

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE VALENCIA

Departamento de Ingeniería Química y Nuclear



**Integración de la Ecuación de la
Difusión Neutrónica en
Geometrías Multidimensionales.
Aplicación a Reactores Nucleares.
Cálculo de los Modos Lambda.**

TESIS DOCTORAL

Presentada por:

Damián Ginestar Peiró

Dirigida por:

Dr. I. I. Gumersindo Verdú Martín

Dr. I. I. José Luis Muñoz-Cobo González

Valencia, Junio de 1995

Agradecimientos

En primer lugar, quiero dar las gracias a los directores del presente trabajo, Gumersindo Verdú y José Luis Muñoz-Cobo, por su entusiasmo y la gran ayuda que me han prestado, sin los cuales, no hubiese sido posible la realización del mismo.

También quiero mostrar mi agradecimiento a Vicente Vidal por su colaboración y ayuda en la resolución de los problemas de cálculo numérico que han ido surgiendo.

Debo asimismo agradecer a Ximo, Loles y a Ana su ayuda con las gráficas y dibujos de la memoria, extendiendo el agradecimiento a todos los amigos que han estado conmigo en el Departamento de Ingeniería Química y Nuclear durante la realización del trabajo, por la ayuda que me han prestado y el excelente ambiente de trabajo del que he disfrutado durante este tiempo.

Asimismo, quiero dar las gracias a Antonio Soria por sus comentarios y sugerencias, que han contribuido a mejorar en lo posible la versión final de la memoria.

Por último, quiero recordar aquí especialmente a mi familia, por su ayuda y apoyo constante.

Índice

1	Introducción	4
1.1	Ecuación de la Difusión	6
1.2	Ecuación de los Modos Lambda	14
1.3	El Problema Adjunto	15
2	Cálculo de los Modos Lambda. Aproximación Analítica	17
2.1	Problemas Unidimensionales	18
2.1.1	Resultados Numéricos	25
2.2	Problemas Bidimensionales	35
2.2.1	Resultados Numéricos	47
3	Cálculo de los Modos Lambda. Método de Colocación Nodal	57
3.1	Método de Colocación Nodal	59
3.2	Cálculo de los Modos Lambda en geometrías 1D	67
3.3	Método de Iteración del Subespacio	70
3.4	Técnica de Aceleración Variacional	76

3.5	Resultados Numéricos	79
3.5.1	Resultados numéricos en geometría 2D. Modo fundamental . .	79
3.5.2	Resultados numéricos en geometría 3D. Modo fundamental . .	81
3.5.3	Modos Subcríticos	87
3.5.4	Modos Subcríticos del reactor de Cofrentes	95
3.5.5	Reactor de Ringhals	98
4	Integración de la ecuación de la Difusión dependiente del tiempo. Método Nodal Modal	102
4.1	Resultados numéricos	106
4.1.1	Benchmark B	106
4.1.2	Benchmark C	114
4.1.3	Benchmark E	119
5	Integración de la ecuación de la difusión dependiente del tiempo. Discretización temporal	126
5.1	Métodos en Diferencias Hacia Atrás	127
5.1.1	Método en diferencias hacia atrás de primer orden	129
5.1.2	Métodos en diferencias hacia atrás de orden superior	133
5.2	Método Cuasi-Estático Mejorado	137
5.3	Resultados Numéricos	141
5.3.1	Problemas unidimensionales	141
5.3.2	Problemas Bidimensionales	147

5.3.3 Problemas Tridimensionales 157

6 Conclusiones **162**

Capítulo 1

Introducción

En la física de los núcleos de los reactores nucleares se pueden distinguir dos objetos de estudio principales [1]. De forma simplificada éstos se pueden resumir en, por una parte, saber dónde se encuentran los neutrones y qué están haciendo, y, por otra, determinar si el reactor en estudio es o no crítico, o sea, si es posible que se mantenga la reacción en cadena en su interior. Entre los diversos métodos probabilistas y deterministas existentes para el tratamiento de estas cuestiones, los más usuales son los basados en la teoría de la difusión neutrónica, que es una aproximación a la teoría del transporte neutrónico.

El tratamiento riguroso de este problema es completamente análogo al que se utiliza en estudios clásicos de difusión gaseosa [2]. El método de estudio consiste en tomar un elemento de volumen de control en cierto punto del reactor, y deducir expresiones que den cuenta de los diversos modos de entrada y salida al volumen de control de los neutrones que posean un vector velocidad determinado, introduciendo secciones eficaces efectivas para no tener que considerar las interacciones específicas a las que están sometidos los neutrones dentro de este volumen de control. El balance entre la proporción de neutrones que entran y la proporción de los que salen, da lugar a lo que se conoce como la ecuación del transporte de Boltzmann. Con el fin de simplificar esta ecuación, se introducen hipótesis tales como que todos los neutrones se pueden agrupar en rangos de energía (grupos) y que la distribución de los vectores de velocidad neutrónica es independiente de la dirección. Con estas condiciones, se puede obtener la ecuación de la difusión neutrónica como una aproximación de la

ecuación del transporte.

Principalmente, se realizan dos tipos de cálculos asociados con la ecuación de la difusión neutrónica. Un primer tipo de cálculos estáticos consistentes en la determinación de los Modos Lambda asociados a la configuración del reactor en un instante de tiempo. Éste es un problema de autovalores generalizado asociado a un operador diferencial, con unas condiciones de contorno dadas. La determinación del modo fundamental nos permite conocer el comportamiento del reactor en régimen estacionario. Otro tipo de cálculos, son los que se realizan para la determinación de un transitorio a partir de una perturbación efectuada sobre una configuración estacionaria del reactor, haciendo uso para ello de la ecuación de la difusión neutrónica dependiente del tiempo o de alguna de sus aproximaciones.

La presente memoria está dedicada al desarrollo de métodos para el tratamiento de estos dos problemas para reactores con geometrías unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales. Los métodos desarrollados están orientados, principalmente, a poder utilizar un mallado o discretización espacial del reactor en nodos de gran tamaño. Se muestran, a su vez, los resultados numéricos obtenidos, tanto en problemas ‘benchmark’ que se encuentran en la literatura, como en problemas más realistas como el reactor de la Central Nuclear de Cofrentes, o el reactor de Ringhals-I.

La memoria se ha estructurado del modo siguiente: Lo que resta del primer capítulo se ha dedicado a mostrar los pasos a seguir para deducir la ecuación de la difusión neutrónica como una aproximación de la ecuación del transporte. A partir de la ecuación de la difusión, se obtiene, a su vez, la ecuación de los Modos Lambda en la aproximación de dos grupos de energía y, finalmente, se analiza el problema adjunto de los Modos Lambda.

En el segundo capítulo se desarrolla una aproximación analítica para la obtención de los Modos Lambda de un reactor unidimensional y la generalización de esta metodología para el tratamiento de problemas bidimensionales.

Debido a la imposibilidad de obtener una generalización eficiente de este método para la resolución de problemas con geometría tridimensional, en el capítulo tercero se aborda el cálculo de los Modos Lambda mediante un método de colocación nodal. Utilizando este método, es posible reducir el problema de los Modos Lambda a un

problema de autovalores algebraico. Por ello, en este capítulo se desarrolla, a su vez, un método iterativo que permite obtener los autovalores dominantes de una matriz real no simétrica, basado en el método de Iteración del Subespacio combinado con una estrategia de aceleración variacional. Por último se presentan los distintos resultados numéricos obtenidos.

En el capítulo cuarto, se desarrolla un método nodal modal para la integración de la ecuación de la difusión neutrónica dependiente del tiempo, basado en la obtención previa de los Modos Lambda del reactor, y se aplica el método para la resolución de tres problemas ‘benchmark’ unidimensionales.

Para el estudio de transitorios en reactores con geometría bidimensional y tridimensional, en el capítulo quinto, se desarrollan métodos basados en una discretización temporal de las ecuaciones. En particular se estudian los métodos Backward en diferencias y una aproximación Cuasi-Estática, comparando su funcionamiento en la resolución de varios problemas.

1.1 Ecuación de la Difusión

El comportamiento de un reactor nuclear viene descrito mediante la distribución de neutrones en el reactor como una función de la posición, la energía y el tiempo. Así pues, uno de los principales problemas de la teoría de reactores consiste en predecir esta distribución. En principio, como ya se ha comentado, esto podría hacerse resolviendo la ecuación del transporte de neutrones en el reactor. Debido a la complejidad de esta ecuación, se utiliza como aproximación a la misma, la ecuación de la difusión [3]. Procederemos seguidamente, a mostrar el proceso que se sigue para deducir la ecuación de la difusión de neutrones a partir de la ecuación del transporte.

En la teoría del transporte se considera el neutrón como una partícula puntual, en el sentido de que puede ser descrito completamente conociendo su posición y su velocidad. La interacción entre los neutrones y los núcleos atómicos se trata desde un punto de vista macroscópico, ignorando los detalles del proceso de interacción dentro del núcleo. Además, se definen secciones eficaces asociadas a la probabilidad de que tenga lugar un determinado tipo de reacción (como la captura de neutrones,

la dispersión elástica de los mismos, etc.) y se supone que la interacción tiene lugar instantáneamente.

La ecuación de balance en un volumen de control se obtiene teniendo en cuenta que la variación con el tiempo de la densidad de neutrones dentro de un volumen $dVdEd\Omega$ del espacio de fases, es igual a la proporción de neutrones que entran menos la proporción de neutrones que salen del volumen. Para describir la población de neutrones se utiliza la magnitud denominada *densidad angular de neutrones*, $N(\vec{r}, \Omega, E, t)$, definida como el número esperado de neutrones en la posición \vec{r} , con dirección Ω , y energía E en el tiempo t , por unidad de volumen, unidad de ángulo sólido y unidad de energía. Además, si definimos el *flujo neutrónico angular* como

$$\Phi(\vec{r}, E, \Omega, t) \equiv vN(\vec{r}, E, \Omega, t)$$

donde v es el módulo de la velocidad, la ecuación de balance en el volumen de control que da lugar a la ecuación del transporte de neutrones se expresa de la forma [3]

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t}(\vec{r}, E, \Omega, t) &= -\vec{u}_\Omega \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{r}, E, \Omega, t) - \Sigma_T(\vec{r}, E, t) \Phi(\vec{r}, E, \Omega, t) + Q(\vec{r}, \Omega, E, t) + \\ &+ (1 - \beta) \frac{\chi_p(E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \int_{\Omega'} d\Omega' \Phi(\vec{r}, E', \Omega', t) + \\ &+ \int_0^\infty dE' \int_{\Omega'} d\Omega' \Sigma_s(\vec{r}; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega; t) \Phi(\vec{r}, E', \Omega', t) + \\ &+ \sum_{k=1}^K \lambda_k \frac{\chi_k(E)}{4\pi} \mathcal{C}_k(\vec{r}, t) \quad . \end{aligned} \quad (1.1)$$

El primer término de la parte derecha de la ecuación da cuenta de la advección neta de neutrones fuera del volumen de control, siendo \vec{u}_Ω el vector unitario en la dirección especificada por Ω . El segundo término nos describe la proporción a la que *salen los neutrones* del volumen de control por procesos de *absorción* o de *dispersión*. Q denota una posible fuente externa de neutrones. El cuarto término nos indica la *tasa de neutrones de fisión* que se producen en el volumen, supuesta la distribución de neutrones de fisión isótropa en todas las direcciones. El quinto término da cuenta de la tasa de neutrones que se *introducen* en el volumen por procesos de *dispersión*. Los *neutrones diferidos* que aparecen en el volumen al decaer los precursores se tienen en cuenta mediante el último término.

Σ_T y Σ_f denotan la *sección eficaz total* y de *fisión*, respectivamente. χ_p nos indica el espectro de los neutrones producidos en la fisión y χ_k es el espectro de neutrones

producidos al decaer los precursores. La probabilidad de que un neutrón se disperse de un volumen $dV dE' d\Omega'$ a otro $dV dE d\Omega$, se representa por $\Sigma_s(\vec{r}; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega; t)$. La proporción de neutrones de fisión diferidos debidos a la transformación de un precursor de tipo k , es β_k con $\beta = \sum_{k=1}^K \beta_k$, siendo K el número de precursores que se consideran. La tasa con la que un precursor de tipo k decae es $\lambda_k C_k$.

La concentración de precursores de neutrones diferidos satisface la ecuación de balance

$$\frac{\partial C_k}{\partial t}(\vec{r}, t) = \beta_k \int_0^\infty dE \int_\Omega d\Omega \nu \Sigma_f(\vec{r}, E, \Omega, t) \Phi(\vec{r}, E, \Omega, t) - \lambda_k C_k(\vec{r}, t) \quad , \quad (1.2)$$

donde ν es el número promedio de neutrones que se producen en una fisión, y $k = 1, \dots, K$.

Se supone que la dependencia angular de la dispersión de los neutrones es debida sólo al ángulo formado entre la dirección del neutrón incidente ($\vec{u}_{\Omega'}$) y la dirección del neutrón emergente (\vec{u}_Ω). Definiendo

$$\mu^* = \vec{u}_{\Omega'} \cdot \vec{u}_\Omega = \cos \theta^*, \quad \mu = \cos \theta, \quad \mu' = \cos \theta' \quad ,$$

donde θ y θ' son los ángulos que forman (\vec{u}_Ω) y ($\vec{u}_{\Omega'}$) con el eje z del sistema de referencia elegido, podemos desarrollar la sección eficaz de dispersión de la forma

$$\Sigma_s(\vec{r}; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega; t) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{sl}(\vec{r}; E' \rightarrow E; t) P_l(\mu^*) \quad ,$$

donde P_l son los polinomios de Legendre.

Con la idea de eliminar la dependencia angular, se realiza un desarrollo en armónicos esféricos [5] y, en primera aproximación (aproximación P_1), se puede expresar $\Phi(\vec{r}, E, \Omega, t)$ de la forma

$$\Phi(\vec{r}, E, \Omega, t) = \frac{1}{4\pi} [\phi(\vec{r}, E, t) + 3\vec{u}_\Omega \cdot \vec{J}(\vec{r}, E, t)] \quad ,$$

donde $\phi(\vec{r}, E, t)$ es el flujo neutrónico *escalar*, definido como

$$\phi(\vec{r}, E, t) = \int_\Omega d\Omega \Phi(\vec{r}, E, \Omega, t) \quad ,$$

y $\vec{J}(\vec{r}, E, t)$ es la *corriente neutrónica* definida como

$$\vec{J}(\vec{r}, E, t) = \int_{\Omega} d\Omega \vec{u}_{\Omega} \Phi(\vec{r}, E, \Omega, t) \quad .$$

Utilizando estas aproximaciones, obtenemos la ecuación del transporte en la aproximación P_1

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{4\pi} [\phi + 3\vec{u}_{\Omega} \cdot \vec{J}] \right) &= -(\vec{u}_{\Omega} \cdot \vec{\nabla}) \frac{1}{4\pi} [\phi + 3\vec{u}_{\Omega} \cdot \vec{J}] - \Sigma_T \frac{1}{4\pi} [\phi + 3\vec{u}_{\Omega} \cdot \vec{J}] + \\ &+ Q + (1 - \beta) \frac{\chi_p}{4\pi} \int_0^{\infty} dE' \nu \Sigma_f \int_{\Omega'} d\Omega' \frac{1}{4\pi} [\phi + 3\vec{u}_{\Omega'} \cdot \vec{J}] + \\ &+ \int_0^{\infty} dE' \int_{\Omega'} d\Omega' \left(\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{si}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) P_l(\mu^*) \right) \frac{1}{4\pi} [\phi + 3\vec{u}_{\Omega'} \cdot \vec{J}] + \\ &+ \sum_{k=1}^K \lambda_k \frac{\chi_k}{4\pi} C_k \quad . \end{aligned} \quad (1.3)$$

Obtendremos una ecuación para el flujo neutrónico escalar, ϕ , integrando esta ecuación para todas las posibles direcciones Ω . Para realizar esta integración es útil tener en cuenta las identidades [4]

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} d\Omega &= 4\pi \quad , \\ \int_{\Omega} \vec{u}_{\Omega} d\Omega &= 0 \quad , \\ \int_{\Omega} \vec{u}_{\Omega} (\vec{u}_{\Omega} \cdot \vec{A}) d\Omega &= \frac{4\pi}{3} \vec{A} \quad , \\ \int_{\Omega} (\vec{u}_{\Omega} \cdot \vec{A}) (\vec{u}_{\Omega} \cdot \vec{B}) d\Omega &= \frac{4\pi}{3} \vec{A} \cdot \vec{B} \quad , \end{aligned} \quad (1.4)$$

que permiten obtener

$$\int_{\Omega} d\Omega (\vec{u}_{\Omega} \cdot \vec{\nabla}) \frac{1}{4\pi} [\phi + 3\vec{u}_{\Omega} \cdot \vec{J}] = \vec{\nabla} \cdot \vec{J} \quad .$$

Se introduce una fuente de neutrones promedio

$$\int_{\Omega} d\Omega Q(\vec{r}, E, \Omega, t) = \tilde{Q}(\vec{r}, E, t) \quad .$$

Para eliminar la dependencia angular se utiliza la fórmula de adición de los polinomios de Legendre

$$P_l(\mu^*) = P_l(\mu) P_l(\mu') + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) P_l^m(\mu') \cos(m(\varphi - \varphi')) \quad ,$$

donde φ es el ángulo azimutal y P_l^m los polinomios asociados de Legendre. Utilizando las relaciones (1.4), y las relaciones de ortogonalidad de los polinomios de Legendre y de los polinomios asociados de Legendre, se llega a que [3]

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} d\Omega \int_{\Omega'} d\Omega' \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{sl}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) (P_l(\mu) P_l(\mu') + \\ & + \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) P_l^m(\mu') \cos(m(\varphi - \varphi')) \frac{1}{4\pi} [\phi + 3\vec{u}_{\Omega'} \cdot \vec{J}]) = \\ & = \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', t) \quad . \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta los resultados anteriores, la ecuación para ϕ queda de la forma

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t}(\vec{r}, E, t) &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E, t) - \Sigma_T(\vec{r}, E, t) \phi(\vec{r}, E, t) + \tilde{Q}(\vec{r}, E, t) + \\ &+ (1 - \beta) \chi_p(E) \int_0^{\infty} dE' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) + \\ &+ \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', t) + \\ &+ \sum_{k=1}^K \lambda_k \chi_k(E) \mathcal{C}_k(\vec{r}, t) \quad . \end{aligned} \quad (1.5)$$

Es posible obtener una ecuación para \vec{J} , multiplicando la ecuación (1.3) por \vec{u}_{Ω} e integrando para todas las direcciones posibles, Ω . Teniendo en cuenta que [3]

$$\int_{\Omega} d\Omega \vec{u}_{\Omega} (\vec{u}_{\Omega} \cdot \vec{\nabla}) \frac{1}{4\pi} [\phi + 3\vec{u}_{\Omega} \cdot \vec{J}] = \frac{1}{3} \vec{\nabla} \phi \quad ,$$

y que

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} d\Omega \vec{u}_{\Omega} \int_{\Omega'} d\Omega' \sum_{l=1}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{sl}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) (P_l(\mu) P_l(\mu') + \\ & + \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) P_l^m(\mu') \cos(m(\varphi - \varphi')) \frac{1}{4\pi} [\phi + 3\vec{u}_{\Omega'} \cdot \vec{J}]) = \\ & = \Sigma_{s1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \vec{J}(\vec{r}, E', t) \quad , \end{aligned}$$

se obtiene la ecuación para la \vec{J}

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \vec{J}}{\partial t}(\vec{r}, E, t) &= -\frac{1}{3} \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t) - \Sigma_T(\vec{r}, E, t) \vec{J}(\vec{r}, E, t) + \\ &+ \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{s1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \vec{J}(\vec{r}, E', t) \quad . \end{aligned} \quad (1.6)$$

Para reducir las ecuaciones (1.5) y (1.6) a la ecuación de la difusión usual, se hace la aproximación

$$\frac{\partial \vec{J}}{\partial t}(\vec{r}, E, t) = \vec{0} \quad .$$

Además, se supone que la dispersión inelástica de los neutrones es isótropa, lo que implica que Σ_{s1} describe sólo la dispersión elástica. Se considera que la dispersión elástica anisótropa tiene lugar sin cambio en la energía de los neutrones y, por tanto se puede escribir

$$\int_0^\infty dE' \Sigma_{s1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \vec{J}(\vec{r}, E', t) = \bar{\Sigma}_{s1}(\vec{r}, E, t) \vec{J}(\vec{r}, E, t) \quad .$$

Se define la sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{tr}(\vec{r}, E, t) = \Sigma_T(\vec{r}, E, t) - \bar{\Sigma}_{s1}(\vec{r}, E, t) \quad ,$$

y el coeficiente de difusión

$$D(\vec{r}, E, t) = \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\vec{r}, E, t)} \quad .$$

Haciendo uso de estas relaciones, podemos combinar las ecuaciones (1.5) y (1.6) para llegar a la ecuación de la difusión

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t}(\vec{r}, E, t) &= \vec{\nabla} \cdot (D(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t)) - \Sigma_T(\vec{r}, E, t) \phi(\vec{r}, E, t) + \\ &+ \tilde{Q}(\vec{r}, E, t) - (1 - \beta) \chi_p(E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) + \\ &+ \int_0^\infty dE' \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', t) + \sum_{k=1}^K \lambda_k \chi_k(E) \mathcal{C}_k(\vec{r}, t) . \end{aligned} \quad (1.7)$$

Las secciones eficaces, en general, son funciones de la energía de los neutrones y, para simplificar la ecuación de la difusión, se utiliza una *aproximación multigrupo*. Esta aproximación consiste en obtener una ecuación para los neutrones cuya energía esté comprendida en cada intervalo $[E_g, E_{g+1}]$, $g = 1, \dots, G - 1$, siendo G el número de grupos de energía considerados.

Se definen las magnitudes asociadas al grupo g

$$\begin{aligned}
\phi_g(\vec{r}, t) &= \int_{E_g}^{E_{g+1}} dE \phi(\vec{r}, E, t) \quad , \\
\frac{1}{v_g} &= \int_{E_g}^{E_{g+1}} dE \frac{1}{v} \frac{\phi(\vec{r}, E, t)}{\phi_g(\vec{r}, t)} \quad , \\
\Sigma_{Tg}(\vec{r}, t) &= \int_{E_g}^{E_{g+1}} dE \Sigma_T(\vec{r}, E, t) \frac{\phi(\vec{r}, E, t)}{\phi_g(\vec{r}, t)} \quad , \\
\nu \Sigma_{fg}(\vec{r}, t) &= \int_{E_g}^{E_{g+1}} dE \nu \Sigma_f(\vec{r}, E, t) \frac{\phi(\vec{r}, E, t)}{\phi_g(\vec{r}, t)} \quad , \\
\tilde{Q}_g(\vec{r}, t) &= \int_{E_g}^{E_{g+1}} dE \tilde{Q}(\vec{r}, E, t) \quad , \\
\chi_{pg} &= \int_{E_g}^{E_{g+1}} dE \chi_p(E) \quad , \\
\chi_{kg} &= \int_{E_g}^{E_{g+1}} dE \chi_k(E) \quad , \\
\Sigma_{g'g}(\vec{r}, t) &= \int_{E_{g'}}^{E_{g'+1}} dE' \int_{E_g}^{E_{g+1}} dE \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E \rightarrow E', t) \frac{\phi(\vec{r}, E', t)}{\phi_{g'}(\vec{r}, t)} \quad , \quad (1.8)
\end{aligned}$$

y para cada dirección espacial, j , se define el coeficiente de difusión del grupo g como

$$D_g(\vec{r}, t) = \int_{E_g}^{E_{g+1}} dE D(\vec{r}, E, t) \frac{\partial_j \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial_j \phi^g(\vec{r}, t)} \quad .$$

La sección eficaz total se escribe como suma de un término de absorción y términos de dispersión de la forma

$$\Sigma_{Tg}(\vec{r}, t) = \Sigma_{ag}(\vec{r}, t) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{g'g}(\vec{r}, t) \quad ,$$

y se introduce la sección eficaz de dispersión del grupo g

$$\Sigma_{sg}(\vec{r}, t) = \sum_{g' \neq g}^G \Sigma_{g'g}(\vec{r}, t) \quad .$$

Integrando la ecuación (1.7) entre E_g y E_{g+1} y haciendo uso de las definiciones anteriores llegamos a la *ecuación de la difusión para el grupo g*

$$\vec{\nabla} \cdot (D_g(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \phi_g(\vec{r}, t)) - (\Sigma_{ag}(\vec{r}, t) + \Sigma_{sg}(\vec{r}, t)) \phi_g(\vec{r}, t) +$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{g' \neq g}^G \Sigma_{g'g}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + (1 - \beta) \chi_{pg} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + \\
& + \sum_{k=1}^K \lambda_k \chi_{kg} \mathcal{C}_k(\vec{r}, t) + \tilde{Q}(\vec{r}, t) = \frac{1}{v_g} \frac{\partial \phi_g(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad . \quad (1.9)
\end{aligned}$$

Con estas aproximaciones, la ecuación (1.2) para la concentración de precursores se escribe de la forma

$$\frac{\partial \mathcal{C}_k(\vec{r}, t)}{\partial t} = \beta_k \sum_{g=1}^G \nu \Sigma_{fg}(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) - \lambda_k \mathcal{C}_k(\vec{r}, t) \quad . \quad (1.10)$$

Hay que hacer notar que al aproximar las ecuaciones (1.1) y (1.2) mediante las ecuaciones (1.9) y (1.10), se ha reducido el espacio soporte de los campos, del espacio caracterizado por las variables (\vec{r}, E, Ω, t) al espacio de coordenadas (\vec{r}, t) , con la consecuente simplificación del problema que ello supone.

En adelante, consideraremos la aproximación de dos grupos de energía, o sea, se dividirá el espectro de energía en un grupo rápido, correspondiente a los neutrones cuya energía es superior a unas unidades de electrónvoltios y que denotaremos con un 1, y un grupo térmico, correspondiente a los neutrones cuya energía es menor que esta cantidad y que denotaremos con un 2. Además, se supondrá que no hay procesos de dispersión del grupo térmico al rápido, o sea, que $\Sigma_{21}(\vec{r}, t) = 0$ y que no se producen neutrones en el grupo térmico, con lo que $\chi_{p2} = 0$ y $\chi_{k2} = 0$. Por último, supondremos que no hay fuente externa de neutrones, y que $\chi_{p1} = 1$ y $\chi_{k1} = 1$. Haciendo uso de estas consideraciones, obtenemos un sistema de ecuaciones en derivadas parciales para los grupos rápido y térmico que, en forma matricial, se expresa

$$[v^{-1}] \dot{\phi} + \mathcal{L} \phi = (1 - \beta) \mathcal{M} \phi + \sum_{k=1}^K \lambda_k \mathcal{C}_k \chi \quad , \quad (1.11)$$

donde

$$\mathcal{L} = \begin{bmatrix} -\vec{\nabla} \cdot (D_1 \vec{\nabla}) + \Sigma_{a1} + \Sigma_{12} & 0 \\ -\Sigma_{12} & -\vec{\nabla} \cdot (D_2 \vec{\nabla}) + \Sigma_{a2} \end{bmatrix} , \quad [v^{-1}] = \begin{bmatrix} \frac{1}{v_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{v_2} \end{bmatrix} ,$$

y

$$\mathcal{M} = \begin{bmatrix} \nu \Sigma_{f1} & \nu \Sigma_{f2} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} , \quad \phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} , \quad \chi = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad .$$

La ecuación (1.10) queda como la ecuación diferencial ordinaria

$$\dot{\mathcal{C}}_k = \beta_k[\nu\Sigma_{f1} \nu\Sigma_{f2}]\phi - \lambda_k\mathcal{C}_k \quad . \quad (1.12)$$

1.2 Ecuación de los Modos Lambda

Se dice que un reactor es crítico cuando la disposición de materiales en su interior es tal que la proporción a la que se producen los neutrones es igual a la proporción de pérdida de los mismos. En estas condiciones el reactor se encuentra en estado estacionario. Para estudiar el estado estacionario de un reactor dado, se puede forzar la criticidad del mismo de un modo artificial [6], multiplicando las secciones eficaces que dan cuenta de la producción de neutrones por procesos de fisión, por un número λ . De este modo, esperamos que exista un número λ que satisfaga las ecuaciones

$$\mathcal{L}\phi = \lambda(1 - \beta)\mathcal{M}\phi + \sum_{k=1}^K \lambda_k\mathcal{C}_k \chi \quad , \quad (1.13)$$

$$0 = \lambda\beta_k[\nu\Sigma_{f1} \nu\Sigma_{f2}]\phi - \lambda_k\mathcal{C}_k \quad . \quad (1.14)$$

Sustituyendo la ecuación (1.14) en (1.13) y teniendo en cuenta que $\sum_{k=1}^K \beta_k = \beta$, obtenemos la ecuación

$$\mathcal{L}\phi = \lambda\mathcal{M}\phi \quad , \quad (1.15)$$

que se conoce como la ecuación de los Modos Lambda del reactor y constituye un problema de *valores propios generalizado* asociado al operador diferencial \mathcal{L} .

Como los autovalores λ_n asociados a la ecuación (1.15) se interpretan como factores multiplicativos de las secciones eficaces de fisión, van a ser necesariamente números reales y por tanto, las autofunciones ϕ_n también serán funciones reales.

No se conoce mucho sobre la naturaleza de los Modos Lambda, en particular, no se sabe [6] si las autofunciones forman un conjunto completo (en el sentido de que cualquier función que satisfaga unas ciertas condiciones de continuidad y de contorno, se pueda expresar como combinación lineal de ellas). A pesar de que no hay evidencia de ello, se suele suponer que estas funciones forman un conjunto completo y, por ejemplo, como veremos más adelante, en los métodos modales para

la integración de las ecuaciones dinámicas (1.11) y (1.12) se utiliza un desarrollo de la solución para el flujo neutrónico en términos de los Modos Lambda del reactor. Así pues en este sentido, el problema de la determinación de los Modos Lambda de un reactor dado, se puede considerar como un problema previo para el estudio de las características de la ecuación dinámica de la difusión.

1.3 El Problema Adjunto

Dado que el operador matricial \mathcal{L} y la matriz \mathcal{M} no son simétricas, es posible definir el problema adjunto del problema (1.15), que está definido por la ecuación

$$\mathcal{L}^\dagger \phi_n^\dagger = \lambda_n^\dagger \mathcal{M}^\dagger \phi_n^\dagger \quad , \quad (1.16)$$

donde

$$\mathcal{L}^\dagger = \begin{bmatrix} -\vec{\nabla} \cdot (D_1 \vec{\nabla}) + \Sigma_{a1} + \Sigma_{12} & -\Sigma_{12} \\ 0 & -\vec{\nabla} \cdot (D_2 \vec{\nabla}) + \Sigma_{a2} \end{bmatrix}$$

y

$$\mathcal{M}^\dagger = \begin{bmatrix} \nu \Sigma_{f1} & 0 \\ \nu \Sigma_{f2} & 0 \end{bmatrix} \quad .$$

Los modos correspondientes a este problema satisfacen unas *relaciones de biortogonalidad* con los Modos Lambda. Para deducirlas, se introduce el producto escalar

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \int_R (\varphi(\vec{x}))^T \psi(\vec{x}) dV \quad ,$$

donde la integración se extiende a todo el recinto R que define el reactor.

Suponiendo que el flujo neutrónico se anula en la frontera del reactor y utilizando el Teorema de la Divergencia [6], se puede obtener la relación

$$\langle \phi_n^\dagger, \mathcal{L} \phi_m \rangle = \langle \mathcal{L}^\dagger \phi_n^\dagger, \phi_m \rangle \quad . \quad (1.17)$$

Multiplicando escalarmente la ecuación (1.15) por ϕ_n^\dagger se llega a

$$\langle \phi_n^\dagger, \mathcal{L} \phi_m \rangle = \lambda_m \langle \phi_n^\dagger, \mathcal{M} \phi_m \rangle \quad ,$$

y usando (1.17), obtenemos

$$(\lambda_n^\dagger - \lambda_m) \langle \phi_n^\dagger, \mathcal{M}\phi_m \rangle = 0 \quad .$$

Si $\lambda_n^\dagger \neq \lambda_m$, se cumple que

$$\langle \phi_n^\dagger, \mathcal{M}\phi_m \rangle = 0 \quad ; \quad n \neq m$$

y además, por razonamientos de tipo físico [6], se puede justificar que necesariamente $\langle \phi_n^\dagger, \mathcal{M}\phi_n \rangle \neq 0$ y por tanto, $\lambda_n^\dagger = \lambda_n$, con lo que se tiene que los autovalores correspondientes al problema de los Modos Lambda son los mismos que los correspondientes al problema adjunto, y las autofunciones satisfacen la relación de biortogonalidad

$$\langle \phi_n^\dagger, \mathcal{M}\phi_m \rangle = N_n \delta_{n,m} \quad , \quad (1.18)$$

donde N_n es la constante de normalización y $\delta_{n,m}$ la delta de Kronecker.

Capítulo 2

Cálculo de los Modos Lambda. Aproximación Analítica

En este capítulo nos ocuparemos de la la determinación de los Modos Lambda para un reactor nuclear. Estos modos vienen determinados por la ecuación

$$\mathcal{L}\phi_n = \lambda_n \mathcal{M}\phi_n \quad , \quad (2.1)$$

y las condiciones de contorno

$$\left[\begin{array}{l} \alpha_1 \phi_1 + \beta_1 D_1 \vec{n} \cdot \vec{\nabla} \phi_1 \\ \alpha_2 \phi_2 + \beta_2 D_2 \vec{n} \cdot \vec{\nabla} \phi_2 \end{array} \right] \Big|_S = \left[\begin{array}{l} 0 \\ 0 \end{array} \right] \quad , \quad (2.2)$$

donde α_i y β_i son coeficientes que dependen de las condiciones de contorno del problema en particular a tratar, S es la frontera del recinto que define el reactor y \vec{n} un vector unitario normal a la frontera del mismo en cada punto.

Se ha desarrollado un método para la resolución de este problema utilizando una aproximación analítica para el caso de geometrías unidimensionales, y se ha generalizado el mismo para el tratamiento de problemas bidimensionales.

Para comprobar la validez del método desarrollado, se han comparado los resultados obtenidos con este método y los proporcionados por otros programas, como el SIMULATE-3 y el VENTURE. Además, se han resuelto los problemas ‘benchmark’ bidimensionales correspondientes al reactor de la IAEA y al reactor BIBLIS.

2.1 Problemas Unidimensionales

Las secciones eficaces D_i , Σ_{12} , Σ_{a1} , etc., que intervienen en la ecuación (2.1) dependen de los distintos materiales de los que está formado el reactor a estudiar y, por tanto, van a ser funciones de la posición. Para simplificar el problema, la aproximación que se utiliza en los métodos nodales consiste en discretizar el reactor en una serie de celdas o nodos donde estas secciones eficaces se suponen constantes. Así, para un reactor unidimensional se realiza una discretización del mismo en N nodos o celdas, de la forma

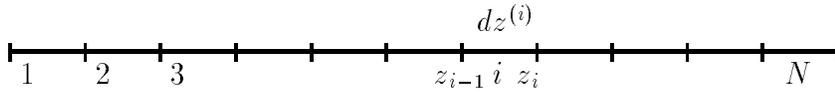


Fig. 2.1.- Nodalización de un reactor unidimensional.

y se resuelve en cada nodo un problema del tipo

$$\mathcal{L}_i \phi_n^{(i)}(z) = \lambda_n \mathcal{M}_i \phi_n^{(i)}(z) ; \quad z_{i-1} < z < z_i , \quad i = 1, 2, \dots, N \quad , \quad (2.3)$$

donde \mathcal{L}_i es el operador nodal de pérdidas netas de dos grupos en la celda i , dado por

$$\mathcal{L}_i = \begin{bmatrix} -D_1^{(i)} \frac{d^2}{dz^2} + \Sigma_{a1}^{(i)} + \Sigma_{12}^{(i)} & 0 \\ -\Sigma_{12}^{(i)} & -D_2^{(i)} \frac{d^2}{dz^2} + \Sigma_{a2}^{(i)} \end{bmatrix} ,$$

y \mathcal{M}_i es la matriz nodal de producción de dos grupos en la celda i

$$\mathcal{M}_i = \begin{bmatrix} \nu \Sigma_{f1}^{(i)} & \nu \Sigma_{f2}^{(i)} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} .$$

Para construir la solución global sobre todo el reactor se imponen condiciones de continuidad del flujo y de la corriente neutrónica en las caras de las celdas internas del reactor, así como las condiciones de contorno en los extremos que, en este caso, se expresan de la forma

$$\left[\alpha_{g1} \phi_g^{(1)}(z) - \beta_{g1} D_g^{(1)} \frac{d}{dz} \phi_g^{(1)}(z) \right]_{z=z_0} = 0 \quad ,$$

$$\left[\alpha_{gN} \phi_g^{(N)}(z) - \beta_{gN} D_g^{(N)} \frac{d}{dz} \phi_g^{(N)}(z) \right]_{z=z_N} = 0 \quad , \quad g = 1, 2 \quad . \quad (2.4)$$

Es conocido [6] que es posible encontrar soluciones de la ecuación (2.3) para cada región i del reactor y para un autovalor λ arbitrario, probando como soluciones funciones $\phi_g^{(i)}(z, \lambda)$, que satisfacen la condición

$$\begin{bmatrix} \frac{d^2}{dz^2} & 0 \\ 0 & \frac{d^2}{dz^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1^{(i)}(z, \lambda) \\ \phi_2^{(i)}(z, \lambda) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(B^{(i)})^2(\lambda) & 0 \\ 0 & -(B^{(i)})^2(\lambda) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1^{(i)}(z, \lambda) \\ \phi_2^{(i)}(z, \lambda) \end{bmatrix} \quad , \quad (2.5)$$

donde $(B^{(i)})^2(\lambda)$ es una constante a determinar.

Haciendo uso de las condiciones (2.5) en la ecuación (2.3), se llega al sistema de ecuaciones homogéneo

$$\begin{bmatrix} D_1^{(i)}(B^{(i)})^2(\lambda) + \Sigma_{a1}^{(i)} + \Sigma_{12}^{(i)} - \lambda\nu\Sigma_{f1}^{(i)} & -\lambda\nu\Sigma_{f2}^{(i)} \\ -\Sigma_{12}^{(i)} & D_2^{(i)}(B^{(i)})^2(\lambda) + \Sigma_{a2}^{(i)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1^{(i)}(z, \lambda) \\ \phi_2^{(i)}(z, \lambda) \end{bmatrix} = 0 \quad . \quad (2.6)$$

Este sistema tendrá solución no trivial cuando el determinante de la matriz se anule. Los valores de $(B^{(i)})^2(\lambda)$ que satisfacen esta condición son

$$\begin{aligned} (\nu^{(i)})^2(\lambda) &= -a^{(i)}(\lambda) - ((d^{(i)})^2(\lambda) + r^{(i)}(\lambda))^{1/2} \quad , \\ (\mu^{(i)})^2(\lambda) &= -a^{(i)}(\lambda) + ((d^{(i)})^2(\lambda) + r^{(i)}(\lambda))^{1/2} \quad ; \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} a^{(i)}(\lambda) &= \frac{p^{(i)} + q^{(i)}(\lambda)}{2} \quad , \\ d^{(i)}(\lambda) &= \frac{p^{(i)} - q^{(i)}(\lambda)}{2} \quad , \\ r^{(i)}(\lambda) &= \frac{\lambda\nu\Sigma_{f2}^{(i)}\Sigma_{12}^{(i)}}{D_1^{(i)}D_2^{(i)}} \quad , \end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned} p^{(i)} &= \frac{\Sigma_{a2}^{(i)}}{D_2^{(i)}} \quad , \\ q^{(i)}(\lambda) &= \frac{\Sigma_{a1}^{(i)} + \Sigma_{12}^{(i)} - \lambda\nu\Sigma_{f1}^{(i)}}{D_1^{(i)}} \quad . \end{aligned}$$

Así pues, el flujo térmico ha de satisfacer una de las siguientes relaciones

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz^2}\phi_2^{(i)} &= (\nu^{(i)})^2(\lambda)\phi_2^{(i)} \quad , \\ \frac{d^2}{dz^2}\phi_2^{(i)} &= (\mu^{(i)})^2(\lambda)\phi_2^{(i)} \quad ,\end{aligned}$$

y por tanto su solución general puede expresarse en el seno de cada celda de la forma

$$\begin{aligned}\phi_2^{(i)}(z, \lambda) &= \varphi_i(z_{i-1})\frac{\text{sen}(\nu^{(i)}(z_i - z))}{\text{sen}(\nu^{(i)}dz^{(i)})} + \varphi_i(z_i)\frac{\text{sen}(\nu^{(i)}(z - z_{i-1}))}{\text{sen}(\nu^{(i)}dz^{(i)})} + \\ &+ \psi_i(z_{i-1})\frac{\text{sen}(\mu^{(i)}(z_i - z))}{\text{sen}(\mu^{(i)}dz^{(i)})} + \psi_i(z_i)\frac{\text{sen}(\mu^{(i)}(z - z_{i-1}))}{\text{sen}(\mu^{(i)}dz^{(i)})} \quad ,\end{aligned}$$

donde ‘sen’ es la función seno en variable compleja y $\varphi_i(z_{i-1})$, $\varphi_i(z_i)$, $\psi_i(z_{i-1})$, y $\psi_i(z_i)$ son parámetros que dependen de la zona y el autovalor considerado.

De la ecuación (2.6) se obtiene la relación

$$\Sigma_{12}^{(i)}\phi_1^{(i)} = (D_2^{(i)}(B^{(i)})^2(\lambda) + \Sigma_{a2}^{(i)})\phi_2^{(i)} \quad ,$$

y, si definimos

$$\begin{aligned}s_i &= \frac{D_2^{(i)}(\nu^{(i)})^2(\lambda) + \Sigma_{a2}^{(i)}}{\Sigma_{12}^{(i)}} \quad , \\ t_i &= \frac{D_2^{(i)}(\mu^{(i)})^2(\lambda) + \Sigma_{a2}^{(i)}}{\Sigma_{12}^{(i)}} \quad ,\end{aligned}$$

podemos escribir la solución general para el flujo rápido en el seno de cada celda de la forma

$$\begin{aligned}\phi_1^{(i)}(z, \lambda) &= s_i\varphi_i(z_{i-1})\frac{\text{sen}(\nu^{(i)}(z_i - z))}{\text{sen}(\nu^{(i)}dz^{(i)})} + s_i\varphi_i(z_i)\frac{\text{sen}(\nu^{(i)}(z - z_{i-1}))}{\text{sen}(\nu^{(i)}dz^{(i)})} + \\ &+ t_i\psi_i(z_{i-1})\frac{\text{sen}(\mu^{(i)}(z_i - z))}{\text{sen}(\mu^{(i)}dz^{(i)})} + t_i\psi_i(z_i)\frac{\text{sen}(\mu^{(i)}(z - z_{i-1}))}{\text{sen}(\mu^{(i)}dz^{(i)})} \quad .\end{aligned}$$

Así, la solución general de la ecuación (2.3) se puede expresar matricialmente del modo siguiente

$$\begin{bmatrix} \phi_1^{(i)}(z, \lambda) \\ \phi_2^{(i)}(z, \lambda) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_i & t_i \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_i(z_{i-1})\frac{\text{sen}(\nu^{(i)}(z_i - z))}{\text{sen}(\nu^{(i)}dz^{(i)})} + \varphi_i(z_i)\frac{\text{sen}(\nu^{(i)}(z - z_{i-1}))}{\text{sen}(\nu^{(i)}dz^{(i)})} \\ \psi_i(z_{i-1})\frac{\text{sen}(\mu^{(i)}(z_i - z))}{\text{sen}(\mu^{(i)}dz^{(i)})} + \psi_i(z_i)\frac{\text{sen}(\mu^{(i)}(z - z_{i-1}))}{\text{sen}(\mu^{(i)}dz^{(i)})} \end{bmatrix} \quad . \quad (2.7)$$

De este modo, para reconstruir los flujos térmico y rápido en el seno de cada celda i hay que calcular los coeficientes $\varphi_i(z_i)$, $\psi_i(z_i)$, $\varphi_i(z_{i-1})$, $\psi_i(z_{i-1})$.

