

METODOLOGIA DE ANÁLISE DE PROBLEMAS
PADRÕES CELULARES COM O XSDRNPM

Carlos Roberto Ferreira
Adimir dos Santos

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares-IPEN/CNEN-SP
Travessa R, nº 400, USP - Caixa Postal 11049
CEP: 05508-900 - São Paulo - SP

RESUMO

Problemas padrões celulares referentes a reatores nucleares são calculados em geral com códigos celulares como, por ex., o HAMMER-TECHNION. Neste trabalho é proposta uma metodologia mais elaborada, com a utilização do módulo XSDRNPM do sistema AMPX-II. Essencialmente, o método proposto transforma o problema celular em um problema unidimensional equivalente, onde a fuga de neutrons do sistema e as taxas de reações são preservadas. As dimensões críticas são obtidas por meio do buckling crítico experimental e é subtraída a distância extrapolada, para compatibilizar com a teoria de transporte de neutrons. Boa concordância foi obtida na análise de unidades críticas térmicas das séries BAW e DIMPLE, sendo verificada também a consistência em geometrias plana, esférica e cilíndrica.

INTRODUÇÃO

A análise de problemas padrões celulares é de grande interesse para a verificação e validação de metodologias de cálculos referentes ao projeto nuclear de reatores. Problemas padrões desse tipo têm sido calculados frequentemente com códigos celulares como, por exemplo, o HAMMER-TECHNION [1]. Nessa análise são fornecidas a descrição geométrica do problema e as composições atômicas dos núcleos de cada região da célula unitária. A fuga de neutrons do sistema é representada por um único parâmetro, o buckling, que por sua vez é obtido experimentalmente por meio da distribuição espacial do fluxo neutrônico na região assintótica do reator. Códigos de transporte, como o módulo XSDRNPM [2] do sistema AMPX-II, que utilizam teorias mais sofisticadas do que os códigos celulares, possuem dificuldades para o tratamento de problemas padrões celulares, visto que no cálculo da fuga com o buckling experimental o coeficiente de difusão utilizado é calculado como sendo $1/3\Sigma_t$, onde Σ_t é a seção de choque total. O presente trabalho tem por objetivo propor um método para a utilização do XSDRNPM na análise de problemas padrões celulares. Basicamente, o método proposto transforma o problema celular em um problema unidimensional equivalente, onde a fuga de neutrons do sistema e as taxas de reação são preservadas. A dimensão do sistema unidimensional é obtida através do buckling e é subtraída a distância extrapolada do sistema para compatibilizar com a teoria de transporte.

CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS

O XSDRNPM é um código de transporte unidimensional. Portanto, para efetuar cálculos de problemas padrões com este módulo do AMPX-II, é necessário transformar o problema a ser resolvido, num sistema unidimensional correspondente, preservando a fuga de neutrons e as taxas de reações do sistema considerado. Para isso, uma vez obtidas as seções de choque homogeneizadas em 85 grupos de energia, na primeira execução do XSDRNPM (cálculo celular), procede-se os

cálculos homogêneos dos problemas padrões, nas geometrias plana, esférica e cilíndrica. As dimensões críticas são calculadas inicialmente com o uso do "buckling" experimental. Lembre-se que, pela teoria do reator assintótico, dado o buckling crítico, as dimensões críticas extrapoladas podem ser calculadas por meio deste parâmetro em qualquer geometria. Com efeito, recordemos que num reator homogêneo e sem refletores, na região assintótica o fluxo de neutrons satisfaz a equação de Helmholtz: $\nabla^2\phi + B^2\phi = 0$, com condições de contorno homogêneas na superfície extrapolada do sistema. As soluções desta equação apresentam as formas:

$$\text{geometria plana: } \phi(r) = A \cos(Bx) \quad (1)$$

$$\text{geometria esférica: } \phi(r) = A \frac{\text{sen}(Br)}{r} \quad (2)$$

$$\text{geometria cilindro-}\infty: \phi(r) = A J_0(Br) \quad (3)$$

onde os bucklings geométricos estão relacionados às dimensões extrapoladas dos sistemas, pelas expressões:

$$\text{geometria plana: } B^2 = \left(\frac{\pi}{2h_e}\right)^2 \quad (4)$$

$$\text{geometria esférica: } B^2 = \left(\frac{\pi}{r_e}\right)^2 \quad (5)$$

$$\text{geometria cilindro-}\infty: B^2 = \left(\frac{2.4048}{r_e}\right)^2 \quad (6)$$

