

SOLUÇÃO DE PROBLEMAS-PADRÃO COM OS SISTEMAS
ACOPLADOS NJOY/AMPX-II/KENO-IV

Carlos Roberto Ferreira
Adimir dos Santos

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN

R E S U M O

Usando o acoplamento dos sistemas de processamento NJOY/AMPX-II/KENO-IV, desenvolvido no IPEN/CNEN-SP, foram feitos cálculos de problemas-padrão da série PNL e para o experimento crítico composto por nitratos de urânio e plutônio em solução de H₂O, completamente refletida por H₂O. As bibliotecas de dados nucleares ENDF/B-IV, JENDL-2 e JENDL-3 foram acessadas para produzir bibliotecas de multigrupos para cálculos finais de k-efetivos no XSDRNP e KENO-IV. Encontrou-se que os cálculos baseados na JENDL-3 apresentam uma sensível melhora para o problema persistente de sobre-estimativa de valores calculados de k-efetivos para tais sistemas.

INTRODUÇÃO

O ciclo do combustível nuclear envolve, em várias etapas, o manuseio de materiais fisséis como, por exemplo, materiais contendo U-235 e/ou Pu-239. As instalações que processam tais materiais devem ser submetidas a rigorosas análises de segurança contra acidentes de criticalidade nuclear, visando garantir a sua subcriticalidade ($k_{eff} < 1.0$), mesmo em situações acidentais de inundação do sistema ou, eventualmente, de falhas humanas.

Sob o ponto de vista computacional, a confiança nos resultados obtidos para os parâmetros críticos de dado sistema, a partir de certo modelo teórico e biblioteca de dados nucleares, é garantida pela validação dos programas em comparação com experimentos críticos padrão.

O objetivo deste trabalho é aplicar a metodologia de cálculo baseada nos sistemas de processamento NJOY [1], AMPX-II [2] e o código KENO-IV [3], desenvolvida na Divisão de Física de Reatores do IPEN, na solução dos problemas-padrão do CSEWG da série PNL-I, I = 1 a 5 [4], constituídos por esferas não refletidas de nitrato de plutônio em solução aquosa, e no cálculo do experimento crítico definido na Referência [5], representado por cilindros contendo uma mistura de nitrato de plutônio e nitrato de urânio em solução aquosa e completamente refletido por H₂O, designado por convenção neste trabalho por padrão A-I, I = 1 a 4. Os resultados são comparados com os encontrados na literatura, na qual encontra-se que, para problemas térmicos contendo plutônio, os resultados obtidos para o k_{eff} são em geral superestimados (Referências [4] e [6]).

Logo, este trabalho é uma verificação da metodologia computacional desenvolvida na Divisão de Física de Reatores do IPEN e, ao mesmo tempo, um estudo comparativo dos fatores efetivos de multiplicação de neutrons obtidos a partir das várias bibliotecas de dados nucleares, quais sejam, ENDF/B-IV, JENDL-2 e, principalmente, a JENDL-3, recentemente liberada.

METODOLOGIA DE CÁLCULO

A metodologia de cálculo empregada

neste trabalho consiste do acoplamento dos sistemas NJOY/AMPX-II/KENO-IV. Esta metodologia encontra-se descrita com algum detalhe em trabalho apresentado no VII ENFIR [7], onde foram analisados os problemas-padrão rápidos GODIVA e JEZEBEL. Dessa forma, este trabalho pode ser considerado uma seqüência daquele, no qual estuda-se agora sistemas moderados. Os cálculos utilizam as bibliotecas básicas de dados nucleares: ENDF/B-IV, JENDL-2 e JENDL-3 (esta última disponível recentemente). Também foram feitos alguns cálculos usando a própria biblioteca do KENO-IV [8]. A estrutura de grupos de energia é de 85 grupos no módulo XSDRNP do AMPX-II, sendo constituída da estrutura térmica do EPRI-CELL [9] (36 grupos no intervalo de energia de 1,000E-05 eV a 1,855 eV) e da estrutura epitérmica do programa HAMMER-TECHNION [10] (49 grupos no intervalo de energia de 1,855eV a 10,0 MeV). Finalmente, as constantes nucleares são colapsadas em 16 grupos para o cálculo de Monte Carlo no KENO-IV. Um esquema simplificado da metodologia é dado na Figura 1, abaixo.

