

VERIFICAÇÃO DAS BIBLIOTECAS JENDL3 E ENDF/B-VI
PARA O CICLO TANDEM

ADIMIR DOS SANTOS, LUIZ ANTONIO MAI, *ALFREDO Y. ABE
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES - IPEN/CNEN-SP
SUPERVISÃO DE TECNOLOGIA DO NÚCLEO - RTF

*COORDENADORIA DE PROJETOS ESPECIAIS - COPESP
DIVISÃO DE FÍSICA DE REATORES - RTF

RESUMO

O sucesso do ciclo TANDEM proposto pelos canadenses está intimamente ligado à qualidade dos dados nucleares do plutônio como também o desempenho da metodologia usada na análise. As bibliotecas ENDF/B-VI e JENDL-3 recentemente liberadas foram acessadas e analisou-se dois problemas críticos padrões de óxido misto ($\text{PuO}_2\text{-UO}_2$) nesse trabalho. A ENDF/B-VI produziu bons resultados. Entretanto a JENDL-3 produziu resultados subestimados e a causa principal pode ser creditada aos dados nucleares do U-235. Além disso, o código WIMS/D-4 com a biblioteca Tape 166259 também foi utilizado na análise e produziu resultados que está aquém da qualidade desejada para um programa de análise de projeto.

INTRODUÇÃO

Tem sido uma tendência mundial uma reanálise do ciclo de combustível e novas concepções de reatores nucleares visando uma melhor utilização das reservas disponíveis de urânio [1,2,3]. Novas concepções de reatores nucleares se apoiam no aspecto de aumentar a taxa de conversão e queima do combustível. O principal combustível desses reatores é o plutônio obtido do reprocessamento de elementos PWR. Um procedimento alternativo denominado Ciclo TANDEM [4] foi introduzido pelos canadenses. O Ciclo TANDEM utiliza núcleos físséis (Urânio e Plutônio) obtidos do "reprocessamento" de elementos PWR e posteriormente são fabricados elementos de óxidos mistos $\text{UO}_2\text{-PuO}_2$ com alguma porcentagem de urânio natural e subsequentemente são utilizados em reatores HWR (Heavy Water Reactor).

Sistemas com óxidos mistos, tendo plutônio como principal combustível, têm sido objeto de vários estudos [5,6,7,8,9,10,11,12,13] e tem-se mostrado um grande desafio para área de Física de Reatores, visto que os fatores de multiplicação calculados por várias metodologias em sistemas críticos, tem sempre se mostrado superestimados. Desta forma é imprescindível a qualificação dos dados nucleares e metodologias referentes ao plutônio para o sucesso do Ciclo TANDEM.

O objetivo do trabalho é acessar os dados nucleares dos isótopos de plutônio e urânio das bibliotecas JENDL-3 [14] e ENDF/B-VI [15] e analisar com sistema HAMMER-TECHNION[16]/CITATION[17] vários "benchmarks"[8] com óxido misto para verificar progresso alcançados nestas novas bibliotecas. Além disso, os mesmos "benchmarks" serão analisados com o programa WIMS-D4 [18] afim de validar a utilização deste programa para a ciclo dos reatores PWR e HWR.

METODOLOGIA DE CÁLCULO

Este trabalho seguirá o seguinte roteiro :
a) Pré-processamento dos dados nucleares e elaboração de bibliotecas para a execução do cálculo celular. Para a execução dessa fase serão utilizados os seguintes programas e bibliotecas de dados nucleares :

Processamento de Dados Nucleares :

- I) NJOY [19]
- II) AMPX-II [20]
- III) LINEAR,[21] RECENT[22], SIGMA1[23]
- IV) GROUPXS [24]

Biblioteca de Dados Nucleares

- I) ENDF/B-VI [15]
- II) JENDL-3 [14]

b) A fase posterior consistirá na resolução dos problemas padrões utilizando os seguintes programas de cálculo celular e cálculo de reator:

- I) HAMMER-TECHNION [16]
- II) AMPX-II (módulos ROLAIDS) [20]
- III) WIMS/D-4 (versão para PC) [18]
- IV) CITATION [17]

A fase de pré-processamento para elaboração das bibliotecas em estrutura de multigrupo envolve acessar os dados nucleares básicos relativos aos núcleos componentes do problema, nesta fase são executadas a estruturação de grupo de energias, espectro de ponderação e temperatura para o alargamento Doppler.

