# RUBERT MARTÍN PARDO

# ACOPLE ENTRE EL FLUJO NEUTRÓNICO Y LOS PARÁMETROS NEUTRÓNICOS-TERMOHIDRÁULICOS

# ACOPLE ENTRE EL FLUJO NEUTRÓNICO Y LOS PARÁMETROS NEUTRÓNICOS- TERMOHIDRÁULICOS

# RUBERT MARTÍN PARDO



Pumita



# ÍNDICE GENERAL

Ĺ	ACO	PLE ES	STÁTICO	1		
	1.1	Cálcul	lo inicial de las secciones eficaces	1		
	1.2	Modif	icación de Secciones Eficaces según Parámetros			
		Neutr	ónico-Termohidráulicos	2		
		1.2.1	Modificación por concentración de Xenón	2		
		1.2.2	Modificación por concentración de Samario	3		
		1.2.3	Modificación por Parámetros Termohidráulicos	4		
	1.3	Cálcul	lo del Flujo Neutrónico	4		
	1.4 Cálculo de los Parámetros Neutrónico - Termohidráulicos					
1.4.1 Cálculo de la distribución de concentración						
		•	Xenón	4		
		1.4.2	Cálculo de la distribución de la concentración	ľ		
		•	de Samario	5		
		1.4.3				
		, ,	mohidráulicos	5		
	1.5	Organ	iization	7		
	1.6	_	Options	9		
	1.7	-		01		
	1.8			11		
	1.9		T.T. 1	[1		
	_		1 mm ·	[1		
		Licono				

# PROCEDIMIENTOS INVOLUCRADOS

El acople entre el flujo neutrónico y los parámetros neutrónico termohidráulicos en Pumita para el caso de un cálculo estático se puede resumir con la siguiente secuencia:

- 1. Las *Secciones Eficaces* se calculan en función de la distribución de materiales y el quemado.
- 2. Las *Secciones Eficaces* se modifican de acuerdo a la distribución de los *Parámetros Neutrónico Temohidráulicos* en el reactor.
- 3. La distribución de *Flujo Neutrónico* se calcula iterativamente a partir del conjunto de *Secciones Eficaces* obtenido en el paso 2.
- 4. Se calcula la distribución de los *Parámetros Neutrónico Temohidráulicos* en el reactor, a partir del *Flujo Neutrónico* obtenido en el paso 3 y del cálculo termohidráulico.
- 5. Se regresa al paso 1, con la nueva distribución de los *Parámetros Neutrónico Temohidráulicos* en el reactor.

Este proceso iterativo se repetirá hasta que el flujo neutrónico no varíe significativamente de un paso a otro. Para ello se puede tomar como criterio que el número de iteraciones que requiera el cálculo de flujo sea 1.

En el presente capítulo se desglosarán los distintos pasos del acople, citando las variables y procedimientos dentro del código fuente de Pumita que lo hacen posible.

#### 1.1 CÁLCULO INICIAL DE LAS SECCIONES EFICACES

El cálculo inicial de las secciones eficaces se realiza con el procedimiento InterpolateXS contenido en CAREMTRI. pas (o en CAREMHEXA. pas según el modelo de Pumita).

- 1. Se llama al procedimiento asignar\_materiales. Aquí se asignan los números de materiales a cada uno de los 14 trozos de los 61 canales del modelo del núcleo del reactor. También se asignan las fracciones de inserción de barra para los trozos en los que la barra de control está parcialmente insertada.
- 2. Para cada uno de los canales y trozos del núcleo del reactor, se realiza una interpolación de las secciones eficaces y los coeficientes de difusión a partir de las tablas de los números de

materiales correspondientes. Esta interpolación tiene en cuenta el quemado de cada canal y trozo. Se emplea la función InterpolateXS. Los resultados obtenidos son almacenados en las matrices DIF[canal,trozo,grupo], SIGMABS[canal,trozo,grupo], NUSGIMAFIS[canal,trozo,grupo],SIGMAFIS[canal,trozo,grupo] y SCATTERING[canal,trozo,grupo,grupo1].

