

# **INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL**

Escuela Superior de Física y Matemáticas

## **SOLUCION DE LAS ECUACIONES DE DIFUSION PARA VARIOS GRUPOS POR EL METODO DE ELEMENTOS FINITOS**

Tesis presentada ante el Colegio de Profesores  
de la Sección de Graduados de la Escuela  
Superior de Física y Matemáticas del Instituto  
Politécnico Nacional, para satisfacer, en parte,  
los requisitos necesarios para la obtención del  
Grado de

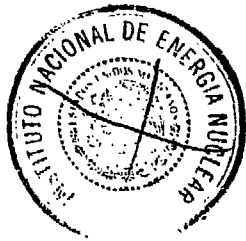
**MAESTRO EN CIENCIAS**  
(Ingeniería Nuclear)

por

**CARLOS ARREDONDO SANCHEZ**

**México, D. F. México**  
**1975**

S  
QC173  
A77  
#j2



BIBLIOTECA





SECRETARIA  
DE  
EDUCACION PUBLICA

INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL  
ESCUELA SUPERIOR DE FISICA Y MATEMATICAS  
Unidad de Zacatenco, Edificio N° 6  
México 14, D. F.

México, D.F., a 14 de marzo 1975.

ACTA DE REVISION DE TESIS

DR. LUIS CALVILLO ARMENDARIZ  
DIRECTOR DE GRADUADOS E  
INVESTIGACION CIENTIFICA Y  
TECNOLOGICA,  
PRESENTE.

Los que suscribimos la presente acta nos complacemos en informar a usted que el día de hoy, y de acuerdo con lo previsto en el Artículo 153 del Reglamento General de Cursos de Graduados del I.P.N., hemos revisado el manuscrito de Tesis que presenta el lic. CARLOS ARREDONDO SANCHEZ., Candidato al grado académico de Maestro en Ciencias en la especialidad de Ingeniería Nuclear. El título de la tesis es: "SOLUCIONES DE LAS ECUACIONES DE DIFUSION PARA VARIOS GRUPOS POR EL METODO DE ELEMENTOS FINITOS".

Al hacer la revisión mencionada, hemos aceptado el trabajo presentado por el candidato, previas ciertas modificaciones de forma y algunas adiciones que no modifican sustancialmente la Tesis. Por esto y de acuerdo con el Artículo 155 del mencionado Reglamento se le autoriza que proceda a la impresión definitiva de este Trabajo de Tesis y solicite el Examen de Grado.

A T E N T A M E N T E .

LA COMISION DE TESIS.

Dr. Jean Pierre Hennart

Dr. José Ginoris Martín

M. en C. Francisco Sepúlveda M.

Dr. Carlos Vélez Ocón

Dr. Ismael Herrera

La presente tesis fue dirigida por el Dr. Jean Pierre Hennart, a quien deseo hacer patente mi agradecimiento por su valiosa orientación.

Agradezco al Instituto Nacional de Energía - Nuclear las facilidades otorgadas para el desarrollo de este trabajo y por la ayuda económica para su impresión.

Dedico esta tesis a toda mi familia y en especial a mis padres.

## CONTENIDO

Resumen.

### Capítulo I. INTRODUCCION.

- 1.- Propósito de la tesis.
- 2.- Antecedentes y Descripción del Método.
- 3.- Polinomios por Partes.
- 4.- Estado Actual de las Aplicaciones en Ingeniería Nuclear.
- 5.- Contenido.

### Capítulo II. DESCRIPCION DEL PROBLEMA.

- 1.- Ecuaciones de Varios Grupos.
- 2.- Método Iterativo de Solución.
- 3.- Problema Básico.

### Capítulo III. SOLUCION DE LA ECUACION ELIPTICA INHOMOGENEA POR EL METODO DE ELEMENTOS FINITOS.

- 1.- Propiedades Generales de la Solución.
- 2.- Formulación Variacional y Método de Ritz-Galerkin.
- 3.- Elementos Finitos.
- 4.- Aplicación a la Ecuación Elíptica de Difusión de Neutrones.

### Capítulo IV. CARACTERISTICAS DE NUESTRO PROBLEMA.

- 1.- Razones de Convergencia

- 2.- Geometría.
- 3.- Polinomios de Lagrange.
- 4.- Eliminación de Nodos Internos.
- 5.- Condiciones a la Frontera.
- 6.- Inversión Directa.

#### Capítulo V. RESULTADOS Y COMPARACION.

- 1.- Introducción.
- 2.- Descripción de los Códigos.
- 3.- Bases para la Comparación.
- 4.- Terminología.
- 5.- Limitaciones de la Comparación.
- 6.- Comprobación de la exactitud en la aproximación con DELFIN.
- 7.- Comparación.

Conclusiones.

Apéndice I.

Referencias.

## LISTA DE FIGURAS

FIG.		PAG.
1	Convergencia de las aproximaciones $\phi_A^i$ a la solución $\phi$	III-9
2	Ejemplo de aproximación de la superficie $\Omega$ por la unión $\Omega_h$ de elementos triangulares	III-11
3	Nodos asociados a un triángulo para distintos grados $k$ de las funciones polinomiales base	III-13
4	Coordenadas triangulares homogéneas	III-15
5	Funciones de base $W_i$ para un elemento finito en una dimensión, con diferente grado $k$ de la función polinomial	III-19
6	Forma general de una matriz banda	IV-14
7	Forma de almacenar la semibanda superior de una matriz de banda simétrica	IV-14
8	Partición de la semibanda superior para su manejo en la memoria central	IV-16
9	Mallas Básicas para un reactor homogéneo rectangular	V-9
10	Ordenación de nodos para ambos tipos de malla	V-19
11	Tiempo de cálculo en función del error relativo de truncación. Reactor Homogéneo. Elementos Lineales.	V-22
12	Tiempo de cálculo en función del error relativo de truncación. Reactor Homogéneo. Elementos cuadráticos.	V-23



FIG.		PAG.
13	Reactor de 2 Zonas (cuarta parte)	V-26
14	Tiempo de cálculo en función del error relativo de truncación. Reactor de 2 zonas. Diferencias Finitas, Elementos lineales y cuadráticos.	V-30
15	Tiempo de cálculo en función del error relativo de truncación. Reactor de 2 zonas. Elementos <u>cú-</u> bicos.	V-31
16	Reactor rápido de cría LMFBR (cuarta parte)	V-33

LISTA DE TABLAS

TABLA		PAG.
I	Resultados para el Problema de Referencia.	V-11
II	Resultados con DELFIN para el Reactor Homogéneo, grado 1.	V-16
III	Resultados con DELFIN para el Reactor Homogéneo, grado 2.	V-17
IV	Resultados con DELFIN para el Reactor Homogéneo, grado 3.	V-17
V	Resultados con HOD para el Reactor Homogéneo.	V-20
VI	Resultados con DELFIN para el Reactor de 2 Zonas, grado 1.	V-28
VII	Resultados con HOD y DARC2D para el Reactor de 2 Zonas.	V-29
VIII	Estructura de las Mallas para la aproximación con Diferencias Finitas del Reactor LMFBR.	V-34
IX	Resultados con DARC2D para el Reactor LMFBR.	V-34
X	Resultados con el HOD para el Reactor LMFBR.	V-35
XI	Resultados con DELFIN para el Reactor LMFBR.	V-36

## RESUMEN

Se ha implementado el código DELFIN para resolver las ecuaciones de difusión de neutrones en dos dimensiones, obtenidas al aplicar la aproximación de varios grupos de energía. El código trabaja con cualquier número de grupos y de regiones, siendo aplicable a reactores térmicos y a reactores rápidos. Suministrándole los coeficientes de difusión, las secciones eficaces y el espectro de fisión produce como resultados la constante de multiplicación del sistema y los flujos de cada grupo.

El código se desarrolló empleando el método de elementos finitos, que es una forma de resolver la formulación variacional de las ecuaciones aplicando el método de Ritz-Galerkin con funciones polinomiales continuas por partes, en nuestro caso del tipo Lagrange con geometría rectangular y hasta de tercer grado.

Los resultados obtenidos y la comparación con los resultados en la literatura, permiten concluir la conveniencia del uso de elementos rectangulares en todos los casos donde la geometría lo permita, y demuestran además la mayor calidad del método de elementos finitos sobre el método de diferencias finitas.

## CAPITULO I.- Introducción.

### 1.1.- Propósito de la tesis.

El propósito de esta tesis es desarrollar un código que resuelva la ecuación de difusión de neutrones, en particular para el caso de reactores con geometría rectangular, considerando varios grupos de energía y usando como herramienta de solución el método de elementos finitos. Este código podrá ser usado como una herramienta muy útil para toda una serie de investigaciones en el diseño de núcleos de reactores nucleares, tales como: quemado de combustible, cambios de reactividad, y otros.

El código proporciona los flujos para cada grupo de neutrones en función de la posición y el valor de la constante de multiplicación del reactor.

### 1.2.- Antecedentes y Descripción del Método.

Dentro del campo de la ingeniería nuclear, siempre ha sido un problema de gran importancia el cálculo de la función de distribución de neutrones dentro de los reactores nucleares. Con este fin han sido desarrollados una gran variedad de procedimientos numéricos, tanto para los problemas estacionarios, como para los dinámicos, usando ya sea la teoría de transporte o la teoría de difusión. La mayoría de estos procedimientos se han basado en el uso de diferencias finitas<sup>(1,4)</sup>. Además, debido a la complejidad de los problemas

el uso de computadoras digitales se ha hecho casi indispensable; conforme la magnitud y velocidad de las computadoras ha crecido, la complejidad de los problemas resueltos también - ha aumentado, pero a pesar del adelanto logrado, existen aún problemas muy difíciles de resolver debido a su magnitud y a la precisión requerida en la solución. Dada esta situación, se han buscado métodos alternativos al de diferencias finitas; siendo la principal finalidad de estos métodos, la de - reducir el número de incógnitas sin detrimento de la precisión.

El método de elementos finitos se empezó a usar en los años cincuenta dentro del campo de la mecánica estructural - en donde alcanzó su más alto desarrollo. Durante los pasados 15 años ha sido aplicado con éxito a la solución de una gran variedad de problemas cuya conducta puede ser descrita por - ecuaciones diferenciales parciales, tales como: conducción - de calor, hidrodinámica, ingeniería hidráulica, ingeniería - aeroespacial, ingeniería mecánica, ingeniería estructural, - etc. <sup>(9)</sup>.

Aunque se habían aplicado métodos variacionales y de - síntesis a los problemas de reactores nucleares <sup>(21, 22)</sup>, es - sólo recientemente, en 1971, que el método de elementos finitos ha sido usado en aplicaciones dentro del campo de reactores nucleares <sup>(23, 24)</sup>, debido a la necesidad de cálculos con más variables independientes para los diseños reales de reactores de potencia.

La razón del amplio uso del método de elementos finitos en mecánica de sólidos, es el gran número de ventajas inherentes a él y que también son de gran importancia en el cálculo de reactores nucleares; puede tratar geometrías regulares o irregulares, materiales homogéneos o heterogéneos y cualquier combinación de condiciones a la frontera, todo ello con la misma facilidad y exactitud.

Brevemente, el método es un proceso por el cual el dominio dentro del cual se define la ecuación diferencial se discretiza dividiéndolo en un número suficiente de subdominios llamados elementos. Dentro de cada elemento se formulan funciones de interpolación, usualmente polinomios por partes, en términos de parámetros asociados con puntos discretos o nodos sobre las fronteras de los elementos. Las funciones de interpolación de elementos adjuntos están relacionadas a través de los parámetros nodales, lo cual establece las condiciones de continuidad a través de las fronteras entre elementos. Los polinomios por partes son incorporados en la funcional variacional característica del problema. El requisito de que la funcional sea estacionaria produce un conjunto de ecuaciones algebraicas simultáneas para los parámetros nodales.

Desde el punto de vista matemático, el método de elementos finitos no es más que una aplicación del procedimiento de Ritz-Galerkin<sup>(20)</sup>, para obtener un extremo de la funcional variacional usando polinomios por partes como funciones de

base particulares.

### 1.3.- Polinomios por Partes.

Un gran número de experiencias usando polinomios por partes ha permitido obtener las siguientes características para este tipo de aproximación<sup>(13)</sup>:

- 1) Proporcionan aproximaciones locales y por lo tanto son muy adecuadas para aproximar cantidades físicas con fuertes variaciones locales, requiriendo tales casos pocos polinomios por partes, lo cual no acontecería si se usaran polinomios definidos sobre todo el dominio.
- 2) Permiten flexibilidad en la imposición de condiciones de continuidad o saltos en las uniones entre elementos.
- 3) Las funciones base polinomiales convenientes son encontradas fácilmente así que los coeficientes de la expansión son relacionados directamente a los valores de las funciones y sus derivadas en los puntos de la malla.
- 4) Usados con el método de Ritz-Galerkin, el sistema de ecuaciones lineales que resulta puede ser resuelto en la computadora por procesos directos simples y bien conocidos.
- 5) En algunos casos es posible obtener cotas rigurosas en el error de la aproximación.

### 1.4.- Estado Actual de las Aplicaciones en Ingeniería Nuclear.

Recientemente las personas que trabajan con problemas -

matemáticos han puesto bastante atención en el método de elementos finitos como una herramienta para obtener procedimientos de aproximación de alto orden con hasta quince dígitos, y en muchos casos han sido obtenidas estimaciones teóricas del error<sup>(5)</sup>. En el caso de la aplicación del método a las ecuaciones de difusión de varios grupos, algunos autores se han limitado a usar elementos lineales y bilineales<sup>(13,16)</sup>, mientras que otros han trabajado con elementos de más alto grado, demostrando la gran capacidad del método para generar aproximaciones de alto orden<sup>(5)</sup>. Desafortunadamente el uso de elementos finitos de alto orden para la solución de problemas heterogéneos es muy improbable, por lo cual existen autores trabajando en el desarrollo de posibles métodos alternativos basados en extrapolación de aproximaciones con elementos finitos de bajo orden<sup>(7)</sup> con pocos dígitos de aproximación.

#### 1.5.- Contenido.

En particular dentro de este trabajo, se usan elementos finitos de bajo orden con geometría rectangular, trabajando con los datos proporcionados por Kaper, Leaf y Lindeman<sup>(5)</sup>, - llevando a cabo comparaciones con los resultados que ellos - obtienen usando elementos triangulares de alto orden.

En el Capítulo II se hace una descripción general de la ecuación de difusión de neutrones y se aplica la aproximación de varios grupos. En el Capítulo III se discute en forma general la formulación del método de elementos finitos para -



nuestro problema. El Capítulo IV contiene los resultados obtenidos y los compara con los encontrados en la literatura. Finalmente se tienen las conclusiones y se mencionan posibles ampliaciones al trabajo.

CAPITULO II.- Descripción del problema.

1.- Ecuaciones de Varios Grupos.

La finalidad principal de este trabajo es resolver el sistema de ecuaciones obtenido al dividir el intervalo de energía en varios grupos para obtener la solución a la ecuación de difusión de neutrones<sup>(1,2,3)</sup>.

La ecuación de difusión de neutrones independiente del tiempo puede ser escrita así:

$$\begin{aligned}
 & -\nabla \cdot D(\bar{r}, E) \nabla \phi(\bar{r}, E) + \Sigma_t(\bar{r}, E) \phi(\bar{r}, E) - \int_0^{\infty} dE' \Sigma_s(\bar{r}, E' \rightarrow E) \phi(\bar{r}, E') \\
 & = \frac{\chi(E)}{\lambda} \int_0^{\infty} dE' \nu(\bar{r}, E') \Sigma_f(\bar{r}, E') \phi(\bar{r}, E') \quad \forall \bar{r} \in \Omega, E \in (0, \infty),
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

donde

- $\lambda$  es el valor propio ó constante de multiplicación,
- $\bar{r}$  es el vector posición,
- $E$  es la energía,
- $D(\bar{r}, E)$  es el coeficiente de difusión,
- $\Sigma_t(\bar{r}, E)$  es la sección eficaz macroscópica total,
- $\Sigma_s(\bar{r}, E' \rightarrow E)$  es la sección eficaz de dispersión de  $E'$  a  $E$  en  $\bar{r}$ ,
- $\chi(E)$  es el espectro de fisión normalizado ( $\int_0^{\infty} \chi(E) dE = 1$ ),
- $\nu(\bar{r}, E)$  es el número promedio de neutrones liberado por fisión,

$\Sigma_f(\bar{r}, E)$  es la sección eficaz macroscópica de fisión,  
 $\phi(\bar{r}, E)$  es el flujo de neutrones,

La sección eficaz macroscópica total incluye la sección eficaz de absorción ( $\Sigma_a$ ) más la sección eficaz de dispersión ( $\Sigma_s$ ); el término de absorción es, a su vez la suma de un término de fisión ( $\Sigma_f$ ) y otro de captura ( $\Sigma_c$ ).

La ecuación (1.2) es una ecuación de balance en  $dv = d\bar{r} dE$  para neutrones con energía  $E$  en el punto  $\bar{r}$ . El primer término del lado izquierdo es el flujo neto de neutrones hacia afuera por difusión, el segundo término representa la pérdida de neutrones por absorciones o dispersiones, el tercer término da la fuente de neutrones a energía  $E$  en  $\bar{r}$  debida a dispersiones a diferentes energías. El término a la derecha describe la fuente de neutrones debida a fisiones en todo el rango de energía. La ecuación es válida sobre el volumen  $\Omega$  y el intervalo de energía  $[0, \infty)$ .

El flujo debe cumplir además con ciertas condiciones a la frontera. Si la frontera externa de  $\Omega$  es denotada por  $\partial_e \Omega$ , las condiciones a la frontera sobre  $\partial_e \Omega$  son de la forma general

$$\alpha(\bar{r}_e, E)\phi(\bar{r}_e, E) + \beta(\bar{r}_e, E)D(\bar{r}_e, E)\nabla\phi(\bar{r}_e, E) \cdot \hat{n}_e = 0, \quad (2.2)$$

$$\alpha(r_e, E), \beta(r_e, E) \geq 0 \quad \text{con} \quad \alpha(r_e, E) + \beta(r_e, E) > 0,$$

$$\forall \bar{r}_e \in \partial_e \Omega, E \in (0, \infty)$$

donde  $\hat{n}_e$  es un vector unitario normal a  $\partial_e \Omega$  en  $\bar{r}_e$  y dirigido hacia afuera. Estas condiciones incluyen los casos de flujo nulo ( $\beta = 0$ ), corriente nula ( $\alpha = 0$ ) y la condición general de frontera extrapolada ( $\alpha, \beta \neq 0$ ).

Además de las condiciones de frontera externa, las condiciones usuales de interfaces deben ser satisfechas; si las interfaces dentro de  $\Omega$  son denotadas por  $\partial_i \Omega$ , las condiciones de interfaces son las siguientes condiciones de continuidad:

$$\phi(\bar{r}_i + 0, E) = \phi(\bar{r}_i - 0, E), \quad (2.3)$$

$$D(r_i + 0, E) \nabla \phi(r_i + 0, E) \cdot \hat{n}_i = D(r_i - 0, E) \nabla \phi(r_i - 0, E) \cdot \hat{n}_i,$$

$$\forall r_i \in \partial_i \Omega, E \in (0, \infty)$$

donde  $\hat{n}_i$  es un vector unitario normal a  $\partial_i \Omega$  en  $\bar{r}_i$ .

Debido a las grandes variaciones de las secciones eficaces con la energía, es necesario dividir el intervalo de interés para la energía de los neutrones (aproximadamente de 0.01 eV a 10 Mev), en un número finito  $G$  de intervalos o grupos, siendo usualmente el primer grupo aquel que corresponde a las energías más altas. En cada grupo las secciones eficaces son reemplazadas por sus valores promedio en energía sobre el grupo.

Dividiendo el intervalo de energía como se muestra en la ilustración,

$$\begin{array}{ccccccc} & g=G & & & g=3 & g=2 & g=1 \\ \hline & E_G & & & E_3 & E_2 & E_1 & E_0 \end{array} \rightarrow$$

definimos:

$$\phi_g(\bar{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \phi(\bar{r}, E) \quad ,$$

$$D^g(\bar{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE D(\bar{r}, E) \phi(\bar{r}, E) / \phi_g(\bar{r}) \quad ,$$

$$\sum_t^g(\bar{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \sum_t(\bar{r}, E) \phi(\bar{r}, E) / \phi_g(\bar{r}) \quad ,$$

$$\sum_s^{g' \rightarrow g}(\bar{r}) = \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} dE' \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \sum_s(\bar{r}, E' \rightarrow E) \phi_g(\bar{r}, E) / \phi_{g'}(\bar{r}) \quad , \quad (2.4)$$

$$\chi^g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \chi(E) \quad \left( \sum_{g=1}^G \chi^g = 1 \right) \quad ,$$

$$v_f^g \sum_f^g(\bar{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE v(\bar{r}, E) \sum_f(\bar{r}, E) \phi(\bar{r}, E) / \phi_g(\bar{r}) \quad .$$

Aplicando estas definiciones a la ecuación (2.1) y usando propiedades conocidas para las integrales, se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas para los flujos de cada grupo; en estado estacionario estas ecuaciones de di

fusión de grupo son:

$$-\nabla \cdot D^g(\bar{r}) \nabla \phi_g(\bar{r}) + \sum^g(\bar{r}) \phi_g(\bar{r}) - \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \sum_s^{g'+g}(\bar{r}) \phi_{g'}(\bar{r}) = \frac{\lambda}{\lambda} \sum_{g'=1}^G v^{g'} \sum_f^{g'}(\bar{r}) \phi_{g'}(\bar{r}) \quad (2.5)$$

$$\forall \bar{r} \in \Omega, \quad g = 1, 2, \dots, G.$$

Donde hemos introducido una sección eficaz de remoción  $\sum^g$   $\neq \sum_t^g$  definida como:

$$\sum^g(\bar{r}) = \sum_a^g(\bar{r}) + \sum_s^g(\bar{r}), \quad (2.6)$$

donde  $\sum_s^g(\bar{r})$  es la sección eficaz de remoción por dispersión

$$\sum_s^g(\bar{r}) = \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \sum_s^{g+g'}(\bar{r}), \quad (2.7)$$

el término  $\sum_s^{g+g}$  no se toma en cuenta, puesto que la dispersión implicada en él no remueve realmente neutrones del grupo de energía  $g$ .

Usando valores promedio para  $\alpha$  y  $\beta$  las condiciones a la frontera se escriben ahora como:

$$\alpha^g(\bar{r}_e) \phi_g(\bar{r}_e) + \beta^g(\bar{r}_e) D^g(\bar{r}_e) \nabla \phi_g(\bar{r}_e) \cdot \hat{n}_e = 0, \quad ,$$

$$\alpha^g(\bar{r}_e), \beta^g(\bar{r}_e) \geq 0 \quad \text{con} \quad \alpha^g(\bar{r}_e) + \beta^g(\bar{r}_e) > 0, \quad (2.8)$$

$$\forall \bar{r}_e \in \partial_e \Omega, \quad g = 1, \dots, G$$

y las condiciones de continuidad (2.3) son

$$\phi_g(\bar{r}_i + 0) = \phi_g(\bar{r}_i - 0) \quad ,$$

$$D^g(\bar{r}_i + 0) \nabla \phi_g(\bar{r}_i + 0) \cdot \hat{n}_i = L^g(\bar{r}_i - 0) \nabla \phi_g(\bar{r}_i - 0) \cdot \hat{n}_i \quad . \quad (2.9)$$

$$\forall \bar{r}_i \in \partial_i \Omega, \quad g = 1, \dots, G$$

La ecuación (2.5) puede ser escrita en forma matricial como sigue:

$$\underline{A} \underline{\Phi} = \frac{1}{\lambda} \underline{B} \underline{\Phi} \quad , \quad (2.10)$$

donde

$$\underline{\Phi} = \left[ \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_G \right]^T \quad (2.11)$$

A es la matriz de operadores cuyos elementos  $A_{g_g'}$  son dados por

$$A_{g_g}^{\circ} \equiv -\nabla \cdot D^g(\bar{r}) \nabla^{\circ} + \sum^g(\bar{r})^{\circ} \quad g = 1, \dots, G, \quad (2.12)$$

$$A_{g_g'}^{\circ} \equiv -\sum_s^{g' \rightarrow g} L_s^{\circ}(\bar{r})^{\circ} \quad g', g = 1, \dots, G; \quad g' \neq g \quad ,$$

y B es la matriz de operadores cuyos elementos son

$$B_{g_g'}^{\circ} \equiv \chi_g \nu^{g'} \sum_f^{g'} L_f^{\circ}(\bar{r})^{\circ} \quad g', g = 1, \dots, G \quad (2.13)$$

En esta forma (2.10) es considerado como un problema - de valor propio, donde  $\lambda$  es el valor propio.