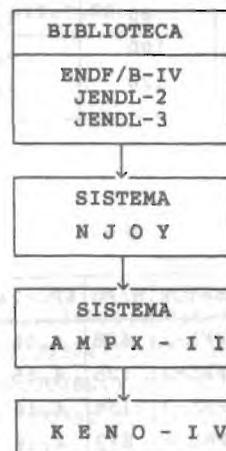


Figura 1. Metodologia de Cálculo

Ainda, com referência à metodologia de cálculo, cabem algumas observações:

1) No caso do hidrogênio ligado na molécula de H₂O, a matriz de espalhamento térmico foi obtida a partir das leis de espalhamento da biblioteca ENDF/B-III, para todos os casos analisados.

2) Nos cálculos efetuados a partir da biblioteca JENDL-2, os dados do H, O e N provieram da ENDF/B-IV. O oxigênio e o nitrogênio não constam da JENDL-2

3) O Pu-239 requer o tratamento de Reich-Moore, não incluído na versão do NJOY que dispomos. Um tratamento à parte foi efetuado, utilizando os códigos LINEAR [11], e RECENT [12] (Versões 89.1) e, então, manipulando-se os dados para um formato compatível para o processamento no NJOY.

4) O tratamento da autoblindagem de ressonâncias resolvidas foi elaborado com o

módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II, considerando-se meio infinito.

5) Nos cálculos com o módulo XSDRNPM do sistema AMPX-II, tomou-se ordem de espalhamento P₃ e ordem de quadratura S₈. Os casos que utilizam opções diferentes de P₃S₈, estão explícitos no texto.

6) Os cálculos com o KENO-IV foram elaborados com 50.000 histórias de neutrons, em grupos de 500. Opções de cálculo diferentes são especificados onde aparecerem no texto.

RESULTADOS OBTIDOS

Os resultados obtidos para os problemas padrão da série PNL são apresentados nas Tabelas 1 a 5. Os resultados correspondentes obtidos na literatura encontram-se na Tabela 6 [4] e Tabela 7 [13]. A Tabela 8 fornece os fatores efetivos de multiplicação de neutrons para os experimentos críticos definidos na Referência [5] (experimentos A-I, I = 1 a 4).

Tabela 1 - PNL-5: Fatores efetivos calculados com o XSDRNPM (metodologia NJOY/AMPX-II)

P ₁ S _n	JENDL-3	P ₁ S _n	JENDL-3
P ₁ S ₄	1,00520	P ₃ S ₄	1,00872
P ₁ S ₈	1,00352	P ₃ S ₈	1,00661
P ₁ S ₁₆	1,00297	P ₃ S ₁₆	1,00603
P ₁ S ₃₂	1,00280	P ₃ S ₃₂	1,00585

Tabela 2 - PNL-5: Fatores efetivos calculados com o XSDRNPM: influência do número de malhas espaciais.

MALHAS	JENDL-3
20	1,00680
40	1,00675
60	1,00661
80	1,00655
100	1,00642
120	1,00626

Tabela 3 - PNL-5: Fatores efetivos calculados com o KENO-IV: influência do número de histórias.