Las corrientes $J_g^{(i)}(z, \lambda) = -D_g^{(i)} \frac{d}{dz} \phi_g^{(i)}$, $g = 1, 2$ en la región i , se obtienen a partir de la ecuación (2.7)

$$\begin{bmatrix} J_1^{(i)}(z, \lambda) \\ J_2^{(i)}(z, \lambda) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -D_1^{(i)} s_i & -D_1^{(i)} t_i \\ -D_2^{(i)} & -D_2^{(i)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_i(z_{i-1}) \frac{-\nu_i \cos(\nu_i(z_i - z))}{\text{sen}(\nu_i dz^{(i)})} + \varphi_i(z_i) \frac{\nu_i \cos(\nu_i(z - z_{i-1}))}{\text{sen}(\nu_i dz^{(i)})} \\ \psi_i(z_{i-1}) \frac{-\mu_i \cos(\mu_i(z_i - z))}{\text{sen}(\mu_i dz^{(i)})} + \psi_i(z_i) \frac{\mu_i \cos(\mu_i(z - z_{i-1}))}{\text{sen}(\mu_i dz^{(i)})} \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

Si definimos los vectores

$$\Phi_i(z, \lambda) = \text{col}(\phi_1^{(i)}(z, \lambda), \phi_2^{(i)}(z, \lambda), J_1^{(i)}(z, \lambda), J_2^{(i)}(z, \lambda))$$

y

$$E_i = \text{col}(\varphi_i(z_{i-1}), \varphi_i(z_i), \psi_i(z_{i-1}), \psi_i(z_i)) \quad ,$$

y las matrices

$$M_i = \begin{bmatrix} s_i & t_i & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -D_1^{(i)} s_i & -D_1^{(i)} t_i \\ 0 & 0 & -D_2^{(i)} & -D_2^{(i)} \end{bmatrix}$$

y

$$U_i(z) = \begin{bmatrix} \frac{\text{sen}(\nu^{(i)}(z_i - z))}{\text{sen}(\nu^{(i)} dz^{(i)})} & \frac{\text{sen}(\nu^{(i)}(z - z_{i-1}))}{\text{sen}(\nu^{(i)} dz^{(i)})} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\text{sen}(\mu^{(i)}(z_i - z))}{\text{sen}(\mu^{(i)} dz^{(i)})} & \frac{\text{sen}(\mu^{(i)}(z - z_{i-1}))}{\text{sen}(\mu^{(i)} dz^{(i)})} \\ \frac{-\nu^{(i)} \cos(\nu^{(i)}(z_i - z))}{\text{sen}(\nu^{(i)} dz^{(i)})} & \frac{\nu^{(i)} \cos(\nu^{(i)}(z - z_{i-1}))}{\text{sen}(\nu^{(i)} dz^{(i)})} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-\mu^{(i)} \cos(\mu^{(i)}(z_i - z))}{\text{sen}(\mu^{(i)} dz^{(i)})} & \frac{\mu^{(i)} \cos(\mu^{(i)}(z - z_{i-1}))}{\text{sen}(\mu^{(i)} dz^{(i)})} \end{bmatrix} \quad ,$$

podemos escribir las ecuaciones (2.7) y (2.8) en la forma

$$\Phi_i(z, \lambda) = M_i U_i(z) E_i \quad . \quad (2.9)$$

Construiremos ahora, la solución global de la ecuación (2.1) sobre todo el reactor imponiendo las condiciones de continuidad en las $N - 1$ caras de las celdas internas del mismo y las condiciones de contorno en los dos extremos. Mediante esta

formulación, las condiciones de continuidad se pueden expresar como

$$M_i U_i(z_i) E_i = M_{i+1} U_{i+1}(z_i) E_{i+1} \quad i = 1, \dots, N-1 \quad , \quad (2.10)$$

y las condiciones de contorno

$$\begin{aligned} B_0 M_1 U_1(z_0) E_1 &= 0 \quad , \\ B_N M_N U_N(z_N) E_N &= 0 \quad , \end{aligned} \quad (2.11)$$

donde

$$\begin{aligned} B_0 &= \begin{bmatrix} \alpha_{11} & 0 & \beta_{11} & 0 \\ 0 & \alpha_{21} & 0 & \beta_{21} \end{bmatrix} \quad , \\ B_N &= \begin{bmatrix} \alpha_{1N} & 0 & -\beta_{1N} & 0 \\ 0 & \alpha_{2N} & 0 & -\beta_{2N} \end{bmatrix} \quad . \end{aligned}$$

Las condiciones (2.10) y (2.11) se pueden agrupar en la ecuación matricial

$$K(\lambda) E = 0 \quad , \quad (2.12)$$

donde E es el vector

$$E = \text{col}(E_1, E_2, \dots, E_N) \quad ,$$

y $K(\lambda)$ es una matriz banda real, con la siguiente estructura a bloques

$$K(\lambda) = \begin{bmatrix} B_0 M_1 U_1(z_0) & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ M_1 U_1(z_1) & -M_2 U_2(z_1) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & M_2 U_2(z_2) & -M_3 U_3(z_2) & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & M_{N-1} U_{N-1}(z_{N-1}) & -M_N U_N(z_{N-1}) \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & B_N U_N(z_N) \end{bmatrix} \quad .$$

El sistema homogéneo (2.12) tendrá solución distinta de la trivial si y sólo si

$$\det(K(\lambda)) = 0 \quad , \quad (2.13)$$

que constituye una ecuación no lineal, a partir de la cual, se pueden obtener los distintos autovalores λ_n de la ecuación (2.1).

Dado un valor λ_n que anule el determinante, se garantiza la existencia de infinitas soluciones para el sistema (2.12). Para obtener un representante del subespacio de soluciones damos, por ejemplo, el valor 1 a la componente p -ésima del vector E y eliminamos una de las ecuaciones; de este modo, se llega al sistema de $q = 4N - 1$ ecuaciones siguientes,

$$K_1(\lambda_n)E^1 = S_1 \quad , \quad (2.14)$$

donde

$$S_1 = \text{col}(-K_{1p}, -K_{2p}, \dots, -K_{qp}) \quad ,$$

$$E^1 = \text{col}(e_1, e_2, \dots, e_{p-1}, e_{p+1}, \dots, e_{4N}) \quad ,$$

con $e_1 = \varphi_1(z_0)$, $e_2 = \varphi_1(z_1)$, $e_3 = \psi_1(z_0)$, $e_4 = \psi_1(z_1)$, $e_5 = \psi_2(z_1)$, etc. Finalmente, la matriz $K_1(\lambda_m)$ tiene la estructura

$$K_1(\lambda_n) = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & \cdots & K_{1p-1} & K_{1p+1} & \cdots & K_{14N} \\ K_{21} & K_{22} & \cdots & K_{2p-1} & K_{2p+1} & \cdots & K_{24N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ K_{p1} & K_{p2} & \cdots & K_{pp-1} & K_{pp+1} & \cdots & K_{p4N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ K_{q1} & K_{q2} & \cdots & K_{qp-1} & K_{qp+1} & \cdots & K_{q4N} \end{bmatrix} .$$

El método descrito se ha implementado en un programa escrito en lenguaje FORTRAN denominado MOD2G [10], [11]. El primer paso del algoritmo desarrollado, consiste en el cálculo de los autovalores λ_n a partir de la ecuación (2.13), mediante el método de la Secante, obteniendo el determinante de $K(\lambda)$ mediante una descomposición LU de la matriz. Una vez se ha calculado un autovalor λ_n , para calcular un autovector asociado, se resuelve el sistema (2.12), obteniendo de este modo las componentes del vector $E(\lambda_n)$. Mediante la ecuación (2.7) se reconstruyen el flujo rápido, $\phi_1^{(i)}$, y el flujo térmico, $\phi_2^{(i)}$, en cada una de las celdas en que se ha discretizado el reactor.

Como la mayoría de los programas existentes calculan el flujo promedio en cada celda, se ha incluido en el programa el cálculo de estos flujos medios. Integrando

el flujo sobre cada región y dividiendo por la longitud de la misma, obtenemos las expresiones de los flujos promedio rápido y térmico asociados al autovalor λ_n en la celda i -ésima

$$\begin{aligned}\bar{\phi}_1^{(i)} &= s_i \varphi_i(z_{i-1}) \frac{1 - \cos(\nu^{(i)} dz^{(i)})}{\nu^{(i)} dz^{(i)} \operatorname{sen}(\nu^{(i)} dz^{(i)})} + s_i \varphi_i(z_i) \frac{1 - \cos(\nu^{(i)} dz^{(i)})}{\nu^{(i)} dz^{(i)} \operatorname{sen}(\nu^{(i)} dz^{(i)})} + \\ &+ t_i \psi_i(z_{i-1}) \frac{1 - \cos(\mu^{(i)} dz^{(i)})}{\mu^{(i)} dz^{(i)} \operatorname{sen}(\mu^{(i)} dz^{(i)})} + t_i \psi_i(z_i) \frac{1 - \cos(\mu^{(i)} dz^{(i)})}{\mu^{(i)} dz^{(i)} \operatorname{sen}(\mu^{(i)} dz^{(i)})} , \\ \bar{\phi}_2^{(i)} &= \varphi_i(z_{i-1}) \frac{1 - \cos(\nu^{(i)} dz^{(i)})}{\nu^{(i)} dz^{(i)} \operatorname{sen}(\nu^{(i)} dz^{(i)})} + \varphi_i(z_i) \frac{1 - \cos(\nu^{(i)} dz^{(i)})}{\nu^{(i)} dz^{(i)} \operatorname{sen}(\nu^{(i)} dz^{(i)})} + \\ &+ \psi_i(z_{i-1}) \frac{1 - \cos(\mu^{(i)} dz^{(i)})}{\mu^{(i)} dz^{(i)} \operatorname{sen}(\mu^{(i)} dz^{(i)})} + \psi_i(z_i) \frac{1 - \cos(\mu^{(i)} dz^{(i)})}{\mu^{(i)} dz^{(i)} \operatorname{sen}(\mu^{(i)} dz^{(i)})} .\end{aligned}$$

Asimismo, se ha incluido el cálculo del perfil axial de potencia relativa en cada celda, a partir de los flujos rápido y térmico mediante la expresión

$$P^{(i)} = \frac{(\Sigma_{f1}^{(i)} \phi_1^{(i)} + \Sigma_{f2}^{(i)} \phi_2^{(i)}) L}{\sum_{i=1}^N (\Sigma_{f1}^{(i)} \phi_1^{(i)} + \Sigma_{f2}^{(i)} \phi_2^{(i)}) dz^{(i)}} ,$$

donde L es la longitud total del reactor. El perfil de potencia se define de igual forma para problemas bidimensionales y tridimensionales cambiando la longitud por el área o el volumen, según el caso.

Mediante el método desarrollado, es inmediato resolver el problema adjunto (1.16). Para ello, una vez se ha obtenido el autovalor λ_n a partir de la ecuación (2.13), se reconstruye la matriz $K_1(\lambda_n)$, sustituyendo los bloques

$$\begin{bmatrix} s_i & t_i \\ 1 & 1 \end{bmatrix} , \quad \begin{bmatrix} -D_1^{(i)} s_i & -D_1^{(i)} t_i \\ -D_2^{(i)} & -D_2^{(i)} \end{bmatrix} ,$$

en las ecuaciones (2.7) y (2.8), por los bloques

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s_{ai} & t_{ai} \end{bmatrix} , \quad \begin{bmatrix} -D_1^{(i)} & -D_1^{(i)} \\ -D_2^{(i)} s_{ai} & -D_2^{(i)} t_{ai} \end{bmatrix} ,$$

donde

$$s_{ai} = \frac{D_1^{(i)} (\nu^{(i)})^2 (\lambda) + \Sigma_{a1}^{(i)} + \Sigma_{12}^{(i)} - \lambda \nu \Sigma_{f1}^{(i)}}{\Sigma_{12}^{(i)}} ; \quad t_{ai} = \frac{D_1^{(i)} (\mu^{(i)})^2 (\lambda) + \Sigma_{a1}^{(i)} + \Sigma_{12}^{(i)} - \lambda \nu \Sigma_{f1}^{(i)}}{\Sigma_{12}^{(i)}} .$$

Una vez construida la nueva matriz $K_1(\lambda_n)$, se resuelve el sistema equivalente al (2.14), que nos proporciona los coeficientes que nos permiten reconstruir los flujos rápido y térmico adjuntos en cada celda.

2.1.1 Resultados Numéricos

Para comprobar el funcionamiento del método, se han comparado los resultados del flujo rápido, el flujo térmico y del perfil axial de potencia proporcionados por el programa MOD2G con los proporcionados por el programa SIMULATE-3, para el caso correspondiente al Ciclo 5 EOFPL de la Central Nuclear de Cofrentes.

Para estudiar este caso, se ha construido un modelo de reactor unidimensional equivalente al Reactor de Cofrentes, que se ha discretizado en 27 nodos del modo siguiente

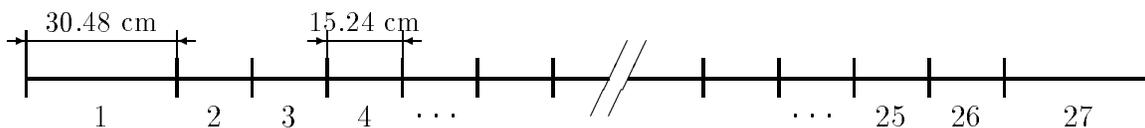


Fig. 2.2.- Nodalización del Reactor de Cofrentes 1D.

donde se han distinguido dos tipos de nodos, los nodos correspondientes al reflector de 30.48 cm de longitud y los nodos correspondientes al combustible, de 15.24 cm.. Las secciones eficaces 1D del modelo unidimensional, se han generado de forma consistente, a partir de las secciones eficaces 3D suministradas por el programa SIMULATE-3, de forma que se reproduzca la constante efectiva de multiplicación y el perfil de potencia [7], [8], [9]. Los resultados obtenidos para las secciones eficaces del modelo unidimensional se presentan en la tabla siguiente

Tabla 2.1.- Secciones eficaces del Reactor de Cofrentes 1D. Ciclo 5

Nodo	D_1	D_2	Σ_{a1}	Σ_{a2}	Σ_{12}	$\nu\Sigma_{f1}$	$\nu\Sigma_{f2}$
1	1.045600	0.315390	0.006759	0.042792	0.026483	0.000000	0.000000
2	1.400000	0.344100	0.006123	0.034803	0.020791	0.002735	0.034955
3	1.424300	0.343700	0.008097	0.055085	0.018634	0.004232	0.073338
4	1.440100	0.349150	0.008074	0.053924	0.018297	0.003974	0.068992
5	1.463400	0.357540	0.008164	0.053309	0.017755	0.003855	0.067221
6	1.498000	0.369890	0.008157	0.053255	0.016920	0.003816	0.067254
7	1.540300	0.385070	0.008126	0.053497	0.015890	0.003814	0.068310
8	1.585000	0.401320	0.008084	0.053781	0.014817	0.003822	0.069648
9	1.620800	0.414780	0.008032	0.054029	0.014014	0.003826	0.070696
10	1.654100	0.427590	0.007985	0.054287	0.013313	0.003832	0.071755
11	1.692600	0.442740	0.007928	0.054566	0.012557	0.003839	0.072991
12	1.728100	0.457050	0.007867	0.054783	0.011887	0.003842	0.074049
13	1.744200	0.464010	0.007843	0.054977	0.011580	0.003846	0.074696
14	1.767600	0.473770	0.007796	0.055161	0.011145	0.003852	0.075503
15	1.816300	0.493390	0.007717	0.055270	0.010296	0.003854	0.076852
16	1.811800	0.492410	0.007721	0.055381	0.010358	0.003855	0.076873
17	1.823900	0.497810	0.007709	0.055496	0.010151	0.003858	0.077387
18	1.867100	0.515640	0.007630	0.055528	0.009468	0.003853	0.078503
19	1.870800	0.518060	0.007624	0.055557	0.009409	0.003850	0.078634
20	1.864900	0.516380	0.007651	0.055622	0.009500	0.003860	0.078783
21	1.890200	0.527490	0.007582	0.055656	0.009126	0.003876	0.079692
22	1.928500	0.544280	0.007458	0.055537	0.008572	0.003897	0.080804
23	1.896500	0.532430	0.007522	0.055653	0.009036	0.003972	0.080954
24	1.900800	0.535970	0.007310	0.055492	0.008983	0.004066	0.081710
25	1.961700	0.564160	0.007563	0.055242	0.008123	0.004142	0.081839
26	1.886100	0.577310	0.004319	0.030169	0.009894	0.002442	0.039040
27	2.214700	0.549020	0.012728	0.008695	0.011400	0.000000	0.000000

Con el programa MOD2G se han calculado el autovalor fundamental y los cuatro autovalores subcríticos axiales. En la siguiente tabla, se recogen los resultados

correspondientes a estos autovalores así como el resultado para el primer autovalor que proporciona SIMULATE

Tabla 2.2.- Autovalores de los cuatro primeros modos subcríticos.

$k_0(\text{SIMUL.})$	$k_0(\text{MOD2G})$	k_1	k_2	k_3	k_4
1.00523996	1.00523998	0.99434963	0.9711910948	0.9350388003	0.89051947

donde $k_i = 1/\lambda_i$.

Seguidamente, presentamos los resultados del flujo rápido, del flujo térmico y del perfil axial de potencia asociados al modo fundamental obtenidos con los programas SIMULATE y MOD2G.

Tabla 2.3.- Comparación de los resultados obtenidos con los programas MOD2G y SIMULATE-3 para el modo fundamental.

Nodo	$\phi_1^{(i)}$ (SIM.)	$\phi_1^{(i)}$ (MOD.)	$\phi_2^{(i)}$ (SIM.)	$\phi_2^{(i)}$ (MOD.)	$P^{(i)}$ (SIM.)	$P^{(i)}$ (MOD.)
1	0.032884	0.015977	0.02362	0.01152	0.0000	0.0000
2	0.18881	0.18881	0.10501	0.10501	0.2773	0.2705
3	0.43361	0.43361	0.15029	0.15029	0.8557	0.8501
4	0.57773	0.57773	0.19498	0.19498	1.0413	1.0289
5	0.64306	0.64306	0.21345	0.21345	1.1053	1.0927
6	0.68553	0.68553	0.21741	0.21741	1.1277	1.1160
7	0.72775	0.72775	0.21601	0.21601	1.1435	1.1339
8	0.77258	0.77258	0.21310	0.21310	1.1577	1.1505
9	0.81709	0.81709	0.21198	0.21198	1.1768	1.1708
10	0.86035	0.86035	0.21080	0.21080	1.1954	1.1907
11	0.90095	0.90095	0.20737	0.20737	1.2044	1.2018
12	0.93571	0.93571	0.20352	0.20352	1.2069	1.2063
13	0.96260	0.96260	0.20248	0.20248	1.2170	1.2168
14	0.98328	0.98328	0.19791	0.19791	1.2102	1.2108
15	0.99761	0.99761	0.18731	0.18731	1.1744	1.1795
16	1.00000	1.00000	0.18652	0.18652	1.1729	1.1763
17	0.99643	0.99643	0.18142	0.18142	1.1520	1.1562
18	0.98827	0.98827	0.16955	0.16955	1.0989	1.1069
19	0.97120	0.97120	0.16469	0.16469	1.0716	1.0792
20	0.94751	0.94751	0.16102	0.16102	1.0499	1.0571
21	0.91725	0.91725	0.15008	0.15008	0.9963	1.0050
22	0.87198	0.87198	0.13593	0.13593	0.9231	0.9339
23	0.79558	0.79558	0.12817	0.12817	0.8741	0.8819
24	0.67564	0.67564	0.10818	0.10818	0.7527	0.7594
25	0.50064	0.50064	0.07954	0.07954	0.5580	0.5672
26	0.27291	0.27291	0.08585	0.08585	0.2569	0.2577
27	0.09853	0.04285	0.10658	0.04504	0.0000	0.0000

La representación gráfica de estos resultados es la siguiente

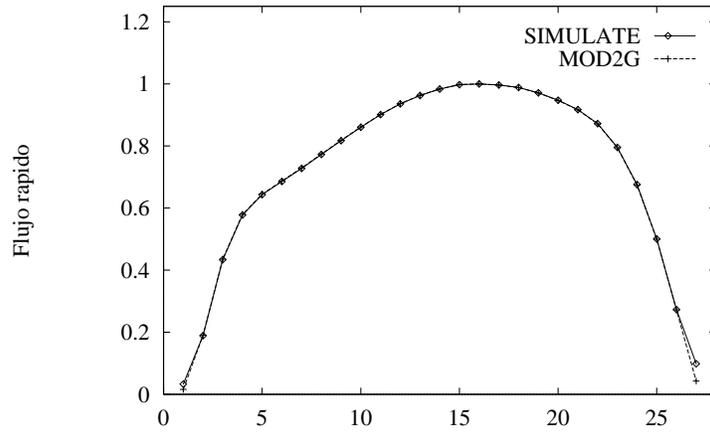


Fig. 2.3.- Comparación del flujo rápido entre SIMULATE y MOD2G.
Cofrentes ciclo 5.

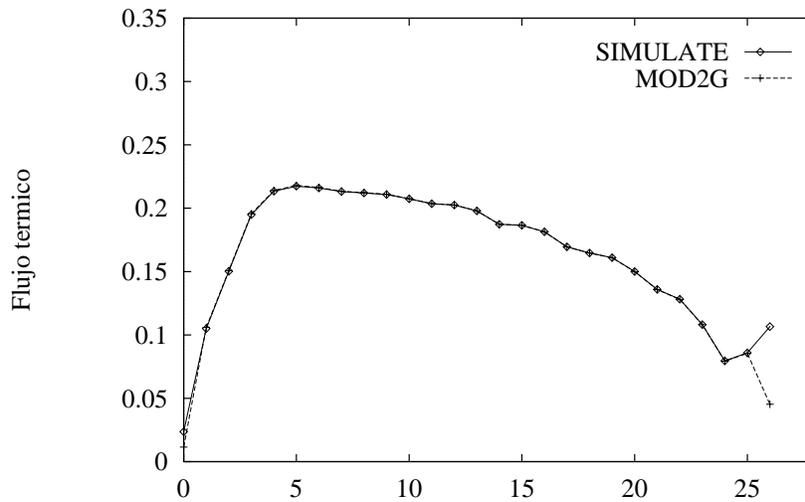


Fig. 2.4.- Comparación del flujo térmico entre SIMULATE y MOD2G.
Cofrentes ciclo 5.

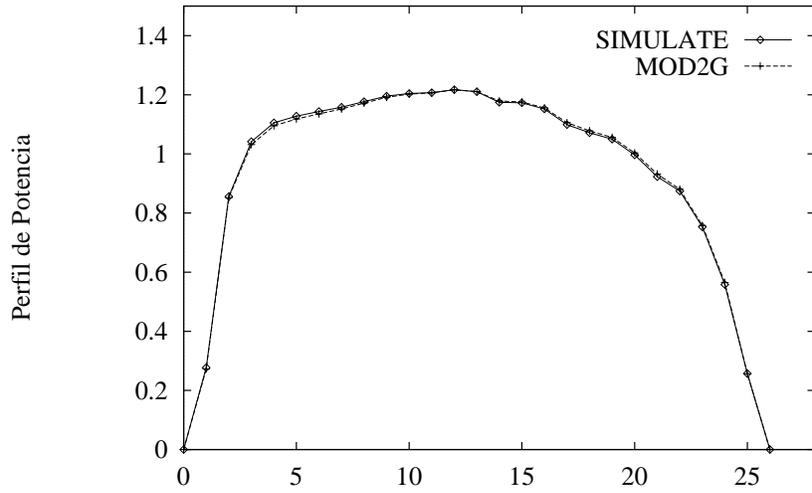


Fig. 2.5.- Comparación del perfil de potencia. SIMULATE-MOD2G.
Cofrentes ciclo 5.

En la figura siguiente se representa la comparación del perfil de potencia, entre el modo fundamental y el primer modo subcrítico.

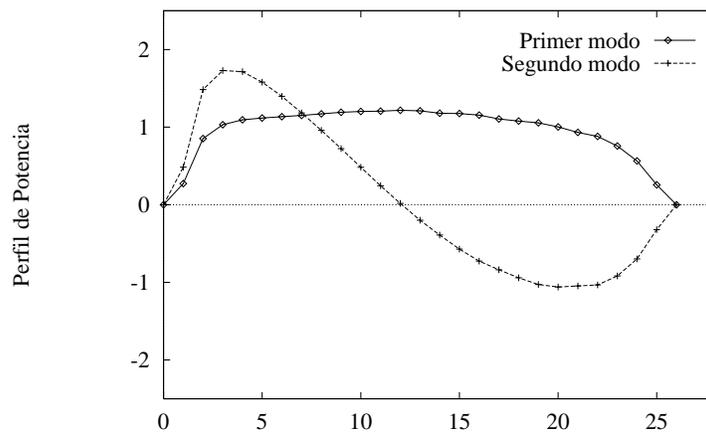


Fig. 2.6.- Comparación del perfil de potencia entre el primer y segundo modo.

Se observa que el acuerdo de los resultados es excelente y tan sólo hay que destacar una pequeña diferencia en la zona del reflector. Estos errores no son achacables al método desarrollado para el cálculo de los Modos Lambda, si no que son debidos al proceso de síntesis que se ha utilizado para calcular las secciones eficaces del modelo unidimensional.

Con la metodología desarrollada, se ha estudiado el suceso de inestabilidad de Cofrentes. Se han distinguido dos casos: en el primer caso se tienen las barras de control parcialmente insertadas y corresponde a la situación real de Cofrentes del 29 de Enero de 1991, y un segundo caso, (caso hipotético), que corresponde a tener las barras de control totalmente fuera del reactor.

En la tablas siguientes se representan las constantes k_i correspondientes al modo fundamental y a los modos subcríticos axiales en los dos casos estudiados

Tabla 2.4.- Autovalores del modo fundamental. Cofrentes ciclo 6.

caso	k_0 (SIMULATE)	k_0 (MOD2G)	k_0 (VENTURE)
real	1.00100	1.001	1.00101
hipotético	1.04968	1.049680	1.04968

Tabla 2.5.- Autovalores de los modos axiales Cofrentes ciclo 6.

caso	k_{1z} (MOD2G)	k_{1z} (VENTURE)	k_{2z} (MOD2G)	k_{3z} (MOD2G)
real	0.9923321	0.9923538	0.968586	0.934804
hipotético	1.036858	1.036855876	1.01126259	0.975563

A efectos de comparación, se han incluido también los resultados de la k -efectiva obtenidos con el programa VENTURE.

También se han estudiado los modos azimutales correspondientes a estos casos. Para obtener estos modos azimutales, se han colapsado consistentemente las secciones eficaces 3D mediante los flujos 3D suministrados por SIMULATE-3, obteniendo de este modo, un reactor unidimensional equivalente en las direcciones x e

y , [10], [12]. Ahora bien, debido a la geometría cruciforme del reactor, los autovalores asociados a dicha representación unidimensional serán sólo aproximaciones a los verdaderos autovalores en geometría 3D, aunque, como veremos más adelante, la precisión obtenida es muy buena.

En las figuras siguientes se representa la comparación entre los resultados obtenidos con MOD2G y los suministrados por SIMULATE-3 para el modo fundamental

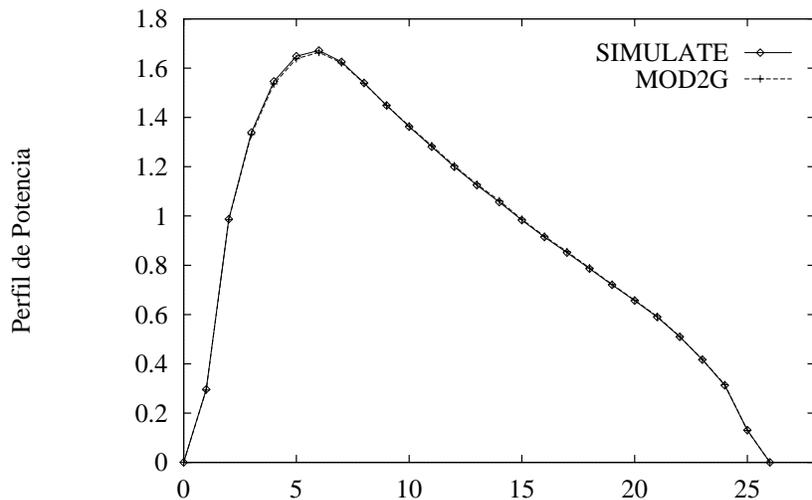


Fig. 2.7.- Perfil de potencia del primer modo para el ciclo 6 sin barras insertadas
Comparación SIMULATE- MOD2G.

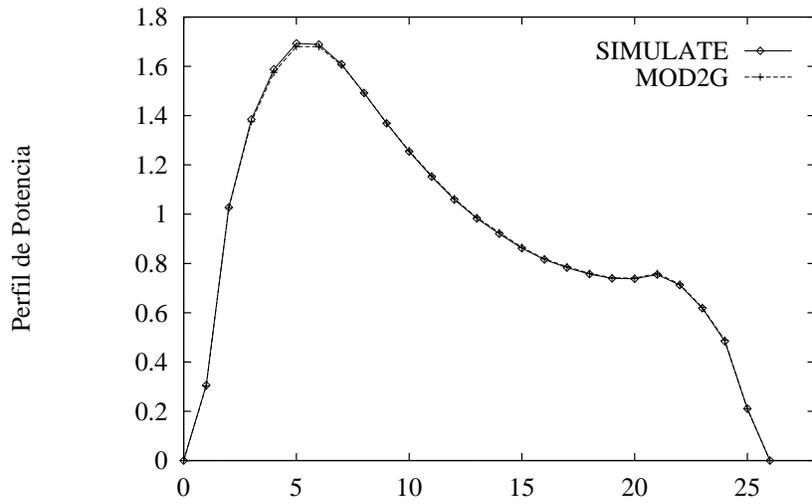


Fig. 2.8.- Perfil de potencia del primer modo para el ciclo 6 caso real. Comparación SIMULATE-MOD2G.

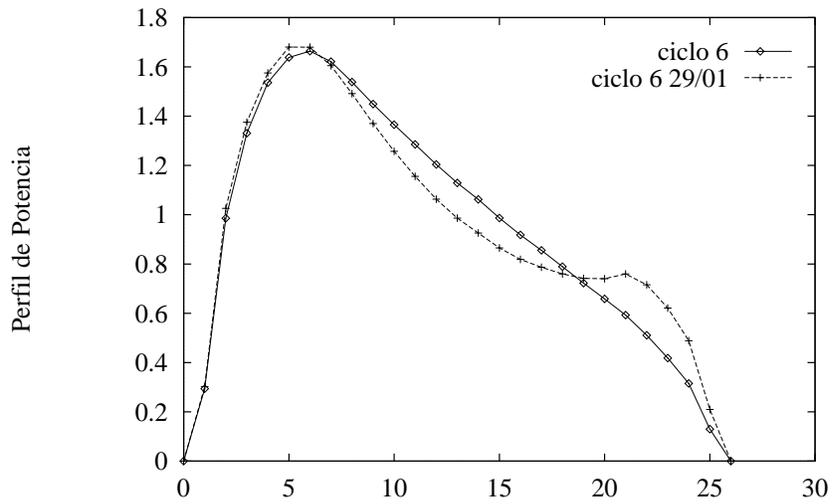


Fig. 2.9.- Comparación del perfil de potencia entre el caso real y el caso hipotético.

En la siguiente figura, se representan el primer y el segundo modo obtenidos con MOD2G, al tomar como eje principal el eje x .

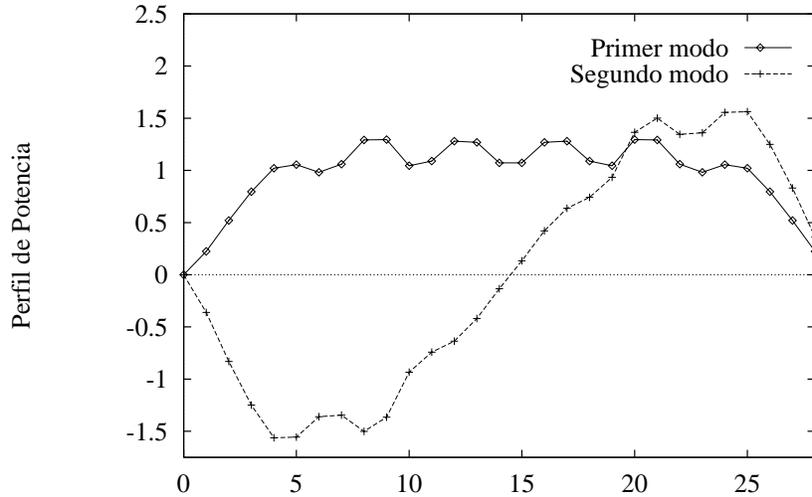


Fig. 2.10.- Perfil de potencia en el eje x . Primer y segundo modo.

En la tabla siguiente se representa la separación entre los autovalores correspondientes a los modos subcríticos axiales y azimutales en los dos casos estudiados.

Tabla 2.6.- Separación entre los autovalores (MOD2G).

caso	$k_0 - k_{1x}$	$k_0 - k_{1z}$	$k_0 - k_{2x}$	$k_0 - k_{2z}$
real	0.006726	0.008668	0.025312	0.032414
hipotético	0.008970	0.012824	0.029039	0.038417

Dado que la β_{ef} para el caso real vale 0.0057172, tendremos que $(k_{1x} - k_0)/\beta_{ef} = -1.175\$$. En el caso hipotético la β_{ef} es igual a 0.0057026, con lo que tenemos $(k_{1x} - k_0)/\beta_{ef} = -1.573\$$.

En ambos casos, los modos axiales son más subcríticos que los modos azimutales, lo que implica que se exciten primero los de tipo azimutal, que son los causantes de las oscilaciones fuera de fase.

Como se puede ver, la separación de autovalores es más pequeña en el caso real que en el hipotético; esto nos indica que la inserción parcial de barras de control (perfil más picado) acorta la separación entre los autovalores, posibilitando así que la realimentación termohidráulica pueda excitar el modo subcrítico.

2.2 Problemas Bidimensionales

En esta sección, generalizaremos el método expuesto en la sección precedente para el tratamiento de problemas bidimensionales [13], [14].

El primer paso consiste en discretizar el reactor en N celdas rectangulares, (i, j) , de la forma

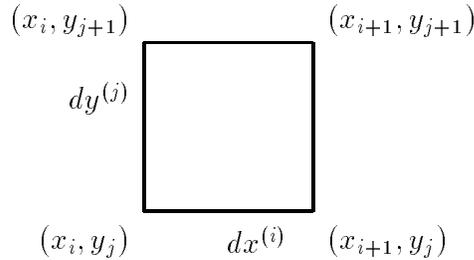


Fig. 2.11.- Celda genérica de un problema bidimensional.

donde se suponen constantes las distintas secciones eficaces que aparecen en la ecuación (2.1).

El problema (2.3) a resolver en cada celda para un autovalor λ genérico, en este caso se expresa

$$\begin{aligned}
 -D_1^{(i,j)} \nabla^2 \phi_1^{(i,j)}(x, y) + (\Sigma_{a1}^{(i,j)} + \Sigma_{12}^{(i,j)} - \lambda \nu \Sigma_{f1}^{(i,j)}) \phi_1^{(i,j)}(x, y) - \lambda \nu \Sigma_{f2}^{(i,j)} \phi_2^{(i,j)}(x, y) &= 0 \quad , \\
 -D_2^{(i,j)} \nabla^2 \phi_2^{(i,j)}(x, y) + \Sigma_{a2}^{(i,j)} \phi_2^{(i,j)}(x, y) - \Sigma_{12}^{(i,j)} \phi_1^{(i,j)}(x, y) &= 0 \quad .
 \end{aligned}
 \tag{2.15}$$

Para construir la solución global sobre todo el reactor, habrá que imponer condiciones de *continuidad del flujo y de la corriente neutrónicas en las caras de las celdas internas del reactor*, así como las condiciones de contorno en la frontera del mismo.

De forma análoga al caso unidimensional, para cada grupo se buscan soluciones de la forma

$$\begin{aligned}\nabla^2 \phi_1^{(i,j)} &= -(B^{(i,j)})^2 \phi_1^{(i,j)} \quad , \\ \nabla^2 \phi_2^{(i,j)} &= -(B^{(i,j)})^2 \phi_2^{(i,j)} \quad .\end{aligned}$$

Sustituyendo en (2.15) e imponiendo que el sistema homogéneo obtenido tenga solución no trivial, obtenemos la ecuación

$$\begin{vmatrix} D_1^{(i,j)}(B^{(i,j)})^2 + \Sigma_{a1}^{(i,j)} + \Sigma_{12}^{(i,j)} - \lambda\nu\Sigma_{f1}^{(i,j)} & -\lambda\nu\Sigma_{f2}^{(i,j)} \\ -\Sigma_{12}^{(i,j)} & D_2^{(i,j)}(B^{(i,j)})^2 - \Sigma_{a2}^{(i,j)} \end{vmatrix} = 0 \quad ,$$

que tiene como posibles soluciones para $(B^{(i,j)})^2$

$$\begin{aligned}(\mu^{(i,j)})^2 &= -\frac{1}{2}(p^{(i,j)} + q^{(i,j)}) - \frac{1}{2}((p^{(i,j)} - q^{(i,j)})^2 + 4r^{(i,j)})^{\frac{1}{2}} \quad , \\ (\nu^{(i,j)})^2 &= -\frac{1}{2}(p^{(i,j)} + q^{(i,j)}) + \frac{1}{2}((p^{(i,j)} - q^{(i,j)})^2 + 4r^{(i,j)})^{\frac{1}{2}} \quad ,\end{aligned}\tag{2.16}$$

donde

$$\begin{aligned}p^{(i,j)} &= \Sigma_{a2}^{(i,j)} / D_2^{(i,j)} \quad , \\ q^{(i,j)} &= (\Sigma_{s12}^{(i,j)} + \Sigma_{a1}^{(i,j)} - \lambda\nu\Sigma_{f1}^{(i,j)}) / D_1^{(i,j)} \quad , \\ r^{(i,j)} &= \lambda\nu\Sigma_{f2}^{(i,j)}\Sigma_{12}^{(i,j)} / (D_1^{(i,j)} D_2^{(i,j)}) \quad .\end{aligned}$$

Basta obtener las solución de las ecuaciones

$$\begin{aligned}\nabla^2 \phi_2^{(i,j)} &= (\mu^{(i,j)})^2 \phi_2^{(i,j)} \quad , \\ \nabla^2 \phi_1^{(i,j)} &= (\nu^{(i,j)})^2 \phi_1^{(i,j)} \quad ,\end{aligned}\tag{2.17}$$

para el flujo térmico y, a partir de éste, obtener el flujo rápido mediante la relación

$$\Sigma_{12}^{(i,j)} \phi_1^{(i,j)} = (D_2^{(i,j)}(B^{(i,j)})^2 + \Sigma_{a2}^{(i,j)}) \phi_2^{(i,j)}$$

donde $B^{(i,j)}$ puede tomar el valor $\mu^{(i,j)}$ o $\nu^{(i,j)}$.

Para mostrar el procedimiento seguido para obtener la solución de las ecuaciones (2.17), consideramos, en cada celda, una ecuación genérica de la forma

$$\nabla^2 \phi = (B^{(i,j)})^2 \phi \quad , \quad (2.18)$$

donde se han abandonado los superíndices (i, j) del campo ϕ para simplificar la notación.

Se utiliza el método de separación de variables y por tanto, se buscan soluciones del tipo

$$\phi(x, y) = \mathcal{X}(x)\mathcal{Y}(y) \quad ,$$

con lo que la ecuación (2.18) se expresa como

$$\mathcal{Y}(y) \frac{\partial^2 \mathcal{X}}{\partial x^2} + \mathcal{X}(x) \frac{\partial^2 \mathcal{Y}}{\partial y^2} = (B^{(i,j)})^2 \mathcal{X}(x)\mathcal{Y}(y) \quad . \quad (2.19)$$

Para eliminar la dependencia en la variable y de esta ecuación, la integramos entre y_j y y_{j+1} para cada fila de celdas j . Si introducimos el ‘flujo integrado asociado a la fila j ’

$$X(x) = \mathcal{X}(x) \int_{y_j}^{y_{j+1}} \mathcal{Y}(y) dy \quad ,$$

la ecuación (2.19) se expresa

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} = \left((B^{(i,j)})^2 - \frac{\int_{y_j}^{y_{j+1}} \frac{\partial^2 \mathcal{Y}}{\partial y^2} dy}{\int_{y_j}^{y_{j+1}} \mathcal{Y}(y) dy} \right) X \quad . \quad (2.20)$$

Análogamente, para eliminar la dependencia en la variable x de la ecuación (2.19), la integramos entre x_i y x_{i+1} para cada columna de celdas i , e introduciendo el ‘flujo integrado asociado a la columna i ’

$$Y(x) = \mathcal{Y}(y) \int_{x_i}^{x_{i+1}} \mathcal{X}(x) dx \quad ,$$

obtenemos la ecuación

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} = \left((B^{(i,j)})^2 - \frac{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial^2 \mathcal{X}}{\partial x^2} dx}{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \mathcal{X}(x) dx} \right) Y \quad . \quad (2.21)$$

Una vez se han obtenido los ‘flujos integrados’ en cada celda, el flujo real viene dado por

$$\phi(x, y) = \frac{X(x)Y(y)}{\int_{y_j}^{y_{j+1}} \mathcal{Y}(y) dy \int_{x_i}^{x_{i+1}} \mathcal{X}(x) dx} = \frac{X(x)Y(y)}{dx^{(i)} dy^{(j)} \bar{\phi}(x, y)} \quad , \quad (2.22)$$

donde $\bar{\phi}$ es el flujo medio en cada celda.

Las ecuaciones (2.20) y (2.21) han de ser compatibles con la separación de variables dada por (2.19). Si definimos

$$(B_x^{(i,j)})^2 = \frac{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial^2 \mathcal{X}}{\partial x^2}(x) dx}{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \mathcal{X}(x) dx} \quad ,$$

$$(B_y^{(i,j)})^2 = \frac{\int_{y_j}^{y_{j+1}} \frac{\partial^2 \mathcal{Y}}{\partial y^2}(y) dy}{\int_{y_j}^{y_{j+1}} \mathcal{Y}(y) dy} \quad ,$$

las ecuaciones (2.20) y (2.21) se expresan

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} = (B_x^{(i,j)})^2 X \quad ,$$

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} = (B_y^{(i,j)})^2 Y \quad ,$$

junto con la relación

$$(B_x^{(i,j)})^2 + (B_y^{(i,j)})^2 = (B^{(i,j)})^2 \quad .$$

De forma totalmente análoga al caso unidimensional, hay dos soluciones posibles para cada uno de los $B_x^{(i,j)}$, $B_y^{(i,j)}$, que denotaremos por $\mu_x^{(i,j)}$, $\nu_x^{(i,j)}$, $\mu_y^{(i,j)}$, $\nu_y^{(i,j)}$ y, por tanto, podemos tomar las soluciones para los ‘flujos integrados térmicos’ en el seno de cada celda como

$$X_2^{(i,j)}(x) = a_1^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\mu_x^{(i,j)}(x - x_i))}{\text{sen}(\mu_x^{(i,j)} dx^{(i)})} + a_2^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\mu_x^{(i,j)}(x_{i+1} - x))}{\text{sen}(\mu_x^{(i,j)} dx^{(i)})} +$$

$$a_3^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\nu_x^{(i,j)}(x - x_i))}{\text{sen}(\nu_x^{(i,j)} dx^{(i)})} + a_4^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\nu_x^{(i,j)}(x_{i+1} - x))}{\text{sen}(\nu_x^{(i,j)} dx^{(i)})} \quad , \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned}
Y_2^{(i,j)}(y) = & b_1^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\mu_y^{(i,j)}(y - y_j))}{\text{sen}(\mu_y^{(i,j)} dy^{(j)})} + b_2^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\mu_y^{(i,j)}(y_{j+1} - y))}{\text{sen}(\mu_y^{(i,j)} dy^{(j)})} + \\
& b_3^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\nu_y^{(i,j)}(y - y_j))}{\text{sen}(\nu_y^{(i,j)} dy^{(j)})} + b_4^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\nu_y^{(i,j)}(y_{j+1} - y))}{\text{sen}(\nu_y^{(i,j)} dy^{(j)})} , \quad (2.24)
\end{aligned}$$

y para los ‘flujos integrados rápidos’, tendremos

$$\begin{aligned}
X_1^{(i,j)}(x) = & s^{(i,j)} a_1^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\mu_x^{(i,j)}(x - x_i))}{\text{sen}(\mu_x^{(i,j)} dx^{(i)})} + s^{(i,j)} a_2^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\mu_x^{(i,j)}(x_{i+1} - x))}{\text{sen}(\mu_x^{(i,j)} dx^{(i)})} + \\
& t^{(i,j)} a_3^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\nu_x^{(i,j)}(x - x_i))}{\text{sen}(\nu_x^{(i,j)} dx^{(i)})} + t^{(i,j)} a_4^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\nu_x^{(i,j)}(x_{i+1} - x))}{\text{sen}(\nu_x^{(i,j)} dx^{(i)})} \quad (2.25)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Y_1^{(i,j)}(y) = & s^{(i,j)} b_1^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\mu_y^{(i,j)}(y - y_j))}{\text{sen}(\mu_y^{(i,j)} dy^{(j)})} + s^{(i,j)} b_2^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\mu_y^{(i,j)}(y_{j+1} - y))}{\text{sen}(\mu_y^{(i,j)} dy^{(j)})} + \\
& t^{(i,j)} b_3^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\nu_y^{(i,j)}(y - y_j))}{\text{sen}(\nu_y^{(i,j)} dy^{(j)})} + t^{(i,j)} b_4^{(i,j)} \frac{\text{sen}(\nu_y^{(i,j)}(y_{j+1} - y))}{\text{sen}(\nu_y^{(i,j)} dy^{(j)})} \quad (2.26)
\end{aligned}$$

donde

$$s^{(i,j)} = \frac{D_2^{(i,j)} (\nu^{(i,j)})^2 + \Sigma_{a_2}^{(i,j)}}{\Sigma_{12}^{(i,j)}} ; \quad t^{(i,j)} = \frac{D_2^{(i,j)} (\mu^{(i,j)})^2 + \Sigma_{a_2}^{(i,j)}}{\Sigma_{12}^{(i,j)}} .$$

La separación de variables es incompatible con la imposición de condiciones de continuidad para el flujo real en las caras de las celdas internas del reactor, por tanto, estas condiciones se impondrán sobre los ‘flujos integrados’ que hemos introducido anteriormente. Así, imponiendo las condiciones de continuidad en las caras internas del reactor, las condiciones de contorno en la frontera del mismo, y adoptando una notación similar a la del caso unidimensional, obtenemos, para cada fila y columna de celdas en que se ha discretizado el reactor, las ecuaciones

$$\begin{aligned}
\det(K^{(j)}(\mu_x^{(i,j)}, \nu_x^{(i,j)}, \lambda)) &= 0; \quad j = 1, \dots, n_f , \\
\det(K^{(i)}(\mu_x^{(i,j)}, \nu_x^{(i,j)}, \lambda)) &= 0; \quad i = 1, \dots, n_c ,
\end{aligned} \quad (2.27)$$

donde $K^{(j)}$ es la matriz del problema (2.12) asociado a cada fila o columna de celdas j , n_f es el número de filas de celdas y n_c el número de columnas de celdas. Además,

hay que tener en cuenta que, en cada celda, se satisfacen las relaciones

$$\begin{aligned}(\mu_y^{(i,j)})^2 &= (\mu^{(i,j)})^2 - (\mu_x^{(i,j)})^2 \quad , \\(\nu_y^{(i,j)})^2 &= (\nu^{(i,j)})^2 - (\nu_x^{(i,j)})^2 \quad ,\end{aligned}$$

y que $\mu^{(i,j)}$ y $\nu^{(i,j)}$ dependen del autovalor, λ , según las ecuaciones (2.16).