No processamento dos dados relativos à biblioteca JENDL-3 utilizou-se a metodologia frequentemente utilizada na Divisão de Física de Reatores[25]. No caso da biblioteca ENDF/B-VI desenvolveu-se uma metodologia

diferente devido à particularidade desta nova versão (inclusão da representação Double Differential Cross Section e utilização do formalismo de Reich Moore) onde o código NJOY versão 10/83 não está adequado para o processamento desta nova biblioteca.

Desta forma, afim de processar os dados dos nuclídeos da biblioteca ENDF/B-VI utilizou-se os códigos LINEAR/RECENT/SIGMA1; o código GROUPXS e o programa LINKOA. A descrição detalhada da metodologia encontra-se na referência [26].

Após o pré-processamento dos dados inicia-se a elaboração da biblioteca em estrutura de multigrupo da biblioteca térmica (30 grupos) e epitérmica/rápida (54 grupos) para o código HAMMER-TECHNION; esta fase é executada utilizando-se o sistema AMPX-II, sendo que a autobindagem é efetuada pelo módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II.

A formatação da biblioteca é efetuado pelo programa LITHE para a biblioteca térmica e para biblioteca epitérmica/rápida o programa HELP. O espectro de fissão considerado é do nuclídeo Pu-239 via CCCCR.

Com as bibliotecas elaboradas procede-se o cálculo celular para geração de constantes de poucos grupos para o cálculo de reator, nesta fase serão utilizados os códigos HAMMER-TECHNION e CITATION. Além disso, utilizou-se o código WIMS/D4 versão para microcomputador PC afim de verificar e avaliar o desempenho deste código[18].

Após a geração das seções de choque em poucos grupos faz-se o cálculo de reator para a obtenção do parâmetro Kef (Fator efetivo de multiplicação dos neutrons) em geometria cilíndrica unidimensional com reflexão total de água. A fuga axial é representada através do "buckling" axial; um parâmetro obtido experimentalmente e fornecido nas especificações dos "benchmarks".

Para o programa WIMS/D4 utilizou-se a biblioteca original distribuída juntamente com o programa (TAPE 166259).

PROBLEMA PADRÃO

O problema escolhido faz parte de uma série de experimentos críticos do Programa de Utilização do Plutônio desenvolvido pela Pacific Northwest Laboratories[8]; este problema consiste em uma crítica moderado de água leve constituída de varetas combustíveis com óxido misto (PuO₂-UO₂) com a concentração de 2.0% em massa de PuO₂. As varetas são revestidas de Zircaloy-2 dispostas num arranjo triangular. Neste trabalho serão analisadas somente dois arranjos da mesma célula com a ENDF/B-VI e a JENDL-3, devido ao excessivo tempo de CPU requerido para a execução do módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II. No caso do WIMS/D-4 serão analisados todos os arranjos da célula especificada na Tabela 1. As tabelas abaixo ilustram os dados pertinentes ao problema :

Tabela 1. Concentrações da Célula de PuO₂-UO₂

Nuclídeo	Concentração (Átomos/Barn.Cm)
Combustível :	
U-235	1.5030E-04
U-238	2.0710E-02
Pu-239	3.0440E-02
Pu-240	9.9400E-05
Pu-241	1.6800E-05
Pu-242	2.7000E-06
Am-241	1.7000E-06
O-16	4.2580E-02
Revestimento :	
Zircaloy-2	4.2260E-02
Moderador :	
H-1	6.6680E-02
O-16	3.3340E-02