HISTÓRIAS	JENDL-3
1.000	0,97735±0,03684
5.000	1,00095±0,01260
10.000	1,01138±0,00768
50.000	1,00838±0,00438
100.000	1,00811±0,00290
500.000	1,00462±0,00128
1.000.000	1,00519±0,00090

Tabela 4 - PNL-I: Fatores de multiplicação calculados com o XSDRNPM (metodologia NJOY/AMPX-II)

REATOR	H/Pu	%Pu-240	ENDF/B-IV	JENDL-2	JENDL-3
PNL-1	668	4,58	1,02063	1,02309	1,01299
PNL-2	125	4,55	1,01937	1,02136	1,00950
PNL-3	1154	4,18	0,99862	1,00108	0,99409
PNL-4	873	4,18	1,00724	1,00974	1,00249
PNL-5	554	4,15	1,01423	1,01662	1,00661

Tabela 5 - PNL-I: Fatores de multiplicação calculados com o KENO-IV (metodologia NJOY/AMPX-II/KENO-IV).

REATOR	H/Pu	%Pu-240	ENDF/B-IV	JENDL-2	JENDL-3
PNL-1	668	4,58	1,02659±0,00468	1,02134±0,00400	1,01363±0,00402
PNL-2	125	4,55	1,01302±0,00421	1,02120±0,00449	1,00879±0,00369
PNL-3	1154	4,18	0,99462±0,00369	0,99440±0,00343	0,99471±0,00349
PNL-4	873	4,18	1,00230±0,00358	1,00381±0,00363	1,00474±0,00373
PNL-5	554	4,15	1,01314±0,00381	1,01960±0,00437	1,00838±0,00438

Tabela 6 - Padrões PNL-I: Fatores de multiplicação apresentados na Referência [4]

REATOR	H/Pu	%Pu-240	ENDF/B-IV (média) *	ENDF/B-V LANL (MCNP)
PNL-1	668	4,58	1,0215±0,0039	1,0211±0,0021
PNL-2	125	4,55	1,0185±0,0082	-
PNL-3	1154	4,18	1,0002±0,0024	1,0003±0,0023
PNL-4	873	4,18	1,0089±0,0026	1,0072±0,0023
PNL-5	554	4,15	1,0147±0,0044	1,0110±0,0024

* média de vários cálculos de Monte Carlo.

Tabela 7 - PNL-I: Fatores efetivos de multiplicação calculados com o código VIN-JAERI [13].

REATOR	H/Pu-239	JENDL-2	JENDL-3
PNL-1	700	1,023±0,006	1,019±0,006
PNL-2	131	1,019±0,007	0,990±0,007
PNL-3	1204	1,002±0,005	0,989±0,005
PNL-4	911	1,010±0,006	1,004±0,006
PNL-5	578	1,009±0,005	0,993±0,007
MÉDIA	-	1,013±0,006	0,999±0,006

Tabela 8 - Padrões A-I: Fatores efetivos de multiplicação determinados com o KENO-IV (metodologia NJOY/AMPX-II/KENO-IV)

R(cm)	H(CM)	KENO-IV	ENDF/B-IV	JENDL-2	JENDL-3
12,713	51,80	1,01448±0,00358	1,02778±0,00354	1,03190±0,00347	1,01460±0,00338
15,310	28,64	1,02548±0,00402	1,02788±0,00400	1,03684±0,00374	1,01501±0,00335
18,995	20,05	1,01645±0,00404	1,01665±0,00385	1,03256±0,00380	1,02324±0,00410
25,360	14,94	1,01616±0,00383	1,01077±0,00365	1,01529±0,00362	1,00924±0,00368

ANÁLISE DOS RESULTADOS

A Tabela 1 mostra os resultados para os k_{ef} , em função das ordens de espalhamento e de quadratura angular (P_1S_n), obtidos com o módulo XSDRNPM do sistema AMPX-II, para o problema-padrão PNL-5, utilizando-se a biblioteca JENDL-3. Observa-se daí, que os resultados numéricos do k_{ef} aumentam levemente quando passamos de P_1 a P_3 e decrescem suavemente com o aumento da ordem de quadratura. Nota-se, também, que a aproximação P_3S_8 fornece resultados satisfatórios para os problemas em questão, quando comparados aos experimentais.

