



Comparación de diferentes aproximaciones del Transporte Neutrónico:

Difusión, SP_3 y S_N .

S. Morató¹, A. Vidal-Ferràndiz¹, Á. Bernal², R. Miró¹, G. Verdú¹

¹Instituto Universitario de Seguridad Industrial Radiofísica y Medioambiental (ISIRYM),
Universitat Politècnica de València.

²Nuclear Energy and Safety Research Department, Paul Scherrer Institut (PSI), Villigen PSI,
Switzerland

Teléfono: 963877635

E-mail: smorato@iqn.upv.es

Resumen – En este trabajo se presenta una comparación de resultados 1D y 2D para diferentes aproximaciones de la Ecuación del Transporte Neutrónico. La primera de ellas utiliza una discretización angular mediante el método de Ordenadas Discretas (S_N) y el Método de Diferencias Finitas (FDM) para la discretización espacial. Tanto la ecuación de la Difusión como la aproximación SP_3 utilizan la misma discretización espacial. Por tanto, se han desarrollado 3 códigos que han sido programados en lenguaje de programación FORTRAN, uno para cada aproximación angular. La resolución del problema de autovalores generalizado en cada una de las metodologías expuestas ha sido llevada a cabo mediante el uso de la librería SLEPc calculando varios modos.

1. INTRODUCCIÓN.

El análisis y diseño de reactores nucleares se basa en el conocimiento preciso de la distribución neutrónica en el sistema. El detalle de esta distribución neutrónica requiere de la comprensión del transporte de estos neutrones y de cómo estos interactúan con el medio físico. Debido a esto, los códigos de transporte determinista son ampliamente utilizados para la estimación de distribuciones neutrónicas en el interior de un reactor, así como para cálculos de criticidad.

Si bien es conocido que la solución más precisa entre los códigos de transporte determinista es la obtenida mediante la solución de la Ecuación del Transporte de Boltzmann, sin embargo, con la aproximación del método de Ordenadas Discretas (S_N) su resolución requiere un alto coste computacional. Por otro lado, una simplificación de la ecuación del transporte es la Ecuación de la Difusión, la cual reduce significativamente el coste computacional obteniendo resultados menos precisos. Como opción intermedia y viable desde el punto del coste computacional, se encuentra la aproximación de los Armónicos Esféricos Simplificados (SP_N).

2. MÉTODOS

La Ecuación del Transporte de Neutrones unidimensional en estado estacionario puede expresarse como:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial \psi(x, \mu, E)}{\partial x} + \Sigma_t(x, E) \psi(x, \mu, E) &= \int_0^\infty \int_{-1}^1 \Sigma_s(x, \mu', \mu, E' \rightarrow E) \psi(x, \mu', E') d\mu' dE' \\ &+ \frac{1}{K_{eff}} \chi(x, E) \int_0^\infty \int_{-1}^1 \nu(x, E') \Sigma_f(x, E') \psi(x, \mu', E') d\mu' dE' \end{aligned} \quad (1)$$

Donde:

- x, y : Variables espaciales
- μ : Coseno director
- E : Energía
- $\psi(x, \mu, E)$: Flujo angular de neutrones
- $\Sigma_t(x, E)$: Sección eficaz macroscópica total
- $\Sigma_s(x, \mu', \mu, E' \rightarrow E)$: Sección eficaz macroscópica de dispersión desde la energía E' hasta E y desde la dirección μ' hasta μ
- $\chi(x, E)$: Espectro de fisión
- $\nu(x, E')$: Número medio de neutrones generados por fisión
- $\Sigma_f(x, E')$: Sección eficaz macroscópica de fisión
- K_{eff} : Factor de Multiplicación

2.1. Ordenadas Discretas (S_N).

El método de Ordenadas Discretas consiste en considerar solamente un conjunto de direcciones μ_n y aplicar una cuadratura para aproximar el término de la integral.

