



22 a 27 de abril de 1990

ANAIS - PROCEEDINGS

**ELABORAÇÃO DE UMA INTERFACE AMPX-II/HAMMER-TECHNION**

ADIMIR DOS SANTOS;  
CARLOS ROBERTO FERREIRA  
EDNA MARIA LOPEZ

COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR  
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGETICAS E NUCLEARES  
DEPARTAMENTO DE TECNOLOGIA DE REATORES  
DIVISÃO DE FÍSICA DE REATORES  
Caixa Postal 11049 - Pinheiros  
CEP 05499 - São Paulo - Brasil

**SUMÁRIO**

Neste trabalho, elaborou-se uma interface entre o sistema AMPX-II e o código HAMMER-TECHNION, sendo o pré-processamento dos dados nucleares efetuados com o sistema NJOY. A autoblindagem mútua das ressonâncias resolvidas dos núclídeos actínídeos é tratada pelo módulo ROLAIDS do AMPX-II, sendo que o HAMMER-TEC foi alterado com a inclusão do fator de desvantagem epitérmica proposto por MacFarlane e utilizada no EPRI-CELL. Utilizando-se a metodologia de cálculo desenvolvida neste trabalho foram analisados experimentos críticos da CSEWG e os da série DIMPLE, incluindo o experimento recente realizado na Inglaterra. Os dados nucleares provieram da ENDF/B-IV a não ser os do U-235 e do U-238 que referem-se à ENDF/B-V e JENDL-2, respectivamente. Os resultados obtidos apresentam boa concordância com os experimentais.

**ABSTRACT**

In this work, an interface between the AMPX-II system and the HAMMER-TECHNION code was elaborated. In the proposed scheme, the nuclear data library pré-processing is performed by the NJOY system. The mutual shielding of the actinide resolved resonances is treated by using the module ROLAIDS of the AMPX-II. The epithermal disadvantage factors as proposed by MacFarlane and utilized in the EPRI-CELL code was implemented into the HAMMER-TECHNION code. The proposed methodology performed was tested against CSEWG critical experiments and the DIMPLE series, including the recent experiment realized in England. The ENDF/B-IV nuclear data was used for all nuclides but U-235 and U-238 which was used the ENDF/B-V and JENDL-2 nuclear data, respectively. The results obtained are in good agreement with the published experimental values.

## 1. INTRODUÇÃO

A análise de experimentos críticos é essencial para testar a aplicabilidade dos dados nucleares utilizados nos códigos de geração de constantes de grupo, como também, na análise do desempenho dos métodos numéricos utilizados por esses programas. É fundamental que a análise de experimentos críticos seja feita com bibliotecas de dados nucleares atualizadas e com métodos numéricos e analíticos bem estabelecidos. O objetivo deste trabalho é apresentar um procedimento para a análise de experimentos críticos baseado nos sistemas NJOY/1/ e AMPX-II/2/ e o código HAMMER-TECHNION/3/. No procedimento proposto, todas as seções de choque serão geradas com o sistema NJOY, ao invés do procedimento usual baseado nos códigos ETOG-3/4/ e FLANGE-II/5/. Do ponto de vista de qualificação de processamento de dados nucleares o sistema NJOY preenche todos os requisitos, visto que atendeu todos os requisitos no projeto recente de verificação de códigos de pré-processamento de dados nucleares, promovido pela IAEA/6/.

A autoblindagem mútua das ressonâncias dos núclídeos actínídeos será calculada utilizando o módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II. O módulo ROLAIDS possui vantagens em relação ao procedimento de cálculo implementado no HAMMER-TECHNION, visto que não há limitações no número de núclídeos que compõem a célula unitária e pode, inclusive, calcular seções de choque efetivas em função do raio da pastilha combustível. Como resultado, o módulo, ROLAIDS produz seções de choque efetivas para cada núclídeo e multigrupo e por superzona na região de ressonâncias resolvidas. Em todos os casos analisados neste trabalho, a célula unitária será descrita por três zonas: pastilha combustível, revestimento e moderador, de tal forma que cada núclídeo da região combustível será representado por um único conjunto de seções de choque efetivas.

A formatação das bibliotecas binárias (rápida e térmica) do HAMMER-TECHNION é obtida subsequentemente por duas versões modificadas do módulo NITAWL do sistema AMPX-II e com os programas HELP/3/ e LITHE/3/.