Então, o primeiro cálculo de criticidade (sistema homogêneo) é feito com o XSDRNPM utilizando-se as dimensões críticas extrapoladas, obtidas com as Equações (4) a (6). Em seguida parte-se para o cálculo de interesse real, ou seja, testar a capacidade da metodologia de cálculo proposta em predir a criticidade de um dado sistema nuclear. Para este objetivo, as dimensões críticas reais são obtidas subtraindo-se as distâncias extrapoladas, das dimensões

críticas extrapoladas. Desta forma, o problema pode ser tratado pela teoria de transporte de neutrons. Neste trabalho, a distância extrapolada é obtida de duas maneiras distintas. A primeira utiliza a fórmula de distância extrapolada do problema clássico de Milne [3]. Esta fórmula é aplicável a todas as geometrias, desde que o tamanho físico do sistema seja muito maior do que a distância extrapolada. A expressão é a seguinte:

$$d_e = \frac{0.71044}{\Sigma_{tr}} \quad (7)$$

d_e → distância extrapolada;

Σ_{tr} → seção de choque de transporte em 1 grupo de energia.

A segunda maneira de obter as dimensões críticas reais do sistema, muito mais laboriosa, foi ajustar os fluxos de neutrons em 85 grupos de energia, na região assintótica, usando os modos fundamentais das soluções da equação de Helmholtz (Eqs.(1) a (3)) como funções de ajuste. Isto foi obtido com o Statistical Analysis System SAS [4].

METODOLOGIA DE CÁLCULO

A metodologia de cálculo segue o fluxograma da Figura 1. O pré-processamento dos dados nucleares é feito com o sistema NJOY [5], o qual acessa as bibliotecas básicas de dados nucleares avaliados ENDF/B-IV e JENDL-2, produzindo bibliotecas de dados nucleares pontuais e em multigrupo, com estrutura de 85 grupos. Estas bibliotecas entram, mediante uma interface [6], no sistema AMPX-II, sendo que a autoblindagem das ressonâncias resolvidas dos núcleos actinídeos é tratada no módulo ROLAIDS do AMPX-II, onde a geometria e composição celular é considerada. Este cálculo é feito utilizando-se a Equação Integral de Transporte de neutrons, com espalhamento isotrópico, em milhares de pontos energéticos (cerca de 40000 a 50000 pontos) e sintetizado para 85 grupos. O processamento segue até que seja preparada a biblioteca WORKING em 85 grupos para o módulo XSDRNPM do AMPX-II, o qual resolve a equação de transporte de neutrons pelo método de ordenadas discretas e grau de anisotropia 1 (P_1S_n). A partir daí o XSDRNPM é executado várias vezes: primeiramente, para o cálculo de homogeneização celular em 85 grupos de energia; em seguida, utilizando-se os arquivos de dados celulares obtidos na primeira execução, o XSDRNPM é executado para os cálculos de criticalidade nas várias geometrias: esférica, cilíndrica e plana, para os problemas padrões considerados.

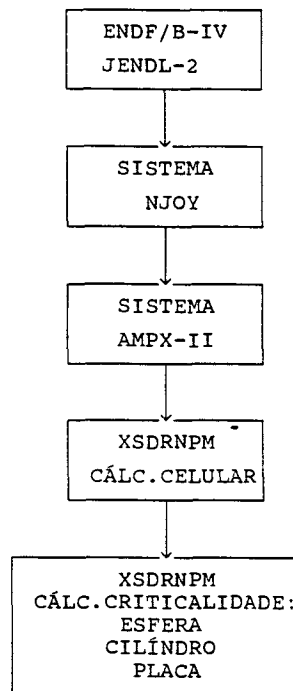


Fig. 1. Metodologia de cálculo :
NJOY/AMPX-II (XSDRNPM)