Para resolver la ecuación se puede definir N direcciones discretas ($\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_N$) con $-1 \leq \mu \leq +1$ y sus correspondientes pesos ($\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N$). En las ecuaciones del método de Ordenadas Discretas el flujo escalar se aproxima por la siguiente fórmula de cuadratura:

$$\phi(x) = \int_{-1}^1 \psi(x, \mu) d\mu = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \omega_n \psi(x, \mu_n) \quad (2)$$

Utilizando el método de Ordenadas Discretas para la discretización angular, una aproximación multigrupo, y considerando isotropía tanto en el término de fisiones como en el de dispersiones, podemos reescribir la ecuación del transporte como:

$$\begin{aligned} \mu_n \frac{\partial \psi_g(x, \mu_n)}{\partial x} + \Sigma_{t,g}(x) \psi_g(x, \mu_n) &= \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(x) \sum_{n=1}^N w_n \psi_{g'}(x, \mu_n) + \frac{1}{K_{eff}} \frac{\chi_g}{2} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}(x) \sum_{n=1}^N w_n \psi_{g'}(x, \mu_n) \end{aligned} \quad (3)$$

Para la discretización espacial utilizando el Método de Diferencias Finitas, se define una malla unidimensional con I puntos de malla definiéndose el centro de celda como:

$$x_i = \frac{1}{2} (x_{i-1/2} + x_{i+1/2}) \quad (4)$$

El término de la derivada del flujo y el flujo se aproximan por:

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_g(x, \mu) = \frac{\psi_g(i + 1/2, \mu_n) - \psi_g(i - 1/2, \mu_n)}{h} \quad (5)$$

$$\psi_g(x, \mu) = \frac{\psi_g(i + 1/2, \mu_n) + \psi_g(i - 1/2, \mu_n)}{2} \quad (6)$$

2.2. Difusión.

La ecuación de la Difusión que se obtiene a partir de la ecuación del Transporte es la siguiente:

$$-\nabla(D_g \nabla \phi_g) + \Sigma_{r,g} \phi_g = \sum_{g' \neq g}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g} \phi_{g'} + \frac{\chi_g}{K_{eff}} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{f,g} \phi_{g'} \quad (7)$$

Que para el caso unidimensional

$$-\frac{\partial}{\partial x}(D_g(x) \frac{\partial}{\partial x} \phi_g(x)) + \Sigma_{r,g}(x) \phi_g(x) = \sum_{g' \neq g}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(x) \phi_{g'}(x) + \frac{\chi_g(x)}{K_{eff}} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{f,g}(x) \phi_{g'}(x) \quad (8)$$

Considerando la ley de Fick:

$$J(x) = -D_g(x) \frac{\partial \phi_g(x)}{\partial x} \quad (9)$$

Y utilizando el método de Diferencias Finitas centrado en celda obtenemos:

$$J_i - J_{i-1} + \Sigma_{r,i,g} h_i \phi_{i,g} = \sum_{g' \neq g}^G \Sigma_{s,i,g' \rightarrow g} h_i \phi_{i,g'} + \frac{\chi_{i,g}}{K_{eff}} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{f,i,g} h_i \phi_{i,g'} \quad (10)$$

2.3. Armónicos Esféricos Simplificados (SP₃).

Las ecuaciones SP_N son una simplificación de la ecuación de Armónicos Esféricos (P_N) en 1D, en la que la derivada unidimensional es sustituida por un gradiente y utilizando las ecuaciones de orden impar para eliminar los momentos impares de las ecuaciones de orden par se obtienen un conjunto de ecuaciones difusivas acopladas.

En caso de SP₃ unidimensional se obtienen 2 ecuaciones acopladas con forma similar a la ecuación de la Difusión:

$$\frac{\partial}{\partial x}(-D_g(x)\frac{\partial}{\partial x}\Phi_g(x)) + \Sigma_{r,g}(x)\Phi_g(x) = \frac{\chi_g(x)}{K_{eff}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g'}(x)\phi_{g'}^0(x) + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(x)\phi_{g'}^0(x) + 2\Sigma_{r,g}(x)\phi_g^2(x) \quad (11)$$

$$\frac{27}{35} \frac{\partial}{\partial x}(-D_g(x)\frac{\partial}{\partial x}\phi_g^2(x)) + \Sigma_{t,g}(x)\phi_g^2(x) = \frac{2}{5} \left\{ \Sigma_{r,g}(x)\phi_g^0(x) - \left(\frac{\chi_g(x)}{K_{eff}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g'}(x)\phi_{g'}^0(x) + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(x)\phi_{g'}^0(x) \right) \right\} \quad (12)$$

