Resolución de la ecuación de transporte mediante el método de las características en el código neutrónico milonga

Vignolo, R.¹

¹TECNA Estudios y Proyectos de Ingeniería S.A. Encarnación Ezcurra 365, C1107CLA Buenos Aires, Argentina rvignolo@tecna.com

Resumen

Milonga es un código de cálculo neutrónico que resuelve la ecuación de transporte estacionaria y multigrupo tanto mediante la formulación de difusión como la de ordenadas discretas (S_N) sobre mallas no estructuradas (aunque mallas simples estructuradas son también soportadas). Ambas formulaciones pueden ser resueltas sobre esquemas de volúmenes o elementos finitos. Milonga nació como parte del desarrollo de una tesis de doctorado de ingeniería nuclear y, al ser software libre, permite que distintos colaboradores participen activamente en su desarrollo y no ser, como Stamm'ler decía, usuarios que "will never understand the programs they are to use and, as computer slaves, consider them as black boxes, blindy trusting their results" (Stamm'ler et al., 1983). La implementación del método de las características (MOC) incorpora dentro de milonga una formulación capaz de ser aplicada en cálculos de celda, rellenando la etapa faltante en cálculos de producción: celda (MOC), celda-núcleo (S_N) y núcleo (difusión). En esta primera instancia del desarrollo de formulaciones de celda, MOC fue seleccionado por sobre el método de las probabilidades de colisión debido a que éste no produce matrices densas, por lo que es posible resolver problemas con mayor cantidad de regiones. En este contexto, se desarrolló un eficiente algoritmo de ray tracing sobre mallas no estructuradas y estructuradas y un solver de potencias no lineal que, mediante la resolución de la ecuación de transporte en cada track, permite obtener el flujo escalar en cada región y grupo de energía. En este trabajo se discute acerca de la implementación del método, los resultados preliminares obtenidos y las futuras mejoras e incorporaciones.



XLIII Reunión Anual de la Asociación Argentina de Tecnología Nuclear Buenos Aires, Noviembre 2016

Solving the neutron transport equation by the method of characteristics in milonga neutron code

Vignolo, R.¹

¹TECNA Estudios y Proyectos de Ingeniería S.A. Encarnación Ezcurra 365, C1107CLA Buenos Aires, Argentina rvignolo@tecna.com

Abstract

Milonga is a neutron code that solves the steady-state multigroup neutron transport equation either by using the diffusion approximation or the discrete ordinates method (S_N) over unstructured grids (although simple structured grids can also be used). Both formulations can be solved over a finite-volumes or a finite-elements discretization scheme. Milonga was born as part of a PhD in nuclear engineering and, since it is free software (as in free speech), it may be developed collaboratively by volunteer engineers/computer programmers who do not want to be, as Stamm'ler used to say, users that "will never understand the programs they are to use and, as computer slaves, consider them as black boxes, blindy trusting their results" (Stamm'ler et al., 1983). The implementation of the method of characteristics (MOC) incorporates in milonga a lattice formulation, filling in the missing stage of production calculations: lattice (MOC), latticecore (S_N) and core (diffusion). In this first stage of development of lattice formulations, MOC was selected because it overcome the main limitation for collision probability (CP) method: it does not produce full square matrices of order equal to the number of regions in the domain times the energy groups, so it is possible to solve problems with many more regions. In this context, an efficient ray tracing algorithm for structured and unstructured meshes and a nonlinear power method were developed. These two things allow to compute the scalar flux per refion and energy group by collecting all mean angular fluxes over track segments and region sources. This paper discusses about the implementation of the method, preliminary results and future improvements or additions in milonga.



XLIII Reunión Anual de la Asociación Argentina de Tecnología Nuclear Buenos Aires, November 2016

Índice

1.	Introducción	4
2.	Método de las Características2.1. Discretización y nomenclatura2.2. Formulación	4 4 6
3.	Ray tracing	9
4.	MOC solver	11
5.	Sintaxis	12
6.	Resultados 6.1. Benchmarks de medio homogéneo infinito 6.2. Benchmark BWR	13 13 13
7.	Conclusiones	15

1. Introducción

Los cálculos de celda se corresponden, tradicionalmente, con el primer paso del análisis determinístico de reactores. En esta instancia, una celda representativa es resuelta mediante una formulación que pueda ser correctamente aplicada al dominio. Entre estas formulaciones, usualmente se utilizan tanto el método de las probabilidades de colisión (que puede estar asociado al método de las corrientes en las interfaces) como el método de las características. La resolución de la ecuación de transporte en este dominio resulta en la obtención del flujo escalar en una discretización fina en energía y regiones que, posteriormente, es empleada para calcular secciones eficaces homogeneizadas tanto en energía como en el espacio a utilizar como entradas en cálculos de núcleo.

