JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

MÉTODOS DE SÍNTESIS DE CAMPOS NEUTRÓNICOS

por

R. Ortiz Fornaguera

Parte.A

FTCR- 60
Marzo 1967

MÉTODOS DE SÍNTESIS DE CAMPOS NEUTRÓNICOS

por

R. Ortiz Fornaguera

Parte.A

PARTE. A

El principio de variación en la síntesis de campos neutrónicos.

ÍNDICE

A. El principio de variación en la síntesis de campos neutrónicos.

I. La aproximación P_1-multigrupo

1. Notación y ecuaciones fundamentales
2. La aproximación multigrupo
3. Condiciones de contorno

II. Formulación variacional

1. Superficies de discontinuidad
2. El principio variacional
3. Otra versión del principio variacional

III. Síntesis variacional, Aproximación P_1

1. Funciones de prueba
2. Aplicación del principio variacional
3. Ecuaciones de la síntesis variacional

INTRODUCCIÓN

Los métodos de síntesis de campos neutrónicos, junto con los llamdos métodos heterogéneos, figuran entre las técnicas más al día y mejor elaboradas para un tratamiento adecuado de los problemas de análisis de reactores, tanto desde un punto de vista estático, como desde el punto de vista cinético o de evolución. Para subrayar la importancia de ambos métodos baste decir que han sido objeto recientemente de detenida discusión en dos reuniones especialmente dedicadas a ellos , sin que se lograra agotar el tema(*).

En estas condiciones, puede tener interés reunir en un mismo esquema general los distintos aspectos concretos que han adoptado los diferentes métodos de síntesis hoy utilizados o en desarrollo, con objeto de compararlos y entender en qué difieren los puntos de vista en que se basan. No hay que olvidar que sólo un conocimiento adecuado de las ideas físicas en que se fundan y de las técnicas matemáticas utilizadas puede permitir un manejo "sin riesgos" de los modernos programas que se apoyan en dichos métodos.

El presente trabajo se ha dividido en dos partes. En la parte A se presentan los fundamentos generales del método variacional, como base de la aproximación P_1-multigrupo y su aplicación a la síntesis de los campos neutrónicos(**). Expuesta la teoría general, en la parte B se estudian primero algunos casos particulares de métodos variacionales de síntesis y,

---

(*) EACRP Panel on reactor synthesis computer codes for burnup analysis, Argonne, Illi.,January 9-11,1967.

Ad hoc specialist meeting on the application of heterogeneous methods for burnup calculation, Saclay, January 16-18,1967.

(**) Los métodos de síntesis se han aplicado también a la síntesis de campos neutrónicos en el tiempo.

luego, otros métodos de síntesis de interés práctico no basados en un principio de variación.

R. Ortiz Fornaguera

Madrid, marzo de 1967

I. La aproximación P_1-multigrupo

1. Notación y ecuaciones fundamentales

Como es sabido[1,2], el sistema de ecuaciones fundamental correspondiente a la aproximación P_1 se escribe (*)

$$\operatorname{div} \underline{j} + \Sigma\phi = \int du'\phi(u')w_{os}(u' \to u) + \frac{1}{\lambda}\int du'\phi(u')(\nu\Sigma)_f(u')\chi(u),$$

$$\frac{1}{3}\operatorname{grad}\phi + \Sigma\underline{j} = \int du'\underline{j}(u')w_{1s}(u' \to u). \qquad (I.1)$$

Estas ecuaciones suponen una representación del flujo dirigido de la forma

$$F(\underline{x},u,\underline{\Omega}) = \frac{1}{4\pi}\left\{\phi(\underline{x},u) + 3\,\underline{\Omega}\cdot\underline{j}(\underline{x},u)\right\} \qquad (I.2)$$

y una representación del núcleo de dispersión del tipo

$$w_s(\underline{x},u' \to u,\mu_o) = \frac{1}{4\pi}\left\{w_{os}(\underline{x},u' \to u) + 3\mu_o\, w_{1s}(\underline{x},u' \to u)\right\}, \qquad (I.3)$$

con $\mu_o = \underline{\Omega}\cdot\underline{\Omega}'$, es decir, igual al coseno del ángulo de dispersión en el sistema del laboratorio. El coeficiente Σ es la sección eficaz total:

$$\Sigma = \Sigma_a + \Sigma_s, \quad \Sigma_a = \Sigma_c + \Sigma_f, \quad \Sigma_s = \int du' w_{os}(u \to u'), \qquad (I.4)$$

donde Σ_c es la sección eficaz de captura radiativa y Σ_f la de la fisión. El parámetro $\frac{1}{\lambda}$ es el valor propio, o sea, λ no es sino

---

(*) Un trazo horizontal debajo de una letra significa que ésta es símbolo de un vector del espacio ordinario. Así, por ejemplo, $\underline{j}$ es el vector corriente: $\underline{j} = \int_\Omega \underline{\Omega} F(\underline{x},u,\underline{\Omega})d\Omega$, donde $F(\underline{x},u,\underline{\Omega})$ es el flujo dirigido.

el factor de multiplicación efectivo. Finalmente, $\chi(u)$ es el espectro total de fisión y ν el número total de neutrones por fisión.

Las funciones ϕ, $\underline{j}$ solución de I.1 deben ser continuas, con derivadas primeras continuas en la región R ocupada por el reactor y en su superficie, S, salvo acaso en un número finito de líneas sobre S. Además, ϕ debe ser no negativa y junto con $\underline{j}$ ha de cumplir sobre S la condición de contorno de Marshak-Vladimirov [2,3]

$$2\underline{j}\cdot\underline{n} - \phi = 0, \qquad (I.5)$$

en la que $\underline{n}$ es el versor normal a S exterior a R.

2. La aproximación multigrupo

La hipótesis básica de la aproximación multigrupo consiste en suponer que todas las características nucleares del sistema son funciones de la letargia constantes a trozos. Más concretamente: en la aproximación G-grupo, el intervalo total de letargia es la unión de un número finito G de intervalos de letargia, g, que no se solapan y tales que todas las características nucleares f(u) son constantes en cada g, y las f(u,u') lo son para $u \in g$ y $u' \in g'$, cualquiera que sea el par g,g'.(*) Para estos valores constantes se adoptarán las notaciones f_g y $f_{gg'}$ (o f(g), f(g,g')), respectivamente, de modo que

$$f(u) = f_g \text{ si } u \in g; \quad f(u,u') = f_{gg'} \text{ si } u \in g \;\&\; u' \in g'.$$

(*) La ordenación de los intervalos g es tal que $g<g'$ implica que cualquier letargia de g es menor que cualquiera de g'.

Con otras palabras, la aproximación multigrupo equivale a una <u>discretización</u> de la variable continua letargia.

En estas condiciones, la integración de la primera ecuación (I.1) en el intervalo g da:

$$\operatorname{div} \underline{j}_g + \Sigma_g \phi_g = \sum_{g'=1}^{G} \phi_{g'} w_{os}(g' \to g) \Delta_g + \frac{1}{\lambda} \sum_{g'=1}^{G} \phi_{g'} (\nu \Sigma_f)_{g'} \chi_{g'} \tag{I.6}$$

donde Δ_g es la anchura del intervalo g y, además, se ha hecho

$$\phi_g = \int_g du\, \phi(u), \qquad \underline{j}_g = \int_g du\, \underline{j}(u), \qquad \chi_g = \int_g du\, \chi(u), \tag{I.7}$$

es decir, ϕ_g, $\underline{j}_g$ y χ_g son las integrales de ϕ, $\underline{j}$ y χ, respectivamente, extendidas al intervalo g de letargia. Obsérvese la presencia en (I.6) de la anchura Δ_g: dado que ahora las relaciones son entre grupos de neutrones,(*) es natural que aparezca Δ_g, ya que, por ejemplo, $\phi_{g'} w_{os}(g' \to g) \Delta_g$ es precisamente el número total de neutrones del grupo g' que pasan por colisión al grupo g, cuya anchura es Δ_g.

Resulta conveniente dar a (I.6) otra forma. Partiremos para ello de la identidad

$$\Sigma_g = \Sigma_{a,g} + \Sigma_{s,g} = \Sigma_{a,g} + \int du' w_{os}(u \to u')$$
$$= \Sigma_{a,g} + \sum_{g'=1}^{G} w_{os}(g \to g') \Delta_{g'}$$

Si se pasa al primer miembro de (I.6) el término con g'=g de la primera suma del segundo miembro, se tiene, en virtud de la identidad anterior,

---

(*) ϕ_g, $\underline{j}_g$ y χ_g son características de los neutrones de un mismo grupo, el g.

$$\operatorname{div} \underline{j}_g + \left\{ \Sigma_{a,g} + \sum_{g' \neq g} w_{os}(g \to g') \Delta_{g'} \right\} \phi_g = \sum_{g' \neq g} \phi_{g'} w_{os}(g' \to g) \Delta_g + \frac{1}{\lambda} \sum_{g'=1}^{G} \phi_{g'} (\nu \Sigma_f)_{g'} \chi_g$$

Introduciendo la <u>sección eficaz de remoción total</u>

$$\Sigma_{T,g} = \Sigma_{a,g} + \sum_{g' \neq g} w_{os}(g \to g') \Delta_{g'} \tag{I.8}$$

y las secciones eficaces de transición ($g' \neq g$)

$$\Sigma_{g'g} = w_{os}(g' \to g) \Delta_g , \tag{I.9}$$

la ecuación (I.6) se escribe en la notación matricial de la aproximación multigrupo

$$\operatorname{div} \underline{j} + \Sigma_T \phi = S \phi + \frac{1}{\lambda} F \phi , \tag{I.10}$$

donde Σ_T , S y F son matrices cuadradas GxG no-negativas,(*) diagonal la primera de ellas, y $\underline{j}$ y ϕ son vectores en el espacio de los G grupos. La ecuación matricial (I.10) es fundamentalmente la traducción al discreto de la primera ecuación (I.1) respecto de la variable continua u: los operadores integrales de (I.1) son ahora matrices finitas (en particular, el operador diagonal multiplicación por Σ se ha convertido en la matriz diagonal Σ_T) que actúan sobre vectores de un espacio de un número finito G de dimensiones:

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_G \end{pmatrix} , \qquad \underline{j} = \begin{pmatrix} \underline{j}_1 \\ \underline{j}_2 \\ \vdots \\ \underline{j}_G \end{pmatrix} \tag{I.11}$$

(*) Es decir, todos sus elementos son números reales no negativos.

$$\Sigma_T = \begin{pmatrix} \Sigma_{r1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \Sigma_{r2} & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 0 & & \Sigma_{TG} \end{pmatrix}, \qquad S = \begin{pmatrix} 0 & \Sigma_{21} & \cdots & \Sigma_{G1} \\ \Sigma_{12} & 0 & \cdots & \Sigma_{G2} \\ \hline \Sigma_{1G} & \Sigma_{2G} & - & 0 \end{pmatrix}, \tag{I.12}$$

$$F = \begin{pmatrix} \chi_1(\nu\Sigma_f)_1 & \chi_1(\nu\Sigma_f)_2 & \cdots & \chi_1(\nu\Sigma_f)_G \\ \chi_2(\nu\Sigma_f)_1 & \chi_2(\nu\Sigma_f)_2 & \cdots & \chi_2(\nu\Sigma_f)_G \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \chi_G(\nu\Sigma_f)_1 & \chi_G(\nu\Sigma_f)_2 & \cdots & \chi_G(\nu\Sigma_f)_G \end{pmatrix} \tag{I.13}$$

Todos los fenómenos de absorción y de dispersión quedan representados por la matriz $A = \Sigma_T - S$. La parte diagonal de A es precisamente Σ_T y es frecuente descomponer su parte no diagonal (cambiada de signo) S en suma de dos matrices L y U:

$$S = L + U, \tag{I.14}$$

de las cuales la primera es estrictamente triangular inferior y la segunda estrictamente triangular superior.(*) El significado físico de estas matrices es evidente: la parte diagonal de A corresponde a los fenómenos de remoción, sea por absorción en un grupo o por dispersión de éste a otro grupo cualquiera; la matriz L define la dispersión degenerativa, es decir, el paso de un grupo a un grupo de letargia mayor (menor energía), la U, la dispersión regenerativa, el paso de un grupo a un grupo de letargia menor(mayor energía). Cuando no existe dispersión regenerativa (esto es,

---

(*) De una matriz cuadrada (a_{ij}) se dice que es estrictamente triangular superior(inferior) si $a_{ij}=0$ para $i \geqslant j$ (para $i \leqslant j$).[4]

cuando no existe up-scattering), se tiene $U = 0$. En tal caso, S es estrictamente diagonal inferior.