PROBLEMAS PADRÕES ANALIZADOS

Foram calculadas neste trabalho, com a metodologia de cálculo descrita acima, duas unidades críticas da série BAW [7], BAW-I e BAW-X e duas da série DIMPLE [8], núcleos R1/100H e R3/100H. Todos estes núcleos são sistemas térmicos moderados a água leve, com combustível UO₂ tipo vareta revestido com aço inoxidável e baixos enriquecimentos: 4.02 % de U-235 em massa para os BAW e 3.003 % de U-235 em massa para os DIMPLE. As descrições detalhadas destes sistemas (geometria e composições celulares) encontram-se nas referências mencionadas e não serão dadas aqui. Utilizando as composições celulares destes núcleos, foram calculados fatores de multiplicação de sistemas críticos em geometrias plana, esférica e cilíndrica. Também, a nível de cálculos celulares foram determinados fatores de multiplicação infinito (k_{∞}), e as taxas de reações: ρ^{238} (razão entre a taxa de captura epitérmica e térmica no U-238), δ_{25} (razão entre as taxas de fissões epitérmica e térmica no U-235). Para o núcleo R1/100H foi calculado ainda o parâmetro R, definido por:

$$R = \frac{\text{taxa de captura no U-238 na rede}}{\text{taxa de fissão no U-235 na rede}} \quad (8)$$

$$R = \frac{\text{taxa de captura no U-238 (espectro Maxwelliano (20°C))}}{\text{taxa de fissão no U-235 (espectro Maxwelliano (20°C))}}$$

Cabe observar aqui, que os cálculos de criticalidade para as unidades críticas BAW, utilizaram o primeiro procedimento para a

obtenção das distâncias extrapoladas, descrito acima; os cálculos para os DIMPLE, foram feitos com o segundo método.

DETALHES DO PROCESSAMENTO

Como já foi dito, o sistema NJOY acessa as bibliotecas básicas de dados nucleares avaliados para efetuar o pré-processamento dos dados. No presente trabalho, as bibliotecas acessadas e os nuclídeos utilizados foram os seguintes: ENDF/B-IV: H-1, O-16, Si-natural, Al-27 e Ti-natural; JENDL-2: U-238, Fe-nat, Cr-nat, Ni-nat, e Mn-55; ENDF/B-V (Standard): U-235. O módulo RECONR do NJOY reconstrói as seções de choque a partir dos parâmetros de ressonância; as tolerâncias especificadas para a interpolação das seções de choque foram 0.5 % para o U-238 e 0.2 % para os demais nuclídeos. O módulo BROADR efetua o alargamento Doppler das ressonâncias à temperatura $T = 300$ K. O THERMR prepara a matriz de espalhamento térmico, segundo uma lei de espalhamento térmico escolhida dentre as opções disponíveis ($S(\alpha, \beta)$, por ex., para o espalhamento de neutrons no hidrogênio ligado na molécula de H_2O). O módulo GROUPR sintetiza as seções de choque para a estrutura de grupo especificada: no caso, a estrutura de 85 grupos de energia utilizada na Divisão de Física de Reatores- IPEN/CNEN-SP. Nesta fase, o pré-processamento dos dados nucleares, praticamente independentes da aplicação, termina com a produção de duas bibliotecas de dados nucleares: uma pontual e a outra em 85 grupos de energia.

Para preparar os dados para o sistema AMPX-II, são utilizadas duas interfaces [6]: o AMPXR, para preparar a biblioteca MASTER em 85 grupos e o BRDROL, para preparar a biblioteca pontual (milhares de pontos) para o módulo ROLAIDS, para os cálculos de auto-blindagem (energética e espacial) das ressonâncias resolvidas dos nuclídeos actinídeos.

Continuando o processamento no AMPX-II, o módulo CLAROL substitui as seções de choque auto-blindadas na biblioteca MASTER. O módulo RADE verifica a consistência e tolerâncias dos dados e o módulo COMET renormaliza os dados. Em seguida, o módulo NITAWL prepara a biblioteca WORKING em 85 grupos para o módulo XSDRNPM. Finalmente, como já foi descrito anteriormente, são elaborados com a execução repetida do módulo XSDRNPM, os cálculos de homogeneização celular em 85 grupos e os cálculos de criticalidade nas várias geometrias, plana, esférica e cilíndrica, para os problemas padrões escolhidos.