## 2.- Método iterativo de solución.

Generalmente los coeficientes de la ecuación (2.5) son positivos o al menos no negativos (usualmente constantes) - dentro de cada región del reactor. Además el sistema satisface la propiedad de "transitividad", o sea que si un neutrón es introducido a cualquier energía y en cualquier punto del reactor, tiene potencialmente una descendencia en todas las energías y lugares dentro del reactor; puede observarse que la transitividad "espacial" es asegurada por la difusión de neutrones mientras que la fisión y moderación realizan la - transitividad "energética".

Bajo estas hipótesis, "positividad" y "transitividad", - Habetler and Martino<sup>(4)</sup> demostraron que el operador  $A^{-1}B$  tiene uno y sólo un vector propio que es positivo casi en todas partes y al cual corresponde un valor propio único, real y - positivo mayor que los módulos de todos los otros valores - propios; puesto que el flujo debe ser positivo en todas partes este valor propio es el "modo fundamental" y el valor - propio correspondiente la "constante de multiplicación efectiva".

El teorema de Habetler y Martino no nos dice simplemente que el problema que estamos considerando tiene una solución, sino que también nos da un medio para obtener la solución.



ción. Consideremos el esquema iterativo siguiente<sup>(4)</sup>:

$$\tilde{\phi}^{(n)} = A^{-1}B\phi^{(n-1)} \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.14)$$

$$\phi^{(n)} = \frac{1}{\lambda^{(n)}} \tilde{\phi}^{(n)} \quad (2.15)$$

con

$$\lambda^{(n)} = \frac{\int_{\Omega} v \sum_{\mathbf{f}} \tilde{\phi}^{(n)}(\mathbf{r})}{\int_{\Omega} v \sum_{\mathbf{f}} \phi^{(n-1)}(\mathbf{r})} \quad (2.16)$$

donde

$$v \sum_{\mathbf{f}} = (v^1 \sum_{\mathbf{f}}^1, v^2 \sum_{\mathbf{f}}^2, \dots, v^G \sum_{\mathbf{f}}^G)$$

donde  $\phi^{(0)}$  es un flujo inicial de prueba (generalmente un flujo plano) y  $\lambda^{(n)}$  es una constante de normalización.

Este esquema iterativo es conocido como el "método de potencia" o "iteración de fuente de fisión" y consiste en aplicar potencias sucesivas del operador  $A^{-1}B$  a algún flujo de varios grupos inicial  $\phi^{(0)}$  normalizando el vector obtenido en cada etapa. La existencia de un valor propio único real y positivo, mayor que los módulos de todos los otros valores propios asegura la convergencia de  $\phi^{(n)}$  al modo fundamental  $\phi_1$  y de  $\lambda^{(n)}$  a  $k_{\text{eff}}$ . La aplicación sucesiva de  $A^{-1}B$  sobre  $\phi^{(0)}$  mejora progresivamente la componente de  $\phi^{(0)}$  a lo largo de el modo fundamental con perjuicio de las otras componentes. Supongamos que  $A^{-1}B$  tiene un conjunto completo de

vectores propios\*  $\phi_i$  asociados a los valores propios  $\lambda_i$ , de la ec. (2.10)

$$A^{-1}B\phi_i = \lambda_i\phi_i \quad , \quad (2.17)$$

desarrollando  $\phi^{(0)}$  en una serie de estos vectores propios te nemos

$$\phi^{(0)} = \sum_i a_i \phi_i \quad , \quad (2.18)$$

aplicando  $t$  veces el proceso iterativo tendremos

$$\phi^{(t)} = \frac{1}{\lambda^{(t)} \dots \lambda^{(1)}} (A^{-1}B)^t \phi^{(0)} \quad , \quad (2.19)$$

que es igual a

$$\phi^{(t)} = \frac{1}{\lambda^{(t)} \dots \lambda^{(1)}} \sum_i \lambda_i^t a_i \phi_i = \frac{1}{\lambda^{(t)} \dots \lambda^{(1)}} \lambda_1^t \sum_i a_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^t \phi_i \quad (2.20)$$

si alguna norma es tomada en ambos miembros, la componente - de  $\phi^{(0)}$  a lo largo de  $\phi_i$  es multiplicada por  $\left|\lambda_i/\lambda_1\right|^t$  que es menor que uno excepto para  $i = 1$ . Por lo tanto  $\phi^{(t)}$  es proporcional al modo fundamental  $\phi_1$  después de un número suficiente de iteraciones

$$\phi^{(t)} \approx \frac{\lambda_1^t}{\lambda^{(t)} \dots \lambda^{(1)}} a_1 \phi_1 \quad . \quad (2.21)$$

\* NOTA: En general no es cierto que  $A^{-1}B$  tenga un conjunto - completo de eigenvectores, en particular si  $A^{-1}B$  es no-simétrico. Sin embargo, en cualquier caso el método es bueno y  $\phi^{(t)}$  converge al modo fundamental.

Además de la definición (2.16) puede verse que

$$\lambda^{(t+1)} \approx \frac{1}{\lambda_1} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \quad (2.22)$$

La eficiencia del método de potencia puede ser evaluada por la "razón de dominancia"  $d$

$$d = \max_{i \neq 1} \left| \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right| \quad (2.23)$$

donde las  $\lambda_i$  son los eigenvalores de  $A^{-1}B$ , siendo  $\lambda_1$  la  $k_{\text{eff}}$ .

La iteración de fuente de fisión es comunmente llamada - "iteración externa", esta terminología es debida a la frecuente necesidad de efectuar otra iteración llamada "iteración interna" o "iteración de flujo" para calcular  $A^{-1}B\phi^{(n)}$ .

De la ecuación (2.14) se puede observar que cada iteración externa consiste en resolver un problema de difusión de varios grupos con una fuente calculada en la iteración previa; el número de iteraciones externas dependerá del valor - que se desee tener en el error relativo y de la razón de dominancia.

Usualmente el resultado de la iteración externa es una  $k_{\text{eff}}$  la cual es diferente de un valor prefijado usualmente - igual a uno en investigaciones de criticidad, de modo que es necesaria una tercera iteración para obtener  $k_{\text{eff}} = 1$ . Este proceso consiste en hacer varios cálculos de eigenvalores variando la composición y/o las magnitudes geométricas; llevan

do a cabo una interpolación o extrapolación de las  $k_{\text{eff}}$ 's obtenidas, es generalmente fácil conseguir en pocas etapas el valor deseado de la  $k_{\text{eff}}$ .

3.- Problema Básico.

Desarrollando el esquema iterativo dado por las ecuaciones (2.14) a (2.16) tendremos las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned}
 & -\nabla \cdot D^g(\bar{r}) \nabla \tilde{\phi}_g^{(n)}(\bar{r}) + \sum_{g'}^g(\bar{r}) \tilde{\phi}_{g'}^{(n)}(\bar{r}) - \sum_{g' < g} \sum_s^{g' \rightarrow g}(\bar{r}) \tilde{\phi}_{g'}^{(n)}(\bar{r}) - \sum_{g' > g} \sum_s^{g' \rightarrow g}(\bar{r}) \tilde{\phi}_{g'}^{(n-1)}(\bar{r}) \\
 & = \sum_{g'=1}^G \chi_g(\nu \Sigma_f)_{g'} \phi_{g'}^{(n-1)}(\bar{r}) \quad g = 1, \dots, G, \quad (2.24)
 \end{aligned}$$

$$\lambda^{(n)} = \frac{\sum_{g=1}^G \int_{\Omega} (\nu \Sigma_f)_g \tilde{\phi}_g^{(n)}(\bar{r}) d\bar{r}}{\sum_{g=1}^G \int_{\Omega} (\nu \Sigma_f)_g \phi_g^{(n-1)}(\bar{r}) d\bar{r}} \quad (2.25)$$

$$\phi_g^{(n)} = \frac{1}{\lambda^{(n)}} \tilde{\phi}_g^{(n)} \quad g = 1, \dots, G. \quad (2.26)$$

Desarrollando la ec. (2.24) y pasando los términos que incluyen alguna sección de dispersión, tendremos para cada iteración externa (índice n), el siguiente sistema de ecuaciones.

$$-\nabla \cdot D^1(\bar{r}) \nabla \tilde{\phi}_1^{(n)}(\bar{r}) + \sum_1^1(\bar{r}) \tilde{\phi}_1^{(n)}(\bar{r}) = \sum_{g' > 1} \sum_s^{g' \rightarrow 1}(\bar{r}) \tilde{\phi}_{g'}^{(n-1)}(\bar{r}) + \sum_{g'=1}^G \chi_1(\nu \Sigma_f)_{g'} \phi_{g'}^{(n-1)}(\bar{r})$$

$$\begin{aligned}
& -\nabla \cdot D^2(\bar{r}) \nabla \tilde{\phi}_2^{(n)}(\bar{r}) + \sum_s^{1+2}(\bar{r}) \tilde{\phi}_2^{(n)}(\bar{r}) = \sum_s^{1+2}(\bar{r}) \tilde{\phi}_1^{(n)}(\bar{r}) + \sum_{g' > 2} \sum_s^{g'+2}(\bar{r}) \phi_{g'}^{(n-1)}(\bar{r}) + \\
& + \sum_{g'=1}^G \chi_2(\nu \Sigma_f)_{g'} \phi_{g'}^{(n-1)}(\bar{r}) \quad \cdot \quad (2.27) \\
& \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \cdot \\
& \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \cdot
\end{aligned}$$

$$-\nabla \cdot D^G(\bar{r}) \nabla \tilde{\phi}_G^{(n)}(\bar{r}) + \sum_G(\bar{r}) \tilde{\phi}_G^{(n)}(\bar{r}) = \sum_{g' < G} \sum_s^{g'+G}(\bar{r}) \tilde{\phi}_{g'}^{(n)}(\bar{r}) + \sum_{g'=1}^G \chi_G(\nu \Sigma_f)_{g'} \phi_{g'}^{(n-1)}(\bar{r})$$

Este sistema consta de  $G$  ecuaciones, una para cada grupo, que pueden ser resueltas una por una en forma independiente, usando para resolver la ecuación para el grupo  $g$  el resultado obtenido al resolver la ecuación para el grupo anterior o sea para el grupo  $g-1$ . Cada una de estas ecuaciones es del mismo tipo, por lo tanto cada etapa más sencilla del esquema implica la solución de un problema básico.

Cada una de estas  $G$  ecuaciones es de la forma:

$$L\phi(\bar{r}) = -\nabla \cdot D(\bar{r}) \nabla \phi(\bar{r}) + \sum(\bar{r}) \phi(\bar{r}) = S(\bar{r}), \quad (2.28)$$

$\bar{r} \in \Omega$

donde  $S(\bar{r})$ , como puede verse en (2.27), es una función conocida y  $\phi(\bar{r})$  está sujeta a las condiciones de frontera.

$$\alpha(\bar{r}_e) \phi(\bar{r}_e) + \beta(\bar{r}_e) D(\bar{r}_e) \nabla \phi(\bar{r}_e) \cdot \hat{n}_e = 0, \quad \forall \bar{r}_e \in \partial_e \Omega, \quad (2.29)$$

y a las condiciones de continuidad entre interfaces

$$\phi(\bar{r}_i+0) = \phi(\bar{r}_i-0) ,$$

(2.30)

$$D(\bar{r}_i+0)\nabla\phi(\bar{r}_i+0)\cdot\hat{n}_i = D(\bar{r}_i-0)\nabla\phi(\bar{r}_i-0)\cdot\hat{n}_i ,$$

$$\forall \bar{r}_i \in \partial_i \Omega$$

Puesto que estas  $G$  ecuaciones pueden ser resueltas cada una en forma independiente de las otras, finalmente el problema se reduce a resolver únicamente un problema evaluado a la frontera, elíptico, autoadjunto, simétrico, inhomogéneo del tipo de la ecuación (2.28), con condiciones a la frontera y de continuidad dadas por (2.29) y (2.30).

En nuestro caso, el volumen  $\Omega$  del reactor, es un conjunto acotado en el espacio euclidiano de dos dimensiones  $E_2$ ;  $\Omega$  es la unión de un número finito de subdominios  $\Omega_i$  con propiedades de materiales constantes:  $\Omega = \bigcup_{i=1}^I \Omega_i$ . La frontera  $\partial\Omega = \bar{\Omega} - \Omega$  contiene dos partes;  $\partial_e\Omega$  la frontera externa y  $\partial_i\Omega$  la frontera interna, la cual es el conjunto de todas las interfaces entre medios de diferentes propiedades, por lo tanto  $\partial\Omega = \partial_e\Omega \cup \partial_i\Omega$ . Usualmente  $\partial\Omega$  es lineal por partes o sea lineal entre cada dos vértices sucesivos y así suave por partes en el sentido ordinario, o sea, tiene todas sus derivadas.

En la ecuación (2.28),  $D(\bar{r})$  es el coeficiente de difusión mientras que  $\Sigma(\bar{r})$  es la sección eficaz de remoción;

usualmente son constantes sobre cada subdominio  $\Omega_i$  para cada grupo.

$$D(\bar{r}) = D_i \quad \text{y} \quad \sum(\bar{r}) = \sum_i \quad \forall \quad \bar{r} \in \Omega_i \quad (2.31)$$

Además son estrictamente positivas y acotadas, así que existen constantes positivas  $D_k, D_k, \sum_k, \sum_k$  tales que

$$\begin{aligned} 0 < D_k &= \min_{i=1, \dots, I} D_i ; & 0 < \sum_k &= \min_{i=1, \dots, I} \sum_i, \\ \max_{i=1, \dots, I} D_i &= D_k < \infty ; & \max_{i=1, \dots, I} \sum_i &= \sum_k < \infty \end{aligned} \quad (2.32)$$

Finalmente, la fuente  $S(\bar{r})$  es una función calculada en la iteración previa, usualmente continua sobre cada  $\Omega_i$  y así continua por partes sobre .

En la ecuación (2.29)  $\alpha(\bar{r}_e)$  y  $\beta(\bar{r}_e)$  son dos funciones - no negativas de  $\bar{r}_e$  las cuales no pueden ser iguales a cero - al mismo tiempo.

$$\alpha(\bar{r}_e), \beta(\bar{r}_e) \geq 0 \quad \text{y} \quad \alpha(\bar{r}_e) + \beta(\bar{r}_e) \geq 0 \quad (2.33)$$

$$\forall \quad \bar{r}_e \in \partial_e \Omega$$

Además estas funciones son usualmente constantes por partes entre dos vértices sucesivos de  $\partial_e \Omega$ .

CAPITULO III.- Solución a la Ecuación Elíptica Inhomogénea -  
por el Método de Elementos Finitos.

1.- Propiedades Generales de la Solución.

Como hemos visto anteriormente, nuestro problema en cada etapa más simple consiste en resolver la ecuación del tipo

$$L\phi(\bar{r}) = -\nabla \cdot D(\bar{r}) \nabla \phi(\bar{r}) + \lambda(\bar{r}) \phi(\bar{r}) = S(\bar{r}) \quad \bar{r} \in \Omega \quad (3.1)$$

con condiciones de frontera

$$\alpha(\bar{r}_e) \phi(\bar{r}_e) + \beta(\bar{r}_e) D(\bar{r}_e) \nabla \phi(\bar{r}_e) \cdot \bar{n}_e = 0 \quad \forall \bar{r}_e \in \partial_e \Omega \quad (3.2)$$

y condiciones de continuidad

$$\phi(\bar{r}_i+0) = \phi(\bar{r}_i-0) \quad (3.3)$$

$$D(\bar{r}_i+0) \nabla \phi(\bar{r}_i+0) \cdot \hat{n}_i = D(\bar{r}_i-0) \nabla \phi(\bar{r}_i-0) \cdot \hat{n}_i \quad \forall \bar{r}_i \in \partial_i \Omega$$

donde  $L$  es el operador diferencial,  $S(\bar{r})$  es una función dada y  $\phi(\bar{r})$  es la función incógnita. La ecuación (3.1) es del tipo elíptico, inhomogénea y sus coeficientes son continuos por partes; este problema es tan complejo, que no existe solución exacta y para resolverlo es necesario usar métodos aproximados de solución.

En este capítulo estudiaremos las bases del M.E.F., ver



mos que es posible plantear un problema elíptico con valores a la frontera como un problema variacional, analizaremos el método variacional de Ritz-Galerkin y se describirá la aproximación de elementos finitos.

Como ya se ha mencionado, nuestro problema, Ec. (3.1) a (3.3), es equivalente a un problema variacional; demostraremos más adelante que la solución  $\phi(\bar{r})$ , debe minimizar estrictamente la funcional variacional

$$I(\phi) = \int_{\Omega} (D\nabla\phi^T \cdot \nabla\phi + \sum \phi^2 - 2\phi S) d\bar{r} + \int_{\partial_e \Omega} \frac{\alpha}{\beta} \phi^2 d\bar{r}_e \quad (3.4)$$

donde

$$\partial_e \Omega \equiv \left\{ \bar{r}_e \in \partial_e \Omega, \beta(\bar{r}_e) > 0 \right\}.$$

En (6, 10, 17) se demuestra que si los coeficientes  $D(\bar{r})$ ,  $\sum(\bar{r})$  y el término inhomogéneo  $S(\bar{r})$  de nuestro problema son suficientemente lisos; y el operador  $L$  es lineal, simétrico y positivo, definido sobre un dominio  $D(L)$ ; es entonces posible encontrar una solución "clásica" o "fuerte" del problema, consistiendo de funciones con primera y segunda derivadas continuas en  $\Omega$ , las cuales satisfacen las condiciones a la frontera y las condiciones entre interfaces; tales funciones forman un espacio de Hilbert. En particular, el dominio de funciones  $D(L)$  está contenido en el espacio de Hilbert  $W_2^{(10)}$ ,

el espacio de funciones con segunda derivada (subíndice) cuadráticamente integrable sobre  $\Omega$  (superíndice). Resolver el problema clásicamente es estrictamente equivalente a minimizar la funcional variacional cuadrática  $I(\phi)$  sobre  $W_2^0$ .

Cuando no se tienen las condiciones de continuidad para los coeficientes, y en particular cuando son funciones continuas por partes, como en el caso de nuestro problema, la solución "clásica" ya no existe, puesto que las propiedades de continuidad requeridas para  $\phi(r)$  ya no se cumplen; sin embargo siempre tiene sentido minimizar  $I(\phi)$  no sólo sobre  $D(L)$ , sino sobre un dominio mayor que dé sentido a  $I(\phi)$ , obteniendo una solución llamada "débil" o "generalizada". Dentro de este proceso y para nuestro problema particular, es suficiente que  $D(\bar{r})$  y  $\gamma(\bar{r})$  sean funciones continuas (en particular constantes) por partes, y que  $S(\bar{r})$  pertenezca a  $W_0^2(\Omega)$ , para que  $I(\phi)$  tenga significado.

Al efectuar este proceso,  $D(L)$  es reemplazado por el espacio de funciones de Sobolev  $W_1^2(\Omega)$ <sup>(17)</sup>, formado por funciones que tienen al menos una derivada generalizada cuadráticamente integrable sobre  $\Omega$  y que satisfacen las condiciones a la frontera "esenciales". Estas condiciones "esenciales" deben ser satisfechas previamente por la solución; y son las de orden  $m-1$  si la ecuación es de orden  $2m$ , en nuestro caso  $m=1$ , y por lo tanto las condiciones "esenciales" son las que involucran sólo a la función  $\phi(r)$  pero no a sus derivadas. La parte de la frontera donde se cumplen estas condiciones es

$$\partial_e''\Omega \equiv \left\{ \bar{r}_e : \bar{r}_e \in \partial_e \Omega; \beta(\bar{r}_e) = 0 \right\} ,$$

Las otras condiciones a la frontera son "naturales" y no es necesario que se satisfagan previamente, siendo la parte de la frontera donde se cumplen

$$\partial_e'\Omega \equiv \left\{ \bar{r}_e : \bar{r}_e \in \partial_e \Omega; \beta(\bar{r}_e) > 0 \right\} .$$

## 2.- Formulación Variacional y Método de Ritz-Galerkin.

En esta sección se mencionan tres teoremas tomados de la literatura<sup>(6)</sup>, que constituyen las bases del método de Ritz-Galerkin aplicado a nuestro problema particular. El primero demuestra que la solución del problema elíptico considerado minimiza estrictamente la funcional variacional  $I(\phi)$  sobre  $\dot{W}_1^2(\Omega)$ . El segundo demuestra que el método de Ritz-Galerkin, que consiste en usar solo un subespacio de dimensión finita de  $\dot{W}_1^2(\Omega)$ , proporciona una aproximación a la función que minimiza  $I(\phi)$ . El tercer teorema demuestra la convergencia de la aproximación obtenida con el método de Ritz-Galerkin.

Denotemos con  $W_1^2$  al espacio de funciones de Sobolev con derivadas cuadrado integrables hasta de primer orden.  $W_1^2(\Omega)$  es un espacio de Hilbert en el cual se definen el producto interno y la norma como sigue:

$$(u, v)_1 = \int_{\Omega} (\nabla u^T \cdot \nabla v + uv) d\bar{r} , \quad (3.5)$$

$$||u||_1^2 = (u, u)_1 \quad (3.6)$$

Sea  $\overset{\circ}{W}_1^2(\Omega)$  el subespacio de funciones del espacio  $W_1^2(\Omega)$  el cual satisface las condiciones "esenciales" a la frontera sobre  $\partial_e \Omega$ , o sea las que involucran sólo a  $\phi(r)$ , tenemos que:

TEOREMA 1.- La solución  $\phi(r)$  de las ecuaciones (3.1) a (3.3) minimiza estrictamente la funcional variacional  $I(\phi)$ , - ec. (3.4), sobre el espacio de funciones  $\overset{\circ}{W}_1^2(\Omega)$ .

[X] Dem. Consideremos  $\psi(\bar{r}) = \phi(\bar{r}) + \delta\phi(\bar{r}) \in \overset{\circ}{W}_1^2(\Omega)$  así que

$$\delta\phi(\bar{r}) = \psi(\bar{r}) - \phi(\bar{r}) \in \overset{\circ}{W}_1^2(\Omega) \quad .$$

Entonces

$$\begin{aligned} I(\psi) &= \int_{\Omega} (D\nabla\psi \cdot \nabla\psi + \sum \psi^2) d\bar{r} + \int_{\partial_e \Omega} \frac{\alpha}{\beta} \psi^2 d\bar{r}_e - 2 \int_{\Omega} \psi S d\bar{r} \quad (3.7) \\ &= I(\phi) + B(\delta\phi, \delta\phi) + 2 \int_{\Omega} (D\nabla\phi \cdot \nabla\delta\phi - \sum \phi\delta\phi - S\delta\phi) d\bar{r} + \\ &\quad + 2 \int_{\partial_e \Omega} \frac{\alpha}{\beta} \phi\delta\phi d\bar{r}_e \quad , \end{aligned}$$

donde

$$B(u, v) = \int_{\Omega} (D\nabla u \cdot \nabla v + \sum uv) d\bar{r} + \int_{\partial_e \Omega} \frac{\alpha}{\beta} uv d\bar{r}_e \quad (3.8)$$

Integrando por partes y tomando en cuenta las condicio-

nes "esenciales" de frontera satisfechas por ambas  $\phi$  y  $\delta\phi$  sobre  $\partial_e \Omega$ , los últimos dos términos de la ec. (3.7) serán

$$2 \int_{\Omega} (-\nabla \cdot D\nabla\phi + \sum \phi - s) \delta\phi d\bar{r} + 2 \int_{\partial_e \Omega} D\nabla\phi \cdot \bar{n}_e \delta\phi d\bar{r}_e + 2 \int_{\partial_e \Omega} \frac{\alpha}{\beta} \phi \delta\phi d\bar{r}_e \quad (3.9)$$

$$= 2 \int_{\Omega} (-\nabla \cdot D\nabla\phi + \sum \phi - s) \delta\phi d\bar{r} + 2 \int_{\partial_e \Omega} \left( -\frac{\alpha}{\beta} \phi \delta\phi + \frac{\alpha}{\beta} \phi \delta\phi \right) d\bar{r}_e \equiv 0 ,$$

porque  $\phi$  satisface las ec. (3.1) y (3.2). Por lo tanto

$$I(\psi) = I(\phi) + B(\delta\phi, \delta\phi), \quad (3.10)$$

donde  $B(\delta\phi, \delta\phi)$  es positiva definida

$$B(\delta\phi, \delta\phi) \geq 0 \quad \text{con } B(\delta\phi, \delta\phi) = 0 \text{ si y solo si } \delta\phi \equiv 0, \quad (3.11)$$

como una consecuencia de las propiedades de positividad de  $D(\bar{r})$  y  $\sum(r)$ ; por lo tanto

$$I(\psi) \geq I(\phi) \quad \text{con } I(\psi) = I(\phi) \text{ si y solo si } \psi \equiv \phi. \quad \boxed{X} \quad (3.12)$$

En la práctica es imposible minimizar  $I(\phi)$  sobre todo  $\overset{\circ}{W}_1^2(\Omega)$ , el método de Ritz-Galerkin consiste en usar un subespacio  $S^N$  de  $\overset{\circ}{W}_1^2(\Omega)$  de dimensión finita  $N$ .

