

ANÁLISE DE EXPERIMENTOS DE TAXA DE REAÇÃO DO PROTEUS COM A BIBLIOTECA ENDF/B-VI

Adimir dos Santos e Carlos Roberto Ferreira

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares IPEN/CNEN-SP
Caixa Postal 11049
05499, São Paulo, Brasil

RESUMO

A análise dos experimentos de taxa de reação do PROTEUS Core 1 com a biblioteca ENDF/B-VI mostrou que houve progressos sensíveis no que tange aos dados nucleares dos isótopos do plutônio (principalmente Pu-239). Além disso, a comparação teoria-experimento do parâmetro C8 demonstra a excelente qualidade dos dados nucleares do U-238 como também da metodologia de cálculo empregada nesse trabalho. Mais além, a análise do "Two-Rod Heterogeneity Factor" indica a necessidade da introdução de programas de cálculo que tratem os aspectos geométricos exatamente como o MCNP.

INTRODUÇÃO

A análise de experimentos críticos, como também dos correspondentes índices espectrais, sempre foi reconhecida como um dos aspectos mais importantes na tecnologia de reatores nucleares. A aplicabilidade dos arquivos de dados nucleares (ENDF), como também o desempenho dos métodos matemáticos usados nos códigos nucleares, podem ser verificados simultaneamente como decorrência de análise de experimentos críticos. Nesse processo, é necessário que a análise seja efetuada com arquivos de dados nucleares atualizados e com códigos que usam métodos matemáticos bem estabelecidos que introduzam erros menores do que as incertezas inerentes aos dados nucleares básicos.

Recentemente a IAEA (International Atomic Energy Agency) liberou a sexta versão do arquivo ENDF (ENDF/B-VI) [1], o qual, em princípio, introduziu na área nuclear os dados nucleares mais atualizados possíveis. A ENDF/B-VI trouxe consigo a introdução de novos formalismos, como o modelo de Reich-Moore [2] para a descrição matemática das ressonâncias resolvidas, e também a introdução do Double-Differential Cross Section (MF6) para a descrição do espectro de emissão e direção da partícula emitida. Além disso, houve um grande progresso nos dados nucleares de materiais estruturais, como por exemplo seção de choque para isótopos de Fe, Ni, Cr, que são nuclídeos importantes na composição do aço-inox. Entretanto, com a introdução de ENDF/B-VI houve grandes dificuldades na utilização desse arquivo [3, 4] devido principalmente ao MF6. Vários códigos de processamento de dados nucleares na época da liberação do ENDF/B-VI não eram capazes de tratar o "Double Differential Cross Section". Esforços recentes, principalmente no sistema NJOY [5, 6, 7], culminaram com o processamento satisfatório de grande parte da ENDF/B-VI. Detalhes ainda precisam ser pesquisados

principalmente na aplicabilidade do modelo ACER, o qual gera biblioteca de dados nucleares para o MCNP [8].

O propósito desse trabalho é analisar com a ENDF/B-VI os experimentos de taxa de reação do Reator PROTEUS LWCHR Core 1 [9]. Para esse propósito serão utilizados o NJOY 91.38 para a geração das seções de choque pontuais e de multigrupo e o sistema AMPX-II [10] para o cálculo de autoblindagem das ressonâncias resolvidas com o módulo ROLAIDS e o subsequente cálculo espectral com o módulo XSDRNPM.