En cuanto a la segunda ecuación (I.1), aplicándole el mismo método que hemos seguido en el caso de la primera, la aproximación multigrupo conduce a las ecuaciones

$$\frac{1}{3}\,\mathrm{grad}\,\phi_g + \left\{\Sigma_{r,g} + \left(w_{0s}(g\to g) - w_{1s}(g\to g)\right)\Delta g\right\}\underline{j}_g = \sum_{g'\neq g} \underline{j}_{g'}\, w_{1s}(g'\to g)\,\Delta g\,,$$

que, puestas en forma matricial, se escriben también:

$$\mathrm{grad}\,\phi + D^{-1}\underline{j} = 0 \qquad \text{(I.15)}$$

en la que D^{-1} es una matriz GXG, con elementos $(D^{-1})_{gg'}$, definidos por

$$\frac{1}{3}(D^{-1})_{gg'} = \left\{\Sigma_{r,g} + \left(w_{0s}(g\to g) - w_{1s}(g\to g)\Delta g\right)\right\}\delta_{gg'} - w_{1s}(g'\to g)\Delta g\,(1-\delta_{gg'})$$

o bien, introduciendo la sección eficaz de transporte para el grupo g

$$\Sigma_{tr,g} = \left\{w_{0s}(g\to g) - w_{1s}(g\to g)\right\}\Delta g\,, \qquad \text{(I.16)}$$

por

$$\frac{1}{3}(D^{-1})_{gg'} = \left(\Sigma_{r,g} + \Sigma_{tr,g}\right)\delta_{gg'} - w_{1s}(g'\to g)\Delta g\,(1-\delta_{gg'}) \qquad \text{(I.17)}$$

La parte diagonal de $\frac{1}{3}D^{-1}$ es, pues, la suma de la matriz de remoción total Σ_T y de la matriz de transporte Σ_{tr}.(*) En cuanto a su parte no diagonal -que se representará por $(-S_1)$-, sus elementos suelen ser tales que las componentes de $S_1\underline{j}$ son pequeñas, en módulo, comparadas con los módulos de las correspondientes componentes de $(\Sigma_T + \Sigma_{tr})\underline{j}$ y de $\frac{1}{3}$ grad ϕ. En primera aproximación, por lo tanto, cabe prescindir de S_1 y tomar para D^{-1} su parte diagonal:

$$D^{-1} \approx 3(\Sigma_T + \Sigma_{tr}). \qquad (I.18)$$

Esta es la llamada <u>aproximación de transporte</u>.

Sea como fuere, (I.15) pone de manifiesto que la matriz D generaliza el concepto de <u>coeficiente de difusión</u> de la teoría elemental: en ésta, el vector corriente $\underline{j}$ es proporcional al gradiente del flujo (<u>ley de Fick</u>); en la aproximación de transporte, esta proporcionalidad vale para cada grupo de neutrones, ya que entonces D^{-1} es diagonal y se tiene:

$$\underline{j}_g = - D_g \text{ grad } \phi_g \; ; \qquad (I.19)$$

en la aproximación P_1-multigrupo, a la corriente del grupo g contribuyen los gradientes de todos los flujos en general:

$$\underline{j}_g = - \sum_{g'=1}^{G} D_{gg'} \text{ grad } \phi_{g'} \; . \qquad (I.20)$$

(*) Para evitar posibles confusiones, recordaremos que, a veces, se llama matriz de transporte (en particular, sección eficaz de transporte) a la suma de Σ_T (que hace el papel de Σ_a) y de Σ_{tr} tal como la hemos definido (que hace el papel de $\Sigma_s(1-\bar{\mu})$).

En lo que sigue, D^{-1} se considerará como una matriz, no necesariamente diagonal, que admite inversa, la matriz coeficiente de difusión D.

3. Condiciones de contorno

Consideremos ahora la condición de contorno (I.5). La integración en el intervalo g de letargia da, sin más, $2\underline{j}_g \cdot \underline{n} - \phi = 0$ sobre S, es decir,

$$2\,\underline{j}\cdot\underline{n} - \phi = 0, \text{ sobre } S, \qquad (I.21)$$

donde ahora ϕ y $\underline{j}$ son los vectores definidos por (I.11). Aunque la condición (I.5), y con ella la versión multigrupo (I.21), es una de las más utilizadas, no es a priori la única. En vez de ella, impondremos la siguiente, más general:

$$\alpha\,\underline{j}\cdot\underline{n} - \phi = 0, \text{ sobre } S, \qquad (I.22)$$

donde en la aproximación multigrupo α es una matriz GXG no negativa, definida, y acaso variable, sobre S. En particular, $\alpha = 2I$ (donde I es la matriz unidad) reduce (I.22) a (I.21) y $\alpha = 0$ da la condición elemental de anulación del flujo sobre la superficie del sistema (extrapolado).

Resumiendo, las ecuaciones fundamentales de la aproximación P_1-multigrupo se escriben

$$\text{div}\,\underline{j} + \Lambda\phi = 0, \qquad (I.23)$$
$$\text{grad}\,\phi + D^{-1}\underline{j} = 0,$$

donde, para simplificar la notación, se ha hecho

$$\Lambda = \Sigma - S - \frac{1}{\lambda} F. \qquad (I.24)$$

A (I.23) hay que añadir la condición de contorno

$$\alpha \, \underline{j} \cdot \underline{n} - \phi = 0, \text{ sobre } S, \qquad (I.25)$$

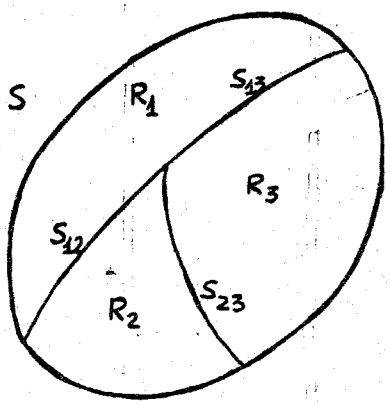
donde S es la frontera del reactor. Cuando-por ejemplo, por razones de simetría- el estudio del reactor queda reducido al de una parte del mismo, la condición de contorno sobre la frontera S del sistema parcial puede variar de una a otra parte de S. Así, puede ocurrir que sobre una parte S_1 de S se imponga una condición del tipo (I.25), mientras que sobre otra, S_2, la condición puede ser de la forma $\underline{j} \cdot \underline{n} = 0$ (esta última corresponde a un plano de <u>simetría física</u> del reactor en conjunto).

II. Formulación variacional

1. Superficies de discontinuidad

Veamos ahora cómo es posible hallar una funcional bilineal respecto del flujo ϕ y la corriente neutrónica $\underline{j}$, de una parte, y la importancia ϕ^+ y la corriente de importancia $\underline{j}^+$, de otra, tal que las ecuaciones de Euler-Lagrange correspondientes a ϕ y $\underline{j}$ coincidan con (I.23) mientras que sus condiciones de contorno naturales son precisamente las (I.25).[5] Sin embargo, dado que las características nucleares de un reactor suelen presentar discontinuidades sobre determinadas superficies (p.e., en las superficies combustible-moderador), conviene antes precisar cuáles son éstas y qué sentido pueden tener ciertas operaciones matemáticas cuando existen tales superficies.

Supondremos que el dominio del reactor nuclear R es una región finita y conexa cuya frontera es una cierta superficie S. Supondremos, además, que existe un número K de subregiones R_k (k=1,2,...K), con fronteras internas s entre ellas, cuya unión es precisamente $R^{(*)}$. Parte de la frontera S_k de R_k puede coincidir con parte de la frontera S_i de otra subregión R_i; esta parte común se representará por S_{ik}, de modo que, por definición, $S_{ik} = S_i \cap S_k$ (véase fig.1). Sea C_R la clase de las funciones reales continuas con derivadas primeras continuas en cada R_k y su frontera. Si f y g son dos funciones cualesquiera de la clase C_R y P_s es un punto de $S_{ik} \neq \phi$, sabemos que f(P) y g(P) tienden a límites bien determinados cuando P tiende a P_s manteniéndose en R_i y a límites bien determinados cuando P tiende a P_s moviéndose en R_k, pero estos límites no tienen por qué ser iguales. Por ejemplo, si R_i está ocupada por acua pesada y R_k por grafito y f(P) es la sección eficaz de dispersión $\Sigma_s(P)$, el límite cuando P tiende a P_s en R_i es $\Sigma_s^{D_2O}$, y cuando P tiende a P_s en R_k, el límite es Σ_s^{C}.



En estas condiciones, es claro que las integrales de la forma

---

(*) Más exactamente: existen K regiones R_k abiertas, simplemente conexas y disjuntas, con fronteras S_k tales que $\bar{R} = \bigcup_{k=1}^{K} \bar{R}_k$, $s = \bigcup_{k=1}^{K} S_k - S$, $S_k = \bar{R}_k - R_k$ (dado un conjunto A, el símbolo $\bar{A}$ representa la adherencia de A, es decir, $\bar{A}$ es el menor conjunto cerrado que contiene a A),

$$\int_R (\underline{f}.\text{grad})dV\ ,\quad \int_R (g\ \text{div}\ \underline{f})\ dV \qquad \text{(II.1)}$$

carecen de sentido inmediato, ya que ni grad g ni div $\underline{f}$ existen en los puntos de s en los que g o f son discontinuas. La "regularización" de dichas integrales se efectúa de la manera ordinaria (véase Apéndice 1) y se obtienen para ellas las expresiones siguientes con pleno significado(*):

$$\int_R (\underline{f}.\text{grad}\, g)dV = \sum_{k=1}^{K} \int_{R_k} (\underline{f}.\text{grad}\, g)dV + \sum_{i<k} \int_{S_{ik}} \bar{f}_\nu^{ik}\, [g]_{ik}\, dS, \qquad \text{(II.2)}$$

$$\int_R (g\, \text{div}\, \underline{f})dV = \sum_{k=1}^{k} \int_{R_k} (g\, \text{div}\, \underline{f})\, dV + \sum_{i<k} \int_{S_{ik}} \bar{g}_{ik}\, [f_\nu]_{ik}\, dS, \qquad \text{(II.3}$$

donde S_{ik} es la frontera común a R_i y R_k, la normal $\underline{\nu}$ está orientada, por ejemplo, en el sentido $i \to k$, con $i < k$ y el salto $[g]_{ik}$ se define de acuerdo con el sentido elegido para orientar la normal: si $P_s \in S_{ik}$, por definición es

$$[g]_{ik} = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \left\{ g(P_s + \varepsilon \underline{\nu}) - g(P_s - \varepsilon \underline{\nu}) \right\}. \qquad \text{(II.4)}$$

En cuanto al valor medio $\bar{f}_\nu^{ik}$, se define por la igualdad

$$\bar{f}_\nu^{ik} = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \frac{1}{2} \left\{ f_\nu (P_s + \varepsilon \underline{\nu}) + f_\nu (P_s - \varepsilon \underline{\nu}) \right\} \qquad \text{(II.5)}$$

Obsérvese que las integrales de superficie que aparecen en (II. 2-3) son entonces, como debe ser, independientes del sentido elegido como positivo sobre la normal. Esta puede no existir

---

(*) Las integrales de superficie son nulas cuando S_{ik} es una línea, un punto o el conjunto vacío.

sobre ciertas líneas o ciertos puntos (aristas, cúspides), pero ello no da lugar a dificultades, ya que unas y otras son siempre en número finito.