TEOREMA 2. Dado cualquier subespacio de dimensión finita  $S^N$  de  $W_1^2(\Omega)$  existe un y sólo un elemento  $\phi_A$  de  $S^N$  el cual minimiza  $I(\phi)$  sobre  $S^N$ . Este elemento es la "mejor" aproximación de  $\phi$  en  $S^N$  en el sentido de la norma de "energía" dada por la ec. (3.8).

$$B(\phi - \phi_A, \phi - \phi_A) = \inf_{\psi \in S^N} B(\phi - \psi, \phi - \psi) \quad (3.13)$$

[X] Dem. Consideremos una base  $\{W_i, i=1, \dots, N\}$  en  $S^N$  de dimensión  $N$ .

Minimizando  $I(\phi)$  sobre  $S^N$  obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$\sum_{j=1}^N B(W_j, W_i) a_j = \int_{\Omega} S W_i d\bar{r}, \quad i = 1, \dots, N \quad (3.14)$$

donde las  $a_j$  son los coeficientes del desarrollo en serie de  $\phi_A$  sobre las  $W_j$

$$\phi_A = \sum_{j=1}^N a_j W_j(\bar{r}), \quad (3.15)$$

así que la ec. (3.14) puede escribirse como

$$B(\phi_A, W_i) = \int_{\Omega} S W_i d\bar{r} \quad i = 1, \dots, N \quad (3.16)$$

Por otra parte, puede ser verificado fácilmente que la

solución  $\phi$  satisface

$$B(\phi, W_i) = \int_{\Omega} \phi W_i d\bar{r} \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad (3.17)$$

usando las ec. (3.16) y (3.17) tenemos

$$B(\phi - \phi_A, W_i) = 0 \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad (3.18)$$

de esta ecuación podemos observar que  $\phi_A$  es la proyección ortogonal de  $\phi$  sobre  $S^N$  con respecto al producto escalar  $B(\dots)$ . Siendo  $S^N$  un subespacio de dimensión finita de  $\overset{\circ}{W}_1^2(\Omega)$ , sabemos que  $\phi_A$  existe y es única y tenemos además, por el teorema de la proyección ortogonal<sup>(18)</sup>

$$B(\phi - \phi_A, \phi - \phi_A) = \inf_{\psi \in S^N} B(\phi - \psi, \phi - \psi) \quad [X] \quad (3.19)$$

Finalmente, es posible probar un tercer teorema que establece la convergencia hacia  $\phi$  de una serie de aproximaciones  $\phi_A^i$  la cual corresponde a una serie de subespacios crecientes  $S^N$  de  $\overset{\circ}{W}_1^2(\Omega)$ , de esta manera, cualquier elemento de  $\overset{\circ}{W}_1^2(\Omega)$  (y en particular  $\phi$ ) puede ser aproximado tanto como se quiera por una secuencia de elementos de estos subespacios en el caso límite cuando  $i \rightarrow \infty$ . Fig. 1.

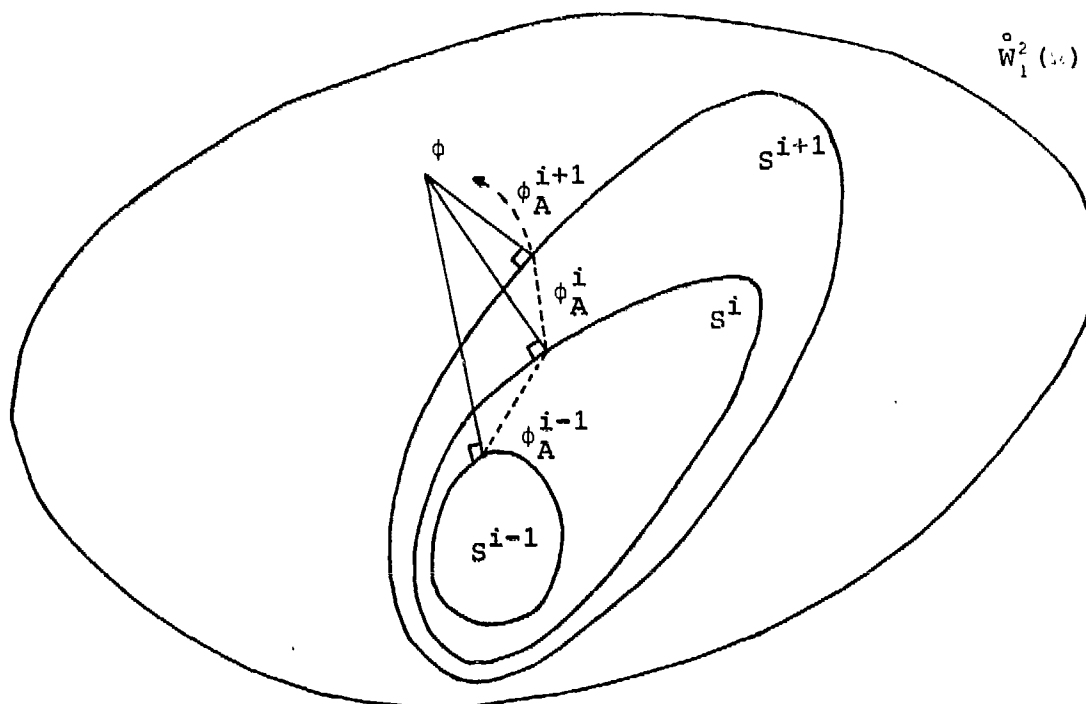


Fig. 1.- Convergencia de las aproximaciones  $\phi_A^i$  a la solución  $\phi$ .

TEOREMA 3.- Sea  $\{S^{N_i}; i=1, \dots, \infty\}$  una secuencia de subespacios crecientes de dimensiones finitas de  $\overset{\circ}{W}_1^2(\Omega)$  los cuales cubren densamente a  $\overset{\circ}{W}_1^2(\Omega)$  en la norma de energía. Entonces la secuencia de las aproximaciones "mejores" correspondientes  $\{\phi_A^i; i = 1, \dots, \infty\}$  converge a  $\phi$  en la norma de energía y también en la norma  $\|\cdot\|_1$ .

La última parte de este Teorema viene de la equivalencia entre la norma de energía y la norma  $\|\cdot\|_1$ .<sup>(10)</sup>

$$m_B \|u\|_1^2 \leq B(u, u) \leq M_B \|u\|_1^2 \quad \forall u \in \overset{\circ}{W}_1^2(\Omega) \quad (3.20)$$



la cual es una consecuencia directa del hecho que  $D$  y  $\int$  son positivos y acotados (ec. 2.32). El interés de usar la norma  $||\cdot||_1$  en lugar de la norma de energía viene de su mayor simplicidad, pues no contiene términos a la frontera y no depende de  $D$  y  $\int$ . Además muchos resultados de la teoría de aproximación son establecidos en  $W_1^2(\Omega)$ ; por lo que la forma más natural de derivar las cotas en los errores, consiste en tomar como un miembro particular  $\psi$  de  $S^N$  en la Ec. (3.19) la "interpolación"  $\phi_I$  de  $\phi$ , para la cual,  $||\phi_I - \phi||_1$  puede ser acotada (así como  $B(\phi_I - \phi, \phi_I - \phi)$  usando la ec. (3.20)).

### 3.- Elementos finitos.

El método de elementos finitos proporciona una forma de escoger el subespacio de dimensión finita  $S^N$  del espacio de Sobolev  $W_1^2(\Omega)$  y por lo tanto de construir las funciones coordenadas o funciones de base  $W_1$ , que servirán para obtener la solución a nuestro problema variacional.

En primer lugar,  $\Omega$  es aproximado por la unión  $\Omega_h \equiv \cup e_m$  de un número finito de subdominios polinomiales  $e_m$  (en dos dimensiones, triángulos o rectángulos) como se muestra en la Fig. 2

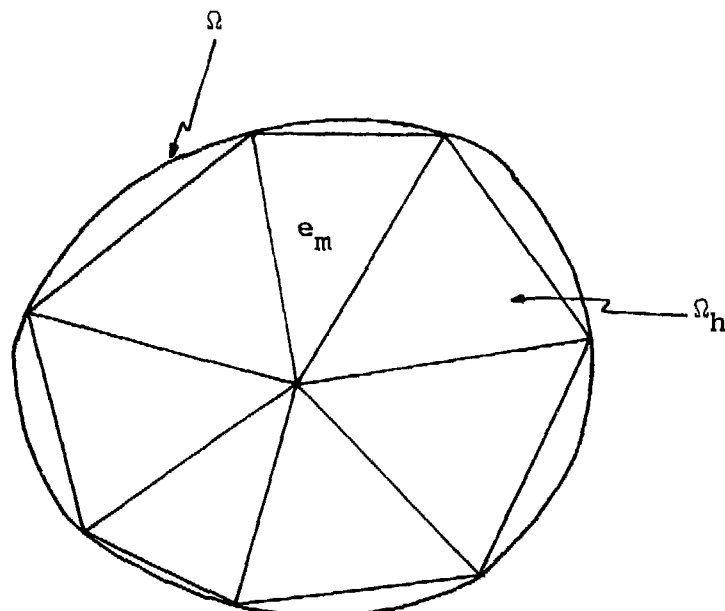


Fig. 2.- Ejemplo de aproximación de la superficie  $\Omega$  por la unión  $\Omega_h$  de elementos triangulares.

Sobre cada "elemento"  $e_m, \phi_A(\bar{r})$  será una función sencilla, escogida usualmente como un polinomio (de grado especificado  $k$ ) que estará completa y únicamente determinado por su conducta local o sea su conducta dentro del elemento  $e_m$  asociado, por lo tanto los subespacios  $S^N$  consistirán de funciones  $\phi_A(\bar{r})$  las cuales serán polinomios por partes sobre  $\Omega$ . - Esta técnica de aproximación es conocida como el método de elementos finitos. Debido a que  $S^N$  es un subespacio de  $W_1^2(\Omega)$ ,  $\phi_A(\bar{r})$  debe ser continua a través de las fronteras entre elementos y debe satisfacer las condiciones "esenciales" a la frontera sobre  $\partial_e \Omega$ .

Una etapa muy importante del método es la construcción de una base para el subespacio de dimensión finita, tomando

en cuenta la geometría que se ha escogido.

Supongamos que  $\Omega$  ha sido aproximado por triángulos, denotemos con  $\phi^r$  la expansión de  $\phi_A(\bar{r})$  sobre el m-ésimo elemento  $e_m$  y sea  $\phi^m$  un polinomio completo de grado  $k$  (comprendiendo todos los términos  $x^p y^q$  con  $p+q \leq k$ ). La forma general de este polinomio es

$$\phi^m(x,y) = \sum_{p=0}^k \sum_{q=0}^{k-p} \alpha_{pq} x^p y^q \quad \bar{r} \in (x,y) \in e_m \quad (3.21)$$

el número total de términos es  $N_t = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$ , por lo que necesitamos precisamente  $N_t$  parámetros o datos en el elemento  $e_m$  para que el polinomio esté determinado únicamente por su conducta local, estos parámetros pueden ser escogidos como los valores de la función y eventualmente de sus derivadas en un cierto número de puntos del triángulo: los polinomios obtenidos de esta forma son llamados polinomios interpolados. - Cuando se usan los valores de la función y de sus derivadas tenemos los polinomios interpolados de Hermite; si sólo usamos los valores de la función tendremos los polinomios interpolados de Lagrange; aquí se trabajará con estos últimos. - Ahora bien, entre cada dos vértices de  $e_m$ ,  $\phi_A^m$  se reduce a un polinomio (sobre una variable local) de grado  $k$  y por lo tanto puede ser completa y únicamente determinado por  $(k+1)$  parámetros, los cuales pueden ser convenientemente escogidos como los valores en  $(k+1)$  puntos sobre la línea que une estos vértices, teniendo por ejemplo  $(k-1)$  puntos equidistantes entre los vértices mismos. Si los mismos valores nodales

son especificados sobre el elemento adjunto a  $e_m$  a lo largo de su lado común, es fácil darse cuenta que la condición de continuidad entre elementos se satisface automáticamente. El número de nodos necesario por cada elemento para satisfacer este requisito es  $N_e = 3k$  y son llamados nodos externos, esto es debido a que si  $k > 2$  debemos introducir nodos internos de tal suerte que  $N_t = N_e + N_i$  teniendo  $\frac{1}{2}(k-1)(k-2)$  nodos internos por cada elemento. En la Fig. 3 se ilustran distribuciones típicas de nodos para elementos triangulares.

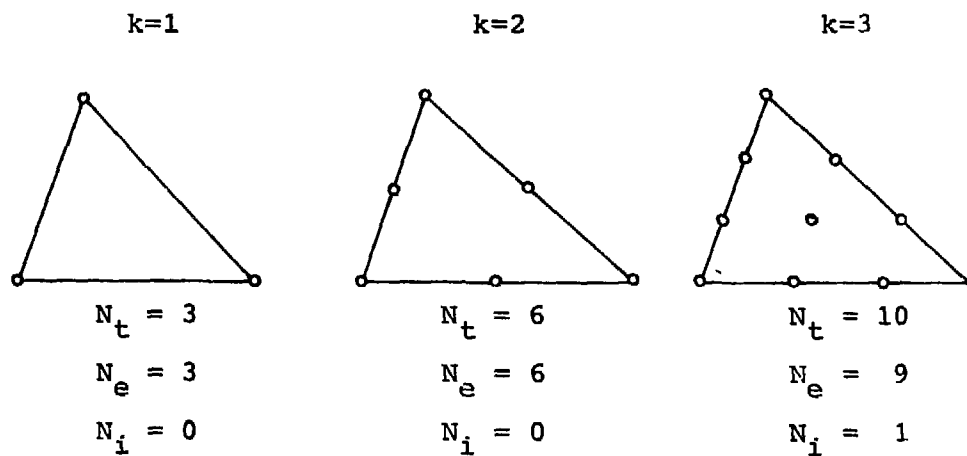


Fig. 3.- Nodos asociados a un triángulo para distintos grados  $k$  de las funciones polinomiales base.

En la práctica la forma general del polinomio (3.21) es reemplazada por un desarrollo donde aparecen explícitamente valores nodales de la función  $\{\phi_j^m ; j=1, \dots, N_t\}$ .

$$\phi^m(\bar{r}) = \sum_{j=1}^{N_t} \phi_j^m W_j^m(\bar{r}) \quad \bar{r} \in e_m \quad (3.22)$$

donde  $W_j^m(\bar{r})$  es la restricción de la función base  $W_j(\bar{r})$  en el elemento  $e_m$ . Con cada nodo en  $\bar{\Omega}$  tenemos asociada una función de base  $W_j$ , la cual tiene un soporte mínimo o sea que  $W_j$ , se anula fuera de la unión de los triángulos a los cuales este  $j$ -ésimo nodo pertenece. Así tendremos que  $W_j^m(\bar{r}) \equiv 0$  si el nodo  $j$  no pertenece al elemento  $m$ , esto demuestra el carácter "local" de las funciones de base;  $W_j^m(\bar{r})$  es diferente de cero solo para los elementos a los cuales el nodo  $j$  pertenece. Además  $W_j$  tendrá el valor uno en el  $j$ -ésimo nodo y el valor cero en todos los otros nodos dentro de su soporte. Por lo anterior  $W_j^m(\bar{r})$  satisface las siguientes condiciones

$$W_j^m(\bar{r}_k) = \delta_{jk} \quad j = k = 1, \dots, N_t \quad (3.23)$$

Con el fin de simplificar las expresiones de las funciones de base es conveniente adoptar un sistema de coordenadas "locales".

Para elementos triangulares las vecindades de los elementos son tomadas como líneas de coordenada cero, las coordenadas triangulares homogéneas  $(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$  son definidas por la geometría de la Fig. 4.

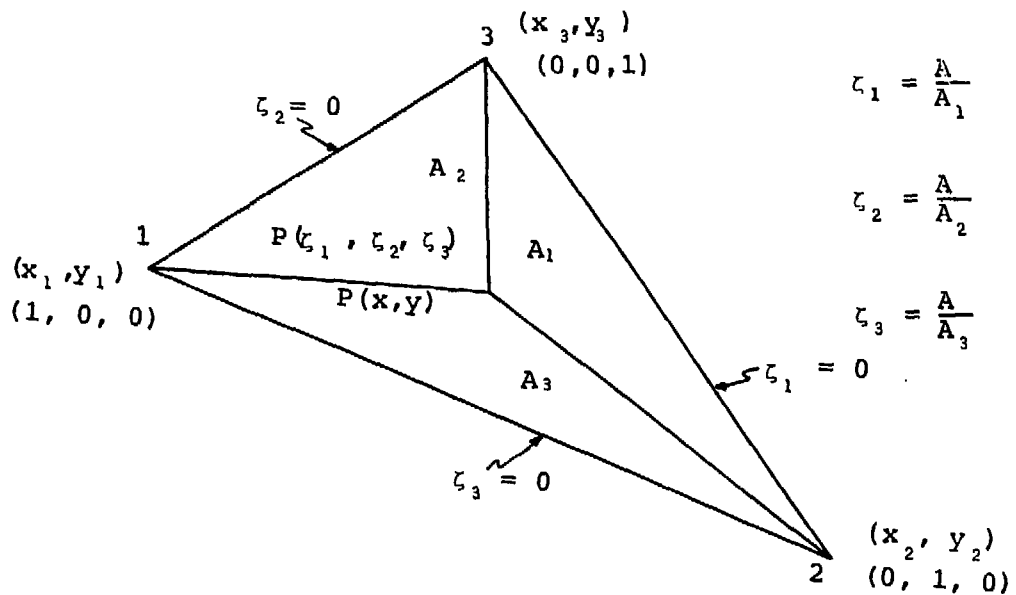


Fig. 4.- Coordenadas triangulares homogéneas.

La relación entre  $(x, y)$  y  $(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$  es lineal y está dada por

$$\begin{vmatrix} 1 \\ x \\ y \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \end{vmatrix} \quad (3.24)$$

El interés de estas coordenadas locales es que las funciones de base pueden ser evaluadas una sola vez independientemente de la forma y magnitud del elemento considerado; la relación (3.24) permite el cambio de estas coordenadas locales a las globales  $(x, y)$ .

Habiendo construido las funciones de base como se indica antes, si  $\Omega_h$  es obtenido de la unión de un número finito de elementos  $e_m$  con un número total de nodos  $N$  (la dimensión del subespacio  $S^N$ ) tendremos que la solución aproximada  $\phi_A(\bar{r})$  a nuestro problema ecs. (3.1) a (3.3) es

$$\phi_A(\bar{r}) = \sum_{j=1}^N \phi_j W_j(\bar{r}) \quad (3.25)$$

Supóngase ahora que  $\Omega$  es aproximado por rectángulos, caso con el que se trabaja aquí. Sea  $\Omega \in R^2$  el rectángulo  $[a_1, b_1] \times [a_2, b_2]$ , a lo largo de cada coordenada  $r_i$  introducimos una partición  $\pi_i = [a_i \equiv r_i^0, r_i^1, \dots, r_i^{N_i}, r_i^{N_i+1} \equiv b_i]$  de tal forma que  $\Omega$  sea la unión de los rectángulos elementales

$$R_{n_1, n_2} = [r_1^{n_1}, r_1^{n_1+1}] \times [r_2^{n_2}, r_2^{n_2+1}] \quad \begin{matrix} n_1 = 0, \dots, N_1 \\ n_2 = 0, \dots, N_2 \end{matrix}$$

Sobre cada uno de estos elementos rectangulares es conveniente usar para la expansión  $\phi^m$  de  $\phi_A(\bar{r})$  polinomios bicompletos de grado  $k$  (comprendiendo todos los términos  $x^p y^q$  con  $p, q \leq k$ ) cuya forma general es

$$\phi^m(x, y) = \sum_{p=0}^k \sum_{q=0}^k \alpha_{pq} x^p y^q \quad (3.26)$$

el número total de términos es  $N_t = (k+1)^2$ .

Puesto que los ejes  $x, y$  son tomados a lo largo de los

lados de los elementos, el número de valores necesario para cumplir con la condición de continuidad de  $\phi_A(\bar{r})$  es  $N_e=4k$ ; - para  $k \geq 2$  tendremos  $(k-1)^2$  nodos internos por cada rectángulo.

Como en el caso de triángulos, es también conveniente - usar coordenadas "locales", conviene entonces usar la forma conocida como "producto-tensor" y que se escribe de la siguiente manera

$$\phi^m(\ell_1, \ell_2) = \sum_{i=1}^{k+1} \sum_{j=1}^{k+1} \zeta_i(\ell_1) \zeta_j(\ell_2) \phi^m(\ell_1^i, \ell_2^j) \quad (3.27)$$

$$0 < \ell_1, \ell_2 < 1$$

donde  $\ell_i$  son las coordenadas "locales" definidas sobre cada elemento como sigue:

$$\ell_i = (r_i - r_i^{n_i}) / (r_{i+1}^{n_i} - r_i^{n_i}) \quad i = 1, 2 \quad (3.28)$$

en la Ec. (3.27) las funciones  $\zeta_i(\ell)$  son polinomios de base del tipo Langrage satisfaciendo

$$\zeta_j(\ell^i) = \delta_j^i \quad i, j = 1, \dots, k \quad (3.29)$$

donde  $\ell^i$   $i=1, \dots, k$  son  $k$  puntos en  $[0, 1]$  tomados generalmente como  $\ell^j = (j-1)/(k-1)$ . Usando las Ecs. (3.29) las fun-



ciones polinomiales de base pueden ser fácilmente escritas -  
como

$$r_j(\ell) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^k \left( \frac{\ell - \ell^i}{\ell^j - \ell^i} \right) \quad (3.30)$$

y estas funciones de base pueden ser calculadas una sola vez independientemente de las magnitudes de los elementos rectangulares.

Por ejemplo, en el caso de una dimensión se define una variable  $\ell$  que tiene el valor cero en el nodo donde se inicia el elemento finito y uno en el nodo final del mismo elemento. En la fig. 5 se muestran las funciones de base de un elemento finito en el caso de una dimensión para diferentes grados de la función polinomial.