O REATOR PROTEUS

O Reator de Potência Zero PROTEUS é caracterizado por um arranjo hexagonal de varetas combustíveis de pitch estreito e um espectro neutrônico "duro". Esse sistema possui uma taxa de conversão alta e autoblindagem das ressonâncias do U-238 acentuadas. Além disso, existe uma grande interferência entre as ressonâncias dos isótopos de Urânio e Plutônio e, portanto, fornece um teste difícil para métodos e dados nucleares utilizados na região epitérmica de energia do nêutron. Mais além, esse sistema foi contruído numa mistura de 1:1 de dois tipos de varetas combustíveis; isto é, varetas de 6.70 mm de diâmetro, sendo uma contendo 15% PuO₂/UO₂ e a outra com urânio depletado (UO₂) com cladding de aço-inox (8.22 mm de diâmetro). Esses dois tipos de varetas foram arranjados de tal forma que elas formaram fileiras paralelas alternadas, conforme mostrado na Figura 1. Maiores detalhes dos núcleos do PROTEUS-LWCHR podem ser encontrados na Ref. 9. A intenção aqui é analisar os experimentos do PROTEUS LWCHR core 1; i. e., o experimento tendo água como moderador.

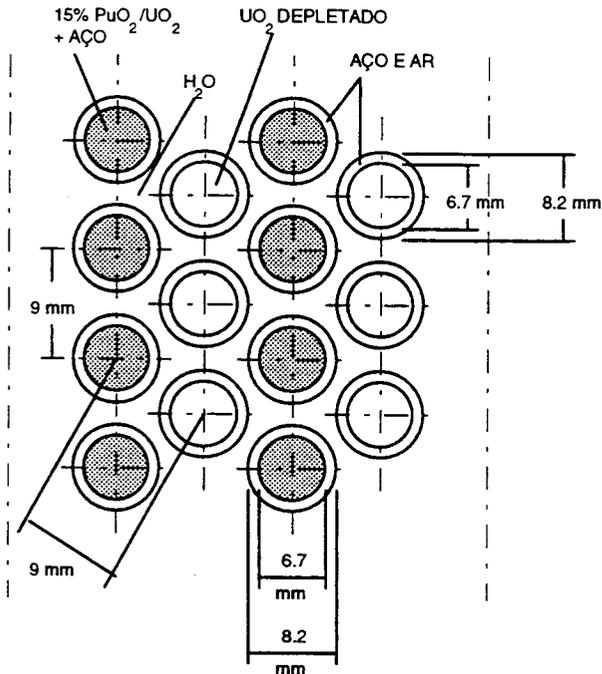


Figura 1: PROTEUS - Arranjo da Rede - Fase 1.

Existem dois níveis de dificuldade na análise do PROTEUS. O primeiro advém do fato que o sistema contém dois tipos de varetas combustíveis formando linhas paralelas alternadas de células hexagonais, fazendo com que o modelo de análise celular seja extremamente difícil. A segunda dificuldade advém da própria situação física do sistema (sistema intermediário). Esse tipo de sistema possui características espectrais que são comuns a ambos: sistemas térmicos e rápidos. Dessa forma, o sistema PROTEUS fornecerá não somente um teste difícil para os métodos e dados nucleares utilizados na análise, mas também no modelo celular utilizado para representar a região combustível na rede.

METODOLOGIA DE CÁLCULO

A metodologia de cálculo utilizada nesse trabalho é mostrada na Figura 2. Basicamente, essa metodologia é comumente utilizada na Supervisão de Física de Reatores do IPEN/CNEN-SP e utilizada em vários trabalhos /11, 12/. A diferença aqui reside no fato de que a versão 91.38 do sistema NJOY foi utilizada para processar o ENDF/B-VI. Adaptações mínimas foram necessárias nos programas BRDROL e AMPXR.

Exceção feita ao Hidrogênio, todos os dados nucleares foram gerados a 300 °K. O Hidrogênio tem as leis de espalhamento térmicas geradas a 293 °K. Seções de choque de multigrupo foram geradas em 85 grupos, sendo 36 térmicos.

A Tabela 1 mostra os núclídeos que foram utilizados nesse trabalho.