Es importante destacar que las secciones eficaces tabuladas en el archivo externo están *referenciadas* a valores centrales de los parámetros neutrónico- termohidráulicos. Por ejemplo, la concentración de xenón para el que fueron cálculadas en general no tiene que ser nula. Lo mismo ocurre con la concentración de Samario y los parámetros termohidráulicos.

# 1.2 MODIFICACIÓN DE SECCIONES EFICACES SEGÚN PARÁME-TROS NEUTRÓNICO-TERMOHIDRÁULICOS

Dentro del procedimiento InterpolateXS también se realizan modificaciones a las secciones eficaces y coeficientes de difusión según las distribuciones de los parámetros neutrónico- termohidráulicos en el reactor. Ahora bien, estas modificaciones serán realizadas solamente si las variables switch correspondientes están activadas (su valor es True).

#### 1.2.1 Modificación por concentración de Xenón

Si la variable switch conXenon está activada, se realiza una modificación de las secciones eficaces a partir de la distribución de la concentración de xenón en el núcleo:

Se llama al procedimiento agregar\_Xenon, pasándole como argumentos la posición N00=241 de tabla de las secciones eficaces del Xenón y la diferencia entre la concentración de Xenón para cada canal y trozo y la concentración de xenón de referencia (valor central): DELTA=ConcXe[canal,grupo] - ConcXe0.

Las secciones eficaces y coeficientes de difusión para cada canal y trozo del reactor, y para cada grupo de energía, son modificadas según las siguientes fórmulas:

$$\begin{split} D &= D_0 + \Delta X * \frac{\partial D}{\partial X} \\ \Sigma_{abs} &= \Sigma_{abs,0} + \Delta X * \sigma^{Xe}_{abs} \\ \Sigma_{scatt} &= \Sigma_{scatt,0} + \Delta X * \sigma^{Xe}_{scatt} \\ \Sigma_{fis} &= \Sigma_{fis,0} + \Delta X * \sigma^{Xe}_{fis} \end{split}$$

donde  $D_0, \Sigma_{abs,0}, \Sigma_{scatt,0}, \Sigma_{fis,0}$  y  $D, \Sigma_{abs}, \Sigma_{scatt}, \Sigma_{fis}$  son los coeficientes de difusión y las secciones eficaces antes y después de la modificación respectivamente;  $\Delta X$  es la diferencia de concentración de xenón con respecto al valor de referencia ConcXe0 (esta diferencia es pasada como argumento al procedimiento agregar\_Xenon);  $\frac{\partial D}{\partial X}, \sigma^{Xe}_{abs}, \sigma^{Xe}_{scatt}, \sigma^{Xe}_{fis}$  son los valores microscópicos de los coeficientes de difusión y las secciones eficaces para el Xenón, que se encuentran tabulados a partir de la posición N00=241 en las tablas externas.

De estas expresiones se puede ver que la modificación de las secciones eficaces y los coeficientes de difusión se hace teniendo en cuenta la *dierencia* de concentración de Xenón respecto al valor central ConcXe0, con lo que queda implicado que las secciones eficaces y los coeficientes de difusión antes de la modificación se encontraban referidos a este valor central.

Es por tanto importante asegurarse de que las tablas de secciones eficaces que se pasen a Pumita se correspondan con valores calculados para una concentración de xenón igual a la que se pasa como ConcXe0.

# 1.2.2 Modificación por concentración de Samario

De manera equivalente al caso del Xenón, las secciones eficaces y los coeficientes de difusión son modificadas según la diferencia entre la concentración de Samario y el correspondiente valor central Delta=ConcSm[canal,trozo]-ConcSamario0 si la variables switch conSamario está activa.

En este caso se llama al procedimiento agregar\_Samario con los argumentos N0=281 y el Delta descrito previamente. Las modificaciones se realizan según las expresiones:

$$\begin{split} D &= D_0 + \Delta Sm*\frac{\partial D}{\partial Sm} \\ \Sigma_{abs} &= \Sigma_{abs,0} + \Delta Sm*\sigma_{abs}^{Sm} \\ \Sigma_{scatt} &= \Sigma_{scatt,0} + \Delta Sm*\sigma_{scatt}^{Sm} \\ \Sigma_{fis} &= \Sigma_{fis,0} + \Delta Sm*\sigma_{fis}^{Sm} \end{split}$$

donde los términos tienen significados equivalentes a los descritos para el Xenón, solo que esta vez están referidos al Samario.