Para todos os problemas estudados, a discretização celular para o ROLAIDS é obtida dividindo-se a pastilha combustível em 10 regiões, o revestimento em 1 região e o moderador em 5 regiões. Desta forma, no cálculo de homogeneização celular no XSDRNPM, inicialmente, cada uma destas regiões é representada por um conjunto específico de seções de choque. Além disso, a menos que seja especificado de outra forma, os cálculos no XSDRNPM utilizam a opção P3Se, isto é, ordem de anisotropia de espalhamento igual a 3 e quadratura de ordem igual a 8.

RESULTADOS

Primeiramente, são relacionados os parâmetros integrais calculados para as unidades críticas BAW-I, BAW-X e R1/100H. Mais adiante são apresentados os fatores efetivos de multiplicação de neutrons, calculados para os sistemas críticos acima, incluindo-se o núcleo R3/100H e, também, para as geometrias plana e esférica. A Tabela 1 mostra os

parâmetros integrais calculados com o XSDRNPM em função da ordem de quadratura, para as críticas BAW-I e BAW-X. A Tabela 2 mostra uma comparação de valores calculados e medidos para estes mesmos sistemas. A Tabela 3 mostra os valores obtidos para o parâmetro R (Eq.8), medido no núcleo R1/100H, em comparação aos valores calculados com esta metodologia e com o sistema WIMS [9].

Tabela 1 - Parâmetros celulares integrais calculados com o XSDRNPM para as unidades críticas BAW-I e BAW-X, em função da ordem de quadratura.

B A W - I				
	S_8	S_{12}	S_{16}	S_{32}
k_{∞}	1.3415	1.3422	1.3424	1.3425
ρ_{28}	4.1665	4.1606	4.1591	4.1608
δ_{25}	0.2324	0.2322	0.2322	0.2323
B A W - X				
k_{∞}	1.3110	1.3119	1.3120	1.3121
ρ_{28}	4.9629	4.9548	4.9528	4.9542
δ_{25}	0.2802	0.2700	0.2799	0.2800

Tabela 2 - Comparação dos parâmetros integrais calculados com o XSDRNPM e medidos para as críticas BAW-I e BAW-X.

B A W - I	Calculado	Medido
$\rho_{28}(E_{th} = 0.625 \text{ eV})$	4.1665	4.12 ± 0.31
$\delta_{25}(E_{th} = 0.625 \text{ eV})$	0.2324	0.253 ± 0.006
$\delta_{25}(E_{th} = 0.417 \text{ eV})$	0.2580	
B A W - X		
$\rho_{28}(E_{th} = 0.625 \text{ eV})$	4.9629	5.08 ± 0.10
$\delta_{25}(E_{th} = 0.625 \text{ eV})$	0.2802	0.307 ± 0.002
$\delta_{25}(E_{th} = 0.417 \text{ eV})$	0.3229	

Tabela 3 - Comparação entre os valores calculados e medido do parâmetro R (Eq.(8)) do núcleo R1/100H do reator DIMPLE.

	XSDRNPM	WIMS	EXPERIMENTAL
R	4.2856	4.1741	4.29 ± 0.02

A seguir, a Tabela 4 apresenta os fatores efetivos de multiplicação de neutrons, críticos, as dimensões críticas e as distâncias extrapoladas calculados para as unidades críticas BAW-I e BAW-X. A Tabela 5 mostra estas mesmas quantidades calculadas para os núcleos R1/100H e R3/100H. Lembre-se que os cálculos foram efetuados para as geometrias plana, cilíndrica e esférica, sendo que no caso das unidades críticas BAW as distâncias extrapoladas foram obtidas pela fórmula de

Milne e para as críticas DIMPLE, pelo processo de ajuste com o SAS, dos fluxos em 85 grupos calculados com o XSDRNPM.