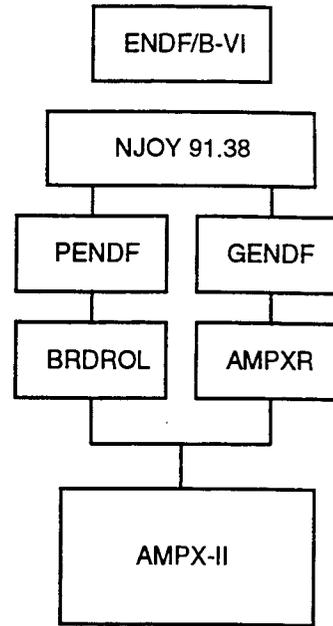


Figura 2: Metodologia de Cálculo.

TABELA 1. Núclídeos da ENDF/B-VI Processados com o NJOY 91.38.

Núclídeo	I. D.	Núclídeo	I. D.
U-235	9228	Mn-55	2525
U-238	9237	Fe-54	2625
Pu-239	9437	Fe-56	2631
Pu-240	9440	Fe-57	2634
Pu-241	9443	Fe-58	2637
Pu-242	9446	Ni-58	2825
Am-241	9543	Ni-60	2831
Am-242	9546	Ni-61	2834
O-16	825	Ni-62	2837
H-1	125	Ni-64	2843
Si-nat	1400	Al-27	1325
Cr-50	2425	Mo-nat	4200
Cr-52	2431		
Cr-53	2434		
Cr-54	2437		

MODELAGEM DO REATOR PROTEUS

O procedimento utilizado nesse trabalho segue os mesmos passos conforme ilustrado na Referência 13, ou seja, será utilizada uma representação de super célula para cada tipo de vareta combustível. Da Figura 1 pode-se notar que cada tipo de vareta combustível é envolto por dois tipos de varetas do mesmo tipo e quatro varetas do segundo tipo e, portanto, pode ser uma boa idéia tentar representar cada célula hexagonal por uma supercélula conservando a razão 2/3 : 1/3 na mistura das duas varetas diferentes. A supercélula do UO2 depletado conterá as seguintes regiões:

- o UO2 depletado no centro,

- b. o cladding de aço inox,
- c. o moderador pertencente à célula individual,
- d. o moderador pertencente às células vizinhas,
- e. o aço inox pertencente às varetas das células vizinhas,
- f. o aço inox pertencente às varetas vizinhas,
- g. uma região homogeneizada constituída de uma mistura na proporção 2/3 de UO₂ PuO₂ e 1/3 de UO₂ depletado.

A área de superzona foi conservada igual ao dobro de uma célula individual tal que a região extrema tem uma área igual à da primeira região. Além disso, da simetria da cilindrização, a terceira e a quarta região tem a mesma área e, da mesma forma, a segunda e a quinta também possuem a mesma área. A supercélula de UO₂ PuO₂ contém a vareta de UO₂ PuO₂ como primeira região e na última região uma mistura de 2/3 de UO₂ depletado e 1/3 de UO₂ PuO₂. As regiões restantes são conservadas as mesmas.

A representação de supercélula do reator PROTEUS tentará levar em consideração o efeito de heterogeneidade das varetas de UO₂/PuO₂ e UO₂ depletado (two-rod heterogeneity). Dessa forma a autoblindagem mútua e também os cálculos do transporte de nêutrons para cada tipo de vareta combustível e o efeito do combustível vizinho serão levados em consideração.

A análise do reator PROTEUS será efetuada num sistema infinito. A supercélula contendo UO₂ depletado no centro das suas tres primeiras regiões homogeneizadas na supercélula conservando taxas de reação. O mesmo procedimento será feito para a supercélula de UO₂ PuO₂. A representação em meio infinito do reator PROTEUS será efetuada para os dois tipos de célula.

A análise do reator PROTEUS foi efetuada executando inicialmente o módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II para cada tipo de supercélula. A primeira região de cada supercélula contendo o UO₂/PuO₂ o UO₂ depletado foi subdividido em 7 subregiões de áreas iguais para levar em consideração o efeito de autoblindagem em função da posição dentro da pastilha combustível. Cerca de 150.000 pontos de energia, englobando o intervalo de energia entre 5.53 keV e 0.625 eV, foi utilizado no cálculo do ROLAIDS.