Es fácil demostrar que las igualdades (II.2-3) permiten extender la fórmula de la divergencia al caso en que existen en R superficies interiores de discontinuidad. En efecto, sumando (II.2-3) miembro a miembro resulta:

$$\int_R (\underline{f}\cdot \operatorname{grad} g)\,dV + \int_R (g \operatorname{div} \underline{f})\,dV = \sum_{k=1}^{k} \int_{R_k} \operatorname{div}(g\underline{f})\,dV + \sum_{i<k} \int_{S_{ik}} \left\{ \bar{f}_\nu^{ik} [g]_{ik} + \bar{g}_{ik} [f_\nu]_{ik} \right\} dS.$$

Pero, evidementemente,

$$\sum_{k=1}^{k} \int_{R_k} \operatorname{div}(g\underline{f})\,dV = \oint_S g f_\nu\, dS + \sum_{k=1}^{k} \int_{S'_k} (g f_\nu)_k\, dS,$$

donde S'_k es la parte de S_k interior a R, $(gf_\nu)_k$ es el valor límite de gf_ν al tender a S'_k moviéndose en R_k y f_ν es la componente de $\underline{f}$ sobre la normal a S_k exterior a R_k. Ahora bien, es fácil ver que

$$\sum_{k=1}^{k} \int_{S'_k} g f_\nu\, dV = \sum_{i<k} \int_{S_{ik}} \left\{ (g f_\nu)_i - (g f_\nu)_k \right\} dS,$$

con la normal $\underline{\nu}$ en el segundo miembro dirigida de i a k, con $i < k$. Por lo tanto, efectivamente es, aún en este caso,

$$\int_R \operatorname{div}(g\underline{f})\, dV = \oint_S g f_\nu\, dS. \qquad \text{(II.6)}$$

2. El principio variacional

Sentado esto, introduzcamos el vector $F(\underline{x})$ definido por

$$F(\underline{x}) = \begin{pmatrix} \phi(\underline{x}) \\ \underline{j}(\underline{x}) \end{pmatrix} . \qquad (II.7)$$

El número total de componentes de este vector es G+3G=4G, las G componentes del flujo (una por cada grupo) y las 3G componentes del vector corriente (G componentes de grupo para cada componente espacial). Unicamente admitiremos vectores $F(\underline{x})$ cuyas componentes son funciones de la clase C_R. El producto escalar de dos vectores de esta clase F^+ y F se definirá mediante la fórmula

$$(F^+,F) = \sum_{g=1}^{G} \int_R \left\{ \phi_g^+(\underline{x})\phi_g(\underline{x}) + \underline{j}_g^+(\underline{x})\cdot\underline{j}_g(\underline{x}) \right\} dV$$

o, abreviadamente,

$$(F^+,F) = \int_R (\phi^+\phi + \underline{j}^+\cdot\underline{j})\, dV \qquad (II.8)$$

Consideremos la funcional, bilineal en F^+ y F, definida por

$$\Omega[F^+,F] = \int_R \left\{ \phi^+(\Lambda\phi + \operatorname{div}\underline{j}) + \underline{j}^+.(\operatorname{grad}\phi + D^{-1}\underline{j}) \right\} dV + \oint_S j_\nu^+(\alpha j_\nu - \phi)\, dS, \qquad (II.9)$$

en la que Λ , D^{-1} y α son matrices cuadradas GxG cuyos elementos son funciones reales continuas en cada R_k y su frontera, sal

vo la matriz α , de la que sólo se exige que esté definida y sea contínua en general sobre S, Determinemos qué condiciones deben cumplirse para que la variación

$$\delta\Omega\left[F^{+}, F\right] = 0 \qquad \text{(II.10)}$$

sea nula para variaciones δF^{+} y δF arbitrarias, es decir, determinemos las ecuaciones de Euler-Lagrange correspondientes al problema de variaciones (II.10).

<u>Sistema de ecuaciones fundamentales</u>

Supongamos primero que se varía sólo ϕ^{+} . Teniendo en cuenta (II.3), resulta:

$$\sum_{k}\int_{R_k}\delta\phi^{+}(\Lambda\phi + \operatorname{div}\underline{j})\,dV + \sum_{i<k}\int_{S_{ik}}\overline{\delta\phi^{+}_{ik}}\,\left[j_{\nu}\right]_{ik}\,dS = 0 .$$

Dado que la variación $\delta\phi^{+}$ es arbitraria, esta igualdad implica que necesariamente debe ser

$$\Lambda\phi + \operatorname{div}\underline{j} = 0 \quad \text{en cada } R_k,$$

$$j_{\nu} \text{ continua al atravesar cada } S'_k,$$

$$(k=1,2,\ldots,K)$$

es decir, ϕ y $\underline{j}$ deben satisfacer la primera ecuación (I.23) y, además, la componente normal de $\underline{j}$ debe ser continua al atravesar las superficies interiores S'_k.

Supongamos ahora que se varía sólo $\underline{j}^{+}$. La aplicación de (II.2) conduce a la igualdad

$$\sum_k \int_{R_k} \delta \underline{j}^+ (\mathrm{grad}\,\phi + D^{-1}\underline{j})\,dV + \sum_{i,k} \int_{S_{ik}} \overline{\delta j_\nu^+}^{\,ik} [\phi]_{ik}\,dS + \oint_S \delta j_\nu^+ (\alpha j_\nu - \phi)\,dS = 0$$

que debe quedar satisfecha cualquiera que sea $\delta \underline{j}^+$. Ello exige que se tenga

$$D^{-1}\underline{j} + \mathrm{grad}\,\phi = 0 \text{ en cada } R_k,$$

$$\phi \text{ continua en } R, \text{ y}$$

$$\alpha j_\nu - \phi = 0 \text{ sobre } S.^{(*)}$$

Por lo tanto, ϕ y $\underline{j}$ deben no sólo satisfacer la segunda ecuación (I.23), sino también la condición de contorno (I.25). Obsérvese que esta última procede precisamente del término de superficie en la funcional Ω, (II.9), y obsérvese también que las condiciones de Euler-Lagrange y las condiciones de continuidad en R no dependen de dicho término. Con otras palabras, el término de superficie sólo afecta a las condiciones de contorno, lo que permite ajustarlo de manera que conduzca a la condición de contorno que convenga. He aquí algunos ejemplos de esta flexibilidad que permite el cálculo de variaciones en la elección de condiciones de contorno.

En (II.9) substituyamos el término de superficie por la expresión

$$\int_{S_{(1)}} j_\nu^+ (\alpha j_\nu - \phi) - \int_{S_{(2)}} \phi^+ j_\nu \, dS, \qquad \text{(II.11)}$$

(*) Dado que $j_\nu = -D\partial_\nu\phi$, la condición de contorno puede escribirse también: $\phi + (\alpha D)\partial_\nu\phi = 0$, donde αD es la matriz "distancia extrapolada" y $\partial_\nu\phi$ es la derivada normal exterior de ϕ sobre S. Cuando α corresponde a la condición de contorno de Marshak-Vladimirov, la matriz $\gamma = \alpha D$ se reduce a 2D. Sin embargo, la introducción de condiciones de contorno efectivas pueden llevar a substituir $\alpha = 2I$ por otra expresión, al igual que en la teoría elemental se substituye el factor $\frac{2}{3}$ por 0,71.

donde $S_{(1)}$ y $S_{(2)}$ es una descomposición de $S^{(*)}$. La variación de ϕ^+ conduce a la condición de contorno

$$j_\nu = 0 \text{ sobre } S_{(2)} \qquad \text{(II.12)}$$

y la variación de $\underline{j}^+$ obliga a que

$$\alpha j_\nu - \phi = 0 \text{ sobre } S_{(1)} \qquad \text{(II.12')}$$

Es decir, la substitución del término de superficie que aparece en (II.9) por el (II.11) ha conducido a substituir la condición (I.25) por la condición de contorno (II.12-12'). Indicamos ya que cuando el reactor presenta un plano de simetría fisica, basta limitar el estudio a la región R determinada por una de las dos partes simétricas en que lo divide dicho plano. Si $S_{(1)}$ es la superficie libre de R y $S_{(2)}$ la determinada por el plano de simetría, las condiciones de contorno adecuadas son entonces precisamente las (II.12-12') y (II.11) es el término de superficie de la funcional correspondiente.

Sistema de ecuaciones adjuntas

Pasemos a determinar las consecuencias del principio variacional (II.9) en lo que concierne al vector F^+, esto es, a la importancia ϕ^+ y a su corriente $\underline{j}^+$. Para facilitar el cálculo de la variación $\delta\Omega$ correspondiente a variaciones arbitrarias $\delta\phi$ y $\delta\underline{j}$ conviene escribir la funcional Ω en otra forma equivalente, pero más manejable cuando se trata de variar ϕ y $\underline{j}$. Teniendo en cuenta (II.6), es fácil ver que $\Omega[F^+, F]$ puede escribirse también en la forma:

(*) $\bar{S} = \bar{S}_{(1)} \cup \bar{S}_{(2)}$, $S_{(1)} \cap S_{(2)} = \phi$

$$\Omega[F^+;F] = \int_R \left\{ (\Lambda^+\phi^+ - \operatorname{div}\underline{j}^+)\phi + (-\operatorname{grad}\phi^+ + (D^{-1})^+\underline{j}^+)\cdot\underline{j} \right\} dV$$

$$+ \oint_S (\alpha^+ j_\nu^+ + \phi^+)\, j_\nu \, dS, \qquad \text{(II.13)}$$

donde Λ^+, $(D^{-1})^+$ y α^+ son las matrices adjuntas de las Λ, D^{-1} y α. En esta forma precisamente tomaremos las variaciones respecto de ϕ y de $\underline{j}$.

Un cálculo en todo análogo al anterior conduce a los siguientes resultados: la anulación de $\delta\Omega$ para $\delta\phi$ cualquiera obliga a que

$$\Lambda^+\phi^+ - \operatorname{div}\underline{j}^+ = 0 \text{ en cada } R_k,$$

$$j_\nu^+ \text{ continua al atravesar cada } S_k',$$

$$(k=1,2,\ldots,K);$$

la anulación de $\delta\Omega$ para $\delta\underline{j}$ cualquiera obliga a que:

$$(D^{-1})^+ j^+ - \operatorname{grad}\phi^+ = 0 \text{ en cada } R_k,$$

$$\phi^+ \text{ continua en } R, \text{ y}$$

$$\alpha^+ j_\nu^+ + \phi^+ = 0 \quad \text{sobre } S.$$

Por consiguiente, el problema de contorno adjunto del (I.23-25) es el siguiente:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}\underline{j}^+ - \Lambda^+\phi^+ &= 0, \\ \operatorname{grad}\phi^+ - (D^{-1})^+\underline{j}^+ &= 0, \\ \alpha^+ j_\nu^+ + \phi^+ &= 0 \text{ sobre } S. \end{aligned} \qquad \text{(II.14)}$$

Claro está, la condición de contorno que aparece en (II.14) es

la que corresponde a la condición de contorno (I.25), o sea, la que resulta del término de superficie que figura en (II.9). Sabemos que si este término se substituye por el (II.11), la condición de contorno para el problema fundamental pasa a ser la (II.12,12'). Entonces el término de superficie en (II.13) se convierte en

$$\int_{S_{(1)}} (\phi^+ + \alpha^+ j_\nu^+) j_\nu \, dS + \int_{S_{(2)}} j_\nu^+ \phi \, dS, \qquad \text{(II.15)}$$

y, por consiguiente, la condición de contorno del problema adjunto se escribe:

$$j_\nu^+ = 0 \qquad \text{sobre } S_{(2)}, \qquad \text{(II.16)}$$

$$\alpha^+ j_\nu^+ + \phi^+ = 0 \qquad \text{sobre } S_{(1)}. \qquad \text{(II.16')}$$

El término de superficie en la funcional (II.9), por lo tanto, determina las condiciones de contorno del problema fundamental y del problema adjunto.