A seguir, para que haja consistência entre as seções de choque efetivas calculadas pelo módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II e as seções de choque homogêneas requeridas pelo cálculo do espectro epitérmico (MUFT), foi implementado no código HAMMER-TECHNION o fator de desvantagem epitérmica sugerido por MacFarlane/7/. Esses fatores foram aplicados somente nos grupos de 25 a 54. Nos demais grupos foi utilizado o procedimento original do código HAMMER-TECHNION.

Finalmente, neste trabalho serão utilizados os dados nucleares do U-238 da biblioteca JENDL-2 ao invés dos da ENDF/B-IV. Os dados nucleares do U-238 da JENDL-2 têm-se mostrado melhores do que os da ENDF/B-IV/8/.

## 2. METODOLOGIA DE CÁLCULO

A metodologia de cálculo utilizada neste trabalho é apresentada na Figura 2.1. O processamento dos dados nucleares começa com o sistema NJOY. Inicialmente, são produzidos dois tipos de seções de choque: seções de choque pontuais linearmente interpoláveis para utilização no ROLAIDS e seções de choque de multigrupo numa estrutura de energia compatível com a utilizada no HAMMER-TECHNION. As seções de choque pontuais são calculadas na sequência MODER-RECONR-BROADR-UNRESR e subsequentemente escritas num formato compatível com o módulo ROLAIDS, utilizando o programa BRDROL/9/. As seções de choque de multigrupo, calculadas pelo módulo GROUPE do sistema NJOY, são transformadas na estrutura da biblioteca MASTER do sistema AMPX-II utilizando-se o programa AMPXR/9/. As bibliotecas térmica (30

grupos) e epitérmica (54 grupos) são obtidas através da execução sucessiva do módulo GROUPE do sistema NJOY.

Seguindo a estrutura da metodologia de cálculo da Figura 2.1, existe um ramo para a elaboração da biblioteca binária térmica e um ramo para a biblioteca epitérmica. O ramo correspondente a elaboração da biblioteca epitérmica começa com a execução do módulo ROLAIDS. Aqui são produzidas seções de choque efetivas autoblindadas para a aplicação de interesse. A região de ressonâncias resolvidas compreendeu o intervalo de energia entre 0,625 ev e 5.53 kev, o qual corresponde em grande parte à região de ressonâncias resolvidas do  $^{238}\text{U}$ . O módulo CLAROL do AMPX-II substitui as seções de choque autoblindadas na biblioteca MASTER epitérmica do AMPX-II. A consistência dessa biblioteca é verificada pelo módulo RADE e, se houver alguma inconsistência na seção de choque total ou na normalização das matrizes de espalhamento, o módulo COMET se encarrega de consertar. O segundo RADE é executado para verificar se a tarefa do COMET foi executada com êxito. Neste ponto, a biblioteca MASTER epitérmica se encontra pronta para a formatação para o HAMMER-TECHNION. Para este propósito foi feita uma versão especial do módulo NITAWL do sistema AMPX-II, denominada EPLIB.

Basicamente, o procedimento adotado para a elaboração da biblioteca epitérmica seguiu, em grande parte, o procedimento do ETOG-3. A seção de choque ( $n,2n$ ) foi adicionada duas vezes à seção de choque inelástica e subtraída uma vez da seção de choque de captura. Desta forma, nos grupos em que a seção de choque ( $n,2n$ ) é diferente de zero, as seções de choque inelástica e de captura serão fictícias e levarão em consideração o efeito do processo ( $n,2n$ ) indiretamente. O que fica implícito neste procedimento é que o espectro de emissão dos dois neutrons da reação ( $n,2n$ ) é o mesmo do espalhamento inelástico. Outros tipos de reação como ( $n,3n$ ) e ( $n,4n$ ) não são levados em consideração pelo procedimento do sistema HAMMER-TECHNION e foram desprezados neste trabalho.

O arquivo escrito pelo EPLIB não conterá parâmetros de ressonância comumente utilizado pelo método de Nordheim/10/. A biblioteca binária epitérmica final para o HAMMER-TECHNION é escrita pelo programa HELP.