Os efeitos de autoblindagem para o U-238 e Pu-239 são mostrados nas Tabelas 2 e 3 respectivamente. Dessas tabelas nota-se claramente que devido a alta concentração de U-238 e também a ressonância pronunciada localizada em 6.67 eV, a seção de choque nesse grupo de energia desse nuclide é reduzida substancialmente de seu valor de diluição infinita. Esse efeito é claramente o efeito de autoblindagem da ressonância do U-238 em si mesmo. Entretanto, efeito oposto é mostrado para o Pu-239 sendo inclusive os fatores de autoblindagem maiores que 1.0. Nesse caso, o efeito de interferência entre ressonâncias é predominantemente para o Pu-239 devido à sua baixa concentração.

TABELA 2. Fatores de Autoblindagem do U-238 (n, γ) no Grupo 44 (8.351 - 6.476 eV)

Zona do Pellet	Fatores de Autoblindagem	
	UO ₂ depletado	UO ₂ /PuO ₂
1	2.2614 -02	2.7515 -02
2	2.3796 -02	2.9110 -02
3	2.5173 -02	3.0639 -02
4	2.6999 -02	3.2729 -02
5	2.8864 -02	3.6068 -02
6	3.5614 -02	4.3716 -02
7	7.5735 -02	9.3398 -02
$\sigma_{n,\gamma}^{\infty} = 4.98256 +02$ barns		

TABELA 3. Fatores de Autoblindagem do Pu-239 no Grupo 44 (8.351 - 6.476 eV)

Zona do Pellet	Fatores de Autoblindagem			
	UO ₂ depletado		UO ₂ /PuO ₂	
	(n, γ)	(n, f)	(n, γ)	(n, f)
1	1.1614	1.1374	0.6280	0.6318
2	1.1480	1.1252	0.6595	0.6622
3	1.1369	1.1151	0.6903	0.6917
4	1.1262	1.1053	0.7222	0.7223
5	1.1150	1.0951	0.7554	0.7541
6	1.1024	1.0835	0.7895	0.7868
7	1.0835	1.0662	0.8178	0.8169
$\sigma_{n,\gamma}^{\infty} = 70.3243$ barns				
$\sigma_{n,f}^{\infty} = 87.7903$ barns				

Além disso, as Tabelas 2 e 3 mostram que os fatores de autoblindagem dependem da posição espacial no "pellet" com U-238 mostrando esse efeito mais acentuadamente.

A equação de transporte dentro de cada supercélula foi resolvida pelo módulo XSDRNPM do sistema AMPX-II. A razão de escolha do XSPRNPM é que esse módulo do AMPX-II resolve a equação de transporte de nêutrons pelo método SN para qualquer ordem de anisotropia e consequentemente tem as características desejadas tanto para tratar sistemas térmicos como sistemas rápidos. A aproximação $S_8 - P_3$ foi utilizada em toda a análise efetuada pelo XSPRNPM. As seções de choque pertencentes às tres primeiras regiões de cada supercélula foi então homogeneizada pelo XSPRNPM na área total de supercélula e finalmente um cálculo espectral homogeneizado para o sistema superposto foi efetuada pelo XSPRNPM para obter k_{∞} e as várias taxas de reação dos actídeos.

Os resultados finais estão nas Tabelas IV e V.

RESULTADOS

Considere inicialmente "the two-rod heterogeneity factors", definido como a razão entre uma dada taxa de reação (por átomo) na vareta de UO₂ depletado e a mesma taxa de reação na vareta de UO₂ PuO₂. Esse fator fornece um teste difícil para a precisão de modelagem geométrica, dados nucleares e métodos utilizados nesse trabalho.