En un comienzo, la celda elemental consistía en un *pin cell* donde sólo se representa una única barra combustible junto al moderador que la rodea y condiciones de contorno reflectivas. Debido al incremento en el poder de cálculo, hoy en día es posible realizar cálculos de celda a nivel de elemento combustible e incluso se busca realizarlos a nivel de núcleo. El método de las características (comúnmente denominado MOC) pareciera ofrecer esta posibilidad, y es por este motivo que durante los últimos años ha ganado un particular interés.

Milonga es un código neutrónico de núcleo escrito como *plugin* de wasora [1]. Con la incorporación del método de las características como formulación de transporte en 2D se ha abierto el panorama a los cálculos de celda. En este trabajo se describe la implementación de MOC 2D y se presentan algunos resultados preliminares. Por último, se hará un breve hincapié en futuras incorporaciones.

2. Método de las Características

MOC resuelve la forma característica de la ecuación de transporte recorriendo lineas rectas (denominadas rayos o *tracks*) que simulan la trayectoria de neutrones a medida que se mueven por el dominio. Este método se basa en la resolución iterativa del flujo a partir de la resolución de la ecuación de transporte sobre dichos *tracks* trazados. El método de las características es generalmente aplicado sobre la forma multigrupo de la ecuación de transporte y sobre dominios compuestos por regiones con propiedades nucleares uniformes. Posteriormente, el flujo escalar de cada región y grupo es computado a partir de la variación del flujo angular sobre cada uno de los *tracks* y de la fuente.

2.1. Discretización y nomenclatura

Debido a la gran cantidad de notación disponible en la bibliografía, es conveniente definir adecuadamente la discretización a utilizar en este trabajo previo a ingresar a la descripción del método. Las diferentes definiciones que se dan a continuación se encuentran representadas gráficamente en la figura 1. En este contexto, se definen:

- \cdot g: índice asociado a un grupo de energía;
- · *i*: índice asociado a una región con flujo plano;
- m: índice asociado a un ángulo sólido $\hat{\mathbf{\Omega}}_m$ (cada índice m tiene asociado un único par de índices $a \neq p$, que son detallados a continuación);

- $\cdot \, a$: índice asociado a un ángulo azimutal $\varphi_a;$
- · p: índice asociado a un ángulo polar θ_p ; y
- · k: índice asociado a un segmento de un *track*; k generalmente viene acompañado de los índices i y m para representar los segmentos contenidos en la región i con ángulo $\hat{\Omega}_m$.



Figura 1: Representación gráfica de la notación utilizada para la formulación MOC en este trabajo.

Por otra parte, las secciones eficaces responden a la nomenclatura usual:

- · $\Sigma_{g' \to g}^s$: sección eficaz de *scattering* de grupo g' a g;
- · Σ_g^t : sección eficaz total de grupo g;
- · Σ_g^a : sección eficaz de absorción de grupo g;y
- · Σ_q^f : sección eficaz de fisión de grupo g; y
- $\cdot \ \nu:$ número de neutrones por fisión.

Finalmente, se listan algunas definiciones usuales y otras específicas a MOC:

- · $\psi_{i,g,m,k}^{\text{in}}$: flujo angular de entrada al segmento k correspondiente a la región i, grupo g y ángulo $\hat{\Omega}_m$;
- · $\psi_{i,g,m,k}^{\text{out}}$: flujo angular de salida del segmento k correspondiente a la región i, grupo g y ángulo $\hat{\Omega}_m$;
- · $\phi_{i,q}$: flujo escalar de la región *i* y grupo *g*;
- · $q_{i,g,m}$: fuente angular de la región i y grupo g con dirección $\hat{\Omega}_m$. Para *scattering* isotrópico, $q_{i,g,m} = \frac{1}{4\pi}Q_{i,g}$, donde $Q_{i,g}$ es la fuente de la región i y grupo g. De esta forma, $q_{i,g,m}$ es independiente del índice m, motivo por el cual se utiliza $q_{i,g,m} = q_{i,g}$.
- · $l_{i,m,k}$: longitud del segmento k con dirección angular m dentro de la región i. Observando la figura 1, la igualdad $l_{i,m,k} = \frac{l_{i,k}}{\sin \theta_p}$ resulta obvia.

2.2. Formulación

La formulación multigrupo de la ecuación de transporte integro-diferencial estacionaria es [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]

$$\hat{\boldsymbol{\Omega}} \cdot \operatorname{grad} \left[\psi_g(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\Omega}}) \right] + \Sigma_g^t(\mathbf{x}) \cdot \psi_g(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\Omega}}) = q_g(\mathbf{x}, \hat{\boldsymbol{\Omega}}),$$
(2.1)

donde, para el caso sin fuentes externas, el término de fuente posee las contribuciones de fisión (isotrópica) y *scattering*

$$q_{g}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{\Omega}}) = \sum_{g'=1}^{G} \int_{4\pi} \Sigma_{g' \to g}^{s}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{\Omega}'} \to \hat{\mathbf{\Omega}}) \cdot \psi_{g'}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{\Omega}'}) \, d\hat{\mathbf{\Omega}'} + \frac{\chi_{g}}{4\pi k_{\text{eff}}} \sum_{g'=1}^{G} \int_{4\pi} \nu \Sigma_{g'}^{f}(\mathbf{x}) \cdot \psi_{g'}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{\Omega}'}) \, d\hat{\mathbf{\Omega}'}.$$
(2.2)