Utilizando el método de Diferencias Finitas y la Ley de Fick estas ecuaciones quedan como:

$$J_{i,g}^0 - J_{i-1,g}^0 + \Sigma_{r,i,g}h_i\Phi_{i,g} = \frac{\chi_{i,g}}{K_{eff}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,i,g'}h_i\phi_{i,g'}^0 + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,i,g' \rightarrow g}h_i\phi_{i,g'}^0 + 2\Sigma_{r,i,g}h_i\phi_{i,g}^2 \quad (13)$$

$$J_{i,g}^2 - J_{i-1,g}^2 + \Sigma_{t,i,g}h_i\phi_{i,g}^2 = \frac{2}{5}\Sigma_{r,i,g}h_i\phi_{i,g}^0 - \frac{2}{5}\frac{\chi_{i,g}}{K_{eff}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,i,g'}h_i\phi_{i,g'}^0 - \frac{2}{5} \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,i,g' \rightarrow g}(x)h_i\phi_{i,g'}^0 \quad (14)$$

3. RESULTADOS NUMÉRICOS.

Esta sección muestra los resultados de los códigos desarrollados con los métodos S_N , Difusión y SP_3 para diferentes benchmark 1D y 2D. Se muestran los resultados de autovalores y distribución de flujo escalar.

3.1. Caso 1D – Reactor Homogéneo

Este problema considera una losa homogénea de 2cm de longitud con $\Sigma_t = 1.0$, $\nu\Sigma_f = 0.25$ y $\Sigma_s = 0.9$ con condiciones de vacío en los extremos. Este problema se puede encontrar en [Capilla et al. \[2008\]](#) resuelto para P_1 , P_3 y P_5 de forma analítica.

Los resultados de k_{eff} se muestran en las siguientes tablas para P_1 , P_3 (cuyos resultados son analíticos), y para los códigos S_N , Difusión y SP_3 desarrollados. Las soluciones han sido calculadas utilizando una malla de 2048 celdas. En el caso 1D, SP_N se corresponde con P_N .

Tabla 1. Resultados de los primeros 4 autovalores para el caso de Reactor Homogéneo
(*CC= discretización centrada en celda / *CN= discretización centrada en nodo)

Autovalor	P_1	Dif. ^{CC}	Dif. ^{CN}	P_3	SP_3 ^{CC}	SP_3 ^{CN}	S_{16}
1°	0.587489	0.587489	0.587489	0.652956	0.652956	0.652956	0.662276
2°	0.149135	0.149135	0.149135	0.207745	0.207745	0.207745	0.229179
3°	0.058380	0.058380	0.058380	0.096091	0.096092	0.096091	0.126073
4°	0.029602	0.029602	0.029602	0.053122	0.053122	0.053122	0.084613

La comparación del flujo escalar se muestra en la siguiente figura. Se comparan los resultados de los códigos desarrollados y además se ha añadido la comparación con el código llamado FEMFFUSION el cual usa el método de Elementos Finitos para resolver ecuaciones SP_3 [Vidal-Ferràndiz \[2018\]](#).

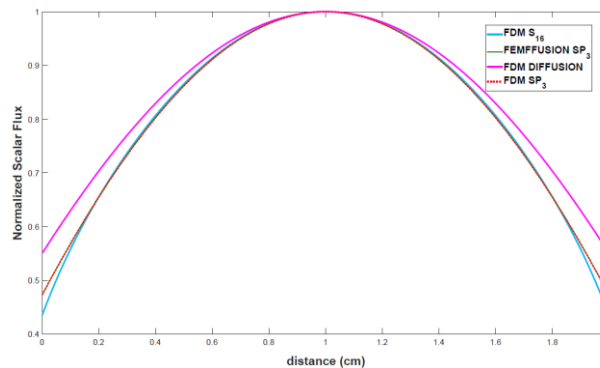


Figura 1. Comparación del flujo escalar normalizado del Reactor homogéneo 1D.

En este caso se aprecia como el flujo escalar obtenido con la ecuación de la difusión diverge considerablemente con respecto a la solución obtenida con S_{16} a medida que nos acercamos a las fronteras, mientras la solución obtenida con las ecuaciones SP_3 si se asemeja más a la solución S_{16} con un coste computacional menor.

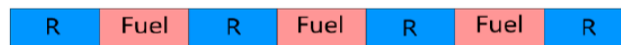
3.2. Caso 1D – Reactor Heterogéneo

El problema está compuesto de 7 regiones alternadas de combustible y reflector. Las secciones eficaces para un grupo energético se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 2. Secciones Eficaces para el caso de Reactor Heterogéneo 1D

	$\nu\Sigma_f(cm^{-1})$	$\Sigma_s(cm^{-1})$	$\Sigma_t(cm^{-1})$
Fuel (U-235)	0.178	0.334	0.416667
Reflector	0.0	0.334	0.370370

A continuación, podemos ver un esquema representativo del problema.