Se observa nuevamente que las modificaciones se hacen respecto al valor de referencia ConcSamario0 por lo que las secciones eficaces tabuladas están referidas a este valor.

## 1.2.3 Modificación por Parámetros Termohidráulicos

## 1.3 CÁLCULO DEL FLUJO NEUTRÓNICO

Dentro de InterpolateXS, una vez que las secciones eficaces han sido calculadas acorde a los materiales, quemado y los parámetros neutrónico - termohidráulicos (aegún las variables switch activas), se pasan dichas secciones eficaces a variables con coordenadas del reticulado del reactor (triangular o hexagonal según la versión de Pumita).

Así, se obtienen los valores requeridos en las variables D[iz,i,j,grupo], SIGTOT[iz,i,j,grupo], NUSIGF[iz,i,j,grupo], NUSIGF0[iz,i,j,grupo], SIGSCATT[iz,i,j,grupo,grupo1] para todas las coordenadas iz,i,j del reticulado.

Luego se llama al procedimiento MeshConstants que determina las constantes necesarias para el cálculo del flujo neutrónico con la ecuación de difusión a partir de las secciones eficaces determinadas anteriormente. Es en este procedimiento donde se tienen en cuenta las condiciones de borde según se emplee o no el método de la matriz de respuesta.

Luego se llama al procedimiento iteraciones, que efectivamente realiza un cálculo iterativo del flujo neutrónico. Este cálculo emplea los coeficientes determinados con MeshConstants que a su vez dependen de las secciones eficaces y por tanto de los parámetros neutrónicostermohidráulicos. El cálculo del flujo implica varias iteraciones hasta que se obtenga una convergencia del valor de k (factor de multiplicación). El número de iteraciones necesarios para la convergencia es un indicador de cuán lejos está el flujo neutrónico antes de llamarse a iteraciones del flujo neutrónico calculado.

## 1.4 CÁLCULO DE LOS PARÁMETROS NEUTRÓNICO - TERMOHI-DRÁULICOS

## 1.4.1 Cálculo de la distribución de concentración de Xenón

Si la variable switch conXenon está activa, se llama al procedimiento Xenon que recibe como argumento el paso de tiempo DT empleado en el cálculo.

Para el caso de un cálculo estático, se emplea DT = 0. En este caso se determinan las concentraciones de Xenón en equilibrio para cada canal y trozo del reactor, a partir del flujo neutrónico obtenido previamente

$$Xe_{\infty} = \frac{y_{\text{I}} * \sum_{g} \Sigma_{\text{fis,g}} \varphi_{g} + y_{Xe} \sum_{g} \Phi_{g} \Sigma_{\text{fis}}}{\sum_{g} \Phi_{g} * \sigma_{abs,g}^{Xe} + \lambda_{Xe}}$$

donde  $Xe_{\infty}$  es la concentración de Xenón en equilibrio calculada para cada canal,trozo ;  $y_{Xe}=0.002576$  y  $y_{I}=0.062810$  son los yields del Xenón y el Iodo en la fisión neutrónica respectivamente ;  $\varphi_{g}$  es el flujo neutrónico por grupo ;  $\Sigma_{fis,g}$  la sección eficaz de fisión por

grupo calculada previamente,  $\lambda_{Xe} = 2,10e - 5seg^{-1}$  la constante temporal de decaimiento del Xenón, y  $\sigma^{Xe}_{abs,q}$  la sección eficaz de aborción del Xenón por grupo, tabulada externamente.

De esta manera, la concentración de xenón depende del flujo neutrónico calculado previamente, y más tarde, a través de las modificaciones correspondientes de las secciones eficaces, influye sobre él, cerrando así el acople.

Dentro del procedimiento Xenon también se calcula la concentración media de Xenón y se almacena en la variable ConcXeMedia.

#### Cálculo de la distribución de la concentración de Samario

De manera parecida al cálculo del xenón, el cálculo de xenón se activa con la variable switch conSamario. En este caso se llama al procedimiento Samario. Si el cálculo es estático, se le pasa como argumento DT=0.