Suponiendo *scattering* isotrópico y utilizando la definición del flujo escalar a partir del flujo angular se pierde la dependencia con la dirección angular $\hat{\Omega}$ y se obtiene

$$q_g(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{\Omega}}) = q_g(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} \left(\sum_{g'=1}^G \Sigma_{g' \to g}^s(\mathbf{x}) \cdot \phi_{g'}(\mathbf{x}) + \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{g'}^f(\mathbf{x}) \cdot \phi_{g'}(\mathbf{x}) \right).$$
(2.3)

Aplicando MOC a la ecuación de transporte multigrupo (2.1) se obtiene una ecuación diferencial lineal de primer orden [5, 8]

$$\frac{d}{ds}\psi_g(\mathbf{r_0} + s\hat{\mathbf{\Omega}}, \hat{\mathbf{\Omega}}) + \Sigma_g^t(\mathbf{r_0} + s\hat{\mathbf{\Omega}}) \cdot \psi_g(\mathbf{r_0} + s\hat{\mathbf{\Omega}}, \hat{\mathbf{\Omega}}) = q_g(\mathbf{r_0} + s\hat{\mathbf{\Omega}})$$
(2.4)

que será aplicada a cada segmento de cada *track* trazado sobre la geometría a analizar. Estas líneas responden a la ecuación $\mathbf{r_0} + s\hat{\mathbf{\Omega}}$, donde *s* es la distancia al punto $\mathbf{r_0}$ medida sobre la dirección $\hat{\mathbf{\Omega}}$. Como se verá a continuación, realizando un *ray tracing* sobre la geometría del problema a partir de la selección de diferentes puntos de inicio $\mathbf{r_0}$ y direcciones $\hat{\mathbf{\Omega}}$ y resolviendo la ecuación característica (2.4) sobre cada uno de los segmentos de cada *tracks*, es posible obtener la información necesaria para la determinación del flujo escalar en cada región y grupo de energía. Al discretizar la ecuación (2.4) y aplicar la notación descripta para este trabajo, se obtiene

$$\frac{d}{ds}\psi_{i,g,m,k}(s) + \Sigma_{i,g}^t \cdot \psi_{i,g,m,k}(s) = q_{i,g,m}$$
(2.5)

donde además se ha asumido la aproximación de fuente plana en cada región y por este motivo q ha perdido la dependencia con s, resultando en

$$q_{i,g,m} = q_{i,g} = \frac{1}{4\pi} \left(\sum_{g'=1}^{G} \sum_{i,g'\to g}^{s} \cdot \phi_{i,g'} + \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'=1}^{G} \nu \sum_{i,g'}^{f} \cdot \phi_{i,g'} \right).$$
(2.6)

La ecuación (2.5) puede ser resuelta para cada segmento de cada *track*, siempre y cuando se conozca la condición inicial. En particular, el resultado para el flujo angular a la salida de un segmento es

$$\psi_{i,g,m,k}^{\text{out}} = \psi_{i,g,m,k}^{\text{in}} \cdot e^{-\tau_{i,g,m,k}} + \frac{q_{i,g}}{\sum_{i,g}^{t}} \left(1 - e^{-\tau_{i,g,m,k}}\right),$$
(2.7)

siendo $\tau_{i,g,m,k}$ el camino óptico, definido como el producto $l_{i,m,k} \cdot \Sigma_{i,g}^t$. Reacomodando, la variación del flujo angular en un segmento puede escribirse como

$$\Delta \psi_{i,g,m,k} = \psi_{i,g,m,k}^{\text{in}} - \psi_{i,g,m,k}^{\text{out}} = \left(\psi_{i,g,m,k}^{\text{in}} - \frac{q_{i,g}}{\Sigma_{i,g}^t}\right) \left(1 - e^{-\tau_{i,g,m,k}}\right).$$
(2.8)

El valor medio del flujo angular del segmento k correspondiente a la región i, grupo g y dirección $\hat{\Omega}_m$ se obtiene integrando la solución de la ecuación (2.5) de la siguiente forma

$$\overline{\psi}_{i,g,m,k} = \frac{1}{l_{i,m,k}} \int_{s_{\rm in}}^{s_{\rm out}} \psi_{i,g,m,k}(s) \, ds = \frac{1}{l_{i,m,k}} \left[\frac{\psi_{i,g,m,k}^{\rm in}}{\Sigma_{i,g}^t} \left(1 - e^{-\tau_{i,g,m,k}} \right) + \frac{l_{i,m,k} \cdot q_{i,g}}{\Sigma_{i,g}^t} \left(1 - \frac{\left(1 - e^{-\tau_{i,g,m,k}}\right)}{\tau_{i,g,m,k}} \right) \right]. \quad (2.9)$$