El hecho de utilizar ‘flujos integrados’ implica que, en cada celda, se satisfaga la relación

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} X(x) dx = \int_{y_j}^{y_{j+1}} Y(y) dy = dx^{(i)} dy^{(j)} \bar{\phi} \quad . \quad (2.28)$$

Integrando las ecuaciones (2.23) y (2.24), podemos escribir

$$\begin{aligned}\int_{x_i}^{x_{i+1}} X_2(x) dx &= f^{(j)} \left[(a_1^{(i,j)} + a_2^{(i,j)}) \frac{1}{\mu_x^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\mu_x^{(i,j)} dx^{(i)}}{2}\right) + \right. \\ &\quad \left. (a_3^{(i,j)} + a_4^{(i,j)}) \frac{1}{\nu_x^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\nu_x^{(i,j)} dx^{(i)}}{2}\right) \right] \quad , \quad (2.29)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\int_{y_j}^{y_{j+1}} Y_2(y) dy &= c^{(i)} \left[(b_1^{(i,j)} + b_2^{(i,j)}) \frac{1}{\mu_y^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\mu_y^{(i,j)} dy^{(j)}}{2}\right) + \right. \\ &\quad \left. (b_3^{(i,j)} + b_4^{(i,j)}) \frac{1}{\nu_y^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\nu_y^{(i,j)} dy^{(j)}}{2}\right) \right] \quad , \quad (2.30)\end{aligned}$$

y análogamente para los ‘flujos rápidos’

$$\begin{aligned}\int_{x_i}^{x_{i+1}} X_1(x) dx &= f^{(j)} \left[s^{(i,j)} (a_1^{(i,j)} + a_2^{(i,j)}) \frac{1}{\mu_x^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\mu_x^{(i,j)} dx^{(i)}}{2}\right) + \right. \\ &\quad \left. t^{(i,j)} (a_3^{(i,j)} + a_4^{(i,j)}) \frac{1}{\nu_x^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\nu_x^{(i,j)} dx^{(i)}}{2}\right) \right] \quad , \quad (2.31)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\int_{y_j}^{y_{j+1}} Y_1(y) dy &= c^{(i)} \left[s^{(i,j)} (b_1^{(i,j)} + b_2^{(i,j)}) \frac{1}{\mu_y^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\mu_y^{(i,j)} dy^{(j)}}{2}\right) + \right. \\ &\quad \left. t^{(i,j)} (b_3^{(i,j)} + b_4^{(i,j)}) \frac{1}{\nu_y^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\nu_y^{(i,j)} dy^{(j)}}{2}\right) \right] \quad , \quad (2.32)\end{aligned}$$

donde se han introducido las constantes globales indeterminadas $f^{(j)}$ y $c^{(i)}$, asociadas a cada fila j y a cada columna i , que provienen de las condiciones (2.27), y que aseguran que los sistemas que permiten determinar los coeficientes $a_l^{(i,j)}$ y $b_l^{(i,j)}$ ($l = 1, \dots, 4$) no tengan rango máximo.

Igualando el cociente entre las igualdades (2.29) y (2.31) al cociente entre las igualdades (2.30) y (2.32), obtenemos, para cada celda, la restricción

$$\frac{(a_1^{(i,j)} + a_2^{(i,j)}) \frac{1}{\mu_x^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\mu_x^{(i,j)} dx^{(i)}}{2}\right) + (a_3^{(i,j)} + a_4^{(i,j)}) \frac{1}{\nu_x^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\nu_x^{(i,j)} dx^{(i)}}{2}\right)}{s^{(i,j)} (a_1^{(i,j)} + a_2^{(i,j)}) \frac{1}{\mu_x^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\mu_x^{(i,j)} dx^{(i)}}{2}\right) + t^{(i,j)} (a_3^{(i,j)} + a_4^{(i,j)}) \frac{1}{\nu_x^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\nu_x^{(i,j)} dx^{(i)}}{2}\right)} = \frac{(b_1^{(i,j)} + b_2^{(i,j)}) \frac{1}{\mu_y^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\mu_y^{(i,j)} dy^{(j)}}{2}\right) + (b_3^{(i,j)} + b_4^{(i,j)}) \frac{1}{\nu_y^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\nu_y^{(i,j)} dy^{(j)}}{2}\right)}{s^{(i,j)} (b_1^{(i,j)} + b_2^{(i,j)}) \frac{1}{\mu_y^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\mu_y^{(i,j)} dy^{(j)}}{2}\right) + t^{(i,j)} (b_3^{(i,j)} + b_4^{(i,j)}) \frac{1}{\nu_y^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\nu_y^{(i,j)} dy^{(j)}}{2}\right)} \quad (2.33)$$

Las restricciones extra, necesarias para determinar el problema, se obtienen igualando la integración (2.28) de los ‘flujos integrados térmicos’ X e Y para las cuatro celdas determinadas por los vértices (x_i, y_j) , (x_{i+1}, y_j) , (x_i, y_{j+1}) y (x_{i+1}, y_{j+1}) y eliminando entre estas igualdades las constantes indeterminadas f y c . De este modo, se obtienen las relaciones

$$R^{(i,j)} R^{(i+1,j+1)} = R^{(i+1,j)} R^{(i,j+1)} \quad (2.34)$$

donde

$$R^{(i,j)} = \frac{(a_1^{(i,j)} + a_2^{(i,j)}) \frac{1}{\mu_x^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\mu_x^{(i,j)} dx^{(i)}}{2}\right) + (a_3^{(i,j)} + a_4^{(i,j)}) \frac{1}{\nu_x^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\nu_x^{(i,j)} dx^{(i)}}{2}\right)}{(b_1^{(i,j)} + b_2^{(i,j)}) \frac{1}{\mu_y^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\mu_y^{(i,j)} dy^{(j)}}{2}\right) + (b_3^{(i,j)} + b_4^{(i,j)}) \frac{1}{\nu_y^{(i,j)}} \tan\left(\frac{\nu_y^{(i,j)} dy^{(j)}}{2}\right)} .$$

Hemos de destacar que, tanto las relaciones (2.33) como las relaciones (2.34) son independientes de las constantes indeterminadas $f^{(j)}$ y $c^{(i)}$ y, por tanto, no dependen de las soluciones elegidas para los coeficientes $a_l^{(i,j)}$, $b_l^{(i,j)}$ ($l = 1, \dots, 4$). Así pues, las ecuaciones (2.27), (2.33) y (2.34) constituyen un sistema de $2N + 1$ ecuaciones no lineales, siendo N el número de celdas en que se ha discretizado el reactor. A partir de este sistema, podemos obtener los valores de $\mu_x^{(i,j)}$, $\nu_x^{(i,j)}$ y λ ; y con estos valores, los flujos integrados en cada celda.

En la resolución del sistema de ecuaciones no lineales anterior para un reactor en concreto, nos encontramos con dos problemas. El primero de ellos, es la elección de un método iterativo eficiente para la búsqueda de raíces de un sistema de ecuaciones no lineales y el segundo, consiste en encontrar una solución inicial suficientemente cercana a la solución del problema para que el método iterativo converja. Hay que destacar que, debido a que se han de satisfacer las relaciones (2.33) y (2.34), es necesario, en cada iteración, resolver los sistemas lineales que nos permiten obtener los distintos valores de $a_l^{(i,j)}$ y $b_l^{(i,j)}$ ($l = 1, \dots, 4$).

En los procesos de búsqueda de raíces que se han considerado, hay que calcular la matriz jacobiana asociada a la función que define el sistema de ecuaciones. En nuestro problema esta matriz tiene un tamaño considerable y su cálculo presenta un alto coste computacional. Es por esto que, como proceso básico para la búsqueda de raíces, se ha elegido un método Cuasi-Newton de la familia de los Broyden [15], [16],[17]. Estos métodos se basan en la iteración del método de Newton y utilizan una aproximación para la matriz inversa de la matriz jacobiana del sistema.

A continuación, describiremos brevemente el método de Newton, y tomando éste como partida, expondremos el método de Broyden utilizado.

Se parte de un sistema de ecuaciones no lineales de la forma

$$\vec{F}(\vec{x}) = \vec{0} \quad .$$

Utilizando el desarrollo de Taylor podemos escribir para cada una de las componentes de la función \vec{F}

$$F_i(\vec{x}_1) = F_i(\vec{x}_0 + \Delta\vec{x}) = F_i(\vec{x}_0) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \Delta x_j + O(x^2) \quad . \quad (2.35)$$

Introduciendo la matriz jacobiana del sistema de ecuaciones

$$J_{ij}(\vec{x}_0) = \left. \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \right|_{\vec{x}_0} \quad ,$$

despreciando los términos $O(x^2)$, y haciendo $\vec{F}(\vec{x}_1) = \vec{0}$ en la relación (2.35), obtendremos la iteración básica del método de Newton

$$\vec{x}_1 = \vec{x}_0 - J^{-1}(\vec{x}_0)\vec{F}(\vec{x}_0) \quad .$$

Este método, siempre que el punto inicial, \vec{x}_0 , sea lo suficientemente cercano a la solución y la matriz J^{-1} exista en cada punto, tiene una convergencia cuadrática, o sea, si \vec{x} es la solución del sistema de ecuaciones no lineales y $\{\vec{x}_k\}_{k=0}^{\infty}$ es la sucesión de aproximaciones obtenidas mediante el método de Newton, se puede afirmar que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\vec{x} - \vec{x}_{k+1}\|}{\|\vec{x} - \vec{x}_k\|^2} = \lambda \quad , \quad (2.36)$$

donde λ es una constante positiva.

Para aplicar el método tal como se ha expuesto, hace falta invertir la matriz J en cada iteración. En la práctica el método se suele aplicar en dos pasos. Primero, en cada iteración k se encuentra un vector \vec{y}_k , que satisfaga

$$J(\vec{x}_k)\vec{y}_k = \vec{F}(\vec{x}_k) \quad ,$$

y, posteriormente, la nueva aproximación a la raíz se obtiene de la forma

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \vec{y}_k \quad .$$

Como ya se ha comentado, el hecho de que para aplicar el método de Newton sea necesario calcular, en cada iteración, la matriz jacobiana y resolver el sistema de ecuaciones asociado, hace que el coste computacional del método al aplicarlo a un problema de las características del que nos ocupa, sea muy elevado. Por ello, se ha optado por utilizar el método de Broyden [18], [15], que es una generalización del método de la Secante y permite resolver sistemas de ecuaciones no lineales. En este método se reemplaza la matriz jacobiana del método de Newton por una aproximación de la misma y, por ello, se pasa de la convergencia cuadrática del método de Newton a una convergencia superlineal [15], [16], o sea, ya no existe el límite (2.36), pero se cumple que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\vec{x} - \vec{x}_{k+1}\|}{\|\vec{x} - \vec{x}_k\|} = 0 \quad .$$

Para aplicar el método de Broyden se parte de una solución inicial del problema, \vec{x}_0 , y mediante el método de Newton, se calcula una primera aproximación \vec{x}_1 . Posteriormente, se reemplaza la matriz jacobiana, $J(\vec{x}_1)$, por una matriz A_1 , que satisface

$$A_1(\vec{x}_1 - \vec{x}_0) = \vec{F}(\vec{x}_1) - \vec{F}(\vec{x}_0) \quad .$$

Con esta condición no se define de forma unívoca la matriz A_1 , por lo que se exige la condición extra

$$A_1 \vec{z} = J(\vec{x}_0) \vec{z} \quad \text{si} \quad (\vec{x}_1 - \vec{x}_0) \vec{z} = 0 \quad .$$

Estas dos condiciones definen unívocamente la matriz A_1 , como [19]

$$A_1 = J(\vec{x}_0) + \frac{[\vec{F}(\vec{x}_1) - \vec{F}(\vec{x}_0) - J(\vec{x}_0)(\vec{x}_1 - \vec{x}_0)](\vec{x}_1 - \vec{x}_0)^T}{\|\vec{x}_1 - \vec{x}_0\|^2} \quad .$$

Ésta es la nueva matriz que se utiliza para calcular \vec{x}_2 en vez de $J(\vec{x}_1)$, mediante la expresión

$$\vec{x}_2 = \vec{x}_1 - A_1^{-1} \vec{F}(\vec{x}_1) \quad .$$

El método se puede repetir para encontrar \vec{x}_3 usando A_1 en vez de $A_0 = J(\vec{x}_0)$ y \vec{x}_2 y \vec{x}_1 en vez de \vec{x}_1 y \vec{x}_0 . En general, una vez se ha calculado \vec{x}_i , se calcula \vec{x}_{i+1} mediante las relaciones

$$A_i = A_{i-1} + \frac{[\vec{F}(\vec{x}_i) - \vec{F}(\vec{x}_{i-1}) - A_{i-1}(\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1})](\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1})^T}{\|\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}\|^2} \quad , \quad (2.37)$$

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i - A_i^{-1} \vec{F}(\vec{x}_i) \quad . \quad (2.38)$$

Con este esquema el método de Broyden no es muy eficiente, ya que lo que se gana al sustituir la matriz jacobiana por la A_i , se pierde al pasar de tener una convergencia cuadrática a una convergencia superlineal. Por esto, para evitar tener que resolver el sistema de ecuaciones asociado a cada A_i , se utiliza una fórmula de inversión de Sherman y Morrison [19]. Este resultado dice que si A es una matriz no singular y \vec{x} y \vec{y} son dos vectores, entonces la matriz $A + \vec{x}(\vec{y})^T$ es no singular siempre que $(\vec{y})^T A^{-1} \vec{x} \neq -1$. Además,

$$(A + \vec{x}(\vec{y})^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1} \vec{x}(\vec{y})^T A^{-1}}{1 + (\vec{y})^T A^{-1} \vec{x}} \quad . \quad (2.39)$$

Tomando

$$A = A_{i-1} \quad , \quad \vec{x} = \frac{[\vec{F}(\vec{x}_i) - \vec{F}(\vec{x}_{i-1}) - A_{i-1}(\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1})]}{\|\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}\|^2} \quad , \quad \vec{y} = \vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}$$

y utilizando (2.39), podemos expresar

$$A_i^{-1} = \left(A_{i-1} + \frac{[\vec{F}(\vec{x}_i) - \vec{F}(\vec{x}_{i-1}) - A_{i-1}(\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1})](\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1})^T}{\|\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}\|^2} \right)^{-1}$$

como [15]

$$A_i^{-1} = A_{i-1}^{-1} + \frac{(\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1} - A_{i-1}^{-1}(\vec{F}(\vec{x}_i) - \vec{F}(\vec{x}_{i-1}))) (\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1})^T A_{i-1}^{-1}}{(\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}) A_{i-1}^{-1} (\vec{F}(\vec{x}_i) - \vec{F}(\vec{x}_{i-1}))} \quad . \quad (2.40)$$

Esta expresión nos evita construir la matriz A_i y resolver el sistema de ecuaciones asociado, en cada iteración. De este modo, el esquema utilizado en el método de Broyden viene dado por las ecuaciones (2.38) y (2.40).

Hay que tener en cuenta que la matriz A_i no es más que una aproximación de la matriz jacobiana y, por tanto, para mejorar la convergencia del método es conveniente alternar un cierto número de iteraciones del método de Broyden con una iteración del método de Newton, en donde se vuelve a calcular la matriz jacobiana. En el programa que se ha realizado para la resolución del sistema de ecuaciones no lineales se han alternado 10 iteraciones del método de Broyden con una iteración del método de Newton.

Es conocido que, en general, el radio de convergencia de los métodos de resolución de sistemas de ecuaciones no lineales es muy pequeño [15], [20]. Por ello, es conveniente utilizar estos métodos tomando como punto de partida un punto cercano a la solución real del problema. Así pues, en el programa realizado (MOD2G2D) se ha implementado el *método de continuación* [16], [20] que detallamos a continuación.

Se parte de un sistema de ecuaciones de la forma

$$\vec{F}(\vec{x}) = \vec{0} \quad (2.41)$$

y de un punto inicial \vec{x}_0 . Se construye la sucesión de problemas no lineales

$$\vec{G}(\vec{x}, k) = \vec{0}; \quad k = N, \dots, 0 \quad , \quad (2.42)$$

siendo

$$\vec{G}(\vec{x}, k) = \vec{F}(\vec{x}) - \frac{k}{N} \vec{F}(\vec{x}_{i-1}) \quad .$$

El proceso de resolución de los sistemas (2.42) se esquematiza, por etapas, del modo siguiente

Etapla primera.- Se toma $k = N$, con lo que $\vec{x} = \vec{x}_0$ es una solución trivial del sistema.

Etapla Segunda.- Se toma $k = N - 1$ y se utiliza la solución de la etapa anterior, \vec{x}_0 , como punto inicial en la resolución del problema

$$\vec{G}(\vec{x}, N - 1) = \vec{F}(\vec{x}) - \frac{N - 1}{N} \vec{F}(\vec{x}_0) = \vec{0} \quad ,$$

para lo que se utiliza el método de Broyden. La solución obtenida para este problema la denotamos por \vec{x}_1 .

Etapla i-ésima.- Se toma $k = N - i$ y se utiliza la solución de la etapa anterior, \vec{x}_{i-1} , como punto inicial en la resolución del problema

$$\vec{G}(\vec{x}, N - i) = \vec{F}(\vec{x}) - \frac{N - i}{N} \vec{F}(\vec{x}_{i-1}) = \vec{0} \quad .$$

La solución obtenida para este problema la denotamos por \vec{x}_i .

Se sigue el proceso de este modo hasta llegar al valor $k = 0$ ($i = N$), donde el problema no lineal a resolver coincide con el problema de partida (2.41).

Inicialmente, N es un número entero indeterminado que nos indica el número de problemas no lineales a resolver en el método de continuación y se elegirá mayor o menor en cada problema concreto dependiendo de lo alejada que esté la solución inicial, \vec{x}_0 , de la solución del problema (2.41). En los problemas que se han resuelto, se han utilizado *valores de N comprendidos entre 5 y 10*. (Hemos de destacar que al aumentar N aumenta el radio de convergencia del método, pero, a su vez, aumenta el número de problemas no lineales a resolver con el consecuente aumento del coste computacional).

Como ya se ha ido exponiendo, gran parte de la eficiencia de los métodos presentados depende de lo próxima que se encuentre la solución elegida, \vec{x}_0 , a la solución real del problema. Seguidamente presentamos el proceso que se ha seguido para la búsqueda de esta solución inicial. Se ha construido un proceso iterativo que sólo tiene en cuenta las ecuaciones (2.27), y se puede esquematizar en las siguientes etapas

Etapla primera.- Dado un valor del autovalor λ , tenemos determinado el valor de $\mu^{(i,j)}$, $\nu^{(i,j)}$ en cada celda, por las relaciones (2.16).

Se resuelve, para cada fila de celdas, un problema unidimensional de búsqueda del autovalor λ , suponiendo que, como valor inicial, podemos tomar

$$(\mu_x^{(i,j)})^2 = (\mu^{(i,j)})^2/2; \quad (\nu_x^{(i,j)})^2 = (\nu^{(i,j)})^2/2 \quad .$$

Etapa segunda.- En esta etapa se resuelve un problema de búsqueda del autovalor λ para cada una de las columnas de celdas del reactor, teniendo en cuenta que

$$(\mu_y^{(i,j)})^2 = (\mu^{(i,j)})^2 - (\mu_x^{(i,j)})^2; \quad (\nu_y^{(i,j)})^2 = (\nu^{(i,j)})^2 - (\nu_x^{(i,j)})^2 \quad ,$$

donde $\mu_x^{(i,j)}$ y $\nu_x^{(i,j)}$ se obtienen de la etapa anterior.

Etapa tercera.- Se vuelve a resolver un problema de búsqueda del autovalor λ para cada fila de celdas del reactor, pero a diferencia de la primera etapa, ahora se utilizan las relaciones

$$(\mu_x^{(i,j)})^2 = (\mu^{(i,j)})^2 - (\mu_y^{(i,j)})^2; \quad (\nu_x^{(i,j)})^2 = (\nu^{(i,j)})^2 - (\nu_y^{(i,j)})^2 \quad ,$$

donde $\mu_y^{(i,j)}$ y $\nu_y^{(i,j)}$ se obtienen de la etapa anterior.

Tras un número pequeño de iteraciones de este tipo, se consigue un valor de λ similar para cada fila y columna de celdas del reactor. Al finalizar este proceso habremos obtenido los valores iniciales de λ , μ_x y ν_x que satisfacen las relaciones (2.27) y que se utilizan como punto inicial, \vec{x}_0 , para el proceso de continuación que se utiliza para resolver el sistema de ecuaciones no lineales formado por (2.27), (2.33) y (2.34).

2.2.1 Resultados Numéricos

Para comprobar la validez del método desarrollado en el caso bidimensional, se han resuelto dos problemas ‘benchmark’, el correspondiente al reactor de la IAEA y el reactor BIBLIS [21], [22], [23]. Posteriormente, como caso práctico de aplicación, se ha calculado el autovalor y la distribución de potencia normalizada correspondientes al primer modo y segundo modo de un plano axial del reactor de la Central Nuclear de Cofrentes.

Reactor IAEA

El problema ‘benchmark’ bidimensional de la IAEA corresponde a un reactor de agua ligera muy simplificado, donde se consideran dos grupos de energía. El reactor está formado por 177 nodos de 20 cm.×20 cm., correspondientes al núcleo del reactor y un reflector de 20 cm. de ancho.

Este problema presenta una perturbación fuerte debida a la presencia de barras de material absorbente y se dan fuertes variaciones del flujo térmico en las intercaras correspondientes al reflector.

El problema tiene simetría 1/8 y la distribución espacial de los materiales, es de la forma

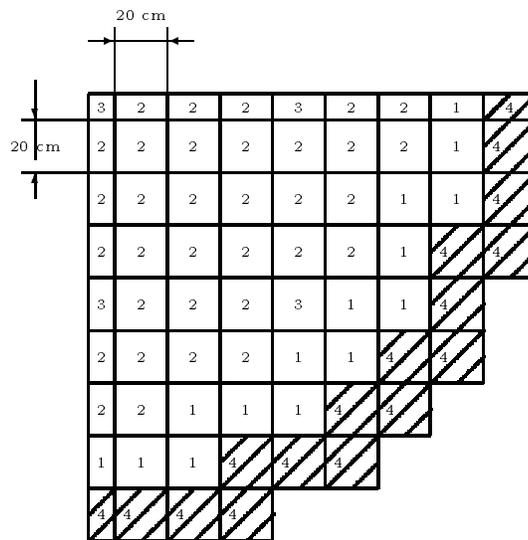


Fig. 2.12.- Reactor IAEA.

Las secciones eficaces asociadas a los distintos materiales vienen dadas en la tabla

Tabla 2.7.- Secciones eficaces del reactor IAEA.

Material Número	D_1 (cm)	D_2 (cm)	Σ_{a1} (cm ⁻¹)	Σ_{a2} (cm ⁻¹)	Σ_{12} (cm ⁻¹)	$\nu\Sigma_{f1}$ (cm ⁻¹)	$\nu\Sigma_{f2}$ (cm ⁻¹)
1	1.5	0.4	0.01012	0.080032	0.02	0.0	0.135
2	1.5	0.4	0.01012	0.085032	0.02	0.0	0.135
3	1.5	0.4	0.01012	0.130032	0.02	0.0	0.135
4	2.0	0.3	0.00016	0.010024	0.04	0.0	0.0

La constante efectiva, $k_{eff} = \frac{1}{\lambda}$, obtenida para el primer modo, es $k_{eff} = 1.0286$, a comparar con el valor de referencia $k_{eff} = 1.029585$. La distribución de potencia normalizada obtenida, viene dada en la tabla

Tabla 2.8.- Potencia normalizada del reactor IAEA.

fil 1	0.9690	0.8925	0.6679	0.0000					
fil 2	1.1180	1.1950	1.2850	1.0430	0.6669	0.0000			
fil 3	0.9943	1.0260	0.9992	0.8734	0.7016	0.5004	0.0000		
fil 4	0.5916	1.0920	1.2740	0.9890	0.4346	0.6238	0.5731	0.0000	
fil 5	1.2090	1.2440	1.2000	1.0260	0.7918	0.6151	0.4733	0.0000	
fil 6	1.5080	1.5740	1.5880	1.4790	1.3330	1.3270	1.2770	0.9419	0.0000
fil 7	1.2740	1.3180	1.2950	1.1470	0.9478	0.8270	0.6708	0.5015	0.0000
fil 8	0.6866	1.2740	1.5080	1.2090	0.5916	0.9941	1.1170	0.9687	0.0000

y su representación gráfica es de la forma

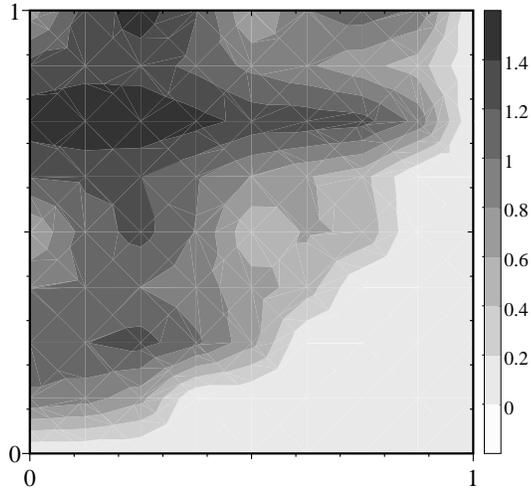


Fig. 2.13.- Distribución de potencia neutrónica normalizada para el reactor IAEA. MOD2G-2D.

A continuación, se presenta la representación gráfica de la solución de referencia para la distribución de potencia [21], [24], [23],

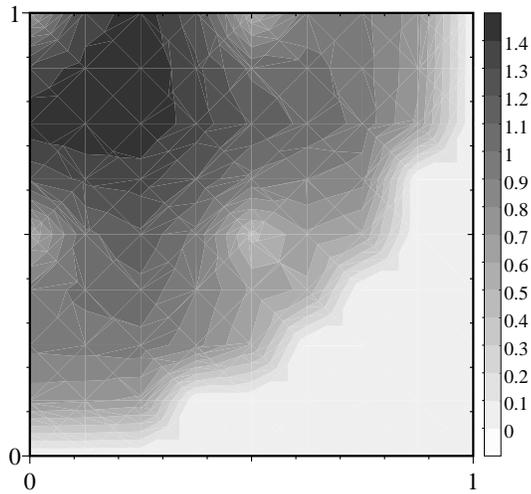


Fig. 2.14.- Distribución de potencia neutrónica normalizada para el reactor IAEA.Solución de referencia.

Observamos pues, que la solución alcanzada para el sistema de ecuaciones no

lineales, nos proporciona un valor bastante bueno para la k_{eff} , pero la solución obtenida para la distribución de potencia normalizada presenta cierto error (hasta de un 10% cerca del reflector). Como ya se ha comentado, podríamos aumentar la precisión de la solución a costa de aumentar el número de problemas no lineales a resolver, pero con ello, se aumenta de forma prohibitiva el coste computacional. Otro modo de poder aumentar la efectividad del método sería buscar otro método para inicializar el problema.

Reactor BIBLIS

El problema bidimensional BIBLIS [22], [23] está modelizado mediante dos grupos de energía, y representa un reactor de agua a presión (PWR) realista. Se ha discretizado el núcleo en nodos de 23.1226 cm. \times 23.1226 cm. y tiene 7 materiales diferentes. El núcleo del reactor está rodeado por un reflector de 23.1226 cm. de ancho. El reactor presenta simetría 1/8 y la distribución de los materiales en su interior es de la forma

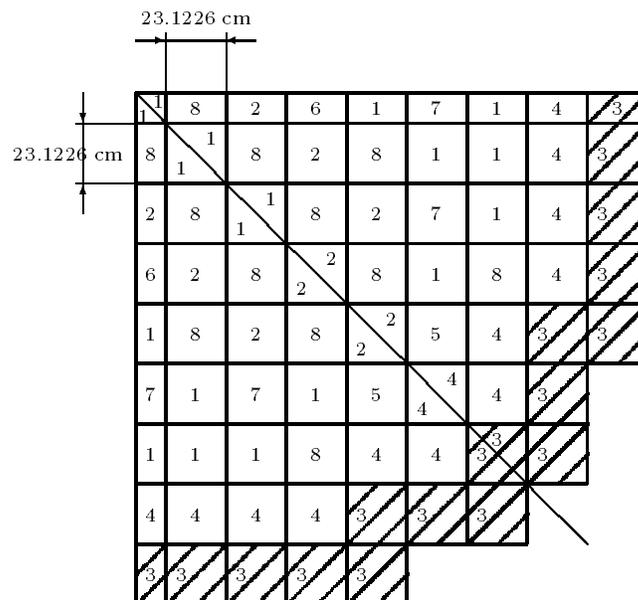


Fig. 2.15.- Reactor BIBLIS.

Las secciones eficaces asociadas a los distintos materiales vienen dadas en la tabla siguiente

Tabla 2.9.- Secciones eficaces del reactor BIBLIS.

Material Número	D_1 (cm)	D_2 (cm)	Σ_{a1} (cm^{-1})	Σ_{a2} (cm^{-1})	Σ_{12} (cm^{-1})	$\nu\Sigma_{f1}$ (cm^{-1})	$\nu\Sigma_{f2}$ (cm^{-1})
1	1.4360	0.3635	0.0095042	0.075058	0.017754	0.0058708	0.096067
2	1.4366	0.3636	0.0096785	0.078436	0.017621	0.0061908	0.103580
3	1.3200	0.2772	0.0026562	0.071596	0.023106	0.0	0.0
4	1.4389	0.3638	0.0103630	0.091408	0.017101	0.0074527	0.132360
5	1.4381	0.3665	0.0100030	0.084828	0.017290	0.0061908	0.103580
6	1.4385	0.3665	0.0101320	0.087314	0.017192	0.0064285	0.109110
7	1.4389	0.3679	0.0101650	0.088024	0.017125	0.0061908	0.103580
8	1.4393	0.3680	0.0102940	0.090510	0.017027	0.0064285	0.109110

La constante efectiva obtenida para el primer modo es $k_{eff} = 1.02478$, a comparar con el valor de referencia $k_{eff} = 1.02511$. La distribución de potencia normalizada obtenida ha sido

Tabla 2.10.- Potencia normalizada del reactor BIBLIS

fil 1	1.0430	0.9907	0.8347	0.5092	0.0000				
fil 2	1.0960	1.0670	0.9157	0.7264	0.8309	0.6263	0.0000		
fil 3	0.9890	1.0470	0.9130	0.9335	0.9507	1.1330	0.6267	0.0000	
fil 4	1.1170	1.0790	1.1430	1.0320	1.1060	0.9511	0.8258	0.0000	
fil 5	1.2520	1.2670	1.1210	1.1850	1.0310	0.9347	0.7262	0.5090	0.0000
fil 6	1.2990	1.1660	1.1600	1.1200	1.1430	0.9138	0.9185	0.8271	0.0000
fil 7	1.1330	1.1660	1.1660	1.2670	1.0790	1.0450	1.0700	0.9817	0.0000
fil 8	1.1370	1.1340	1.2990	1.2510	1.1160	0.9889	1.1020	1.0340	0.0000

y su representación gráfica es de la forma

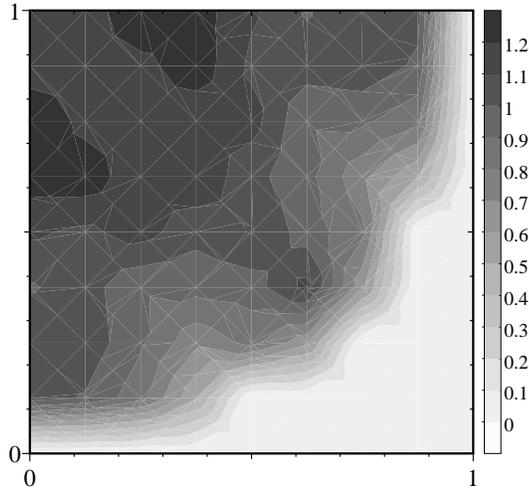


Fig. 2.16.- Distribución de potencia neutrónica normalizada para el reactor BIBLIS. MOD2G-2D.

De igual forma, representamos los valores de referencia [24], [23]

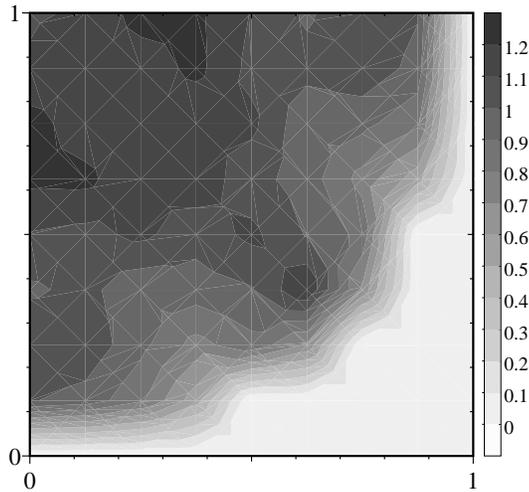


Fig. 2.17.- Distribución de potencia neutrónica normalizada para el reactor BIBLIS. Solución de referencia.

Observamos que, en este caso, el acuerdo en la k_{eff} y en la distribución de potencia es mayor que en caso del reactor IAEA. Ello es debido a que la composición de

materiales del reactor BIBLIS es más homogénea por corresponder el caso estudiado a una situación donde las barras de control están totalmente extraídas.

Reactor de COFRENTES

Como caso de aplicación más realista del método desarrollado, se han calculado el primer y segundo modos correspondientes a un plano axial cercano al centro del reactor de la Central Nuclear de Cofrentes, en la situación del caso ‘hipotético’ que hemos estudiado en el caso unidimensional, y donde no hay barras insertadas.

El reactor presenta simetría 1/4 y se ha discretizado por planos en nodos de $15.24 \text{ cm} \times 15.24 \text{ cm}$., según la figura

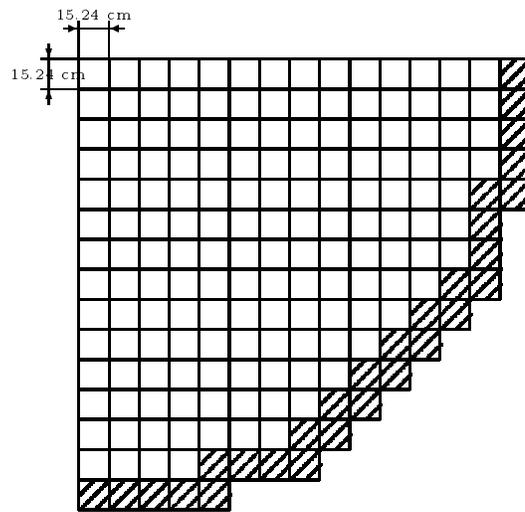


Fig. 2.18.- Reactor de COFRENTES

La constante k obtenida a partir del autovalor del primer modo es $k_0 = 1.0112$ y la distribución de potencia normalizada obtenida viene dada en la siguiente gráfica

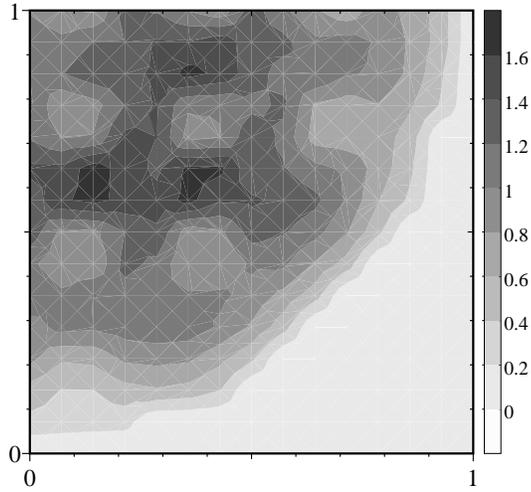


Fig. 2.19.- Distribución de potencia neutrónica normalizada para el reactor de COFRENTES. Primer modo.

La constante k obtenida para el segundo modo es $k_1 = 1.0030$ y la distribución de potencia neutrónica normalizada viene dada por

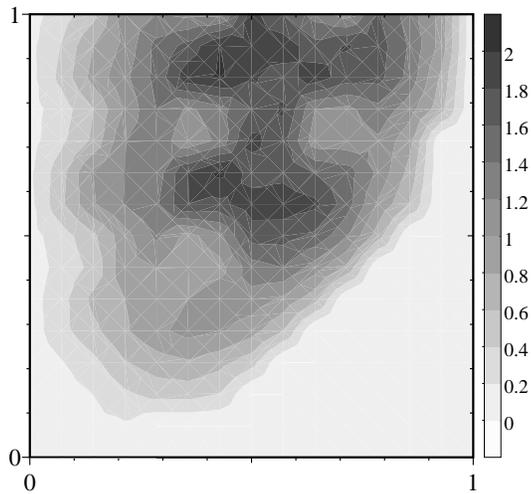


Fig. 2.20.- Distribución de potencia neutrónica normalizada para el reactor de COFRENTES. Segundo modo (azimutal).

Tenemos pues, que la separación entre las constantes correspondientes al modo

fundamental y al primer modo subcrítico es de $\Delta k = 0.0082$ para el plano elegido.

Para comprobar los resultados obtenidos se ha calculado el autovalor correspondiente al primer modo con el programa VENTURE, basado en un método de diferencias finitas. En la siguiente tabla, presentamos la comparación de los valores obtenidos con el programa VENTURE y nuestro programa MOD2G.

Tabla 2.11.- Comparación de las k -s obtenidas con MOD2G y VENTURE.

Problema	VENTURE	MOD2G
COFRENTES 1	1.0114	1.0112
COFRENTES 2	-	1.0030

Observamos pues, que el valor obtenido para la primera constante k_0 es bastante bueno, lo que viene a confirmar la hipótesis de que el método desarrollado proporciona buenos resultados cuando la composición de materiales del reactor es bastante homogénea.

Vistos los resultados numéricos obtenidos y el elevado tiempo de cálculo que es necesario para resolver un problema bidimensional de estas características, se puede concluir que una generalización de este proceso para abordar la resolución de un problema con geometría tridimensional es inviable. Por lo tanto, habrá que cambiar de filosofía a la hora de resolver la ecuación de la difusión si queremos obtener los Modos Lambda de este tipo de problemas.

Capítulo 3

Cálculo de los Modos Lambda. Método de Colocación Nodal

En vista de que el procedimiento empleado en el capítulo precedente no nos proporciona un método efectivo para el cálculo de los Modos Lambda de un reactor tridimensional, optaremos por cambiar de filosofía a la hora de abordar la resolución de la ecuación de los Modos Lambda para un reactor discretizado en una serie de nodos de gran tamaño.

Para este fin, se han desarrollado métodos [1] en diferencias finitas, métodos de síntesis, métodos nodales, métodos basados en elementos finitos y métodos basados en la teoría de las perturbaciones. Nosotros vamos a centrarnos en los métodos nodales [25]. Estos métodos se adaptan bien a la utilización de un mallado o discretización espacial en nodos grandes, lo que permite utilizar las ‘discretizaciones naturales’ dadas por los elementos de combustible o grupos de combustible o grupos homogéneos de estos elementos. En la literatura aparecen, entre otros, los métodos nodales analíticos (ANMs) [26], [27], los métodos nodales basados en el desarrollo en serie de la solución (NEMs) [28] y los métodos basados en una función de Green Nodal (NGGNs) [29], [30].

En la mayoría de estos métodos nodales avanzados, se utiliza un procedimiento de integración transversal que permite reducir la ecuación de la difusión multidimensional a un conjunto equivalente de ecuaciones de difusión unidimensionales. Ahora

bien, esta aproximación da lugar a ciertas limitaciones en la precisión del método, ya que el término de escape transversal que aparece debe aproximarse de forma apropiada. Este tipo de aproximación se puede mejorar [31], [32], [24] a costa de una complicación adicional del método. Otras aproximaciones que no hacen uso de la integración transversal [45], [34] se basan en el desarrollo del flujo neutrónico como combinación lineal de funciones analíticas cuyos coeficientes se calculan mediante una técnica de pesado de residuos.

Actualmente, a medida que van mejorando las prestaciones de los ordenadores, hay un renovado interés en desarrollar programas más rápidos y seguros para la realización de estos cálculos [35]. El trabajo desarrollado en esta memoria se podría encuadrar dentro de esta línea.

Así pues, para abordar la resolución de la ecuación de los Modos Lambda, se ha optado por utilizar un método de colocación nodal [36] basado en un desarrollo en polinomios de Legendre de los flujos neutrónicos en cada celda. Tras imponer las condiciones de continuidad y de contorno de los flujos y las corrientes de forma adecuada, este método permite transformar el problema de autovalores inicial asociado a un operador diferencial

$$\mathcal{L}\phi_n = \frac{1}{k_n}\mathcal{M}\phi_n \quad ,$$

en un problema algebraico de autovalores generalizado

$$L\psi_n = \frac{1}{k_n}M\psi_n \quad ,$$

donde L y M son matrices $2N$ -dimensionales, con la estructura a bloques N -dimensionales [37] siguiente

$$\begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ -L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{1n} \\ \psi_{2n} \end{bmatrix} = \frac{1}{k_n} \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{1n} \\ \psi_{2n} \end{bmatrix} \quad .$$

El gran número de nodos, N , en que se discretiza el reactor y el hecho de que las ecuaciones de la difusión en la aproximación de dos grupos de energía no sean autoadjuntas, implica que la matriz del problema algebraico resultante, L , sea una matriz real, de gran tamaño, no simétrica y con una estructura dispersa.

Existen gran variedad de métodos de búsqueda de valores propios, pero debido al carácter no simétrico de la matriz obtenida, la mayoría de ellos no pueden ser

utilizados eficientemente. Además, como esta matriz es de gran tamaño, las técnicas directas no son aconsejables, debido, principalmente, a la gran cantidad de memoria necesaria para su almacenamiento y a la poca precisión de la solución numérica que se obtiene.

El algoritmo que se ha desarrollado [38], [39], utiliza la técnica de Iteración del Subespacio basada en una proyección de Ritz combinada con un proceso de aceleración obtenido a partir de un principio variacional. Para obtener la solución de los sistemas de ecuaciones, que es necesario resolver en cada iteración del proceso, se ha utilizado el método del gradiente conjugado.

3.1 Método de Colocación Nodal

Pasaremos seguidamente, a presentar las principales características del método de colocación nodal con la aproximación de ‘Serendipita’ que se ha utilizado [36]. En el caso tridimensional, para un autovalor λ dado y un nodo paralelepípedo, e , las ecuaciones (2.15) se pueden escribir de la forma

$$\begin{aligned} -\vec{\nabla} \cdot (D_{1,e} \vec{\nabla})\phi_{1e} + (\Sigma_{a1,e} + \Sigma_{12,e})\phi_{1e} &= \lambda(\nu\Sigma_{f1,e}\phi_{1e} + \nu\Sigma_{f2,e}\phi_{2e}) \\ -\vec{\nabla} \cdot (D_{2,e} \vec{\nabla})\phi_{2e} + \Sigma_{a2,e}\phi_{2e} &= \Sigma_{12,e}\phi_{1e} \quad . \end{aligned} \quad (3.1)$$

Para desarrollar el método de colocación nodal, consideraremos una sola ecuación genérica

$$-D_{x,e} \frac{\partial^2 \phi_e}{\partial x^2} - D_{y,e} \frac{\partial^2 \phi_e}{\partial y^2} - D_{z,e} \frac{\partial^2 \phi_e}{\partial z^2} + \Sigma_{r,e} \phi_e = S_e(\phi_e) \quad . \quad (3.2)$$

La generalización para las ecuaciones (3.1) es sencilla.

Realizando el cambio de variables (véase Fig. 3.1)

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{dx_e} \left[x - \frac{1}{2}(x_{m-1/2} + x_{m+1/2}) \right] \quad , \\ v &= \frac{1}{dy_e} \left[y - \frac{1}{2}(y_{n-1/2} + y_{n+1/2}) \right] \quad , \\ w &= \frac{1}{dz_e} \left[z - \frac{1}{2}(z_{p-1/2} + z_{p+1/2}) \right] \quad , \end{aligned} \quad (3.3)$$

la ecuación (3.2) se puede expresar en la forma

$$-\frac{dy_e dz_e}{dx_e} D_{x,e} \frac{\partial^2 \phi_e}{\partial u^2} - \frac{dx_e dz_e}{dy_e} D_{y,e} \frac{\partial^2 \phi_e}{\partial v^2} - \frac{dx_e dy_e}{dz_e} D_{z,e} \frac{\partial^2 \phi_e}{\partial w^2} + \Sigma_{r,e} V_e \phi_e = V_e S_e \quad (3.4)$$

donde $V_e = dx_e dy_e dz_e$, es el volumen del nodo e considerado.

Como función de prueba para la solución en cada elemento e , se utiliza el desarrollo truncado

$$\phi_e(u, v, w) = \sum_{k_1=0}^K \sum_{k_2=0}^K \sum_{k_3=0}^K \phi_e^{k_1, k_2, k_3} P_{k_1}(u) P_{k_2}(v) P_{k_3}(w) \quad , \quad (3.5)$$

y para la fuente S_e , se toma

$$S_e(u, v, w) = \sum_{k_1=0}^K \sum_{k_2=0}^K \sum_{k_3=0}^K S_e^{k_1, k_2, k_3} P_{k_1}(u) P_{k_2}(v) P_{k_3}(w) \quad , \quad (3.6)$$

donde K es el orden del desarrollo elegido y $P_k(u)$ son los polinomios de Legendre ortonormales en el intervalo $[-1/2, 1/2]$, o sea, polinomios de Legendre que satisfacen la relación

$$\int_{-1/2}^{1/2} P_n(u) P_m(u) du = \delta_{n,m} \quad . \quad (3.7)$$

Estos polinomios son diferentes de los que se utilizan normalmente (polinomios ortogonales en el intervalo $[-1, 1]$), ya que son *ortonormales* y su dominio de definición es $[-1/2, 1/2]$. Ello es debido al cambio de variables (3.3) realizado para disponer de elementos cuyo volumen sea la unidad.