Tabela 4 - Dimensões críticas e extrapoladas e fatores efetivos de multiplicação de neutrons, obtidos com esta metodologia de cálculo para as unidades críticas BAW-I e BAW-X.

BAW - I	R_{crit} (cm)	D_{extr} (cm)	k_{eff}
Placa	14.600	2.1452	1.0093
Esfera	31.301	2.1881	1.0043
Cilindro-∞	23.461	2.1758	1.0058
BAW - X			
Placa	15.501	2.1718	1.0021
Esfera	33.136	2.2100	0.9977
Cilindro-∞	24.858	2.1998	0.9989

Tabela 5 - Dimensões críticas e extrapoladas e fatores efetivos de multiplicação de neutrons, obtidos com esta metodologia de cálculo para as críticas DIMPLE:R1/100H e R3/100H.

R1/100H	R_{crit} (cm)	D_{extr} (cm)	k_{eff}
Placa	17.130	2.205	1.00787
Esfera	36.327	2.343	1.00393
Cilindro-∞	27.348	2.253	1.00555
R3/100H			
Placa	19.585	2.419	1.00177
Esfera	41.521	2.487	1.00072
Cilindro-∞	31.209	2.478	1.00070

ANÁLISE DOS RESULTADOS

Primeiramente, consideram-se os resultados obtidos para os parâmetros celulares integrais e, posteriormente, os cálculos de criticalidade elaborados para as unidades críticas estudadas neste trabalho.

Observando-se a Tabela 1 para o BAW-I e BAW-X, respectivamente, nota-se que existe uma variação muito pequena em todos os parâmetros celulares integrais calculados, com a ordem de quadratura, sendo que os resultados a partir de $S_n=8$ variam muito pouco. Conclui-se, portanto, que os parâmetros celulares, de um modo geral, são pouco sensíveis à ordem de quadratura.

Outros cálculos com o XSDRNPM (cujos resultados não foram relacionados neste trabalho), usando-se 5, 10 e 20 malhas espaciais na discretização da região moderadora da célula, mostraram para as mesmas críticas, que a discretização espacial do moderador, também, influencia de modo desprezível nos valores calculados para os parâmetros integrais celulares. A região combustível foi, em todos os casos, subdividida em 10 malhas espaciais e o revestimento em 1.

A Tabela 2, mostra uma concordância muito boa entre os valores calculados e

medidos dos parâmetros ρ_{28} e δ_{25} . Os cálculos no XSDRNPM para o δ_{25} foram feitos para duas energias de corte térmico: $E_{th}=0.625$ eV e $E_{th}=0.417$ eV. Os valores obtidos para o primeiro caso estão abaixo do experimental e no segundo caso, acima, mas em ambos os casos

os desvios são aproximadamente da mesma ordem de grandeza. Nota-se que a energia $E_{th}=0.417$ eV é aproximadamente a energia de corte do cádmio, nos experimentos que usam cobertura com cádmio: daí a escolha, também, desta energia em alguns cálculos com o XSDRNPM.

A comparação mostrada na Tabela 3 refere-se ao parâmetro R (Eq.8) medido no reator R1/100H. Ressalta-se o excelente resultado obtido com a metodologia de cálculo deste trabalho, dentro da incerteza experimental, superior inclusive ao calculado com o sistema WIMS, também mostrado na tabela. Finalmente, com referência aos cálculos de criticalidade, os fatores efetivos de multiplicação de neutrons, calculados com esta metodologia, para os sistemas críticos resultaram de boa qualidade. A Tabela 4 mostra isto para as críticas BAW-I e BAW-X, enquanto que a Tabela 5 mostra os k-efetivos críticos para os núcleos R1/100H e R3/100H, respectivamente (nestas Tabelas foram incluídas, também, as dimensões críticas e as dimensões extrapoladas dos sistemas). Como já foi mencionado, as geometrias calculadas para todos os sistemas foram as geometrias plana, esférica e cilíndrica. Nota-se que os k-efetivos obtidos são consistentes nas várias geometrias consideradas, destoando um pouco para a geometria plana, onde a espessura crítica da placa é menor e a distância extrapolada passa a ter maior importância, sendo que a Eq. (7) fornece resultados menos precisos.