Ao contrário do caso da biblioteca epitérmica, a biblioteca térmica requerida para o HAMMER-TECHNION é independente da aplicação para uma dada temperatura. Neste caso também foi elaborada uma versão especial do módulo NITAWL, denominada THLIB. A versão modificada do módulo NITAWL, basicamente transforma a biblioteca MASTER térmica (30 grupos) num formato compatível com o programa LITHE. Na região térmica a transformação não foi efetuada tão diretamente como no caso da região epitérmica. A complicação adveio do fato do programa LITHE exigir a matriz de transferência em unidades de velocidade ao invés de por unidade de energia, como é o padrão da biblioteca MASTER. Para este objetivo foi efetuada a seguinte transformação na matriz de transferência:

$$P'(v_i \rightarrow v_j) = \frac{\sigma_{g_i \rightarrow g_j}}{\Delta E_{g_j}}$$

onde  $i, j$  refere-se aos grupos de velocidades  $v_i$  e  $v_j$  e  $g_{ij}$  denota o grupo correspondente de energia. Detalhes desta transformação podem ser encontrados nas Referências /2/ e /11/. A transformação foi efetuada até a primeira ordem de espalhamento (P1). Para acomodar as seções de choque formatadas pelo THLIB, algumas modificações foram feitas no programa LITHE. A versão original desse programa requer que a matriz de espalhamento seja triangular inferior; ou seja, somente são exigidos os termos de "downscattering". O "upscattering" é calculado pelo uso do balanço detalhado /12/. Entretanto, os dados produzidos pelo módulo GROUPE e formatados pelo THLIB são matricialmente

completos. Dessa forma, o programa LITHE foi modificado para acomodar a matriz de espalhamento calculada pelo GROUPR. Após a formatação binária pelo LITHE, a elaboração das bibliotecas térmica e epitérmica do HAMMER-TECHNION fica completamente estabelecida.

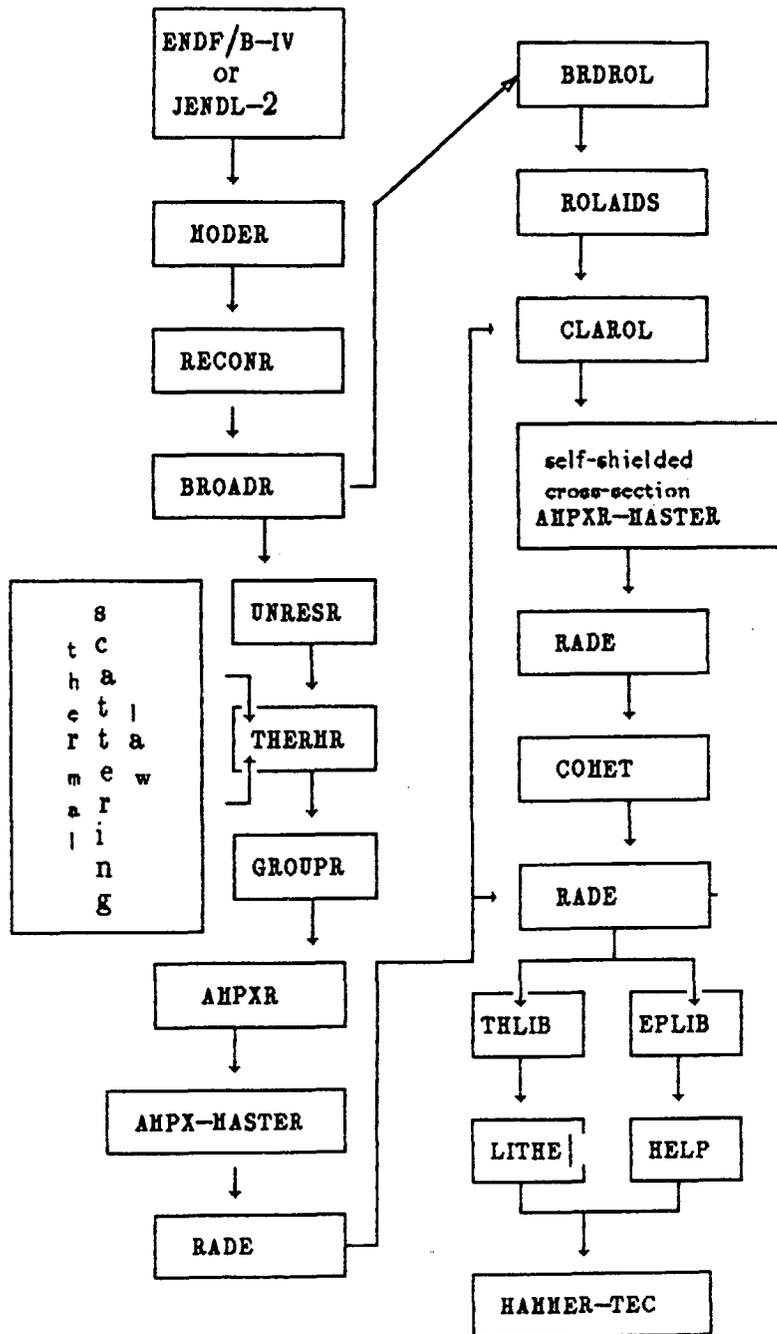


Figura 1. Metodologia de Cálculo.