Para el caso estático, se calcula la concentración en equilibrio del samario:

$$Sm_{\infty} = \frac{y_{Pt} * \sum_{g} \sum_{fis,g} * \Phi_{g}}{\sum_{g} \sigma_{gbs,g}^{Sm} * \Phi_{g}}$$

 $\mathrm{Sm}_{\infty} = rac{\mathrm{y}_{\mathrm{Pt}} * \sum_{g} \Sigma_{\mathrm{fis,g}} * \Phi_{g}}{\sum_{g} \sigma_{\mathrm{abs,g}}^{\mathrm{Sm}} * \Phi_{g}}$  donde  $\mathrm{y}_{\mathrm{Pt}}$  es el yield del Platino en la fisión neutrónica,  $\Sigma_{\mathrm{fis,g}}$  es la sección eficaz de fisión por grupo calculada previamente,  $\Phi_q$  el flujo neutronigo por grupo para cada canal y trozo y  $\sigma^{Sm}_{abs,q}$  es la sección eficaz de absorción del Samario.

El resultado es almacenado en la matriz ConcSm[canal,troz] para cada canal y trozo del núcleo del reactor. Esta variable es luego empleada en la modificación de las secciones eficaces, cerrando así el acople.

## Cálculo de la distribución de los parámetros termohidráulicos

Los parámetros termohidráulicos Densidad de Refrigerante, Temperatura del refrigerante y Temperatura del combustible se encuentran almacenados en las matrices globales DensRefr, TempRefr y TComb.

Estas variables pueden ser modificadas a través del procedimiento pasar\_parametros\_TH que ofrece Pumita en su interfaz. Por tanto, los valores de la distribución de estos parámetros deberá de ser calculada con un código termohidráulico externo y pasarse los correspondientes valores a Pumita para que el mismo los emplee en la modificación correspondiente de las secciones eficaces.

El cálculo de los valores termohidráulicos y el posterior trapsaso a Pumita deberá de hacerse de forma alternada con el cálculo del flujo neutrónico para obtener un resultado acoplado.

En general, el cálculo de los parámetros neutrónico termohidráulicos con un programa externo requerirá un conocimiento de la distribución de potencia neutrónicas en el núcleo, lo cual se puede obtener de Pumita a partir del procedimiento (también perteneciente a la interfaz) pedir\_distribucion\_potencias.

As of version 3.0, classicthesis can also be easily used with  $L_YX^1$  thanks to Nicholas Mariette and Ivo Pletikosić. The  $L_YX$  version of this manual will contain more information on the details.

This should enable anyone with a basic knowledge of LATEX  $2\varepsilon$  or LyX to produce beautiful documents without too much effort. In the end, this is my overall goal: more beautiful documents, especially theses, as I am tired of seeing so many ugly ones.

The whole template and the used style is released under the GNU General Public License.

If you like the style then I would appreciate a postcard:

André Miede Detmolder Straße 32 31737 Rinteln Germany

The postcards I received so far are available at:

http://postcards.miede.de

So far, many theses, some books, and several other publications have been typeset successfully with it. If you are interested in some typographic details behind it, enjoy Robert Bringhurst's wonderful book.

IMPORTANT NOTE: Some things of this style might look unusual at first glance, many people feel so in the beginning. However, all things are intentionally designed to be as they are, especially these:

- No bold fonts are used. Italics or spaced small caps do the job quite well.
- The size of the text body is intentionally shaped like it is. It supports both legibility and allows a reasonable amount of information to be on a page. And, no: the lines are not too short.
- The tables intentionally do not use vertical or double rules. See the documentation for the booktabs package for a nice discussion of this topic.²
- And last but not least, to provide the reader with a way easier access to page numbers in the table of contents, the page numbers are right behind the titles. Yes, they are not neatly aligned at the right side and they are not connected with dots that help the eye to bridge a distance that is not necessary. If you are still not convinced: is your reader interested in the page number or does she want to sum the numbers up?

A well-balanced line width improves the legibility of the text. That's what typography is all about, right?