CONCLUSÕES

Em consequência do que foi exposto acima pode-se, em geral, inferir o seguinte: a) a auto-blindagem das ressonâncias resolvidas foi tratada de forma completa, tanto energética como espacialmente, no módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II; b) os bons resultados obtidos para o parâmetro ρ_{28} dos sistemas BAW calculados e o parâmetro R para o sistema R1/100H, demonstram que os dados nucleares do U-238 da biblioteca JENDL-2 são de excelente qualidade; c) com relação ao procedimento de ajuste do fluxo de neutrons para a obtenção da distância extrapolada, a função de ajuste independe do grupo considerado e, conseqüentemente, a distância extrapolada também; d) a obtenção da distância extrapolada com a fórmula de Milne (menos trabalhosa) dá resultados similares ao método de ajuste; e) os resultados obtidos para os k-efetivos críticos são consistentes, como esperado, nas várias geometrias, divergindo um pouco para a geometria plana devido à menor espessura crítica da placa: neste caso, a fórmula de Milne (Eq. (7)) para a distância extrapolada perde um pouco de precisão; f) finalmente, a metodologia de cálculo apresentada neste trabalho (apesar de laboriosa) é coerente e consistente, apresentando resultados muito bons para os parâmetros celulares integrais e fatores de multiplicação críticos calculados para sistemas nucleares térmicos, em comparação com os resultados medidos.

REFERÊNCIAS

- [1] BARHEN, J.; ROTHENSTEIN, W.; and TAVIV, E.; The Hammer Code System, NP-565, Electric Power Research, Palo Alto California, October 1978.
- [2] GREENE, N. M.; FORD III, W. E. et alli, AMPX-II: A Modular Code System for Generating Coupled Multigroup Neutron-Gamma Libraries from Data in ENDF Format, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- [3] BELL, G. I. and GLASSTONE, S. Nuclear Reactor Theory. Robert E. Krieger Publishing Company, New York, 1979.
- [4] SAS User's Manual Guide: Statistics, Version on 5 Edition, SAS Institute Inc., North Caroline, USA, 1985.
- [5] MACFARLANE, R. E.; MUIR, D. W. and BOICOURT, R. M.; The NJOY Nuclear Data Processing System, Vol. I: User's Manual, Los Alamos National Laboratory Report, LA-9393-M, Vol(ENDF-324), 1982.
- [6] SANTOS, A.; FERREIRA, C. R.; LOPEZ, E. M; Elaboração de uma Interface AMPX-II /HAMMER-TECHNION, IPEN/CNEN-SP. In: Anais do 3° Encontro Geral de Energia Nuclear Nuclear (3° CGEN), Rio de Janeiro, 22 a 27 de abril de 1.990.
- [7] ENGELDER, T. C. at alli. Spectral Shift Control Reactor Basic Physics Program. BAW-1273 - The Babcock and Wilcox Company, Lynchburg, Virginia, 1963.
- [8] BROWN, W. at alli. Measurements of Material Buckling and Detailed Reaction Rates in a Series of Low Enrichment UO₂ Fuelled Cores Moderated by Light Water. AEEW - R502, 1967.
- [9] FINDLAY, D. J. S. and COOKSON, J. A.; U. K. Nuclear Data Progress Report. Jan. Dec. 1984 - UKNDC(85)P112 - Nuclear Physics Division, Harwell Laboratory, Oxfordshire (1985).

ABSTRACT

Thermal reactor benchmarks are often analysed by means of cell codes such as HAMMER-TECHNION. This work proposes a more elaborated methodology based on the XSDRNPM module of AMPX-II system. Basically, the proposed method transforms the cell problem in an one-dimensional equivalent problem by preserving the reaction rates and leakage. The critical dimensions are obtained by means of the critical buckling, a measured parameter, and it is substracted the extrapolated distance in order to compatibilize the transporte theory. Good agreement has been found in the analysis of the BAW and DIMPLE critical experiments and also consistent results have been verified for slab, spherical and cylindrical geometries.