A última parte da metodologia de cálculo refere-se à execução do código HAMMER-TECHNION, com a implementação do fator de desvantagem epitérmico sugerido por MacFarlane. O fator de desvantagem epitérmico é calculado admitindo um problema de duas regiões (combustível e moderador), e faz uso da aproximação racional de Wigner /13/ para a probabilidade de escape do combustível. Para a determinação da seção de choque de escape foi utilizado o procedimento do EPRI-CELL /14/, onde utiliza-se o fator de Bell /15/ e o fator de Dancoff /16/; os fatores intermediários de ressonância foram extraídos da Referência /12/.

### 3. DESCRIÇÃO DOS EXPERIMENTOS CRÍTICOS

A parte principal na verificação do desempenho dos métodos de cálculo, como também, dados nucleares é a escolha dos experimentos críticos que servirão como padrões de comparação. Neste trabalho foram selecionados cinco problemas padrões da CSEWG /17/ (BAPL e TRX) e três experimentos críticos com revestimento de aço inox do projeto DIMPLE /18/. Além disso foram feitas comparações com os resultados experimentais do arranjo S01 do projeto DIMPLE recentemente reativado na Inglaterra /19/.

### 4. ANÁLISE DOS RESULTADOS OBTIDOS

Nos cálculos realizados neste trabalho, foram utilizados os seguintes núclídeos:

<u>Núclídeo</u>	<u>ID</u>	<u>Biblioteca</u>
U-238	2925	JENDL-2
U-235	1395	ENDF/B-V
O-16	1276	ENDF/B-IV
H-1	1269	ENDF/B-IV
Fe-nat.	1192	ENDF/B-IV
Ni-nat.	1190	ENDF/B-IV
Cr-nat.	1191	ENDF/B-IV
Mn-55	1197	ENDF/B-IV
Si-nat.	1194	ENDF/B-IV

A única modificação feita nos dados nucleares foi a utilização do  $\nu_{th}$  do U-235 do ENDF/B-IV (=2.4188), ao invés do  $\nu_{th}$  do ENDF/B-V. O  $\nu_{th}$  do U-235 do ENDF/B-IV tem-se mostrado melhor /20/ na comparação entre valores medidos e calculados.

Inicialmente serão discutidos os resultados obtidos para as unidades críticas BAPL e TRX por se tratar de problemas considerados padrões clássicos. A comparação dos resultados calculados e experimentais é mostrada na Tabela 4.1. O módulo ROLAIDS foi executado com uma malha de energia de 42585 pontos.

Pela análise da Tabela 4.1 observa-se os seguintes detalhes: os k-efetivos calculados com os dados nucleares e modificação no HAMMER-TECHNION propostos neste trabalho estão em excelente concordância com os resultados experimentais e apresentam uma sensível melhora em relação ao sistema HAMMER original. Além disso, observa-se uma leve tendência do k-efetivo aumentar conforme a razão de moderação aumenta. Este aspecto será mais evidente nos experimentos críticos do projeto DIMPLE. A razão dessa distorção é em grande parte explicada pelo comportamento do  $\rho_{28}$ . O  $\rho_{28}$  é uma medida do desempenho do código e biblioteca de dados nucleares calcular a autoblindagem dos núclídeos actínídeos. Observando os resultados da Tabela 4.1 nota-se que a diferença entre o valor calculado e o valor medido diminui quando a razão de moderação aumenta. Esse aspecto é mais evidente nas unidades críticas TRX-1 e TRX-2, tornando-se negativa na unidade crítica TRX-2. Como o  $\rho_{28}$  é, na realidade, uma boa indicação da taxa de absorção nas ressonâncias do U-238, o k-efetivo tende a ser subestimado quando o  $\rho_{28}$  é superestimado e vice-versa. Esse tipo de tendência deve ser observado para que não haja conclusões precipitadas com relação ao k-efetivo.