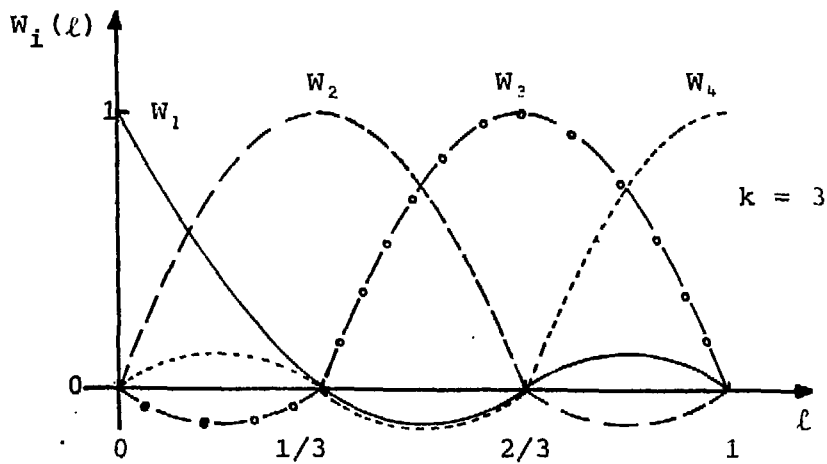
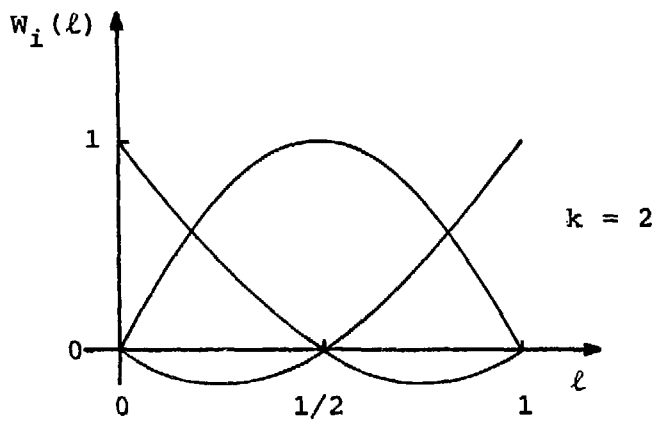
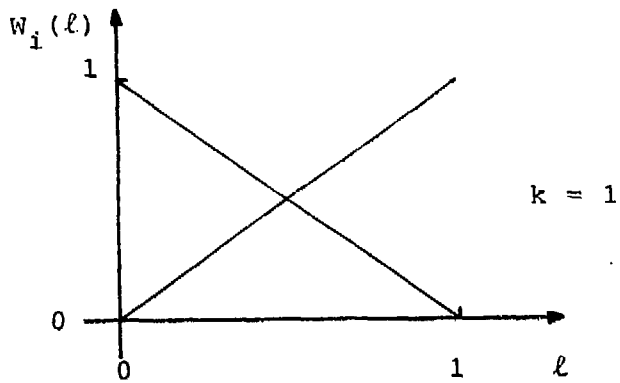


Fig. 5.- Funciones de base  $W_i$  para un elemento finito en una dimensión, con diferente grado  $k$  de la función polinomial.

Con coordenadas "globales"  $\bar{r} = [r_1, r_2]$  los miembros de  $S^N$  serán:

$$\phi_A(\bar{r}) = \sum_{j=1}^N \phi_j W_j(\bar{r}) \quad (3.35)$$

siendo  $W_j(\bar{r})$  la función de base correspondiente al nodo  $r^j$  - mientras que el valor nodal  $\phi(r^j)$  es un parámetro libre o - incógnita del problema. Esta ecuación es idéntica a la obtenida para elementos triangulares.

Hemos denotado a la expansión de  $\phi_A(\bar{r})$  sobre el m-ésimo elemento, con  $N_t$  nodos en él, como

$$\phi^m(\bar{r}) = \sum_{j=1}^{N_t} \phi_j^m W_j^m(\bar{r}) \quad \bar{r} \in e_m \quad (3.31)$$

Calculando  $\phi^m(r^j)$  se tiene

$$\phi^m(r^j) = \sum_{j=1}^{N_t} \phi_j^m W_j^m(r^j) \quad (3.32)$$

pero de (3.23)

$$W_j^m(r^j) = \delta_{jj} = 1 \quad (3.33)$$

por lo tanto

$$\phi^m(r^j) = \phi_j^m \quad (3.34)$$

de donde puede verse que la función aproximada  $\phi_A(\bar{r})$  calculada en cualquier nodo  $j$  es igual al parámetro nodal  $\phi_j$ .

4.- Aplicación a la ecuación elíptica de difusión de neutrones.

Usando el método de elementos finitos hemos construido a partir de las funciones de base  $W_j (j=1, \dots, N)$  una función  $\phi(\bar{r})$  de la forma

$$\phi(\bar{r}) = \sum_{j=1}^N \phi_j W_j(\bar{r}) \quad (3.36)$$

que dará una solución aproximada a la ecuación elíptica (2.28) una vez que hayamos determinado los  $N$  parámetros  $\phi_j$

Como vimos en el teorema 2 de este capítulo, tomando para la solución aproximada un desarrollo en series de  $W_j$  idéntico al obtenido con elementos finitos Ecs. (3.15) y (3.26) al minimizar  $I(\phi)$  sobre  $S^N$  se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas dado por la Ec. (3.14), en nuestro caso

$$\sum_{j=1}^N B(W_j, W_i) \phi_j = \int_{\Omega} S W_i \, d\bar{r} \quad i=1, \dots, N \quad (3.37)$$

donde hay  $\phi_j$  ( $j=1, \dots, N$ ) parámetros por determinar.

Introduciendo ahora la siguiente notación

$$\underline{\phi} = [\phi_1, \dots, \phi_N]^T$$

$$\underline{W} = \left[ w_1(\bar{r}), \dots, w_N(\bar{r}) \right]^T \quad (3.38)$$

$$\underline{\nabla W} = \begin{bmatrix} \frac{\partial w_1(\bar{r})}{\partial r_1} & \dots & \frac{\partial w_N(\bar{r})}{\partial r_1} \\ \frac{\partial w_2(\bar{r})}{\partial r_1} & \dots & \frac{\partial w_N(\bar{r})}{\partial r_2} \end{bmatrix}^T$$

de tal manera que la Ec. (3.36) puede escribirse como

$$\phi(\bar{r}) = \underline{W}^T \cdot \underline{\Phi} \quad (3.39)$$

Introduciendo  $\phi(\bar{r})$  en  $I(\phi)$  y minimizando con respecto a los valores nodales  $\phi_j$ , se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones algebraicas

$$\underline{A} \underline{\Phi} = \underline{k} \quad (3.40)$$

donde

$$\underline{A} = \int_{\Omega} (D\underline{\nabla W} \cdot \underline{\nabla W}^T + \Sigma \underline{W} \cdot \underline{W}^T) d\bar{r} + \int_{\partial_e \Omega} \frac{\alpha}{\beta} \underline{W} \cdot \underline{W}^T d\bar{r}_e \quad (3.41)$$

$$\underline{k} = \int_{\Omega} \underline{s} \underline{W} d\bar{r} \quad (3.42)$$

La matriz  $\underline{A}$  es de orden  $N \times N$ , simétrica, positiva definida y de banda o sea que  $a_{ij} \neq 0$  solo si  $j < i - W$  ó  $j > i + W$ , donde  $W$  es el semiancho de banda y está dado por la má-

xima diferencia entre los índices de funciones base  $w_j(\bar{r})$  - que se traslapan y dan por lo tanto una contribución diferente de cero a la matriz  $A$ .

Por lo tanto el sistema puede ser resuelto con métodos directos de inversión con lo que se evita efectuar la iteración interna o de flujo.

Los elementos de la matriz y del vector fuente pueden ser evaluados para un elemento finito cada vez puesto que la integración sobre  $\Omega$  puede ser reescrita como la suma de integrales sobre cada elemento particular  $R_{n_1, n_2}$ ; por lo tanto puede ser construido un DO en el programa FORTRAN que trate cada elemento sucesivamente, calculando su contribución a los elementos de la matriz y al vector fuente y finalmente los agregue a  $A$  y  $k$  en la posición correcta.

## CAPITULO IV.- Características de nuestro problema.

## 1.- Razones de convergencia.

El método de elementos finitos ha sido aplicado en cálculos de reactores nucleares, principalmente porque ofrece la posibilidad de obtener altos ordenes de precisión y, por lo tanto, aproximaciones más exactas que usando diferencias finitas, las cuales son de bajo orden de aproximación. Es entonces importante conocer bajo qué condiciones se alcanzan estas altas precisiones, con lo cual nos daremos cuenta de las limitaciones inherentes al método de elementos finitos cuando se aplica al cálculo de reactores nucleares.

El reactor  $\Omega \in \mathbb{R}^2$  es aproximado por la unión de un número finito de elementos  $e_m$  y los miembros  $\phi_A$  del espacio  $S^N$  se reducen sobre cada elemento a polinomios bicompletos de grado  $k$ . El proceso de minimización sobre  $S^N$  produce el sistema de ecuaciones algebraicas (3.14), o sea

$$\sum_{j=1}^N B(w_j, w_i) a_j = (S, w_i) \quad i=1, \dots, N, \quad (4.1)$$

siendo la solución aproximada

$$\phi_A(\bar{r}) = \sum_{j=1}^N a_j w_j(\bar{r}), \quad (4.2)$$

que es la proyección ortogonal sobre  $S^N$  de la solución real  $\phi(\bar{r})$  según el producto escalar  $B(\dots)$ .

Se notó en el capítulo anterior que  $\phi_A$  existe, es única y es la mejor aproximación a  $\phi$  en el sentido de la norma de energía  $||\cdot||_B$ , por lo tanto

$$||\phi - \phi_A||_B = \inf_{\psi \in S^N} ||\phi - \psi||_B, \quad (4.3)$$

en particular esto se cumple cuando  $\psi$  es la interpolación  $\phi_I$  de  $\phi$  sobre  $S^N$ , esta interpolación tiene un desarrollo similar al de (4.2) pero los coeficientes  $a_j$  serán los valores de la solución verdadera sobre cada nodo  $j$ , por lo tanto

$$||\phi - \phi_A||_B < ||\phi - \phi_I||_B, \quad (4.4)$$

Este resultado es importante pues, si la lisura de  $\phi(\bar{r})$  es conocida, o sea, el orden hasta el cual existen derivadas sucesivas en un sentido puntual o bien cuadrado integrable, es posible conocer muchas propiedades del error de interpolación ( $\phi - \phi_I$ ).

En general una norma en el espacio  $W_m^2$  se define como

$$||u||_m^2 = \sum_{|\alpha| \leq m} \int_{\Omega} d\bar{r} (D^\alpha u)^2, \quad (4.5)$$

con

$$D^\alpha = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x^{\alpha_1} \partial y^{\alpha_2}}, \quad \alpha = (\alpha_1, \alpha_2),$$



$$y \quad |\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2$$

además tenemos que

$$|u|_m^2 = \int_{\Omega} d\bar{r} (D^m u)^2, \quad (4.6)$$

es una seminorma, o sea que puede ser igual a cero para funciones  $u$  diferentes de cero: no es positiva definida. Obviamente

$$||u||_m^2 = |u|_0^2 + |u|_1^2 + \dots + |u|_m^2. \quad (4.7)$$

En la referencia<sup>(10)</sup> se demuestra que para funciones  $\phi(\bar{r})$  con derivadas cuadrado integrables hasta de orden  $k+1$  sobre  $\Omega$ , se tiene

$$|\phi - \phi_I| < C_s h^{k+1-s} |\phi|_{k+1}, \quad s = 0, 1. \quad (4.8)$$

donde  $C_s$  es una constante y  $h = \max h_i$  siendo  $h_i$  el diámetro del elemento  $e_i$ . Esta estimación del error se cumple en primera instancia para cada elemento  $e_i$  y sólo es válida para todo el espacio si  $\phi(r)$  es suficientemente lisa. Se ha supuesto aquí que  $\phi_I$  se reduce a un polinomio completo de orden  $k$  sobre cada elemento  $e_i$ .

De la ec (4.8) se deduce que

$$||\phi - \phi_I||_1 < C_1 h^k |\phi|_{k+1}, \quad (4.9)$$

Además, la equivalencia entre la norma de energía y la norma  $||\cdot||_1$  es <sup>(6, 10)</sup>

$$m_B ||u||_1^2 \leq ||u||_B \leq M_B ||u||_1^2, \quad (4.10)$$

por lo tanto, las propiedades de convergencia en la norma de energía son válidas en la norma  $||\cdot||_1$  y recíprocamente, usando esta equivalencia y la ec. (4.9) tenemos

$$||\phi - \phi_I||_B \leq C_B h^k |\phi|_{k+1}, \quad (4.11)$$

y de la ec. (4.4)

$$||\phi - \phi_A||_B \leq C_B h^k |\phi|_{k+1}. \quad (4.12)$$

Aplicando nuevamente la equivalencia entre las normas - al resultado anterior se obtiene

$$||\phi - \phi_A|| \leq C h^k |\phi|_{k+1} \quad \text{con } C = m_B^{-1/2} C_B. \quad (4.13)$$

De lo anterior puede observarse que el grado de los polinomios por partes usados en la aproximación debe ser al menos igual a uno para que la convergencia exista.

De la ec. (4.13) es fácil obtener

$$||\phi - \phi_A||_0 \leq C h^k |\phi|_{k+1};$$

sin embargo, esta no es la mejor cota para el error en norma  $W_0^2$ . En realidad, de la ec. (4.8) puede observarse para el error  $||\phi - \phi_I||_0$  un comportamiento  $O(h^{k+1})$ , siendo posi-

ble en general probar que

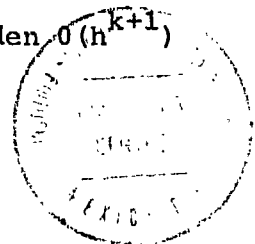
$$\|\phi - \phi_A\|_0 \leq C h^{k+1} |\phi|_{k+1} \quad (4.14)$$

En cuanto a la convergencia para el eigenvalor, se demuestra en la ref. <sup>(10)</sup> que la razón de convergencia es del tipo  $O(h^{2k})$ .

En conclusión, la aproximación  $\phi_A$  al flujo de neutrones  $\phi$ , alcanza razones de convergencia de orden  $O(h^{k+1})$  en norma  $W_0^2$  y la aproximación  $\lambda_A$  al eigenvalor  $\lambda$ , tiene razones de convergencia de orden  $O(h^{2k})$ , si  $\phi$  tiene todas sus derivadas hasta la  $(k+1)$ -ésima en un sentido cuadrado integrable. Si  $\phi$  tiene solo derivadas cuadrado-integrables hasta de orden  $l+1$ , con  $l \leq k$ , la razón de convergencia estará regida por  $l+1$  y no por  $k+1$ .

Esencialmente los reactores nucleares son construidos por la unión de varias regiones  $\Omega_i$  con propiedades de materiales constantes y diferentes en cada región. En las interfaces la corriente normal es continua pero la primera derivada del flujo no lo es; por lo tanto,  $\phi$  no pertenece a  $W_2^2(\Omega)$  y la convergencia sería sólo del tipo  $O(h)$ .

Por fortuna, los argumentos dados anteriormente pueden ser restringidos a cualquier elemento o serie de elementos y, puesto que  $\phi$  es más "suave" al nivel de  $\Omega_i$  que al nivel global  $\Omega$ , se puede esperar alcanzar precisiones de orden  $O(h^{k+1})$



si  $\phi$  posee derivadas cuadrado-integrables hasta de orden  $k+1$  ya no sobre  $\Omega$  sino solamente sobre  $\Omega_i$ . Esto se consigue únicamente si se hace coincidir las interfaces de los materiales con las fronteras de los elementos, lo cual significa que para cada reactor existe una malla mínima, la cual estará formada por todas las interfaces del mismo. De hecho las mallas usadas para el tratamiento se obtienen por refinamientos de la malla mínima.

La malla mínima intrínseca de cada reactor representa una primera y considerable restricción al uso de elementos finitos de alto orden en cálculos de difusión de reactores nucleares. Puesto que el número de incógnitas por elemento aumenta considerablemente con el grado  $k$ , uno se da cuenta fácilmente que el uso de elementos de alto orden para describir el flujo de neutrones en reactores con una estructura fina, como son los reactores de agua presurizada (PWR's) y los reactores de agua hirviente (BWR's), guía a sistemas de ecuaciones algebraicas casi intratables. En la literatura de ingeniería nuclear, se nota que todos los cálculos de alto orden con elementos finitos son restringidos hasta ahora a reactores rápidos de cría (FBR's), los cuales pueden ser descritos con pocas regiones homogéneas debido a las altas energías de los neutrones dentro de ellos.

Dentro de este argumento, hemos supuesto implícitamente que  $\phi$  tiene todas sus derivadas hasta de orden  $k+1$  cuadrado integrables sobre  $\Omega_i$ . Sin embargo, los problemas elípticos -

con coeficientes continuos por partes sobre fronteras suaves por partes, como son las ecuaciones de difusión de neutrones, tienen una conducta singular en rincones e interfaces<sup>(7,10)</sup>, o sea que sobre cada  $\Omega_i$  conteniendo puntos singulares  $\phi$  tiene solamente derivadas de primer orden cuadrado integrables. Si la situación es ésta, la razón de convergencia ya no es gobernada por el grado  $k$  del polinomio, sino por el orden de la singularidad (al menos asintóticamente). La diferencia entre estas razones de convergencia asintóticas (con y sin singularidades) aumenta con  $k$ . Los elementos finitos de alto orden tienen mayor probabilidad de padecer esta situación que los de bajo orden especialmente para reactores altamente heterogéneos como los BWR's y PWR's.

Debido a estas razones, el uso de elementos finitos de alto orden para el cálculo de reactores con una estructura fina, parece ser muy cuestionable. En la ref.<sup>(7)</sup> se describe un camino alternativo para alcanzar precisiones de alto orden, evitando parcialmente las dos restricciones principales expuestas arriba.

## 2.- Geometría.

El método de elementos finitos se aplicó inicialmente a problemas de ingeniería mecánica, donde debido a las formas geométricas que se tratan, es necesario usar elementos triangulares para lograr una buena aproximación. En los cálculos presentados en la literatura nuclear se han tomado directa-

mente estos elementos triangulares, sin embargo, debido a la forma geométrica de la mayoría de los reactores, parece más conveniente, para un importante porcentaje de casos prácticos (excluyendo lógicamente reactores de geometría hexagonal) - usar elementos rectangulares, especialmente en el caso de un reactor con geometría rectangular. Nosotros usamos exclusivamente elementos rectangulares en nuestros cálculos: en el próximo capítulo se comparan con cálculos efectuados con elementos triangulares y que se encuentran en la literatura, observándose que para los casos en que es posible usar elementos rectangulares se obtienen resultados usualmente más precisos.

Una de las ventajas que se tienen al usar elementos rectangulares es, la mayor facilidad para su manejo y programación que con elementos triangulares.

### 3.- Polinomios de Lagrange.

Como se mencionó en el capítulo anterior, si los parámetros necesarios para la determinación de los polinomios se escogen como los valores del flujo en los nodos, tendremos elementos finitos de tipo Lagrange; en cambio, si se escogen los valores de la función y de sus derivadas se tendrán elementos finitos de tipo Hermite.

Aquí se usan exclusivamente elementos finitos del tipo Lagrange, se han preferido debido a que el uso de elementos del tipo Hermite implica la determinación de valores del flu

jo, así como de algunas de sus derivadas parciales, las cuales simplemente no existen en sentido puntual en las singularidades<sup>(11)</sup>.

#### 4.- Eliminación de nodos internos.

Con el fin de que el número total de incógnitas  $N$  y el ancho de banda  $2W-1$  del sistema de ecuaciones algebraicas a resolver sean más pequeños, se usa la técnica llamada "condensación estática"<sup>(8)</sup> que permite eliminar los grados internos de libertad. Esta eliminación se hace debido a que los valores en los nodos internos están relacionados únicamente con los valores nodales del elemento al cual pertenecen, por lo tanto pueden ser puestos en función de los valores nodales externos del elemento en cuestión.

En el capítulo anterior, se obtuvo un sistema de ecuaciones algebraicas dado por la ec. (3.36)

$$\underline{A} \underline{\phi} = \underline{k} , \quad (4.15)$$

donde

$$\underline{\phi} = \left[ \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N \right]^T ,$$

siendo  $\phi_1, \dots, \phi_N$  los  $N$  parámetros o valores del flujo por determinar. Si llamamos  $\underline{\phi}_1$  al vector que incluye todos los valores nodales en la frontera de algún elemento considerado, y  $\underline{\phi}_2$  al vector que incluye los valores nodales en el interior del mismo elemento, podremos escribir la contribución del e-

lemento a la ecuación (4.15) como sigue:

$$\begin{vmatrix} \underline{A}_{11} & \underline{A}_{12} \\ \underline{A}_{21} & \underline{A}_{22} \end{vmatrix} \begin{Bmatrix} \underline{\phi}_1 \\ \underline{\phi}_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \underline{k}_1 \\ \underline{k}_2 \end{Bmatrix}, \quad (4.16)$$

de donde

$$\underline{k}_1 = \underline{A}_{11} \underline{\phi}_1 + \underline{A}_{12} \underline{\phi}_2, \quad (4.17)$$

y

$$\underline{k}_2 = \underline{A}_{21} \underline{\phi}_1 + \underline{A}_{22} \underline{\phi}_2, \quad (4.18)$$

despejando  $\underline{\phi}_2$  de (4.18), tenemos

$$\underline{\phi}_2 = (\underline{A}_{22})^{-1} (\underline{k}_2 - \underline{A}_{21} \underline{\phi}_1), \quad (4.19)$$

y substituyendo esto en (4.17) se obtiene

$$\left[ \underline{A}_{11} - \underline{A}_{12} (\underline{A}_{22})^{-1} \underline{A}_{21} \right] \underline{\phi}_1 = \underline{k}_1 - \underline{A}_{12} (\underline{A}_{22})^{-1} \underline{k}_2, \quad (4.20)$$

que puede ser reescrita en la forma

$$\tilde{\underline{A}} \underline{\phi}_1 = \tilde{\underline{k}}, \quad (4.21)$$

donde  $\tilde{\underline{A}}$  y  $\tilde{\underline{k}}$  son la matriz discretizada y el vector fuente condensados respectivamente, asociados solamente con los valores nodales externos  $\underline{\phi}_1$  del elemento considerado. En la práctica



este proceso se lleva a cabo por eliminación de Gauss simétrica hacia atrás<sup>(8,9)</sup>. El sistema de ecuaciones algebraicas (4.21) tiene como incógnitas únicamente a los valores nodales externos, por lo tanto el número de ecuaciones y el ancho de banda de la matriz total  $\underline{A}$  se reducen en forma considerable.

Esta condensación de los nodos internos podría ser evitada si hiciéramos una modificación a los elementos bicompletos quitando definitivamente los nodos internos; por ejemplo, en el caso cuadrático se elimina el término  $x^2y^2$  de la ec. (3.26), obteniendo un número de grados de libertad igual al de nodos externos<sup>(10)</sup>.

#### 5.- Condiciones a la Frontera.

Las condiciones a la frontera esenciales o geométricas de nuestro problema limitan el valor del flujo  $\phi$  a valores predeterminados iguales a cero en la frontera externa del reactor.

Estas condiciones a la frontera pueden ser consideradas de la siguiente manera: nuestro sistema de ecuaciones a resolver es  $\underline{A} \underline{\phi} = \underline{k}$ , supongamos que el nodo  $j$ -ésimo se encuentra en la frontera externa y que ahí se tiene una condición esencial a la frontera, la cual hace que el valor nodal  $\phi_j$  sea igual a cero. Para que esto se cumpla, hacemos los siguientes cambios en la ecuación matricial

$$a_{jn} = 0, a_{nj} = 0 \quad n = 1, \dots, N ; n \neq j ,$$

y

$$a_{jj} = 1, k_j = 0 ,$$

con lo que tendremos automáticamente una sola ecuación para el valor nodal  $\phi_j$ , siendo esta ecuación  $\phi_j = 0$  la única en que aparece explícitamente el valor nodal  $\phi_j$ .

Haciendo lo mismo para todos aquellos nodos que se encuentran en la parte de la frontera externa donde se cumplen las condiciones esenciales, o sea valores del flujo iguales a cero, habremos incluido las condiciones esenciales a la frontera dentro de nuestra ecuación matricial a resolver.