Ainda, com referência ao PNL-5 e à biblioteca JENDL-3, usando a aproximação P_3S_8 , um estudo da tendência do k_{ef} com o número de malhas espaciais no XSDRNPM é mostrado na Tabela 2 e um estudo com a variação do número de histórias de neutrons no KENO-IV é visto na Tabela 3. Observa-se da Tabela 2 que, variando-se o número de malhas espaciais de 20 malhas (1,006 cm) para 120 malhas (0,168 cm), a variação no valor do k_{ef} não é significativa (0,0054%). Da Tabela 3, verifica-se que, tomando-se 50.000 histórias de neutrons no cálculo com o KENO-IV, obtém-se uma boa estatística: considerando-se os valores médios, uma variação de 0,32% no k_{ef} ocorre quando passa-se de 50.000 para 1.000.000 de histórias.

Estas considerações justificam a escolha das opções P_3S_8 e 60 malhas espaciais no XSDRNPM, e 50.000 histórias de neutrons no KENO-IV, nos cálculos cujos resultados são apresentados nas Tabelas 4, 5 e 8.

A Tabela 4 fornece os k_{ef} calculados com o XSDRNPM referentes aos padrões PNL-I, I=1 a 5, partindo-se das bibliotecas ENDF/B-IV, JENDL-2 e JENDL-3. A Tabela 5 mostra os valores correspondentes calculados com o KENO-IV. Nota-se, a consistência dos resultados, referentes à biblioteca ENDF/B-IV, ao comparar-se com os correspondentes na Tabela 6 extraída da Referência [4]. Os resultados relativos às bibliotecas JENDL-2 e JENDL-3 são, aproximadamente, consistentes com os correspondentes apresentados na Tabela 7, extraídos da Referência [13]. Isto assegura um bom grau de coerência dos resultados obtidos com a metodologia de cálculo usada neste trabalho, com os resultados apresentados na literatura internacional. Observa-se, que a Tabela 6 mostra, também, os resultados baseados na biblioteca ENDF/B-V.

A Tabela 8 refere-se aos problemas padrão A-I, I=1 a 4, onde os k_{ef} foram calculados a partir das bibliotecas ENDF/B-IV, JENDL-2, JENDL-3 e da biblioteca própria do KENO-IV. Os valores obtidos são superestimados, mas são coerentes com os apresentados nas Referências [4] e [6] para experimentos críticos similares.

CONCLUSÕES

Observando-se globalmente os resultados apresentados acima, pode-se concluir, em resumo, os seguintes aspectos:

1) A metodologia de cálculo empregada neste trabalho fornece resultados consistentes com os apresentados na literatura internacional, referentes à biblioteca ENDF/B-IV. Com relação às bibliotecas JENDL-2 e JENDL-3, o grau de concordância dos resultados é menor.

2) Nos cálculos com o módulo XSDRNPM do sistema AMPX-II, a opção P_3S_8 e malhas espaciais entre 0,16 cm e 1,0cm, dão resultados satisfatórios.

3) Nos cálculos com o programa de Monte Carlo KENO-IV, tomando-se 50.000 histórias de neutrons, obtém-se uma boa estatística.

4) Os valores obtidos para os k_{ef} são crescentes, respectivamente, a partir das bibliotecas de dados nucleares JENDL-3, ENDF/B-IV e JENDL-2. A biblioteca ENDF/B-V apresentou resultados próximos à JENDL-2 e a biblioteca do KENO-IV, próximos à JENDL-3.

5) Para a categoria de problemas estudados, de modo geral, a JENDL-3 forneceu os melhores resultados.

6) Com referência aos experimentos críticos A-I, os valores dos k_{ef} obtidos são superestimados. Isto pode decorrer, talvez, de alguma incerteza na especificação de sua composição.