<sup>1</sup> http://www.lyx.org

<sup>2</sup> To be found online at http://mirror.ctan.org/macros/latex/contrib/booktabs/.

Therefore, please do not break the beauty of the style by changing these things unless you really know what you are doing! Please.

YET ANOTHER IMPORTANT NOTE: Since classicthesis' first release in 2006, many things have changed in the LATEX world. Trying to keep up-to-date, classicthesis grew and evolved into many directions, trying to stay (some kind of) stable and be compatible with its port to LyX. However, there are still many remains from older times in the code, many dirty workarounds here and there, and several other things I am absolutely not proud of (for example my unwise combination of KOMA and titlesec etc.).

Currently, I am looking into how to completely re-design and re-implement classicthesis making it easier to maintain and to use. As a general idea, classicthesis.sty should be developed and distributed separately from the template bundle itself. Excellent spin-offs such as arsclassica could also be integrated (with permission by their authors) as format configurations. Also, current trends of microtype, fontspec, etc. should be included as well. As I am not really into deep LATEX programming, I will reach out to the LATEX community for their expertise and help.

An outlook into the future of classicthesis.

### 1.5 ORGANIZATION

A very important factor for successful thesis writing is the organization of the material. This template suggests a structure as the following:

- Chapters/ is where all the "real" content goes in separate files such as Chapter01.tex etc.
- FrontBackMatter/ is where all the stuff goes that surrounds the "real" content, such as the acknowledgments, dedication, etc.
- gfx/ is where you put all the graphics you use in the thesis. Maybe they should be organized into subfolders depending on the chapter they are used in, if you have a lot of graphics.
- Bibliography.bib: the BibT<sub>E</sub>X database to organize all the references you might want to cite.
- classicthesis.sty: the style definition to get this awesome look and feel. Does not only work with this thesis template but also on its own (see folder Examples). Bonus: works with both LATEX and PDFLATEX...and LyX. Great tool and it's free!
- ClassicThesis.tex: the main file of your thesis where all gets bundled together.
- classicthesis-config.tex: a central place to load all nifty packages that are used.

You can use these margins for summaries of the text body...

Make your changes and adjustments here. This means that you specify here the options you want to load classicthesis.sty with. You also adjust the title of your thesis, your name, and all similar information here. Refer to Sección 1.7 for more information.

This had to change as of version 3.0 in order to enable an easy transition from the "basic" style to LyX.

In total, this should get you started in no time.

#### 1.6 STYLE OPTIONS

There are a couple of options for classicthesis.sty that allow for a bit of freedom concerning the layout:

#### General:

 drafting: prints the date and time at the bottom of each page, so you always know which version you are dealing with. Might come in handy not to give your Prof. that old draft. ...or your supervisor might use the margins for some comments of her own while reading.

## Parts and Chapters:

- parts: if you use Part divisions for your document, you should choose this option. (Cannot be used together with nochapters.)
- Linedheaders: changes the look of the chapter headings a
  bit by adding a horizontal line above the chapter title. The
  chapter number will also be moved to the top of the page,
  above the chapter title.

# Typography:

- eulerchapternumbers: use figures from Hermann Zapf's Euler math font for the chapter numbers. By default, old style figures from the Palatino font are used.
- beramono: loads Bera Mono as typewriter font. (Default setting is using the standard CM typewriter font.)
- eulermath: loads the awesome Euler fonts for math. Palatino is used as default font.

Options are enabled via option=true

## Table of Contents:

- tocaligned: aligns the whole table of contents on the left side. Some people like that, some don't.
- dottedtoc: sets pagenumbers flushed right in the table of contents.
- manychapters: if you need more than nine chapters for your document, you might not be happy with the spacing between the chapter number and the chapter title in the Table of Contents. This option allows for additional space in this context. However, it does not look as "perfect" if you use \parts for structuring your document.

## Floats:

- listings: loads the listings package (if not already done) and configures the List of Listings accordingly.
- floatperchapter: activates numbering per chapter for all floats such as figures, tables, and listings (if used).

Furthermore, pre-defined margins for different paper sizes are available, e.g., a4paper, a5paper, and letterpaper. These are based on your chosen option of \documentclass.

The best way to figure these options out is to try the different possibilities and see what you and your supervisor like best.

