

008510711

ISSN 0101-3386

COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR

CNEN/SP

MODIFICAÇÃO NO PROGRAMA CITATION: TROCA DE SECÇÕES
DE CHOQUE MICROSCÓPICAS POR ZONA

Mitsuo Yamaguchi e Nanami Kosaka

INFORMAÇÃO IPEN 17
IPEN - Inf - 17

MARÇO/1983

**MODIFICAÇÃO NO PROGRAMA CITATION: TROCA DE SECÇÕES
DE CHOQUE MICROSCÓPICAS POR ZONA**

Mitsuo Yamaguchi e Nanami Kosaka

DEPARTAMENTO DE TECNOLOGIA DE REATORES
RTF

CNEN/SP
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
SÃO PAULO - BRASIL

Série INFORMAÇÃO IPEN

INIS Categories and Descriptors

F50

E21

BURNUP

C CODES

CROSS SECTIONS

Recebida em Abril de 1983.

Aprovada para publicação em Outubro de 1983.

Nota: A redação, ortografia, conceitos e revisão final são de responsabilidade dos Autores.

MODIFICAÇÃO NO PROGRAMA CITATION: TROCA DE SECÇÕES DE CHOQUE MICROSCÓPICAS POR ZONA

Mitsuo Yamaguchi e Nanami Kosaka

RESUMO

O trabalho consistiu em introduzir modificações no programa CITATION para calcular a queima acumulada para cada zona do reator em cada passo de queima e permitir a troca de secções de choque microscópicas para cada zona após cada passo de queima de acordo com a queima acumulada. Alguns dados de entrada foram introduzidas no programa. As alterações foram testadas e os resultados comparados com e sem as modificações.

1 – INTRODUÇÃO

O programa CITATION⁽³⁾ vem sendo largamente utilizado pelos pesquisadores da Divisão de Física de Reatores para os cálculos neutrônicos. É um programa poderoso com a capacidade de fazer inúmeros cálculos, tais como queima de combustíveis, recarga de combustível, pesquisa de criticalidade, de veneno queimável, de dimensão e concentração críticas, etc.

Esses cálculos são feitos em multigrupo, em uma, duas ou três dimensões usando a teoria de difusão e método de diferenças finitas.

Apesar de toda essa capacidade, ainda há necessidade de algumas modificações para torná-lo mais versátil e poder representar com mais precisão o comportamento real do reator. Parâmetros como queima, densidade de água, temperatura do combustível influem nas secções de choque microscópicas; desse modo há necessidade de se fazer correções nas secções de choque com a variação desses parâmetros.

Neste trabalho mostra-se a influência da queima nas secções de choque microscópicas, a qual ocasionou as modificações no programa CITATION. Com essas modificações, tornou-se possível ao programa fazer trocas de secções de choque microscópicas após cada passo de queima de acordo com a queima acumulada em cada zona do reator.

2 – SEQUÊNCIA DO TRABALHO

O objetivo principal das modificações introduzidas no CITATION, nessa fase, foi torná-lo mais eficiente nos cálculos que envolvem queima de combustível.

A Figura 1 mostra a variação das secções de choque microscópicas com a queima⁽¹⁾. Após alguns passos de queima ("burnup time step"), cada zona do reator apresentará diferentes queimas; assim é preciso utilizar a secção de choque de acordo com a queima de cada zona.

O trabalho foi desenvolvido da seguinte maneira:

- a) cálculo da queima média acumulada (em MWD/T) para cada zona e para cada passo de queima;
- b) leitura da tabela de secções de choque microscópicas versus queima para cada enriquecimento inicial do combustível;

c) troca dos conjuntos de secções de choque microscópicas em cada zona após cada passo de queima de acordo com a queima acumulada nessa zona;

d) teste e validação das modificações.