Si se restringe la clase de elementos admisibles a la de aquellos que cumplen las condiciones de contorno, aparecen dos subclases en general diferentes: la de los elementos que cumplen la condición de contorno fundamental y la de los elementos que satisfacen la condición de contorno adjunta. Si designamos por (C_R) la primera y por $(C_R)^+$ la segunda, el problema variacional puede presentarse de otra forma que pone de manifiesto su relación con el problema de valores propios. Veámoslo.

3. Otra versión del principio variacional

Sean F y F^+ dos elementos cualesquiera de (C_R) y de

$(C_R)^+$, respectivamente, y consideremos la funcional

$$W\left[F^+,F\right] = \frac{(F^+,\mathcal{A}F)}{(F^+,\mathcal{F}F)}, \qquad \text{(II.16)}$$

donde $\mathcal{A}$ y $\mathcal{F}$ son los operadores lineales definidos por(*)

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} A \text{ div} \\ \text{grad} \quad D^{-1} \end{pmatrix}, \qquad \mathcal{F} = \begin{pmatrix} F_f & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{(II.17)}$$

La misma funcional puede expresarse también mediante los operadores adjuntos de (II.17)

$$\mathcal{A}^+ = \begin{pmatrix} A^+ & -\text{div} \\ -\text{grad} & (D^{-1})^+ \end{pmatrix}, \quad \mathcal{F}^+ = \begin{pmatrix} F_f^+ & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{(II.17')}$$

La condición de que $W\left[F^+,F\right]$ sea estacionaria para variaciones cualesquiera de $F^+ \in (C_R)^+$ y de $F \in (C_R)$ se traduce en las dos igualdades

$$(\delta F^+,\mathcal{F}F)(F^+,\mathcal{A}F) - (F^+,\mathcal{F}F)(\delta F^+,\mathcal{A}F) = 0,$$

$$(\mathcal{F}^+F^+,\delta F)(\mathcal{A}^+F^+,F) - (\mathcal{F}^+F^+,F)(\mathcal{A}^+F^+,\delta F) = 0,$$

o lo que es lo mismo

$$\left(\delta f^+, \frac{(F^+,\mathcal{A}F)}{(F^+,\mathcal{F}F)}\mathcal{F}F - \mathcal{A}F\right) = 0,$$

(*) En (II.17) F_f es la matriz que se ha representado por F en (I.10,13). Se utiliza aquí esta notación para que no se confunda la matriz (I.13) con el vector F definido en (II.7).

$$\left(\frac{(F^+, \mathcal{A} F)}{(F^+, \mathcal{F} F)} \mathcal{F}^+ F^+ - \mathcal{A}^+ F^+, \delta F \right) = 0 .$$

Pero δF^+ y δF son arbitrarios. Por lo tanto, a la vez debe tenerse

$$\mathcal{A} F = \frac{(F^+, \mathcal{A} F)}{(F^+, \mathcal{F} F)} \mathcal{F} F, \qquad \mathcal{A}^+ F^+ = \frac{(F^+, \mathcal{A} F)}{(F^+, \mathcal{F} F)} \mathcal{F}^+ F^+,$$

es decir, los vectores F y F^+ que hacen extrema la funcional (II.16) son soluciones de los dos problemas adjuntos de valores propios

$$\mathcal{A} F = \frac{1}{\lambda} \mathcal{F} F, \qquad \mathcal{A}^+ F^+ = \frac{1}{\lambda^+} \mathcal{F}^+ F^+ \tag{II.18}$$

correspondients a un mismo valòr propio común real:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda^+} = \frac{(F^+, \mathcal{A} F)}{(F^+, \mathcal{F} F)} . \tag{II.19}$$

El paso de la funcional $\Omega[F^+, F]$ a la funcional $W[F^+, F]$ permite poner de manifiesto una circunstancia que encubre Ω y podría pasar desapercibida. Al formular el principio variacional basado en la funcional $\Omega[F^+, F]$ decíamos que se trataba de determinar F^+ y F tales que $\delta \Omega = 0$ para variaciones arbitrarias de F^+ y de F. En rigor, hay algo más que esto. En efecto, el valor de la funcional $\Omega[F^+, F]$ depende no sólo de F^+ y de F, sino del parámetro λ incluído en la matriz Λ (cf. (I.24))

$$\Lambda = \Sigma_T - S - \frac{1}{\lambda} F ,$$

parámetro cuyo valor se desconoce. Por consiguiente, debiera decirse, en rigor, que de lo que se trata es de determinar F^+, F y

λ de manera que sea $\delta\Omega = 0$, cualesquiera que sean δF^+ y δF. Esto precisamente es lo que queda claro en la formulación (II. 18) y (II.19): hay que determinar F y F^+ y el valor propio co - mún $\lambda = \lambda^+$.

Resumiendo: tomando como clase de vectores admisibles los vectores F,(II.7), cuyas componentes pertenecen a la clase C_R, el valor de la funcional $\Omega[F^+, F]$, (II.9), es estacionario para variaciones arbitrarias δF^+, δF si y sólo si F es solución del problema de contorno (I.23,25) y F^+ es solución del problema de contorno adjunto (II.14) <u>para un mismo valor</u> real de λ. El valor de Ω es entonces igual a cero.

Ahora bien, la idea fundamental de la aplicación del cálculo de variaciones a la resolución aproximada de un problema de contorno y de su adjunto se centra en la noción de que si restringimos la clase de vectores admisibles, la "mejor" aproxima - ción dentro de esta clase la proporcionan el par F_o^+, F_o de ele - mentos de la misma que, junto con un valor λ_o de λ , hacen estacionaria Ω para variaciones δF_o^+, δF_o arbitrarias <u>dentro de la clase restringida</u>. Cuando la funcional Ω es de la forma $(F^+ , (M-\frac{1}{\lambda} N)F)$, con M y N operadores lineales autoadjuntos y defini - dos, es posible demostrar que, en efecto, se puede dar un sentido matemático concreto al concepto de "mejor" (véase, p.e.,[6] Cap.IV). Pero cuando no ocurre así -y este es precisamente el caso de (II.9)- queda un tanto en el aire hasta qué punto son "mejores" que los demás los elementos F_o^+ y F_o de la clase restringida elegidos acudiendo al principio de variación dentro de dicha clase. Cabe imaginar que, acaso, otro par de elementos, elegido de acuerdo con otro criterio, se "aproxime" más de hecho a la solución verdadera. Con todo, no se pierde de vista que también el concep

to de "aproximarse" más es algo que hay que definir. El criterio variacional debe por el momento adaptarse, pues, como un criterio puramente heurístico que se justifica por la bondad de los resultados a que conduce, por poco más. Es este un campo en el que queda mucho por hacer desde el punto de vista matemático. En la sección que sigue veremos cómo se aplica este método a la síntesis de los campos neutrónicos considerados en la aproximación P_1-multigrupo.

III. Síntesis variacional. Aproximación P_1.

1. Funciones de prueba

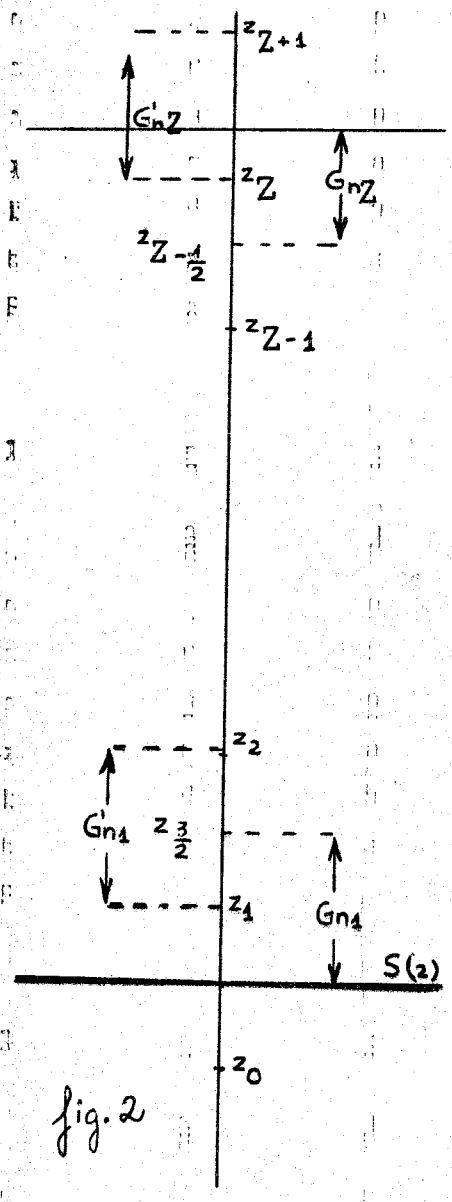


fig. 2

En todo lo que sigue se supondrá que el reactor tiene la forma de un cilindro recto finito (en particular, un prisma) limitado lateralmente por una superficie convexa, $S_{(\ell)}$. Conforme se indicó ya, por razones de simetría no siempre es necesario explorar todo el volumen del reactor. Para fijar las ideas, supondremos que existe un plano horizontal de simetría (física) que constituirá la base inferior del cilindro, $S_{(2)}$, y sobre la cual, por consiguiente, debe cumplirse la condición de contorno (II.12). Sobre la otra base, $S_{(1)}$, -que se supone es una superficie libre- la condición de contorno será la (II.12').

Análogamente, para el vector adjunto, F^+, se tendrán las condiciones (II.16,16'). Las condiciones de contorno sobre la superficie lateral, $S_{(\ell)}$, no se especifican por el momento; en la práctica, las condiciones serán de la forma $j_\nu = 0$ sobre parte de $S_{(\ell)}$ y $\alpha j_\nu - \phi = 0$ sobre el resto. Aunque, en rigor, el sistema así definido no es todo el reactor, lo llamaremos el reactor, R, sin más.

Esto sentado, descompongamos R en N canales verticales C_n $(n=1,2,\ldots,N)$. Sobre el eje de coordenadas z fijemos una red de puntos $z_i (i=0,1,\ldots,Z+1)$. La red puede no ser uniforme, de modo que $h_i=z_{i+1}-z_i$ depende, en general, del índice i. Superpongamos a esta red otra red de puntos $z_{i+\frac{1}{2}}$ tales que $z_{i+\frac{1}{2}} = z_i + \frac{1}{2}h_i$, es decir, la red formada por los puntos medios de los intervalos (z_i, z_{i+1}) de la red primitiva. Esta se elige de tal manera que el plano $z=z_{\frac{1}{2}}$ contiene la base $S_{(2)}$ y el plano $z=z_{Z+\frac{1}{2}}$ contiene la base $S_{(1)}$ (fig.2). Además, por construcción, ninguna discontinuidad física se produce fuera de las secciones horizontales determinadas por los planos $z=z_i$. Dicho de otra manera, todas las características nucleares son funciones continuas de z en cada intervalo (z_i, z_{i+1}).(*) En particular, las superficies de separación horizontales de dos medios están siempre sobre planos $z=z_i$. A su vez, los planos $z=z_{i+\frac{1}{2}}$ determinan Z zonas; la zona i-ésima, Z_i, está constituida por los puntos de R tales que $z_{i-\frac{1}{2}} < z < z_{i+\frac{1}{2}}$ $(i=1,2,\ldots,Z)$. Obsérvese que las propiedades físicas de una zona Z_i pueden cambiar bruscamente al atravesar la sección por el plano $z=z_i$ contenido en ella. Designemos por G_{ni}

(*) Si es necesario, el sistema se puede imaginar prolongado idealmente de manera continua hasta $z=z_{Z+1}$ y $z=z_0$.

el dominio (abierto) intersección del canal C_n y la zona Z_i(G_{ni}= $=C_n \cap Z_i$). Por definición de C_n y Z_i, se tiene $\bar{R} = \bigcup_{n,i} \bar{G}_{ni}, G_{ni} \cap G_{n'i'} = \phi$, $n \neq n', i \neq i'$. Introduzcamos también los dominios (abiertos) G'_{ni}, conjunto de los puntos de C_n tales que $z_i < z < z_{i+1}$ ($i = 1,2,\ldots,Z$)(cf.fig.2). Llamaremos Δ_{ni} y Δ'_{ni} a las funciones características(*) de los conjuntos G_{ni} y G'_{ni}, respectivamente.