Luego, utilizando el resultado de la ecuación (2.8) sobre la expresión del flujo angular medio, se obtiene

$$\overline{\psi}_{i,g,m,k} = \frac{q_{i,g}}{\Sigma_{i,g}^t} + \frac{\Delta \psi_{i,g,m,k}}{\tau_{i,g,m,k}}.$$
(2.10)

El flujo angular medio en la región i, grupo g y dirección $\hat{\Omega}_m$ puede ser obtenido a partir de la contribución de cada segmento k en la región i

$$\overline{\psi}_{i,g,m} = \frac{\sum_{k \in K(i,m)} \overline{\psi}_{i,g,m,k} l_{i,k} \delta_m}{\sum_{k \in K(i,m)} l_{i,k} \delta_m},$$
(2.11)

Asociación Argentina de Tecnología Nuclear

donde $k \in K(i, m)$ representa los segmentos correspondientes a una región i con dirección $\hat{\Omega}_m$ y δ_m la separación entre segmentos para un dado ángulo azimutal especificado en $\hat{\Omega}_m$. Para encontrar al flujo escalar en una región i y a un grupo g, basta con integrar en ángulo sólido la expresión obtenida en (2.11) de la siguiente manera

$$\phi_{i,g} = \int_{4\pi} \overline{\psi}_{i,g}(\hat{\mathbf{\Omega}}) \, d\hat{\mathbf{\Omega}} \approx 4\pi \sum_{m} w_m \overline{\psi}_{i,g,m}.$$
(2.12)

En este caso, w_m son los pesos de la cuadratura angular normalizados, de forma que $\sum_m w_m = \sum_a \sum_p w_a w_p = \sum_a w_a \sum_p w_p = 1$. En primera instancia, es necesario implementar el resultado obtenido en la ecuación (2.11) en (2.12)

$$\phi_{i,g} = 4\pi \sum_{m} \left(w_m \frac{\sum_{k \in K(i,m)} \overline{\psi}_{i,g,m,k} l_{i,k} \delta_m}{\sum_{k \in K(i,m)} l_{i,k} \delta_m} \right) = \frac{4\pi}{A_i} \sum_{m} \left(w_m \delta_m \sum_{k \in K(i,m)} \overline{\psi}_{i,g,m,k} l_{i,k} \right).$$
(2.13)

En la anterior ecuación puede verse que el término $A_{i,m} = \sum_{k \in K(i,m)} l_{i,k} \delta_m = \delta_m \sum_{k \in K(i,m)} l_{i,k}$ representa el área de la región *i* computada a partir de los segmentos $l_{i,k}$ (proyectados sobre el plano x - y) y con ángulo azimutal contenido en $\hat{\Omega}_m$. En un *ray tracing* con la suficiente densidad de lineas puede suponerse que el área obtenida a partir de esta expresión es independiente de la dirección azimutal de los segmentos, motivo por el cual $A_{i,m} = A_i$ y es retirado de la sumatoria sobre *m*.

Por último, la expresión para el flujo escalar puede simplificarse aún más incorporando el resultado de la ecuación (2.10) sobre (2.13)

$$\phi_{i,g} = \frac{4\pi}{A_i} \sum_m \left\{ w_m \delta_m \sum_{k \in K(i,m)} \left[l_{i,k} \left(\frac{q_{i,g}}{\Sigma_{i,g}^t} + \frac{\Delta \psi_{i,g,m,k}}{\tau_{i,g,m,k}} \right) \right] \right\}$$
$$= \frac{4\pi}{A_i} \cdot \frac{q_{i,g}}{\Sigma_{i,g}^t} \sum_m \left(w_m \delta_m \sum_{k \in K(i,m)} l_{i,k} \right) + \frac{4\pi}{A_i \cdot \Sigma_{i,g}^t} \sum_m \left(w_m \delta_m \sin \theta_p \sum_{k \in K(i,m)} \Delta \psi_{i,g,m,k} \right)$$
$$= \frac{4\pi}{\Sigma_{i,g}^t} \left[q_{i,g} + \frac{1}{A_i} \sum_m \left(w_m \delta_m \sin \theta_p \sum_{k \in K(i,m)} \Delta \psi_{i,g,m,k} \right) \right]. \quad (2.14)$$

La resolución de las ecuaciones (2.6), (2.8) y (2.14) permiten obtener la distribución espacial y energética del flujo escalar. Sin embargo, el proceso es iterativo hasta que los criterios de convergencia del flujo, fuentes, condiciones de contorno y valor de k_{eff} sean satisfechos. Comúnmente, el nombre atribuido a cada una de estas iteraciones se conoce como *transport sweep*. En cada *transport sweep* se calcula el flujo escalar con (2.14) a partir de las contribuciones del flujo angular sobre cada región y grupo obtenidas mediante (2.8). Posteriormente se computa el factor de multiplicación y se actualizan los valores de las fuentes $q_{i,g}$ según (2.6).