Tabela 2. Dimensões dos Problemas

Dimensões (Cm)	C É L U L A S					
	CASO-A	CASO-B	CASO-C	CASO-D	CASO-E	CASO-F
raio da vareta	0.64135	0.64135	0.64135	0.64135	0.64135	0.64135
espessura do revestimento	0.07620	0.07620	0.07620	0.07620	0.07620	0.07620
"Pitch"	2.0320	2.3622	2.6670	2.9032	3.3528	3.5204
Raio Crítico	24.317	20.978	21.383	23.222	30.296	35.327
"Buckling" Axial (m ⁻²)	8.484	8.672	8.711	8.878	9.299	9.435
"Buckling" Total (m ⁻²)	63.10	79.40	77.60	72.20	53.70	44.30

As varetas descritas neste problema fazem parte do conjunto de varetas com 24% de Pu240 na mistura de PuO₂-UO₂; a temperatura do sistema é de 24 graus Celsius.

RESULTADOS

Inicialmente apresenta-se os resultados referentes aos dois casos (CASO-A e CASO-C) executados com os códigos NJOY, AMPX-II, HAMMER-TECHNION, WIMS/D-4 e CITATION. No código WIMS/D4 utilizou-se a opção de cálculo DSN e o nuclídeo Am-241 não foi considerado devido a ausência deste nuclídeo na biblioteca de seções de choque. A tabela abaixo ilustra os resultados relativos ao dois casos : CASO-A e CASO-C

Tabela 3. Resultados obtidos com cálculo de difusão (CITATION)

Programa	Seção de Choque 4 grupos	K - E f e t i v o	
		CASO-A	CASO-C
CITATION	HAMMER-TECHNION* c/JENDL-3	0.9938604	0.9983944
CITATION	HAMMER-TECHNION* c/ENDF/B-VI	0.9996440	1.0042219
CITATION	WIMS/D4 (PC) c/ TAPE 166259	1.0082951	1.0116911
CITATION	HAMMER-TECHNION* c/ENDF/B-IV	0.9977952	1.0036955

* opção de cálculo : CARLVIK

Com o código WIMS/D-4 será executado os cálculos celulares para geração de constantes de poucos grupos e em seguida será executado o cálculo de reator. A tabela abaixo ilustra os resultados dos casos :

Tabela 4. Resultados do cálculo de reator com o código CITATION utilizando seções de choque gerado pelo código WIMS/D-4

Problema	K - E f e t i v o Cálculo de Reator (CITATION) Seção de Choque 4 grupos
CASO-A	1.0082951
CASO-B	1.0088453
CASO-C	1.0116911
CASO-D	1.0164909
CASO-E	1.0174036
CASO-F	1.0160103

Referindo-se à tabela 3 observa-se que os resultados obtidos com a ENDF/B-VI encontram-se em boa concordância com o valor experimental. O mesmo não ocorre com a JENDL-3 a qual apresenta resultados subestimados. A causa provável desse comportamento é a utilização do U-235 da JENDL-3 o qual apresenta seção de choque de fissão subestimada conforme discutido na referência [27].

Bons resultados também são obtidos com o HAMMER-TECHNION com a biblioteca obtida de Michigan. Nesse caso a autoblindagem das ressonâncias resolvidas é efetuada internamente no código HAMMER-TECHNION via método de Nordhein.

Os resultados obtidos com o WIMS/D-4 apresentam-se superestimados e muito aquém da qualidade exigida em projetos de reatores nucleares. A tabela 4 mostra o restante dos resultados obtidos com o WIMS/D-4. Um aspecto que deve ser ressaltado e apresentado em todas as metodologias e bibliotecas de dados nucleares desse trabalho é que o "bias" no Keff não é constante com o "pitch". Esse aspecto deve ser ressaltado e será objeto de estudo em trabalhos futuros.