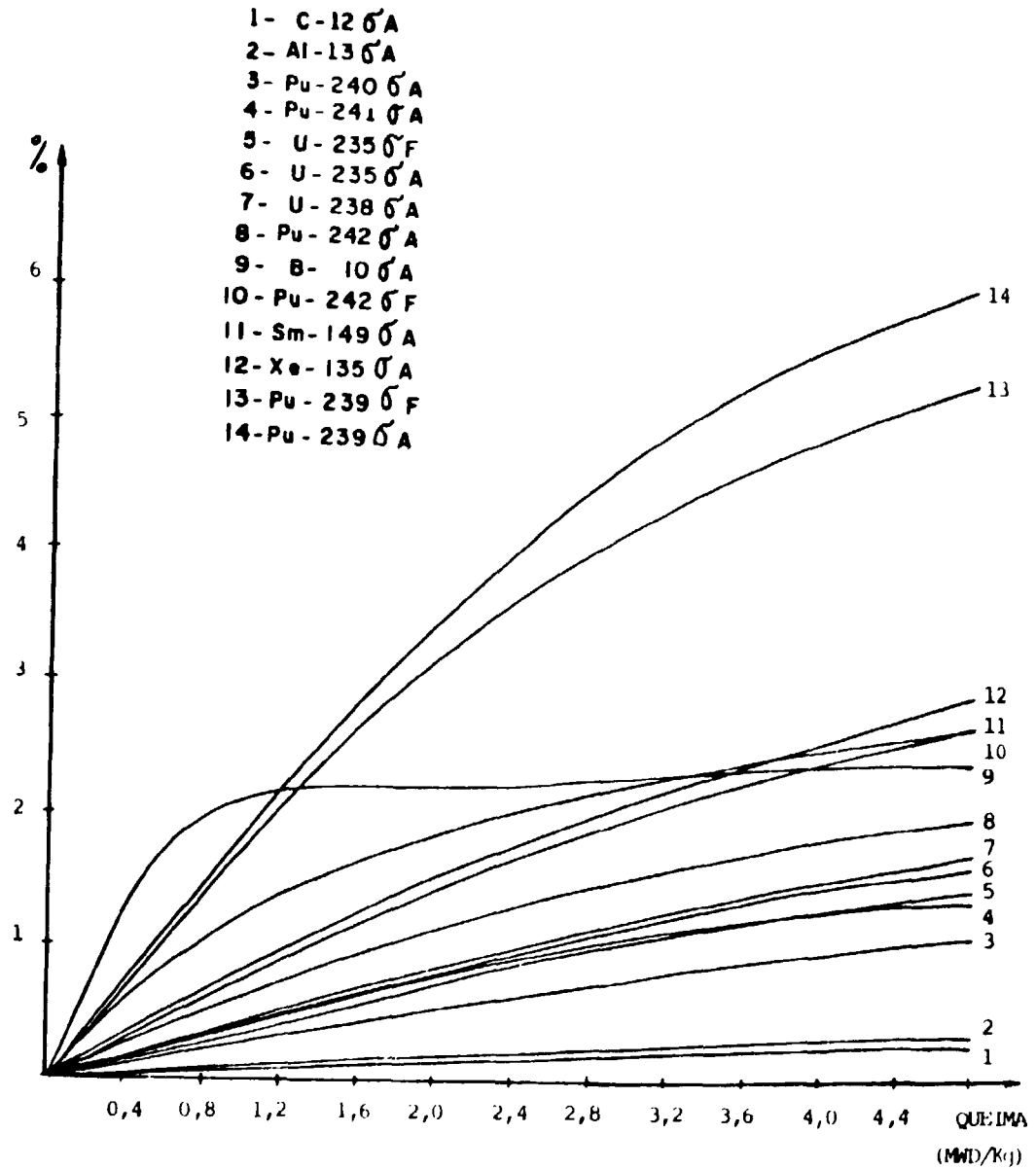


Figura 1 - Variações Percentuais das Secções de Choque Microscópicas com a Queima.

A troca dos conjuntos de secções de choque para cada zona nos cálculos, após cada passo de queima, é feita comparando-se a queima média acumulada desta zona com as queimas correspondentes às secções de choque preparadas pelos programas HAMMER ou LEOPARD, e escolhendo-se o conjunto correspondente à queima mais próxima.