Por completitud, convienen detallar las cuadraturas azimutales y polares que pueden utilizarse para aproximar la integral sobre ángulo sólido. Se ha decido normalizar los pesos w_m , de forma que $\sum_a w_a = 1$ y $\sum_p w_p = 1$. En cuanto a la cuadratura azimutal, la forma más simple de obtener cada ángulo φ_a es dividiendo el dominio azimutal en ángulos equiespaciados:

$$\Delta \varphi_a = \frac{2\pi}{A},\tag{2.15}$$

siendo A el número total de ángulos azimutales. Sin embargo, como se verá en la sección 3, pequeñas correcciones sobre cada φ_a deben ser realizadas con el fin de realizar un *ray tracing* cíclico. Milonga elige cada ángulo azimutal φ_a con $a \in \{0, 1, ..., A - 1\}$ mediante

$$\varphi_a = \frac{2\pi}{A} \left(a + \frac{1}{2} \right). \tag{2.16}$$

Posteriormente, cada ángulo φ_a se corrige de forma tal que el *ray tracing* sea cíclico. Luego, el peso asociado a φ_a se obtiene a partir de

$$w_a = \frac{1}{4\pi} \left(\varphi_{a+1} - \varphi_{a-1} \right).$$
(2.17)

Milonga trabaja con diferentes cuadraturas polares descriptas, en su mayoría, en [8] y [9]. Entre ellas, es posible hacer uso de cuadraturas tipo *equal angle, equal weight*, Gauss-Legendre, Leonard y Tabuchi-Yamamoto (seleccionada por defecto).

3. Ray tracing

La realización del *ray tracing* sobre la geometría del problema a resolver es uno de los pasos más importantes que debe afrontar el método de las características. Luego de este procedimiento, se dispone de las estructuras de datos que almacenan información de los *tracks*, principalmente los segmentos que los forman y la región a la que cada uno de ellos pertenece.

La actual formulación MOC implementada en milonga acepta únicamente dominios rectangulares. El motivo de esta limitación radica en que el tipo de algoritmo de *ray tracing* desarrollado es de tipo cíclico, tal como puede verse en la figura 2 y se describe a continuación. Por simetría, solo es necesario trazar *tracks* con $\varphi \in [0, \pi]$ debido a que aquellos con $\varphi + \pi$ poseen los mismos puntos de definición. Por otro lado, los *tracks* con ángulos azimutales suplementarios tienen un espaciado tal que se forman recorridos cerrados. En conclusión, para realizar un trazado de *tracks* en un dominio de estas características, solo es necesario conocer las dimensiones de la *bounding box* de la geometría y datos de entrada: densidad o espaciado de líneas y número de ángulos azimutales.

La principal ventaja de utilizar *cyclic tracking* es el manejo de las condiciones de contorno debido a que no es necesario realizar aproximaciones de ningún tipo. Si la condición de contorno es de vacío, el flujo angular entrante a determinado *track* es simplemente nulo. Para los casos con condiciones de contorno reflectivas o periódicas, el flujo angular entrante a cada *track* es igual al flujo angular saliente de algún otro (dependiendo la condición de contorno). En este sentido, milonga conecta adecuadamente los *tracks*.



Figura 2: Tracks de dos ray tracing cíclicos trazados sobre un dominio rectangular. La figura 2a permite visualizar el mecanismo del trazado de líneas, mientras que la figura 2b demuestra el resultado obtenido al aplicar el mismo procedimiento pero considerando una mayor discretización en ángulos azimutales y densidad de líneas.

Una vez definidos los *tracks*, es momento de discretizarlos en segmentos correspondientes a cada región que atraviesan y así obtener la información necesaria para computar las variaciones del flujo angular a partir de la ecuación (2.8). En la figura 3 se presentan, por un lado un mallado conformado mediante *delaunay* y, por el otro, los segmentos coloreados por región resultantes de un *ray tracing*. En este caso, el espaciado entre líneas y número de ángulos φ seleccionados no permiten distinguir los segmentos graficados. Por este motivo, en la figura 4 se presenta el *ray tracing* sobre una malla con elementos recombinados a partir de la malla en 3a y parámetros de *tracking* que permiten visualizar los segmentos de forma individual.



Figura 3: (3a) presenta la malla de un determinado problema y (3b) la segmentación de los *tracks* sobre la misma. No es posible visualizar los segmentos de forma independiente debido a la cantidad de ángulos φ y separación de líneas seleccionada.

Opcionalmente, milonga efectúa la comparación de las áreas reales de cada región y las computadas a partir del *tracking* de la malla, indicando si es necesario modificar sus parámetros. Por otro lado, la evaluación de la función exponencial de la ecuación (2.8) puede ser sustituida por una aproximación lineal por partes, requiriendo eventualmente la segmentación de segmentos dentro de una



Figura 4: Con el fin de demostrar la capacidad de realizar ray tracings sobre diferentes elementos y, además, poner en evidencia los segmentos no visibles en la figura 3b, se presentan las figuras 4a y 4b.

misma región ya que se podría incurrir en errores mayores a los deseados [10].