In order to make things easier, classicthesis-config.tex contains some useful commands that might help you.

#### 1.7 CUSTOMIZATION

This section will show you some hints how to adapt classicthesis to your needs.

The file classicthesis.sty contains the core functionality of the style and in most cases will be left intact, whereas the file classic-thesis-config.tex is used for some common user customizations.

The first customization you are about to make is to alter the document title, author name, and other thesis details. In order to do this, replace the data in the following lines of classicthesis-config.tex:

Modifications in classicthesis-config.tex

```
% *************************
% 2. Personal data and user ad-hoc commands
% ******************
\newcommand{\myTitle}{A Classic Thesis Style\xspace}
\newcommand{\mySubtitle}{An Homage to...\xspace}
```

Further customization can be made in classicthesis-config.tex by choosing the options to classicthesis.sty (see Sección 1.6) in a line that looks like this:

```
\PassOptionsToPackage{
 drafting=true,
                   % print version information on the bottom
     of the pages
 tocaligned=false, % the left column of the toc will be
     aligned (no indentation)
 dottedtoc=false, % page numbers in ToC flushed right
                   % use part division
 parts=true,
 eulerchapternumbers=true, % use AMS Euler for chapter font (
     otherwise Palatino)
 linedheaders=false,
                           % chaper headers will have line
     above and beneath
                           % numbering per chapter for all
 floatperchapter=true,
     floats (i.e., Figure 1.1)
 listings=true, % load listings package and setup LoL
 subfig=true, % setup for preloaded subfig package
 eulermath=false, % use awesome Euler fonts for mathematical
     formulae (only with pdfLaTeX)
 beramono=true, % toggle a nice monospaced font (w/ bold)
 minionpro=false % setup for minion pro font; use minion pro
      small caps as well (only with pdfLaTeX)
}{classicthesis}
```

Many other customizations in classicthesis-config.tex are possible, but you should be careful making changes there, since some changes could cause errors.

#### 1.8 ISSUES

This section will list some information about problems using classicthesis in general or using it with other packages.

Beta versions of classicthesis can be found at Bitbucket:

https://bitbucket.org/amiede/classicthesis/

There, you can also post serious bugs and problems you encounter.

#### 1.9 FUTURE WORK

So far, this is a quite stable version that served a couple of people well during their thesis time. However, some things are still not as they should be. Proper documentation in the standard format is still missing. In the long run, the style should probably be published separately, with the template bundle being only an application of the style. Alas, there is no time for that at the moment...it could be a nice task for a small group of LATEXnicians.

Please do not send me email with questions concerning LATEX or the template, as I do not have time for an answer. But if you have comments, suggestions, or improvements for the style or the template in general, do not hesitate to write them on that postcard of yours.

#### 1.10 BEYOND A THESIS

The layout of classicthesis.sty can be easily used without the framework of this template. A few examples where it was used to typeset an article, a book or a curriculum vitae can be found in the folder Examples. The examples have been tested with latex and pdflatex and are easy to compile. To encourage you even more, PDFs built from the sources can be found in the same folder.

#### 1.11 LICENSE

GNU GENERAL PUBLIC LICENSE: This program is free software; you can redistribute it and/or modify it under the terms of the GNU General Public License as published by the Free Software Foundation; either version 2 of the License, or (at your option) any later version.

This program is distributed in the hope that it will be useful, but without any warranty; without even the implied warranty of merchantability or fitness for a particular purpose. See the GNU General Public License for more details.

You should have received a copy of the GNU General Public License along with this program; see the file COPYING. If not, write to the Free Software Foundation, Inc., 59 Temple Place - Suite 330, Boston, MA 02111-1307, USA.

CLASSICHTHESIS AUTHORS' NOTE: There have been some discussions about the GPL's implications on using classicthesis for theses etc. Details can be found here:

## https://bitbucket.org/amiede/classicthesis/issues/123/

We chose (and currently stick with) the GPL because we would not like to compete with proprietary modified versions of our own work. However, the whole template is free as free beer and free speech. We will not demand the sources for theses, books, CVs, etc. that were created using classicthesis.

Postcards are still highly appreciated.