Tabela 4.1 Comparação entre Parâmetros Integrais Medidos e Calculados

	BAPL-1	BAPL-2	BAPL-3	TRX-1	TRX-2
$k_{eff}$					
Exp.	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
H-Tec*	0,9973	0,9985	0,9996	0,9961	0,9972
Hammer	0,9935	0,9958	0,9981	0,9902	0,9955
$\rho_{28}$					
Exp.	1,39	1,12	0,906	1,320	0,837
	$\pm 0,01$	$\pm 0,01$	$\pm 0,001$	$\pm 0,002$	$\pm 0,015$
H-Tec*	1,4169	1,1724	0,9146	1,3325	0,8277
Hammer	1,402	1,159	0,903	1,320	0,816
$\delta_{25}$					
Exp.	0,084	0,068	0,052	0,0987	0,0614
	$\pm 0,002$	$\pm 0,001$	$\pm 0,001$	$\pm 0,001$	$\pm 0,0008$
H-Tec*	8,1599E-02	6,3696E-02	5,092E-02	9,5329E-02	5,8553E-02
Hammer	8,061E-02	6,537E-02	4,996E-02	9,621E-02	5,841E-02
$\delta_{28}$					
Exp.	0,078	0,070	0,057	0,0946	0,0693
	$\pm 0,004$	$\pm 0,004$	$\pm 0,003$	$\pm 0,0002$	$\pm 0,0035$
H-Tec*	7,4110E-02	7,3630E-02	5,222E-02	9,4867E-02	6,7393E-02
Hammer	7,399E-02	6,345E-02	5,187E-02	9,530E-02	6,710E-02

(\*) versão utilizada neste trabalho

Os resultados obtidos para o  $\rho_{28}$  calculados com o U-238 da JENDL-2 encontram-se em boa concordância com os resultados experimentais, evidenciando a boa qualidade dos dados nucleares do U-238 da JENDL-2, como também, o bom desempenho da metodologia de cálculo utilizada nesse trabalho. Finalmente, com relação ao  $\delta_{25}$  e  $\delta_{28}$ , os resultados obtidos neste trabalho apresentam melhoras em relação ao sistema HAMMER original e também uma boa concordância com os valores experimentais.

Os resultados obtidos para as unidades críticas de revestimento de aço inox são apresentados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2.  $k_{eff}$  para os núcleos da Unidade Crítica de Aço inox DIMPLE (\*) Referência /18/.

NÚCLEO (*)	HAMMER-TEC (Carlvik)	HAMMER-TEC (std. Thermos)	HAMMER (std. Thermos)
R1/100H	1,0011	0,99927	0,99319
R2/100H	1,0075	1,0055	1,0055
R3/100H	0,9988	0,9966	0,99055

Também neste caso os resultados obtidos para o k-efetivo na metodologia de cálculo deste trabalho são de muito boa qualidade e melhores que os obtidos pelo sistema HAMMER original. A distorção da curva k-efetivo versus razão de moderação é mais pronunciada neste caso do que no caso das unidades críticas BAPL e TRX.

Recentemente, o arranjo crítico DIMPLE/S01 foi reativado na Inglaterra e vários parâmetros foram reavaliados com técnicas experimentais recentes. O parâmetro celular experimental comparado nesse trabalho é a taxa de conversão /19/. Este parâmetro é sensível à taxa de captura epitérmica no U-238, uma vez que, pela sua definição, incertezas nos dados nucleares na região térmica tendem a cancelarem-se mutuamente. Dessa forma, será um bom teste para os dados nucleares do U-238 da JENDL-2, como também, para a metodologia de cálculo utilizada neste trabalho. Os resultados são mostrados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3. Taxas de conversão medida e calculadas para o núcleo DIMPLE-I.

HAMMER-TEC	WIMS	EXP.
4,3038	4,1742	4,29±0,02

O resultado obtido para a taxa de conversão na metodologia de cálculo deste trabalho foi simplesmente de excelente qualidade, dentro da incerteza experimental e inclusive superior ao obtido pelos Ingleses com o programa WIMS.

## 5. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

A metodologia de cálculo proposta neste trabalho para a análise de experimentos críticos mostrou que com o conhecimento atual na área de dados nucleares e métodos de cálculo disponíveis na literatura e nos códigos utilizados neste trabalho, pode-se chegar a resultados de muito boa qualidade. Do ponto de vista de dados nucleares, o U-238 da JENDL-2 teve um desempenho que pode ser considerado promissor e inclusive superior em qualidade ao U-238 da ENDF/B-IV. Além disso, convém salientar que os métodos numéricos e analíticos utilizados no sistema NJOY e no módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II encontram-se num excelente estágio de evolução.