Establecidas estas definiciones, sean $\{\phi^+_m\}$ y $\{\phi_m\}$, m = = 1,2,...,M, dos familias de importancias y de flujos en dos dimensiones, $\phi^+_m = \phi^+_m(x,y)$, $\phi_m = \phi_m(x,y)$, a los que van asociados los vectores corriente (paralelos al plano x,y, claro está) $\underline{j}^+_m = D^+_m \text{ grad } \phi^+_m$, $\underline{j}_m = - D_m \text{ grad } \phi_m$. Las funciones ϕ^+_m , ϕ_m (llamadas <u>funciones de base</u>) son las importancias y los flujos solución del problema P_1-multigrupo (o difusión-multigrupo) en dos dimensiones a diferentes cotas z. No se pierda de vista que los coeficientes del problema bidimensional varían con z no sólo debido a cambios de las características realmente nucleares, sino también a cambios de las características nucleares "ficticias" (fugas longitudinales). En cuanto a las cotas a que se calculan ϕ^+_m y ϕ_m , en general se eligen alejadas de las superficies horizontales de separación de regiones con propiedades nucleares netamente diferentes (superficies de discontinuidad), de modo que las ϕ^+_m y ϕ_m son, en cierto sentido, formas "asintóticas" dentro de una región con propiedades nucleares reales independientes (o prácticamente independientes) de z(**).

(*) Si el conjunto A está contenido en el B ($A \subset B$), la función característica de A, e (A), es la función definida en B tal que e(x)=1 si $x \in A$ y e(x)=0 si $x \in B-A$.

(**) En lo que sigue, las propiedades nucleares se considerarán independientes de z (¡pero, acaso, función de x,y!)en cada dominio G'_{ni}.

Es plausible la idea de que, a ciertas cotas intermedias y en cada canal, la forma real de las distribuciones de flujo y de importancia se puede aproximar por una cierta combinación lineal de algunas ϕ_m y de algunas ϕ_m^+ cuyos coeficientes dependen de dichas cotas. El problema está en cómo elegir estos coeficientes. Veremos a continuación que el principio variacional proporciona un criterio para ello.

Consideremos la clase restringida de vectores F^+, F admisibles definida por las igualdades [7]

$$\phi\ (x,y,z) = \sum_{m,n,i} \Delta_{ni}\ (x,y,z)\,\phi_m\,(x,y)a_{mni}, \qquad \text{(III.1)}$$

$$\underline{j}\ (x,y,z) = \sum_{m,n,i} \Delta_{ni}\ (x,y,z)\left\{\phi_m(x,y)\underline{b}_{2,mni}+\underline{j}_m(x,y)c_{mni}\right\}^{(*)}$$

$$+ \sum_{m,n,i} \Delta'_{ni}\ (x,y,z)\underline{e}_z\phi_m(x,y)b_{z,mni}, \qquad \text{(III.2)}$$

donde a_{mni}, $\underline{b}_{2,mni}$, c_{mni}, y $b_{z,mni}$ son constantes indeterminadas. Según estas definiciones, el flujo $\phi\ (x,y,z)$ es continuo en cada G_{ni}, cuya frontera es (en general) una superficie de discontinuidad para ϕ. El vector corriente, es discontinuo tanto en los planos $z=z_{i+\frac{1}{2}}$ como en los planos $z=z_i$; en los primeros lo es su componente transversal, en los segundos, su componente longitudinal. En particular, sobre la superficie de G_{ni} el vector corriente se comporta de acuerdo con las fórmulas siguientes: sobre la superficie lateral es

$$\underline{j}_{trans} = \sum_m \left\{\phi_m\,\underline{b}_{2,mni}+\underline{j}_m\,c_{mni}\right\}, \qquad \text{(III.3)}$$

(*) El componente transversal de un vector que no lo es se representará con la misma letra y el subíndice 2 (por "dos dimensiones").

independiente de z; sobre la base inferior es

$$\underline{j}_{long} = \underline{e}_z \sum_m \phi_m \; b_{z,mn,i-1} \qquad \text{(III.4)}$$

y sobre la base superior se tiene

$$\underline{j}_{long} = \underline{e}_z \sum_m \phi_m \, b_{z,mni}, \qquad \text{(III.5)}$$

La idea de la elección de (III.1,2) como <u>funciones de prueba</u> es la siguiente: a_{mni}, $\underline{b}_{2,mni}$ y c_{mni} caracterizan el flujo y el componente transversal del vector corriente a la cota z_i del canal C_n, mientras que la componente longitudinal de dicho vector viene caracterizada por su valor a la cota $z_{i+\frac{1}{2}}$ de aquel canal a través del coeficiente $\underline{b}_{z,mni}$ y por su valor a la cota $z_{i-\frac{1}{2}}$ mediante $b_{z,mni,i-1}$. Conforme se verá, la eliminación de este componente conduce a una fórmula de tres puntos para determinar los coeficients a_{mni}. Finalmente, obsérvese que de (III.2) resulta automáticamente $j_\nu = 0$ sobre $S_{(2)}$, ya que $\Delta'_{ni}(x,y,z_{\frac{1}{2}}) = 0^{(*)}$.

Acerca de la notación utilizada para definir las funciones de prueba $\phi(x,y,z)$ y $\underline{j}(x,y,z)$, conviene hacer notar que tanto ϕ como $\underline{j}$ son vectores en el espacio de los G grupos neutrónicos, de modo que, por ejemplo, (III.1) se escribe explícitamente

$$\phi_g(x,y,z) = \sum_{mni} \Delta_{ni}(x,y,z) \; \phi_{g,m}(x,y) a_{g,mni}$$

(*) Si sobre $S_{(2)}$ -la base inferior del sistema- la condición de contorno fuese, no la $j_\nu = 0$, sino la $\alpha j_\nu - \phi = 0$, se anadiría la región G'_{no}, es decir, habría una región G'_{ni} más que regiones G_{ni}.

Para simplificarla, sin embargo, interpretaremos las $\phi_{g,m}$ como elementos de una matriz diagonal GxG definida por $(\phi_m)_{gg'} = \phi_{g,m}\,\delta_{gg'}$. Con esto, (III.1) dice que el vector ϕ es la suma de los M vectores $\phi_m \sum_{ni} \Delta_{ni}\, a_{mni}$, transformados de los $\sum_{ni} \Delta_{ni}\, a_{mni}$ por las correspondientes matrices ϕ_m. Análogamente, $\underline{j}_m$ se interpreta en (III.2) como la matriz diagonal definida por $(\underline{j}_m)_{gg'} = \underline{j}_{g,m}\,\delta_{gg'}$, con tres matrices componentes $j_{x,m}$, $j_{y,m}$, $j_{z,m}$ en el espacio ordinario, la tercera de ellas idénticamente nula (¡ $\underline{j}_m = - D_m \operatorname{grad} \phi\,(x,y)$ es un vector transversal!)

Otra observación es conveniente hacer: consideradas las cosas desde el punto de vista físico, se entrevé que no todas las formas asintóticas tienen por qué contribuir a, por ejemplo, la forma del flujo en una zona determinada. Quiere esto decir, que, fijado i, los coeficientes a_{mni}, $\underline{b}_{mni}$ y c_{mni} serán nulos para ciertos m cualquiera que sea n, o sea, que sólo ciertos ϕ_m y ciertos $\underline{j}_m$ contribuyen a representar el flujo y el vector corriente en la zona Z_i. En estas condiciones, los valores que toma m no son del todo independientes de i, sino que cada i fija un cierto conjunto de valores de m (matemáticamente, m es función multiforme de i). Esta selección de los flujos y corrientes bidimensionales que contribuyen a la síntesis en cada Z_i hay que hacerla dejándose guiar más que nada por una intuición desarrollada en el estudio y el análisis de diversas situaciones físicas. Ayuda también a ello la síntesis de distribuciones bidimensionales a partir de distribuciones en una dimensión; la comparación con soluciones bidimensionales conocidas permite entonces no sólo ver qué zonas influyen más sobre una zona dada, sino incluso fijar la posición y número de las propias zonas.

Claro está, todas las definiciones y consideraciones

que preceden se transladan literalmente al caso de las funciones de prueba para la importancia ϕ^+ y su corriente $\underline{j}^+$. Los coeficientes correspondientes se designarán por a^+_{mni}, $\underline{b}^+_{mni}$, c^+_{mni}.

2. Aplicación del principio variacional

Como se dijo ya, una vez elegidas las funciones de base y las que van a intervenir en cada zona, de lo que se trata es de determinar los coeficientes de manera que resulte la "mejor"aproximación posible. Uno de los criterios posibles consiste en substituir las funciones de prueba (III.1,2) y las correspondientes a la importancia en la funcional (II.9) e imponer la condición de estacionariedad para variaciones δF^+, δF dentro de la clase restringida que constituyen las funciones de prueba, directas y adjuntas. De éstas, ϕ^+ y ϕ son discontinuas sobre la frontera de cada G_{ni} ($n=1,2,\ldots,N$; $i=1,2,\ldots,Z$) al igual que las componentes transversales de $\underline{j}^+$ y de $\underline{j}$ y sólo allí; la componente axil j_z, en cambio, lo es sobre las fronteras de los G'_{ni} y sólo sobre ellas. Por lo tanto, al calcular las variaciones de la funcional Ω habrá que tener en cuenta que la integral que en ella aparece debe entenderse en el sentido de las fórmulas (II,2,3).

Variaciones del componente transversal de $\underline{j}^+$.

Veamos primero a qué conduce la condición $\delta\Omega = 0$ para una variación cualquiera del parámetro c^+_{mni} (m,n,i fijos) y variaciones nulas de todos los restantes parámetros, es decir, para una variación

$$\delta \underline{j}^+ = \Delta_{ni}\, \underline{j}^+_m\, \delta c^+_{mni}, \qquad \text{(III.6)}$$

con δc^{+}_{mni} arbitraria. Prescindiendo por el momento de los efectos de superficie, la relación $\delta\Omega = 0$ se escribe

$$\int_R \Delta_{ni}\, \underline{j}^{+}_{m}\, (\mathrm{grad}_2\phi + D^{-1}\underline{j}_2)\, dV = 0.$$

La substitución de (III.1,2) en esta ecuación conduce a un sistema de ecuaciones lineales y homogéneas en a_{mni}, $\underline{b}_{2,mni}$ y c_{mni} que es de la forma

$$(\underline{j}^{+}_{i}\cdot \mathrm{grad}\,\phi_i)_n\, a_{ni} + (\underline{j}^{+}_{i}\, \overline{D}^{-1}_{i}\, \phi_i)_n \cdot \underline{b}_{2,ni} + \qquad \text{(III.7)}$$
$$+(\underline{j}^{+}_{i}\cdot \overline{D}^{-1}_{i}\, \underline{j}_i)_n\, c_{ni} + \frac{1}{2}\sum_{n'\neq n} (\underline{\nu}\cdot \underline{j}^{+}_{i}\phi_i)_{nn'}(a_{n'i} - a_{ni}) = 0,$$

donde los paréntesis son matrices cuadradas MxM y, genéricamente, f_{ni} es el vector de M componentes

$$f_{ni} = \begin{pmatrix} f_{1ni} \\ f_{2ni} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ f_{Mni} \end{pmatrix}$$

→ En efecto(*), substituyendo (III.1,5) resulta:

$$\int_R \Delta_{ni}\, \underline{j}^{+}_{m}\cdot \sum_{m'n'i'} \Delta_{n'i'} \left\{ (\mathrm{grad}\,\phi_{m'})\, a_{m'n'i'} + D^{-1}(\phi_{m'}\, \underline{b}_{2,m'n'i'} + \underline{j}_{m'}\, c_{m'n'i'}) \right\} dV +$$
$$+ \int_R \Delta_{ni}\, \underline{j}^{+}_{m}\cdot \sum_{m'n'i'} (\mathrm{grad}_2\, \Delta_{n'i'})\, \phi_{m'}\, a_{m'n'i'} = 0 .$$

(*) El lector no interesado en los pormenores del cálculo puede prescindir de los apartados comprendidos entre dos flechas → y ← .