#### 6.- Inversión Directa.

Las dos formas básicas para la solución de un sistema muy grande de ecuaciones son eliminación e iteración. La primera conocida también como la forma directa, es un proceso en donde la matriz A es factorizada en el producto de una matriz triangular inferior por una matriz triangular superior, las cuales pueden ser invertidas fácilmente en forma directa. La segunda es una serie de correcciones sucesivas a una prueba inicial para las incógnitas: el proceso se ejecuta hasta que la magnitud de las correcciones sea despreciable. El desarrollo actual de las computadoras digitales de alta velocidad con grandes posibilidades de memoria externa e interna favorece cada vez más las técnicas de inversión directa, las

cuales presentan entre otras ventajas las siguientes: a) se pueden construir subrutinas generales y verificarlas fácilmente, b) el tiempo de computación puede ser estimado muy exactamente, c) la factorización de la matriz original no necesita ser repetida cuando se cambia el vector fuente, (esta característica es de gran interés para el problema de difusión de neutrones para varios grupos, donde típicamente solo cambia la fuente de fisión en cada iteración externa), d) no es necesario un conocimiento especial por parte del usuario de, por ejemplo, parámetros de aceleración o de factores de sobrerelajación, como en el caso de los métodos iterativos.

El método más general de eliminación es el de Gauss, - el cual no es otra cosa que la factorización de la matriz de coeficientes  $A$  en el producto  $A = LU$  de una matriz triangular inferior unitaria por una matriz triangular superior, siendo ambas matrices fácilmente invertibles.

En nuestro caso, un problema bidimensional tratado con elementos finitos, las matrices de coeficientes son de banda, simétricas y positivas definidas. Su estructura se muestra en la fig. 6 donde sólo las áreas oscuras de la matriz  $N \times N$  contienen elementos diferentes de cero; denotamos con  $2W-1$  al ancho de banda de la matriz, siendo  $W$  la semianchura de banda.

Para este tipo de matrices el proceso de eliminación de Gauss sin intercambio de renglones es posible y numéricamente estable: dada la simetría de la matriz la factorización -

puede hacerse en una forma más simétrica sacando la parte diagonal de la matriz U de tal modo que  $A = LD(D^{-1}U)$ , donde los tres factores son determinados en forma única: L es una matriz triangular inferior con diagonal unitaria,  $D^{-1}U$  es una matriz triangular superior con diagonal unitaria y D es una matriz diagonal positiva. Por la simetría,  $D^{-1}U$  debe ser la transpuesta de L, así  $A = LDL^T$  es la forma simétrica de la factorización conocida como factorización de Gauss.

Hay otra factorización posible, al introducir una nueva matriz triangular  $\tilde{L} = LD^{1/2}$  obtenemos la factorización de Cholesky  $A = \tilde{L}\tilde{L}^T$ . Aunque esta factorización involucra raíces cuadradas y presenta algunos problemas adicionales para evitar operaciones con cero, Wilkinson<sup>(12)</sup> recomienda su uso en el caso  $W \ll N$  y nosotros usamos las subrutinas que él recomienda. Básicamente la ecuación matricial con esta factorización es

$$\tilde{L}\tilde{L}^T\phi = k \quad (4.22)$$

que puede dividirse en dos ecuaciones matriciales

$$\tilde{L}l = k \quad \text{y} \quad \tilde{L}^T\phi = 1 \quad (4.23)$$

resolviendo la primera por reducción hacia adelante obtenemos el vector con el cual podemos resolver la segunda por sustitución hacia atrás, obteniendo el vector que determina los valores nodales del flujo  $\phi$ .

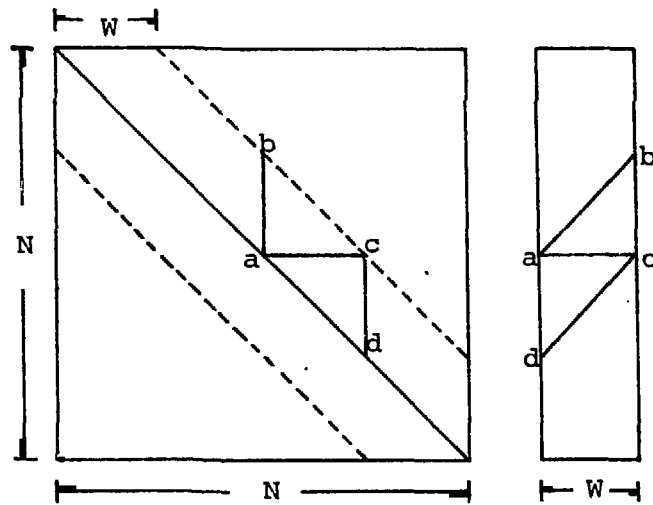
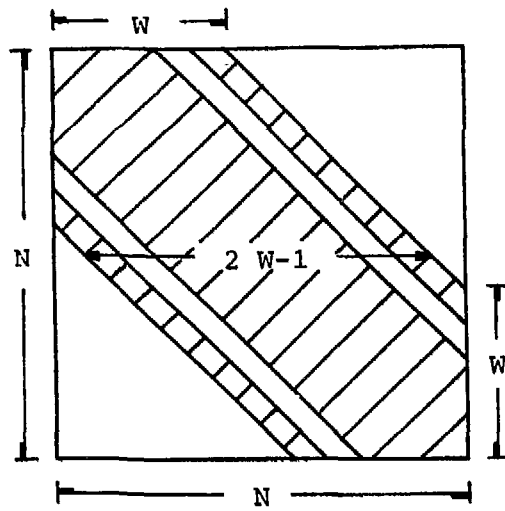


Fig. 7.- Forma de almacenar la semibanda superior de una matriz banda simétrica.

Puesto que cada grupo tiene asociada una matriz de coeficientes, se han guardado en el disco las matrices L de cada grupo con el fin de no hacer la factorización A cada vez que se efectúa una iteración externa.

Es importante notar que el número de operaciones necesario para resolver el sistema de ecuaciones usando el método de Cholesky es aproximadamente  $NW^2/2$  <sup>(10,12)</sup>.

También debemos mencionar que, dada la forma de banda y simétrica de la matriz, es posible economizar memoria central almacenando sólo la porción  $N \times W$  de la matriz como se indica en la fig. 7. En programas de producción a gran escala, aún esta matriz no puede ser almacenada en el núcleo y debe hacerse una partición en forma adecuada como se muestra en la fig. 8. En este caso será necesario almacenar en la memoria central solo una matriz  $W \times W$ , esto es posible gracias a que en los procesos de reducción y sustitución para resolver las ec. (4.23), los elementos de cada una de las matrices  $W \times W$ , están relacionados únicamente con los elementos de la matriz que le sigue <sup>(8)</sup>.

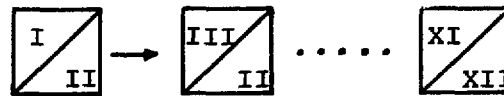
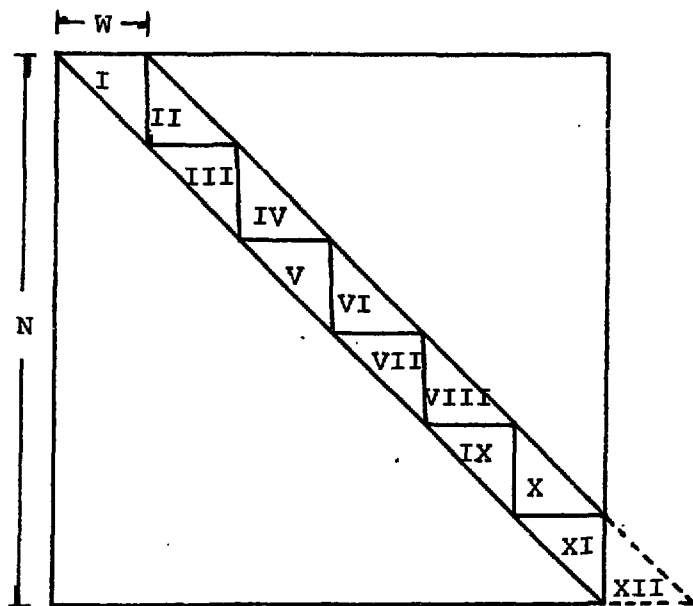


Fig. 8.- Partición de la semibanda superior para su manejo en la memoria central.

## CAPITULO V.- Resultados y Comparación.

## 1.- Introducción.

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos con el código DELFIN, se comprueba si estos resultados son correctos, y se hace una comparación de la eficiencia en el cálculo entre la aproximación con elementos finitos rectangulares contra la aproximación con elementos finitos triangulares, así como contra la aproximación con diferencias finitas, para la solución numérica de las ecuaciones de difusión para varios grupos de un reactor nuclear. Para la comprobación de los resultados y el estudio comparativo, se utilizan los resultados obtenidos por Kaper, Leaf y Lindeman con los códigos HOD (elementos finitos triangulares) y DARC2D (diferencias finitas)<sup>(5)</sup>, así como los mencionados en un reporte del Argonne National Laboratory para un problema de referencia obtenidos aplicando el código EXTERMINATOR-2<sup>(19)</sup>.

Se presenta una descripción breve de los códigos, así como de los parámetros usados para el análisis de resultados, considerando diferentes tipos de reactores: un reactor homogéneo y un reactor de dos regiones ambos con dos grupos de energía; y un reactor de cinco regiones con cuatro grupos de energía. Se discuten también los resultados obtenidos para un reactor homogéneo con siete grupos de energía y cualquier tipo de dispersión entre ellos. Se presenta el análisis de -



cada reactor por separado y se llega al final a las conclusiones.

## 2.- Descripción de los Códigos.

El código DELFIN ha sido desarrollado para un sistema PDP-10. Permite cualquier tipo de dispersión entre los grupos de energía, ya sea hacia arriba o hacia abajo; usa polinomios interpolados de Lagrange, el sistema de ecuaciones lineales es resuelto en forma directa por el algoritmo de Cholesky. No se ha incluido por ahora ningún procedimiento para acelerar el proceso iterativo de potencias. Se hace uso de los discos para la administración de los datos en cada iteración externa. Como resultados proporciona los valores de la aproximación a la constante de multiplicación y a los flujos en cualquier punto del reactor.

El código HOD<sup>(s)</sup> fué desarrollado en un sistema IBM-360 Modelo 50-75. Puesto que está orientado al cálculo de reactores rápidos sólo permite dispersión hacia abajo; usa polinomios interpolados de Lagrange. Para la solución del sistema de ecuaciones lineales usa el algoritmo de Cholesky, y las iteraciones externas son aceleradas por medio de un procedimiento de extrapolación de Chebyshev. El cálculo completo está contenido dentro de la memoria central. La salida consiste de los valores de la aproximación a la solución en los nodos de la triangulación y de la potencia en cada región del

reactor, así como el valor de  $k_{\text{eff}}^{(5)}$ .

El programa DARC2D<sup>(5)</sup> es el módulo para difusión de varios grupos con dos dimensiones en el Argonne Reactor Computation (ARC) System<sup>(25)</sup>. Los algoritmos usados en el programa son similares a los que usan otros códigos en el análisis de reactores rápidos. Para cada grupo de energía se hace una aproximación con diferencias finitas de cinco puntos a la ecuación de difusión. Tanto las iteraciones externas como las internas son aceleradas por un proceso de extrapolación de Chebyshev de tres términos. Hay uso de discos para la administración de datos en cada iteración externa<sup>(5)</sup>.

### 3.- Bases para la comparación.

Los reactores nucleares en general pueden ser representados por configuraciones bastante regulares, más aún en el caso de los reactores rápidos que como ya se ha dicho son más homogéneos y por lo tanto presentan menos regiones; esto permite el uso de elementos finitos sencillos como son los elementos triangulares o los rectangulares. Tales elementos podrán cubrir totalmente a  $\Omega$ , lo cual es una ventaja. En el caso de reactores hexagonales es necesario usar elementos de tipo triangular, sin embargo la mayoría de los reactores pueden ser representados por una geometría rectangular y por lo tanto tratados con elementos finitos rectangulares; puesto -

que en estos casos parece más fácil y adecuado trabajar con elementos rectangulares que con triangulares, es importante hacer un estudio comparativo de la eficiencia del cálculo para los dos tratamientos de un reactor con geometría rectangular. Se hace también la comparación para el tratamiento con diferencias finitas.

La comparación está basada en el tiempo de cálculo para la  $k_{\text{eff}}$  con una cierta precisión prefijada. Es importante notar que el tiempo de cálculo que será tomado en cuenta para efectuar la comparación no es el tiempo de ejecución de los programas: éste tiempo depende en cada caso de varios factores: por ejemplo, el programa DARC2D de diferencias finitas usa métodos iterativos de solución y además necesita memoria externa; en cambio el programa HOD de elementos finitos usa métodos de inversión directos y no necesita memoria externa; el programa DELFIN elaborado en este trabajo usa elementos finitos, inversión directa, y, dado que en la computadora PDP-10 del Centro Nuclear la memoria interna accesible es solo de aproximadamente 24 K es necesario el uso de memoria externa.

Para llevar a cabo la comparación usamos el tiempo necesario para invertir la matriz de coeficientes obtenida en cada caso, considerando que se usa para todos los casos el método directo de Cholesky; si la matriz es de orden  $N$ , y tiene un ancho de banda  $2W-1$ , el tiempo de cálculo para la inversión de la matriz es proporcional a  $NW^2$  (8).

Conviene mencionar que existen métodos para disminuir - la anchura de banda de la matriz<sup>(14)</sup>, sin embargo dadas las condiciones limitadas en que se hace la comparación, no se - hace un análisis del uso de tales técnicas.

Este trabajo es parte de una investigación más amplia - para encontrar el tipo de elementos y de polinomios más eficientes para el tratamiento de reactores con geometría rec - tangular; el código DELFIN ha sido elaborado con elementos - rectangulares y polinomios bicompletos de Lagrange, lo cual no quiere decir que este sea el mejor tratamiento; más bien, se ve la necesidad de futuros trabajos que comparen los resul - tados obtenidos usando el código DELFIN con los obtenidos - usando, por ejemplo, polinomios completos de Lagrange o poli - nomios bicompletos de Hermite<sup>(13)</sup>.

Realmente, las condiciones que se tienen para estable - cer la comparación no son suficientemente adecuadas desde el momento en que nosotros trabajamos con aproximaciones de ba - jo orden, mientras Kaper, Leaf y Lindeman<sup>(5)</sup> trabajan con - aproximaciones de alto orden. Una gran desventaja es, el pe - queño tamaño de la memoria disponible, pues esto restringe - el número de casos posibles de estudiar. Además, al aplicar el criterio de comparación suponemos que en las mallas trian - gulares se usó un cierto orden para numerar los nodos, es - probable que este orden sea diferente al usado por los auto - res, sin embargo tal hecho no afecta substancialmente el va - lor de  $W$  que nosotros suponemos para sus cálculos.

## 4.- Terminología.

En los casos en que se usan elementos rectangulares para formar la malla que representa la configuración, denotaremos a la malla con  $\sigma, k(m, \sigma)$  es la aproximación a  $k_{eff}$  correspondiente a esta malla y para polinomios de grado  $m$ , y el error de truncación en  $k_{eff}$  es la diferencia  $k(m, \sigma) - k_{eff}$ . Obviamente en el caso de usar diferencias finitas se elimina el grado  $m$  en esta notación; la malla en este caso es denotada por  $\pi$ .

Similarmente para elementos finitos triangulares la malla es denotada por  $\tau, k(m, \tau)$  es la aproximación correspondiente a esta malla para polinomios de grado  $m$ , y el error de truncación es  $k(m, \tau) - k_{eff}$ .

Para distinguir entre las diferentes mallas usadas en cada caso usamos la siguiente notación:  $\tau_{p,q}$  representa una malla triangular con  $pq^2$  triángulos, obtenida a partir de una triangulación básica  $\tau_{p,1}$  formada por  $p$  triángulos, subdividiendo los lados de cada triángulo en  $q$  partes iguales, generando  $q^2$  subtriángulos dentro de cada triángulo de  $\tau_{p,1}$ . Si  $h$  es la longitud del lado mayor de todos los triángulos en  $\tau_{p,1}$ , la longitud del lado mayor de todos los triángulos en la triangulación  $\tau_{p,q}$  es  $h/q$ . Similarmente  $\sigma_{p,q}$  representa una malla rectangular con  $pq^2$  rectángulos y con exactamente las mismas consideraciones que en la malla triangular. En el caso de diferencias finitas la malla se representa con -

$\pi_p$  donde p es el número de puntos en los cuales debe determinarse el flujo.

En la fig. 9 se pueden ver las mallas básicas  $\sigma_{1,1}$ ,  $\tau_{6,1}$  y  $\pi_{16}$ .

##### 5.- Limitaciones de la Comparación.

Para comprobar si los resultados obtenidos por el código son correctos, se usaron los datos del reactor homogéneo con dos grupos, puesto que en este caso la solución del sistema de ecuaciones de dos grupos, puede ser obtenida en forma analítica.

Los resultados reportados para este caso fueron obtenidos considerando para el error en el eigenvalor un valor de  $10^{-7}$ , o sea que el proceso de iteración de potencia se terminó cuando la desigualdad  $|k^{(n)} - k^{(n-1)}|/k^{(n)} < 10^{-7}$ , fué satisfecha para un par de iteraciones sucesivas  $k^{(n-1)}$  y  $k^{(n)}$ . Se usó este criterio debido a que la PDP-10 trabaja con ocho cifras significativas en las variables reales, siéndonos imposible el usar doble precisión dada la pequeña capacidad de memoria (24 k).

Kaper, Leaf y Lindeman<sup>(5)</sup> trabajaron con secciones eficaces de 16 dígitos; sin embargo, ellos mismos reconocen que desde un punto de vista físico esto no es muy útil, puesto que las secciones eficaces son conocidas solo con 3 ó 4 dígitos significativos. En nuestras condiciones el máximo de dí-

gitos posibles es 8, por lo que fue necesario redondear los valores de las secciones eficaces, introduciendo un error de redondeo aún antes de que la computadora iniciase su trabajo.

Además de esto, la longitud de una palabra de punto flo<sub>u</sub>ante en la PDP-10 está limitada a 36 bits, casi la mitad de los 64 bits en la IBM-360.

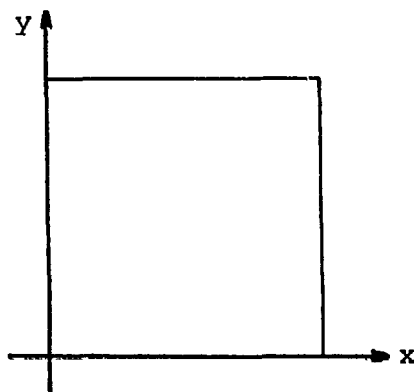
Debido a todos estos problemas, fué necesario obtener - nuestros propios valores de referencia para el eigenvalor -  $k_{eff}$  aún en el caso del reactor homogéneo; considerando que en nuestros resultados son correctos sólo los primeros siete dígitos sin redondeo.

#### 6.- Comprobación de la exactitud en la aproximación con DELFIN.

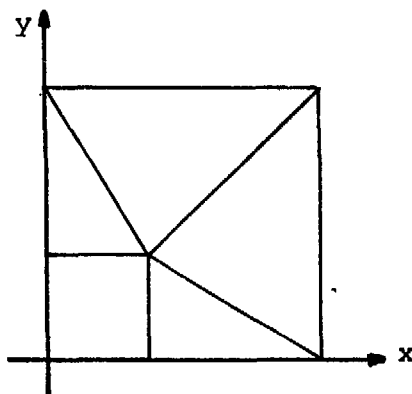
Para comprobar la exactitud de los resultados, y dado - que estamos reducidos a trabajar con ocho dígitos, se ha apli<sub>u</sub>cado el código a un problema de referencia presentado en un reporte del Argonne National Laboratory<sup>(19)</sup>, en el cual los datos tienen dos o tres cifras significativas.

El problema de referencia es un reactor homogéneo cua<sub>u</sub>-drado, con siete grupos de energía, y dispersión hacia arri<sub>u</sub>-ba y hacia abajo entre todos los grupos.

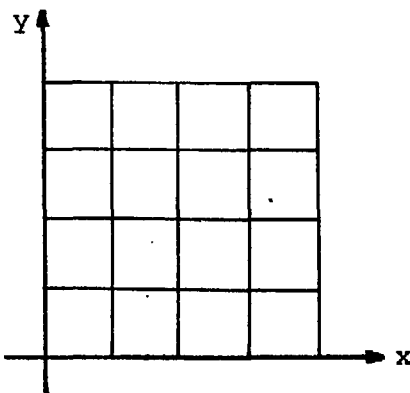
Los resultados obtenidos para  $k_{eff}$  con DELFIN se compa<sub>u</sub>-ran con la solución analítica y con los resultados obtenidos aplicando el código EXTERMINATOR-2 al mismo problema, y que se encuentran en el reporte mencionado. En la Tabla I. se -



MALLA RECTANGULAR  $\sigma_{1,1}$



MALLA TRIANGULAR  $\tau_{6,1}$



MALLA RECTANGULAR  $\pi_{16}$

Fig. 9.- Mallas Básicas para un reactor homogéneo rectangular.



muestran estos resultados, junto con: la malla usada, el grado del polinomio y el error de truncación en por ciento. El valor para el error de truncación que usamos en el proceso iterativo fue  $10^{-5}$  o menor.

Como puede notarse, los valores obtenidos con polinomios lineales para el error son del mismo orden que los que se tienen con el EXTERMINATOR-2, en cambio para polinomios cúbicos obtuvimos un resultado más exacto por un factor de 1000. Este hecho demuestra que los resultados que arroja el código tienen una alta exactitud, y comprueban además la calidad del método del elemento finito.

Para comprobar la exactitud en los valores obtenidos para el flujo, se usa el reactor homogéneo descrito en una sección posterior de este capítulo obteniéndose también una alta exactitud.

Cabe mencionar ahora que para problemas tratados desde un punto de vista físico no es necesario trabajar con más de ocho dígitos, puesto que como ya se ha dicho las secciones eficaces se conocen solo con tres o cuatro dígitos significativos.

#### 7.- Comparación.

Como se ha dicho antes, al hacer el análisis de los resultados para llevar a cabo la comparación, mencionaremos dos valores de referencia para el eigenvalor  $k_{eff}$ :

I). Para mallas triangulares y diferencias finitas los

TABLA I  
Resultados para el Problema de Referencia

CODIGO	GRADO	NODOS	$k_{eff}$	$(\Delta k/k_{eff}) \times 100$
EXTERMINATOR-2		9 x 3	0.8049 55	$3.04 \times 10^0$
		24 x 6	0.7779 37	$3.39 \times 10^{-1}$
		69 x 15	0.7749 34	$5.02 \times 10^{-2}$
DELFIN	1	9 x 3	0.7572 7655	$2.23 \times 10^0$
	1	24 x 6	0.7717 3192	$2.82 \times 10^{-1}$
	2	9 x 3	0.7743 1137	$2.34 \times 10^{-2}$
	3	9 x 3	0.7744 8216	$6.30 \times 10^{-3}$

RESULTADO ANALITICO  $k_{eff} = 0.7745 4513 57$

valores de referencia reportados por Kaper, Leaf y Lindeman. Excepto para el reactor homogéneo, estos valores los obtuvieron usando el código HOD con elementos polinomiales de quinto grado ( $m=5$ ), para una secuencia  $\tau_{p,q}$  de triangulaciones del dominio  $\Omega$  sucesivamente refinadas. El criterio que usaron para el error de truncación en estos valores de referencia fué  $10^{-10}$ , obteniéndose una secuencia  $k(5, \tau_{p,q})$  a partir de la cual se determinó el valor de referencia de  $k_{eff}$ . Todos los errores relativos de truncación para mallas triangulares fueron medidos con respecto al valor de  $k_{eff}$  así determinado, e igualmente para diferencias finitas.

II). Para mallas rectangulares los valores de referencia reportados son los que se obtuvieron con la malla más fina que fué posible usar para polinomios cúbicos ( $m=3$ ). Excepto para el reactor homogéneo, el criterio usado al obtener esos valores es de  $10^{-5}$ . Todos los errores relativos de truncación para mallas rectangulares son medidos con respecto al valor de  $k_{eff}$  así determinado.

a).- Reactor Homogéneo.