Como sugestão, para trabalhos futuros, recomenda-se o tratamento explícito da reação (n,2n) no HAMMER-TECHNION. Além disso, o tratamento da autoblindagem dos núclídeos actínídeos subdividindo-se a pastilha combustível em várias regiões. Dessa forma, o comportamento espacial da autoblindagem dos núclídeos estará plenamente levado em consideração. A não consideração do comportamento espacial da autoblindagem dos núclídeos actínídeos pode em grande parte justificar a distorção da curva k-efetivo versus razão de moderação.

## 6. REFERÊNCIAS

- 1) R. E. MACFARLANE, D. W. MUIR, and R.T BOICOURT: "The NJOY Nuclear Data Processing System, Vol. II: The NJOY RECONR, BROADR, HEATR, and THERMR modules", Los Alamos National Laboratory report LA-9303-M, Vol.II (ENDF-324) May 1982.
- 2) GREENE, N.M.; et ali - AMPX-II - Modular Code System for Generation Coupled Multigroup Neutron Gamma-Ray Cross-Section Libraries From a ENDF Format, PS-63, Tennessee (1978).

- 3) BARHEN, J., et ali. - The HAMMER Code System, EPRI-NP-565 (1978).
- 4) BARHEN, J.; ROHTENSTEIN, W. - ETOG-3: Modification for HAMMER with ENDF/B-IV Data. Memorandum, Department of Nuclear Engineering, Technion-Israel Institute of Technology (1976).
- 5) HONECK, H.C. and FINCH, D.R. - FLANGE-II (Version 71-1): A Code to Process Thermal Neutron Data from ENDF/B Tape, Savannah River Laboratory report DP-1278 (ENDF 152) (Oct. 1971).
- 6) CULLEN, D.E. - The IAEA Cross Section Processing Code Verification Project. INDC(NDS) 170/N1.
- 7) MACFARLANE, R.E. - ENDF/B-IV and V Cross Sections for Thermal Power Reactor Analysis, in Proc. Conf. on Nuclear Cross Section for Technology, Knoxville, TN (Oct. 22-26, 1979), National Bureau of Standards Special Publication 594 (Sept. 1980).
- 8) TAKANO, et ali, - Thermal Benchmark Testes on JENDL-2, JAERI-M-83-202, (Nov. 1983).
- 9) SANTOS, A.; LOPEZ, E.M. - Elaboração de Uma Interface NJOY/AMPX-II (Relatório interno) IPEN/CNEN-SP (1987).
- 10) DRESNER, L. - Resonance Absorption in Nuclear Reactors, Pergamon Press, New York (1960).
- 11) MACFARLANE, R.E. - ENDF/B-V Cross Section Library for Reactor Cell Analysis, EPRI-NP-3418 (1984).
- 12) WILLIAMS, M.M.R. - Slowing Down and Thermalization of Neutrons, John Wiley and Sons, Inc., 1966.
- 13) WIGNER, E.P., CREUTZ, E., JUPNIK, H., and SNYDER, T.J. - Appl. Phys., 26, 260 (1955).
- 14) WILLIAMS, M.L., at ali, - Improvement in EPRI-CELL Methods and Benchmarking of the ENDF/B-V Cross Section Library, EPRI-NP-2416, Jun 1982.
- 15) BELL, G.I., - Theory of Effective Cross Sections, LA-2322, Los Alamos Scientific Laboratory (1959).
- 16) Sauer, A. - Approximate Escape Probabilities, Nucl. Sci. Eng. 16, 329 (1963).
- 17) Cross Section Evaluation Working Group Benchmarks Specifications, (BNL-19302 (1979)).
- 18) BROWN, W.A.V., at ali, - Mesurements of Material Buckling and Detailed Reaction Rates in a Series of Low Enrichment UO<sub>2</sub> Fueled Cores Moderated for Light Water, AEE-W-R502 (1967).
- 19) FINDLAY, D.J.S., at ali, - U.K. Nuclear Data Progress Report. January-December 1984, UKNDC(85) (1985).
- 20) WILLIAMS, M.L., WRIGHT, R.Q., et ali, - Analysis of Thermal Reactor Benchmarks With Design Codes Based on ENDF/B-V Data. Nuclear Technology, Vol. 71, pg. 386, Nov. 1985.