La primera integral no presenta ninguna singularidad(¡las ϕ_m son continuas y derivables en las correspondientes secciones de R!) y se reduce a

$$\frac{1}{2}(h_{i-1}+h_i)\sum_{m'}\left(\int_{\sigma_{ni}} \underline{j}^+_m \cdot \operatorname{grad}\phi_{m'}\,d\sigma\right)a_{m'ni}+\frac{1}{2}(h_{i-1}+h_i)\sum_{m'}\left(\int_{\sigma_{ni}} \underline{j}^+_m \overline{D_i^{-1}}\phi_{m'}\,d\sigma\right)\cdot$$

$$\cdot\,\underline{b}_{2,m'ni}+\frac{1}{2}(h_{i-1}+h_i)\sum_{m'}\left(\int_{\sigma_{ni}} \underline{j}^+_m \cdot \overline{D_i^{-1}}\,\underline{j}_{m'}\,d\sigma\right)c_{m'ni},$$

donde $\overline{D^{-1}_i}$ es el valor medio de D^{-1} respecto de z en G_{ni}:

$$\overline{D^{-1}_i}=\frac{h_{i-1}D^{-1}(x,y,z_i-0)+h_iD^{-1}(x,y,z_i+0)}{h_{i-1}+h_i}$$

y la integral se extiende a una sección transversal cualquiera σ_{ni} de G_{ni}.

Pasemos a la segunda integral, la que contiene el factor singular $\operatorname{grad}_2\Delta_{n'i'}$. En primer lugar, es claro que $\operatorname{grad}_2\Delta_{n'i'}=0$ en todo R salvo sobre la frontera lateral de $G_{n'i'}$. Por otra parte, el valor medio de $\Delta_{ni}\,j^+_m\,\phi_{m'}\,a_{m'n'i'}$, es nulo en todas las fronteras interiores salvo en la frontera de G_{ni}. En consecuencia, a la integral contribuyen sólo las superficies internas $S'_{n'i'}$ que tengan partes comunes con la frontera S'_{ni} de G_{ni} interior a R. Esto implica que necesariamente sea i' = i. El cálculo de la integral da entonces para ella el valor

$$\frac{1}{2}(h_{i-1}+h_i)\sum_{m'}\left(\frac{1}{2}\int_{\ell'_{ni}} j^+_\nu\,\phi_{m'}\,dl\right)(a_{m',n'i}-a_{m',ni}),$$

donde l'_{ni} es el contorno de σ_{ni} interior a R, $j^+_{\nu,m}$ es la compo-

nente de $\underline{j}_m^+$ normal exterior a l'_{ni} y $a_{m'n'i}$ es el valor de $a_{m'}$ en los $G_{n'i}$ en contacto con G_{ni}. La fig. 3 presenta un ejemplo: el canal que se estudia es el n=3 en la zona Z_i y los canales contiguos son los n=2,8 y 4. La integral anterior se escribiría en este caso (prescindiendo del factor $\frac{1}{2}(h_{i-1}+h_i)$ y del signo de suma)

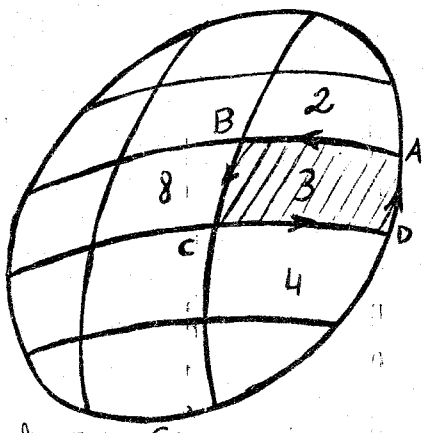


fig 3. $S(\ell)$

$$\left(\frac{1}{2}\int_{AB} j^+_{v,m}\,\phi_{m'}\,d\ell\right)(a_{m'2i}-a_{m'3i})+$$

$$+\left(\frac{1}{2}\int_{BC} j^+_{v,m}\,\phi_{m'}\,d\ell\right)(a_{m'8i}-a_{m'3i})+$$

$$+\left(\frac{1}{2}\int_{CD} j^+_{v,m}\,\phi_{m'}\,d\ell\right)(a_{m'4i}-a_{m3i}).$$

Obsérvese que por tratarse de un <u>canal frontera</u> la línea l'_{ni} no es cerrada. Qué pasa sobre el arco AD se verá más adelante, ya que se trata de un efecto de superficie.

En definitiva, pues, la condición $\delta\Omega=0$ para un $\delta\underline{j}^+$ de la forma (III.6) arbitrario conduce a la condición

$$\sum_{m'}\left(\int_{\sigma_{ni}} \underline{j}^+_m\cdot \operatorname{grad}\phi_{m'}\,d\sigma\right)a_{m'ni}+\sum_{m'}\left(\int_{\sigma_{ni}} \underline{j}^+_m\,\overline{D_i^{-1}}\,\phi_{m'}\,d\sigma\right)\cdot\underline{b}_{2,m'ni}+$$

$$+\sum_{m'}\left(\int_{\sigma_{ni}} \underline{j}^+_m\cdot\overline{D_i^{-1}}\,\underline{j}_{m'}\,d\sigma\right)c_{m'ni}+\frac{1}{2}\sum_{m'}\left(\int_{\ell_{ni}} j^+_{v,m}\,\phi_{m'}\,d\ell\right)(a_{m'n'i}-a_{m'ni})=0.$$

En este sistema de ecuaciones, m es uno cualquiera de los índices m <u>correspondientes a la zona</u> Z_i (cf.III.1) y la suma res -

pecto de m' se extiende precisamente a estos mismos valores. También hay que hacer notar que el último término del primer miembro acopla la zona Z_i del canal C_n con las zonas Z_i de los canales contiguos $C_{n'}$ (coeficientes $a_{m',n',i}$).

Cada una de las incógnitas a, $\underline{b}_2$ y c depende de tres índices: a) del índice de zona, i; b) del índice de canal, n; y c), del índice m que, para cada i, recorre el conjunto m(i) de valores m asociados a la zona Z_i (acaso todos los valores m = = 1,2,...,M). Con vistas a aligerar la notación, agruparemos todos los f_{mni} (f puede ser a, $\underline{b}_2$ o c), para (n,i) dados, en un vector

$$f_{ni} = \begin{pmatrix} f_{1ni} \\ f_{2ni} \\ \\ f_{Mni} \end{pmatrix} \qquad \text{(III.8)}$$

y todos los f_{ni}, para i dado, en un nuevo vector

$$f_i = \begin{pmatrix} f_{1i} \\ f_{2i} \\ \vdots \\ f_{Ni} \end{pmatrix} . \qquad \text{(III.9)}$$

Los vectores f_{ni} tienen (como máximo) M componentes; los vectores f_i (cuyas "componentes" son a su vez vectores) tiene N "componentes" (es decir, como máximo MN componentes en el sentido ordinario(*)). De acuerdo con esto, escribiremos el siste

---

(*) Tengase presente que f_{mni}(m,n,i fijos) es ya de suyo un vector de tantas componentes como grupos. La notación completa sería $f_{g,mni}$. El proceso consiste en si suprimiendo índices sucesivamente aumentando a la vez el número de dimensiones del espacio en que se considere el vector. Por lo tanto, el vector f_i queda determinado por $GM_iN(\leq GMN)$ números reales (M_i es el número de funciones de base que influyen en la zona Z_i).

ma anterior en la forma

$$(\underline{j}_i^+ \cdot \mathrm{grad}\,\phi_i)_n a_{ni} + (\underline{j}_i^+ \overline{D_i^{-1}} \phi_i)_n \cdot \underline{b}_{2,ni} + (\underline{j}_i^+ \cdot \overline{D_i^{-1}} \underline{j}_i)_n c_{ni} + \tag{III.7}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{n' \neq n} (\underline{\nu} \cdot \underline{j}_i^+ \phi_i)_{nn'} (a_{n'i} - a_{ni}) = 0,$$

donde se han introducido las matrices cuadradas $M_i x M_i$ definidas por:

$$\left[(\underline{j}_i^+ \cdot \mathrm{grad}\,\phi_i)_n\right]_{mm'} = \int_{\sigma_{ni}} \underline{j}_m^+ \cdot \mathrm{grad}\,\phi_{m'}\, d\sigma, \left[(\underline{j}_i^+ \overline{D_i^{-1}} \phi_i)_n\right]_{mm'} =$$

$$= \int_{\sigma_{ni}} \underline{j}_m^+ \overline{D_i^{-1}} \phi_{m'}\, d\sigma, \left[(\underline{j}_i^+ \cdot \overline{D_i^{-1}} \underline{j}_i)\right]_{mm'} = \int_{\sigma_{ni}} \underline{j}_m^+ \cdot \overline{D_i^{-1}} \phi_{m'}\, d\sigma \tag{III.10}$$

y finalmente,

$$\left[(\underline{\nu} \cdot \underline{j}_i^+ \phi_i)_{nn'}\right]_{mm'} = \int_{\ell'_{nn',i}} (\underline{\nu} \cdot \underline{j}_m^+)\, \phi_{m'}\, d\ell\ ; \tag{III.11}$$

$\ell'_{nn',i}$ es el arco de ℓ'_{ni} que se encuentra sobre el canal $C_{n'}$ (p.e, el BC de la fig.3) y $\underline{\nu}$ es el vector normal a ℓ'_{ni} exterior a C_n. ←

Si C_n es un canal frontera, la frontera lateral de G_{ni} tiene parte común con la frontera lateral, $S_{(\ell)}$, del sistema. Por lo tanto, si sobre esta parte común la condición de contorno es la $\alpha j_\nu - \phi = 0$, la variación (III.6) influye sobre el término de superficie de la funcional y a (III.7) hay que sumar las contribuciones que proceden del mismo. Es inmediato que éstas se escriban

$$(j_{\nu,i}^+ \overline{\alpha}_i \underline{\nu}\, \phi_i)_{ns} \cdot \underline{b}_{2,ni} + (j_{\nu,i}^+ \overline{\alpha}_i j_{\nu,i})_{ns}\, c_{ni} - (j_{\nu,i}^+ \phi_i)_{ns}\, a_{ni}, \tag{III.7'}$$

donde el subíndice ns caracteriza la integración a lo largo del arco del contorno transversal de G_{ni} que está sobre $S_{(\ell)}$ (p.e., el arco DA de la fig.3). La expresión (III.7') debe sumarse al primer miembro de (III.7) cuando se trata de un canal G_{ni} frontera con la condición $\alpha j_\nu - \phi = 0$ sobre la parte de $S_{(\ell)}$ sobre G_{ni}.