4. MOC solver

En esta sección se darán algunos detalles del algoritmo que resuelve la formulación de transporte a través del método de las características en milonga. En cada transport sweep se calcula $\phi_{i,q}$ a partir de la ecuación (2.14). Como se mencionó previamente, la sumatoria sobre $k \in K(i,m)$ hace referencia a los segmentos que atraviesan con dirección $\hat{\mathbf{\Omega}}_m$ la región i, por lo que una forma de obtener $\phi_{i,q}$ es recorrer cada *track* contabilizando el aporte a $\phi_{i,q}$ de cada segmento. La figura 5 representa el orden en que milonga recorre cada segmento de cada track. En este contexto, la ecuación (2.14) es resuelta para el primer segmento del track señalado en el primer recuadro a partir de un guess inicial de flujo angular entrante. El aporte de este segmento al flujo escalar es contabilizado y almacenado. Posteriormente, se continúa con el recorrido del track hacia delante hasta llegar a la frontera del dominio. Luego, el mismo track es recorrido en sentido inverso¹. El proceso se repite para todas las líneas de trazo con una misma dirección azimutal y, dependiendo de la condición de contorno, el flujo angular saliente de un track es considerado como flujo angular entrante del que corresponda en un transport sweep posterior. Una vez que se finaliza con los rayos de determinada dirección azimutal, se procede con los pertenecientes a otra y se repite la misma lógica. Al finalizar un transport *sweep*, se recalcula el factor de multiplicación y se verifican los criterios de convergencia. Si éstos no son cumplidos, un nuevo cálculo de transporte con fuentes y condiciones de contorno actualizadas es realizado.

¹Es importante tener en cuenta que antes de recorrer el *track* en sentido contrario también se realizan los recorridos para cada ángulo polar p y grupo de energía g.



Figura 5: Recorrido de tracks en un transport sweep de milonga. Los rayos de color se corresponden con aquellos que ya han sido recorridos y las flechas indican el sentido en que se los recorre.

5. Sintaxis

La intención de esta sección no es explicar en detalle la sintaxis detrás de milonga ya que esto implicaría, necesariamente, escribir acerca de la sintaxis de wasora. Más allá de que la documentación disponible pueda diferir de la actual implementación en wasora y milonga, información acerca de este tema puede ser consultada en las referencias [1, 11, 12, 13]. Por otro lado, las consultas a los desarrolladores de la *suite* de wasora son más que bienvenidas.

La definición de un problema a resolver con el método de las características requiere de algunas nuevas consideraciones. En primer lugar, la formulación MOC necesita ser provista de una estructura de *ray tracing*. Milonga permite, en un mismo *input*, generar diferentes estructuras de este tipo sobre una misma o diferentes mallas mediante las siguientes sentencias

```
TRACK_MESH MESH unstructured N_AZIM_ANGLES 24 TRACK_SPACING 0.02 TINY_STEP 1e-3 NAME track_1 DO_NOT_CHECK_VOLUMES TRACK_MESH MESH unstructured N_AZIM_ANGLES 32 TRACK_DENS 20.00 TINY_STEP 1e-3 NAME track_2
```

donde N_AZIM_ANGLES hace referencia al número de ángulos azimutales, TRACK_SPACING al espaciado entre líneas, TRACK_DENS a la densidad de líneas por cm, TINY_STEP a la magnitud a moverse sobre un *track* para encontrar al elemento vecino y D0_NOT_CHECK_VOLUMES es una palabra clave que en el caso de indicarse se evita contrastar los volúmenes reales de cada elemento con los computados a partir del *ray tracing* realizado. En este caso, dos trazados de líneas se realizaron sobre la misma malla (unstructured) con diferentes parámetros, y se almacenaron bajo diferentes nombres: track_1 y track_2.

Cada estructura de *ray tracing* tiene definida por defecto una cuadratura polar. Sin embargo, el usuario puede definir distintas cuadraturas polares a través de

```
POLAR_QUADRATURE NAME polar_1 N_POLAR_ANGLES 6 TYPE tabuchi_yamamoto
POLAR_QUADRATURE NAME polar_2 N_POLAR_ANGLES 4 TYPE leonard
```

Otras cuadraturas polares disponibles son equal_weight, equal_angle y gauss_legendre. Por otra parte, el usuario puede proveer las cuadraturas a partir de la *keyword* DATA en reemplazo de TYPE.

Por último, al definir el problema a resolver con la formulación MOC, debe proveerse de la estructura de *ray tracing* y, en el caso de ser necesario, la cuadratura polar:

MILONGA_PROBLEM FORMULATION moc TRACK track_1 POLAR_QUADRATURE polar_1 ...

6. Resultados

Si bien la incorporación del método de las características en milonga se encuentra en una etapa de activo desarrollo, se presentan a modo ilustrativo algunos resultados obtenidos por medio de esta herramienta. En este contexto, en primera instancia se realizan dos *benchmarks* de cálculo de medio infinito homogéneo reportados en [14] y luego una celda heterogénea de BWR reportada en [15] y [16]. Estos cálculos permiten poner en evidencia la capacidad de la formulación MOC en milonga.