Así pues, utilizaremos los polinomios de Legendre, $P_l(u)$, definidos por [36]

$$P_0(u) = 1 \quad , \quad P_1(u) = 2\sqrt{3}u \quad , \quad (3.8)$$

y la relación de recurrencia

$$P_{k+1}(u) = 2\sqrt{\frac{2k+3}{2k+1}} \frac{2k+1}{k+1} u P_k(u) - \sqrt{\frac{2k+3}{2k-1}} \frac{k}{k+1} P_{k-1}(u) \quad , \quad k \geq 1 \quad . \quad (3.9)$$

Para estos polinomios se satisfacen las igualdades

$$P_n(1/2) = \sqrt{2n+1} \quad , \quad P_n(-1/2) = (-1)^n \sqrt{2n+1} \quad , \quad (3.10)$$

y

$$P'_n(1/2) = n(n+1)\sqrt{2n+1} \quad , \quad P'_n(-1/2) = (-1)^{n+1}n(n+1)\sqrt{2n+1} \quad . \quad (3.11)$$

Utilizando la integración por partes, las igualdades (3.10) y (3.11), y realizando un desarrollo de $f(u)$ en polinomios de Legendre, $f(u) = \sum_{l=0}^{\infty} F_l P_l(u)$, se obtiene el resultado

$$\begin{aligned} \int_{-1/2}^{1/2} du P_k(u) \frac{d^2}{du^2} f(u) &= \sqrt{2k+1} \left\{ (-1)^{k+1} \left[k(k+1)f(-1/2) + \frac{d}{du}f(-1/2) \right] \right. \\ &\quad - \left[k(k+1)f(1/2) - \frac{d}{du}f(1/2) \right] \\ &\quad \left. + \sum_{l=0}^{K-2} [1 + (-1)^{k+l}] \sqrt{2l+1} [k(k+1) - l(l+1)] F_l \right\} \quad (3.12) \end{aligned}$$

Introduciendo las expresiones (3.5) y (3.6) en la ecuación (3.4), multiplicando esta ecuación por la función de ponderación

$$W_{k_1, k_2, k_3}(u, v, w) = P_{k_1}(u) P_{k_2}(v) P_{k_3}(w) \quad ,$$

integrando sobre todo el volumen del elemento e y utilizando la relación de ortonormalidad (3.7), obtenemos la ecuación

$$-dy_e dz_e F_{e,x}^{k_1, k_2, k_3} - dx_e dz_e F_{e,y}^{k_1, k_2, k_3} - dx_e dy_e F_{e,z}^{k_1, k_2, k_3} + V_e \sum_{r \in e} \phi_e^{k_1, k_2, k_3} = V_e S_e^{k_1, k_2, k_3} \quad , \quad (3.13)$$

donde

$$\begin{aligned} F_{e,x}^{k_1, k_2, k_3} &= \frac{D_{x,e}}{dx_e} L_{k_1} \{ \phi_{e,x}^{k_2, k_3}(u) \} \quad , \\ F_{e,y}^{k_1, k_2, k_3} &= \frac{D_{y,e}}{dy_e} L_{k_2} \{ \phi_{e,y}^{k_1, k_3}(v) \} \quad , \\ F_{e,z}^{k_1, k_2, k_3} &= \frac{D_{z,e}}{dz_e} L_{k_3} \{ \phi_{e,z}^{k_1, k_2}(w) \} \quad , \end{aligned}$$

las funciones $\phi_{e,x}^{k_2, k_3}(u)$, $\phi_{e,y}^{k_1, k_3}(v)$, $\phi_{e,z}^{k_1, k_2}(w)$, son, respectivamente,

$$\phi_{e,x}^{k_2, k_3}(u) = \sum_{k=0}^K \phi_e^{k, k_2, k_3} P_k(u) \quad ,$$

$$\phi_{e,y}^{k_1,k_3}(v) = \sum_{k=0}^K \phi_e^{k_1,k,k_3} P_k(v) \quad ,$$

$$\phi_{e,z}^{k_1,k_2}(w) = \sum_{k=0}^K \phi_e^{k_1,k_2,k} P_k(w) \quad ,$$

y

$$L_k(f(u)) = \int_{-1/2}^{1/2} du P_k(u) \frac{d^2}{du^2} f(u) \quad .$$

Impondremos ahora, las condiciones de continuidad en las seis celdas vecinas a la celda e . Para ello, numeramos estos nodos de e_1 a e_6 , de la forma

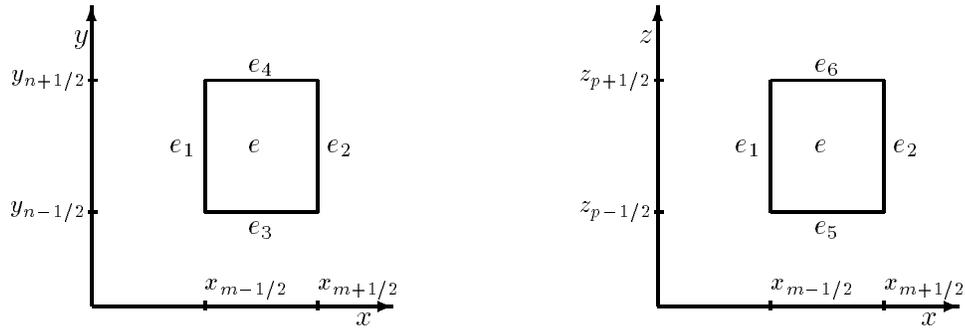


Fig. 3.1.- Posición de los nodos adyacentes al nodo e .

Si, por ejemplo, consideramos la frontera común entre los nodos e y e_1 , las condiciones de continuidad para el flujo y la corriente sobre la cara común de estas celdas, son, respectivamente,

$$\phi_{e_1}\left(\frac{1}{2}, v, w\right) = \phi_e\left(-\frac{1}{2}, v, w\right) \quad ,$$

$$\frac{D_{x,e_1}}{dx_{e_1}} \frac{\partial}{\partial u} \phi_{e_1}\left(\frac{1}{2}, v, w\right) = \frac{D_{x,e}}{dx_e} \frac{\partial}{\partial u} \phi_e\left(-\frac{1}{2}, v, w\right) \quad .$$

Multiplicando estas igualdades por la función de ponderación $W_{k_2,k_3} = P_{k_2}(v)P_{k_3}(w)$ e integrando sobre la superficie común, obtenemos

$$\phi_{e_1,x}^{k_2,k_3}\left(\frac{1}{2}\right) = \phi_{e,x}^{k_2,k_3}\left(-\frac{1}{2}\right) \quad ,$$

$$\frac{D_{x,e_1}}{dx_{e_1}} \frac{d}{du} \phi_{e_1,x}^{k_2,k_3}\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{D_{x,e}}{dx_e} \frac{d}{du} \phi_{e,x}^{k_2,k_3}\left(-\frac{1}{2}\right) \quad . \quad (3.14)$$

Condiciones similares pueden obtenerse para las otras caras del elemento e .

Utilizando el resultado (3.12) y las igualdades (3.10) y (3.11), se pueden obtener los resultados

$$\phi_{e,x}^{k_2,k_3}\left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{K(K+1)} \frac{d}{du} \phi_{e,x}^{k_2,k_3}\left(-\frac{1}{2}\right) = \sum_{l=0}^{K-1} (-1)^l \sqrt{2l+1} \left(1 - \frac{l(l+1)}{K(K+1)}\right) \phi_e^{l,k_2,k_3} \quad , \quad (3.15)$$

$$\phi_{e,x}^{k_2,k_3}\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{K(K+1)} \frac{d}{du} \phi_{e,x}^{k_2,k_3}\left(\frac{1}{2}\right) = \sum_{l=0}^{K-1} \sqrt{2l+1} \left(1 - \frac{l(l+1)}{K(K+1)}\right) \phi_e^{l,k_2,k_3} \quad , \quad (3.16)$$

$$\phi_{e,y}^{k_1,k_3}\left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{K(K+1)} \frac{d}{dv} \phi_{e,y}^{k_1,k_3}\left(-\frac{1}{2}\right) = \sum_{l=0}^{K-1} (-1)^l \sqrt{2l+1} \left(1 - \frac{l(l+1)}{K(K+1)}\right) \phi_e^{k_1,l,k_3} \quad , \quad (3.17)$$

$$\phi_{e,y}^{k_1,k_3}\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{K(K+1)} \frac{d}{dv} \phi_{e,y}^{k_1,k_3}\left(\frac{1}{2}\right) = \sum_{l=0}^{K-1} \sqrt{2l+1} \left(1 - \frac{l(l+1)}{K(K+1)}\right) \phi_e^{k_1,l,k_3} \quad , \quad (3.18)$$

$$\phi_{e,z}^{k_1,k_2}\left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{K(K+1)} \frac{d}{dw} \phi_{e,z}^{k_1,k_2}\left(-\frac{1}{2}\right) = \sum_{l=0}^{K-1} (-1)^l \sqrt{2l+1} \left(1 - \frac{l(l+1)}{K(K+1)}\right) \phi_e^{k_1,k_2,l} \quad , \quad (3.19)$$

$$\phi_{e,z}^{k_1,k_2}\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{K(K+1)} \frac{d}{dw} \phi_{e,z}^{k_1,k_2}\left(\frac{1}{2}\right) = \sum_{l=0}^{K-1} \sqrt{2l+1} \left(1 - \frac{l(l+1)}{K(K+1)}\right) \phi_e^{k_1,k_2,l} \quad . \quad (3.20)$$

Utilizando (3.15) y las condiciones (3.14), podemos expresar

$$\frac{d}{du} \phi_{e,x}^{k_2,k_3}\left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{dx_e D_{x,\epsilon_1}}{dx_{\epsilon_1} D_{x,\epsilon} + dx_\epsilon D_{x,\epsilon_1}} \sum_{l=0}^{K-1} \sqrt{2l-1} [K(K+1) - l(l+1)] ((-1)^l \phi_e^{l,k_2,k_3} - \phi_{\epsilon_1}^{l,k_2,k_3}) \quad (3.21)$$

y combinando la ecuación (3.21) y la ecuación (3.15), obtenemos

$$\begin{aligned} & \frac{D_{x,\epsilon}}{dx_\epsilon} [k(k+1) \phi_{e,x}^{k_2,k_3}\left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{d}{du} \phi_{e,x}^{k_2,k_3}\left(-\frac{1}{2}\right)] = \\ & \frac{D_{x,\epsilon} k(k+1)}{dx_\epsilon} \sum_{l=0}^{K-1} (-1)^l \sqrt{2l+1} \left(1 - \frac{l(l+1)}{K(K+1)}\right) \phi_e^{l,k_2,k_3} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{dx_e D_{x,\epsilon_1}}{dx_{\epsilon_1} D_{x,e} + dx_e D_{x,\epsilon_1}} \left(1 - \frac{k(k+1)}{K(K+1)} \right) \times \\ & \times \sum_{l=0}^{K-1} \sqrt{2l+1} [K(K+1) - l(l+1)] ((-1)^l \phi_e^{l,k_2,k_3} - \phi_{\epsilon_1}^{l,k_2,k_3}) \quad . \quad (3.22) \end{aligned}$$

De forma totalmete análoga, se obtiene que

$$\begin{aligned} & \frac{D_{x,e}}{dx_e} \left[k(k+1) \phi_{e,x}^{k_2,k_3} \left(\frac{1}{2} \right) - \frac{d}{du} \phi_{e,x}^{k_2,k_3} \left(\frac{1}{2} \right) \right] = \\ & \frac{D_{x,e} k(k+1)}{dx_e} \sum_{l=0}^{K-1} \sqrt{2l+1} \left(1 - \frac{l(l+1)}{K(K+1)} \right) \phi_e^{l,k_2,k_3} - \\ & - \frac{dx_e D_{x,\epsilon_1}}{dx_{\epsilon_1} D_{x,e} + dx_e D_{x,\epsilon_1}} \left(1 - \frac{k(k+1)}{K(K+1)} \right) \times \\ & \times \sum_{l=0}^{K-1} \sqrt{2l+1} [K(K+1) - l(l+1)] ((-1)^l \phi_{\epsilon_2}^{l,k_2,k_3} - \phi_e^{l,k_2,k_3}) \quad . \quad (3.23) \end{aligned}$$

Utilizando los resultados (3.22) y (3.23) se obtiene que

$$\begin{aligned} F_{e,x}^{k,k_2,k_3} &= - \frac{\sqrt{2k+1}}{K(K+1)} \left\{ \frac{D_{x,e}}{dx_e} [K(K+1) - k(k+1)] \times \right. \\ & \times \sum_{l=0}^{k-2} (1 + (-1)^{k+l}) \sqrt{2l+1} l(l+1) \phi_e^{l,k_2,k_3} + \\ & + \frac{D_{x,e}}{dx_e} k(k+1) \sum_{l=k}^{K-1} (1 + (-1)^{k+l}) \sqrt{2l+1} [K(K+1) - l(l+1)] \phi_e^{l,k_2,k_3} + \\ & + [K(K+1) - k(k+1)] \sum_{l=0}^{K-1} \sqrt{2l+1} [K(K+1) - l(l+1)] \times \\ & \times \left[(-1)^k \frac{D_{x,e} D_{x,\epsilon_1}}{dx_e D_{x,\epsilon_1} + dx_{\epsilon_1} D_{x,e}} [(-1)^l \phi_e^{l,k_2,k_3} - \phi_{\epsilon_1}^{l,k_2,k_3}] - \right. \\ & \left. \left. - \frac{D_{x,e} D_{x,\epsilon_2}}{dx_e D_{x,\epsilon_2} + dx_{\epsilon_2} D_{x,e}} [(-1)^l \phi_{\epsilon_2}^{l,k_2,k_3} - \phi_e^{l,k_2,k_3}] \right] \right\} \quad . \quad (3.24) \end{aligned}$$

Esta expresión es invariante si se permutan los índices k y l , lo que asegura que las matrices generadas mediante este método para una sola ecuación sean simétricas.

Del mismo modo que se ha obtenido la relación (3.24) para $F_{e,x}^{k,k_2,k_3}$, se obtienen expresiones similares para $F_{e,y}^{k_1,k,k_3}$ y $F_{e,z}^{k_1,k_2,k}$, que se pueden reescribir de la forma

$$\begin{aligned}
F_{e,x}^{k,k_2,k_3} &= \sum_{l=0}^{K-1} (A_{e,x}^{k,l;K} \phi_{\epsilon_1}^{l,k_2,k_3} - B_{e,x}^{k,l;K} \phi_e^{l,k_2,k_3} + C_{e,x}^{k,l;K} \phi_{\epsilon_2}^{l,k_2,k_3}) \quad , \\
F_{e,y}^{k_1,k,k_3} &= \sum_{l=0}^{K-1} (A_{e,y}^{k,l;K} \phi_{\epsilon_3}^{k_1,l,k_3} - B_{e,y}^{k,l;K} \phi_e^{k_1,l,k_3} + C_{e,y}^{k,l;K} \phi_{\epsilon_4}^{k_1,l,k_3}) \quad , \\
F_{e,z}^{k_1,k_2,k} &= \sum_{l=0}^{K-1} (A_{e,z}^{k,l;K} \phi_{\epsilon_5}^{k_1,k_2,l} - B_{e,z}^{k,l;K} \phi_e^{k_1,k_2,l} + C_{e,z}^{k,l;K} \phi_{\epsilon_6}^{k_1,k_2,l}) \quad , \quad (3.25)
\end{aligned}$$

con los coeficientes

$$\begin{aligned}
A_{e,\alpha}^{k,l;K} &= \frac{(-1)^k}{2K(K+1)} \sqrt{2k+1} \sqrt{2l+1} [K(K+1) - k(k+1)][K(K+1) - l(l+1)] W_{e,\alpha}^- \quad , \\
C_{e,\alpha}^{k,l;K} &= \frac{(-1)^l}{2K(K+1)} \sqrt{2k+1} \sqrt{2l+1} [K(K+1) - k(k+1)][K(K+1) - l(l+1)] W_{e,\alpha}^+ \quad , \\
B_{e,\alpha}^{k,l;K} &= \frac{\sqrt{2k+1} \sqrt{2l+1}}{K(K+1)} \left\{ \frac{D_{\alpha,e}}{d\alpha_e} [1 + (-1)^{k+l}] [K(K+1) - k(k+1)] l(l+1) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} [K(K+1) - k(k+1)][K(K+1) - l(l+1)] [(-1)^{k+l} W_{e,\alpha}^- + W_{e,\alpha}^+] \right\} \quad , \\
&\quad \text{si } l < k \quad ,
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
B_{e,\alpha}^{k,l;K} &= \frac{\sqrt{2k+1} \sqrt{2l+1}}{K(K+1)} \left\{ \frac{D_{\alpha,e}}{d\alpha_e} k(k+1) [1 + (-1)^{k+l}] [K(K+1) - l(l+1)] + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} [K(K+1) - k(k+1)][K(K+1) - l(l+1)] [(-1)^{k+l} W_{e,\alpha}^- + W_{e,\alpha}^+] \right\} \quad , \\
&\quad \text{si } l \geq k \quad ,
\end{aligned}$$

donde $\alpha = x, y, z$ y se han introducido los factores de acoplamiento de diferencias finitas centradas, que se definen como

$$\begin{aligned}
W_{e,x}^- = W_{\epsilon_1,x}^+ &= 2D_{x,e} D_{x,\epsilon_1} (dx_e D_{x,\epsilon_1} + dx_{\epsilon_1} D_{x,e})^{-1} \quad , \\
W_{e,x}^+ = W_{\epsilon_2,x}^- &= 2D_{x,e} D_{x,\epsilon_2} (dx_e D_{x,\epsilon_2} + dx_{\epsilon_2} D_{x,e})^{-1} \quad , \\
W_{e,y}^- = W_{\epsilon_3,y}^+ &= 2D_{y,e} D_{y,\epsilon_3} (dy_e D_{y,\epsilon_3} + dy_{\epsilon_3} D_{y,e})^{-1} \quad , \\
W_{e,y}^+ = W_{\epsilon_4,y}^- &= 2D_{y,e} D_{y,\epsilon_4} (dy_e D_{y,\epsilon_4} + dy_{\epsilon_4} D_{y,e})^{-1} \quad , \\
W_{e,z}^- = W_{\epsilon_5,z}^+ &= 2D_{z,e} D_{z,\epsilon_5} (dz_e D_{z,\epsilon_5} + dz_{\epsilon_5} D_{z,e})^{-1} \quad , \\
W_{e,z}^+ = W_{\epsilon_6,z}^- &= 2D_{z,e} D_{z,\epsilon_6} (dz_e D_{z,\epsilon_6} + dz_{\epsilon_6} D_{z,e})^{-1} \quad .
\end{aligned}$$

Estos coeficientes para los elementos que forman el contorno del reactor tienen la forma $W_{e,\alpha}^- = \frac{2D_{\alpha,e}}{d\alpha_e}$, si la superficie de la izquierda de e es un contorno donde se anula el flujo, y $W_{e,\alpha}^+ = \frac{2D_{\alpha,e}}{d\alpha_e}$, si la superficie de la derecha de e es un contorno de flujo cero. De forma análoga, $W_{e,\alpha}^- = 0$ si la superficie de la izquierda de e , es una superficie de contorno donde se anula la corriente, y $W_{e,\alpha}^+ = 0$, si la superficie de la derecha de e es de contorno y tiene corriente nula.

Sustituyendo las expresiones (3.25) en la ecuación de conservación (3.13) obtenemos una nueva ecuación que involucra tan sólo a los coeficientes de Legendre del flujo neutrónico, $\phi_e^{i,j,k}$. Hay que hacer notar que el número de incógnitas por elemento es K^3 , a pesar de usar $(K+1)^3$ polinomios de Legendre en la aproximación realizada.

En el método de colocación nodal, es posible introducir consistentemente la aproximación de ‘Serendipita’ [36]. Esta aproximación se aplica directamente al método reemplazando las ecuaciones (3.25) por

$$\begin{aligned}
F_{e,x}^{k,k_2,k_3} &= \sum_{l=0}^{K-1-k_2-k_3} (A_{e,x}^{k,l;K-k_2-k_3} \phi_{e1}^{l,k_2,k_3} - B_{e,x}^{k,l;K-k_2-k_3} \phi_e^{l,k_2,k_3} + C_{e,x}^{k,l;K-k_2-k_3} \phi_{e2}^{l,k_2,k_3}) , \\
F_{e,y}^{k_1,k,k_3} &= \sum_{l=0}^{K-1-k_1-k_3} (A_{e,y}^{k,l;K-k_1-k_3} \phi_{e3}^{k_1,l,k_3} - B_{e,y}^{k,l;K-k_1-k_3} \phi_e^{k_1,l,k_3} + C_{e,y}^{k,l;K-k_1-k_3} \phi_{e4}^{k_1,l,k_3}) , \\
F_{e,z}^{k_1,k_2,k} &= \sum_{l=0}^{K-1-k_1-k_2} (A_{e,z}^{k,l;K-k_1-k_2} \phi_{e5}^{k_1,k_2,l} - B_{e,z}^{k,l;K-k_1-k_2} \phi_e^{k_1,k_2,l} + C_{e,z}^{k,l;K-k_1-k_2} \phi_{e6}^{k_1,k_2,l}) ,
\end{aligned} \tag{3.26}$$

con $k_1 = 0, \dots, K-1$; $k_2 = 0, \dots, K-1-k_1$; $k_3 = 0, \dots, K-1-k_1-k_2$.

Así pues, generalizando la ecuación (3.13) para dos grupos de energía, utilizando las relaciones (3.26) y eligiendo una ordenación adecuada de los índices, a partir del sistema de ecuaciones diferenciales (3.1) se llega a un sistema algebraico de de ecuaciones lineales con la siguiente estructura a bloques

$$\begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ -L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{1n} \\ \psi_{2n} \end{bmatrix} = \frac{1}{k_n} \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{1n} \\ \psi_{2n} \end{bmatrix} , \tag{3.27}$$

donde ψ_{1n} y ψ_{2n} son vectores cuyas componentes son los coeficientes de Legendre del flujo neutrónico rápido y térmico, respectivamente con la ordenación derivada de la

elección de los índices escogida. Si se utiliza el método de colocación nodal con la aproximación de ‘serendipita’, la dimensión de estos vectores es $\frac{1}{2}K(K+1)N$ para problemas con geometría bidimensional, y $\frac{1}{6}K(K+1)(K+2)N$ para problemas con una geometría tridimensional.

El sistema (3.27) es equivalente a

$$\begin{aligned} L_{11}\psi_{1n} &= \frac{1}{k_n}(M_{11}\psi_{1n} + M_{12}\psi_{2n}) \quad , \\ -L_{21}\psi_{1n} + L_{22}\psi_{2n} &= 0 \quad , \end{aligned} \quad (3.28)$$

y eliminando ψ_2 , obtenemos el problema algebraico de valores propios [37]

$$A\psi_{1n} = k_n\psi_{1n} \quad , \quad (3.29)$$

donde la matriz A viene dada por

$$A = L_{11}^{-1}(M_{11} + M_{12}L_{22}^{-1}L_{21}) \quad . \quad (3.30)$$

3.2 Cálculo de los Modos Lambda en geometrías 1D

El método de colocación nodal que se ha expuesto en la sección precedente en general, para problemas con geometría tridimensional, es fácilmente adaptable a problemas con geometría unidimensional o bidimensional. Para comprobar la validez del método, se han calculado los autovalores del reactor de Cofrentes unidimensional presentado en el Capítulo 2.

En primer lugar, hay que tener en cuenta que en este problema la dimensión de la matriz A que se obtiene no es muy grande;¹ por lo tanto, es posible utilizar un método directo para el cálculo de los autovalores. El método expuesto se ha implementado en un programa denominado MOD1D, y para el cálculo de los autovalores se ha utilizado la rutina RG de la librería EISPACK, que permite el cálculo de autovalores de una matriz real no simétrica.

¹por ejemplo, para un reactor 1D con 30 nodos y quedándonos a orden 3 en el desarrollo de Legendre la dimensión de A es de 90

Por otra parte, hay que destacar que el número de autovalores asociado al problema de los Modos Lambda es infinito, pero el hecho de discretizar el problema mediante el método de colocación nodal nos impone un límite en el número de autovalores que es posible calcular, que, en principio, viene dado por la dimensión de la matriz A obtenida.

En la tabla siguiente, comparamos los primeros cuatro autovalores obtenidos con los programas MOD2G y MOD1D para el reactor de Cofrentes 1D, utilizando un desarrollo en polinomios de Legendre de orden 4 en este último programa.

Tabla 3.1.- Comparación de los autovalores obtenidos con MOD2G y MOD1D

	MOD2G				MOD1D			
Ciclo 5	1.005249	0.99436	0.9712	0.93504	1.005248	0.99436	0.9712	0.9350
Ciclo 6	1.04968	1.036858	1.0112626	0.975563	1.04968	1.03686	1.01127	0.9755
Ciclo 6 29 enero	1.001	0.9923329	0.968586	0.9348	1.001	0.99232	0.96859	0.9348

En las figuras siguientes se compara el perfil de potencia que se obtiene con MOD1D y MOD2G para los casos correspondientes al Ciclo 6 y al Ciclo 6 29 de enero.

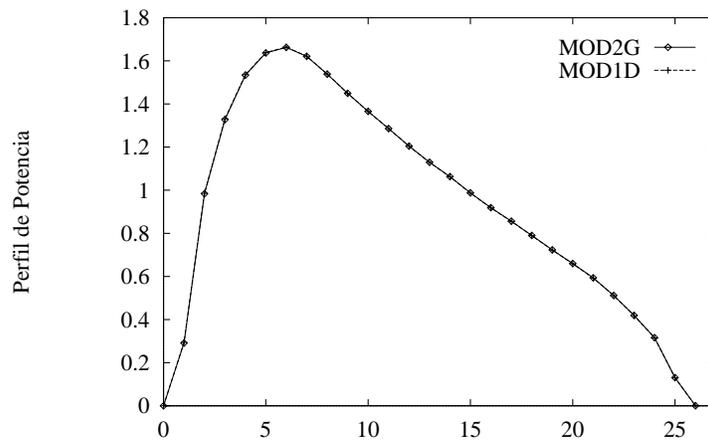


Fig. 3.2.- Perfil de potencia. Comparación MOD1D-MOD2G. Ciclo 6.

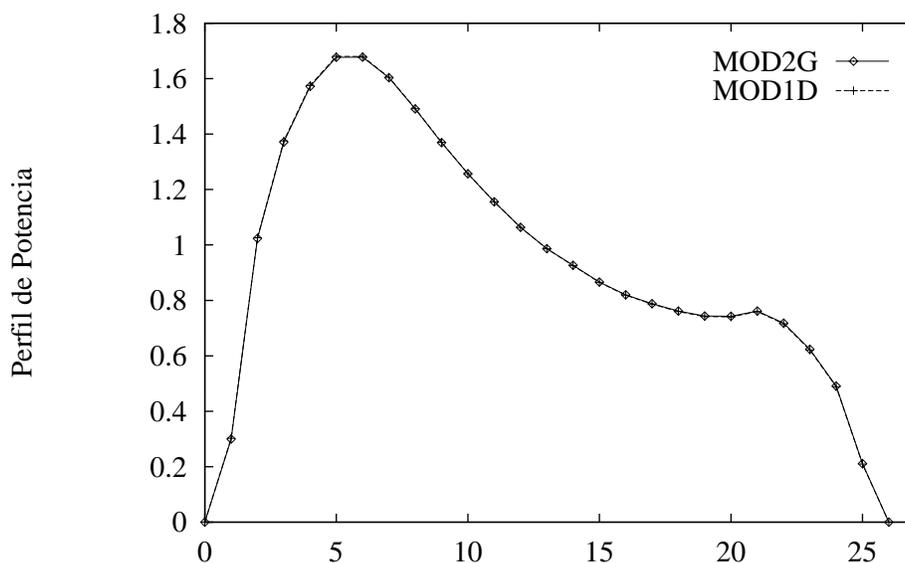


Fig. 3.3.- Perfil de potencia. Comparación MOD1D-MOD2G. Caso real.

Como se puede observar, los resultados obtenidos son prácticamente coincidentes. Hay que resaltar que el programa MOD1D es bastante más rápido que MOD2G y obtiene a la vez un número elevado de autovalores. Con MOD2G se obtiene una solución analítica para el flujo neutrónico, mientras que MOD1D nos proporciona una aproximación al flujo, debido al truncamiento en los desarrollos en polinomios de Legendre que se utilizan en el método de colocación nodal, pero a medida que aumenta el orden en el desarrollo de Legendre utilizado, los resultados obtenidos con MOD1D convergen a los que se obtienen con MOD2G, a costa de un mayor tiempo de cálculo.

Al generalizar el método de colocación para tratar problemas con geometrías más complejas, se produce un gran aumento de la dimensión de la matriz A . Así, por ejemplo, para un problema bidimensional discretizado en 10×10 nodos y escogiendo un orden 3 en el desarrollo de Legendre, se obtiene una matriz A , 600×600 . Esto hace que sea necesaria la utilización de un *método iterativo* para el cálculo de autovalores y sea conveniente aprovechar la *estructura dispersa* de las matrices L_{11} y L_{22} para su almacenamiento.

3.3 Método de Iteración del Subespacio

Como ya hemos comentado, cuando se abordan problemas con geometrías bi-dimensionales o tridimensionales la dimensión de la matriz A del problema de autovalores es muy grande y no es posible utilizar un método directo para el cálculo de los mismos. A efectos prácticos, para resolver el problema de los Modos Lambda basta con obtener los autovalores dominantes de la matriz A , o sea, los autovalores de A con mayor módulo, y sus correspondientes autovectores. Para ello, se ha optado por utilizar un método de Iteración del Subespacio que hace uso de un proceso de proyección de Rayleigh-Ritz para mejorar su convergencia [37], [40], [41]. La idea básica de este método consiste en repetir reiteradamente multiplicaciones de la matriz A por p vectores independientes, generando de este modo una sucesión de subespacios p -dimensionales que convergen al subespacio p -dimensional generado por los p -vectores propios ψ_1, \dots, ψ_p , asociados a los p valores propios dominantes de la matriz A .

Dada la matriz A , sus p valores propios dominantes y sus correspondientes autovectores, el problema (3.29) puede reescribirse de la forma

$$A\Psi = \Psi\Lambda \quad , \quad (3.31)$$

donde $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p)$ es una matriz diagonal cuyos elementos son los p autovalores dominantes de A y $\Psi = (\psi_1, \dots, \psi_p)$ otra matriz cuyas columnas son los correspondientes autovectores.

Los pasos a seguir para resolver (3.31) mediante el método de Iteración del Subespacio que se ha utilizado son los siguientes:

1. X^1 . Se eligen p vectores linealmente independientes para construir una base del subespacio inicial que constituyen las columnas de la matriz X^1 , de dimensión $\mathcal{N} \times p$, donde \mathcal{N} es la dimensión de la matriz A . En la implementación del algoritmo que hemos realizado, la elección de los p vectores se puede realizar, bien por conocimiento de casos previos de p vectores linealmente independientes que aproximen el subespacio generado por los vectores propios de A , o bien se generan utilizando números aleatorios del intervalo $[-1, 1]$. Una vez generados los p vectores, éstos se ortonormalizan utilizando el algoritmo de Gram-Schmidt modificado [42].

2. $Z^2 = AX^1$.

3. $\hat{A}^{k+1} = (Z^{k+1})^T Z^{k+1} = X^{kT} A^T A X^k$, ($k = 1, 2, \dots$). Este paso constituye la proyección de Rayleigh-Ritz, y se ha de destacar que la matriz \hat{A}^{k+1} obtenida es simétrica y de pequeña dimensión, p .

4. Resolución del problema de valores propios simétrico p -dimensional

$$\hat{A}^{k+1} Q^{k+1} = Q^{k+1} (\Delta^{k+1})^2 \quad ,$$

con $(\Delta^{k+1})^2 = \text{diag}(\delta_1^2, \dots, \delta_p^2)^{k+1}$, donde $(\delta_i^2)^{k+1}$ son los valores propios de \hat{A}^{k+1} . La matriz de vectores propios obtenida, Q^{k+1} , ha de ser unitaria ($(Q^{k+1})^T Q^{k+1} = I_p$).

Se construye la matriz

$$T^{k+1} = Q^{k+1} (\Delta^{k+1})^{-1} \quad .$$

5. $X^{k+1} = Z^{k+1} T^{k+1}$.

Los vectores que constituyen X^{k+1} forman un conjunto ortonormal de vectores, ya que

$$\begin{aligned} X^{k+1T} X^{k+1} &= (Z^{k+1} Q^{k+1} (\Delta^{k+1})^{-1})^T (Z^{k+1} Q^{k+1} (\Delta^{k+1})^{-1}) = \\ &= ((\Delta^{k+1})^{-1})^T Q^{k+1T} Z^{k+1T} Z^{k+1} Q^{k+1} (\Delta^{k+1})^{-1} = \\ &= ((\Delta^{k+1})^{-1})^T Q^{k+1T} \hat{A}^{k+1} Q^{k+1} (\Delta^{k+1})^{-1} = I_p \quad . \end{aligned}$$

6. Se calcula

$$Z^{k+1} = AX^k \quad ,$$

y se comprueba el criterio de parada, que consiste en ver si se satisface la relación

$$\frac{\| Z^{k+1} - X^k \Delta^{k+1} \|_1}{\| Z^{k+1} \|_1} < \text{Eps1} \quad ,$$

donde la norma matricial $\| \cdot \|_1$ se define, para una matriz M de dimensión $n \times m$, cuyas componentes son m_{ij} , como

$$\| M \|_1 = \max_{j=1, \dots, m} \sum_{i=1}^n | m_{ij} | \quad ,$$

y la tolerancia Eps1 se elige normalmente como 10^{-4} .

Hay que hacer notar que para construir Δ^{k+1} se toma la parte positiva de la raíz cuadrada de los autovalores de $(\Delta^{k+1})^2$, debido a que, por razones de tipo físico, se puede asegurar que los autovalores de la matriz A son positivos.

En caso de no satisfacerse este criterio de parada, se hace $k = k + 1$ y se vuelve al paso **3** del algoritmo.

Debido a la estructura y dimensión de nuestro problema, el cálculo explícito de la matriz A invirtiendo los bloques L_{11} y L_{22} es prohibitivo por el gran coste computacional y de almacenamiento que supone. Por tanto, el cálculo del paso **6** del algoritmo se realiza mediante el siguiente proceso

I. Se halla $Y^k = L_{21}X^k$.

II. Se resuelven simultáneamente los p sistemas de ecuaciones lineales

$$L_{22}W^k = Y^k \quad .$$

III. Se forma $S^k = M_{11}X^k + M_{12}W^k$

IV. Se obtiene Z^{k+1} resolviendo simultáneamente los p sistemas lineales

$$L_{11}Z^{k+1} = S^k \quad .$$

Este proceso evita construir explícitamente la matriz A y hace uso de resolución de sistemas, multiplicación matriz-vector y suma de vectores. Las matrices L_{11} y L_{22} tienen una estructura dispersa, y ello posibilita que estas operaciones se realicen aprovechando esta propiedad. La resolución de los sistemas se lleva a cabo utilizando un método iterativo, ya que la utilización de un método directo produciría un relleno de la matriz que haría imposible su almacenamiento en la memoria del ordenador. En concreto se ha utilizado el método del gradiente conjugado que se encuentra implementado en la librería ITPACK². Con esta rutina es posible explotar la estructura dispersa y la simetría de las matrices L_{11} y L_{22} .

²Tanto la librería EISPACK como la librería ITPACK forman parte de una colección de librerías de subrutinas escritas en FORTRAN, denominada NETLIB.

La solución del algoritmo expuesto es una matriz X formada por p vectores que generan un subespacio que constituye una aproximación al subespacio que generan los p vectores propios dominantes de la matriz A [37]. Aunque existe esta relación entre los subespacios, las columnas de X no son directamente los autovectores asociados a los autovalores dominantes de A , $\Psi = (\psi_1, \dots, \psi_p)$. Sin embargo, si $X = (x_1, \dots, x_p)$ se puede establecer una relación entre Ψ y X de la siguiente manera

$$\Psi = XU \quad ,$$

donde la matriz U contiene los coeficientes de las p combinaciones lineales que ligan los ψ_i con los x_j . Esta matriz se puede calcular haciendo uso de la ecuación (3.31)

$$A\Psi = AXU = XU\Lambda \quad . \quad (3.32)$$

Multiplicando por la izquierda la ecuación (3.32) por la matriz X^T , obtenemos

$$X^T AXU = U\Lambda \quad ,$$

ya que los vectores que forman la matriz X son una base ortonormal.

Si definimos $\hat{B} = X^T AX$, se obtiene el problema de autovalores p dimensional

$$\hat{B}U = U\Lambda \quad . \quad (3.33)$$

La matriz \hat{B} es no simétrica y el problema de autovalores se ha de resolver completamente para obtener la matriz de transformación U . Como el número de p de autovalores dominantes a calcular generalmente es pequeño, la resolución tanto de este problema como del problema de autovalores del paso 4 del algoritmo se pueden realizar de la forma usual. En la implementación realizada del algoritmo, para resolver estos problemas se ha utilizado la rutina RG de la librería EISPACK.

De este modo, para la determinación de los vectores propios asociados a los valores propios dominantes se realizan los siguientes pasos del algoritmo

7. Se calcula $Z = AX$.
8. Posteriormente, se obtiene $\hat{B} = X^T Z$.

9. Se resuelve el problema de autovalores no-simétrico p -dimensional

$$\hat{B}U = U\Lambda \quad ,$$

con lo que se obtiene la matriz U .

10. Con esta matriz, se obtienen los vectores propios mediante el cálculo de

$$\Psi = XU \quad .$$

11. Una vez obtenidos estos autovectores, se tiene que los autovectores asociados al flujo rápido satisfacen $\Psi_1 = \Psi$, y los autovectores asociados al flujo térmico se obtienen resolviendo simultáneamente los p sistemas de ecuaciones

$$L_{22}\Psi_2 = L_{21}\Psi_1 \quad .$$

Utilizando el método de colocación nodal es posible discretizar el problema adjunto al problema de los Modos Lambda y llegar al problema de autovalores adjunto siguiente

$$\begin{bmatrix} L_{11}^T & -L_{21}^T \\ 0 & L_{22}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \end{bmatrix} = \frac{1}{k} \begin{bmatrix} M_{11}^T & 0 \\ M_{12}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \end{bmatrix} \quad , \quad (3.34)$$

donde ψ_1^* y ψ_2^* son vectores cuyas componentes son los coeficientes de Legendre de los flujos adjuntos rápido y térmico, respectivamente.

De la segunda fila de la ecuación (3.34) se obtiene la relación

$$\psi_2^* = \frac{1}{k} L_{22}^{T-1} M_{12}^T \psi_1^* \quad ,$$

y sustituyendo esta expresión en la primera fila, se llega a

$$0 = L_{11}^T \psi_1^* - \frac{1}{k} L_{21}^T L_{22}^{T-1} M_{12}^T \psi_1^* - \frac{1}{k} M_{11}^T \psi_1^* \quad ,$$

y por tanto

$$L_{11}^{T-1} (M_{11}^T + L_{21}^T L_{22}^{T-1} M_{12}^T) \psi_1^* = k \psi_1^* \quad . \quad (3.35)$$

Si se traspone la matriz A de la ecuación (3.29) se obtiene que los autovalores ψ' de A^T satisfacen una relación de la forma

$$(M_{11}^T + L_{21}^T L_{22}^{-1T} M_{12}^T) L_{11}^{-1T} \psi' = k \psi' \quad .$$

Comparando con la ecuación (3.35), obtenemos que la relación entre los autovectores ψ' de A^T y los autovectores ψ_1^* del problema adjunto es

$$\psi_1^* = L_{11}^T{}^{-1} \psi' \quad .$$

Por otra parte, como los autovectores de A , ψ_i , y los autovectores de A^T , ψ'_i , forman un sistema biortogonal completo [37], se tiene que cada uno de los autovectores dominantes de A^T es ortogonal a los autovectores ψ_j , ($j = p + 1, \dots, \mathcal{N}$). Por lo tanto, ψ'_i , ($i = 1, \dots, p$) han de estar necesariamente contenidos en el subespacio generado por los vectores (ψ_1, \dots, ψ_p) . Por ello, se puede suponer que

$$\Psi' = XU' \quad ,$$

y de forma similar a como se ha hecho anteriormente, obtener U' resolviendo el problema de autovalores

$$\hat{B}^T U' = U' \Lambda \quad .$$

Así pues, para resolver el problema adjunto, el algoritmo sigue realizando los pasos siguientes:

12. Se resuelve el problema de valores propios no simétrico p -dimensional

$$\hat{B}^T U' = U' \Lambda \quad .$$

13. Se calculan los vectores propios de A^T

$$\Psi' = XU' \quad .$$

14. Se resuelven los p sistemas

$$L_{11}^T \Psi_1^* = L_{11} \Psi_1^* = \Psi' \quad ,$$

15. y los sistemas

$$L_{22}^T \psi_{2i}^* = L_{22} \psi_{2i}^* = \frac{1}{k_i} M_{12}^T \psi_{1i}^* \quad , \quad \text{con } i = 1, \dots, p \quad .$$

Tanto en este paso como en el anterior, se hace uso de que L_{11} y L_{22} son matrices simétricas.

3.4 Técnica de Aceleración Variacional

El método de Iteración del Subespacio desarrollado anteriormente, necesita realizar muchas iteraciones para obtener una solución precisa. Por ello, se ha utilizado una estrategia de aceleración que permite reducir el coste computacional del método.

La técnica de aceleración que usualmente se utiliza para el cálculo del modo fundamental se basa en el uso de polinomios de Chebyshev. En [43], [41], se presenta una generalización de estas técnicas para el método de Iteración del Subespacio. Por otra parte, en [44], se expone una técnica alternativa, denominada técnica de Aceleración Variacional, que se aplica al método de la potencia inversa. A continuación, desarrollaremos una variación de esta técnica para adaptarla al método de Iteración del Subespacio, de forma que se pueda utilizar para acelerar el proceso de cálculo de un problema de autovalores de la forma

$$AX = XK \quad ,$$

donde A es una matriz no simétrica de dimensión \mathcal{N} , K es una matriz diagonal de dimensión p cuyos elementos son los autovalores dominantes de A y X es la matriz que tiene por columnas los autovectores asociados a los autovalores de A .

La técnica de aceleración se basa en iteraciones de la forma

$$X^{k+1} = X^k + \{G^k + H^k \beta^k\} \alpha^k \quad , \quad (3.36)$$

donde $H^k = X^k - X^{k-1}$, X^{k+1} , X^k son dos aproximaciones sucesivas de la matriz X . α^k y γ^k son matrices cuadradas diagonales de dimensión p , y G^k es una matriz $\mathcal{N} \times p$, cuyas columnas vienen dadas por

$$g_i^k = \frac{Ax_i^k}{x_i^{kT} Ax_i^k} - x_i^k; \quad i = 1, \dots, p \quad .$$

La ecuación (3.36) puede ser expresada en forma vectorial, identificando vectores columna, como

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \alpha_{ii}^k g_i^k + \gamma_{ii}^k h_i^k, \quad i = 1, \dots, p \quad . \quad (3.37)$$

La ecuación asociada al autovalor i -ésimo se puede expresar de la forma

$$Ax_i - k_i x_i = 0 \quad . \quad (3.38)$$

Simetrizamos esta ecuación multiplicándola por su traspuesta y obtenemos la ecuación para el autovalor k_i siguiente

$$k_i^2 x_i^T x_i - 2k_i x_i^T A x_i + x_i^T A^T A x_i = 0 \quad .$$

Resolviendo esta ecuación de segundo grado llegamos a que

$$k_i = \frac{x_i^T A x_i}{x_i^T x_i} \pm i \left(\frac{x_i^T A^T A x_i}{x_i^T x_i} - \left[\frac{x_i^T A^T x_i}{x_i^T x_i} \right]^2 \right) \quad . \quad (3.39)$$

Como se sabe que los autovalores k_i han de ser reales, se calcularán los factores de extrapolación α_{ii}^k y γ_{ii}^k imponiendo que éstos sean tales que minimicen las expresiones

$$\frac{\langle A x_i^{k+1}, A x_i^{k+1} \rangle}{\langle x_i^{k+1}, x_i^{k+1} \rangle} - \left[\frac{\langle A x_i^{k+1}, x_i^{k+1} \rangle}{\langle x_i^{k+1}, x_i^{k+1} \rangle} \right]^2 ; \quad i = 1, \dots, p, \quad (3.40)$$

donde el producto escalar de dos vectores x_1 y x_2 se denota como $\langle x_1, x_2 \rangle = x_1^T x_2$. Por tanto, estos factores deben satisfacer las relaciones

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\alpha_{ii}^k} \left\{ \langle A x_i^{k+1}, A x_i^{k+1} \rangle \langle x_i^{k+1}, x_i^{k+1} \rangle - \langle A x_i^{k+1}, x_i^{k+1} \rangle^2 \right\} &= 0 \quad , \\ \frac{d}{d\gamma_{ii}^k} \left\{ \langle A x_i^{k+1}, A x_i^{k+1} \rangle \langle x_i^{k+1}, x_i^{k+1} \rangle - \langle A x_i^{k+1}, x_i^{k+1} \rangle^2 \right\} &= 0 \quad . \end{aligned} \quad i = 1, \dots, p$$

Se tiene pues, un sistema de $2p$ ecuaciones no lineales de la forma

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_i^{k+1} \frac{d\mathcal{Y}_i^{k+1}}{d\alpha_{ii}^k} + \frac{d\mathcal{X}_i^{k+1}}{d\alpha_{ii}^k} \mathcal{Y}_i^{k+1} &= 2 \frac{d\mathcal{Z}_i^{k+1}}{d\alpha_{ii}^k} \quad , \\ \mathcal{X}_i^{k+1} \frac{d\mathcal{Y}_i^{k+1}}{d\gamma_{ii}^k} + \frac{d\mathcal{X}_i^{k+1}}{d\gamma_{ii}^k} \mathcal{Y}_i^{k+1} &= 2 \frac{d\mathcal{Z}_i^{k+1}}{d\gamma_{ii}^k} \quad , \end{aligned} \quad ; \quad i = 1, \dots, p \quad (3.41)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_i^{k+1} &= \langle A x_i^{k+1}, A x_i^{k+1} \rangle \quad , \\ \mathcal{Y}_i^{k+1} &= \langle x_i^{k+1}, x_i^{k+1} \rangle \quad , \\ \mathcal{Z}_i^{k+1} &= \langle A x_i^{k+1}, x_i^{k+1} \rangle \quad , \end{aligned}$$

y las incógnitas son α_{ii}^k y γ_{ii}^k , $i = 1, \dots, p$.

Este sistema puede resolverse eficientemente, utilizando el método de Newton-Raphson. Con vistas a optimizar el proceso, el cálculo de la matriz inversa de

la matriz jacobiana del sistema se ha realizado analíticamente. De esta forma, y tomando como soluciones iniciales estimadas $\alpha_{ii}^k = 1$ y $\gamma_{ii}^k = 0$, generalmente, dos o tres iteraciones son suficientes para obtener una solución para estos parámetros de extrapolación.

De este modo, el algoritmo utilizado para acelerar la convergencia del método de Iteración del subespacio se estructura en los siguientes pasos

1. Dadas X^k y X^{k-1} , soluciones consecutivas del método de Iteración del subespacio, se calculan

$$H^k = X^k - X^{k-1} \quad ,$$

y las columnas de G^k , mediante las operaciones

- i) $y^k = Ax_i^k, i = 1, \dots, p.$

- ii) $z^k = x_i^{kT} y^k,$

- iii) $g_i^k = \frac{y^k}{z^k} - x_i^k.$

2. Se determinan las matrices de extrapolación α^k y γ^k , resolviendo, mediante el método de Newton-Raphson, las ecuaciones (3.41).