La variación (III.6) que condujo a (III.7) es una posible variación del componente transversal de $\underline{j}^+$. Otra variación transversal posible, independiente de la primera, es la definida por

$$\delta \underline{j}^+ = \Delta_{ni}\, \phi^+_m\, \delta \underline{b}_{2,mni} \qquad \text{(III.12)}$$

que conduce a

$$\int_R \Delta_{ni}\, \phi^+_m \left(\mathrm{grad}_2\, \phi + D^{-1} \underline{j}_2\right) dV = 0$$

(prescindiendo del término de superficie, si lo hay). Las consecuencias de esta condición (¡vectorial en dos dimensiones espaciales!) se obtienen inmediatamente sin necesidad de efectuar ningún cálculo: basta substituir en (III.7,10,11) la multiplicación escalar $\underline{j}^+_m \cdot$ por la multiplicación aritmética por ϕ^+_m Queda así:

$$(\phi^+_i \mathrm{grad}\, \phi_i)_n a_{ni} + (\phi^+_i \overline{D^{-1}_i} \phi_i)_n \underline{b}_{2,ni} + (\phi^+_i \overline{D^{-1}_i} \underline{j}_i)_n c_{ni} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{n' \neq n} (\underline{\nu}\, \phi^+_i \phi_i)_{nn'} (a_{n'i} - a_{ni}) = 0 . \qquad \text{(III.13)}$$

Las matrices que aquí aparecen se deducen de (III.10.11) mediante una obvia substitución.

Cuando G_{ni} es frontera, al primer miembro de (III.13) hay que añadir términos de superficie cuando la condición de contorno es la $\alpha j_\nu - \phi = 0$. De la misma manera que se pasa de (III.7) a (III.13), de (III.7') se deduce que dichos términos son de la forma

$$(\underline{\nu}\,\phi_i^+ \otimes \bar{\alpha}_i\,\underline{\nu}\,\phi_i)_{ns}\,\underline{b}_{2,ni} + (\underline{\nu}\,\phi_i^+\,\bar{\alpha}_i\,j_{\nu i})_{ns}\,c_{ni} - (\underline{\nu}\,\phi_i^+\,\phi_i)_{ns}\,a_{ni} \qquad \text{(III.13')}$$

El primer término es el vector de dos dimensiones cuya componente cartesiana (x) se escribe

$$(\nu_x\,\phi_i^+\,\bar{\alpha}_i\,\nu_x\,\phi_i)_{ns}\,b_{x,ni} + (\nu_x\,\phi_i^+\,\bar{\alpha}_i\,\nu_y\,\phi_i)_{ns}\,b_{y,ni}$$

y cuya componente (y) es

$$(\nu_y\,\phi_i^+\,\bar{\alpha}_i\,\nu_x\,\phi_i)_{ns}\,b_{x,ni} + (\nu_y\,\phi_i^+\,\bar{\alpha}_i\,\nu_y\,\phi_i)_{ns}\,b_{y,ni}\,.$$

Con esto queda agotada la información que proporciona la variación (arbitraria) del componente transversal de $\underline{j}^+$.

<u>Variaciones de la componente longitudinal de $\underline{j}^+$.</u>

Pasemos ahora a variar la componente longitudinal de $\underline{j}^+$, es decir, consideremos una variación de la forma

$$\delta \underline{j}^+ = \Delta'_{ni}\,\phi_m^+\,\delta b^+_{z,mni}\,, \qquad \text{(III.14)}$$

con m, n, i dados y $\delta b^{+}_{z,mni}$ arbitraria. La condición $\delta\Omega=0$ conduce en este caso a

$$\int_R \Delta'_{ni}\, \phi^{+}_{m} \left(\partial_z \phi + D^{-1} j_z\right) dV = 0 ,$$

para $i < Z$. Un cálculo fácil lleva al sistema lineal homogéneo

$$h_i \sum_{m'} \left(\int_{\sigma_{ni}} \phi^{+}_{m} D^{-1}_{i+} \phi_{m'} d\sigma \right) b_{z,m'ni} + \sum_{m'} \left(\int_{\sigma_{ni}} \phi^{+}_{m} \phi_{m'} d\sigma \right) a_{m'n,i+1}$$

$$- \sum_{m'} \left(\int_{\sigma_{ni}} \phi^{+}_{m} \phi_{m'} d\sigma \right) a_{m'ni} = 0 .$$

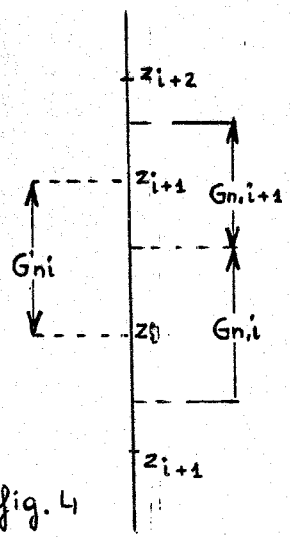


fig. 4

El segundo término del primer miembro requiere una aclaración. En a_{mni}, m toma los valores del conjunto m(i) que corresponde a la zona Z_i. Por consiguiente, en el integrando de dicho término, m' recorre la sucesión m(i+1) correspondiente a Z_{i+1}. En cambio, en el integrando del tercer término, m' toma los valores del conjunto m(i). Las dos sumas son, por lo tanto, diferentes. Puntualizado esto, el convenio de notación establecido permite escribir el sistema anterior en la forma (¡D es constante en G'_{ni}!):

$$h_i (\phi^{+}_{i} D^{-1}_{i+} \phi_i)_n b_{z,ni} + (\phi^{+}_{i} \phi_{i+1})_n a_{n,i+1} - (\phi^{+}_{i} \phi_i)_n a_{ni} = 0 . \qquad \text{(III.15)}$$

Las matrices que aparecen en el primer término y en el tercero son cuadradas $M_i x M_i$; la del segundo, en cambio, en general será rectangular $M_i x M_{i+1}$.

Lo que precede vale para $i < Z$. Para $i=Z$ entra en juego el término de superficie; la substitución de las funciones

de prueba en dicha parte de la integral, junto con la varia - ción de la componente longitudinal de $\underline{j}^+$, nos da la condición

$$\left\{(\phi_Z^+ \alpha \phi_Z)_n + \frac{1}{2} h_Z (\phi_Z^+ D_{Z^+}^{-1} \phi_Z)_n\right\} b_{nZ} - (\phi_Z^+ \phi_Z)_n a_{nZ} = 0, \qquad \text{(III.15')}$$

que substituye a (III.15) cuando i=Z.

<u>Variación de la importancia</u>

Finalmente, consideremos una variación arbitraria de la importancia ϕ^+ dentro de la clase restringida, esto es, tomemos para $\delta\phi^+$ la expresión

$$\delta\phi^+ = \Delta_{ni}\, \phi_m^+\, \delta a_{mni}^+ \qquad \text{(III.16)}$$

Substituyendo en

$$\int \delta\phi^+ (\operatorname{div} \underline{j} + \Lambda \phi)\, dV = 0,$$

(III.16) en vez de $\delta\phi^+$, y las funciones de prueba en lugar de ϕ y de $\underline{j}$, el método repetidamente aplicado y las fórmulas (II.2-3) conducen al sistema de ecuaciones:

$$(\phi_i^+ \bar{\Lambda}_i \phi_i)_n a_{ni} + (\phi_i^+ \operatorname{grad} \phi_i)_n \cdot \underline{b}_{z,ni} + (\phi_i^+ \operatorname{div} \underline{j}_i)_n c_{ni} + \frac{2}{h_{i-1}+h_i}$$
$$\cdot \left\{(\phi_i^+ \phi_i)_n b_{z,ni} - (\phi_i^+ \phi_{i-1})_n b_{z,n,i-1}\right\} + \frac{1}{2} \sum_{n' \neq n} (\underline{\nu} \phi_i^+ \phi_i)_{nn'} \cdot (\underline{b}_{z,n'i} - \underline{b}_{z,ni}) +$$
$$+ \frac{1}{2} \sum_{n' \neq n} (\underline{\nu} \phi_z^+ \cdot \underline{j}_i)_{nn'} (c_{n'i} - c_{ni}) = 0. \qquad \text{(III.17)}$$

Estas ecuaciones valen para $1 < i \leq Z$. Para i=1 falta el término $b_{z,n,i-1}$, como puede verse directamente. A ellas hay que

sumar los términos

$$-(\underline{\nu}\,\phi_i^+\,\phi_i)_{ns}\cdot\underline{b}_{2,ni} - (\underline{\nu}\,\phi_i^+\cdot\underline{j}_i)_{ns}\,c_{ni} \qquad \text{(III.17')}$$

en el caso de aquellos canales frontera sobre cuya superficie exterior sea $j_\nu = 0$.

Las ecuaciones (III.7,13,15,17)(*) constituyen el sistema fundamental que permite determinar la "mejor" aproximación de entre las funciones de prueba (III.1,2) de acuerdo con el principio variacional. Para resolverlo, entre aquellas ecuaciones se eliminarán las incógnitas $\underline{b}_{2,mni}$, c_{mni} y $b_{z,mni}$, las primeras y segundas ligadas con las fugas transversales, las terceras, con las longitudinales.

3. Ecuaciones de la síntesis variacional

En tanto que (III.7,13) introducen sólo las "componentes" transversales $\underline{b}_{2,ni}$ y c_{ni} del vector corriente (III.2), mientras que (III.15) contiene únicamente las componentes longitudinales $b_{z,ni}$ del mismo, tenemos un sistema de ecuaciones para las primeras y otro, independiente, para las segundas. Consideremos el primer sistema y escribámoslo en la forma(**)

(*) Con los complementos (III.7',13',15',17') cuando sea necesario.

(**) Para simplificar la escritura, no se indican explícitamente los términos de superficie (III.7',13'), términos que habrá que añadir cuando sea necesario.

$$(\phi_i^+ \overline{D_i^{-1}} \phi_i)_n \underline{b}_{2,ni} + (\phi_i^+ \overline{D_i^{-1}} \underline{j}_i)_n c_{ni} = -(\phi_i^+ \operatorname{grad} \phi_i)_n a_{ni} + \frac{1}{2} \sum_{n' \neq n} (\underline{\nu} \phi_i^+ \phi_i)_{nn'} (a_{ni} - a_{n'i}),$$

$$(\underline{j}_i^+ \overline{D_i^{-1}} \phi_i)_n \cdot \underline{b}_{2ni} + (\underline{j}_i^+ \cdot \overline{D_i^{-1}} \underline{j}_i)_n c_{ni} = -(\underline{j}_i^+ \cdot \operatorname{grad} \phi_i)_n a_{ni} + \frac{1}{2} \sum_{n' \neq n} (\underline{\nu} \cdot \underline{j}_i^+ \phi_i)_{nn'} (a_{ni} - a_{n'i}). \qquad \text{(III.18)}$$

Los primeros miembros corresponden a las fugas transversales; en los segundos, aparecen los términos de acoplamiento del canal n y sus contiguos. Introduciendo el vector f_i definido por las componentes $f_{\mu,gmni} = \underline{b}_{2,gmni}$ $(\mu = 1,2)$, $f_{\mu,gmni} = c_{gmni}$ $(\mu = 3)$, es decir,

$$f_i = \begin{pmatrix} \underline{b}_{2,1i} \\ c_{1i} \\ \underline{b}_{2,2i} \\ c_{2i} \\ \vdots \\ \underline{b}_{2,Ni} \\ c_{Ni} \end{pmatrix}$$

todo el sistema anterior puede escribirse en la forma

$$\overline{B}_i f_i = \frac{1}{2} A_i a_i. \qquad \text{(III.19)}$$

Las matrices $\overline{B}_i$ son matrices diagonales respecto del índice n, cuadradas de orden $3GM_iN \times 3GM_iN$. Las matrices A_i son matrices no diagonales respecto del índice n, rectangulares de orden $3GM_iN \times GM_iN$. La estructura de unas y otras (que resulta inmediatamente de la identificación de (III.18) y (III.19)), se presenta en el Apéndice 2.