O programa original do CITATION permite, em parte, a troca de secções de choque após cada passo de queima por meio de dados de entrada na secção 002, cartão 6, mas essa troca não considera as diferentes queimas apresentadas nas diversas zonas.

3 – CÁLCULO DA QUEIMA

A queima média acumulada para cada zona é calculada após cada passo de queima pela seguinte expressão:

$$B_{k,i+1} = B_{k,i} + \frac{V_k}{M_k} \rho_{k,i} \Delta T_{i+1}$$

onde:

$B_{k,i+1}$: queima acumulada da zona k no passo $i + 1$ (MWD/T);

$B_{k,i}$: queima acumulada da zona k no passo i (MWD/T);

V_k : volume da zona k (cm^3);

M_k : massa inicial do combustível na zona k (T);

$\rho_{k,i}$: densidade de potência média na zona k (MW/cm^3); e

ΔT_{i+1} : passo de queima (dias).

4 – MODIFICAÇÕES INTRODUZIDAS

CITATION é um programa bastante complexo contendo aproximadamente 200 subrotinas. Para se fazer as modificações propostas foi necessário criar variáveis, e vários comandos foram acrescentados ou modificados.

4.1 – Variáveis Criadas

A subrotina INPT traz uma descrição de todas as variáveis utilizadas no programa. Além dessas variáveis, foi necessário criar outras, como:

NBSTEP -- quantidade de dados fornecidos no cartão 7 da secção 002 (item 6);

NCONJU - número conjuntos de secções de choque que são efetivamente utilizados na troca. Esta variável é igual a NSETVX;

NXCON(50) - ordem dos conjuntos de secções de choque microscópicas no arquivo 8;

BSTEP(50) - valores das queimas correspondentes a cada conjunto de secções de choque fornecidos no cartão 7 da secção 002, em MWD/T;

QACUM(200) – queima acumulada por zona, em MWD/T;

FMASS(200) – massa inicial do combustível por zona, em kg (materiais físseis + férteis);

NXSEC(200) – valores iniciais de NXSET.

Os números entre parênteses são as dimensões das variáveis.

4.2 – Subrotinas Modificadas

Para o cálculo da queima acumulada para cada zona e para leitura e troca das secções de choque microscópicas dependentes da queima, foram modificadas as seguintes subrotinas:

SETV: inicializa as variáveis que representam a queima acumulada e a massa inicial do combustível;

RERT: calcula a massa inicial do combustível por zona;

TSCL: calcula a queima acumulada por zona;

OUTC: imprime a queima acumulada por zona (opção para o usuário);

HIST: lê os dados do cartão 7 da secção 002;

SSET: modifica a variável NXODR e cria NXCON;

TAPE: lê as secções de choque microscópicas do arquivo 8;

BIGS: modifica a variável NXSET.

O arquivo 8 contém os conjuntos de secções de choque microscópicas gerados para várias queimas e é necessário que todos esses conjuntos sejam lidos ao mesmo tempo, mas o CITATION original não a permite, mesmo utilizando a opção do cartão 6 da secção 002. Só foi possível essa leitura modificando a subrotina TAPE.

5 – TROCA DE SECÇÕES DE CHOQUE POR ZONA

Basicamente o CITATION utiliza duas variáveis para definir os conjuntos de secções de choque que serão utilizados nos cálculos: NXSET e NXODR.

Para um melhor entendimento de como se define as variáveis, convém explicar por meio de um exemplo simples. Seja um reator como mostra a Figura 2. Os números 1, 2, 3 e 4 correspondem às zonas de combustíveis e 5 à zona do refletor. O arquivo 8 contém 6 conjuntos de secções de choque microscópicas para o combustível gerados para as queimas 0, 200, 1000, 2000, 3000 e 4000 MWD/T e 1 conjunto para o refletor.