CONCLUSÕES

Pela análise efetuada nesse trabalho observa-se que a biblioteca ENDF/B-VI produziu resultados que podem ser considerados promissores. O mesmo não ocorre com a JENDL-3 embora haja suspeitas de que a causa principal seja os dados do nuclídeo U-235. Os resultados obtidos com o código HAMMER-TECHNION original com a biblioteca de Michigan produziu bons resultados mas, conforme amplamente discutido na referência [27], essa biblioteca utiliza o espectro de fissão de U-235 (mais "mole" do que do Pu-239) e pode acarretar em cancelamento de erros.

O WIMS/D-4 com a biblioteca Tape 166259 também utiliza o espectro de fissão de U-235 e pode em parte justificar os desvios encontrados. Para a aplicação em sistema com óxido-mistos (PuO₂-UO₂), o WIMS/D-4 deixou muito a desejar e embora esse trabalho tenha analisado somente arranjos com um único tipo de vareta, ainda há muito que ser melhorado nesse programa para a utilização no ciclo TANDEM.

Este trabalho deve ser interpretado como marco inicial de verificação de metodologias de cálculo e bibliotecas visando o ciclo TANDEM. A verificação de programas e bibliotecas concentrou-se em sistemas críticos, a temperatura ambiente e o único parâmetro analisado foi Keff. Entretanto no ciclo TANDEM será necessário uma verificação e qualificação completa incluindo problemas padrão com água pesada; cadeias de produtos de fissão, visto que os "yields" de fissão nesse caso são devidos principalmente ao Pu-239, cadeia de transmutação dos actínidos, β_{eff} e outros parâmetros.