Análogamente a (III.19), escribiremos (III.15) en la forma

$$h_i (\phi_i^+ D_{i+}^{-1} \phi_i)_n b_{2,ni} = (\phi_i^+ \phi_i)_n a_{ni} - (\phi_i^+ \phi_{i+1})_n a_{n,i+1}. \qquad \text{(III.20)}$$

Antes de proceder a eliminar las incógnitas $\underline{b}_{2,i}$, c_i y $b_{z,i}$, agrupemos en (III.17) los términos que corresponden a las fugas transversales, términos que se pueden escribir como producto de una matriz rectangular por el vector f_i que aparece en (III.19). En efecto, la identidad

$$(\phi_i^+ \operatorname{grad} \phi_i)_n \cdot \underline{b}_{2,ni} + \frac{1}{2} \sum_{n' \neq n} (\underline{\nu} \phi_i^+ \phi_i)_{nn'} \cdot (\underline{b}_{2,n'i} - \underline{b}_{2,ni}) +$$

$$+ (\phi_i^+ \operatorname{div} \underline{j}_i)_n c_{ni} + \frac{1}{2} \sum_{n' \neq n} (\underline{\nu} \phi_i^+ \cdot \underline{j}_i)_{nn'} (c_{n'i} - c_{ni}) \equiv \frac{1}{2} M_i f_i \qquad \text{(III.21)}$$

define unívocamente los elementos de la matriz M_i (véase Apendice 2). Como debe ser, esta matriz es rectangular $GM_i N \times 3GM_i N$.

Finalmente, de (III.20) se sigue para las componentes longitudinales

$$b_{z,ni} = \frac{1}{h_i} (\phi_i^+ D_{i+}^{-1} \phi_i)_n^{-1} \left\{ (\phi_i^+ \phi_i)_n a_{ni} - (\phi_i^+ \phi_{i+1})_n a_{n,i+1} \right\},$$

o introduciendo las correspondientes matrices diagonales respecto del índice n,

$$b_{z,i} = \frac{1}{h_i} (\phi_i^+ D_{i+}^{-1} \phi_i)^{-1} \left\{ (\phi_i^+ \phi_i) a_i - (\phi_i^+ \phi_{i+1}) a_{i+1} \right\} \qquad \text{(III.22)}$$

La substitución de (III.21,22) en (III.17) teniendo en cuenta (III.19) conduce al sistema de ecuaciones en a_i

$$\frac{1}{2}(h_{i-1}+h_i) \left\{ (\phi_i^+ \bar{\Lambda}_i \phi_i) a_i + \frac{1}{4} M_i (\bar{B}_i)^{-1} A_i a_i \right\} + \frac{1}{h_i} (\phi_i^+ \phi_i)(\phi_i^+ D_{i+}^{-1} \phi_i)^{-1} \left\{ (\phi_i^+ \phi_i) a_i - \right.$$

$$\left. - (\phi_i^+ \phi_{i+1}) a_{i+1} \right\} \frac{1}{h_{i-1}} (\phi_i^+ \phi_{i-1})(\phi_{i-1}^+ D_{i-}^{-1} \phi_{i-1})^{-1} \left\{ (\phi_{i-1}^+ \phi_{i-1}) a_{i-1} - (\phi_{i-1}^+ \phi_i) a_i \right\} = 0. \qquad \text{(III.23)}$$

En él, el primer término corresponde a la dispersión, a la absorción y a la fisión, el segundo, a las fugas transversales, y el tercero y cuarto, a las fugas longitudinales. Acerca de estas ecuaciones hay que hacer notar que su forma general (III.23) queda modificada en los casos particulares i=1 ei=Z. En efecto, para i=1 falta en (III.17) el término en $b_{z,n,i-1}$, con lo que en (III.23) desaparecen los términos de fugas longitudinales que contienen el subíndice i-1=0. Por otra parte, hay que recordar que para i=Z el parámetro $b_{z,i}$ viene dado por (III.15'), no por (III.15), lo que hace desaparecer el término correspondiente a a_{i+1} cuando i=Z. Todo esto a un lado, téngase presente la observación general ya hecha acerca de las modificaciones que suponen los canales frontera y las condiciones de contorno sobre ellos.

Introduciendo la notación matricial

$$\Lambda_i = (\phi_i^+ \bar{\Lambda}_i \phi_i)\frac{1}{2}(h_{i-1}+h_i) \qquad \text{(III.24)}$$

$$L_{z,i} = \frac{1}{h_i}(\phi_i^+\phi_i)(\phi_i^+ D_{i+}^{-1}\phi_i)^{-1}(\phi_i^+\phi_i) + \frac{1}{h_{i-1}}(\phi_i^+\phi_{i-1})(\phi_{i-1}^+ D_{i-}^{-1}\phi_{i-1})^{-1}(\phi_{i-1}^+\phi_i), \qquad \text{(III.25)}$$

$$L_{z,i-} = \frac{1}{h_{i-1}}(\phi_i^+\phi_{i-1})(\phi_{i-1}^+ D_{i-}^{-1}\phi_{i-1})^{-1}(\phi_{i-1}^+\phi_{i-1}), \quad L_{z,i+} = \frac{1}{h_i}(\phi_i^+\phi_i)(\phi_i^+ D_{i+}^{-1}\phi_i)^{-1}(\phi_i^+\phi_{i+1}) \qquad \text{(III.26)}$$

$$L_{t,i} = \frac{1}{4} M_i (\bar{B}_i)^{-1} A_i \frac{1}{2}(h_{i-1}+h_i) \qquad \text{(III.27)}$$

el sistema fundamental (III.23) toma la forma

$$(L_i + \Lambda_i)a_i - L_{z,i-1}a_{i-1} - L_{z,i+1}a_{i+1} = 0, \qquad \text{(III.28)}$$

en el que $L_i = L_{z,i} + L_{t,i}$. Teniendo en cuenta que $L_{z,i-1} = 0$ para $i=1$ y que $L_{z,i+1} = 0$ para $i=Z$, es claro que la matriz de los coeficientes en (III.28) es tridiagonal, o sea, que (III.28) equivale a

$$\begin{pmatrix} L_1 + \Lambda_1 & -L_{Z,1+} & & 0 \\ -L_{Z,2-} & L_2 + \Lambda_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -L_{Z,(Z-1)+} \\ 0 & & -L_{Z,Z-} & L_Z + \Lambda_Z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_{Z-1} \\ a_Z \end{pmatrix} = 0 \qquad \text{(III.29)}$$

Dado que cada elemento de la matriz que aparece en(III.29)es a su vez una matriz respecto de los índices de canal (n) ,de función de prueba (m) y de grupo (g), se trata, en rigor, de una matriz tridiagonal a bloques.

Si en (III.29) se pone de manifiesto el término de fisión, el problema de determinar las a_i aparece entonces como lo que realmente es -un problema de valores propios :

$$\mathcal{M} a = \frac{1}{\lambda} \mathcal{F} a$$

o explícitamente

$$\begin{pmatrix} L_1 + (\Sigma_T - S)_1 & -L_{Z,1+} & & 0 \\ -L_{Z,2-} & L_2 + (\Sigma_T - S)_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -L_{Z,(Z-1)+} \\ 0 & & -L_{Z,Z-} & L_Z + (\Sigma_T - S)_Z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_{Z-1} \\ a_Z \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{\lambda} \begin{pmatrix} F_{g,1} & & & 0 \\ & F_{g,2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & F_{g,Z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_Z \end{pmatrix} \qquad \text{(III.30)}$$

Para presentar un ejemplo, he aquí la expresión explícita de los elementos del bloque $F_{f,i}$ de la matriz diagonal a bloques $\mathcal{F}$:

$$(F_{f,i})_{gmn,g'm'n'} = \delta_{nn'} \int_{\sigma_{ni}} \phi^{+}_{gm}(x,y) \frac{\left\{h_{i-1}\nu\Sigma_f(x,y,z_{i-1}) + h_i \nu \Sigma_f(x,y,z_{i+1})\right\}_{g'}}{(h_{i-1}+h_i)} \phi_{g'm'}(x,y)\,dx\,dy$$

En cuando a la resolución de (III.30), un procedimiento puede ser el siguiente. Multipliquemos los dos miembros de (III.30) por λ y hagamos $\alpha = \lambda a$. Considerando el segundo miembro como un vector fuente s_i (lo que exige una primera estimación de las a_i), el sistema resultante puede resolverse mediante eliminación progresiva y substitución regresiva (en definitiva, un método equivalente al de Gauss). La solución explícita correspondiente a un s_i dado resulta del simple algoritmo siguiente (véase Apéndice 3): se determinan por recurrencia las matrices W_i

$$W_1 = Q_1^{-1}R_1, \qquad W_i = (Q_i - P_i W_{i-1})^{-1} R_i, \quad 2 \leq i \leq Z \qquad \text{(III.31)}$$

y los vectores k_i

$$k_i = Q_1^{-1} s_1, \qquad k_i = (Q_i - P_i W_{i-1})^{-1}(s_i - P_i k_{i-1}), \; 2 \leq i \leq Z \qquad \text{(III.32)}$$

Las incógnitas $\alpha_i = \lambda a_i$ resultan entonces también por recurrencia:

$$\alpha_Z = k_Z, \; \alpha_i = k_i - W_i \alpha_{i+1}, \; 1 \leq i \leq Z-1 \qquad \text{(III.33)}$$

Para abreviar, los elementos de $\mathfrak{M}$ (no nulos) sobre fila i-ésima se han representado por P_i, Q_i, R_i.

Las iteracciones (exteriores) sucesivas pueden efectuarse, por ejemplo, de acuerdo con el esquema

$$\begin{aligned} \alpha^{(t)} &= \mathcal{M}^{-1}\mathcal{F}a^{(t)}, \\ \lambda^{(t)} &= \|\alpha^{(t)}\|\,\|a^{(t)}\|^{-1}, \\ a^{(t+1)} &= \frac{1}{\lambda^{(t)}}\alpha^{(t)}, \end{aligned} \qquad \text{(III.34)}$$

donde t es el índice de iteracción y $\|\alpha\|$ es el módulo(euclídeo) del vector α : $\|\alpha\|^2 > \sum_{i=1}^{Z} |\alpha_i|^2$.(*) El proceso puede acelerarse o acudiendo a la extrapolación de Chebyshev o al método de Wielandt[8]. En cualquier caso, la resolución de (III.30) proporciona el "mejor" ϕ de entre los (III.1) y el correspondiente "mejor" valor de k_{ef} = . No entraremos aquí en los pormenóres propios del cálculo numérico, limitándonos únicamente a unas pocas indicacione acerca de la estrategia general a seguir en la práctica.

Se plantea, en primer lugar, la cuestión del número de canales y del número de zonas. El número de canales depende fundamentalmente de la mayor o menor complejidad del reactor; como mínimo, debe haber tantos como regiones longitudinales netamente diferenciadas, pero conviene subdividirlos para lograr una mayor precisión. Lo mismo cabe decir respecto del número de zonas: aunque éstas vienen determinadas en esencia

---

(*) En realidad, $|\alpha_i|^2$ es a su vez una norma (euclídea): $|\alpha_i|^2 = \sum_{gmn} |\alpha_{gmni}|^2$.

por los planos de discontinuidad física, es necesario tomar más zonas parciales si se pretende una descripción aceptable de la distribución longitudinal del flujo neutrónico, en particular de la potencia, en cada canal. En cuanto a las funciones de prueba, $\phi_m(x,y)$, se indicó ya que generalmente representan formas asintóticas planas en diferentes zonas. El cálculo de estas distribuciones bidimensionales (por ejemplo, mediante un programa PDQ) supone una importante fracción del tiempo total de cálculo del sistema en tres dimensiones. Conviene, pues, partir de una estimación aceptable de las fugas longitudinales a fin de que aquellas formas no difieran excesivamente de la real. Estimadas estas fugas y calculadas las ϕ_m, la resolución de (III.30) conduce a una primera síntesis mediante la fórmula

$$\phi(x,y,z) = \sum_{m,n,i} \Delta_{ni}(x,y,z)\,\phi_m(x,y)\,a_{mni} \,.$$

De ella se deducen nuevas fugas longitudinales, variables de un canal a otro, que a su vez permiten el cálculo bidimensional de nuevas funciones de prueba. Además, los propios valores a_{mni} hallados en el cálculo longitudinal hacen posible el apreciar cuales son las funciones ϕ_m que más influyen en cada zona. Esta información permite a menudo reducir el número de funciones de pruebas ("filtrado"), con el consiguiente ahorro de tiempo de cálculo.