Assim os dados de entrada na secção 012 devem ser:

1	2	5
3	4	5
5	5	5

Figura 2 – Exemplo para a Troca das Secções de Choque.

NZ1	NZ2	NORD	NDP	NAME
1	4	1	0	Combustível
5	5	7	-1	Refletor

Sem a opção de trocas de secções por zonas, as variáveis NXSET e NXODR ficam:

```

NXSET ( 1 ) = 1;      NXODR ( 1 ) = 1
      ( 2 ) = 1;      ( 7 ) = 2
      ( 3 ) = 1
      ( 4 ) = 1
      ( 5 ) = 7

```

Isso indica que somente as secções de choque dos conjuntos 1 e 7 são colocadas nas respectivas variáveis (ver a subrotina INPT). A escolha das secções de choque é feita da seguinte maneira:

```

DO 1 M = 1, MMAX
  NS = NXSET ( M )
  NR = NXODR ( NS )
  SIGM ( K, M, IT ) = CONC( N, M ) * SS1 ( K, N, NR )

```

onde:

MMAX = número de zonas;

SIGM = secção de choque macroscópica;

CONC = concentração;

SS1 = secção de choque microscópica;

K = grupo de energia;

IT = tipo de secção de choque macroscópica;

6

N = nuclídeo;

NR = conjunto de secção de choque.

Quando NR = 1, refere-se ao conjunto de secções de choque do combustível, e NR = 2, refere-se às secções de choque do refletor.

A troca de secções de choque microscópicas por zona será feita modificando-se, inicialmente, a variável NXODR e, em cada passo de queima, a variável NXSET. Suponha que os dados de entrada no cartão 7 da secção 002 seja:

0,0	200,0	1000,0	2000,0
-----	-------	--------	--------

(nesse caso, dos 6 conjuntos de secções de choque para o combustível gravados no arquivo 8, apenas os 4 primeiros correspondentes a essas queimas serão utilizados nos cálculos), então a variável NXODR será:

NXODR (1) = 1
(2) = 2
(3) = 3
(4) = 4
(7) = 5

Supondo que em um determinado passo de queima, a queima acumulada seja:

QACUM (1) = 1260,0
(2) = 450,0
(3) = 710,0
(4) = 95,0
(5) = 0,0

a variável NXSET deve ser:

NXSET (1) = 3
(2) = 2
(3) = 3
(4) = 1
(5) = 7

Em palavras, a zona 1 utilizará as secções de choque do conjunto 3, pois a queima a qual foi gerado o conjunto 3 é a mais próxima da queima acumulada desta zona, a zona 2 do conjunto 2; a zona 3 do conjunto 3, a zona 4 do conjunto 1 e a zona 5 do conjunto 7.

6 – DADOS DE ENTRADA

Três dados de entrada foram adicionados nos cartões 2, 5 e 7+, da secção 002, que são os seguintes:

Cartão 2 : NDPL24 (70-72) > 0 – indica opção para a troca das secções de choque microscópicas de acordo com a queima acumulada por zona em cada passo de queima. Requer o cartão 7+. A opção NDPL12 deve ser igual a zero.

Cartão 5 : JEDG24 (70–72) > 0 – imprime as queimas acumuladas por zona, em MWD/T.

Cartão 7 + (6E12 . 0) – entrada dos valores de queima acumulada correspondentes a cada conjunto de secções de choque microscópicas. A quantidade de dados fornecidos neste cartão pode ser menor ou igual ao número de conjuntos gerados para cada enriquecimento. No caso em que for menor, apenas os conjuntos correspondentes às queimas fornecidas neste cartão serão utilizados nas trocas. Um campo em branco indica fim de dados neste cartão. Para todo e qualquer enriquecimento, os conjuntos devem ser gerados para os mesmos valores de queimas. É importante salientar que, na secção 012 de dados de entrada, deve-se colocar um número negativo na variável NDP (19–21) para indicar classes de zonas que não ocorrem "depletion". A não observação deste ítem acarreta erro na execução do problema. Ainda na secção 012, a variável NORD (10–12) deve indicar o conjunto correspondente ao primeiro valor dos dados fornecidos neste cartão.