3. Conocidas α^k y γ^k , se construye

$$X^{k+1} = X^k + G^k \alpha^k + H^k \gamma^k \quad .$$

4. Se comprueba si k es mayor que un número máximo de iteraciones de aceleración que se ha prefijado anteriormente. Si éste no es el caso, se vuelve al paso **1**.

Estas iteraciones de aceleración se alternan con un número dado de iteraciones del método del Subespacio. El número óptimo de iteraciones de un tipo y del otro que se han de alternar para resolver el problema, depende del caso concreto que se esté tratando de resolver; no obstante, en los casos estudiados ha funcionado bien una alternancia de cinco iteraciones del método del subespacio con una iteración de aceleración. De este modo, cada iteración ‘variacional’ modifica el subespacio original, introduciendo nuevos vectores que reconducen la solución del problema.

Por último, hay que señalar que cada vez que se terminan las iteraciones del método de aceleración, es necesario ortonormalizar los vectores de la matrix X^{k+1} resultante, para que no se pierda la independencia lineal de sus columnas y, de este modo, pueda utilizarse la matriz X resultante como una solución inicial del Método de Iteración del Subespacio.

3.5 Resultados Numéricos

El algoritmo desarrollado ha sido implementado en un programa escrito en FORTRAN, y se le ha denominado MOD2D o MOD3D, según la geometría del problema.

Para comprobar el funcionamiento del método, en primer lugar se estudiará el modo fundamental de los modelos bidimensionales de reactores IAEA y BIBLIS, que ya se han estudiado en el Capítulo 2. Posteriormente, se calcularán los modos fundamentales del reactor de Cofrentes y del reactor propuesto por Langenbuch, que son reactores en geometría 3D. A continuación, se estudiarán los modos subcríticos de estos reactores, finalizando con la exposición de los resultados obtenidos al aplicar el método al reactor de Ringhals.

3.5.1 Resultados numéricos en geometría 2D. Modo fundamental

En las Tablas 3.2 y 3.3 se exponen los resultados numéricos obtenidos con el método de colocación nodal para el cálculo del modo fundamental en los problemas 'benchmark' IAEA y BIBLIS.

Tabla 3.2.- Resultados para el reactor IAEA con MOD2D.

Orden del polinomio	Número de incógnitas	Número de elem. no nulos	$k_{eff}^a)$	ε_{\max}	$\bar{\varepsilon}$	Tiempo CPU	Iteraciones ext./acel.
2	207	945	1.02862	13.8	3.5	0.3 s	5
3	414	2646	1.02928	4.21	1	0.7 s	5
4	690	5670	1.02947	1.1	0.3	1.6 s	5
5	1035	10395	1.0295	0.9	0.2	6.7 s	5

a) La solución de referencia se ha obtenido mediante cálculos analíticos nodales, con 1485 incógnitas por grupo de energía. El correspondiente factor de multiplicación efectivo es $k_{eff} = 1.029585$.

Tabla 3.3.- Resultados para el reactor BIBLIS con MOD2D.

Orden del polinomio	Número de incógnitas	Número de elem. no nulos	$k_{eff}^a)$	ε_{\max}	$\bar{\varepsilon}$	Tiempo CPU	Iteraciones ext./acel.
2	219	1005	1.02507	3	0.7	0.4 s	5
3	438	2814	1.02505	2.4	0.5	0.8 s	5
4	730	6030	1.02505	0.76	0.2	1.6 s	5
5	1095	11155	1.0251	0.4	0.1	5 s	5

a) La solución de referencia ha sido obtenida mediante cálculos analíticos modales con 1581 incógnitas por grupo de energía. El factor correspondiente de multiplicación efectivo es $k_{eff} = 1.025105$.

Los distintos cálculos se han realizado variando el número de polinomios de Legendre utilizado en los desarrollos del método de colocación nodal. En las tablas se han recogido, para cada caso, la dimensión y el número de elementos no nulos de la matriz del problema, así como el autovalor obtenido para el modo fundamental, k_{eff} . También queda reflejado el error máximo y medio para la distribución de potencia, que han sido calculados mediante las expresiones

$$\varepsilon_{\max} = \max_i \left\{ \frac{|P_i - P_i^*|}{P_i^*} \right\} \quad \text{y} \quad \bar{\varepsilon} = \frac{1}{V_{\text{núcleo}}} \sum_i \left\{ \frac{|P_i - P_i^*|}{P_i^*} \right\} V_i \quad ,$$

donde P_i y P_i^* son la potencia de referencia y la potencia obtenida con el método en cada nodo respectivamente, y V_i es el volumen del nodo.

En todos los casos se han alternado cinco iteraciones del método de Iteración del Subespacio con una iteración de aceleración. También se refleja el tiempo de CPU necesario para resolver el problema en un ordenador HP9000/735.

Como se observa, a medida que aumentamos el orden del desarrollo en polinomios de la solución, el método proporciona una solución con mayor precisión, a costa de un coste computacional mayor. Por otra parte, como ocurría con el método basado en la aproximación analítica presentado en el Capítulo anterior, los resultados del problema IAEA tienen un error mayor que los del problema BIBLIS, y ello es debido, como ya se ha comentado, a que el primer problema presenta un mayor grado de heterogeneidad en los materiales.

Estos resultados revelan que el método de colocación nodal es bastante fiable y seguro, confirmando además la rápida convergencia de los métodos utilizados y la estabilidad del algoritmo implementado.

3.5.2 Resultados numéricos en geometría 3D. Modo fundamental

En geometría 3D, se han estudiado el reactor de la Central Nuclear de Cofrentes en una situación correspondiente al comienzo del ciclo 6 del quemado de combustible, y el reactor de Langenbuch [45]. El primer caso nos servirá para comprobar la validez del método para problemas tridimensionales, y el segundo, por ser un problema clásico y sencillo, para estudiar el comportamiento del programa MOD3D.

En la tabla 3.4 se exponen los resultados obtenidos en el cálculo del modo fundamental del reactor nuclear de Cofrentes al comienzo del ciclo 6, sin las barras de control insertadas.

Tabla 3.4.- Cálculos de COFRENTES

Orden del polinomio	Número de elementos nodales	Número de incógnitas	Número de elementos no nulos	$k_{eff}^a)$	Tiempo CPU
2	4995	19980	118905	1.0498	119 s
3	4995	41950	404675	1.05	240 s

a) El valor de referencia del factor de multiplicación efectivo, $k_{eff} = 1.04968$, ha sido obtenido mediante el SIMULATE 3.

En la figura siguiente, comparamos los perfiles axiales de potencia obtenidos con MOD2G y SIMULATE utilizando 2 y 3 polinomios de Legendre en el método de colocación

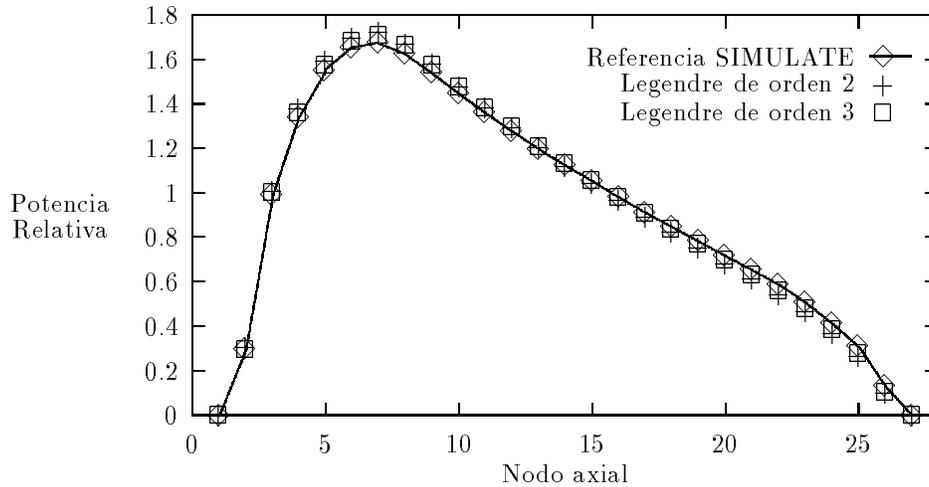


Fig. 3.4.- Comparación del perfil de potencia entre SIMULATE y MOD3D.

A continuación, se estudia el modo fundamental del reactor de Langenbuch [45], [46]. Este problema corresponde a un pequeño reactor de agua ligera (LWR) con dos tipos de materiales. Se han estudiado dos discretizaciones del mismo, una discretización fina con nodos de 10 cm.×10cm.×10cm., y una discretización gruesa en donde se han considerado nodos de 20 cm.×20cm.×20cm..

El reactor tiene simetría 1/4 y la disposición de los materiales en su interior se muestra en las figuras siguientes

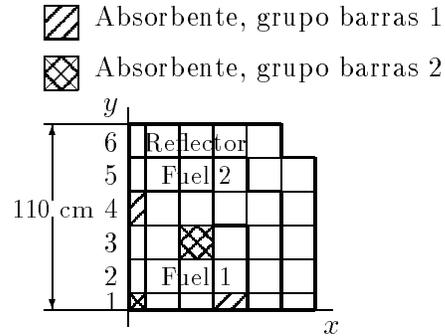


Fig. 3.5.a.- Sección transversal del reactor de Langenbuch

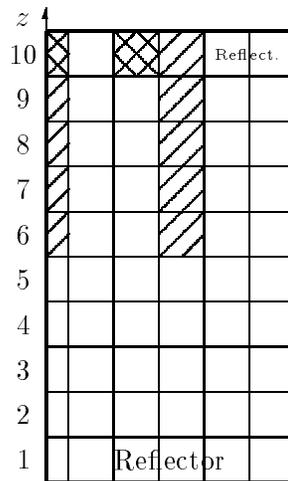


Fig. 3.5.b.- Sección axial del Reactor de Langenbuch

Las secciones eficaces correspondientes a los distintos materiales del reactor vienen dadas en la tabla 3.5

Tabla 3.5.- Secciones eficaces para el Reactor de Langenbuch

Región	Grupo	$D_g(\text{cm})$	$\Sigma_{ag}(\text{cm}^{-1})$	$\nu\Sigma_{fg}$	Σ_{12}
Combustible 1	1	1.423913	0.01040206	0.006477691	0.01755550
	2	0.3563060	0.08766217	0.1127328	
Combustible 2	1	1.425611	0.01099263	0.007503284	0.01717768
	2	0.3505740	0.09925634	0.1378004	
Absorbente	1	1.423913	0.01095206	0.006477691	0.01755550
	2	0.3563060	0.09146217	0.11273228	
Reflector	1	1.634227	0.002660573	0.0	0.02759693
	2	0.2640020	0.04936351	0.0	

En la tabla 3.6 se expresan los resultados para la k_{eff} obtenidos para el modo fundamental

Tabla 3.6.- Resultados de la k_{eff} del reactor de Langenbuch.

Discret.	Orden polinomio	Nº elementos nodales	Nº incógnitas	Nº elementos no nulos	k_{eff}	Tiempo CPU (seg)
FINA	2	2340	9360	55158	0.99917	22.24
	3	2340	23400	187760	0.9994	94
	4	2340	46800	475250	0.99948	240
GRUESA	2	350	1400	7820	0.99916	1.95
	3	350	3500	26650	0.99915	8
	4	350	7000	67500	0.9994	26.55

En las tablas siguientes recogemos la distribución de potencia en el plano axial medio para las dos discretizaciones consideradas y un orden 3 en el desarrollo de polinomios de Legendre.

Tabla 3.7.- Mapa de potencia. Plano axial medio. Malla fina.

	col 1	col 2	col 3	col 4	col 5	col 6	col 7	col 8	col 9	col 10	col 11
fil 1	1.705	1.670	1.600	1.495	1.352	1.168	.983	.876	.557	.000	.000
fil 2	1.670	1.637	1.570	1.469	1.336	1.175	.991	.869	.549	.000	.000
fil 3	1.600	1.570	1.509	1.417	1.295	1.146	.968	.844	.531	.000	.000
fil 4	1.495	1.469	1.417	1.336	1.227	1.091	.921	.799	.499	.000	.000
fil 5	1.352	1.336	1.295	1.227	1.135	1.011	.849	.728	.449	.000	.000
fil 6	1.167	1.175	1.146	1.091	1.011	1.027	.848	.617	.369	.000	.000
fil 7	.982	.990	.968	.921	.849	.848	.669	.465	.261	.000	.000
fil 8	.875	.868	.844	.798	.728	.616	.465	.000	.000	.000	.000
fil 9	0.557	0.549	0.531	0.499	0.448	0.369	0.261	0.000	0.000	0.000	0.000
fil 10	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
fil 11	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Tabla 3.8.- Mapa de potencia. Plano axial medio. Malla gruesa.

	col 1	col 2	col 3	col 4	col 5	col 6
fil 1	1.718	1.647	1.431	1.078	0.709	0.000
fil 2	1.647	1.582	1.386	1.073	0.691	0.000
fil 3	1.431	1.386	1.235	0.969	0.611	0.000
fil 4	1.078	1.072	0.969	0.843	0.420	0.000
fil 5	0.709	0.690	0.611	0.420	0.000	0.000
fil 6	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

La representación gráfica del modo fundamental para este reactor es de la forma

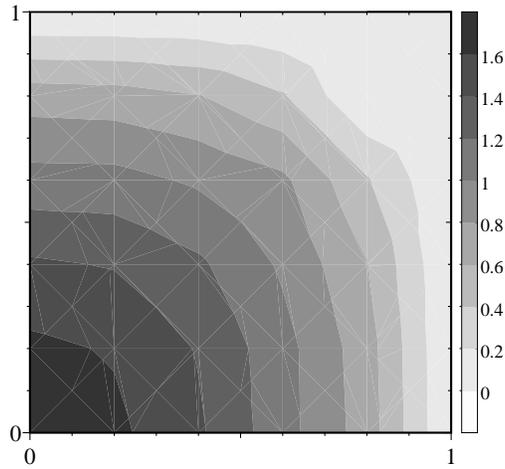


Fig. 3.6.- Modo fundamental del reactor de Langenbuch.

Estos mismos cálculos se han repetido considerando dos situaciones: una en la que se supone que las barras de control están insertadas, y la otra, en la que se considera que están fuera. Los resultados para el autovalor, k_{eff} , en ambos casos han sido 0.99773 y 1.000545, respectivamente. En las tablas 3.9 y 3.10 se muestra la distribución de potencia obtenida para el plano radial medio del reactor utilizando la discretización gruesa.

Tabla 3.9.- Distribución de potencia. Caso barras insertadas

	col 1	col 2	col 3	col 4	col 5	col 6
fil 1	1.745	1.668	1.428	1.030	0.690	0.000
fil 2	1.668	1.600	1.391	1.062	0.683	0.000
fil 3	1.428	1.391	1.245	.976	0.614	0.000
fil 4	1.029	1.062	.975	.853	0.425	0.000
fil 5	0.690	0.683	0.614	0.425	0.000	0.000
fil 6	.000	.000	.000	.000	.000	.000

Tabla 3.10.- Distribución de potencia. Caso sin barras insertadas

	col 1	col 2	col 3	col 4	col 5	col 6
fil 1	1.691	1.626	1.434	1.124	0.727	0.000
fil 2	1.626	1.564	1.381	1.083	0.698	0.000
fil 3	1.434	1.381	1.226	0.963	0.608	0.000
fil 4	1.123	1.082	0.963	0.833	0.415	0.000
fil 5	0.726	0.698	0.608	0.415	0.000	0.000
fil 6	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Se puede concluir que, como ya se había apuntado anteriormente, la precisión de los resultados aumenta a medida que se incrementa el orden del desarrollo en polinomios de Legendre de la solución. Además, en estos casos bastante homogéneos, una discretización gruesa y orden 2 en el desarrollo en polinomios de Legendre es suficiente para obtener una buena precisión en los resultados.

3.5.3 Modos Subcríticos

Obtendremos ahora, los modos subcríticos de los reactores anteriores. Para simplificar, se ha adoptado la siguiente notación esquemática, donde se tienen en cuenta los signos de la distribución de potencia en las distintas zonas del reactor.

Modos 2D armónicos

Modo	Representación esquemática	Tipo
2D.1		fundamental
2D.2		azimutal
2D.3		azimutal
2D.4		"rotación" azimutal
2D.5		"rotación" azimutal
2D.6		radial
2D.7		azimutal

Modos 3D armónicos.		
Modo	Representación esquemática en el Plano XY en el eje Z	Tipo
3D.1		fundamental
3D.2		azimutal
3D.3		azimutal
3D.4		axial
3D.5		azimutal
3D.6		azimutal
3D.7		azimutal-axial

En la tabla 3.11 se presentan los autovalores de los modos subcríticos de los reactores IAEA y BIBLIS, 2D.

Tabla 3.11.- Autovalores 2D. Casos IAEA y BIBLIS.

Mode	IAEA-2D	BIBLIS-1300
2D.1	1.0295	1.0251
2D.2	1.017	1.018
2D.3	1.017	1.018
2D.4	1.0022	1.0061
2D.5	0.997	1.0072
2D.6	0.9913	0.9976
2D.7	0.9803	0.993

En las figuras siguientes, mostramos la distribución de potencia relativa del cuadrante inferior derecho del reactor IAEA, para los modos 2D.2, 2D.5, 2D.6, y 2D.7.

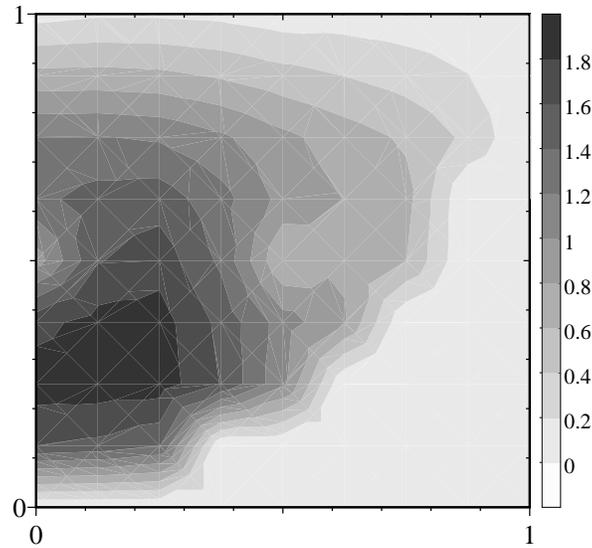


Fig. 3.7.- Modo IAEA 2D.2

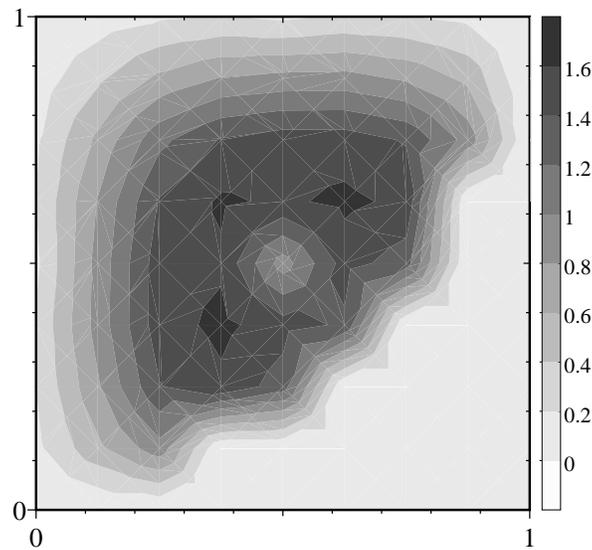


Fig. 3.8.- Modo IAEA 2D.5

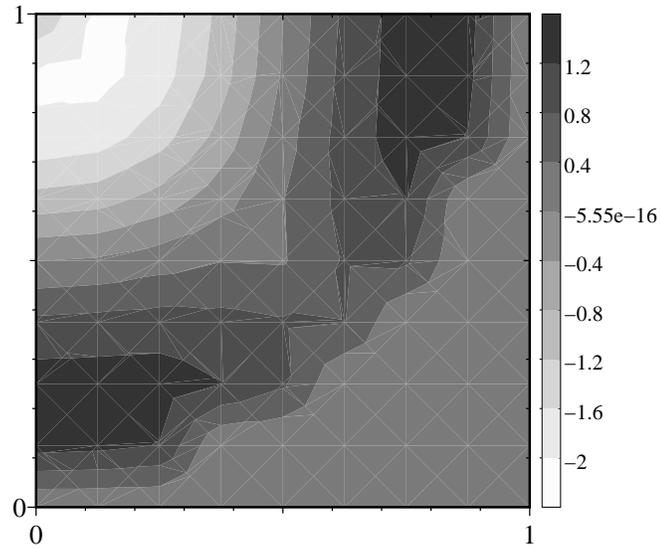


Fig. 3.9.- Modo IAEA 2D.6

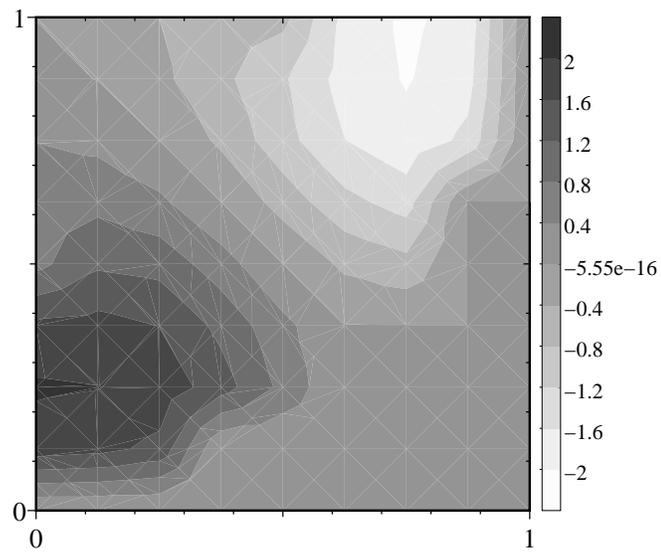


Fig. 3.10.- Modo IAEA 2D.7

En las tablas siguientes recogemos los modos subcríticos más importantes para los casos del reactor de Langenbuch (3D) vistos anteriormente

Tabla 3.12.- Autovalores 3D del problema Langenbuch.

Modo	Langenbuch	Langenbuch/barras	Lanbenbuch/sin barras
3D.1	0.99915	0.99773	1.000545
3D.2	0.966682	0.96510	0.968224
3D.3	0.966682	0.96510	0.968224
3D.4	0.95083	0.949	0.952
3D.5	0.936	0.9359	0.93614
3D.6	0.912	0.9106	0.911

En las siguientes figuras, se muestra la distribución de potencia para el plano radial medio asociada a los modos 3D.2, 3D.3, 3D.4, 3D.5 y 3D.6.

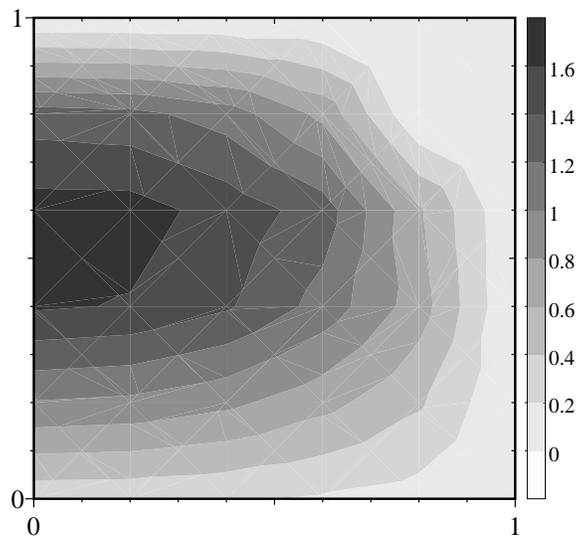


Fig. 3.11.- Distribución de potencia relativa para el modo 3D.2 del problema Langenbuch.

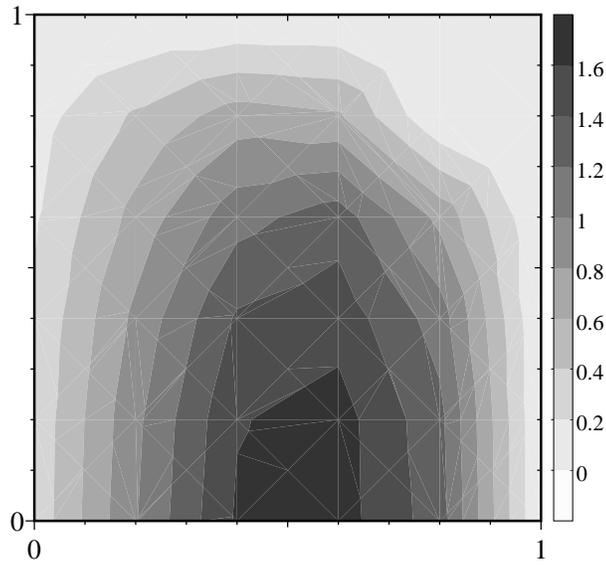


Fig. 3.12.- Distribución de potencia relativa para el modo 3D.3 del problema Langenbuch.

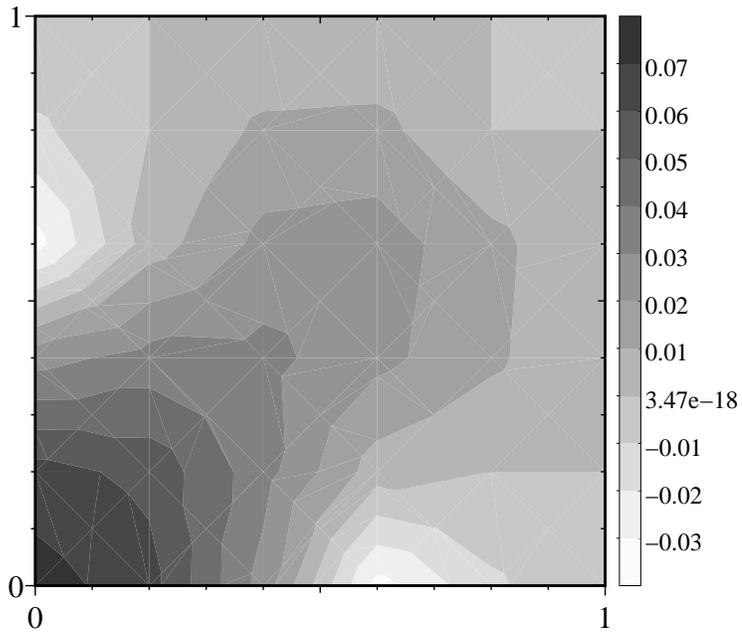


Fig. 3.13.- Distribución de potencia relativa para el modo 3D.4 del problema Langenbuch.

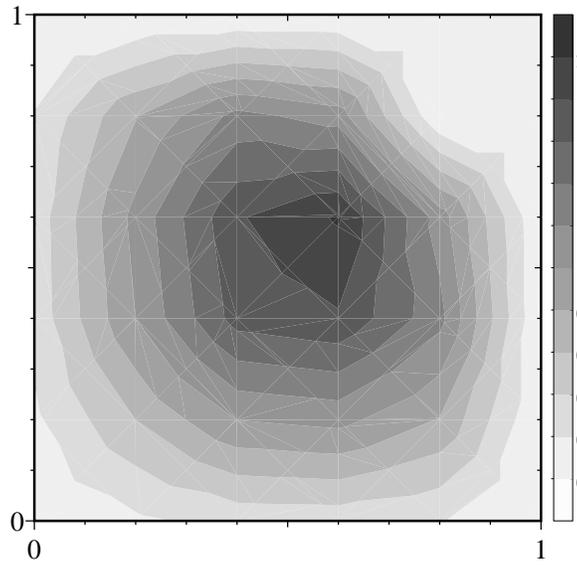


Fig. 3.14.- Distribución de potencia relativa para el modo 3D.5 del problema Langenbuch.

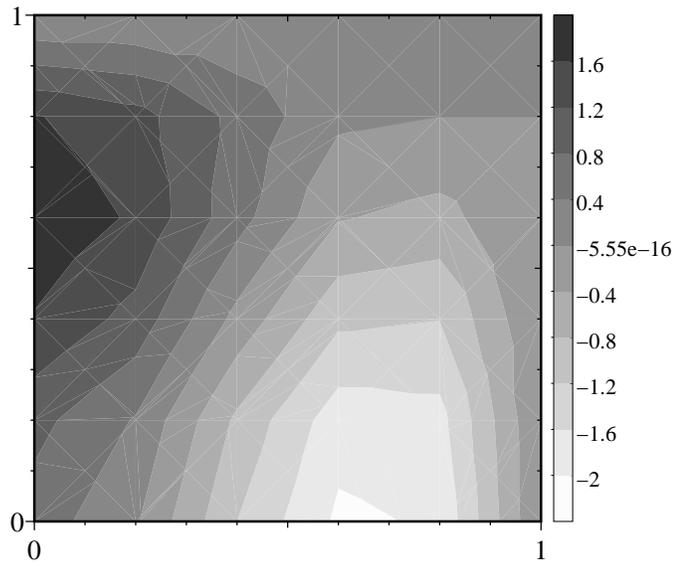


Fig. 3.15.- Distribución de potencia relativa para el modo 3D.6 del problema Langenbuch.

3.5.4 Modos Subcríticos del reactor de Cofrentes

El programa MOD3D se ha utilizado para obtener los Modos Lambda 3D del reactor de Cofrentes al comienzo del ciclo 6. En la figura 3.16 mostramos el perfil axial de la potencia relativa correspondiente al primer modo axial

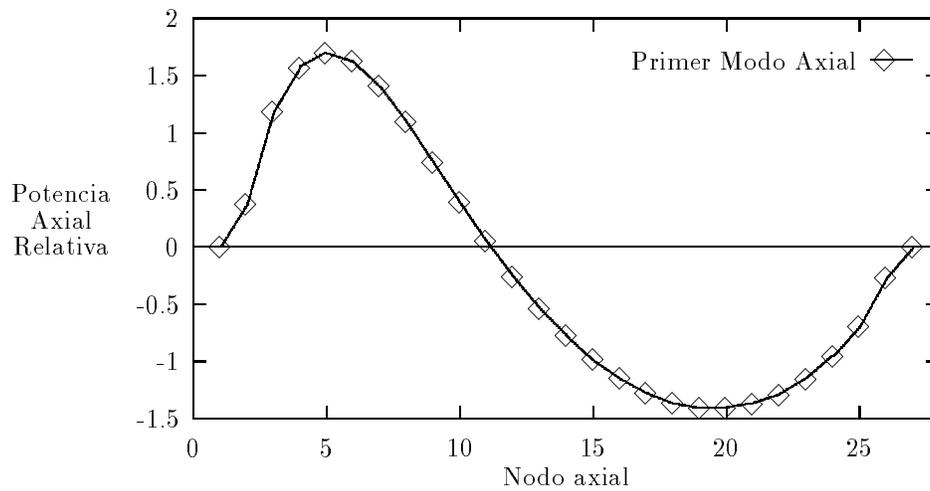


Fig. 3.16.- Perfil de potencia del primer modo axial. Cofrentes.

A continuación, se muestra la distribución de potencia correspondiente al cuadrante superior derecho del plano radial medio del reactor de Cofrentes para los modos 3D.1, 3D.4 y 3D.6.

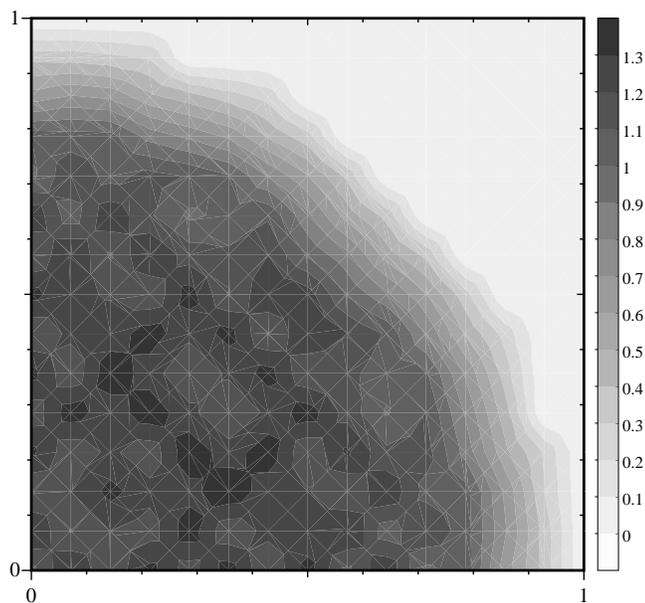


Fig. 3.17.- Modo 3D.1 del reactor nuclear de Cofrentes. Ciclo 6.

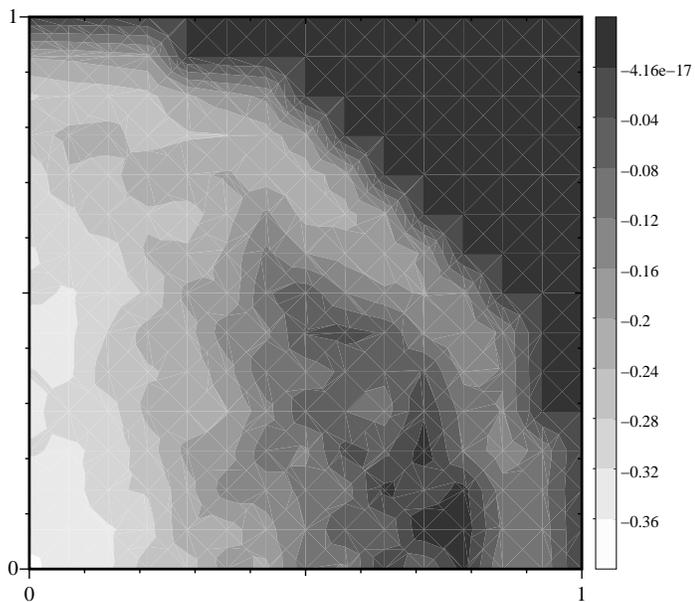


Fig. 3.18.- Modo 3D.4 del reactor nuclear de Cofrentes. Ciclo 6.

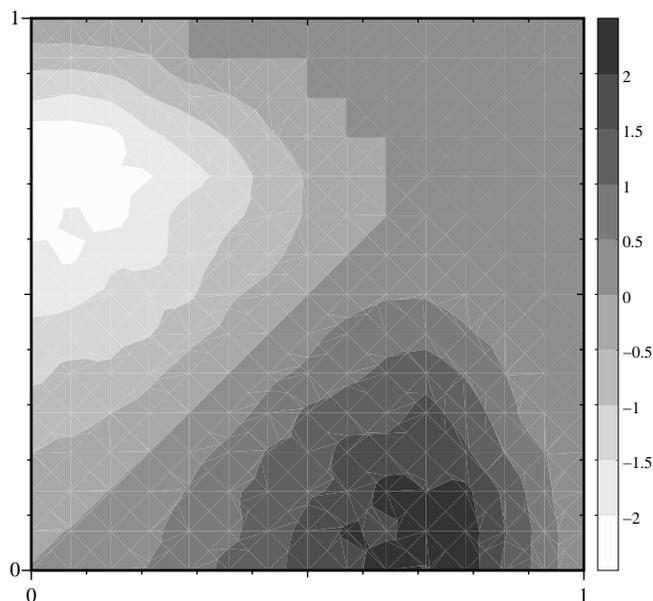


Fig. 3.19.- Modo 3D.6 del reactor nuclear de Cofrentes. Ciclo 6.

Por último, en la tabla 3.13 se comparan los valores propios 1D obtenidos con los programas VENTURE y MOD2G usando secciones eficaces consistentes, con los valores propios 3D obtenidos con el programa MOD3D

Tabla 3.13.- Modos λ del Reactor Nuclear de Cofrentes al comienzo del ciclo C6.

PROG.	3D.1	3D.2	3D.3	3D.4	3D.5	3D.6	3D.7	3D.8
SIMULATE-3	1.04968							
VENTURE-1D	1.049685	1.0408	1.0409	1.03685				
MOD2G-1D	1.04967	1.04071	1.0408	1.03671				
MOD3D	1.0497	1.0412	1.04145	1.036	1.028649	1.02765	1.0253	1.02498

Si observamos los resultados, vemos que los autovalores son muy similares para los modos coincidentes. No obstante, hay que indicar que el programa MOD2G no puede obtener modos compuestos de segundo orden, como los 3D.5, 3D.6, 2D.4, 2D.5, 2D.6, etc. debido a que el proceso de resolución del sistema de ecuaciones

no lineales no se obtiene las raíces correspondientes a estos modos de una forma sencilla.

Todos estos resultados nos confirman que los autovalores de los modos azimutales en las situaciones estudiadas están muy cerca del autovalor fundamental, con el consiguiente riesgo de que se pueda superar esa separación por mecanismos termohidráulicos, dando lugar a oscilaciones de la potencia en el reactor.

3.5.5 Reactor de Ringhals

El último problema que se ha estudiado, corresponde al reactor de agua en ebullición Ringhals-I, que posee 648 elementos combustibles cuyo quemado corresponde a los ciclos 14-16.

El reactor se ha discretizado en 27 planos axiales de 14.72 cm, 25 correspondientes al combustible, y un plano en la parte inferior y otro en la parte superior correspondientes al reflector. Cada plano axial, a su vez, se ha discretizado en celdas de 15.275 cm. \times 15.275cm. de la forma indicada en la figura 3.20.

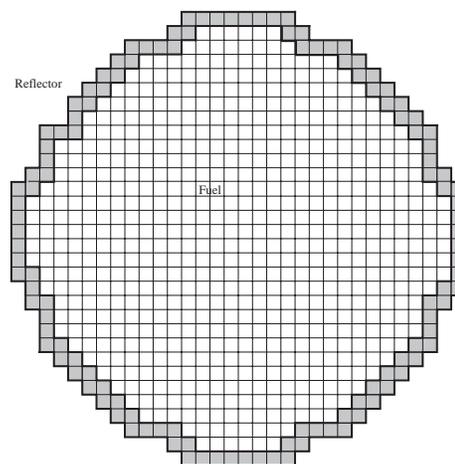


Fig. 3.20.- Plano del reactor de Ringhals.

En el arranque efectuado en 1990 de reactor de Ringhals, se efectuaron medidas

de la potencia neutrónica para varios instantes, correspondientes a distintos valores de la relación potencia-caudal [47]. Se han calculado para este reactor el primer y segundo modo correspondientes a la configuración del reactor en el instante D, sin hacer uso de ningún tipo de simetría. Los valores obtenidos para los dos primeros autovalores son

$$\lambda_1 = 1.00891958 \quad , \quad \lambda_2 = 1.00072305 \quad .$$

En las figuras 3.21 y 3.22 se muestran los perfiles axiales de potencia correspondientes al primer y segundo modo modo excitado obtenidos.

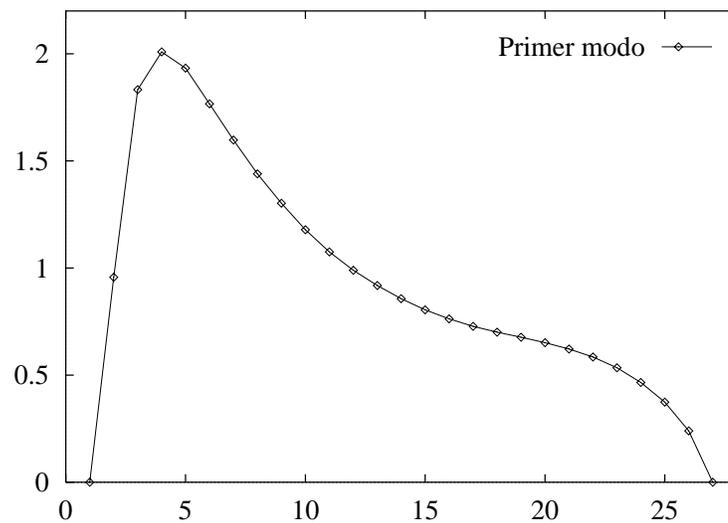


Fig. 3.21.- Perfil axial de potencia del primer modo del reactor de Ringhals.

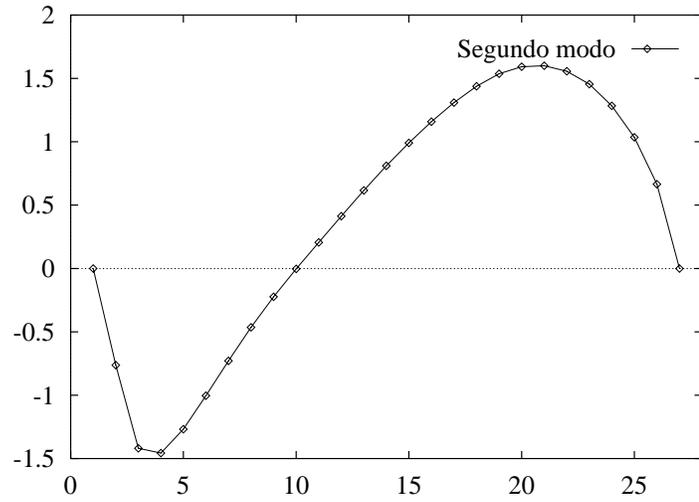


Fig. 3.22.- Perfil axial de potencia del segundo modo del reactor de Ringhals.

En las figuras 3.23 y 3.24 se muestra la distribución de potencia correspondiente al plano medio del reactor para los dos modos calculados.

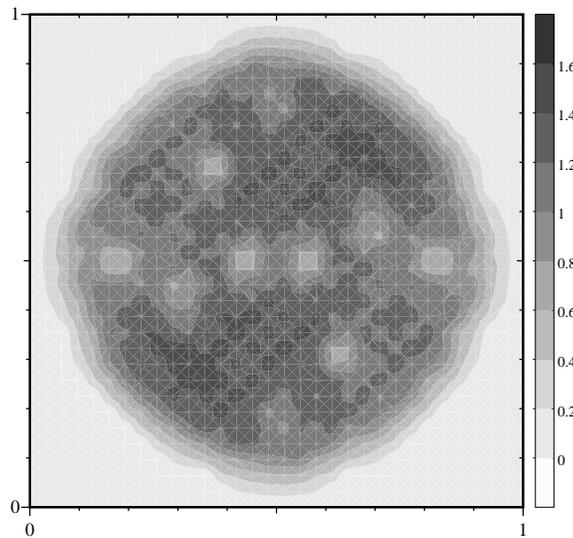


Fig. 3.23.- Distribución de potencia para el primer modo del reactor de Ringhals.

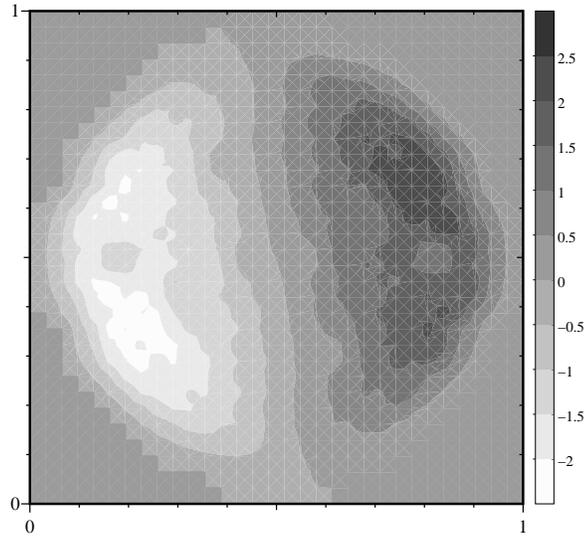


Fig. 3.24.- Distribución de potencia para el segundo modo del reactor de Ringhals.

Capítulo 4

Integración de la ecuación de la Difusión dependiente del tiempo. Método Nodal Modal

Pasaremos ahora a estudiar la integración de la ecuación de la difusión *dependiente del tiempo* en la aproximación de dos grupos de energía. Esto nos permitirá poder conocer la evolución en el tiempo de la distribución de flujo neutrónico en el reactor a partir de una distribución inicial dada. Para la integración de esta ecuación, desarrollaremos un *método nodal modal*. Este método está basado en la utilización de un método de colocación nodal para discretizar la parte espacial de las ecuaciones y en la suposición de que es posible desarrollar los vectores de los coeficientes de Legendre del flujo neutrónico en cada instante de tiempo, como una combinación lineal de los Modos Lambda dominantes de una configuración determinada del reactor. De este modo, conseguimos un sistema semidiscreto de ecuaciones diferenciales ordinarias que, una vez integradas, nos permiten conocer la evolución del sistema.

Pasamos pues a desarrollar el *método nodal modal*, para ello, se parte de la ecuación de la difusión dependiente del tiempo y la ecuación de la concentración de precursores de neutrones

$$[v^{-1}]\dot{\phi} + \mathcal{L}\phi = (1 - \beta)\mathcal{M}\phi + \sum_{k=1}^K \lambda_k \mathcal{C}_k \chi \quad , \quad (4.1)$$

$$\dot{C}_k = \beta_k[\nu\Sigma_{f1} \ \nu\Sigma_{f2}]\phi - \lambda_k C_k \quad , \quad k = 1, \dots, K \quad , \quad (4.2)$$

donde, recordemos que K es el número de grupos de neutrones de diferidos,

$$\mathcal{L} = \begin{bmatrix} -\vec{\nabla} \cdot (D_1 \vec{\nabla}) + \Sigma_{a1} + \Sigma_{12} & 0 \\ -\Sigma_{12} & -\vec{\nabla} \cdot (D_2 \vec{\nabla}) + \Sigma_{a2} \end{bmatrix} , \quad [v^{-1}] = \begin{bmatrix} \frac{1}{v_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{v_2} \end{bmatrix} ,$$

y

$$\mathcal{M} = \begin{bmatrix} \nu\Sigma_{f1} & \nu\Sigma_{f2} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} , \quad \phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} , \quad \chi = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} .$$

En primer lugar, se utiliza el método de colocación nodal expuesto en el capítulo anterior, para discretizar la parte espacial de las ecuaciones (4.1) y (4.2) y reducir las a un sistema de la forma

$$[v^{-1}]\dot{\psi} + L\psi = (1 - \beta)M\psi + \sum_{k=1}^K \lambda_k X C_k \quad , \quad (4.3)$$

$$X\dot{C}_k = \beta_k M\psi - \lambda_k X C_k \quad , \quad (4.4)$$

donde ψ y C_k son vectores cuyas componentes corresponden a los coeficientes del desarrollo en polinomios de Legendre de ϕ y C_k en cada nodo, en cada instante de tiempo. Las matrices L y M son las que se han obtenido en el capítulo anterior, y tienen la estructura a bloques siguiente

$$L = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ -L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} , \quad M = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} ,$$

y se ha introducido una matrix X de la forma

$$X = \begin{bmatrix} I \\ 0 \end{bmatrix} .$$

Para integrar las ecuaciones (4.3) y (4.4) supondremos que ψ admite un desarrollo

$$\psi = \sum_{l=1}^{M_d} n_l(t)\psi_l \quad , \quad (4.5)$$

donde ψ_l ($l = 1, \dots, M_d$) son los autovectores asociados a los M_d autovalores dominantes de un problema estático dado de Modos Lambda

$$L_0 \psi_l = \frac{1}{k_l} M_0 \psi_l \quad . \quad (4.6)$$

Se introduce el problema adjunto

$$L_0^\dagger \psi_l^\dagger = \frac{1}{k_l} M_0^\dagger \psi_l^\dagger \quad , \quad (4.7)$$

con el fin de poder hacer uso de las propiedades de biortogonalidad existente entre los modos de los dos problemas. Así, los modos ψ_n y ψ_m^\dagger satisfacen la relación

$$\langle \psi_m^\dagger, M_0 \psi_n \rangle = \langle \psi_n^\dagger, M_0 \psi_n \rangle \delta_{n,m} \quad , \quad (4.8)$$

donde el producto escalar considerado es el producto escalar euclídeo de dos vectores.