TABELA 4. Comparação do "Two-Rod Heterogeneity Factors" (Valores da Vareta de UO₂ Relativo aos da Vareta de UO₂/PuO₂)

Taxa de Reação	C8	F8	F5	F9
Experi- mental ^a	0.9861± 1.0	0.986± 0.8	1.265± 1.2	1.918± 1.4
WIMS- D **	0.929	0.934	1.278	2.154
EPRI- CPM **	0.916	0.945	1.257	---
BOXER **	0.976	0.974	1.239	1.899
Ref. 13	0.959	0.966	1.174	1.653
Esse Trabalho	0.959	0.968	1.174	1.667

^a Erros expressos em porcentagem.

** Resultados da Ref. 14

TABELA 5. Comparação das Taxas de Reação e K_∞ para o PROTEUS Core 1

Parâ- metros	C8/F9	F8/F9	F5/ F9	F1/ F9	K _∞
Experi- mento ^a	0.0691 ±1.0	0.00987 ±2.5	0.988 ±2.0	1.045 ±1.1	1.045 ±1.1
Teórico/Experimental					
WIMS- D**	1.002	0.974	1.096	1.096	0.990
EPRI- CPM **	0.933	1.003	1.016	1.033	1.012
Ref. 13	0.946	0.980	0.944	0.943	1.008
Esse Trabalho	0.977	0.995	0.969	0.967	0.995

^a Erros expressos em porcentagem.

** Resultados da Ref. 14

Como mostrado na Tabela 4, houve pouco progresso na utilização do ENDF/B-VI na determinação do "Two-Rod Heterogeneity Factors" comparado aos resultados obtidos na Ref. 13 utilizando JENDL-2 para os actídeos e ENDF/B-IV para os materiais estruturais. O parâmetro C8, que é provavelmente o mais difícil de ser obtido no reator PROTEUS, se situa a $\approx 3.5\%$ do valor experimental o que pode ser considerado de muito boa qualidade. Para F5 e F9, entretanto, os resultados obtidos estão aquém das incertezas experimentais.

Do ponto de vista de balanço neutrônico, captura no U-238 e fissão no Pu-239 são as reações mais importantes que ocorrem no PROTEUS. O U-235 contribui com uma quantidade pequena na absorção de nêutrons e tem pouco impacto na análise global do PROTEUS. Deve ser observado que no aspecto global a análise efetuada nesse trabalho é comparável à níveis internacionais conforme observado nos resultados obtidos com WIMS-D, EPRI-CPM e BOXER.

Os resultados obtidos para C8/F9, F8/F9, F5/F9, F1/F9 e k_∞ são mostrados na Tabela 5. Nesse caso, pode ser observado o impacto causado pela ENDF/B-VI. De uma maneira geral houve um progresso sensível na comparação teoria-experimento das taxas de reação e k_∞. Os resultados da Tabela 5 confirmam progressos obtidos com o ENDF/B-VI comparado aos resultados obtidos na Referência 14.

Além disso, a metodologia de cálculo desse trabalho produz resultados similares ou melhores que os obtidos em outros centros de pesquisa.

CONCLUSÕES

A análise dos experimentos de taxa de reação do PROTEUS efetuada nesse trabalho mostrou que a metodologia de cálculo empregada pode produzir excelentes resultados. Devido às características de processamento de dados nucleares, autoblindagem mútua de actídeos e ponderação das seções de choque de multigrupo pode ser aplicado a ambos sistemas, rápidos e térmicos. Portanto, possui as características necessárias para a análise de sistemas epitérmicos avançados (Tight-Pitch).

A análise dos experimentos do PROTEUS Core 1 confirma que do ponto de vista do impacto causado pela introdução da ENDF/B-VI houve progresso sensível nos dados nucleares dos isótopos do plutônio (principalmente Pu-239). Para os dados nucleares dos isótopos do urânio, o progresso no que tange a comparação teoria-experimento de taxas de reação foi modesto.