Para las condiciones de contorno se considera vacío. Cada región está dividida en 500 celdas. La siguiente tabla muestra los resultados para los 3 primeros autovalores comparados con los resultados de referencia que podemos encontrar en [Capilla et al. \[2008\]](#).

Tabla 3. Resultados de los primeros 4 autovalores para el caso de Reactor Heterogéneo

(*CC= discretización centrada en celda / *CN= discretización centrada en nodo)

Autovalor	P_1	Dif. ^{CC}	Dif. ^{CN}	P_3	SP_3 ^{CC}	SP_3 ^{CN}	S_{32}
1°	1.113872	1.113878	1.113869	1.148740	1.148745	1.148744	1.162109
2°	0.658651	0.658661	0.658647	0.735037	0.735037	0.735037	0.752109
3°	0.423944	0.423957	0.423941	0.527647	0.527647	0.527646	0.547413

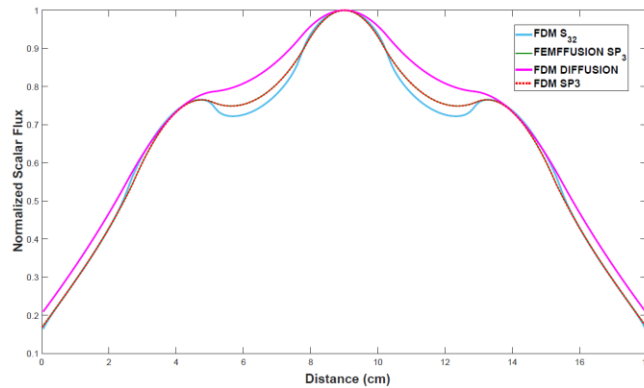


Figura 2. Comparación del flujo escalar normalizado del Reactor heterogéneo 1D.

3.3. Caso 2D – BWR cell

Se trata de una celda BWR homogénea. El problema a está compuesto de una región central con combustible homogenizado rodeado de agua moderadora. El problema se ha realizado con 2 grupos energéticos y todas las condiciones de contorno son reflectivas. El número de celdas utilizadas es 30x30.

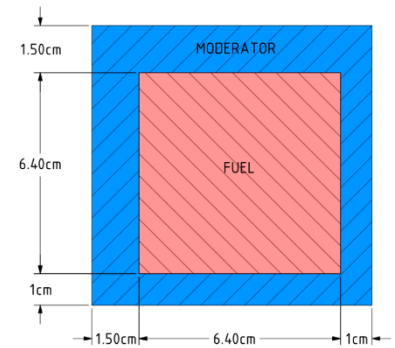


Tabla 4. Secciones eficaces BWR cell

Material	Group	Σ_t	$\nu\Sigma_f$	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$	χ_g
Fuel	1	0.196647	0.006203	0.178000	0.001089	1.000
	2	0.596159	0.1101	0.010020	0.525500	0.000
Moderator	1	0.222064	0.000	0.199500	0.001558	0.000
	2	0.887874	0.000	0.021880	0.878300	0.000

Tabla 5. Resultados de los primeros 4 autovalores para el caso BWR cell

Autovalor	Dif. cc	SP ₃ cc	S ₈
1°	1.220100	1.213237	1.212944
2°	0.039126	0.055777	0.058672
3°	0.039104	0.055746	0.058631
4°	0.011755	0.019805	0.024961

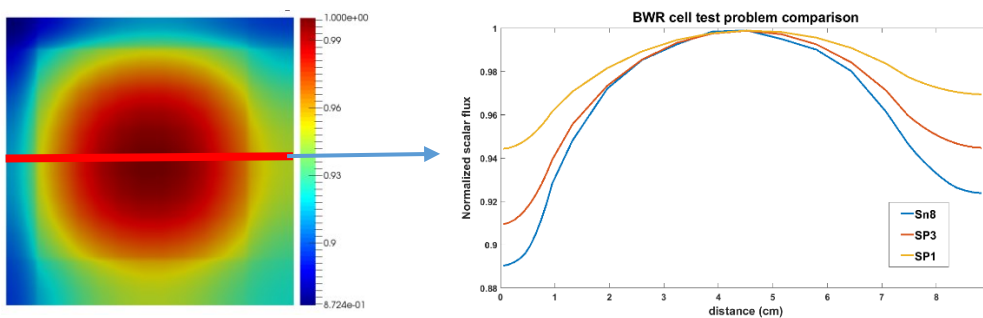


Figura 3. Comparación del flujo escalar normalizado del caso BWR cell.