Multiplicando escalarmente las ecuaciones (4.3) y (4.4) por ψ_m^\dagger , escribiendo

$$L = L_0 + \delta L \quad , \quad M = M_0 + \delta M \quad ,$$

y haciendo uso del desarrollo (4.5), se llega al sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} & \sum_{l=1}^{M_d} \langle \psi_m^\dagger, [v^{-1}] \psi_l \rangle \frac{d}{dt} n_l + \sum_{l=1}^{M_d} \frac{1}{k_l} \langle \psi_m^\dagger, M_0 \psi_l \rangle n_l + \sum_{l=1}^{M_d} \langle \psi_m^\dagger, \delta L \psi_l \rangle n_l = \\ & (1 - \beta) \sum_{l=1}^{M_d} \langle \psi_m^\dagger, M_0 \psi_l \rangle n_l + (1 - \beta) \sum_{l=1}^{M_d} \langle \psi_m^\dagger, \delta M \psi_l \rangle n_l + \sum_{k=1}^K \lambda_k \langle \psi_m^\dagger, X C_k \rangle , \\ & \frac{d}{dt} \langle \psi_m^\dagger, X C_k \rangle = \beta_k \sum_{l=1}^{M_d} \langle \psi_m^\dagger, M_0 \psi_l \rangle n_l + \beta_k \sum_{l=1}^{M_d} \langle \psi_m^\dagger, \delta M \psi_l \rangle n_l - \lambda_k \langle \psi_m^\dagger, X C_k \rangle . \end{aligned} \quad (4.9)$$

Haciendo uso de la relación de biortogonalidad (4.8) e introduciendo la notación

$$\begin{aligned} \Lambda_{ml} &= \frac{1}{\langle \psi_m^\dagger, M_0 \psi_m \rangle} \langle \psi_m^\dagger, [v^{-1}] \psi_l \rangle \quad , \\ A_{ml}^L &= \frac{1}{\langle \psi_m^\dagger, M_0 \psi_m \rangle} \langle \psi_m^\dagger, \delta L \psi_l \rangle \quad , \\ A_{ml}^M &= \frac{1}{\langle \psi_m^\dagger, M_0 \psi_m \rangle} \langle \psi_m^\dagger, \delta M \psi_l \rangle \quad , \\ C_{mk} &= \frac{1}{\langle \psi_m^\dagger, M_0 \psi_m \rangle} \langle \psi_m^\dagger, X C_k \rangle \quad , \end{aligned}$$

y la reactividad del modo m , definida como

$$\rho_m = \frac{k_m - 1}{k_m} \quad ,$$

las ecuaciones (4.9) se expresan

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^{M_d} \Lambda_{ml} \frac{d}{dt} n_l &= (\rho_m - \beta) n_m + (1 - \beta) \sum_{l=1}^{M_d} A_{ml}^M n_l - \sum_{l=1}^{M_d} A_{ml}^L n_l + \sum_{k=1}^K \lambda_k C_{mk} \quad , \\ \frac{d}{dt} C_{mk} &= \beta_k n_m + \beta_k \sum_{l=0}^{M_d} A_{ml}^M n_l - \lambda_k C_{mk} \quad , \quad k = 1, \dots, K \quad . \end{aligned} \quad (4.10)$$

Haciendo variar el índice m de 1 a M_d , podemos expresar estas ecuaciones en la forma matricial siguiente

$$\begin{aligned} \frac{d[n]}{dt} &= [\Lambda]^{-1} [\rho - \beta I][n] + (1 - \beta) [\Lambda]^{-1} [A^M][n] - [\Lambda]^{-1} [A^L][n] + \sum_{k=1}^K \lambda_k [\Lambda]^{-1} [C_k] \quad , \\ \frac{d[C_k]}{dt} &= \beta_k [n] + \beta_k [A^M][n] - \lambda_k [C_k] \quad , \quad k = 1, \dots, K \quad . \end{aligned} \quad (4.11)$$

Considerando explícitamente las K ecuaciones para los diferidos, agrupamos las ecuaciones (4.11) como el sistema de ecuaciones

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} n \\ C_1 \\ \vdots \\ C_K \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{c|ccc} [\Lambda]^{-1} \left([\rho - \beta I] + (1 - \beta) [A^M] - [A^L] \right) & [\Lambda]^{-1} \lambda_1 & \cdots & [\Lambda]^{-1} \lambda_K \\ \hline & & & \\ \beta_1 [I + [A^M]] & -\lambda_1 I & \cdots & 0 \\ & \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta_K [I + [A^M]] & 0 & \cdots & -\lambda_K I \end{array} \right] \begin{bmatrix} n \\ C_1 \\ \vdots \\ C_K \end{bmatrix} \quad . \quad (4.12)$$

Este sistema de ecuaciones diferenciales es de dimensión $(K + 1)M_d$, así, para un problema típico en el que se utilicen desarrollos en 5 modos dominantes y se consideren 6 grupos de precursores, tendríamos un sistema de dimensión 35. Esto

permite que para la resolución del sistema se pueda usar el método de Runge-Kutta o bien un método implícito como el implementado en la rutina LSODE ¹. Como condición inicial para n se toman los valores que se derivan de suponer que el ψ inicial es el modo fundamental correspondiente a la configuración inicial del reactor. Una vez se han determinado los n iniciales, se calculan los C_k utilizados como condición inicial mediante la ecuación

$$C_k = \frac{\beta_k}{\lambda_k} [I + [A^M]] [n] \quad .$$

4.1 Resultados numéricos

El método nodal modal que se ha expuesto, se ha implementado en un programa escrito en FORTRAN llamado MOD1D.CIN, para la resolución de problemas unidimensionales, tomando como base el programa MOD1D, que nos permite calcular los Modos Lambda de un reactor dado utilizando el método de colocación nodal.

Para comprobar el funcionamiento del método, se han resuelto tres problemas unidimensionales propuestos por Nigg [27], y denominados Benchmark B, Benchmark C y Benchmark E.

4.1.1 Benchmark B

El problema denominado Benchmark B, corresponde a un reactor unidimensional con simetría 1/2 que se ha discretizado en seis nodos de 30.48 cm de la forma siguiente

¹La rutina LSODE es una rutina de la librería ODEPACK que también se encuentra en la colección de librerías NETLIB

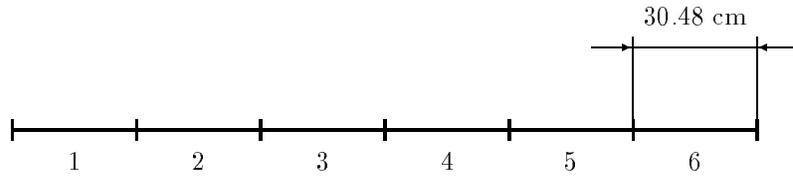


Fig. 4.1.- Nodalización del reactor Benchmark B.

Estos nodos corresponden a un solo material, cuyas secciones eficaces vienen dadas en la tabla 4.1

Tabla 4.1.- Secciones eficaces del reactor Benchmark B.

Grupo	D_g (cm)	Σ_{ag} (cm ⁻¹)	$\nu\Sigma_{fg}$	Σ_{12}	$1/v_g$
1	1.28205	0.01	0.01	0.075	$1 \cdot 10^{-7}$
2	0.666667	0.1	0.1	-	$1 \cdot 10^{-5}$

Se consideran además, seis grupos de precursores de neutrones, cuyos parámetros vienen dados en la tabla 4.2

Tabla 4.2.- Parámetros de los precursores del Benchmark B.

Grupo	β_i	λ_i (seg ⁻¹)
1	0.000215	0.0124
2	0.001424	0.0305
3	0.001274	0.1110
4	0.002568	0.03010
5	0.000748	1.1400
6	0.000273	3.0100

Para el estudio de un transitorio con este reactor, se perturban las secciones eficaces $\nu\Sigma_{f1}$ y $\nu\Sigma_{f2}$ correspondientes al tercer nodo empezando por la izquierda ,

aumentándolas en un 4 %, dejando los otros nodos inalterados. Se ha realizado el cálculo utilizando los Modos Lambda correspondientes al reactor inicial y utilizando los Modos Lambda del reactor perturbado, y se han comparado los resultados obtenidos utilizando 5 y 10 modos en el desarrollo del método nodal modal, con los resultados que proporciona un método analítico nodal [27].

En las figuras 4.2 y 4.3 se comparan los resultados obtenidos para la evolución de la potencia, utilizando un desarrollo en 5 y 10 modos correspondientes al reactor inicial (MRI), y al reactor perturbado (MRP). Como referencia, se utilizan los resultados proporcionados por el método analítico nodal (AN).

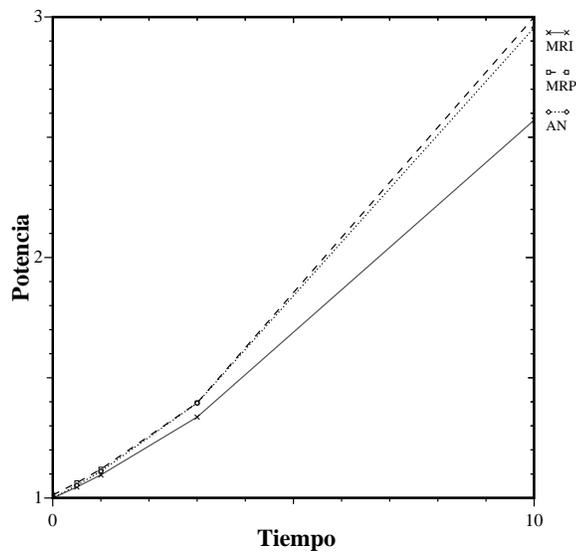


Fig. 4.2.- Evolución de la potencia con 5 modos.

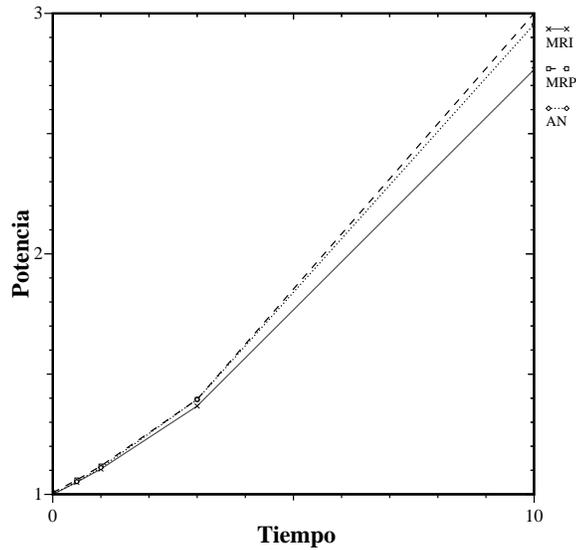


Fig. 4.3.- Evolución de la potencia con 10 modos.

Observamos que los resultados obtenidos para la evolución de la potencia son mejores si se utilizan en los desarrollos del método nodal modal los modos asociados a la configuración perturbada del reactor. Además, si se utilizan este tipo de modos será suficiente utilizar 5 modos en los desarrollos para obtener un resultado con precisión suficiente.

En las figuras de la 4.4 a la 4.7 comparamos, para las posibilidades anteriores, el perfil de potencia en el reactor en los instantes de tiempo correspondientes a 0.0005 seg., 0.001 seg., 0.003 seg., 0.01 seg., utilizando desarrollos en 5 modos.

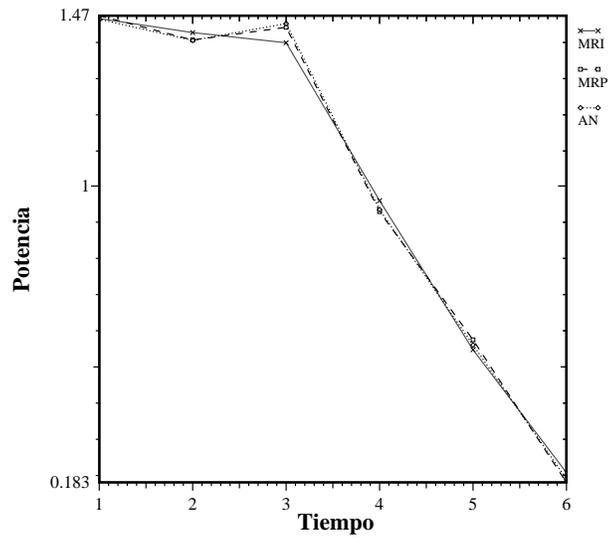


Fig. 4.4.- Perfil de potencia a los 0.0005 seg.

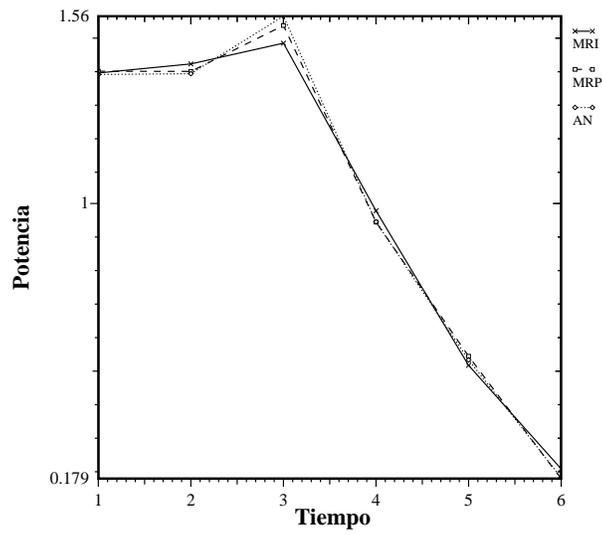


Fig. 4.5.- Perfil de potencia a los 0.001 seg.

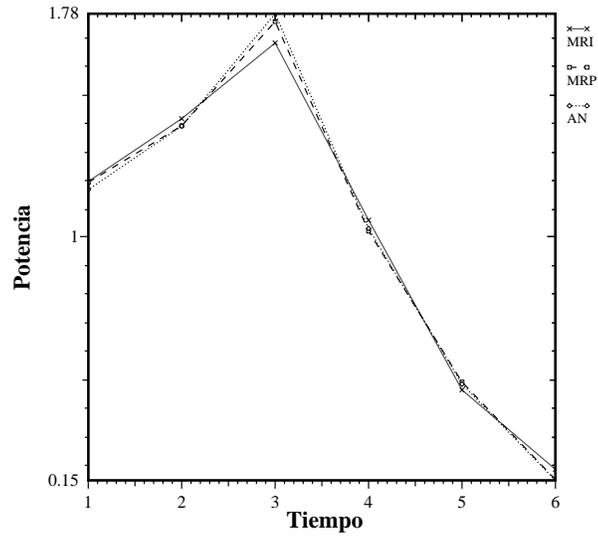


Fig. 4.6.- Perfil de potencia a los 0.003 seg.

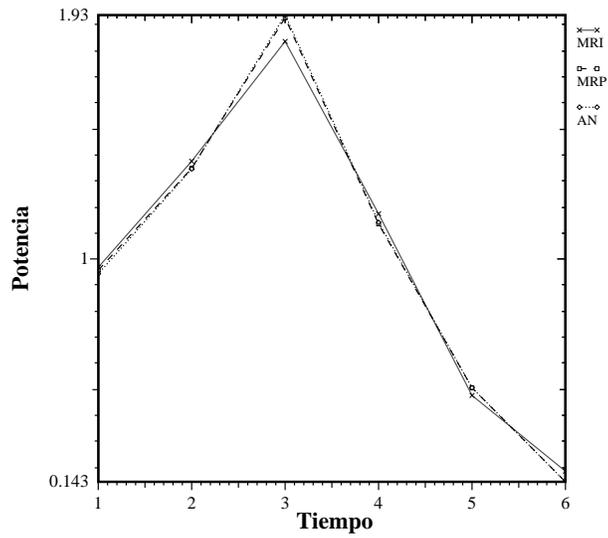


Fig. 4.7.- Perfil de potencia a los 0.01 seg.

Hay que hacer notar, que la evolución del perfil de potencia, que se muestra en las figuras anteriores, depende tanto de la evolución de las funciones de ponderación

asociadas a los flujos neutrónicos rápido y térmico como del tipo de perturbación realizada sobre el reactor.

Con el objeto de poder hacer un estudio cualitativo de la variación de la evolución de la potencia, de los flujos neutrónicos y de perfil de potencia, se tiene en cuenta que, en la aproximación de la cinética puntual [51], el comportamiento asintótico en el tiempo de estas magnitudes se puede suponer exponencial. Basándonos en esta dependencia, definiremos una serie de parámetros que cuantifican la variación de estas funciones. Así, para la potencia se define

$$w_P^n = \ln \left(\frac{P^n}{P^{n-1}} \right) \quad ,$$

donde P^n es la potencia del reactor en el instante t_n y \ln es el logaritmo neperiano. Para el flujo rápido y el flujo térmico se definen los parámetros

$$\begin{aligned} w_{\phi_1}^n &= \max_{k=1\dots N} \left\{ \ln \left(\frac{\phi_{1,k}^n}{\phi_{1,k}^{n-1}} \right) \right\} \quad , \\ w_{\phi_2}^n &= \max_{k=1\dots N} \left\{ \ln \left(\frac{\phi_{2,k}^n}{\phi_{2,k}^{n-1}} \right) \right\} \quad , \end{aligned} \quad (4.13)$$

donde $\phi_{1,k}^n$ y $\phi_{2,k}^n$ son el flujo rápido y el flujo térmico en el nodo k del reactor en el instante t_n , respectivamente. Y para el perfil de potencia

$$w_{pe}^n = \max_{k=1\dots N} \left\{ \ln \left(\frac{pe_k^n}{pe_k^{n-1}} \right) \right\} \quad ,$$

donde pe_k^n es el perfil de potencia en el nodo k en el instante t_n y N es el número de nodos en los que se ha discretizado el reactor.

En las figuras 4.8 y 4.9 se muestra la evolución con el tiempo de los parámetros w_P^n , $w_{\phi_1}^n$, $w_{\phi_2}^n$, w_{pe}^n para el Benchmark B

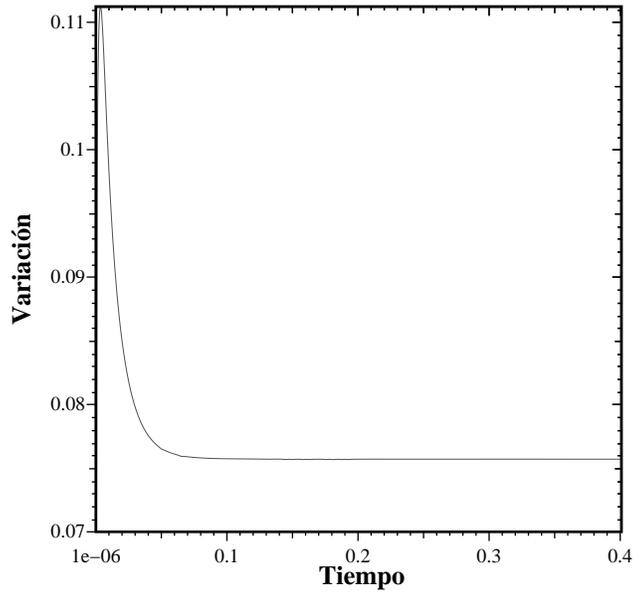


Fig. 4.8.- Evolución de w_P para el Benchmark B.

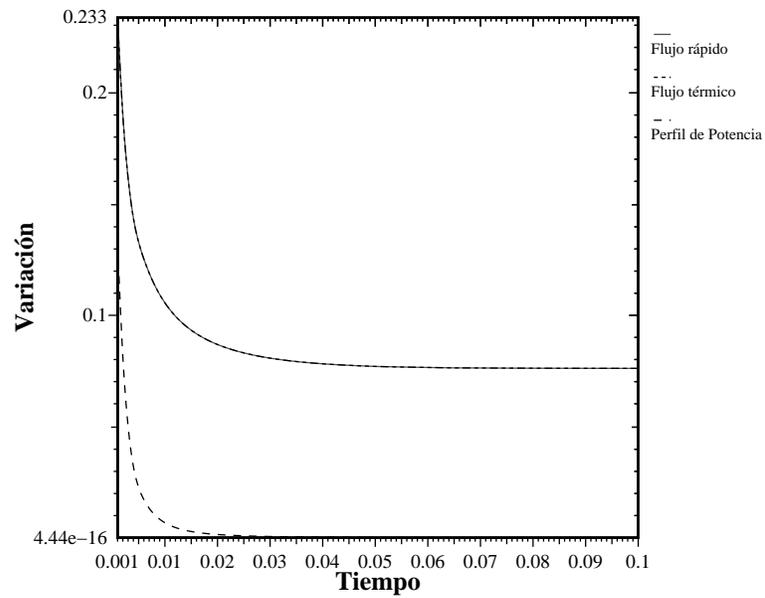


Fig. 4.9.- Evolución de w_{ϕ_1} , w_{ϕ_2} y de w_{pe} para el Benchmark B.

Observamos que se produce un cambio rápido del parámetro w_P , alcanzándose finalmente un valor asintótico para el mismo, esto nos indica que llegados a este punto el comportamiento de la potencia es claramente exponencial. En cuanto a los flujos rápido y térmico, el comportamiento es idéntico entre ellos y claramente diferente del que tiene el perfil de potencia. Para estas funciones el comportamiento asintótico exponencial se alcanza mucho más rápidamente que para la potencia.

4.1.2 Benchmark C

El siguiente problema que vamos a estudiar lo denominaremos Benchmark C [27] y consiste en un reactor unidimensional discretizado en 14 nodos de la forma

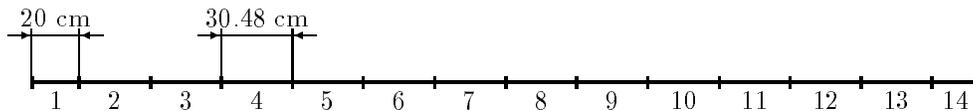


Fig. 4.10.- Nodalización del reactor del Benchmark C.

donde se tienen 12 nodos correspondientes al combustible (nodos del 2 al 13) de 30.48 cm y dos nodos en los extremos (nodos 1 y 14) de 20 cm, correspondientes al reflector.

La disposición inicial de los materiales en el reactor es de la siguiente forma

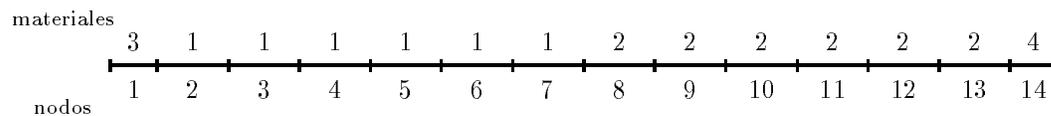


Fig. 4.11.- Disposición inicial de los materiales en el Benchmark C.

donde las secciones eficaces de cada material vienen dadas en la tabla 4.3.

Tabla 4.3.- Secciones eficaces del reactor Benchmark C.

Material	Grupo	D_g (cm)	Σ_{ag} (cm ⁻¹)	$\nu\Sigma_{fg}$	Σ_{12}	$1/v_g$
1	1	1.28205	0.0100000128205	0.01	0.075	$1 \cdot 10^{-7}$
	2	0.666667	0.10000000666667	0.1	-	$1 \cdot 10^{-5}$
2	1	1.28205	0.01	0.01	0.075	$1 \cdot 10^{-7}$
	2	0.666667	0.1	0.1	-	$1 \cdot 10^{-5}$
3	1	1.28205	0.0010000128205	0	0.1	$1 \cdot 10^{-7}$
	2	0.666667	0.01000000666667	0	-	$1 \cdot 10^{-5}$
4	1	1.28205	0.001	0	0.1	$1 \cdot 10^{-7}$
	2	0.666667	0.01	0	-	$1 \cdot 10^{-5}$

Para estudiar el transitorio asociado a este problema, se perturba el reactor cambiando la disposición de los materiales de la forma siguiente

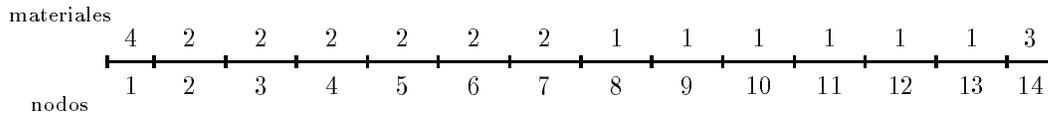


Fig. 4.12.- Disposición final de los materiales en el Benchmark C.

y se deja evolucionar el sistema. Se han estudiado dos posibilidades, una donde no se tienen en cuenta los precursores de neutrones, y otra en donde se han considerado 6 grupos de precursores de neutrones, cuyos parámetros vienen dados en la tabla 4.2. En ambos casos, se ha determinado el estado inicial del reactor mediante el método de colocación nodal utilizando tres polinomios de Legendre en los desarrollos. La evolución del reactor se ha calculado mediante el método nodal modal, considerando 5 modos en los desarrollos del método nodal modal y utilizando los modos asociados al reactor perturbado para realizar estos desarrollos.

En las figuras de la 4.13 a la 4.15 observamos la evolución de la potencia y de los parámetros w_p^n , $w_{\phi_1}^n$, $w_{\phi_2}^n$, w_{pe}^n para el Benchmark C, sin considerar los neutrones diferidos

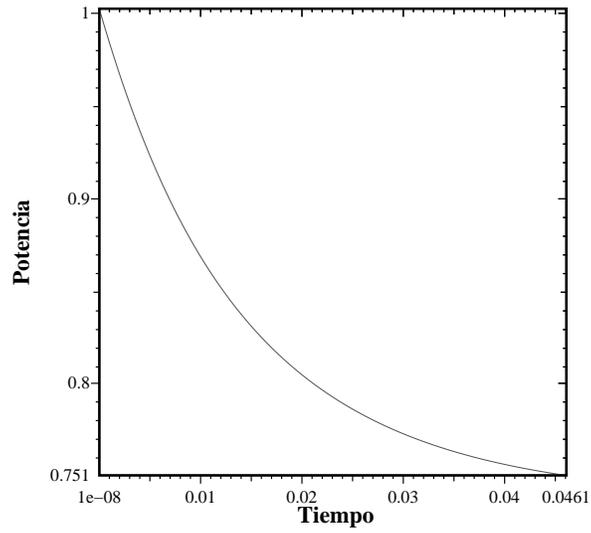


Fig. 4.13.- Evolución de la potencia en el Benchmark C sin neutrones diferidos.

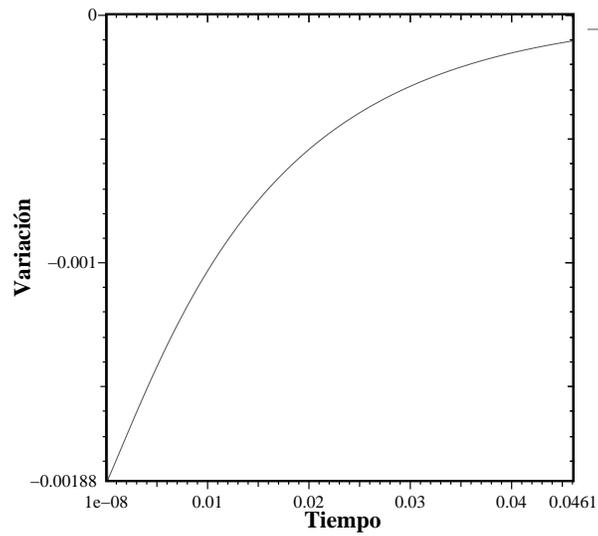


Fig. 4.14.- Evolución de w_P del Benchmark C sin neutrones diferidos.

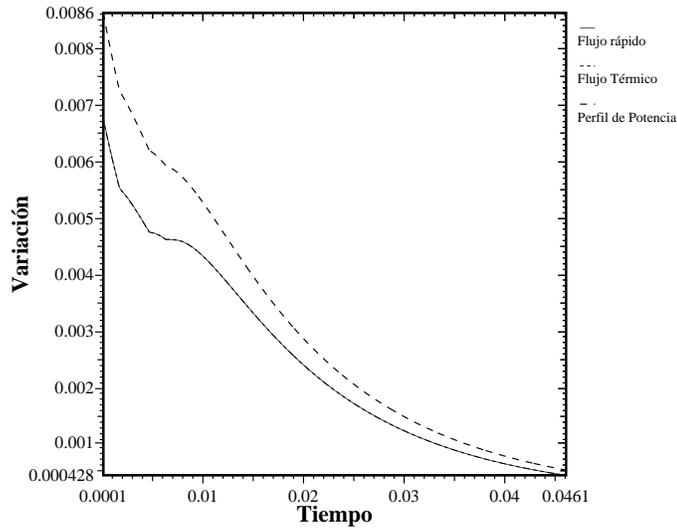


Fig. 4.15.- Evolución de w_{ϕ_1} , w_{ϕ_2} y de w_{pe} para el Benchmark C sin neutrones diferidos.

Se observa que la potencia del reactor baja, al contrario de lo que ocurría en el Benchmark B. Las variaciones de los parámetros w -s no es tan brusca en el Benchmark C como en el B y el comportamiento del perfil de potencia es más parecido al de los flujos rápido y térmico que en el problema anterior.

En las figuras de la 4.16 a la 4.18, se muestra las mismas gráficas anteriores si se consideran los neutrones diferidos

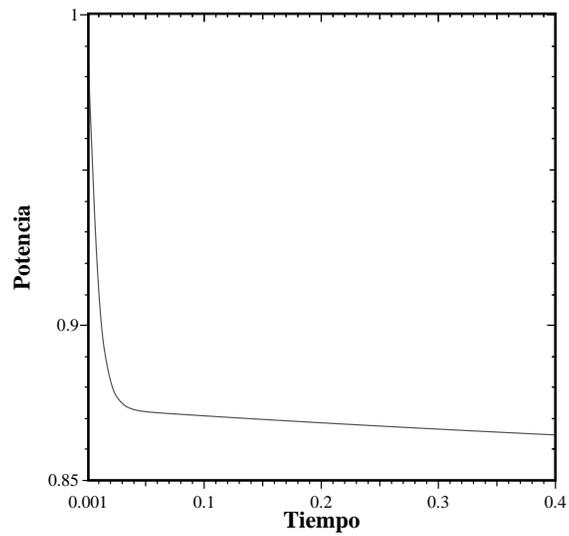


Fig. 4.16.- Evolución de la potencia en el Benchmark C con neutrones diferidos.

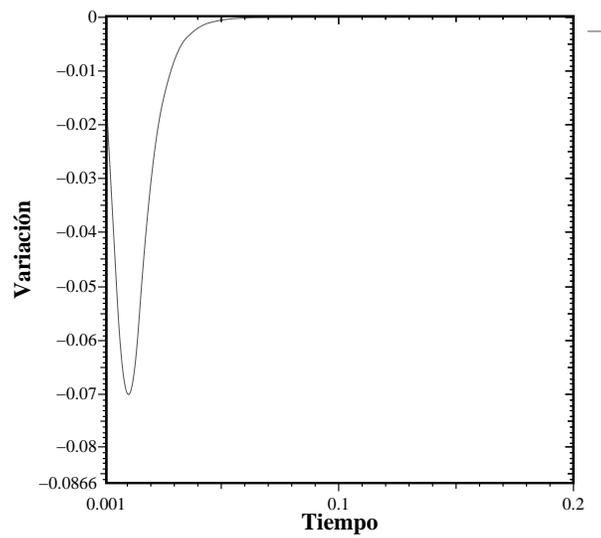


Fig. 4.17.- Evolución de w_P del Benchmark C con neutrones diferidos.

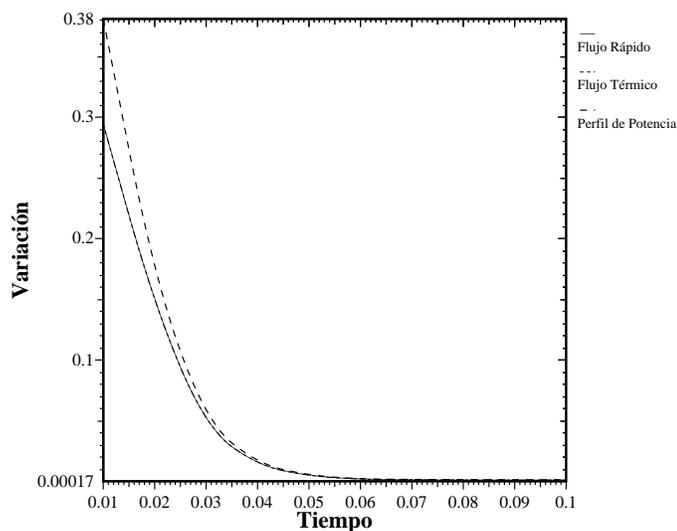


Fig. 4.18.- Evolución de w_{ϕ_1} , w_{ϕ_2} y de w_{pe} para el Benchmark C con neutrones diferidos.

Se observa claramente que la presencia de los neutrones diferidos hace que el reactor alcance el comportamiento asintótico mucho más lentamente que si no se consideran los precursores. Además, el comportamiento de los flujos neutrónicos rápido y térmico se asemeja más al comportamiento del perfil de potencia por la influencia de los neutrones diferidos.

4.1.3 Benchmark E

Este problema consiste en un reactor unidimensional que se ha discretizado en 8 nodos de 30 cm, de la forma

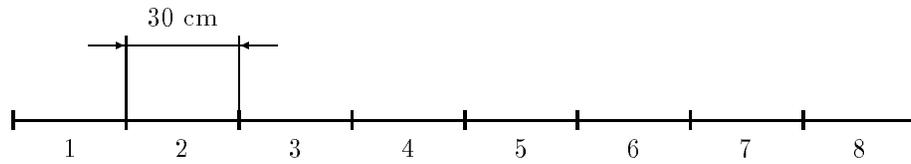


Fig. 4.19.- Nodalización del reactor Benchmark E.

con la siguiente disposición de materiales

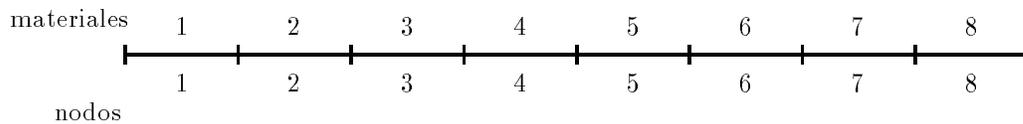


Fig. 4.20.- Disposición de los materiales en el Benchmark E.

Las secciones eficaces asociadas a cada tipo de material vienen dadas en la tabla 4.4

Tabla 4.4.- Secciones eficaces del reactor Benchmark E.

Material	Grupo	D_g (cm)	Σ_{ag} (cm^{-1})	$\nu\Sigma_{fg}$	Σ_{12}	$1/v_g$
1	1	1.69531	0.013953	0.0195002	0.0164444	0
	2	0.409718	0.2614097	0.497954	-	$4.5455 \cdot 10^{-6}$
2	1	1.69531	0.0139954	0.019502	0.0164444	0
	2	0.409718	0.26142	0.497954	-	$4.5455 \cdot 10^{-6}$
3	1	1.69531	0.0139523	0.019502	0.0164444	0
	2	0.409718	0.2614095	0.497954	-	$4.5455 \cdot 10^{-6}$

Como perturbación del reactor, se sustituyen las secciones eficaces de fisión correspondientes al material número 1 por las siguientes funciones rampa [27]

$$\nu\Sigma_{f1}(t) = 0.0213586 \left(1 + \frac{0.0122}{0.8} t \right)$$

$$\nu\Sigma_{f2}(t) = 0.0213586 \left(1 + \frac{0.0122}{0.8}t\right) \quad (4.14)$$

durante un tiempo de 0.8 segundos, donde se estudia el comportamiento del reactor.

Al iniciar el estudio del transitorio se modifican las secciones eficaces de fisión de los materiales de forma que el reactor sea crítico, o sea, la $k_{eff} = 1$.

A diferencia de los casos estudiados anteriormente, en este problema la perturbación no es instantánea, ya que depende del tiempo según las ecuaciones (4.14). Esto hace que cada cierto paso de tiempo sea necesario actualizar los modos utilizados para hacer los desarrollos en el método nodal modal, ya que al ir cambiando la configuración de los materiales en el reactor irá cambiando la forma de los modos asociados al reactor en los distintos instantes.

Supongamos que se quiere conocer la evolución del reactor en el intervalo $[t_{i-1}, t_i]$ y que para ello se utilizan los modos asociados al reactor perturbado, ψ_m^i , que satisfacen la ecuación

$$L^i \psi_m^i = \frac{1}{k_m^i} M_i \psi_m^i \quad ,$$

donde L^i y M^i son las matrices asociadas a la configuración del reactor en el instante t_i . Las ecuaciones diferenciales a integrar son de la forma

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^{M_d} \langle \psi_m^{i\dagger}, [v^{-1}] \psi_l^i \rangle \frac{d}{dt} n_l^i + \sum_{l=1}^{M_d} \frac{1}{k_l^i} \langle \psi_m^{i\dagger}, M_i \psi_l^i \rangle n_l^i + \sum_{l=1}^{M_d} \langle \psi_m^{i\dagger}, \delta L^i \psi_l^i \rangle n_l^i = \\ (1 - \beta) \sum_{l=1}^{M_d} \langle \psi_m^{i\dagger}, M_i \psi_l^i \rangle n_l^i + (1 - \beta) \sum_{l=1}^{M_d} \langle \psi_m^{i\dagger}, \delta M^i \psi_l^i \rangle n_l^i + \sum_{k=1}^K \lambda_k \langle \psi_m^{i\dagger}, X C_k \rangle , \\ \frac{d}{dt} \langle \psi_m^{i\dagger}, X C_k \rangle = \beta_k \sum_{l=1}^{M_d} \langle \psi_m^{i\dagger}, M_i \psi_l^i \rangle n_l^i + \\ \beta_k \sum_{l=1}^{M_d} \langle \psi_m^{i\dagger}, \delta M^i \psi_l^i \rangle n_l^i - \lambda_k \langle \psi_m^{i\dagger}, X C_k \rangle \quad . \end{aligned} \quad (4.15)$$

Se plantea ahora la cuestión de obtener las condiciones iniciales en el instante t_{i-1} para poder realizar la integración. Una vez se ha reconstruido el vector $\psi(t_{i-1})$, podemos obtener la condición inicial para $n_m^i(t_{i-1})$ como

$$n_m^i(t_{i-1}) = \frac{1}{\langle \psi_m^{i\dagger}, M_i \psi_m^i \rangle} \langle \psi_m^{i\dagger}, M_i \psi(t_{i-1}) \rangle \quad . \quad (4.16)$$

Nos falta por obtener $\langle \psi_m^{i \dagger}, XC_k \rangle (t_{i-1})$ en términos de $\langle \psi_m^{i-1 \dagger}, XC_k \rangle (t_{i-1})$, que son factores conocidos de la integración de las ecuaciones en el intervalo temporal anterior. Para ello, se supone que podemos escribir

$$\psi_m^{i \dagger} = \sum_{l=1}^{M_d} a_{ml} \psi_l^{i-1 \dagger} \quad ,$$

donde

$$a_{ml} = \frac{\langle \psi_m^{i \dagger}, M_{i-1} \psi_l^{i-1} \rangle}{\langle \psi_l^{i-1}, M_{i-1} \psi_l^{i-1} \rangle} \quad ,$$

y, por tanto

$$\langle \psi_m^{i \dagger}, XC_k \rangle (t_{i-1}) = \sum_{l=1}^{M_d} a_{ml} \langle \psi_l^{i-1 \dagger}, XC_k \rangle (t_{i-1}) \quad . \quad (4.17)$$

Tomando como condiciones iniciales (4.16) y (4.17) ya se pueden integrar las ecuaciones (4.15) en el intervalo $[t_{i-1}, t_i]$. Para extender la integración al intervalo $[t_i, t_{i+1}]$ hay que actualizar de nuevo los Modos Lambda y seguir el mismo proceso que se ha expuesto para calcular las nuevas condiciones iniciales.

En la figura 4.21 se presenta la evolución de la potencia obtenida con el método nodal modal (NM) actualizando los Modos Lambda cada 0.05 segundos, y se compara con los resultados obtenidos con un método analítico nodal (AN) [27]

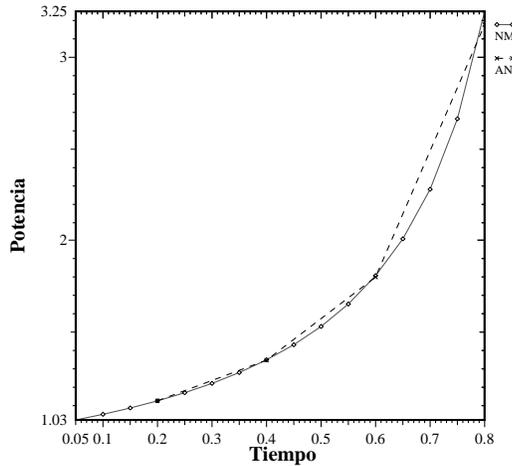


Fig. 4.21.- Evolución de la potencia para el Benchmark E.

En las figuras de la 4.22 a la 4.24 se compara el perfil de potencia en el reactor obtenidos con el método nodal modal y el método analítico nodal

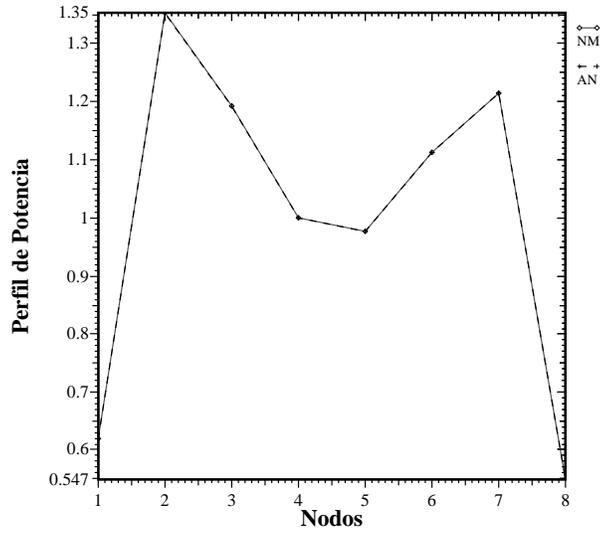


Fig. 4.22.- Perfil de potencia a los 0.2 segundos del Benchmark E.

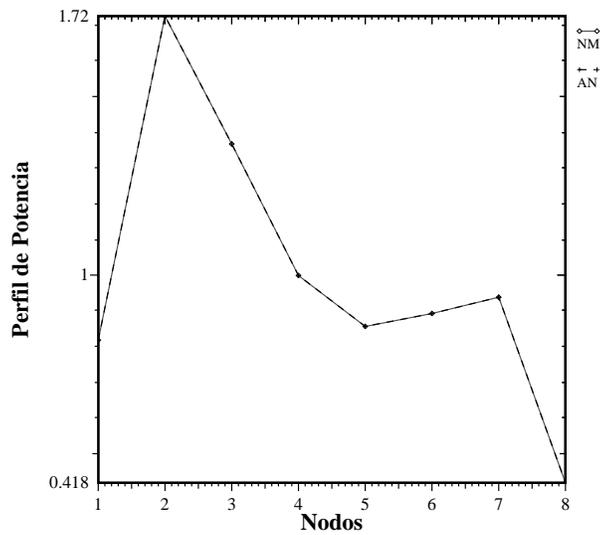


Fig. 4.23.- Perfil de potencia a los 0.6 segundos del Benchmark E.

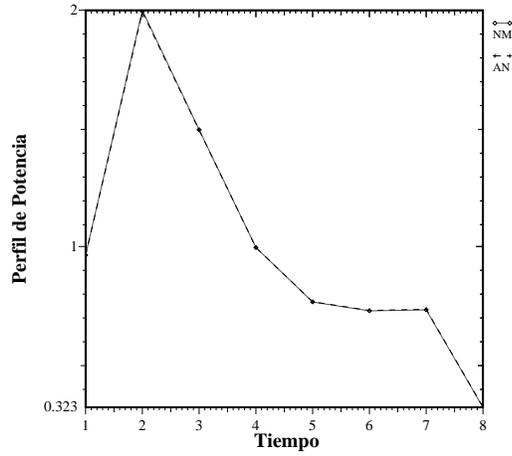


Fig. 4.24.- Perfil de potencia a los 0.8 segundos del Benchmark E.

Como se observa, el acuerdo obtenido es excelente, tanto en la evolución de la potencia como en el perfil de potencia.

En las figuras de la 4.24 a la 4.26 se muestra la evolución de los parámetros w_P , w_{ϕ_1} , w_{ϕ_2} y w_{pe}

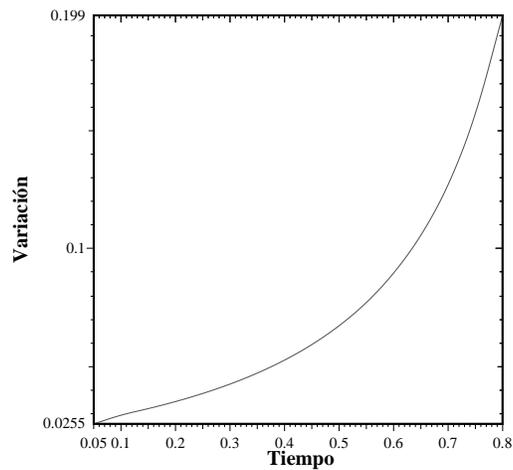


Fig. 4.25.- Evolución de w_P para el Benchmark E.