Como sugestão de continuação desse trabalho sugere-se a análise desse sistema com o MCNP que é um código capaz de tratar os efeitos geométricos exatamente.

Dessa forma pode-se descobrir se as discrepâncias encontradas para F5 e F9 desse trabalho foram devidos à complexidade geométrica e por alguma deficiência no processamento ou nos próprios dados nucleares.

REFERÊNCIAS

- [1] LEMMEL, H.D. "ENDF/B-VI, The U.S. Evaluated Nuclear Data Library for Neutron Reaction Data" IAEA NDS 100, Rev. 2, June 1990.
- [2] ROSE, P.F. & DUNFORD, C.L. "Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6, ENDF-102" July 1990, Revised October 1991.
- [3] GRUPPELAAR, H. et alli "Processing of Double Differential Cross Section in the New ENDF/B-VI Format GROUPXS Code Description and User's Manual" ECN-182 or NEA-1111/01, Nuclear Energy Agency (April 1986).
- [4] SANTOS, A. "Processing and Testing ENDF/B-VI" Trans. Am. Nucl. Soc., Chicago, Illinois (1992).
- [5] MacFARLANE, R.E. "Introducing NJOY 89" LA-MR 89-2057 (June 1989).
- [6] MacFARLANE, R.E. "The NJOY Nuclear data Processing System, Version 91.0" Unpublished Document (February 1992).
- [7] MacFARLANE, R.E. "How do NJOY ENDF-6" International Workshop on NJOY, Saclay, France (April 1992).
- [8] BRIESMEISTER, J.F., Ed. "MCNP-A General Monte Carlo code for Neutron and Photon Transport, Version 3 A" Los Alamos National Laboratory Report LA-7396-M, Rev. 2 (1986).
- [9] CHAWLA, R. et alli "Comparisons of Calculated and Measured Parameters for a Pu-Fueled LWHCR Lattice" EIR-Bericht Nr. 463, Swiss Federal Institute for Reactor Research (1982).
- [10] GREENE, N. M. et alli "AMPX-II: A Modelar Code System For Generating Coupled Multigroup Neutron Gamma Libraries from Data in ENDF Format" PSR-63, Oak Ridge, Tennessee (1978).
- [11] FERREIRA, C.R. & SANTOS, A. "Análise de Criticalidade Utilizando-se os Sistemas NJOY, AMPX-II e KENO-IV" 215,1 Anais do VII ENFIR, Recife, Brasil (Abril 1989).
- [12] SANTOS, A. & FERREIRA, C.R. "Elaboração de uma Interface AMPX-II/HAMMER-TECHNION" 3º CGEN, Rio de Janeiro, Brasil (1990).
- [13] SANTOS, A. et alli "UO₂-PuO₂ Criticality Analysis Based on a Coupled System NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION Proceedings of a Technical Committee Meeting hold in Nuremberg, 26-29 March, AIEA-TECDOC-638 (1990).
- [14] CHAWLA, R. et alli "Reactivity and Reaction Rate Changes With Moderator Voidage in a Light Water High Converter Reactor Lattice" Nuclear Technology, 67, 360 (1984).
- [15] SANTOS, A. "Progresso Alcançado com as Novas Bibliotecas ENDF/B-VI e JENDL-3 em Sistemas Térmicos" 245,1 Anais do IX ENFIR, Caxambu, Brasil (1993).

ABSTRACT

The analysis of the PROTEUS Core 1 reaction rates with ENDF/B-VI show that there have been good progress concerning plutonium isotopes nuclear data (mainly Pu-239) In addition to that, there has been an excelent agreement of the parameter C8 which demonstrate the good quality of the U-238 (n, γ) nuclear data as well as the methodology used in this work. The analysis of the two-rod heterogeneity factor indicates the necessity of the introduction of the calculational methodologies which treats the geometric aspect exactly as MCNP.