6.1. Benchmarks de medio homogéneo infinito

Los *benchmarks* presentados en esta sección tienen como fin demostrar que la formulación MOC de milonga, al resolver sobre las líneas de trazo, satisface la relación de conservación planteada en la ecuación de transporte (2.1). En este caso, es indiferente qué geometría se seleccione para resolver los problemas, aunque deben especificarse condiciones de reflexión o periódicas en todas las fronteras. Las secciones eficaces de ambos *benchmarks* se detallan en las tablas 1 y 2, mientras que los resultados obtenidos se listan en la tabla 3. Puede verse la perfecta concordancia con los valores de referencia.

Benchmark	g	χ_g	Σ_g^f	$ u \Sigma_g^f$	Σ_g^a	Σ_g^t	$\Sigma_{1 \to 1}^s$
Pua-1-0-IN	1	1.0	0.0816	0.264384	0.101184	0.3264	0.225216

Tabla 1: Secciones eficaces en ${
m cm}^{-1}$ para el *benchmark* de medio homogéneo infinito a un grupo de energía.

Benchmark	g	χ_g	Σ_q^f	$\nu \Sigma_{g}^{f}$	Σ_q^a	Σ_q^t	$\Sigma_{g \to 1}^s$	$\Sigma_{g \to 2}^s$	$\Sigma_{g \to 3}^s$	$\Sigma_{g \to 4}^s$	$\Sigma_{g \to 5}^s$	$\Sigma_{g \to 6}^s$
URR-6-0-IN	1	0.48	0.006	0.018	0.012	0.240	0.024	0.171	0.033	0.000	0.000	0.000
	2	0.02	0.060	0.150	0.100	0.975	0.000	0.600	0.275	0.000	0.000	0.000
	3	0.00	0.900	1.800	1.100	3.100	0.000	0.000	2.000	0.000	0.000	0.000
	4	0.00	0.900	1.800	1.100	3.100	0.000	0.000	0.000	2.000	0.000	0.000
	5	0.02	0.060	0.150	0.100	0.975	0.000	0.000	0.000	0.275	0.600	0.000
	6	0.48	0.006	0.018	0.012	0.240	0.000	0.000	0.000	0.033	0.171	0.024

Tabla 2: Secciones eficaces en $\rm cm^{-1}$ para el *benchmark* de medio homogéneo infinito a seis grupo de energía.

Benchmark	$k_\infty^{ m referencia}$	$k_{\infty}^{\mathrm{milonga}}$	$\left \delta k_{\mathrm{eff}}\right \left[\% ight]$
Pua-1-0-IN	2.612903	2.612903	0.0
URR-6-0-IN	1.600000	1.600000	0.0

Tabla 3: Factores de multiplicación obtenidos con milonga y contrastados con los valores de referencia para los benchmarks de medio infinito homogéneo.

6.2. Benchmark BWR

Una celda BWR de 4×4 *pins*, de los cuales dos poseen Gadolinio como veneno quemable, se presenta en la malla de la figura 6. La geometría posee un *pitch* de 1.6 cm, los *pins* un radio de 0.5 cm y, por último, el espesor del *cladding* es de 0.1 cm. Las secciones eficaces se presentan en la

tabla 4. Luego de realizar el trazo de líneas sobre la geometría y aplicar MOC junto a condiciones de contorno reflectivas, milonga fácilmente reporta las salidas gráficas de las distribuciones espaciales y energéticas del flujo neutrónico presentadas en la figura 7. Por último, la tabla 5 presenta el resultado obtenido con milonga y lo contrasta al valor de referencia.



Figura 6: Malla de celda BWR 4×4 obtenida a partir de gmsh [17]. Los dos *pins* que difieren de color son aquellos que poseen Gadolinio como veneno quemable. Aproximadamente, 6400 celdas forman la malla.

Material	g	Σ_g^f	$ u \Sigma_g^f$	Σ_g^t	$\Sigma_{g \to 1}^s$	$\Sigma_{g \to 2}^s$
Combustible	1	$7.22964 imes 10^{-3}$	1.86278×10^{-2}	3.62022×10^{-1}	3.33748×10^{-1}	6.64881×10^{-4}
	2	1.41126×10^{-1}	$3.44137 imes 10^{-1}$	5.72155×10^{-1}	0.0	$3.80898 imes 10^{-1}$
Zircaloy	1	0.0	0.0	2.74144×10^{-1}	2.72377×10^{-1}	$1.90838 imes 10^{-4}$
	2	0.0	0.0	$2.80890 imes 10^{-1}$	0.0	2.77230×10^{-1}
<i>Pin</i> Gadolinio	1	6.97904×10^{-3}	1.79336×10^{-2}	$3.71785 imes 10^{-1}$	$3.38096 imes 10^{-1}$	6.92807×10^{-4}
	2	$6.47524 imes 10^{-2}$	1.57929×10^{-1}	1.75	0.0	3.83204×10^{-1}
Agua Liviana	1	0.0	0.0	$6.40711 imes 10^{-1}$	$6.07382 imes 10^{-1}$	$3.31316 imes 10^{-2}$
	2	0.0	0.0	1.69131	0.0	1.68428

Tabla 4: Secciones eficaces en cm^{-1} para el *benchmark* de la celda BWR.