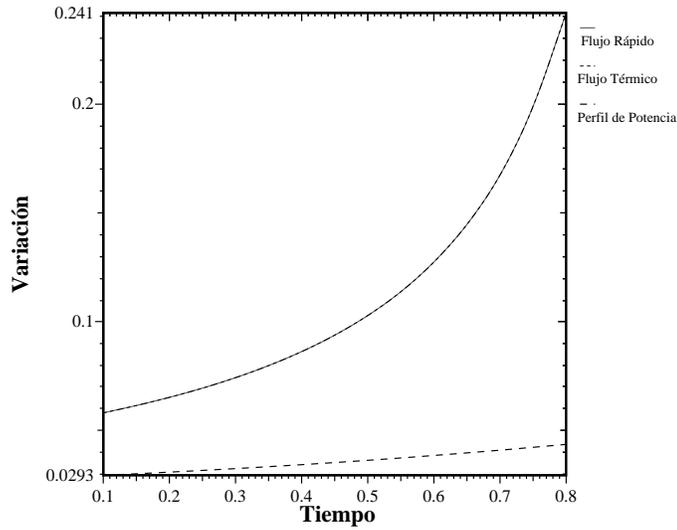


Fig. 4.26.-Evolución de los parámetros w_{ϕ_1} , w_{ϕ_2} y $w_{p\epsilon}$, para el Benchmark E.

A diferencia de los casos anteriores, en este problema los parámetros w -s no alcanzan un valor asintótico.

A la vista de los resultados obtenidos en el estudio de todos estos problemas, podemos concluir que el método nodal modal proporciona buenos resultados, pero es un método costoso desde el punto de vista computacional, ya que es necesario ir calculando los Modos Lambda asociados a distintas configuraciones del reactor para poder realizar la integración. Por tanto, no va a ser viable abordar con este método el estudio de problemas bidimensionales y tridimensionales, especialmente en el caso en que la perturbación realizada sobre el reactor sea dependiente del tiempo.

Capítulo 5

Integración de la ecuación de la difusión dependiente del tiempo. Discretización temporal

Como se ha visto en el capítulo anterior, para utilizar el método nodal modal para la integración de la ecuación de la difusión, es necesario ir calculando los Modos Lambda asociados a distintas configuraciones del reactor a lo largo del tiempo. Éste es un proceso que tiene asociado un gran coste computacional, especialmente, si se consideran problemas con geometrías bidimensionales y tridimensionales y perturbaciones del reactor dependientes del tiempo. Por lo tanto, para abordar este tipo de problemas se han desarrollado otro tipo de métodos basados en la discretización temporal de las ecuaciones de la difusión.

Como en el caso del método nodal modal, el primer paso para el desarrollo de estos métodos consiste en utilizar el método de colocación nodal para discretizar la parte espacial de las ecuaciones y reducir el sistema de ecuaciones en derivadas parciales inicial, a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de gran dimensión. Estas ecuaciones diferenciales, presentan problemas de rigidez [48], por lo que, para la discretización temporal de estas ecuaciones, es necesario recurrir a métodos Backward en diferencias, que son métodos implícitos.

En este capítulo, primero se estudiará un método en diferencias hacia atrás

(Backward) de primer orden con paso variable, a continuación, se revisarán los métodos en diferencias hacia atrás de orden superior, desarrollando un algoritmo combinado que permite ir aumentando el paso de tiempo para la integración. Por último, se desarrollará una modificación de la aproximación Cuasi-Estática [49] adaptándola a la discretización espacial realizada mediante el método de colocación nodal [50], y se estudiará el funcionamiento de estos métodos resolviendo los problemas unidimensionales Benchmark B y Benchmark E que se han tratado en el capítulo anterior, el problema bidimensional correspondiente al reactor de Seed-Blanket y el reactor tridimensional de Langenbuch.

5.1 Métodos en Diferencias Hacia Atrás

Se parte de las ecuaciones obtenidas tras aplicar el método de colocación nodal a las ecuaciones de la difusión neutrónica en la aproximación de dos grupos de energía. Estas ecuaciones son de la forma

$$[v^{-1}]\dot{\psi} + L\psi = (1 - \beta)M\psi + \sum_{k=1}^K \lambda_k C_k X \quad , \quad (5.1)$$

$$\dot{C}_k = \beta_k [M_{11} \ M_{12}] \psi - \lambda_k C_k \quad , \quad (5.2)$$

donde ψ y C_k son vectores cuyas componentes son los coeficientes de Legendre de los desarrollos de ϕ y C_k en cada nodo, y recordemos además que L , M , y $[v^{-1}]$ son matrices con la siguiente estructura a bloques

$$L = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ -L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} , \quad M = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} , \quad [v^{-1}] = \begin{bmatrix} v_1^{-1} & 0 \\ 0 & v_2^{-1} \end{bmatrix} .$$

El método de colocación nodal utilizado da lugar a bloques L_{11} y L_{22} simétricos y diagonal dominantes.

Para integrar la ecuación (5.2) desde un instante de tiempo t_n al instante t_{n+1} , suponemos que $[M_{11} M_{12}] \psi$ varía linealmente entre estos instantes y la ecuación (5.2) se aproxima mediante la ecuación

$$\dot{C}_k = -\lambda_k C_k + \beta_k [M_{11} \ M_{12}]^n \psi^n + \frac{\beta_k}{\Delta t_n} (t - t_n) \{ [M_{11} \ M_{12}]^{n+1} \psi^{n+1} - [M_{11} \ M_{12}]^n \psi^n \} \quad , \quad (5.3)$$

siendo $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$.

Integrando la ecuación (5.3), tenemos que la solución C_k en t_{n+1} se puede expresar como

$$C_k^{n+1} = C_k^n e^{-\lambda_k \Delta t_n} + \beta_k (a_k [M_{11} \ M_{12}]^n \psi^n + b_k [M_{11} \ M_{12}]^{n+1} \psi^{n+1}) \quad , \quad (5.4)$$

donde C_k^n es el valor de C_k en t_n y los coeficientes a_k y b_k vienen dados por

$$a_k = \frac{(1 + \lambda_k \Delta t_n)(1 - e^{-\lambda_k \Delta t_n})}{\lambda_k^2 \Delta t_n} - \frac{1}{\lambda_k} \quad , \quad b_k = \frac{\lambda_k \Delta t_n - 1 + e^{-\lambda_k \Delta t_n}}{\lambda_k^2 \Delta t_n} \quad .$$

Para integrar la ecuación (5.1), en primer lugar, realizamos una transformación de frecuencias en cada intervalo temporal, de la forma [45]

$$\psi(t) = e^{w^n(t-t_n)} \varphi(t) \quad ,$$

donde se supone que w^n permanece constante en el intervalo $[t_n, t_{n+1}]$. De este modo, la ecuación (5.1) pasa a ser

$$[v^{-1}](w^n e^{w^n(t-t_n)} \varphi + e^{w^n(t-t_n)} \frac{d\varphi}{dt}) + L e^{w^n(t-t_n)} \varphi = (1-\beta) M e^{w^n(t-t_n)} \varphi + \sum_{k=1}^K \lambda_k C_k X \quad , \quad (5.5)$$

para $t \in [t_n, t_{n+1}]$.

Como ya se ha comentado, esta ecuación presenta problemas de rigidez debido principalmente a que los elementos de la matriz diagonal $[v^{-1}]$ son muy pequeños, esto hace que para su integración sea necesario recurrir a los métodos Backward en diferencias. Pasaremos seguidamente a describir brevemente en qué consisten estos métodos.

Dada una ecuación diferencial ordinaria de primer orden, de la forma

$$\dot{U}(t) = f(t, U(t)) \quad ,$$

un método en diferencias hacia atrás (Backward) general de m pasos para la resolución de esta ecuación, consiste en una ecuación en diferencias de la forma [48]

$$U(t_{n+1}) + \alpha_1 U(t_n) + \alpha_2 U(t_{n-1}) + \dots + \alpha_m U(t_{n+1-m}) = h \beta_0 f(t_{n+1}, U(t_{n+1})) \quad , \quad (5.6)$$

donde $h = t_{n+1} - t_n$ es el paso de integración, $\beta_0 > 0$, y $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ se eligen de forma que se minimice el error de truncamiento. En la tabla 5.1 se muestran posibles elecciones de los parámetros del método en diferencias hacia atrás para distintos valores de m .

Tabla 5.1.- Coeficientes del los métodos Backward.

m	β_0	α_1	α_2	α_3	α_4
1	1	- 1			
2	$\frac{2}{3}$	$-\frac{4}{3}$	$\frac{1}{3}$		
3	$\frac{6}{11}$	$-\frac{18}{11}$	$\frac{9}{11}$	$-\frac{2}{11}$	
4	$\frac{12}{25}$	$-\frac{48}{25}$	$\frac{36}{25}$	$-\frac{16}{25}$	$\frac{3}{25}$

Con esta elección de los parámetros, los métodos Backward obtenidos son estables [48]. Los métodos Backward son métodos implícitos, y su utilización para la integración de un sistema de ecuaciones diferenciales implica la necesidad de resolver un sistema de ecuaciones lineales en cada paso de integración, pero es imposible construir un método explícito que funcione bien para el tratamiento de problemas con rigidez [48].

Pasaremos a desarrollar un método en diferencias hacia atrás de primer orden para la integración de la ecuación (5.5).

5.1.1 Método en diferencias hacia atrás de primer orden

Se parte de la ecuación (5.5) y se discretiza utilizando un método en diferencias hacia atrás de un paso, llegando a

$$[v^{-1}]\{w^n \psi^{n+1} + \frac{1}{\Delta t_n} (\psi^{n+1} - e^{w^n \Delta t_n} \psi^n)\} + L^{n+1} \psi^{n+1} = (1-\beta)M^{n+1} \psi^{n+1} + \sum_{k=1}^K \lambda_k C_k^{n+1} X \quad (5.7)$$

Considerando la ecuación (5.4) y la estructura de las matrices L y M , podemos

expresar (5.7) como el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \psi^{n+1} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{bmatrix} \psi^n + \sum_{k=1}^K \lambda_k e^{-\lambda_k \Delta t_n} \begin{bmatrix} C_k^n \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (5.8)$$

donde

$$\begin{aligned} T_{11} &= v_1^{-1} \left(w^n + \frac{1}{\Delta t_n} \right) + L_{11}^{n+1} - (1 - \beta) M_{11}^{n+1} - \sum_{k=1}^K \lambda_k \beta_k b_k M_{11}^{n+1}, \\ T_{12} &= -(1 - \beta) M_{12}^{n+1} - \sum_{k=1}^K \lambda_k \beta_k b_k M_{12}^{n+1}, \\ T_{21} &= -L_{21}^{n+1}, \\ T_{22} &= v_2^{-1} \left(w^n + \frac{1}{\Delta t_n} \right) + L_{22}^{n+1}, \\ R_{11} &= v_1^{-1} \frac{e^{w^n \Delta t_n}}{\Delta t_n} + \sum_{k=1}^K \lambda_k \beta_k a_k M_{11}^n, \\ R_{12} &= \sum_{k=1}^K \lambda_k \beta_k a_k M_{12}^n, \\ R_{22} &= v_2^{-1} \frac{e^{w^n \Delta t_n}}{\Delta t_n}. \end{aligned}$$

El sistema de ecuaciones lineales obtenido, (5.8), es un sistema cuya dimensión es muy grande y, por tanto, para su resolución será recomendable utilizar un método iterativo. Tan sólo en problemas cuya geometría es unidimensional es posible abordar eficientemente su resolución mediante un método directo como la descomposición LU de la matriz del sistema. Además, hemos de destacar que, debido a la utilización del método de colocación nodal para la discretización de la parte espacial de las ecuaciones, los bloques T_{11} , T_{12} , T_{21} , T_{22} , R_{11} , R_{12} y R_{22} , son simétricos, en particular, T_{11} y T_{22} son diagonal dominantes y definidos positivos, mientras que la matriz total del sistema, T , no posee ninguna de estas propiedades. De este modo, si se utilizan los métodos iterativos usuales con la matriz T , éstos presentan problemas de convergencia, por ello, para la resolución del sistema (5.8), se ha desarrollado el algoritmo iterativo a bloques que pasamos a describir seguidamente.

En primer lugar reescribimos el sistema en la forma

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \end{bmatrix} ,$$

donde

$$\begin{aligned} E_1 &= R_{11}\psi_1^n + R_{12}\psi_2^n + \sum_{k=1}^K \lambda_k e^{-\lambda_k \Delta t_n} C_k^n , \\ E_2 &= R_{22}\psi_2^n , \end{aligned}$$

y

$$\begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_1^{n+1} \\ \psi_2^{n+1} \end{bmatrix}$$

es el vector incógnita.

Una vez hecho esto, el algoritmo utilizado para resolver el sistema tiene en cuenta la estructura a bloques del sistema y consta de los siguientes pasos

1.- Resolver el sistema

$$T_{11}\psi_1^1 = E_1 - T_{12}\psi_2^0 .$$

En este primer paso, tomamos $\psi_2^0 = \psi_2^n$.

2.- Resolver el sistema

$$T_{22}\psi_2^1 = E_2 - T_{21}\psi_1^1 .$$

Una vez se ha terminado esta iteración, se utiliza un proceso de extrapolación, pasando a

3.- Resolver el sistema

$$T_{11}\psi_1^{l+1} = E_1 - T_{12}(1.5\psi_2^l - 0.5\psi_2^{l-1}) , \quad l = 1, 2, \dots .$$

4.- Resolver el sistema

$$T_{22}\psi_2^{l+1} = E_2 - T_{21}(1.5\psi_1^{l+1} - 0.5\psi_1^l) , \quad l = 1, 2, \dots .$$

5.- Se comprueba el criterio de parada

$$\| \psi_1^{l+1} - \psi_1^l \| < \text{tol} \quad \text{y} \quad \| \psi_2^{l+1} - \psi_2^l \| < \text{tol}$$

Si no se satisfacen estas condiciones, se hace $l = l + 1$ y se repite el proceso desde el paso **3**.

Si se satisfacen estas condiciones se hace $\psi_1^{n+1} = \psi_1^{l+1}$ y $\psi_2^{n+1} = \psi_2^{l+1}$.

Con este método sólo es necesario resolver sistemas lineales asociados a las matrices T_{11} y T_{22} , que son simétricas, definidas positivas, diagonal dominantes y dispersas, por tanto, para la resolución de estos sistemas se puede utilizar de forma efectiva un método como el del gradiente conjugado que aproveche la estructura dispersa de las matrices.

Por otra parte, podría pensarse que se mejoraría el proceso si en los pasos **2** y **3** del algoritmo se introdujesen factores de extrapolación generales ω y η , pasando a resolver los sistemas

$$\begin{aligned} T_{11}\psi_1^{l+1} &= E_1 - T_{12}(\omega\psi_2^l + (1-\omega)\psi_2^{l-1}) \quad , \\ T_{22}\psi_2^{l+1} &= E_2 - T_{21}(\eta\psi_1^{l+1} + (1-\eta)\psi_1^l) \quad , \end{aligned}$$

previo cálculo de los factores ω y η imponiendo que se minimice la norma al cuadrado de los correspondientes residuos. Pero de acuerdo con la pruebas realizadas, se tiene que el coste adicional que supone el cálculo de estos factores no justifica la pequeña mejoría que se consigue en el número de iteraciones necesarias para obtener la solución de los sistemas.

Por último, al final de cada paso de tiempo, Δt_n , se reconstruyen los flujos neutrónicos y se actualiza el parámetro w^n utilizando la expresión

$$w^{n+1} = \frac{1}{\Delta t_n} \ln \left(\frac{P(t_{n+1})}{P(t_n)} \right) \quad ,$$

donde $P(t)$ es la potencia en el instante t .

El método en diferencias hacia atrás de un paso que se ha desarrollado permite realizar *cambios en el paso de integración* para cada paso de tiempo. Para actualizar el paso de tiempo se utiliza la expresión

$$\Delta t_{n+1} = \min \left\{ \frac{f_1}{2w_{phi}}, \Delta t_{us.} \right\} \quad ,$$

donde f_1 es una constante elegida normalmente como 0.1, Δt_{us} es el paso de tiempo máximo permitido por el usuario y w_{phi} viene dado por

$$w_{phi} = \max \left\{ \text{abs} \left(\ln \left(\frac{\bar{\phi}_{g,k}(t_{n+1})}{\bar{\phi}_{g,k}(t_n)} \right) \right) \right\} \quad g = 1, 2 ; \quad k = 1, \dots, N \quad ,$$

donde $\bar{\phi}_{g,k}(t_n)$ es el flujo neutrónico medio del grupo g en el nodo k en el instante t_n . Esta elección implica que, si se supone un comportamiento exponencial del flujo, la componente del flujo que cambie más rápidamente durante un paso de tiempo, lo haga en una proporción aproximadamente de $f_1/2$. Al mismo tiempo, el nuevo paso de tiempo viene restringido por el paso de tiempo máximo permitido por el usuario para garantizar la estabilidad del esquema. Hay que tener en cuenta que, aunque el método implícito utilizado sea teóricamente estable, para hacer uso del mismo hay que resolver el sistema (5.8) mediante un método iterativo, y la solución alcanzada con el método iterativo depende del punto inicial de partida y este punto depende, a su vez, del paso de integración utilizado, Así, la utilización de un paso de integración grande puede dar lugar a que la solución del sistema de ecuaciones lineales alcanzada venga afectada de un error que, al propagarse, hace que se desestabilice el esquema.

Una vez resuelto el sistema (5.8), para seguir la integración se actualiza el valor de C_k mediante la ecuación (5.4) y se repite todo el proceso para el siguiente paso de tiempo.

5.1.2 Métodos en diferencias hacia atrás de orden superior

El método en diferencias de orden uno tiene asociado un error de truncamiento proporcional al paso de integración, y esto implica que es necesario utilizar pasos de integración muy pequeños para no cometer un error muy grande en la resolución del problema. Será más adecuado pues, utilizar métodos en diferencias hacia atrás de orden superior para la integración de la ecuación (5.5), ya que permiten el uso de pasos de integración mayores, por ser el error de truncamiento de estos métodos proporcional a potencias de del paso de integración [48], que denominaremos h para diferenciarlo del método de un paso donde le hemos llamado Δt_n , ya que mientras en el método de un paso es posible ir variando el paso de integración en cada paso de tiempo, en los métodos de orden superior el paso de integración ha de permanecer constante.

En adelante, nos centraremos en el método en diferencias hacia atrás de un paso y los métodos de 2 y 4 pasos para construir un algoritmo combinado que nos permitirá utilizar pasos de integración más grandes.

Método en diferencias hacia atrás de 2 pasos

Se parte de la ecuación (5.5) y se discretiza mediante un método en diferencias hacia atrás de dos pasos, obteniendo la ecuación

$$[v^{-1}] \left(\psi^{n+1} - \frac{4}{3} e^{w^n(t_{n+1}-t_n)} \psi^n + \frac{1}{3} e^{w^n(t_{n+1}-t_{n-1})} \psi^{n-1} \right) = \frac{2}{3} h \left(-w^n [v^{-1}] \psi^{n+1} - L^{n+1} \psi^{n+1} + (1 - \beta) M^{n+1} \psi^{n+1} + \sum_{k=1}^K \lambda_k C_k^{n+1} X \right),$$

que, teniendo en cuenta la ecuación (5.4), podemos agrupar en el sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \psi^{n+1} = \begin{bmatrix} R_{11}^1 & R_{12}^1 \\ 0 & R_{22}^1 \end{bmatrix} \psi^n + \begin{bmatrix} R_{11}^2 & 0 \\ 0 & R_{22}^2 \end{bmatrix} \psi^{n-1} + \frac{2}{3} \sum_{k=1}^K \lambda_k e^{-\lambda_k h} \begin{bmatrix} C_k^n \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (5.9)$$

donde

$$\begin{aligned} T_{11} &= v_1^{-1} \left(\frac{2}{3} w^n + \frac{1}{h} \right) + \frac{2}{3} L_{11}^{n+1} - \frac{2}{3} (1 - \beta) M_{11}^{n+1} - \frac{2}{3} \sum_{k=1}^K \lambda_k \beta_k b_k M_{11}^{n+1}, \\ T_{12} &= -\frac{2}{3} (1 - \beta) M_{12}^{n+1} - \frac{2}{3} \sum_{k=1}^K \lambda_k \beta_k b_k M_{12}^{n+1}, \\ T_{21} &= -\frac{2}{3} L_{21}^{n+1}, \\ T_{22} &= v_2^{-1} \left(\frac{1}{h} + \frac{2}{3} w^n \right) + \frac{2}{3} L_{22}^{n+1}, \\ R_{11}^1 &= \frac{4}{3} \frac{1}{h} v_1^{-1} e^{w^n h} + \frac{2}{3} \sum_{k=1}^K \lambda_k a_k \beta_k M_{11}^n, \\ R_{12}^1 &= \frac{2}{3} \sum_{k=1}^K \lambda_k a_k \beta_k M_{12}^n, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R_{22}^1 &= \frac{4}{3} \frac{1}{h} v_2^{-1} e^{w^n h} \quad , \\
R_{11}^2 &= -\frac{1}{3} \frac{1}{h} v_1^{-1} e^{w^n 2h} \quad , \\
R_{22}^2 &= -\frac{1}{3} \frac{1}{h} v_2^{-1} e^{w^n 2h} \quad .
\end{aligned}$$

Para utilizar el método de orden 2 hay que resolver el sistema (5.9) para cada paso de integración, y es necesario partir del valor de la solución en dos puntos, ψ^0 y ψ^1 .

Método en diferencias hacia atrás de 4 pasos

Realizamos ahora una discretización, mediante un método en diferencias hacia atrás de orden 4 de la ecuación (5.5) y obtenemos la ecuación

$$\begin{aligned}
&\frac{[v^{-1}]}{h} \left(\psi^{n+1} - \frac{48}{25} e^{w^n h} \psi^n + \frac{36}{25} e^{w^n h} e^{-w^n(t_{n-1}-t_n)} \psi^{n-1} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{16}{25} e^{w^n h} e^{w^n(t_{n-2}-t_n)} \psi^{n-2} + \frac{3}{25} e^{w^n h} e^{-w^n(t_{n-3}-t_n)} \psi^{n-3} \right) = \\
&= \frac{12}{25} \left(-[v^{-1}] w^n \psi^{n+1} - L^{n+1} \psi^{n+1} + (1 - \beta) M^{n+1} \psi^{n+1} + \sum_{k=1}^K \lambda_k C_k^{n+1} X \right) \quad ,
\end{aligned}$$

que, utilizando la ecuación (5.4), se puede reagrupar en un sistema de la forma

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \psi^{n+1} &= \begin{bmatrix} R_{11}^1 & R_{12}^1 \\ 0 & R_{22}^1 \end{bmatrix} \psi^n + \begin{bmatrix} R_{11}^2 & 0 \\ 0 & R_{22}^2 \end{bmatrix} \psi^{n-1} + \begin{bmatrix} R_{11}^3 & 0 \\ 0 & R_{22}^3 \end{bmatrix} \psi^{n-2} + \\
&+ \begin{bmatrix} R_{11}^4 & 0 \\ 0 & R_{22}^4 \end{bmatrix} \psi^{n-3} + \frac{12}{25} \sum_{k=1}^K \lambda_k e^{-\lambda_k h} \begin{bmatrix} C_k^n \\ 0 \end{bmatrix} \quad , \quad (5.10)
\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
T_{11} &= v_1^{-1} \left(\frac{12}{25} w^n + \frac{1}{h} \right) + \frac{12}{25} L_{11}^{n+1} - \frac{12}{25} (1 - \beta) M_{11}^{n+1} - \frac{12}{25} \sum_{k=1}^K \lambda_k \beta_k b_k M_{11}^{n+1} \quad , \\
T_{12} &= -\frac{12}{25} (1 - \beta) M_{12}^{n+1} - \frac{12}{25} \sum_{k=1}^K \lambda_k \beta_k b_k M_{12}^{n+1} \quad ,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{21} &= -\frac{12}{25}L_{21}^{n+1} \quad , \\
T_{22} &= v_2^{-1}\left(\frac{1}{h} + \frac{12}{25}w^n\right) + \frac{12}{25}L_{22}^{n+1} \quad , \\
R_{11}^1 &= \frac{48}{25}\frac{1}{h}v_1^{-1}e^{w^nh} + \frac{12}{25}\sum_{k=1}^K \lambda_k a_k \beta_k M_{11}^n \quad , \\
R_{12}^1 &= \frac{12}{25}\sum_{k=1}^K \lambda_k a_k \beta_k M_{12}^n \quad , \\
R_{22}^1 &= \frac{48}{25}\frac{1}{h}v_2^{-1}e^{w^nh} \quad , \\
R_{11}^2 &= -\frac{36}{25}\frac{1}{h}v_1^{-1}e^{w^n 2h} \quad , \\
R_{22}^2 &= -\frac{36}{25}\frac{1}{h}v_2^{-1}e^{w^n 2h} \quad . \\
R_{11}^3 &= \frac{16}{25}\frac{1}{h}v_1^{-1}e^{w^n 3h} \quad , \\
R_{22}^3 &= \frac{16}{25}\frac{1}{h}v_2^{-1}e^{w^n 3h} \quad . \\
R_{11}^4 &= -\frac{3}{25}\frac{1}{h}v_1^{-1}e^{w^n 4h} \quad , \\
R_{22}^4 &= -\frac{3}{25}\frac{1}{h}v_2^{-1}e^{w^n 4h} \quad .
\end{aligned}$$

Para utilizar el método Backward de orden 4, se ha de resolver el sistema (5.10) para cada paso de integración y es necesario partir del valor de la solución en cuatro puntos, ψ^0 , ψ^1 , ψ^2 y ψ^3 . Para resolver los sistemas (5.9) y (5.10) es conveniente utilizar el algoritmo iterativo a bloques que se ha desarrollado para el método Backward de un paso.

Algoritmo Combinado

A continuación, expondremos un algoritmo combinado que hace uso de los métodos Backward de orden 1, de orden 2 y orden 4 y que permite ir aumentando el paso de integración hasta un máximo impuesto por el usuario, (h_{\max}), que dependerá del comportamiento de cada problema en particular.

Para exponer el funcionamiento del algoritmo, nos basaremos en el siguiente

esquema

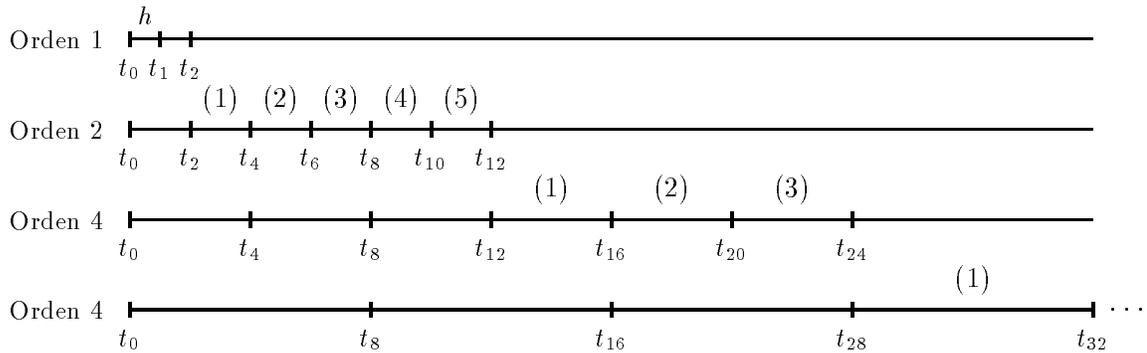


Fig. 5.1.- Esquema del Algoritmo Combinado.

En primer lugar, se parte del valor de la solución en el instante inicial, ψ^0 , y, mediante el método Backward de orden 1, se calcula la solución en los instantes t_1 y t_2 utilizando un paso de integración h . A continuación, tomando como puntos de partida los valores de la solución en los instantes t_0 y t_2 , se realizan 5 iteraciones con el método Backward de orden 2 usando un paso de integración $2h$. Posteriormente, tomando como puntos de partida los valores de la solución en los instantes t_0, t_4, t_8 y t_{12} se realizan 3 iteraciones mediante el método Backward de orden 4 usando un paso de integración $4h$. Una vez se ha hecho esto, es posible utilizar el método Backward de orden 4 tomando como puntos de partida los valores de la solución en los instantes t_0, t_8, t_{16} y t_{24} con lo que se consigue duplicar el paso de integración ($8h$). A partir de aquí, se siguen repitiendo bloques de tres iteraciones utilizando el método Backward de orden 4, lo cual, permite ir duplicando el paso de integración hasta un máximo h_{\max} , que dependerá de cada problema en concreto. Una vez se alcanza este paso de integración, se utiliza el método Backward de orden 4, basándose en los valores de la solución en los cuatro instantes anteriores consecutivos, hasta alcanzar el tiempo final.

5.2 Método Cuasi-Estático Mejorado

Para reducir el coste computacional a la hora de integrar la ecuación de la Difusión dependiente del tiempo, se ha desarrollado también una aproximación Cuasi-

Estática [49], [52].

Para el desarrollo de esta aproximación, se parte de las ecuaciones

$$[v^{-1}]\dot{\psi} + L\psi = (1 - \beta)M\psi + \sum_{k=1}^K \lambda_k C_k X \quad , \quad (5.11)$$

$$C_k^{n+1} = C_k^n e^{-\lambda_k \Delta t_n} + \beta_k (a_k [M_{11} \ M_{12}]^n \psi^n + b_k [M_{11} \ M_{12}]^{n+1} \psi^{n+1}) \quad , \quad (5.12)$$

con los coeficientes

$$a_k = \frac{(1 + \lambda_k \Delta t_n)(1 - e^{-\lambda_k \Delta t_n})}{\lambda_k^2 \Delta t_n} - \frac{1}{\lambda_k} \quad , \quad b_k = \frac{\lambda_k \Delta t_n - 1 + e^{-\lambda_k \Delta t_n}}{\lambda_k^2 \Delta t_n} \quad ,$$

y se hace una factorización de la forma

$$\psi(\vec{r}, t) = \mathcal{S}(\vec{r}, t)a(t) \quad , \quad (5.13)$$

donde $a(t)$ es una función dependiente sólo del tiempo, que denominaremos función de amplitud y que varía muy rápidamente con el tiempo durante el transitorio, y la función de forma, $\mathcal{S}(\vec{r}, t)$, cuya variación con el tiempo en el transitorio es menor que la de la función de amplitud.

Utilizando la factorización (5.13) en la ecuación (5.11) evaluada en el instante t_{n+1} , haciendo uso de la ecuación (5.12) y realizando la aproximación

$$\dot{S}(t_{n+1}) \approx \frac{S(t_{n+1}) - S(t_n)}{\Delta t_n} \quad , \quad (5.14)$$

obtenemos el sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} S^{n+1} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{bmatrix} S^n + \frac{1}{a^{n+1}} \sum_{k=1}^K \lambda_k e^{-\lambda_k \Delta t_n} \begin{bmatrix} C_k^n \\ 0 \end{bmatrix} \quad , \quad (5.15)$$

donde

$$\begin{aligned} T_{11} &= v_1^{-1} \left(\frac{1}{a^{n+1}} \frac{da}{dt} \Big|_{t_{n+1}} + \frac{1}{\Delta t_n} \right) + L_{11}^{n+1} - (1 - \beta) M_{11}^{n+1} - \sum_{k=1}^K \lambda_k \beta_k b_k M_{11}^{n+1} \quad , \\ T_{12} &= -(1 - \beta) M_{12}^{n+1} - \sum_{k=1}^K \lambda_k \beta_k b_k M_{12}^{n+1} \quad , \\ T_{21} &= -L_{21}^{n+1} \quad , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{22} &= v_2^{-1} \left(\frac{1}{a^{n+1}} \frac{da}{dt} \Big|_{t_{n+1}} + \frac{1}{\Delta t_n} \right) + L_{22}^{n+1} \quad , \\
R_{11} &= v_1^{-1} \frac{1}{\Delta t_n} + \frac{a^n}{a^{n+1}} \sum_{k=1}^K \lambda_k \beta_k a_k M_{11}^n \quad , \\
R_{12} &= \frac{a^n}{a^{n+1}} \sum_{k=1}^K \lambda_k \beta_k a_k M_{12}^n \quad , \\
R_{22} &= v_2^{-1} \frac{1}{\Delta t_n} \quad .
\end{aligned}$$

Para obtener el valor de la función de forma en cada paso de integración, se resuelve el sistema (5.15) utilizando el mismo método iterativo a bloques que se ha utilizado en los métodos en diferencias hacia atrás. El sistema depende de los valores de la función de amplitud y de su derivada en los distintos instantes de tiempo, por ello, es necesario obtener una ecuación que nos proporcione la evolución de la función $a(t)$. Para ello, partimos de la ecuación (5.11) y la multiplicamos por la transpuesta de un vector de peso S^* , obteniendo

$$S^{*T}[v^{-1}](S\dot{a} + \dot{S}a) + S^{*T}LSa = (1 - \beta)(S^{*T}MS)a + \sum_{k=1}^K \lambda_k (S^{*T}C_k X) \quad . \quad (5.16)$$

Normalmente, como vector de peso se elige la función de forma asociada al flujo adjunto, que se reconstruye a partir de la función de forma como [25], [53]

$$S^* = \begin{bmatrix} S_1^* \\ S_2^* \end{bmatrix} \quad ,$$

donde $S_1^* = S_1$ y las componentes de S_2^* vienen dadas por

$$S_{2_i}^* = \frac{\nu \Sigma_{f2} S_{1_i} S_{2_i}}{S_{1_i} \Sigma_{12} - S_{2_i} \Sigma_{a2}} \quad ,$$

si $\Sigma_{f1,2} \neq 0$ y

$$S^* = \begin{bmatrix} S_1^* \\ S_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \frac{(\Sigma_{a1} + \Sigma_{12}) D_2 / \Sigma_{a2}}{\Sigma_{12} (D_2 / \Sigma_{a2} + D_1 / (\Sigma_{a1} + \Sigma_{12}))} \end{bmatrix} \quad ,$$

si $\Sigma_{f1,2} = 0$.

Se supone que la función S permanece constante en el intervalo $[t_n, t_{n+1}]$, tomando el valor $S(t_n)$, aunque L y M pueden variar en este intervalo de tiempo.

Si definimos

$$\begin{aligned} b_1 &= S^{*T}[v^{-1}]S(t_n) \quad , \\ b_2 &= S^{*T}LS(t_n) \quad , \\ b_3 &= S^{*T}MS(t_n) \quad , \\ b_{1\text{ant}} &= S^{*T}(t_n)[v^{-1}]S(t_{n-1}) \quad , \\ \kappa_k &= \frac{S^{*T}C_kX}{b_1} \quad , \end{aligned}$$

y aproximamos \dot{S} mediante la relación (5.14), la ecuación (5.16) en el intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ se expresa como

$$\dot{a} + \left(\frac{b_1 - b_{1\text{ant}}}{b_1 \Delta t_{n-1}} + \frac{b_2}{b_1} - (1 - \beta) \frac{b_3}{b_1} \right) a = \sum_{k=1}^K \lambda_k \kappa_k \quad (5.17)$$

donde los coeficientes b_2 y b_3 dependen de tiempo al hacerlo L y M .

La ecuación para la amplitud de precursores, κ_k , se obtiene a partir de la ecuación (5.2) y tiene la forma

$$\dot{\kappa}_k = \beta_k \frac{b_3}{b_1} a - \lambda_k \kappa_k \quad . \quad (5.18)$$

Las ecuaciones (5.17) y (5.18) se resuelven para cada intervalo de tiempo $[t_n, t_{n+1}]$ utilizando la subrutina LSODE, teniendo en cuenta que los coeficientes b_2 y b_3 se deben actualizar cada cierto intervalo de tiempo, que hemos denominado ‘tiempo de actualización feedback’, y debe ser mayor o igual que el paso de integración utilizado por esta subrutina. Una vez se ha obtenido la solución de estas ecuaciones, se resuelve el sistema (5.15) y se repite el proceso para el próximo intervalo de tiempo.

Al igual que el método Backward de un paso, el método Cuasi-Estático permite cambios en el paso de tiempo de integración, que hemos denominado ‘paso de tiempo de forma’. Para actualizar este paso de tiempo se utiliza la expresión

$$\Delta t_{n+1} = \text{mín} \left\{ \frac{f_1}{2w_{\text{forma}}}, \Delta t_{\text{forma-us.}} \right\} \quad ,$$

donde f_1 es una constante que normalmente se elige como 0.1, $\Delta t_{\text{forma-us.}}$ es el ‘paso de tiempo de forma’ máximo permitido por el usuario, y w_{forma} viene dada por

$$w_{\text{forma}} = \text{máx} \left\{ \text{abs} \left(\ln \left(\frac{\bar{S}_{g,k}(t_{n+1})}{\bar{S}_{g,k}(t_n)} \right) \right) \right\} \quad g = 1, 2; \quad k = 1, \dots, N \quad ,$$

siendo $\bar{S}_{g,k}$ la función de forma promediada espacialmente en el nodo k .

5.3 Resultados Numéricos

5.3.1 Problemas unidimensionales

Para comprobar el funcionamiento de este tipo de métodos, utilizaremos el método Backward de un paso para resolver los problemas Benchmark B y Benchmark E, que hemos expuesto en el capítulo anterior.

Benchmark B

En las figuras de la 5.2 a la 5.6 se muestran los resultados obtenidos, mediante el método Backward de un paso (Back. 1), para la evolución de la potencia en el reactor, así como el perfil de potencia en los instantes 0.0005 seg., 0.001 seg., 0.003 seg., y 0.1 seg., comparándolos con los resultados obtenidos mediante un método Analítico Nodal (AN) [27]. Los cálculos se han realizado utilizando tres polinomios en los desarrollos del método de colocación nodal, e imponiendo un paso máximo $\Delta t_{\text{us.}} = 0.0001$ seg.

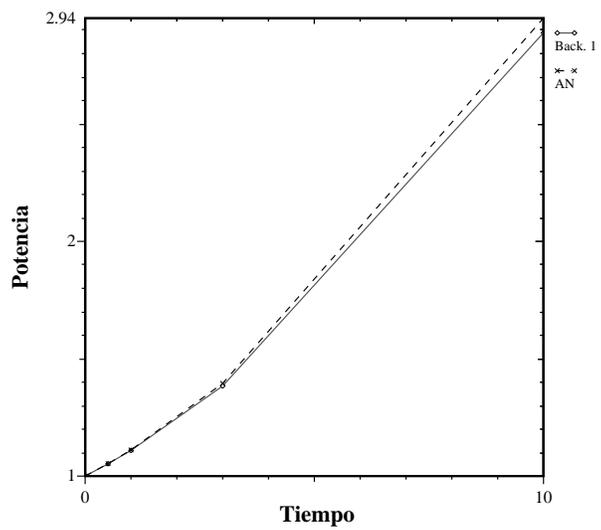


Fig. 5.2.- Evolución de la potencia para el Benchmark B.

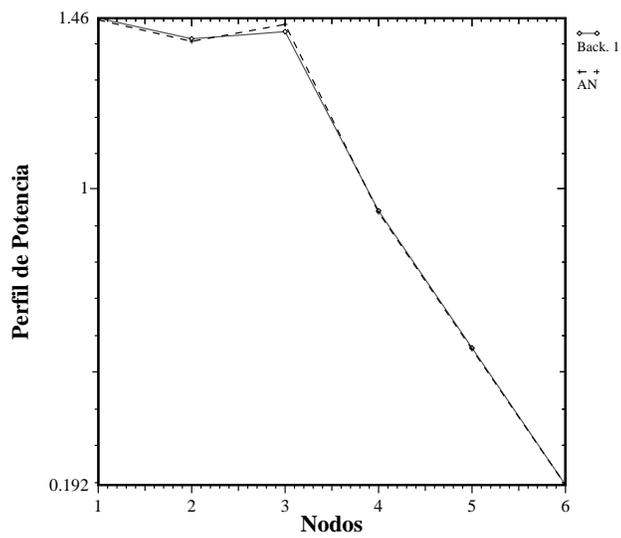


Fig. 5.3.- Perfil de potencia a los 0.0005 segundos para el Benchmark B.

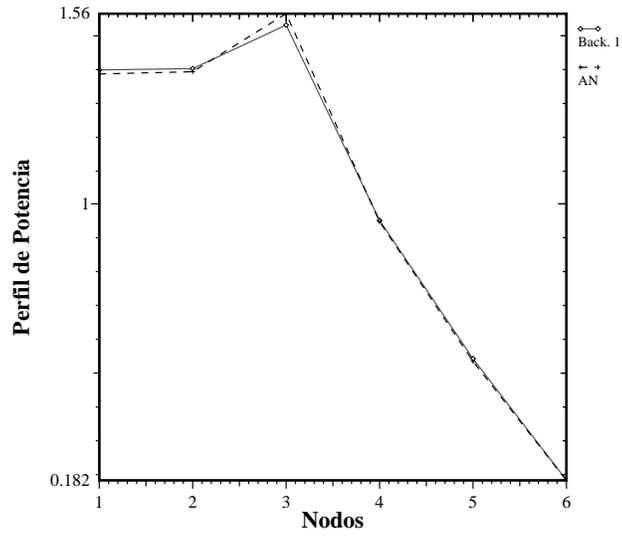


Fig. 5.4.- Perfil de potencia a los 0.001 segundos para el Benchmark B.

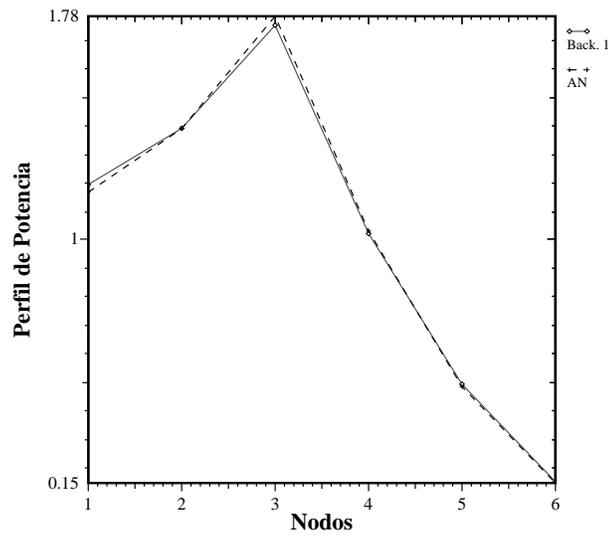


Fig. 5.5.- Perfil de potencia a los 0.003 segundos para el Benchmark B.

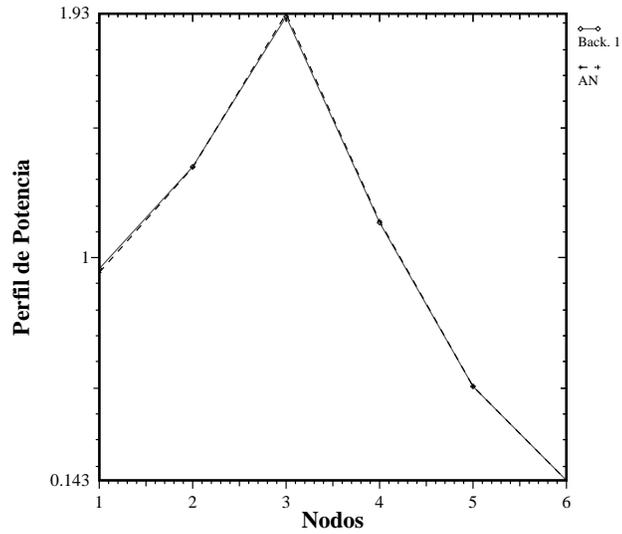


Fig. 5.6.- Perfil de potencia a los 0.1 segundos para el Benchmark B.

Benchmark E

En las figuras de la 5.7 a la 5.11 se muestran los resultados obtenidos para el Benchmark E, de la evolución de la potencia y los perfiles de potencia en los instantes 0.2 seg., 0.4 seg., 0.6 seg., y 0.8 seg., utilizando el método Backward de un paso (Back. 1) y se comparan con los resultados obtenidos mediante el método Analítico Nodal (AN) [27]. Al igual que en el problema anterior, los cálculos se han realizado utilizando tres polinomios en los desarrollos del método de colocación nodal, e imponiendo un paso máximo $\Delta t_{us.} = 0.01$ seg.

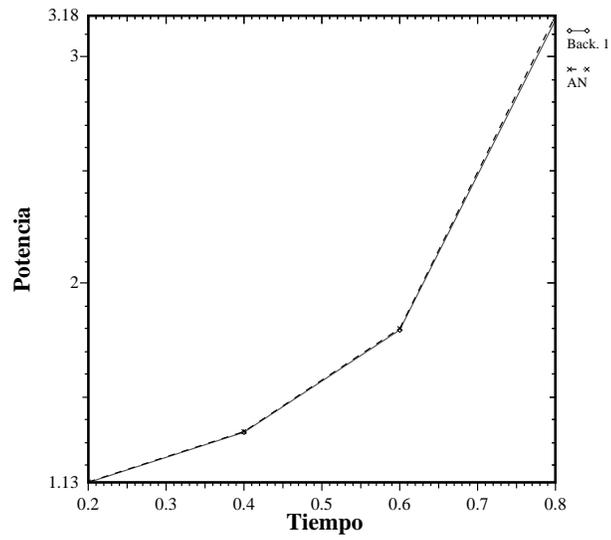


Fig. 5.7.- Evolución de la potencia para el Benchmark E.

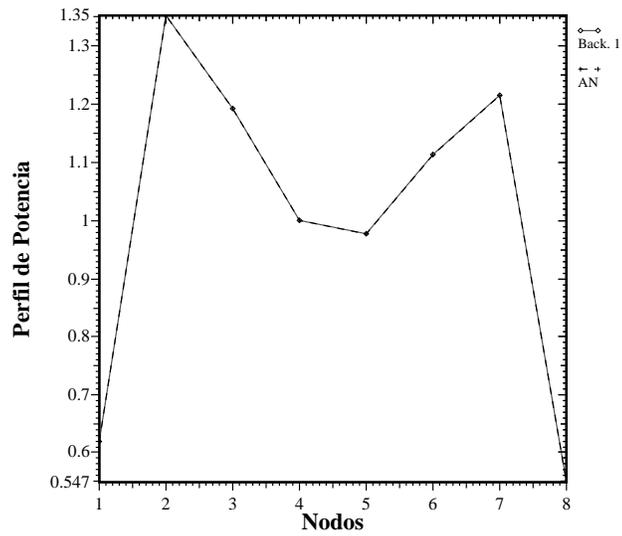


Fig. 5.8.- Perfil de potencia a los 0.2 segundos para el Benchmark E.