3.4. Caso 2D – BWR rod bundle

Este problema está formado por 7 materiales: de 1 a 4 son diferentes tipos de combustible, el material 5 es combustible homogenizado con veneno neutrónico, rodeando el combustible encontramos pared de acero anti oxidable (material 6) rodeada de agua (material 7). El problema tiene 2 grupos de energía y todas las condiciones de contorno son reflectivas. La discretización espacial es 48x48 celdas.

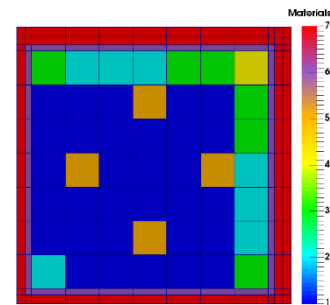


Tabla 6. Secciones eficaces BWR rod bundle

Material	Group	Σ_t	$\nu\Sigma_f$	$\Sigma_{s,1\rightarrow g}$	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$	λ_g
1	1	0.253100	0.0059250	0.2334270	-	1.000
	2	0.573200	0.0981700	0.010690	0.514280	0.000
2	1	0.253600	0.0052420	0.2339200	-	1.000
	2	0.576700	0.0822800	0.010950	0.524960	0.000
3	1	0.253500	0.0048200	0.2337900	-	1.000
	2	0.579070	0.0720000	0.011120	0.532530	0.000
4	1	0.253300	0.0043370	0.2336900	-	1.000
	2	0.583700	0.0590000	0.011130	0.542300	0.000
5	1	0.250600	0.0056050	0.2308400	-	1.000
	2	0.585300	0.0242400	0.010160	0.422700	0.000
6	1	0.217200	0.0000000	0.2070700	-	0.000
	2	0.474800	0.0000000	0.009095	0.470416	0.000
7	1	0.247600	0.0000000	0.2105800	-	0.000
	2	1.123000	0.0000000	0.036820	1.115200	0.000

Tabla 7. Resultados de los primeros 4 autovalores para el caso BWR rod bundle

Autovalor	Dif. cc	SP ₃ cc	S ₈
1°	1.089149	1.090692	1.090543
2°	0.218291	0.240399	0.240934
3°	0.213136	0.235141	0.235715
4°	0.093711	0.114823	0.116910

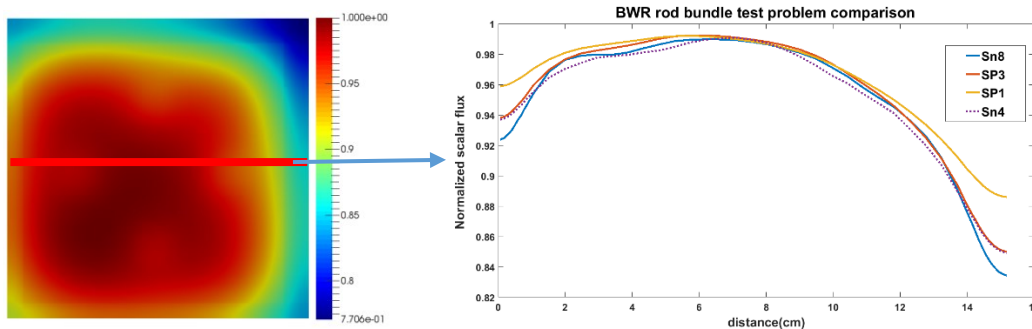


Figura 4. Comparación del flujo escalar normalizado del caso BWR rod bundle.

3.5. Caso 2D – Reactor MOX

Este problema es una modificación del problema del benchmark MOX descrito en *Capilla et al. [2008]* y adaptado a partir de *Brantley and Larsen [2000]*. La configuración del núcleo se compone de 7x7 fuel assemblies de dos tipos de combustible (MOX/UO2) como puede verse en la siguiente figura:

El núcleo está rodeado por un material reflector y cada assembly tiene dimensiones de 21.42x21.42 cm. Este problema tiene dos grupos de energía y tres materiales diferentes. Las condiciones de contorno son de vacío. La discretización utilizada es 135x135 celdas.