7 – TESTE E VALIDAÇÃO DAS MODIFICAÇÕES

As modificações foram testadas com o programa fornecendo como dados de saída as variáveis NXCON, NXODR e NXSET, que definem os conjuntos de secções de choque microscópicas. Os resultados foram obtidos conforme o esperado de acordo com as explicações feitas no ítem 5.

Para efeito de validação das modificações feitas, processou-se problemas e os resultados foram comparados considerando os programas com e sem as alterações.

Caso exemplo. Seja um reator como mostra a Figura 3.

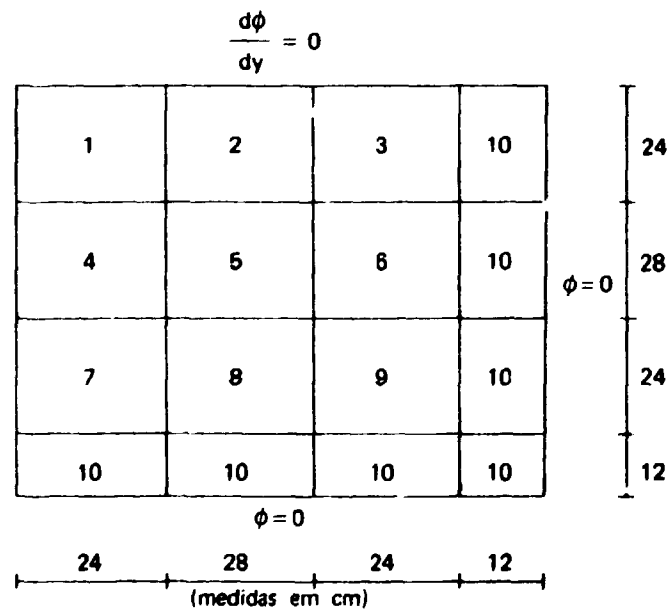


Figura 3 – Caso exemplo.

As zonas 1 a 9 são combustíveis e a zona 10 é refletora (água).

As secções de choque micoscópicas (2 grupos de energia) foram geradas pelo código LEOPARD⁽²⁾, com os seguintes valores de queima para o combustível: 0, 200, 1000, 2000, 3000, 4000, 5000, 6000, 7000, 8000, 9000, 10000, 11000 e 12000 MWD/T. São 14 conjuntos para o combustível (UO₂) com 4,5% de enriquecimento inicial, 1 conjunto para água + guias, 1 para o aço e 1 para a água. Os conjuntos 15 e 16 não são usados. Os valores da queima correspondem a 14,2 dias para o primeiro passo de tempo ou passo de queima, 56,8 para o segundo e 71 dias para o terceiro e os restantes passos de tempo. As concentrações iniciais dos nuclídeos das zonas combustíveis e refletor são dadas na Tabela I.

Tabela I
Concentrações dos Nuclídeos

NUCLÍDEO	CONCENTRAÇÃO (at./barn.cm)	
	COMBUSTÍVEL	REFLETOR
Hidrogênio	0,02779530	0,05156740
Oxigênio	0,02949240	0,02578370
Ferro	0,00652606	
Níquel	0,00106461	
Cromo	0,00179048	
Manganês	0,00019357	
Urânio-235	0,00035515	
Urânio-236	0,3390 x 10 ⁻¹⁰	
Urânio-238	0,00744219	
Plutônio-239	0,3390 x 10 ⁻¹⁰	
Plutônio-240	0,3390 x 10 ⁻¹⁰	
Plutônio-241	0,3390 x 10 ⁻¹⁰	
Plutônio-242	0,3390 x 10 ⁻¹⁰	