7) Observa-se, finalmente, que os resultados obtidos com o XSDRNPM são, teoricamente, mais precisos do que os obtidos com o KENO-IV. Isto deve-se ao fato do primeiro utilizar a aproximação P_3 e 85 grupos de energia e o segundo, a aproximação P_1 e 16 grupos de energia.

Como vantagem da metodologia deste trabalho, destaca-se a boa qualidade dos resultados obtidos e a vasta gama de aplicações, o que a torna um padrão de referência para verificação de cálculos menos elaborados. Como desvantagem, cita-se o laborioso trabalho computacional, requerendo-se grandes quantidades de memória e tempo de computador.

Em trabalhos futuros pretende-se analisar outros sistemas moderados, particularmente, aqueles contendo compostos de urânio e plutônio em dispersões aquosas.

REFERÊNCIAS

- [1] 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.
- [2] Greene, N. M., Ford III, W. E. et alii, "AMPX-II: A Modular Code System for Generating Coupled Multigroup Neutron-Gamma Libraries from Data in ENDF Format" PSR-63, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- [3] Petrie, L. M., "KENO-IV: An Improved Monte Carlo Program", ORNL-4938, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee (1975).
- [4] Hardy, J., "ENDF/B Data Testing Results for Thermal Reactor Benchmarks", Bettis Atomic Power Laboratory, Pittsburgh, Proceedings of Thermal Reactor Benchmark Calculations: Techniques, Results and Applications, EPRI-NP-2855, Feb. 1983.

- [5] Bierman, S. R., "Critical Experiments Benchmarks (Pu-U Systems)", Nuclear Technology, vol. 26, n. 3, pp. 352-381, July, 1975.
- [6] Primm, R. T. and Mincey, J. F., "Calculated k-effectives for Light Water Reactor Typical, U + Pu Nitrate Solution Critical Experiments", Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee. Proceedings of Thermal Reactor Benchmark Calculations: Techniques, Results and Applications, Applications, EPRI-NP-2855, Feb. 1983.
- [7] Ferreira, C. R. e Santos, A., "Análise de Criticalidade Utilizando-se os Sistemas NJOY, AMPX-II e KENO-IV", Anais do VII ENFIR, Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica, 26 a 28 de Abril de 1989, Recife PE, Vol. I.
- [8] Hansen, G. E., Roach W. H. "Six and Sixteen Group Cross Sections for Fast and Intermediate Critical Assemblies", Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico, LAMS-2543, 1961.
- [9] "ARMP: Advanced Recycle Methodology Program", EPRI-CCM-3, Electric Power Research Institute, Sep. 1977.
- [10] Barhen, J., Rothenstein, W., Taviv, E., "The HAMMER Code System" NP-565, Electric Power Research, Palo Alto, California, October 1978.
- [11] 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.
- [12] Cullen, D. E., "Program RECENT: Reconstruction of Energy-Dependent Neutron Cross-Sections from Resonance Parameters in the ENDF/B Format", UCRL-50400, Lawrence Livermore Laboratory, October 1979.
- [13] Takano, H., Kaneko, K. and Nakagawa, T., Benchmark Tests of JENDL-3 for Thermal and Fast Reactors, Japan Atomic Energy Research Institute. Proceedings of International Conference on the Physics of Reactors: Operation, Design and Computation - PHYSOR-90", Ap. 23-27, 1990, Marseille - France, Vol. 3.

SUMMARY

Employing the calculational methodology based on a coupled NJOY/AMPX-II/KENO-IV system developed at IPEN/CNEN-SP, benchmark calculations have been performed for the PNL series and for the critical experiment composed of plutonium and uranium nitrates in a H₂O solution, fully reflected by water. The ENDF/B-IV, JENDL-2 and JENDL-3 nuclear data libraries are accessed to produce multigroup libraries for the final XSDRNPM and KENO-IV k_{eff} calculations. It was found that the JENDL-3 gives a very good improvement for the long-standing k_{eff} overprediction in this kind of critical systems.