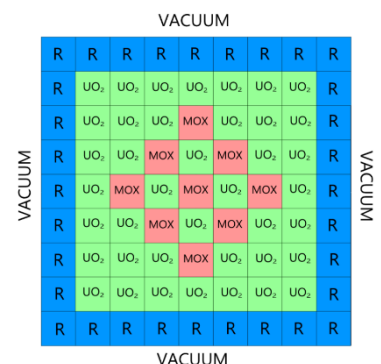


Tabla 8. Secciones eficaces MOX

Material	Group	Σ_t	$\nu\Sigma_f$	$\Sigma_{a,1\rightarrow g}$	$\Sigma_{s,2\rightarrow g}$	χ_g
MOX fuel	1	0.550	0.0075	0.520	-	1.000
	2	1.060	0.450	0.015	0.760	0.000
UO ₂ fuel	1	0.570	0.005	0.540	-	1.000
	2	1.100	0.125	0.020	1.000	0.000
Reflector	1	0.611	0.000	0.560	-	0.000
	2	2.340	0.000	0.050	2.300	0.000

Tabla 9. Resultados de los primeros 4 autovalores para el caso MOX

Autovalor	Dif. ^{CC}	SP ₃ ^{CC}	S ₈
1°	0.991846	0.991485	0.992608
2°	0.965859	0.965681	0.966544
3°	0.965859	0.965681	0.966544
4°	0.939349	0.939432	0.939900

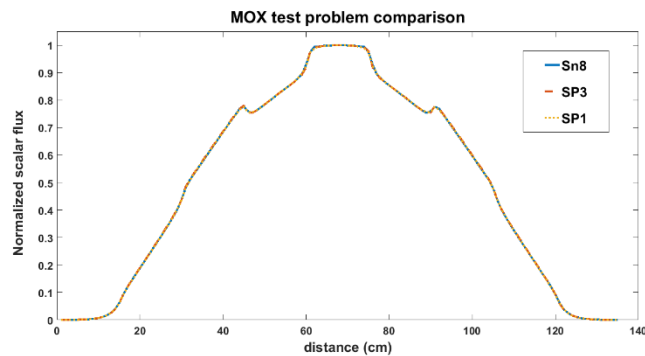
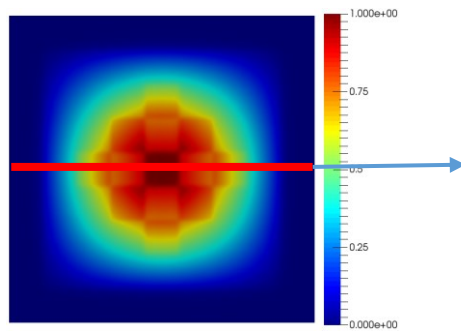


Figura 5. Comparación del flujo escalar normalizado del caso MOX

4. CONCLUSIONES.

Como se observa en los resultados presentados en el apartado anterior, existen diferencias importantes en el flujo neutrónico entre los tres métodos presentados: S_N, SP₃ y Difusión (SP₁) a excepción del último caso donde sí se aprecian las diferencias en la k_{eff} . Por tanto, se puede concluir que es importante conocer qué tipo de método es el adecuado dependiendo del tiempo de cálculo y la precisión deseada.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por la Agencia Estatal Española de Investigación [subvención número BES-2016-076782] y el Ministerio de Economía, Industria y Competitividad y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (MINECO/FEDER) [proyecto ENE2015-68353-P].

REFERENCIAS

- [1] M. Capilla, C. Talavera, D. Ginestar, G. Verdú, A nodal collocation approximation for the multi-dimensional pl equations—2d applications, *Annals of Nuclear Energy* 35 (10) (2008) 1820–1830.
- [2] P. S. Brantley, E. W. Larsen, The simplified P3 approximation, *Nuclear Science and Engineering* 134 (1) (2000) 1–21.
- [3] Vidal-Ferrándiz A., González-Pintor S., Ginestar D., Carreño A., Verdú G. Optimized Eigenvalue Solvers for the Neutron Transport Equation. En *Computational Science – ICCS 2018*. ICCS 2018. Lecture Notes in Computer Science, vol 10861. Springer (2018), doi.org/10.1007/978-3-319-93701-4_65