Consideremos un reactor homogéneo cuadrado, con dos grupos de energía, siendo las constantes del material dadas en el Apéndice 1, con el nombre de núcleo entonces

$$\Omega = \{(x,y) : 0 < x < L, 0 < y < L\} \quad \text{con } L = 50.05 \text{ cm.}$$

Con condiciones de frontera dadas por

$$\frac{\partial \phi_g}{\partial x}(0, y) = \frac{\partial \phi_g}{\partial y}(x, 0) = 0,$$

para  $(x, y) \in \partial_e \Omega$ ;  $g = 1, 2$

$$\phi_g(L, y) = \phi_g(x, L) = 0.$$

Resolviendo analíticamente este problema se obtiene un flujo dado por

$$\phi_g(x, y) = A_g \cos \frac{x}{2L} \cos \frac{y}{2L} \quad g = 1, 2,$$

con

$$k_{\text{eff}} = 1.4653 \ 87384 \ 104 \ ,$$

$$A_1 = 0.0064 \ 57062 \ 6 \ ,$$

$$A_2 = 0.0311 \ 86083 \ .$$

para un flujo normalizado a una fisión por segundo dentro del reactor. Este valor de  $k_{\text{eff}}$  es el valor de referencia en el caso de los resultados reportados para mallas triangulares.

Considerando solo ocho cifras significativas el valor del eigenvalor es

$$k_{\text{eff}} = 1.4653 \ 874 \ .$$

Este último valor de  $k_{\text{eff}}$  es el usado como referencia para nuestro problema, o sea con mallas rectangulares.

Para verificar el programa DELFIN usamos la secuencia - de mallas rectangulares  $\sigma_{1,q}$  (con  $q = 1, 2, \dots$ ) sobre  $\Omega$ . Los resultados obtenidos con diferente grado de los polinomicos, - desde lineales ( $m = 1$ ) hasta cúbicos ( $m = 3$ ) son listados en las tablas II, III, IV respectivamente.

Las primeras columnas de las tablas contienen los siguientes datos: 1) la malla rectangular  $\sigma_{1,q}$ ; 2) el número de coordenadas generalizadas por grupo de energía  $N$ , o sea el orden de la matriz de coeficientes; 3) el semiancho de banda de la matriz  $W$ ; 4) el factor  $NW^2$  que es proporcional al tiempo de cálculo; 5) el valor del factor de multiplicación  $k = k(m, \sigma_{p,q})$  calculado considerando un error relativo de  $10^{-7}$  o menor en el proceso iterativo de potencias; 6) el error relativo de truncación en porciento medido contra el valor exacto de  $k_{eff}$  o sea  $(|\Delta k|/k_{eff}) \times 100$ , con  $\Delta k = \Delta k(m, \sigma_{p,q}) = k(m, \sigma_{p,q}) - k_{eff}$ ; 7) la cantidad  $p_k = p_k(m, \sigma_{p,q})$

$$p_k(m, \sigma_{p,q}) = \left| \ln \frac{\Delta k_{q+1}}{\Delta k_q} \right| \bigg/ \left| \ln \frac{h_q}{h_{q+1}} \right|$$

que es una estimación para el exponente  $p_k(m)$  en la relación asintótica para el error en  $k_{eff}$

$$\left| k(m, \sigma) - k_{eff} \right| = O(h^{p_k(m)}) \quad \text{como } h \rightarrow 0 \quad .$$

Las siguientes columnas contienen los datos pertinentes al flujo, siendo: 8) la norma  $L^\infty$ , o sea la norma superior -

del error de truncación en el flujo

$$\|\phi_g(m, \sigma_{p,q}) - \phi_g\|_\infty = \max_{g=1,2} \max_{(x,y) \in \Omega} \left| \phi_g(m, \sigma_{p,q})(x,y) - \phi_g(x,y) \right| ,$$

como puede observarse ésta es una norma muy simple y está definida en un sentido puntual; 9) la cantidad  $p_\phi = p_\phi(m, \sigma_{p,q})$  definida por

$$p_\phi(m, \sigma_{p,q}) = \ln \left| \frac{\Delta\phi(m, \sigma_{p,q})}{\Delta\phi(m, \sigma_{p,q-1})} \right| / \ln \left| \frac{h_q}{h_{q+1}} \right| ,$$

que estima el valor del exponente  $p_\phi(m)$  en la relación

$$\|\phi_g(m, \sigma) - \phi_g\|_\infty = O(h^{p_\phi(m)}) \quad \text{con } h \rightarrow 0 ,$$

y 10) la norma  $W_0^2$  del error de truncación.

$$\|\phi_g(m, \sigma) - \phi_g\|_0 = \left[ \int_{\Omega} (\phi_g(m, \sigma) - \phi_g)^2 d\bar{r} \right]^{1/2} .$$

Analizando los resultados obtenidos, puede notarse que el comportamiento de los errores de truncación para el flujo y el eigenvalor convergen a los valores teóricos, así  $p_k$  y  $p_\phi$  convergen a  $O(h^{2m})$  y  $O(h^{m+1})$  respectivamente. Es importante mencionar que dado el corto número de dígitos que podemos

TABLA II

RESULTADOS CON DELFIN PARA EL REACTOR HOMOGENEO GRADO 1

MALLA $\sigma_{p,q}$	INCOGNITAS POR GRUPO N	SEMIAN- CHO DE BANDA W	N W <sup>2</sup>	k	ERROR RELATI- VO DE TRUNCA- CION $\frac{\Delta k}{k_{eff}} \times 100$	P <sub>k</sub>	NORMA SUPE- RIOR DEL - ERROR DE - TRUNCACION EN EL FLU- JO	P <sub>φ</sub>	NORMA EN W <sub>0</sub> <sup>2</sup> - DEL ERROR DE TRUNCACION - DEL FLUJO.
$\sigma_{1,1}$	4	4	6.40x10 <sup>0</sup>	1.4068 150	-3.99x10 <sup>0</sup>	-	0.1909x10 <sup>-1</sup>	-	0.3689x10 <sup>-2</sup>
$\sigma_{1,2}$	9	5	2.25x10 <sup>2</sup>	1.4507 483	-9.98x10 <sup>-1</sup>	2.00	0.3463x10 <sup>-2</sup>	-	0.7298x10 <sup>-3</sup>
$\sigma_{1,3}$	16	6	5.76x10 <sup>2</sup>	1.4589 119	-4.41x10 <sup>-1</sup>	2.01	0.1462x10 <sup>-2</sup>	2.46	0.2840x10 <sup>-3</sup>
$\sigma_{1,4}$	25	7	1.23x10 <sup>3</sup>	1.4617 519	-2.48x10 <sup>-1</sup>	2.01	0.8085x10 <sup>-3</sup>	2.13	0.1717x10 <sup>-3</sup>
$\sigma_{1,5}$	36	8	2.30x10 <sup>3</sup>	1.4630 628	-1.58x10 <sup>-1</sup>	2.00	0.5133x10 <sup>-3</sup>	2.06	0.1582x10 <sup>-3</sup>
$\sigma_{1,6}$	49	9	3.97x10 <sup>3</sup>	1.4637 739	-1.10x10 <sup>-1</sup>	2.00	0.3550x10 <sup>-3</sup>	2.04	0.7551x10 <sup>-4</sup>
$\sigma_{1,7}$	64	10	6.40x10 <sup>3</sup>	1.4642 023	-8.08x10 <sup>-2</sup>	2.00	0.2601x10 <sup>-3</sup>	2.02	0.5065x10 <sup>-4</sup>
$\sigma_{1,8}$	81	11	9.80x10 <sup>3</sup>	1.4644 802	-6.19x10 <sup>-2</sup>	2.00	0.1988x10 <sup>-3</sup>	2.02	0.4232x10 <sup>-4</sup>
$\sigma_{1,9}$	100	12	1.44x10 <sup>4</sup>	1.4646 706	-4.89x10 <sup>-2</sup>	2.00	0.1569x10 <sup>-3</sup>	2.01	0.3056x10 <sup>-4</sup>
$\sigma_{1,10}$	121	13	2.05x10 <sup>4</sup>	1.4648 069	-3.96x10 <sup>-2</sup>	2.00	0.1270x10 <sup>-3</sup>	2.01	0.2450x10 <sup>-4</sup>
$\sigma_{1,11}$	144	14	2.82x10 <sup>4</sup>	1.4649 077	-3.27x10 <sup>-2</sup>	2.00	0.1049x10 <sup>-3</sup>	2.01	0.1852x10 <sup>-4</sup>
$\sigma_{1,12}$	169	15	3.80x10 <sup>4</sup>	1.4649 841	-2.75x10 <sup>-2</sup>	1.99	0.8807x10 <sup>-4</sup>	2.01	0.1772x10 <sup>-4</sup>
$\sigma_{1,13}$	196	16	5.02x10 <sup>4</sup>	1.4650 438	-2.34x10 <sup>-2</sup>	2.00	0.7501x10 <sup>-4</sup>	2.01	0.1325x10 <sup>-4</sup>
$\sigma_{1,14}$	225	17	6.50x10 <sup>4</sup>	1.4650 912	-2.02x10 <sup>-2</sup>	2.00	0.6467x10 <sup>-4</sup>	2.00	0.1176x10 <sup>-4</sup>
$\sigma_{1,15}$	256	18	8.29x10 <sup>4</sup>	1.4651 293	-1.76x10 <sup>-2</sup>	2.00	0.5631x10 <sup>-4</sup>	2.00	0.1099x10 <sup>-5</sup>
$\sigma_{1,16}$	289	19	1.04x10 <sup>5</sup>	1.4651 603	-1.55x10 <sup>-2</sup>	1.98	0.4946x10 <sup>-4</sup>	2.00	0.8960x10 <sup>-5</sup>
$\sigma_{1,17}$	324	20	1.30x10 <sup>5</sup>	1.4651 863	-1.37x10 <sup>-2</sup>	2.00	0.4382x10 <sup>-4</sup>	2.00	0.7742x10 <sup>-5</sup>
$\sigma_{1,18}$	361	21	1.59x10 <sup>5</sup>	1.4652 082	-1.22x10 <sup>-2</sup>	2.00	0.3909x10 <sup>-4</sup>	2.00	0.7109x10 <sup>-5</sup>
$\sigma_{1,19}$	400	22	1.94x10 <sup>5</sup>	1.4652 264	-1.10x10 <sup>-2</sup>	2.00	0.3507x10 <sup>-4</sup>	2.01	0.6192x10 <sup>-5</sup>
$\sigma_{1,20}$	441	23	2.33x10 <sup>5</sup>	1.4652 422	-9.90x10 <sup>-3</sup>	2.00	0.3165x10 <sup>-4</sup>	2.00	0.1583x10 <sup>-5</sup>

TABLA III

RESULTADOS CON DELFIN PARA EL REACTOR HOMOGENEO GRADO 2

$\sigma_{p,q}$	N	W	N W <sup>2</sup>	k	$\frac{\Delta k}{k_{eff}} \times 100$	P <sub>k</sub>
$\sigma_{1,1}$	8	8	$5.12 \times 10^2$	1.4632 67	$-1.45 \times 10^{-1}$	-
$\sigma_{1,2}$	21	11	$2.54 \times 10^3$	1.4652 42	$-9.89 \times 10^{-3}$	3.87
$\sigma_{1,3}$	40	14	$7.84 \times 10^3$	1.4653 58	$-1.98 \times 10^{-3}$	3.97
$\sigma_{1,4}$	65	17	$1.88 \times 10^4$	1.4653 77	$-6.82 \times 10^{-4}$	3.70
$\sigma_{1,5}$	96	20	$3.84 \times 10^4$	1.4653 83	$-2.73 \times 10^{-4}$	4.11
$\sigma_{1,6}$	133	23	$7.04 \times 10^4$	1.4653 85	$-1.36 \times 10^{-4}$	3.80
$\sigma_{1,7}$	176	26	$1.19 \times 10^5$	1.4653 86	$-6.82 \times 10^{-5}$	4.50
$\sigma_{1,8}$	225	29	$1.89 \times 10^5$	1.4653 86	-	-
$\sigma_{1,9}$	280	32	$2.87 \times 10^5$	1.4653 87	-	-
$\sigma_{1,10}$	341	35	$4.18 \times 10^5$	1.4653 86	-	-

TABLA IV

RESULTADOS CON DELFIN PARA EL REACTOR HOMOGENEO GRADO 3

$\sigma_{p,q}$	N	W	N W <sup>2</sup>	k	$\frac{\Delta k}{k_{eff}} \times 100$
$\sigma_{1,1}$	12	12	$1.79 \times 10^3$	1.4653 49	$-2.59 \times 10^{-2}$
$\sigma_{1,2}$	33	17	$9.54 \times 10^3$	1.4653 87	-
$\sigma_{1,3}$	64	22	$3.10 \times 10^4$	1.4653 87	-
$\sigma_{1,4}$	105	27	$7.65 \times 10^4$	1.4653 87	-
$\sigma_{1,5}$	150	32	$1.54 \times 10^5$	1.4653 87	-
$\sigma_{1,6}$	217	37	$2.97 \times 10^5$	1.4653 87	-
$\sigma_{1,7}$	288	42	$5.08 \times 10^5$	1.4653 87	-



usar, tan solo con una partición en dos de la malla básica, ya se ha alcanzado el valor correcto para el eigenvalor con los siete dígitos exactos disponibles.

Como puede verse, las restricciones que tenemos en cuanto al número de dígitos dificulta la comparación de nuestros resultados con los obtenidos usando elementos triangulares - por Kaper, Leaf y Lindeman<sup>(5)</sup>.

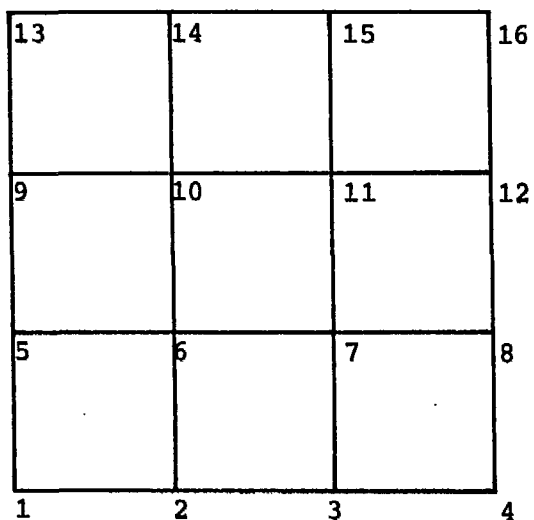
Con el fin de efectuar la comparación se listan en la Tabla IV los resultados obtenidos con el código HOD para este mismo reactor usando elementos triangulares<sup>(5)</sup>. Los valores del factor de multiplicación efectiva  $k = k(m, \tau_{p,q})$  son los obtenidos con un error relativo de  $10^{-15}$  o menor.

Como ya se ha mencionado el tiempo de cálculo es proporcional a  $NW^2$ , donde N es el número de incógnitas por grupo y W es el semiancho de banda. Una vez establecida la malla que se emplea y el grado de los polinomios N permanece fijo, pero W puede variar de acuerdo a la forma en que se ordenen los nodos de la malla. En nuestro caso, mallas rectangulares, hemos numerado los nodos en forma progresiva sobre cada línea del eje x, recorriéndola de izquierda a derecha, y así línea por línea empezando por la de más abajo, fig. 10. Para las mallas triangulares se supuso que los nodos fueran ordenados en la misma forma, en base a la experiencia se piensa que - aunque la ordenación haya sido hecha en forma diferente, no varía en forma notable el valor de W. Nos hemos tomado la libertad de incluir estos valores en la tabla V.

V-19

$N = 16$

$W = 6$



$N = 7$

$W = 5$

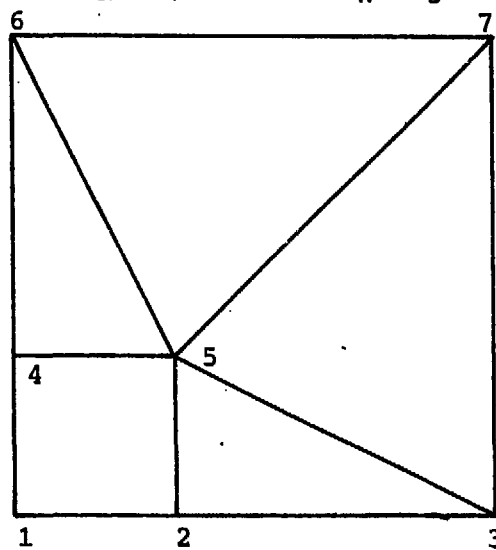


Fig. 10.- Ordenación de nodos para ambos tipos de malla.

T A B L A V

RESULTADOS CON HOD PARA EL REACTOR HOMOGENEO

	Malla $\tau_{p,q}$	Incog- nitas por Grupo N	Semi- ancho de - banda (?)W	N W <sup>2</sup> (?)	k	ERROR RE- LATIVO DE TRUNCACION $\frac{\Delta k}{k_{eff}} \times 100$	P <sub>k</sub>	NORMA SUPE- RIOR DEL - ERROR DE - TRUNCACION EN EL FLUJO	P <sub>φ</sub>
LINEAL	$\tau_{6,1}$	7	5	$1.75 \times 10^2$	1.4225 1602	$-2.9 \times 10^0$	-	$0.1551 \times 10^{-1}$	-
	$\tau_{6,2}$	19	7	$9.31 \times 10^2$	1.4532 6222	$-8.3 \times 10^{-1}$	1.82	$0.5932 \times 10^{-2}$	1.39
	$\tau_{6,3}$	37	9	$3.00 \times 10^3$	1.4598 6024	$-3.8 \times 10^{-1}$	1.94	$0.2991 \times 10^{-2}$	1.69
	$\tau_{6,4}$	61	11	$7.38 \times 10^3$	1.4622 4695	$-2.1 \times 10^{-1}$	1.97	$0.1809 \times 10^{-2}$	1.75
	$\tau_{6,5}$	91	13	$1.54 \times 10^4$	1.4633 6726	$-1.4 \times 10^{-1}$	1.98	$0.1218 \times 10^{-2}$	1.77
	$\tau_{6,6}$	127	15	$2.86 \times 10^4$	1.4639 8039	$-9.6 \times 10^{-2}$	1.99	$0.8799 \times 10^{-3}$	1.77
	$\tau_{6,7}$	169	17	$4.88 \times 10^4$	1.4643 5147	$-7.1 \times 10^{-2}$	1.99	$0.6673 \times 10^{-3}$	1.79
CUADRATICO	$\tau_{6,1}$	19	12	$2.74 \times 10^3$	1.4633 9429	$-1.4 \times 10^{-1}$	-	$0.1858 \times 10^{-2}$	-
	$\tau_{6,2}$	61	20	$2.44 \times 10^4$	1.4652 5178	$-9.3 \times 10^{-3}$	3.88	$0.2200 \times 10^{-3}$	3.08
	$\tau_{6,3}$	127	28	$9.95 \times 10^4$	1.4653 6003	$-1.9 \times 10^{-3}$	3.95	$0.6265 \times 10^{-4}$	3.10
	$\tau_{6,4}$	217	36	$2.81 \times 10^5$	1.4653 7865	$-6.0 \times 10^{-4}$	3.97	$0.2594 \times 10^{-4}$	3.07
	$\tau_{6,5}$	331	44	$6.41 \times 10^5$	1.4653 8379	$-2.5 \times 10^{-4}$	3.98	$0.1314 \times 10^{-4}$	3.05
	$\tau_{6,6}$	469	52	$1.27 \times 10^6$	1.4653 8564	$-1.2 \times 10^{-4}$	3.97	$0.7545 \times 10^{-5}$	3.04
	$\tau_{6,7}$	631	60	$2.27 \times 10^6$	1.4653 8644	$-6.4 \times 10^{-5}$	3.98	$0.4723 \times 10^{-5}$	3.04

T A B L A V

RESULTADOS CON HOD PARA EL REACTOR HOMOGENEEO (CONTINUACION)

Malla $\tau_{p,q}$	Incógnitas por Grupo N	Semi- ancho de banda (?)W	N W <sup>2</sup> (?)	k	ERROR RE- LATIVO DE TRUNCACION $\frac{\Delta k}{k_{eff}} \times 100$	P <sub>k</sub>	NORMA SUPE- RIOR DEL - ERROR DE - TRUNCACION EN EL FLUJO	P <sub>φ</sub>
$\tau_{6,1}$	37	23	1.96x10 <sup>4</sup>	1.4653 59766 44	-1.9x10 <sup>-3</sup>	-	0.1761x10 <sup>-3</sup>	-
$\tau_{6,2}$	127	41	2.13x10 <sup>5</sup>	1.4653 86919 30	-3.2x10 <sup>-5</sup>	5.89	0.1870x10 <sup>-4</sup>	3.24
$\tau_{6,3}$	271	59	9.43x10 <sup>5</sup>	1.4653 87342 16	-2.9x10 <sup>-6</sup>	5.93	0.4058x10 <sup>-5</sup>	3.77
$\tau_{6,4}$	509	77	3.02x10 <sup>6</sup>	1.4653 87376 55	-5.2x10 <sup>-7</sup>	5.96	0.1323x10 <sup>-5</sup>	3.90
$\tau_{6,5}$	721	95	6.51x10 <sup>6</sup>	1.4653 87382 11	-1.4x10 <sup>-7</sup>	5.97	0.5476x10 <sup>-6</sup>	3.96
$\tau_{6,6}$	1027	113	1.31x10 <sup>7</sup>	1.4653 87383 43	-4.6x10 <sup>-8</sup>	5.95	0.2642x10 <sup>-6</sup>	4.00

CUBICO

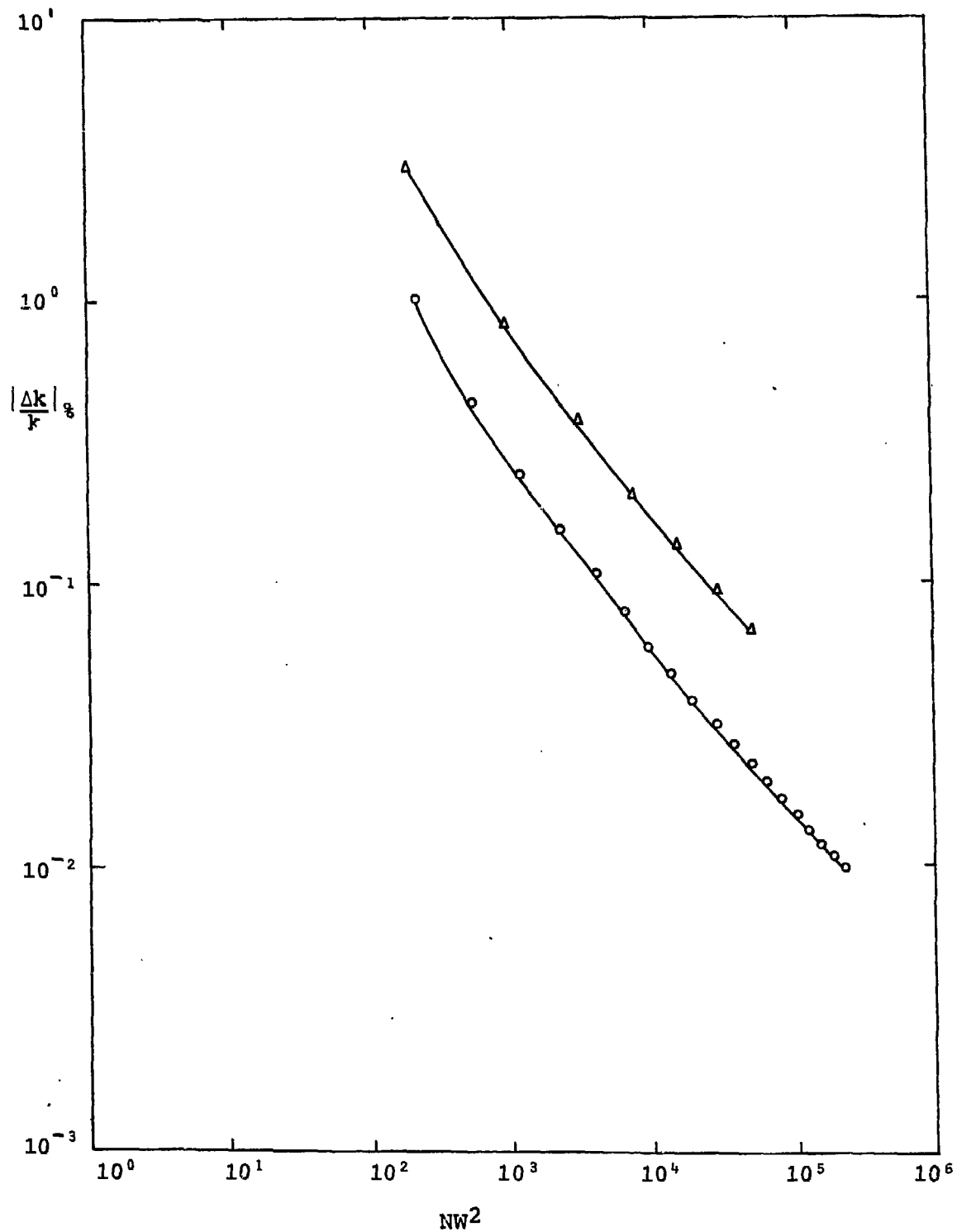


Fig. 11.- Tiempo de cálculo en función del error relativo de truncación. Reactor Homogéneo. Elementos lineales:  $\Delta$  triangulares,  $O$  rectangulares.