Benchmark	$k_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{referencia}}$	$k_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{milonga}}$	$\left \delta k_{\mathrm{eff}}\right \left[\% ight]$
BWR	0.9896832	0.9896989	0.002

Tabla 5: Factor de multiplicación obtenido con milonga y contrastado con el valor de referencia para el benchmark de BWR.



Figura 7: Distribución espacial del flujo rápido (7a) y térmico (7b) obtenido mediante la formulación moc en milonga.

7. Conclusiones

La implementación del método de las características para resolver la formulación de transporte en milonga se encuentra, en principio, en buen camino. El trazo de líneas sobre mallas estructuras y no estructuradas como así también el *solver* de potencias poseen una *performance* satisfactoria. Aún así, numerosas mejoras serán volcadas dentro del código. Entre ellas se espera agregar:

- · descripción de geometrías no estructuradas a partir de líneas, arcos y círculos. Esto permitirá definir tanto menor cantidad de regiones como así también volúmenes más adecuados;
- · *ray tracing* sobre dominios generales, aplicando correctamente condiciones de contorno;
- · paralelización del solver;
- incorporación de esquemas de aceleración del método (*Nonlinear diffusion acceleration*, como por ejemplo *Coarse Mesh Finite Difference*).

Milonga es un código desarrollado durante el tiempo libre de sus colaboradores. Este tipo de trabajo presentado no solo tiene como fin demostrar las capacidades adquiridas por el programa, si no que también busca incorporar nuevos colaboradores que deseen unirse al desarrollo del mismo, aportando tanto ideas como implementándolas dentro del código.

- G. Theler. Description of the computational tool wasora. Inglés. Inf. téc. CIT-WSWA-TD-9E3D. 2016.
- [2] A. F. Henry. Nuclear reactor analysis. Inglés. Cambridge, MIT, 1975.
- [3] J. R. Lamarsh. Introduction to Nuclear Reactor Theory. Inglés. Addisson-Wesley, 1966.
- [4] J. J. Duderstadt y L. J. Hamilton. Nuclear reactor analysis. Inglés. Wiley, New York, 1976.
- [5] G. Glasstone S. Bell. Nuclear reactor theory. Inglés. Krieger Publishing Company, 1970.
- [6] E. E. Lewis y W. F. Miller. *Computational Methods of Neutron Transport*. Inglés. John Wiley y Sons, 1984.
- [7] R. J. G. Stammler y M. J. Abbate. *Methods of Steady-State Reactor Physics in Nuclear Design*. Inglés. Academic Press, 1983.
- [8] D. G. Cacuci. Handbook of Nuclear Engineering. Inglés. Spinger US, 2010. ISBN: 9780387981307.
- [9] Akio YAMAMOTO y col. «Derivation of Optimum Polar Angle Quadrature Set for the Method of Characteristics Based on Approximation Error for the Bickley Function». En: *Journal of Nuclear Science and Technology* 44.2 (2007), págs. 129-136. ISSN: 1881-1248.
- [10] William Boyd y col. «The OpenMOC Method of Characteristics Neutral Particle Transport Code». En: Annals of Nuclear Energy 68 (2014), págs. 43-52.
- [11] G. Theler, F. J. Bonetto y A. Clausse. «Optimización de parametros en reactores de potencia: base de diseño del codigo neutrónico milonga». En: *Reunion Anual de la Asociacion Argentina de Tecnologia Nuclear* XXXVII (2010).
- [12] G. Theler. On the design basis of a new core-level neutronic code written from scratch: the milonga free nuclear reactor core analysis code. Inglés. Inf. téc. WA-MI-AR-14-11D3. 2014.
- G. Theler. «On the design basis of a new core-level neutronic code written from scratch». Inglés. En: *Mecánica Computacional* XXXIII.Number 48, Numerical Methods in Reactor Physics (B) (2014), págs. 3169-3194.
- [14] Avneet Sood, R.Arthur Forster y D. Kent Parsons. «Analytical benchmark test set for criticality code verification». En: Progress in Nuclear Energy 42.1 (2003), págs. 55-106. ISSN: 0149-1970.
- [15] Ser Gi Hong y Nam Zin Cho. «CRX: A code for rectangular and hexagonal lattices based on the method of characteristics». En: Annals of Nuclear Energy 25.8 (1998), págs. 547-565. ISSN: 0306-4549.
- [16] Tanay Mazumdar y S.B. Degweker. «Solution of neutron transport equation by Method of Characteristics». En: Annals of Nuclear Energy 77 (2015), págs. 522-535. ISSN: 0306-4549.
- [17] C. Geuzaine y J. F. Remacle. «Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities». Inglés. En: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 79.11 (2009), págs. 1309-1331.