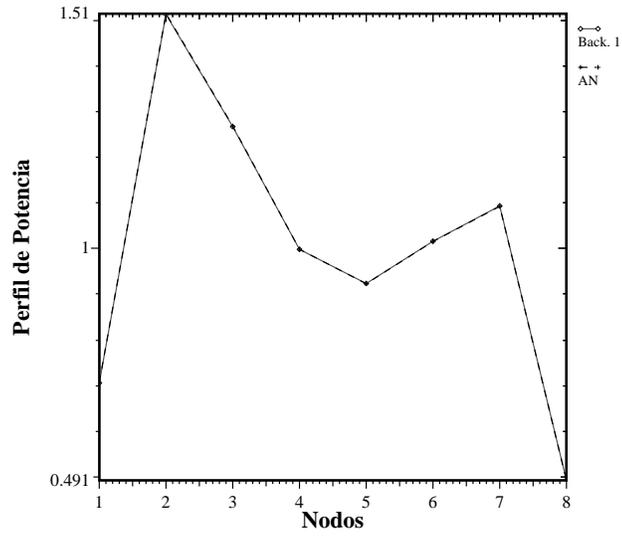


Fig. 5.9.- Perfil de potencia a los 0.4 segundos para el Benchmark E.

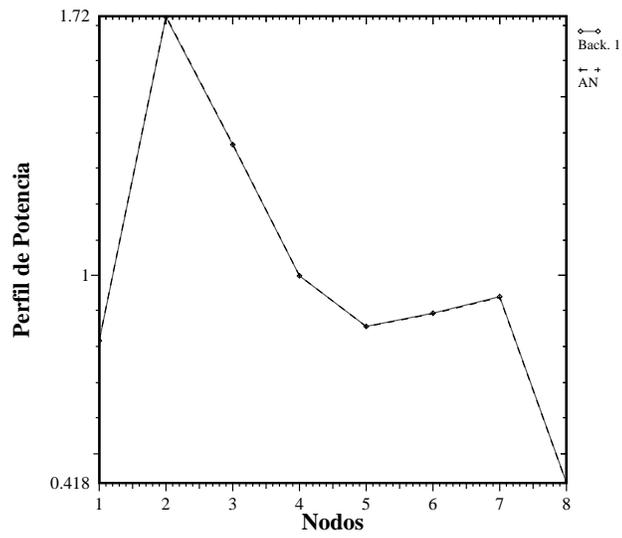


Fig. 5.10.- Perfil de potencia a los 0.6 segundos para el Benchmark E.

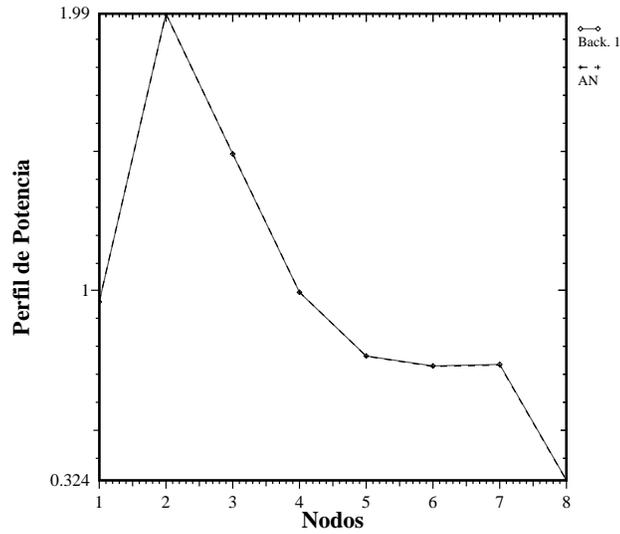


Fig. 5.11.- Perfil de potencia a los 0.8 segundos para el Benchmark E.

Observamos pues, que se obtienen buenos resultados de forma rápida utilizando el método Backward de un paso, tanto en el problema Benchmark B, donde se realiza una perturbación instantánea del reactor, como en el Benchmark E, donde la perturbación realizada depende del tiempo.

5.3.2 Problemas Bidimensionales

Como problema con geometría bidimensional, se abordará el estudio de dos transitorios asociados a un reactor simplificado, que hemos denominado reactor Seed-Blanket, y tiene simetría 1/4. En este reactor se distinguen tres tipos de materiales cuya distribución en su interior viene dada por la figura 5.12

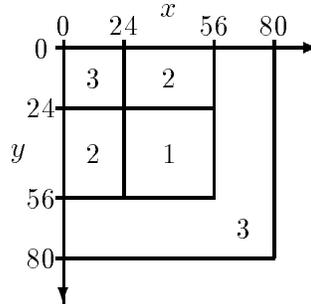


Fig. 5.12.- Cuadrante del reactor Seed-Blanket.

y cuyas secciones eficaces se recogen en la tabla 5.2.

Tabla 5.2.- Secciones eficaces para el problema Seed-Blanket

Región	Grupo	D_g (cm)	Σ_{ag} (cm ⁻¹)	$\nu\Sigma_{fg}$	Σ_{12}
1	1	1.4	0.01	0.007	0.01
	2	0.4	0.15	0.2	
2	1	1.4	0.01	0.007	0.01
	2	0.4	0.15	0.2	
3	1	1.3	0.008	0.003	0.01
	2	0.5	0.05	0.06	

$\frac{1}{v_1}$	$\frac{1}{v_2}$
10^{-5}	10^{-7}

Se ha supuesto además, que hay un grupo de precursores de neutrones cuyos parámetros son

$$\beta_1 = 0.0064 , \quad \lambda_1 = 0.08 \quad .$$

Este problema es similar al reactor TWIGL [54], [45], pero se han cambiado los parámetros lambda y beta de los precursores.

Para su estudio, se ha dividido el reactor en 8×8 nodos de 10 cm. \times 10 cm. y se han escogido dos transitorios particulares. El primero es una mezcla de las

perturbaciones de salto y de rampa y el segundo es una perturbación en rampa, sin neutrones diferidos. Ambas perturbaciones se han realizado sobre la sección eficaz de absorción del grupo térmico asociada al material 1.

Para el transitorio 1 hemos elegido Σ_{a2} como la siguiente función del tiempo

$$\Sigma_{a2}(t) = \begin{cases} 0.15 - \frac{0.0035}{0.2}t & t \leq 0.2 \\ 0.15 + \frac{0.0035}{2}t & 0.2 < t \leq 0.4 \\ 0.15 & t > 0.4 \end{cases}$$

donde el tiempo se mide en segundos.

Para el transitorio 2 hemos supuesto que $\beta_1 = 0$, $\lambda_1 = 0$ y que

$$\Sigma_{a2}(t) = 0.15 - \frac{0.0035}{2}t \quad .$$

Para calcular el valor inicial de las distintas magnitudes asociadas al reactor se ha utilizado el modo fundamental asociado a la distribución inicial de los materiales calculado mediante el programa MOD2D. Se ha obtenido para el autovalor un valor de 0.91318, a comparar con el valor de referencia de 0.91321, [54].

En la figura 5.13 se muestra el resultado obtenido para la evolución de la potencia en el transitorio 1 utilizando el método Backward de un paso, restringiendo el $\Delta t_{us.}$ a los valores $\Delta t_{us.} = 5 \cdot 10^{-3}$ (DIRECT-1), $\Delta t_{us.} = 1 \cdot 10^{-3}$ (DIRECT-2), $\Delta t_{us.} = 5 \cdot 10^{-4}$ (DIRECT-3), $\Delta t_{us.} = 1 \cdot 10^{-4}$ (DIRECT-4)

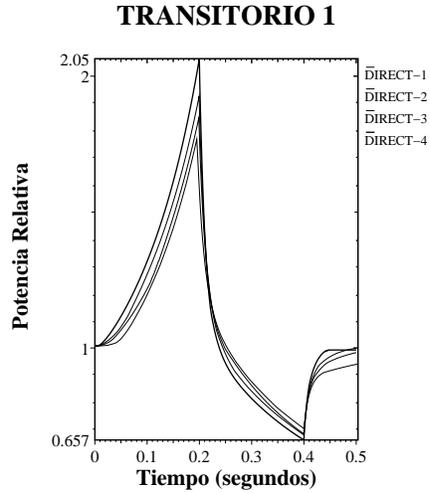


Fig. 5.13.- Evolución de la potencia para el Transitorio 1 utilizando el método Backward de un paso.

En la figura 5.14 se muestra el resultado obtenido para la evolución de la potencia para el transitorio 2 utilizando el método Backward de un paso, restringiendo el Δt_{us} , a los valores $\Delta t_{us} = 1 \cdot 10^{-3}$ (DIRECT-1), $\Delta t_{us} = 5 \cdot 10^{-4}$ (DIRECT-2), $\Delta t_{us} = 1 \cdot 10^{-4}$ (DIRECT-3), $\Delta t_{us} = 5 \cdot 10^{-5}$ (DIRECT-4) y $\Delta t_{us} = 1 \cdot 10^{-5}$ (DIRECT-5)

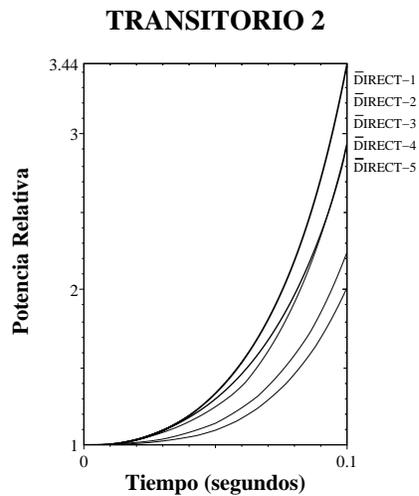


Fig. 5.14.- Evolución de la potencia para el Transitorio 2 utilizando el método Backward de un paso.

En ambos casos, se observa que los resultados dependen mucho del $\Delta t_{us.}$ que se imponga. Este efecto se observa mejor en un transitorio de potencia rápido como es el transitorio 2.

En la figura 5.15 se muestran los resultados obtenidos para la evolución de la potencia en el transitorio 1 utilizando el método Cuasi-Estático, restringiendo el $\Delta t_{forma-us.}$ a $\Delta t_{forma-us.} = 1 \cdot 10^{-1}$ (CUASI-ESTATIC 1) y $\Delta t_{forma-us.} = 1 \cdot 10^{-2}$ (CUASI-ESTATIC 2)

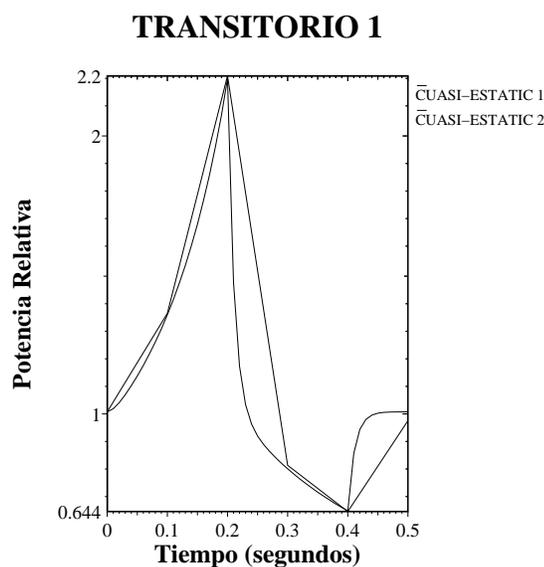


Fig. 5.15.- Evolución de la potencia para el Transitorio 1 utilizando el método Cuasi-Estático.

En la figura 5.16 se muestra la evolución de la potencia obtenida mediante el método Cuasi-Estático para el transitorio 2, restringiendo el $\Delta t_{forma-us.}$ a $\Delta t_{forma-us.} = 1 \cdot 10^{-2}$ (CUASI-ESTATIC 1), $\Delta t_{forma-us.} = 1 \cdot 10^{-3}$ (CUASI-ESTATIC 2) y $\Delta t_{forma-us.} = 5 \cdot 10^{-4}$ (CUASI-ESTATIC 3)

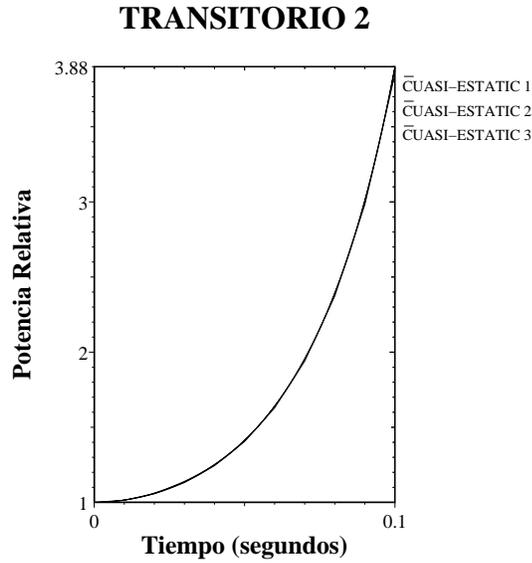


Fig. 5.16.- Evolución de la potencia para el Transitorio 2 utilizando el método Cuasi-Estático.

Se observa que los resultados obtenidos con el método Cuasi-Estático son muy similares a los obtenidos con el método Backward de un paso restringiendo el Δt_{us} al valor más pequeño. Hay que destacar también que los resultados dependen poco de la restricción del $\Delta t_{forma-us}$.

En la tabla 5.3 se muestra la comparación entre el método Backward de un paso y el método Cuasi-Estático para la distribución de la potencia a lo largo de la diagonal del reactor para el transitorio 1.

Tabla 5.3.- Distribución de potencia para el transitorio 1.
Comparación entre el método Backward y el método Cuasi-Estático.

tiempo	Distrib. de potencia nodal									
0	a) 1.260	1.322	1.201	2.187	1.870	1.380	0.946	0.260	0.092	0.01
	b)1.260	1.322	1.201	2.187	1.870	1.380	0.946	0.260	0.092	0.01
0.1	1.243	1.307	1.191	2.201	1.900	1.410	0.966	0.263	0.093	0.01
	1.245	1.309	1.192	2.201	1.898	1.407	0.964	0.262	0.093	0.01
0.2	1.259	1.322	1.199	2.183	1.871	1.384	0.953	0.264	0.094	0.01
	1.273	1.333	1.203	2.180	1.865	1.379	0.949	0.263	0.094	0.01
0.3	1.275	1.336	1.209	2.174	1.842	1.353	0.926	0.257	0.091	0.01
	1.272	1.333	1.207	2.175	1.847	1.358	0.930	0.257	0.091	0.01
0.4	1.269	1.330	1.206	2.187	1.860	1.366	0.931	0.255	0.090	0.01
	1.247	1.312	1.198	2.194	1.876	1.382	0.942	0.257	0.091	0.01
0.5	1.259	1.322	1.201	2.187	1.871	1.381	0.946	0.260	0.092	0.01
	1.259	1.322	1.200	2.187	1.871	1.381	0.946	0.260	0.092	0.01

a) método Backward; b) método Cuasi-Estático.

Observamos que los resultados son similares y sólo es destacable un pequeño error en los instantes correspondientes a un cambio brusco en las secciones eficaces, donde el método Backward proporciona mejores resultados, ya que con este método se utiliza un paso de actualización menor. Esto se puede confirmar observando las figuras 5.17 y 5.18

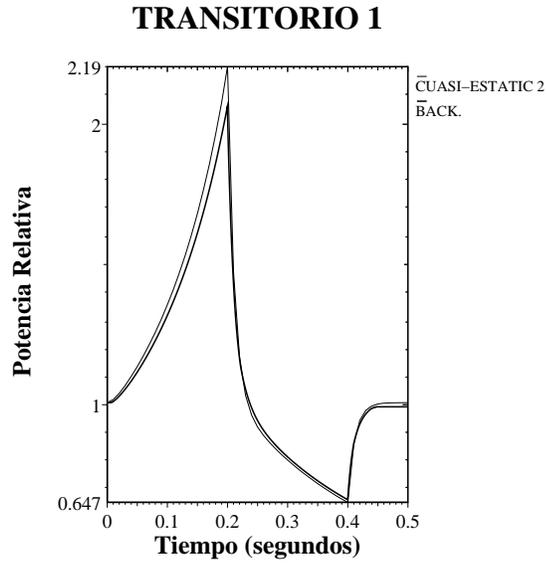


Fig. 5.17.- Comparación entre el método Backward de un paso y el método Cuasi-Estático para el transitorio 1.

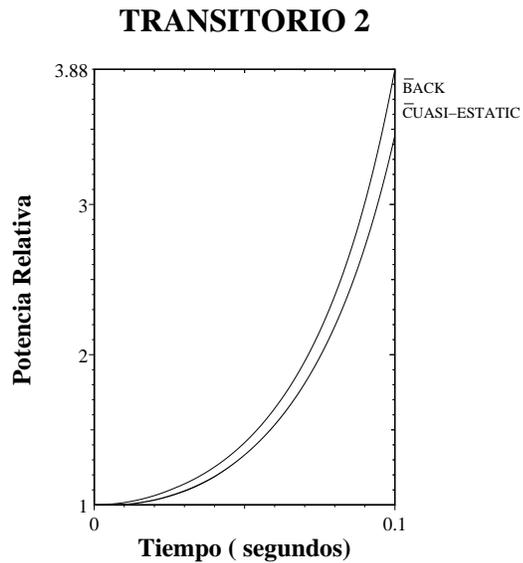


Fig. 5.18.- Comparación entre el método Backward de un paso y el método Cuasi-Estático para el transitorio 2.

En la figura 5.19 mostramos la evolución de la potencia para el transitorio 1 calculada con el Algoritmo Combinado en los casos en los que se restringe el paso máximo de integración ($h_{\max.}$) a $1 \cdot 10^{-3}$ (Comb-1), a $5 \cdot 10^{-3}$ (Comb-2), y a $1 \cdot 10^{-2}$ (Comb-3), y se comparan con los resultados obtenidos con el método Cuasi-Estático restringiendo el paso $\Delta t_{\text{forma-us.}}$ a $1 \cdot 10^{-2}$.

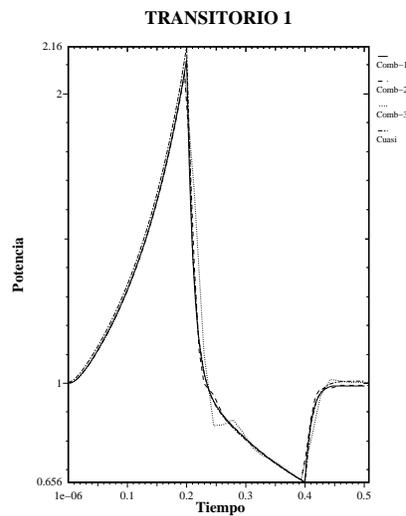


Fig. 5.19.- Comparación de la evolución de la potencia obtenida con el método Combinado y el método Cuasi-Estático.

Los resultados obtenidos son muy similares en todos los casos salvo los obtenidos con el Algoritmo Combinado restringiendo h_{\max} a $1 \cdot 10^{-2}$ (Comb-3), donde se aprecian errores mayores.

En la tabla 5.4 se comparan las diferentes proporciones de tiempo de CPU utilizadas para resolver el transitorio 1 y el transitorio 2, con los métodos Backward de un paso y el método Cuasi-Estático.

Tabla 5.4.- Proporciones de tiempo de CPU para el método Backward de un paso y el método Cuasi-Estático.

caso	Backw. 1, transitorio 1	
	Δt_{us}	Proporc. tiempo CPU
1	$5 \cdot 10^{-3}$	2
2	$1 \cdot 10^{-3}$	5
3	$5 \cdot 10^{-4}$	10
4	$1 \cdot 10^{-4}$	40

caso	Cuasi-Estático, transitorio 1	
	$\Delta t_{forma-us}$	Proporc. tiempo CPU
1	$1 \cdot 10^{-1}$	1 (<i>t</i> referencia)
2	$1 \cdot 10^{-2}$	2

caso	Backw. 1, transitorio 2	
	Δt_{us}	Proporc. t. CPU
1	$1 \cdot 10^{-3}$	3
2	$5 \cdot 10^{-4}$	5
3	$1 \cdot 10^{-4}$	19
4	$5 \cdot 10^{-5}$	33
5	$1 \cdot 10^{-5}$	200

caso	cuasi-estático, transitorio 2	
	$\Delta t_{forma-us}$	Proporc. t. CPU
1	$1 \cdot 10^{-2}$	1 (<i>t</i> referencia)
2	$1 \cdot 10^{-3}$	6
3	$5 \cdot 10^{-4}$	10

Observamos que el método Cuasi-Estático es aproximadamente diez veces más rápido que el método Backward de un paso, consiguiendo casi la misma precisión en los resultados.

En cuanto al método Combinado, se ha comparado este método con el método Cuasi-Estático para la resolución del transitorio 1. Los resultados se recogen en la tabla 5.5

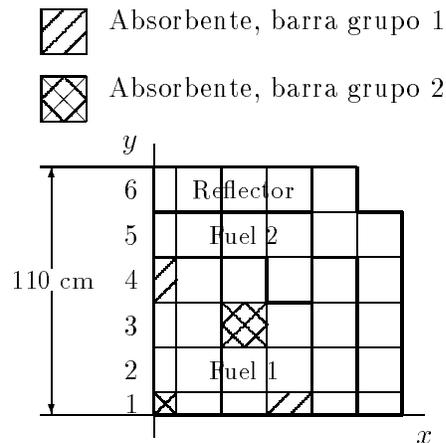
Tabla 5.5.- Proporciones de tiempo de CPU para el método Combinado y el método Cuasi-Estático.

Método	Paso integr.	tiempo CPU
Cuasi-Esta.	$\Delta t_{forma-us} = 1 \cdot 10^{-2}$	1 (ref.)
Combin.	$h_{max} = 1 \cdot 10^{-3}$	4.3
Combin.	$h_{max} = 5 \cdot 10^{-3}$	2.5
Combin.	$h_{max} = 1 \cdot 10^{-2}$	2.32

A diferencia de lo que podría pensarse, al ir aumentando el h_{\max} en el algoritmo combinado no se reduce proporcionalmente el tiempo utilizado en la resolución del problema. Ello es debido a que al aumentar el paso de integración, h el método iterativo utilizado en la resolución de los sistemas de ecuaciones lineales que aparecen en el método convergen más lentamente por ser la solución en el paso de tiempo anterior una aproximación peor a la solución del sistema a resolver en cada iteración, y además, esto hace que aumenten los posibles errores en la solución obtenida, como se pone de manifiesto en la figura 5.19.

5.3.3 Problemas Tridimensionales

Para comprobar los métodos desarrollados en geometrías 3D, se ha resuelto el transitorio tridimensional de Langenbuch. En la figura 5.20 se muestra la geometría del reactor modelizado



Sección transversal del reactor Langenbuch

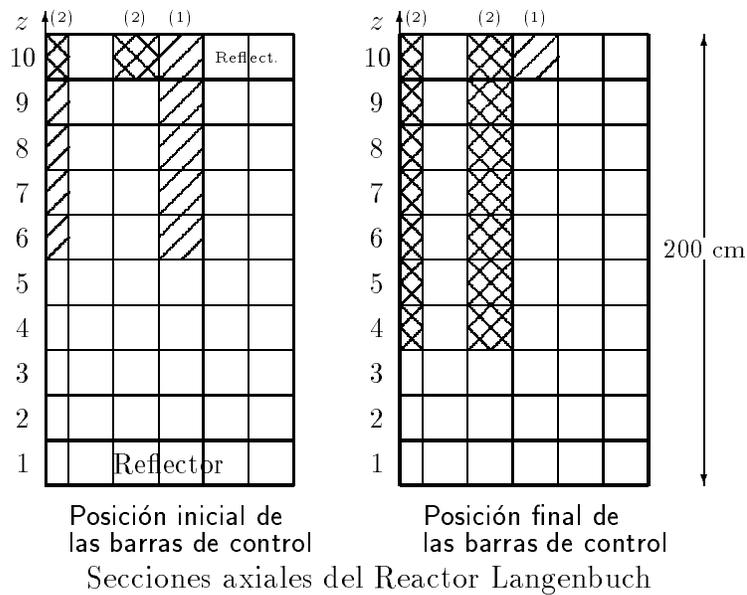


Fig. 5.20.- Geometría del Reactor Langenbuch.

El transitorio que se ha estudiado consiste en el deslizamiento del grupo de barras de control (1) con el absorbente desde el nivel 6 al nivel 10, y el desplazamiento del grupo de barras de control (2) desde el nivel 10 al nivel 4. El desplazamiento de las barras de control de tipo (1) desde su posición inicial a su posición final tiene lugar en el intervalo de tiempo de $t = 0$ seg. a $t = 26.6$ seg. y las barras de control de tipo (2) se mueven desde el tiempo $t = 7.5$ seg, a $t = 47.5$ seg.

Las secciones eficaces de los materiales y los parámetros de los precursores de neutrones para el transitorio se recogen en las tablas 5.6 y 5.7

Tabla. 5.6.- Secciones eficaces de los materiales en el reactor Langenbuch.

Región	Grupo	$D_g(\text{cm})$	$\Sigma_{ag}(\text{cm}^{-1})$	$\nu\Sigma_{fg}$	Σ_{12}
Fuel 1	1	1.423913	0.01040206	0.006477691	0.01755550
	2	0.3563060	0.08766217	0.1127328	
Fuel 2	1	1.425611	0.01099263	0.007503284	0.01717768
	2	0.3505740	0.09925634	0.1378004	
Absorbente	1	1.423913	0.01095206	0.006477691	0.01755550
	2	0.3563060	0.09146217	0.11273228	
Reflector	1	1.634227	0.002660573	0.0	0.02759693
	2	0.2640020	0.04936351	0.0	

Tabla. 5.7.- Parámetros de los precursores de neutrones en el reactor Langenbuch.

	Grupo 1	Grupo 2	Grupo 3	Grupo 4	Grupo 5	Grupo 6
β_i	0.000247	0.0013845	0.001222	0.0026455	0.000832	0.000169
$\lambda_i (s^{-1})$	0.0127	0.0317	0.115	0.311	1.4	3.87

Todos los cálculos se han llevado a cabo haciendo uso de la simetría 1/4 del reactor y se han utilizado 350 nodos. Los cálculos del estado estacionario se han realizado con el programa MOD3D, obteniendo para el autovalor un valor de 0.9992.

En la figura 5.21 se muestran los resultados obtenidos para la evolución de potencia con el método Backward de un paso y con el método Cuasi-Estático, comparándolos con los valores de referencia obtenidos con el programa CUBBOX usando un paso de integración de 12.5 mseg. [45].

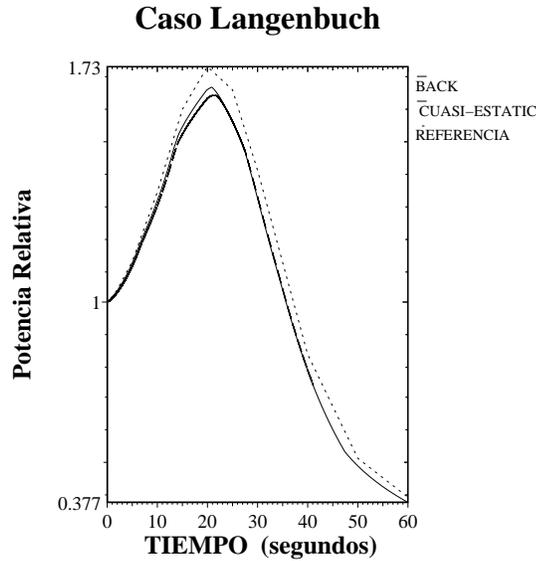


Fig. 5.21.- Evolución de la potencia para el problema Langenbuch.

Se observa que el comportamiento de las curvas es bastante similar, y que la diferencia máxima es siempre menor que un 2.5 %. No obstante, hemos de tener en cuenta que tanto el método Backward como el método Cuasi-Estático vienen afectados de lo que se conoce como el efecto cúspide [46], ya que hacen una predicción para la potencia del reactor inferior a la potencia de referencia. Ello es debido a que la metodología utilizada requiere que se tengan secciones eficaces constantes en cada nodo considerado para la discretización del reactor. Así en aquellos nodos ocupados parcialmente por una barra de control se ha realizado un promedio volumétrico para obtener las secciones eficaces del nodo, utilizadas en los distintos cálculos. Ésta es la razón por la que, tanto el método Backward como el método Cuasi-Estático obtengan un valor de la potencia inferior al de referencia. Este error se puede minimizar utilizando una malla espacial más fina, con el consecuente aumento del coste computacional.

En la figura 5.22 se comparan los resultados obtenidos con el método Cuasi-Estático, tomando en cuenta tres posibilidades diferentes. ST denota el ‘paso de tiempo de forma’ y UT el ‘paso de tiempo de actualización feedback’.

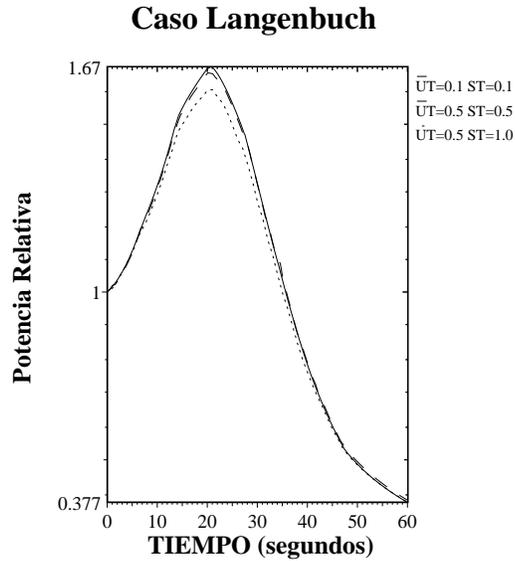


Fig. 5.22.- Evolución de la potencia para el problema Langenbuch utilizando distintos pasos de actualización en el método Cuasi-Estático.

Se observa que los resultados no dependen mucho de estos pasos de tiempo, así es posible utilizar paso de tiempo grandes en las actualizaciones reduciendo el coste computacional sin que afecte mucho a la precisión de los resultados.

Tras los estudios realizados, podemos concluir que los métodos desarrollados, basados en una discretización temporal, son eficientes para la resolución de la ecuación de la difusión neutrónica dependiente del tiempo en un reactor nuclear con una geometría unidimensional, bidimensional y tridimensional, incluso cuando se utilizan mallas espacio-temporales gruesas.

Los métodos en diferencias hacia atrás, si se utiliza un paso de integración pequeño, son precisos pero tienen un coste computacional mayor que la aproximación Cuasi-Estática.

Capítulo 6

Conclusiones

El presente trabajo se ha dedicado al desarrollo de métodos de integración para la ecuación de la difusión neutrónica en un reactor nuclear. Estudiando métodos válidos al realizar una discretización del reactor en nodos de gran tamaño.

En primer lugar, se ha abordado el estudio de la ecuación de los Modos Lambda en la aproximación de dos grupos de energía. Como primer método para su resolución se ha desarrollado una aproximación analítica que permite, de forma rápida y precisa, resolver los problemas unidimensionales.

Posteriormente, se ha generalizado esta metodología para el tratamiento de problemas bidimensionales. Para la resolución de este tipo de problemas es necesario encontrar las raíces de un sistema de ecuaciones no lineales de gran dimensión. Por tanto, ha sido necesario implementar un método de continuación basado en los métodos de Newton y Broyden para la resolución de estas ecuaciones. Este método consigue una buena precisión en la obtención de los autovalores de un reactor bidimensional, pero el error cometido es mayor en la determinación del flujo rápido y el flujo térmico de los distintos modos. Hay que destacar además, que una generalización de la metodología para tratar problemas tridimensionales es inviable por el alto coste computacional que supondría la resolución de este tipo de problemas.

Por lo apuntado anteriormente, se ha cambiado de orientación para el tratamiento del problema, y se ha hecho uso de un método de colocación nodal, basado

en el desarrollo en polinomios de Legendre del flujo neutrónico en cada nodo. Este método permite aproximar el problema de autovalores asociado a un operador diferencial inicial, por un problema de autovalores algebraico. La dimensión de este problema es muy grande y la estructura de la matriz asociada es dispersa, especialmente si se consideran problemas con geometría bidimensional o tridimensional, así, para el cálculo de los autovalores dominantes de la matriz, se ha utilizado el método de Iteración del Subespacio combinado con una técnica variacional de aceleración. Con el algoritmo desarrollado se han resuelto problemas benchmark bidimensionales como los reactores IAEA y BIBLIS y el reactor tridimensional de Langenbuch. También se han obtenido los Modos Lambda dominantes de reactores comerciales como el de la Central Nuclear de Cofrentes y el reactor de Ringhals.

Posteriormente, se han desarrollado métodos para la integración de la ecuación de la difusión neutrónica dependiente del tiempo. El primer método estudiado ha sido un método nodal modal. Para el desarrollo de este método se ha discretizado la parte espacial de las ecuaciones mediante el método de colocación nodal, y una vez hecho esto, se ha desarrollado la solución en función de los Modos Lambda dominantes asociados a distintas configuraciones del reactor a lo largo del tiempo, obteniendo de este modo un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que es posible integrar mediante un método de Runge-Kutta o un método implícito. Con el método desarrollado se han resuelto de forma efectiva distintos problemas unidimensionales.

Para la utilización del método nodal modal es necesario disponer de los Modos Lambda dominantes asociados a distintas configuraciones del reactor a lo largo del tiempo. El cálculo de estos modos es un proceso costoso, especialmente, para problemas con una geometría bidimensional o tridimensional, por lo tanto, para integrar la ecuación de la difusión dependiente del tiempo en este tipo de reactores, se han considerado métodos basados en la discretización de la parte temporal de las ecuaciones. En particular, se han desarrollado los métodos en diferencias hacia atrás de un paso, de dos pasos y de cuatro pasos, contruyendo con los mismos un algoritmo combinado que permite ir variando el paso de integración. Además, se ha desarrollado una modificación de la aproximación Cuasi-Estática para adaptarla a la utilización del método de colocación nodal. Se ha comparado el funcionamiento de estos métodos resolviendo los problemas benchmark unidimensionales estudiados con el método nodal modal, dos transitorios del reactor bidimensional de Seed-Blanket y un transitorio asociado al reactor de Langenbuch, obteniendo como conclusión que

para obtener soluciones muy precisas es necesario utilizar los métodos en diferencias hacia atrás con un paso de integración muy pequeño. No obstante, la aproximación Cuasi-Estática proporciona resultados fiables con un coste computacional mucho menor.

En cuanto al desarrollo futuro de los temas estudiados en la presente memoria, hay que comentar que se está tratando de optimizar el método de Iteración del Subespacio para el cálculo de los autovalores dominantes de una matriz dispersa y no simétrica, así como estudiar las posibilidades del método para su implementación en un ordenador con una arquitectura paralela. También sería interesante profundizar en el estudio de las técnicas de aceleración para este tipo de métodos de forma que puedan ser combinadas con el método de Iteración del subespacio de forma óptima.

Por otra parte, al poder disponer de los Modos Lambda dominantes asociados a una configuración dada de un reactor, va a ser posible realizar estudios de la fenomenología asociada a estos modos y analizar su relación con las inestabilidades en fase y fuera de fase de los reactores.

Con los Modos Lambda dominantes se puede obtener una descomposición modal de la señal de la potencia neutrónica procedente de los LPRM-s de un reactor nuclear y estudiar las señales temporales asociadas a los distintos modos.

Por último, sería interesante acoplar uno de los métodos para la integración de la ecuación de la difusión dependiente del tiempo que se han desarrollado, a un programa que resuelva las ecuaciones del modelo termohidráulico del reactor, como el programa TRAC-BF1, posibilitando de este modo el estudio de transitorios realistas.

Bibliografía

- [1] C.H. Adams, *Current Trends in Methods for Neutron Diffusion Calculations*. Nuclear Science and Engineering, 64, 552-562. (1977).
- [2] S. Glasstone, A. Sesonske, *Ingeniería de Reactores Nucleares*. Ed. Reverté. (1975).
- [3] J.R. Weston, M. Stacey, *Space-Time Nuclear Reactor Kinetics*. Academic Press. (1969).
- [4] George I. Bell, Samuel Glasstone, *Nuclear Reactor Theory*. Robert E. Krieger Publishing Company. (1970).
- [5] G. Verdú, *Teoría General del Transporte Estocástico de Neutrones y su Aplicación a la Medida de Reactividad en Conjuntos Subcríticos*. Tesis Doctoral, Universidad Politécnica de Valencia. (1984).
- [6] Allan F. Henry, *Nuclear-Reactor Analysis*. The MIT Press. (1982).
- [7] J. L. Muñoz Cobo, G. Verdú, *Generación de Parámetros Cinéticos*. Informe Final a Iberdrola. (1990).
- [8] J. L. Muñoz Cobo, G. Verdú, *Generación de Parámetros Cinéticos para TRAC/BF1*. Informe Final a Iberdrola. (1992).
- [9] J. L. Muñoz Cobo, G. Verdú, C. Pereira, A. Escrivá, J. Ródenas, F. Castrillo, J. Serra, *Consistent Generation and Functionalization of one-dimensional Cross Sections for TRAC-BF1*. Nuclear Technology, Vol. 107, 2. (1994).

- [10] G. Verdú, J.L. Muñoz-Cobo, C. Pereira, D. Ginestar, *Lambda Modes of the Neutron-Diffusion Equation: Application to B.W.R.'s Out-of-Phase Instabilities*. Ann. Nucl. Energy, Vol. 20, No 7, pp 477-501. (1993).
- [11] C. Pereira, *Aportaciones al Estudio de Inestabilidad en Reactores de Agua en Ebullición*. Tesis Doctoral, Universidad Politécnica de Valencia. (1993).
- [12] G. Verdú, J.L. Muñoz-Cobo, C. Pereira, D. Ginestar, J. Ródenas, *Inestabilidad en Reactores B.W.R.- Obtención del los Modos Espaciales de Flujo Neutrónico*. Actas de la XVIII Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española, Vol. I, pag. 83-107. (1993).
- [13] G. Verdú, J.L. Muñoz-Cobo, C. Pereira, A. Escrivá, D. Ginestar, V. Vidal, *Modos espaciales de Flujo Neutrónico*. Actas de la XIII C.E.D.Y.A/III Congreso de Matemática Aplicada. Madrid (1993).
- [14] G. Verdú, J.L. Muñoz-Cobo, C. Pereira, A. Escrivá, D. Ginestar, V. Vidal, *Modos Espaciales de Flujo Neutrónico. Aplicación al Caso de Inestabilidad de Cofrentes*. Actas de la XIX Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Cáceres (1993).
- [15] Richard L. Burden, J. Douglas Faires, *Análisis Numérico*. Grupo Editorial Iberoamérica. (1985).
- [16] J.M. Ortega, W.C. Rheinbolt, *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*. Academic Press. (1970).
- [17] José Mario Martínez, *A Family of Quasi-Newton Methods with Direct Secant Updates of Matrix Factorizations*. SIAM J. Numer. Anal. Vol 27, No 4, 1034-1049. (1990).
- [18] C.G. Broyden, *A Class of Methods for Solving Nonlinear Simultaneous Equations*, Mathematics of Computation 19, 577-593. (1965).
- [19] J. E. JR. Dennis, J. J. Moré, *Quasi-Newton Methods, Motivation and Theory*, SIAM Review, 19, No 1, 46-89. (1977).
- [20] M. Shacham, *Numerical Solution of Constrained Non-Linear Algebraic Equations*. Int. J. Numerical Methods Eng. 23, 1455. (1986).

- [21] R. Lee et al., *Argone Code Center: Benchmark Problem Book*. Report ANL-7416, Supp. 2, ID.11-A2, p. 437, Argone National Laboratory. (1976).
- [22] A. Hébert, *Application of the Hermite Method for Finite Element Reactor Calculations*. Nuclear Science and Engineering, 91, 34-58. (1985).
- [23] E.Z. Müller, Z.J. Weiss, *Benchmarking with the Multigroup Diffusion High-Order Response Matrix Method*. Ann. Nucl. Energy, Vol. 18, No. 9, pp 535-544. (1991).
- [24] D.V. Altiparmakov, Dj. Tomašević, *Variational Formulation of a Higher Order Nodal Diffusion Method*. Nuclear Science and Engineering, 105, 256-270. (1990).
- [25] R.J.J. Stammler, M.J. Abbate, *Methods of Steady State Reactor Physics in Nuclear Design*. Academic Press. (1983).
- [26] R.A. Shober, R. N. Sims, A.F. Henry, *Two Nodal Methods for Solving Time-Dependent Group Diffusion Equations*. Nuclear Science and Engineering 63, 437-456. (1977).
- [27] D.W. Nigg, *One-Dimensional Nodal Neutronics Routines for the TRAC-BD1 Thermal-Hydraulics Program*. EGG-PBS-6379. (1984).
- [28] Jae-Woong Song, Jong-Kyung Kim, *An Efficient Nodal Method for Transient Calculations in Light Water Reactors*. Nuclear Technology, 103. (1993).
- [29] R.D. Lawrence, J.J. Dorning, *A Nodal Green's Function Method for Multidimensional Neutron Diffusion Calculations*. Nuclear Science and Engineering, 76, 218-231, (1980).
- [30] Hoju Moon, Samuel H. Levine, *A Fundamental Deviation of the Nodal Diffusion Equation and its Variation*. Nuclear Science and Engineering, 104, 112-122. (1990).
- [31] Abderrafi M. Ougouag, Hrabri L. Rajic, *ILLICO-HO: A Self-Consistent Higher Order Coarse-Mesh Nodal Method*. Nuclear Science and Engineering, 100, 332-341. (1988).
- [32] Moon H. Chang, Kap S. Moon, Jae M. Noh, Si H. Kim, *A Nodal Expansion Method with Spatially Coupled Effects Incorporated into the Transverse Leakage Approximation*. Nuclear Science and Engineering, 103, 343-350. (1989).

- [33] S. Langenbuch, W. Maurer, W. Werner, *Coarse-Mesh Flux Expansion Method for the Analysis of Space-Time Effects in Large Light Water Reactors Cores*. Nuclear Science and Engineering, 63, 437-456. (1977).
- [34] Jae Man Noh, Nam Zin Cho, *A New Approach of Analytic Basis Function Expansion to Neutron Diffusion Neutron Calculation*. Nuclear Science and Engineering, 116, 165-180. (1994).
- [35] Yong Hee Kim, Nam Zin Cho, *Parallel Solution of the Neutron Diffusion Equation with the Domain Decomposition Method on a Transputer Network*. Nuclear Science and Engineering, 114, 252-270. (1993).
- [36] A. Hébert, *Development of the Nodal Collocation Method for Solving the Neutron Diffusion Equation*. Ann. nucl. Energy, Vol 14, No 10, pp 527-541. (1987).
- [37] Matthias G. Döring, Jens Chr. Kalkkuhl, *Subspace Iteration for Nonsymmetric Eigenvalue Problems Applied to the λ -Eigenvalue Problem*. Nuclear Science and Engineering, 115, 244-252. (1993).
- [38] G. Verdú, D. Ginestar, V. Vidal, J.L. Muñoz-Cobo, *3D λ -Modes of the Neutron-Diffusion Equation*. Ann. Nucl. Energy, Vol 21, No 7, pp 405-421. (1994).
- [39] G. Verdú, D. Ginestar, V. Vidal, J.L. Muñoz-Cobo, *Modos λ 3D de la Ecuación de la Difusión Neutrónica*. Actas de la XX Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Córdoba (1994).
- [40] Y. Saad, *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*. Manchester University Press Series in Algorithms and Architectures for Advanced Scientific Computing. (1992).
- [41] I.S. Duff, J.A. Scott, *ACM Transactions on Mathematical Software*. 19, 2. pp 137-159. (1993).
- [42] G.H. Golub, C.F. Van Loan, *Matrix Computations*. The John Hopkins University Press. (1983).
- [43] Y. Saad, *Chebyshev Acceleration Techniques for Solving Nonsymmetric Eigenvalue Problems*. Mathematics of Computation, Vol. 42, No. 166, 567-588. (1984).

- [44] A. Hébert, *Variational Principles and Convergence Acceleration Strategies for the Neutron Diffusion Equation*. Nuclear Science and Engineering, 91, 414-427. (1985).
- [45] S. Langenbuch, W. Maurer, W. Werner, *Coarse-Mesh Flux-Expansion Method for the Analysis of Space-Time Effects in Large Light Water Reactor Cores*. Nuclear Science and Engineering, 63, 437-456. (1977).
- [46] Ping-Hue Huang, Jing-Tong Yang, Jen-Ying Wu, *Qualification of the ARROTA Code for Light Water Reactor Accident Analysis*. Nuclear Technology, Vol. 108, 137-150. (1994).
- [47] T. Lefvert, *BWR STABILITY BENCHMARK. Preliminary Specifications*. NEA/NSC/DOC(93) 13. (1993).
- [48] Grainville Sewell, *The Numerical Solution of Ordinary and Partial Differential Equations*. Academic Press. (1988).
- [49] K.O. Ott, *Accuracy of the Quasistatic Treatment of Spatial Reactor Kinetics*. Nuclear Science and Engineering, 36, 402-411. (1969).
- [50] G. Verdú, D. Ginestar, V. Vidal, J.L. Muñoz-Cobo, *A Consistent Multidimensional Nodal Method for Transient Calculations*. Ann. Nucl. Energy. Vol. 22, No 6, 395-411. (1995).
- [51] F. Merino, *Desarrollo de un Simulador Dinámico Tridimensional para el Análisis de Transitorios en Núcleos de Agua a Presión*. Tesis Doctoral. Universidad Politécnica de Madrid. (1993).
- [52] Hitoshi Uematsu, Sadayuki Izutsu, Toru Yamamoto, Riyutaro Yamashita, Sakae Muto, Akio Toba, *Development of a Three Dimensional Transient Code for Reactivity-Initiated Events in Boiling Water Reactors Models and Code Verifications*. Nuclear Technology, Vol. 88, 87-97. (1983).
- [53] J.M. Hozler, *Methods for the Analysis of Boiling Water Reactors Transient Core Physics*. Report-YAEC-1239 P, Framingham, Massachusetts. (1983).
- [54] Jae-Woong Song, Jong-Kyung Kim, *An Efficient Nodal Method for Transient Calculations in Light Water Reactors*. Nuclear Technology, Vol. 103, 157-167. (1993).