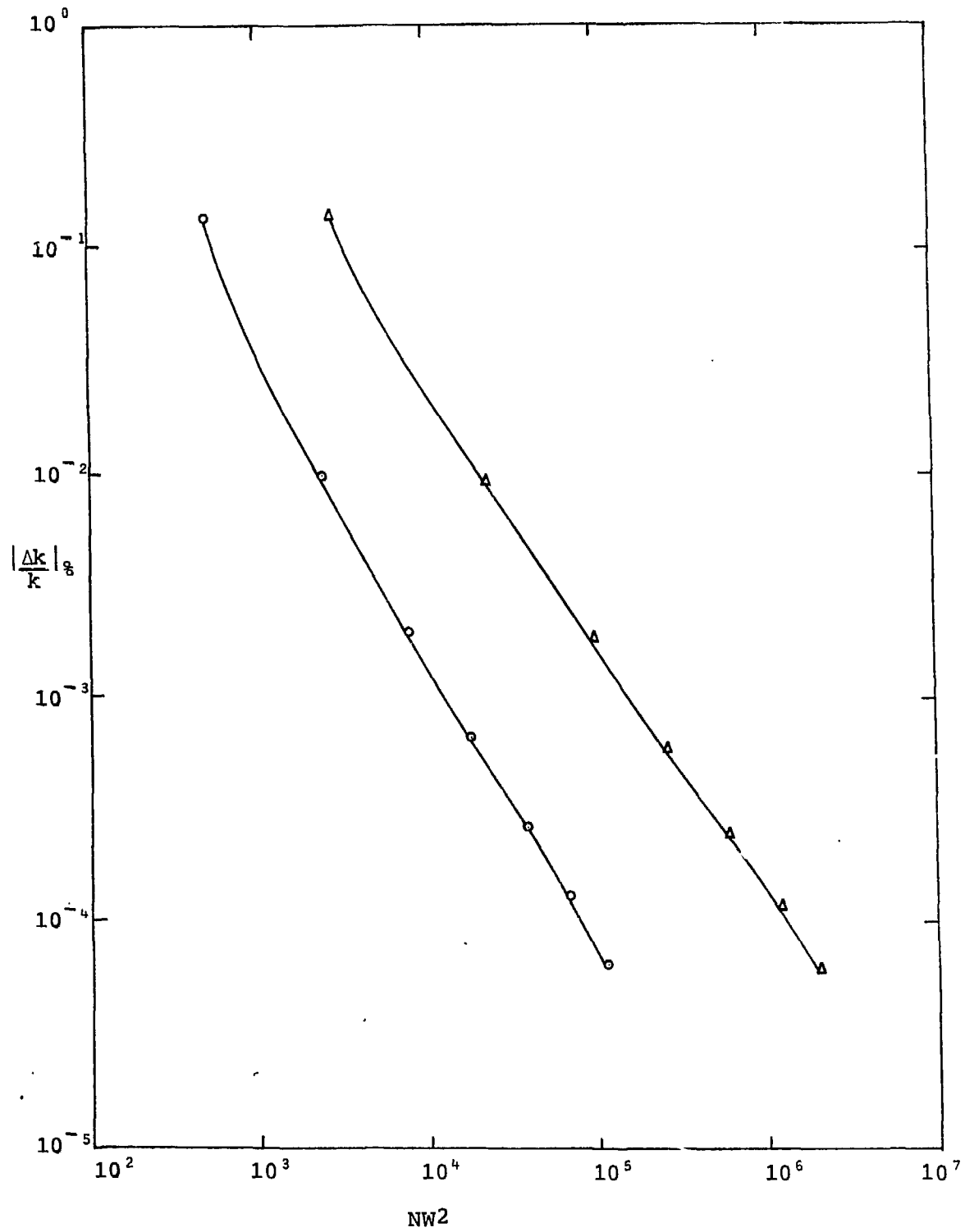


Fig. 12.- Tiempo de cálculo en función del error relativo de truncación. Reactor Homogéneo. Elementos cuadráticos:  $\Delta$  triangulares,  $\circ$  rectangulares.

Para efectuar la comparación se hicieron las gráficas - del error relativo de truncación en por ciento contra el tiempo de cálculo, para ambos tipos: elementos rectangulares y triangulares, en los casos lineal y cuadrático, figs. 11 y 12 respectivamente. Para el caso cúbico no es posible esta comparación pues como puede observarse en las tablas IV y V, son necesarios bastante más de ocho dígitos para establecer la razón de convergencia.

En las gráficas se observa que hay un factor de mayor rapidez en el cálculo cuando se usan elementos rectangulares en lugar de elementos triangulares, además estos factores crecen conforme aumenta la precisión de la constante de multiplicación  $k$ . El orden de magnitud de estos factores es el siguiente:

Grado	Error relativo %	Factor de mayor rapidez
lineal	$4 \times 10^{-1}$	4.3
	$8 \times 10^{-2}$	5.3
	$2 \times 10^{-3}$	12.3
cuadrático	$2 \times 10^{-4}$	16.0

B).- Reactor de dos zonas.

Se consideró un reactor cuadrado de dos zonas como el que se muestra en la fig. 13. Las dimensiones externas del reactor son

$$\Omega = \{(x,y) ; 0 < x < L, 0 < y < L\} \quad \text{con } L = 50.05 \text{ cm.}$$

donde  $\Omega = \Omega_I + \Omega_{II}$  siendo

$$\Omega_I = \{(x,y) ; 0 < x < 20.055, 0 < y < 20.055\} \quad \text{con } x,y \text{ en cm.}$$

Las constantes de los materiales están dadas en el Apéndice I, con los nombres de núcleo y cobertor.

El valor de referencia en el caso de mallas triangulares y diferencias finitas para el factor de multiplicación  $k_{\text{eff}}$  ha sido tomado como  $k_{\text{eff}} = 1.1973 \ 9966$ , obtenido con la triangulación  $\tau_{6,6}^{(5)}$ .

En nuestro caso, mallas rectangulares y ocho dígitos, - el valor de referencia es el obtenido con la malla  $\sigma_{4,3}$  y es  $k_{\text{eff}} = 1.197 \ 405$ .

Los resultados obtenidos con elementos rectangulares se listan en la Tabla VI, y los tomados de la literatura<sup>(5)</sup> para elementos triangulares y para diferencias finitas en la Tabla VII. Para todos los casos el proceso iterativo de potencias se concluyó con un criterio de  $10^{-5}$ , excepto en los casos que se señalan en la Tabla VII.

Para efectuar la comparación tomamos los datos de las Tablas VI y VII, graficando el error relativo de truncación en por ciento contra el tiempo de cálculo para cada uno de los diferentes tratamientos, figs. 14 y 15.



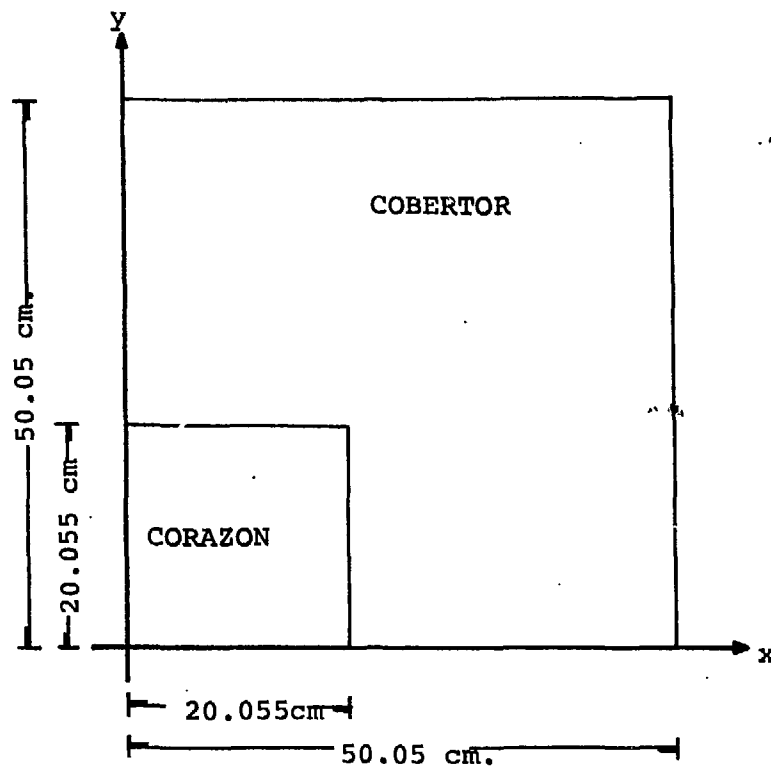


Fig. 13.- Reactor de 2 Zonas (cuarta parte).

De las gráficas, se puede observar la notable diferencia en la mayor rapidez de los cálculos efectuados con elementos finitos contra los hechos usando diferencias finitas, lo cual además ya había sido establecido por Kaper, Leaf y Lindeman<sup>(5)</sup>.

Para llevar a cabo la comparación entre los dos tipos - de geometría de los elementos finitos se dispone de un número muy pequeño de resultados, fig. 15. Si como es de esperarse, el comportamiento de los resultados es igual al de los casos anteriores conforme aumenta el número de parámetros, puede - decirse que hay una mayor rapidez en los cálculos efectuados con elementos rectangulares, aunque el factor no puede ser - estimado.

Es importante hacer notar que el error en  $k_{eff}$  para grado uno se comporta aproximadamente como  $O(h^2)$  a pesar de - existir una discontinuidad, sin embargo para grado dos es - aproximadamente  $O(h^3)$  o menor, en vez del comportamiento teórico  $O(h^4)$ , de donde deducimos que la discontinuidad afecta bastante a la convergencia de  $k_{eff}$ , hecho que esperabamos<sup>(10)</sup>.

C).- Reactor Rápido de Cría enfriado con Metal Líquido de -  
1000 MW(e) LMFBR.

Este es un diseño típico de un reactor rápido de cría - enfriado con metal líquido y teniendo como combustible óxido de uranio. En la fig. 16 se muestra una cuarta parte del - reactor con sus dimensiones. Sus características son las de un reactor con potencia total de 2400 MW(t)<sup>(5)</sup>. Las fraccio-

TABLA VI  
 RESULTADOS CON DELFIN PARA EL REACTOR DE 2 ZONAS  
 GRADO 1

$\sigma_{p,q}$	N	W	N W <sup>2</sup>	k	$\frac{\Delta k}{k_{eff}} \times 100$	$P_k$
$\sigma_{4,1}$	9	5	$2.25 \times 10^2$	1.1050 08	$-7.72 \times 10^0$	-
$\sigma_{4,2}$	25	7	$1.23 \times 10^3$	1.1753 34	$-1.84 \times 10^{-1}$	2.07
$\sigma_{4,3}$	49	9	$3.97 \times 10^3$	1.1880 40	$-7.82 \times 10^{-1}$	2.12
$\sigma_{4,4}$	81	11	$9.80 \times 10^3$	1.1922 81	$-4.28 \times 10^{-1}$	2.10
$\sigma_{4,5}$	121	13	$2.04 \times 10^4$	1.1941 74	$-2.69 \times 10^{-1}$	2.07
$\sigma_{4,6}$	169	15	$3.80 \times 10^4$	1.1951 80	$-1.85 \times 10^{-1}$	2.05
$\sigma_{4,7}$	225	17	$6.50 \times 10^4$	1.1955 50	$-1.55 \times 10^{-1}$	1.18
$\sigma_{4,8}$	289	19	$1.04 \times 10^5$	1.1961 61	$-1.10 \times 10^{-1}$	2.11
$\sigma_{4,9}$	361	21	$1.59 \times 10^5$	1.1964 22	$-8.17 \times 10^{-2}$	2.01
$\sigma_{4,10}$	441	23	$2.33 \times 10^5$	1.1966 08	$-6.61 \times 10^{-2}$	2.00

## GRADO 2

$\sigma_{4,1}$	21	11	$2.54 \times 10^3$	1.1949 33	$-2.47 \times 10^{-2}$	-
$\sigma_{4,2}$	65	17	$1.88 \times 10^4$	1.1978 83	$+4.00 \times 10^{-2}$	2.37
$\sigma_{4,3}$	133	23	$7.04 \times 10^4$	1.1976 08	$+1.70 \times 10^{-2}$	2.11
$\sigma_{4,4}$	225	39	$1.89 \times 10^5$	1.1974 83	$+6.51 \times 10^{-3}$	3.32
$\sigma_{4,5}$	341	35	$4.18 \times 10^5$	1.1974 35	$+2.51 \times 10^{-3}$	4.28

## GRADO 3

$\sigma_{4,1}$	33	17	$9.54 \times 10^3$	1.1983 62	$+7.99 \times 10^{-2}$	-
$\sigma_{4,2}$	105	27	$7.65 \times 10^4$	1.1974 81	$+6.35 \times 10^{-3}$	3.65
$\sigma_{4,3}$	217	37	$2.97 \times 10^5$	1.1974 05		

TABLA VII

RESULTADOS CON HOD Y DARC2D PARA EL REACTOR DE 2 ZONAS

GRADO 3

Malla $\tau_{p,q}$	Incógnitas por grupo N	Semi- ancho de banda W	$N W^2$	k	Error relativo $\frac{\Delta k}{k_{eff}} \times 100$
$\tau_{6,2}$	127	41	$2.13 \times 10^5$	1.1974 048	$+4.3 \times 10^{-4}$
$\tau_{6,3}$	271	59	$9.43 \times 10^5$	1.1973 904	$-7.7 \times 10^{-4}$
$\tau_{6,4}$	509	77	$3.02 \times 10^6$	1.1973 920	$-6.4 \times 10^{-4}$
$\tau_{6,5}$	721	95	$6.51 \times 10^6$	1.1973 943	$-4.5 \times 10^{-4}$

GRADO 3

$\tau_{8,1}$	46	21	$2.03 \times 10^4$	1.1978 55	$+3.8 \times 10^{-2}$
--------------	----	----	--------------------	-----------	-----------------------

GRADO 2

$\tau_{22,1}$	53	24	$3.05 \times 10^4$	1.1970 49	$-2.9 \times 10^{-2}$
$\tau_{6,2}$	61	20	$2.44 \times 10^4$	1.1970 17	$-3.2 \times 10^{-2}$

DIFERENCIAS FINITAS

$\sigma_{1,4}$	16	6	$5.76 \times 10^2$	1.2561 49	$4.9 \times 10^0$
$\sigma_{1,8}$	64	10	$6.40 \times 10^3$	1.2118 48	$1.2 \times 10^0$
$\sigma_{1,20}$	400	22	$1.94 \times 10^5$	1.1994 91	$1.7 \times 10^{-1}$
$\sigma_{1,32}$	1024	34	$1.18 \times 10^6$	1.1982 01	$6.7 \times 10^{-2}$
$\sigma_{1,48}$	2304	50	$5.76 \times 10^6$	1.1977 53	$3.0 \times 10^{-2}$

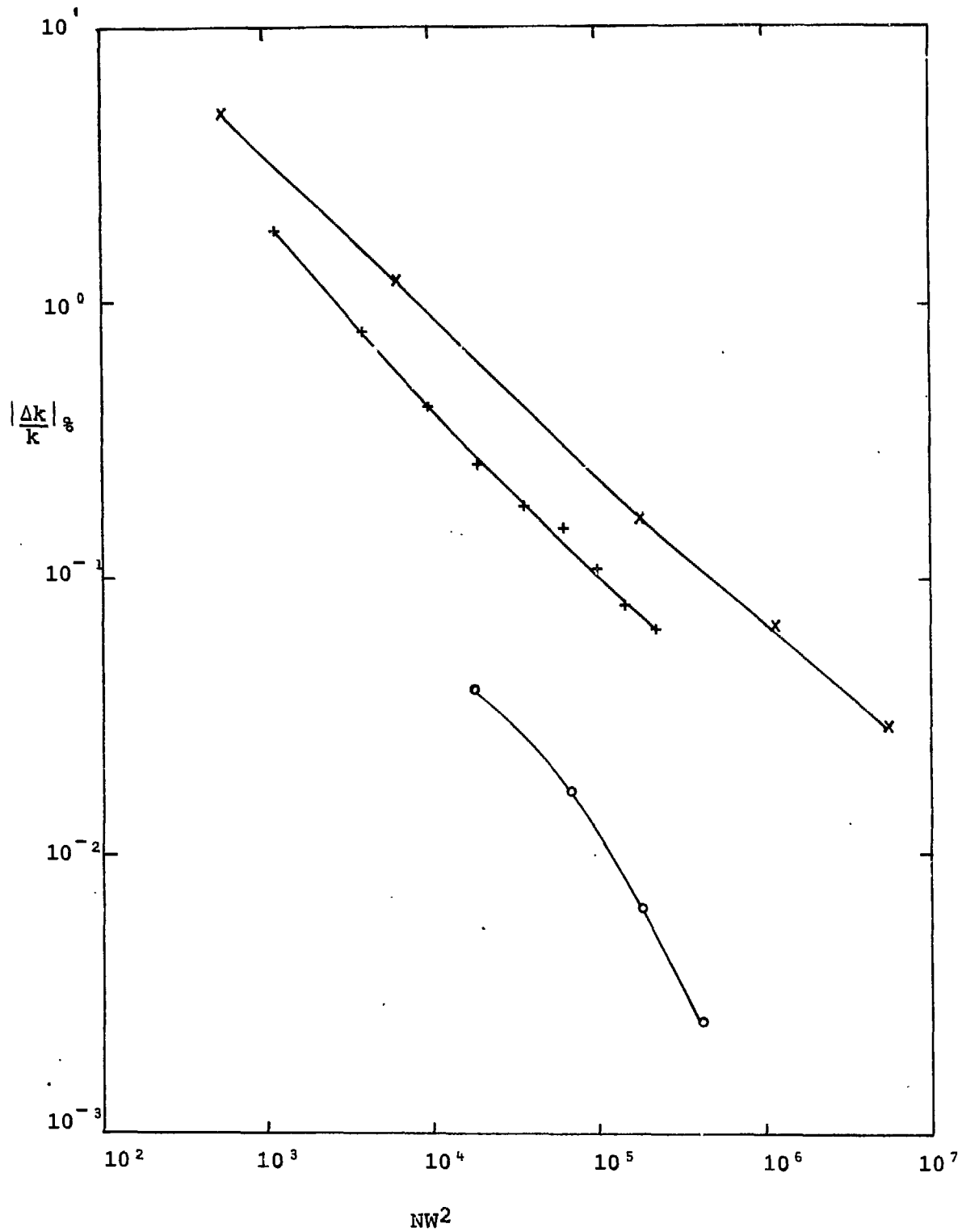


Fig. 14.- Tiempo de cálculo en función del error relativo de truncación. Reactor de dos zonas.  
 X Diferencias Finitas.  
 + Elementos rectangulares lineales.  
 O Elementos rectangulares cuadráticos.

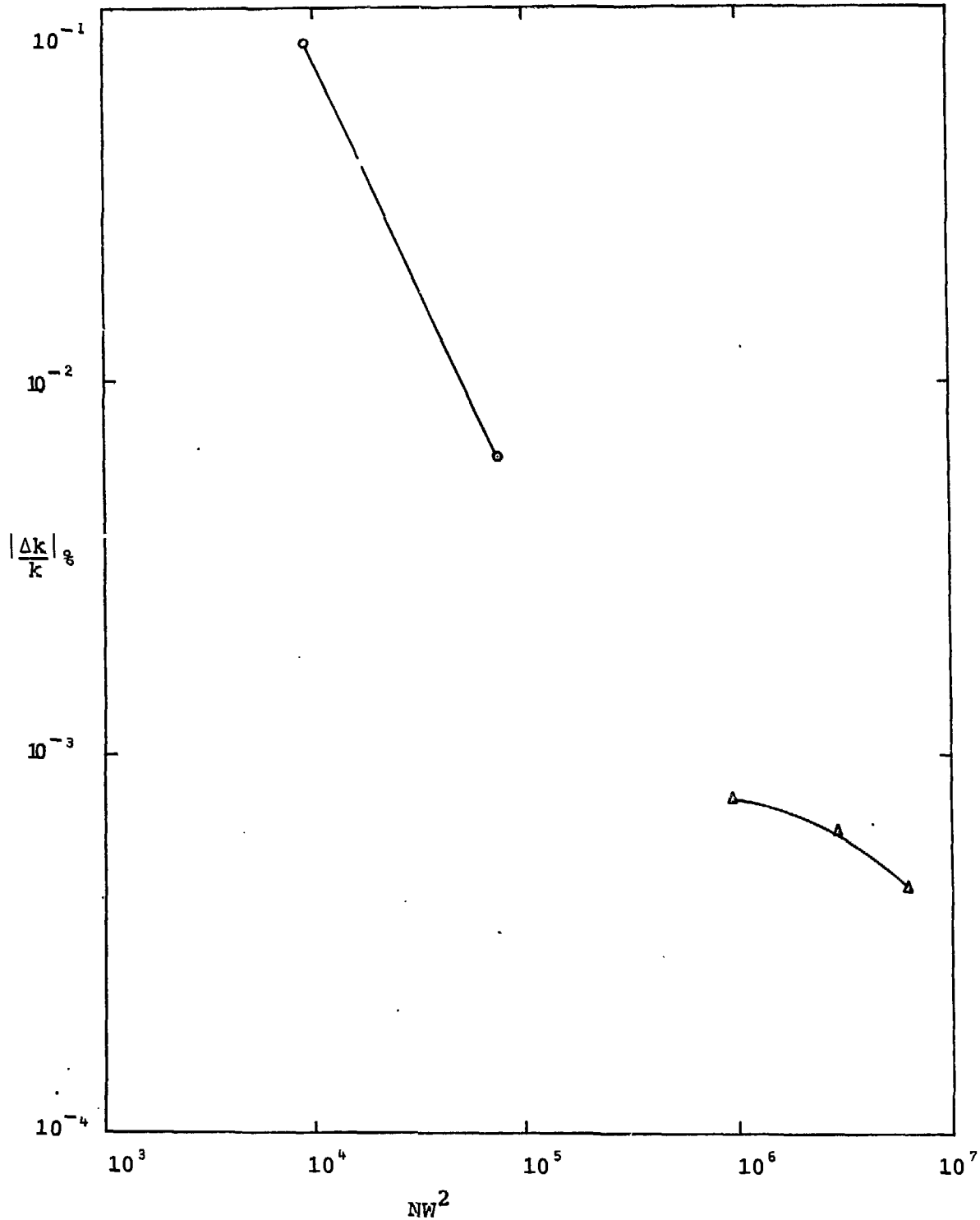


Fig. 15.- Tiempo de cálculos en función del error relativo - de truncación. Reactor de dos zonas. Elementos cúbicos:  $\Delta$  triangulares,  $\circ$  rectangulares.

nes de volúmen de combustible, sodio, y acero inoxidable en el núcleo son 0.42, 0.37 y 0.21 respectivamente.

El conjunto de secciones eficaces para los cuatro grupos usados es listado en el Apéndice I con los siguientes nombres de materiales: región de núcleo I, región de núcleo II, región de reflector, región de cobertor I, y región de cobertor II.

Para mallas triangulares el valor de referencia de la constante de multiplicación es  $k_{\text{eff}} = 1.0569\ 955$ , obtenido con una malla  $\tau_{24,1}^{(5)}$ . También para diferencias finitas se usa este valor.

En el caso de mallas rectangulares el valor de referencia fué el obtenido con la malla más fina posible de calcular con polinomios cúbicos, siendo esta  $\tau_{6,2}$  y el valor de referencia  $k_{\text{eff}} = 1.059\ 789$ .