REFERÊNCIAS

- [1] M.C. Edlund; "High Conversion Ratio Plutonium Recycle Pressurized Water Reactors"; *Annals of Nuclear Energy* 2, 801 (1975).
- [2] M.C. Edlund, "Physics of the Uranium-Plutonium Fuel Cycle in Pressurized Water Reactor", *Trans. Am. Nucl. Soc.* 24, 508 (1976).
- [3] Y. Ishiguro, Y. Murao, S. Yasukawa, T. Iwamura, K. Okumura, O. Sato; "Improved Fuel Utilization with a Slightly Enriched Spectral Shift Reactor", *Proceedings of a Technical Committee Meeting held in Nuremberg*, 26-29 March 1990.
- [4] Veeder, J. & Didsbury, R. "A Catalog of Advanced Fuel Cycles in CANDU Reactors", *AECL* 8641, 85.
- [5] R. Bierman, E.D. Clayton and L. E. Hansen; "Critical Experiments with Homogeneous Mixtures of Plutonium and Uranium Oxides Containing 8, 15 and 30 wt% Plutonium"; *Nuc. Sci. Eng.* 50, 115-126 (1973).
- [6] C. R. Richey, J.D. White, E.D. Clayton and R.C. Lloyd; "Criticality of Homogeneous Plutonium Oxide Plastic Compacts at H:Pu=15", *Nuc. Sci. Eng.* 23, 150-158 (1965).
- [7] S.R. Bierman and E.D. Clayton; "Critical Experiments with Unmoderated Plutonium Oxide", *Nuc. Technol.* Vol-11, June 1971.
- [8] E. G. Taylor; "Saxton Plutonium: Critical Experiments for the Saxton Partial Plutonium Core", *Pittsburg, WCAP-3385-54*, Westinghouse Electric Corp. 1965.
- [9] J. Eich; "Analysis of PuO₂-UO₂ Critical Experiments"; *Trans. Am. Nuc. Soc.* 10, 306-307, 1967.
- [10] R. Chawla, R. Gmür, H. Hager, and R. Seiler; "Reactivity and Reactor Rate Ratio Changes with Moderator Voidage in a Light Water High Converter Reactor Lattice", *Nucl. Technol.*, 67, 360 (1984).
- [11] R. Chawla, R. Seiler, and K. Gmür, "Effects of Fuel Enrichment on the Physics Characteristics of Plutonium Fueled Light Water High Converters Reactors", *Nucl. Technol.*, 73, 296 (1986).
- [12] A. Y. Abe, A. dos Santos, C.R. Ferreira; "Análise de Experimento Crítico Contendo Óxido Misto (PuO₂-UO₂) Utilizando a Biblioteca de Dados Nucleares JENDL-3", *Anais do VIII ENFIR - Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica* Setembro 1991, Atibaia - São Paulo - Brasil.
- [13] A. dos Santos, C.R. Ferreira, M.A. Rodrigues Fernandes; "UO₂-PuO₂ Criticality Analysis Based on a Coupled System NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION", *Proceedings of a Technical Committee Meeting held in Nuremberg*, 26-29 March 1990; IAEA-TECDOC-638.
- [14] K. Shibata, Et alli; "Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 3 - JENDL-3"; *JAERI* 1319 (1990)
- [15] Lemmel, H.D.; "ENDF/B-VI, The U.S Evaluated Nuclear Data Library for Neutron Reaction Data", *IAEA-NDS-100*, June-1990
- [16] Barhen, J., Rothenstein, W. Taviv, E., "The HAMMER Code System" NP-565, Electric Power Research, Palo Alto, California, October 1978.
- [17] Fowler, T.B. et alli; "Nuclear Reactor Core Analysis Code: CITATION", *Oak Ridge National Laboratory, ORNL-2496 Rev. 2-71*.
- [18] Slavic, S. et alli; "WIMS-D/4 for PC-AT386 Computer Version 1.0"; *IJS-DP-5729, NEA 0329 Package 14, Feb. 1990*.
- [19] MacFarlane, R. E., Muir, D. W. 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*.
- [20] 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", *PSR-63, Oak Ridge National Laboratory, Tennessee*.
- [21] Cullen, D.E., "Program LINEAR: Linearize Data in The Evaluated Nuclear Data File/Version B (ENDF/B) Format", *UCRL-50400, Lawrence Livermore Laboratory, Oct. 1979*.
- [22] Cullen, D.E., "Program RECENT: Reconstruction of Energy-Dependent Neutron Cross-Section from Resonance Parameters in ENDF/B Format", *UCRL-50400, Lawrence Livermore Laboratory, Oct. 1979*.
- [23] Cullen, D.E., "Program SIGMA1: Doppler Broaden Evaluated Cross-Sections in The Evaluated Nuclear Data file/version B (ENDF/B) Format", *UCRL-50400, Lawrence Livermore Laboratory, Oct. 1979*.
- [24] Gruppelaar H. et alli; "Processing of Double Differential Cross Sections in The New ENDF/B-VI Format: GROUPXS Code Description and User's Manual"; *ECN-182 or NEA-1111/01 - April 1986*.
- [25] A. dos Santos; "Solução de Problemas Padrões com os Sistemas Acopladas NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION e a Biblioteca JENDL-3", *Anais do VIII ENFIR - Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica*, 17-20 de Setembro 1991, Atibaia - São Paulo - Brasil.

[26] A. dos Santos ; " Processing and Testing The ENDF/B-VI " , ANS/ENS Meeting , November 15-20 1992, Chicago Illinois.

[27] Fernandes, M.A.R.; "Análise de experimetros criticos de UO₂-PuO₂ utilizando os sistemas NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION", Tese de Mestrado, IPEN/USP 1990; São Paulo.

ABSTRACT

The sucess of the TANDEM cycle proposed by the Canadians is intimately tied to the quality of plutonium nuclear data and also to performance of the methodology used in analysis. The recently released nuclear data libraries ENDF/B-VI and JENDL-3 have been accessed and two mixed oxide (PuO₂-UO₂) critical benchmark problems have been analysed in this work. Good agreement has been found for the ENDF/B-VI analysis. However, the results produced by JENDL-3 were found subestimated and the probable reason may be credited to the U-235 nuclear data. Beyond that, the well known WIMS/D-4 code has also been benchmarked and analysis showed that this code togheter with its library (Tape 166259) produced results that is beyond of the desired quality of a code to be used in a design analysis.