Los valores de referencia son diferentes debido al número de cifras significativas usado en cada caso.

Para el tratamiento con diferencias finitas usaron siete diferentes mallas rectangulares según se muestra en la tabla VIII. Dentro de cada región los intervalos son igualmente espaciados en ambas direcciones  $x$ ,  $y$ . Los resultados se presentan en la Tabla IX. En la última columna se muestra el número máximo de palabras de 64 bits usadas durante la ejecución del programa.

Los resultados para el código HOD con elementos desde -

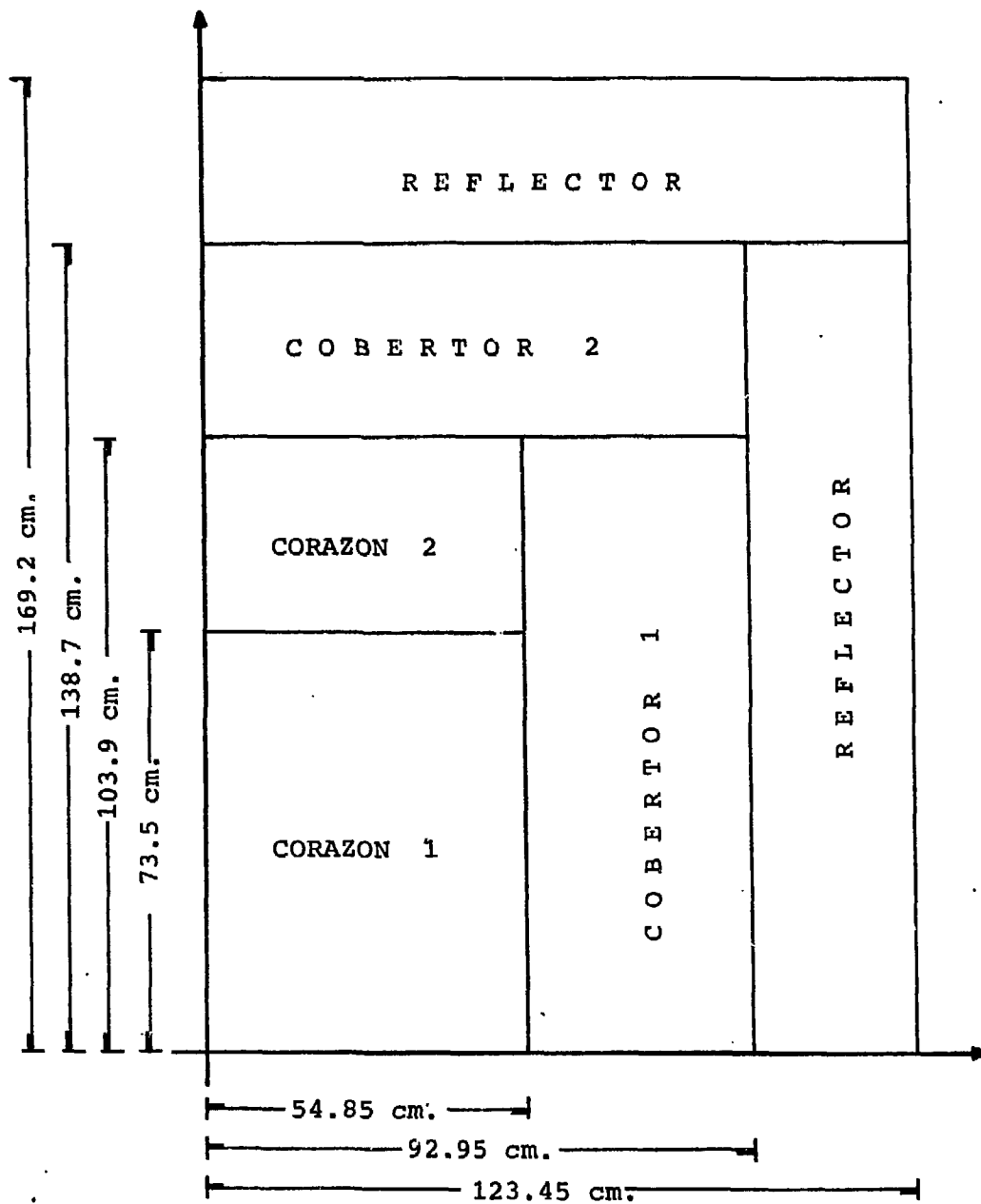


Fig. 16.- Reactor rápido de cría LMFBR (cuarta parte)



TABLA VIII

ESTRUCTURA DE LAS MALLAS PARA LA APROXIMACION CON DIFERENCIAS FINITAS DEL REACTOR LMFBR.

Malla	direccion x (cm)				direccion y (cm)					Número Total de Celdas en la Malla.
	0 a 54.85	54.85 a 92.95	92.95 a 123.45	TOTAL	0 a 73.5	73.5 a 103.9	103.9 a 138.7	138.7 a 169.2	TOTAL	
$\pi_{48}$	2	2	2	6	2	2	2	2	8	48
$\pi_{140}$	6	2	2	10	8	2	2	2	14	140
$\pi_{280}$	8	4	2	14	10	4	4	2	20	280
$\pi_{560}$	10	6	4	20	12	6	6	4	28	560
$\pi_{900}$	13	7	5	25	14	8	8	6	36	900
$\pi_{1160}$	15	8	6	29	15	9	9	7	40	1160
$\pi_{1452}$	16	10	7	33	16	10	10	8	44	1452

TABLA IX

RESULTADOS CON DARC2D PARA EL REACTOR LMFBR

Malla	Número de Incógnitas por Grupo	k	Error Relativo (%)	Número de Palabras (64 bits)
$\pi_{48}$	48	1.067176	$9.6 \times 10^{-1}$	38 900
$\pi_{140}$	140	1.064142	$6.8 \times 10^{-1}$	41 000
$\pi_{280}$	280	1.058874	$1.8 \times 10^{-1}$	44 200
$\pi_{560}$	560	1.057842	$8.0 \times 10^{-2}$	50 500
$\pi_{900}$	900	1.057838	$5.2 \times 10^{-2}$	58 200
$\pi_{1160}$	1160	1.057414	$4.0 \times 10^{-2}$	64 100
$\pi_{1452}$	1452	1.057298	$2.9 \times 10^{-2}$	70 700

TABLA X

RESULTADOS CON EL HOD PARA EL REACTOR LMFBR

Grado	Malla $\tau_{p,q}$	Número - de Incóg nitas por grupo N	Semi- ancho de - banda W	$N W^2$	k	Error relativo (%)	Número de Palabras usado (64 bits)
2	$\tau_{17,1}$	46	15	$1.04 \times 10^4$	1.056700	$-2.8 \times 10^{-2}$	48 000
2	$\tau_{24,1}$	63	17	$1.82 \times 10^4$	1.056851	$-1.3 \times 10^{-2}$	48 400
3	$\tau_{17,1}$	94	27	$6.85 \times 10^4$	1.057007	$+1.5 \times 10^{-3}$	49 800
4	$\tau_{17,1}$	159	36	$2.06 \times 10^5$	1.056995	$+3.3 \times 10^{-4}$	53 300
5	$\tau_{17,1}$	241	46	$5.10 \times 10^5$	1.056992	-	59 400
5	$\tau_{24,1}$	336	50	$8.40 \times 10^5$	1.056992	-	64 400

TABLA XI

RESULTADOS CON DELFIN PARA EL REACTOR LMFBR

## GRADO 1

$\sigma_{p,q}$	N	W	$N W^2$	k	$\frac{\Delta k}{k_{eff}} \times 100$	$P_k$
$\sigma_{6,1}$	20	6	$7.20 \times 10^2$	1.0402 27	$-1.85 \times 10^0$	—
$\sigma_{6,2}$	63	9	$5.10 \times 10^3$	1.0553 82	$-4.16 \times 10^{-0}$	2.15
$\sigma_{6,3}$	130	12	$1.87 \times 10^4$	1.0578 73	$-1.81 \times 10^{-0}$	2.05
$\sigma_{6,4}$	221	15	$4.97 \times 10^4$	1.0587 36	$-9.94 \times 10^{-2}$	2.08

## GRADO 2

$\sigma_{6,1}$	51	14	$1.00 \times 10^4$	1.0599 45	$1.47 \times 10^{-2}$	—
$\sigma_{6,2}$	173	23	$9.15 \times 10^4$	1.0598 42	$5.00 \times 10^{-3}$	1.70
$\sigma_{6,3}$	367	32	$3.76 \times 10^5$	1.0598 01	$1.13 \times 10^{-3}$	3.68

## GRADO 3

$\sigma_{6,1}$	82	22	$3.97 \times 10^4$	1.0598 54	$6.13 \times 10^{-3}$	—
$\sigma_{6,2}$	283	37	$3.87 \times 10^5$	1.0597 89	—	—

grado dos hasta cinco sobre la triangulación  $\tau_{17,1}$ , y para grado dos y cinco sobre la triangulación  $\tau_{24,1}$  se dan en la Tabla X.

Los resultados obtenidos con el código DELFIN para polinomios lineales, cuadráticos y cúbicos se dan en la Tabla XI.

En su reporte Kaper, Leaf, y Lindeman concluyen que el código HOD con elementos cuadráticos y diecisiete triángulos es aproximadamente 20 veces más rápido que el código DARC2D, siendo además reducida la necesidad de memoria de 70 700 palabras a 48 000 palabras, lo cual representa un ahorro de más del 30%.

Con el código DELFIN hemos logrado para la malla  $\sigma_{6,3}$  con 24 000 palabras de memoria y un tiempo de cálculo ligeramente mayor, el mismo orden para el error relativo en porcentaje que el obtenido con el código HOD para la malla  $\tau_{17,1}$  con 53 300 palabras, pero con la gran diferencia de haber usado elementos cuadráticos con el código DELFIN mientras que con el código HOD se usaron elementos cuadráticos.

## C O N C L U S I O N E S

Ha sido desarrollado un código que resuelve numéricamente la ecuación de difusión de neutrones dentro de un reactor nuclear en estado estacionario, considerando varios grupos de energía y usando la técnica de elementos finitos. Los datos que deben suministrarse al código son los coeficientes de difusión, secciones eficaces y espectro de fisión, por región y por grupo; se obtienen como resultados el valor de la constante de multiplicación  $k_{eff}$  y los flujos en cualquier punto del reactor.

Se ha efectuado una comparación entre la eficiencia de un código con elementos finitos rectangulares contra uno que usa elementos finitos triangulares, para el tratamiento de reactores rápidos con geometría rectangular. Se han obtenido resultados que permiten sugerir el uso de elementos finitos rectangulares para resolver problemas con geometría rectangular, pues cuando menos se tendrá una mayor simplicidad en el manejo del código.

Con este código se podrán efectuar en lo sucesivo una serie de investigaciones sobre problemas de ingeniería nuclear como son: investigación de criticidad, quemado de combustible, cambios de reactividad, etc., así como en la determinación del tipo de elemento finito y de las bases de funciones polinomiales más adecuadas para reactores con geometría rectangular.

APENDICE I

CONSTANTES DE LOS MATERIALES

NUCLEO

	g = 1	g = 2	
Dg	2.6800045	1.5787672	*
$\sum_g^R$	$5.4577038 \times 10^{-2}$	$1.4496088 \times 10^{-2}$	**
$(\nu \sum_f)_g$	$3.0834480 \times 10^{-2}$	$2.5200 \times 10^{-2}$	**
$\chi_g$	0.575	0.425	
$(\sum_f)_g$	$1.23338 \times 10^{-2}$	$1.00800 \times 10^{-2}$	**
$g'=1 \sum_{g'} g$	-	$4.0792071 \times 10^{-2}$	**
$g'=2 \sum_{g'} g$	-	-	

(\*) cm (\*\*)  $\text{cm}^{-1}$

APENDICE I

CONSTANTES DE LOS MATERIALES

COBERTOR

g = 1

g = 2

$D_g$	1.5496893	1.0941654	*
$\sum_g^R$	$1.1202501 \times 10^{-1}$	$9.0074999 \times 10^{-3}$	**
$(\nu \sum_f)_g$	$5.2464120 \times 10^{-2}$	$3.42000 \times 10^{-4}$	**
$\chi_g$	0.575	0.425	
$(\sum_f)_g$	$2.09856 \times 10^{-2}$	$1.36800 \times 10^{-4}$	**
$g'=1 \sum_{g'} g'$		$8.8989013 \times 10^{-2}$	**
$g'=2 \sum_{g'} g'$			

(\*) cm

(\*\*)  $\text{cm}^{-1}$

CONSTANTES DE LOS MATERIALES

REGION DE NUCLEO I

	q=1	q=2	q=3	q=4	
$D_g$	2.8549410	1.5019864	$9.5626321 \times 10^{-1}$	$9.4976006 \times 10^{-1}$	*
$\sum_g^R$	$4.4404449 \times 10^{-2}$	$7.5714441 \times 10^{-3}$	$1.0728348 \times 10^{-2}$	$2.8385773 \times 10^{-2}$	**
$(\nu \sum_f)_g$	$1.7810572 \times 10^{-2}$	$4.7768687 \times 10^{-3}$	$6.3201602 \times 10^{-3}$	$2.4478089 \times 10^{-2}$	**
$\chi_g$	$5.8815320 \times 10^{-1}$	$4.0819007 \times 10^{-1}$	$3.6383214 \times 10^{-3}$	$1.9472008 \times 10^{-5}$	
$(\sum_f)_g$	$5.93749 \times 10^{-3}$	$1.63826 \times 10^{-3}$	$2.19686 \times 10^{-3}$	$8.51473 \times 10^{-3}$	**
$g'=1 \sum_{g'} g'$	-	$3.7673204 \times 10^{-2}$	$1.9084315 \times 10^{-4}$	$1.3104739 \times 10^{-8}$	**
$g'=2 \sum_{g'} g'$	-	-	$4.1581627 \times 10^{-3}$	$3.0708365 \times 10^{-7}$	**
$g'=3 \sum_{g'} g'$	-	-	-	$1.8005366 \times 10^{-3}$	**
$g'=4 \sum_{g'} g'$	-	-	-	-	**

\* cm

\*\*  $\text{cm}^{-1}$

APENDICE I



CONSTANTES DE LOS MATERIALES

REGION DE NUCLEO II

	g = 1	g = 2	g = 3	g = 4	
$D_g$	2.8564419	1.5029859	$9.5546409 \times 10^{-1}$	$9.3546137 \times 10^{-1}$	*
$\sum_g^R$	$4.43118312 \times 10^{-2}$	$8.0212329 \times 10^{-3}$	$1.1456733 \times 10^{-2}$	$3.2093861 \times 10^{-2}$	**
$(\nu \sum_f)_g$	$1.9504805 \times 10^{-2}$	$6.1076731 \times 10^{-3}$	$8.0890608 \times 10^{-3}$	$3.1305739 \times 10^{-2}$	**
$\chi_g$	$5.8815320 \times 10^{-1}$	$4.0819007 \times 10^{-1}$	$3.6383214 \times 10^{-3}$	$1.9472008 \times 10^{-5}$	
$(\sum_f)_g$	$6.43424 \times 10^{-3}$	$2.09374 \times 10^{-3}$	$281138 \times 10^{-3}$	$1.08885 \times 10^{-2}$	**
$g'=1 \sum_{g'} g'$	-	$3.7093792 \times 10^{-2}$	$1.8534623 \times 10^{-4}$	$1.3647539 \times 10^{-8}$	**
$g'=2 \sum_{g'} g'$	-	-	$4.1507471 \times 10^{-3}$	$3.0816814 \times 10^{-7}$	**
$g'=3 \sum_{g'} g'$	-	-	-	$1.8030354 \times 10^{-3}$	**
$g'=4 \sum_{g'} g'$	-	-	-	-	

\* cm

\*\*  $\text{cm}^{-1}$

APENDICE I

CONSTANTES DE LOS MATERIALES

REGION DE REFLECTOR

	g = 1	g = 2	g = 3	g = 4	
$D_g$	2.9454221	1.8767154	$9.0814163 \times 10^{-1}$	$8.0997496 \times 10^{-1}$	*
$\sum_g^R$	$3.0877647 \times 10^{-2}$	$3.0552809 \times 10^{-3}$	$2.8511966 \times 10^{-3}$	$4.5020694 \times 10^{-3}$	**
$(\nu \sum_g^F)_g$	-	-	-	-	
$\chi_g$	-	-	-	-	
$(\sum_g)_g$	-	-	-	-	
$g'=1 \sum_{g'} g$	-	$3.0282138 \times 10^{-2}$	$7.2046601 \times 10^{-5}$	-	**
$g'=2 \sum_{g'} g$	-	-	$2.8251846 \times 10^{-3}$	-	**
$g'=3 \sum_{g'} g$	-	-	-	$1.6298899 \times 10^{-3}$	**
$g'=4 \sum_{g'} g$	-	-	-	-	

\* cm

\*\*  $\text{cm}^{-1}$

APENDICE I

CONSTANTES DE LOS MATERIALES

REGION DE COBERTOR I

	g = 1	g = 2	g = 3	g = 4	
$D_g$	2.7170892	1.4239655	9.1786663	9.6557242	*
$\sum_g^R$	$4.7746956 \times 10^{-2}$	$6.4510987 \times 10^{-3}$	$8.7237990 \times 10^{-3}$	$1.6173004 \times 10^{-2}$	**
$(\sum_f^v)_g$	$1.4125980 \times 10^{-2}$	$8.3826363 \times 10^{-4}$	$1.0734519 \times 10^{-3}$	$4.2048861 \times 10^{-3}$	**
$\chi_g$	$5.8815320 \times 10^{-1}$	$4.0819007 \times 10^{-1}$	$3.6383214 \times 10^{-3}$	$1.9472008 \times 10^{-5}$	
$(\sum_f)_g$	$4.93474 \times 10^{-3}$	$2.90263 \times 10^{-4}$	$3.73750 \times 10^{-4}$	$1.46507 \times 10^{-3}$	**
$g'=1 \sum_{g'} g'$	-	$4.1964660 \times 10^{-2}$	$2.2104927 \times 10^{-4}$	-	**
$g'=2 \sum_{g'} g'$	-	-	$4.3169599 \times 10^{-3}$	$1.7577946 \times 10^{-7}$	**
$g'=3 \sum_{g'} g'$	-	-	-	$1.7932700 \times 10^{-3}$	**
$g'=4 \sum_{g'} g'$	-	-	-	-	

\* cm

\*\* cm<sup>-1</sup>

APENDICE I

CONSTANTES DE LOS MATERIALES

REGION DE COBERTOR II

	g = 1	g = 2	g = 3	g = 4	
$D_g$	2.5140638	1.3019350	$8.6143832 \times 10^{-1}$	$9.0189094 \times 10^{-1}$	*
$\sum_g^R$	$5.349433 \times 10^{-2}$	$7.3457619 \times 10^{-3}$	$1.0268167 \times 10^{-2}$	$1.9874156 \times 10^{-2}$	**
$(v \sum_f)_g$	$1.7300704 \times 10^{-2}$	$1.3583608 \times 10^{-3}$	$1.7672090 \times 10^{-3}$	$6.9204081 \times 10^{-3}$	**
$\chi_g$	$5.8815320 \times 10^{-1}$	$4.0819007 \times 10^{-1}$	$3.6383214 \times 10^{-3}$	$1.9472008 \times 10^{-5}$	
$(\sum_f)_g$	$4.93474 \times 10^{-3}$	$2.90263 \times 10^{-4}$	$3.73750 \times 10^{-4}$	$1.46507 \times 10^{-3}$	**
$g'=1 \sum_{g'} g$	-	$4.6522460 \times 10^{-2}$	$2.5647345 \times 10^{-4}$	-	**
$g'=2 \sum_{g'} g$	-	-	$4.6940274 \times 10^{-3}$	$2.0861183 \times 10^{-7}$	**
$g'=3 \sum_{g'} g$	-	-	-	$1.9051786 \times 10^{-3}$	**
$g'=4 \sum_{g'} g$	-	-	-	-	

\* cm

\*\*  $\text{cm}^{-1}$

APENDICE I

R E F E R E N C I A S

- 1.- S. Glasstone and M.C. Edlund, The Elements of Nuclear Reactor Theory, Van Nostrand, New York (1952).
- 2.- J.R. Lamarsh, Introduction to Nuclear Reactor Theory, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts (1966).
- 3.- A.M. Weinberg and E.P. Wigner, The Physical Theory of Neutron Chain Reactors, University of Chicago Press, Chicago (1958).
- 4.- E.L. Wachpress, Iterative Solution of Elliptic Systems and Applications to the Neutron Diffusion Equations of Reactor Physics, Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey (1966).
- 5.- H.G. Kaper, G.K. Leaf and A.J. Lindeman. Applications of Finite Element Methods in Reactor Mathematics. Numerical Solution of the Neutron Diffusion Equation, Argonne National Laboratory, ANL-7925 (1972).
- 6.- J.P. Hennart. Recent Variational Methods with Applications to Numerical Reactor Calculation, Series of lectures given in the Nuclear Engineering Department of the "Instituto Politécnico Nacional" in México City from October 1972 to January 1973.
- 7.- J.P. Hennart. Comparison of extrapolation techniques with high order finite element methods for diffusion equations with piecewise continuous material properties. Instituto

Politécnico Nacional. México (1973).

- 8.- C.A. Felippa and R.W. Clough. The Finite Element Method in Solid Mechanics, in Numerical Solution of Field Problems in Continuum Physics. G. Birkhoff and R.S. Varga, Eds., SIAM-AMS Proceeding; Vol. II. American Mathematical Society (1970).
- 9.- Desai and Abel. Introduction to the Finite Element Methods A Numerical Methods for Engineering Analysis. Van Nostrand Reinhold Company. (1972).
- 10.- G.J. Fix and G. Strang. An Analysis of the Finite Element Method. Prentice Hall, Inc. (1973).
- 11.- J. P. Hennart. Application of the Finite Element Method to Numerical Reactor Calculation.- A Review of Recent Research Work. México. (1973).
- 12.- J. H. Wilkinson and C. REinsch. Handbook for Automatic Computation. Linear Algebra. Chief Editor F.L. Bauer. - Spring-Verlag New York Heidelberg Berlin (1971).
- 13.- C.M. Kang and K.F. Hansen. Finite Element Methods for Reactor Analysis. Nuclear Science Engineering: 51,456-495 (1973).
- 14.- Reginald P. Tewarson. Sparse Matrices. Academic Press.- New York and London. (1973).

- 15.- M. Clark Jr. and K.F. Hansen. Numerical Methods of Reactor Analysis. Academic Press. New York and London. -  
(1964).
- 16.- L.A. Semenza, E.E. Lewis and E.C. Rossow. The Application of the Finite Element Method to the Multigroup Neutron Diffusion Equation. Nuclear Science and Engineering: 47, 302-310 (1972).
- 17.- S.G. Mikhlin and K.L. Smolitskiy. Approximate Methods for Solution of Differential and Integral Equations. -  
American Elsevier Publishing Company Inc., New York -  
(1967).
- 18.- J.M. Gel'Fand. Lectures in Linear Algebra. Interscience Publishers, Inc., New York (1965).
- 19.- Mathematics and Computation Division of the American Nuclear Society. Argonne Code Center: Benchmark Problem -  
Book. ANL-7416 (1968).
- 20.- Kantarovich and Krylov. Approximate Methods of Higher Analysis. Interscience Publishers (1958).
- 21.- S. Kaplan. Some New Methods of Flux Synthesis. Nucl. -  
Sci. Eng., 13:22 (1962).
- 22.- G.P. Calame and F.D. Federighi. A Variational Procedure for Determining Spatially Dependent Thermal Spectra. -  
Nucl. Sci. Eng., 10:190 (1961).

- 23.- C.M. Kang, K.F. Hansen. The Finite Element Methods for the Neutron Diffusion Equations. Trans. Am. Nucl. Soc. 14,199 (1971).
- 24.- L.A. Semenza, E.E. Lewis, E.C. Rossow. A Finite Element Treatment of Neutron Diffusion. 14,200 (1971).
- 25.- L.C. Just et al., The System Aspects and Interface Data Sets of the Argonne Reactor Computation (ARC) System. - ANL-7711, Argonne National Laboratory (1971).