A seguir serão mostrados alguns dos parâmetros mais importantes obtidos com e sem as modificações nas trocas de secções de choque por zona. A Tabela II mostra, a título de ilustração, a queima acumulada por zona, obtida com as modificações nas trocas. Nota-se a grande diferença nas zonas 1 e 9, que são os dois extremos do reator. A Tabela III (A se refere ao CITATION original, utilizando o cartão 6 da secção 002 e N se refere ao CITATION com modificações nas trocas de secções de choque por zona) compara $\nu\Sigma_{f,2}$ e os conjuntos utilizados em cada passo de queima para as zonas 1 e 9. Nos passos 8,9 e 10 para a zona 1, os conjuntos utilizados são os mesmos, uma vez que só foram gerados 14 conjuntos para o combustível. Finalmente, a Tabela IV compara o fator de multiplicação efetivo e as massas de U-235 e Pu-239 para cada passo de queima.

Tabela II

Queima Acumulada por Zona (MWD/T)

PASSO DE QUEIMA	QUEIMA ACUMULADA	Z O N A								
		1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	200	367	292	151	291	230	119	151	119	61
2	1000	1812	1445	764	1444	1150	606	763	606	316
3	2000	3583	2875	1537	2875	2303	1227	1536	1226	649
4	3000	5303	4291	2321	4290	3463	1864	2321	1864	994
5	4000	6969	5688	3119	5688	4629	2521	3119	2521	1357
6	5000	8582	7067	3930	7067	5798	3197	3930	3197	1738
7	6000	10145	8428	4752	8428	6972	3892	4752	3894	2138
8	7000	11665	9771	5584	9772	8148	4607	5584	4608	2557
9	8000	13147	11099	6424	11099	9326	5337	6424	5338	2992
10	9000	14594	12412	7273	12413	10504	6083	7273	6084	3445

Tabela III

Conjuntos de Secções de Choque Utilizados em cada Passo de Queima e $\nu\Sigma_{f_2}$ (cm^{-1}) para as Zonas 1 e 9, segundo os Métodos Antigo (A) e Novo (N)

PASSO DE QUEIMA	Z O N A 1				Z O N A 9			
	CONJUNTO		$\nu\Sigma_{f_2}$ (cm^{-1})		CONJUNTO		$\nu\Sigma_{f_2}$ (cm^{-1})	
	A	N	A	N	A	N	A	N
0	1	1	2,12104(-1)	2,12104(-1)	1	1	2,12104(-1)	2,12104(-1)
1	2	2	2,10895(-1)	2,10895(-1)	2	1	2,10552(-1)	2,12142(-1)
2	3	4	2,14288(-1)	2,13994(-1)	3	2	2,10633(-1)	2,11206(-1)
3	4	6	2,17627(-1)	2,17107(-1)	4	3	2,11205(-1)	2,11430(-1)
4	5	7	2,19848(-1)	2,19390(-1)	5	3	2,11792(-1)	2,12210(-1)
5	6	9	2,21265(-1)	2,20701(-1)	6	3	2,12386(-1)	2,12969(-1)
6	7	11	2,22095(-1)	2,21484(-1)	7	4	2,12986(-1)	2,13422(-1)
7	8	12	2,22487(-1)	2,21977(-1)	8	4	2,13583(-1)	2,14119(-1)
8	9	14	2,22542(-1)	2,22027(-1)	9	5	2,14169(-1)	2,14535(-1)
9	10	14	2,22326(-1)	2,22016(-1)	10	5	2,14732(-1)	2,15152(-1)
10	11	14	2,21882(-1)	2,21785(-1)	11	5	2,15254(-1)	2,15728(-1)

OBS.: Os números entre parênteses significam potências de 10.

Tabela IV

Comparação do Fator de Multiplicação Efetivo e Massas do U-235 e Pu-239, para cada Passo de Queima, entre os Métodos Antigo (A) e Novo (N)

PASSO DE QUEIMA	K-EFETIVO		M A S S A (Kg)			
			U-235		Pu-239	
	A	N	A	N	A	N
0	1,1819363	1,1819363	3,20234	3,20234	3,10885(-7)	3,10885(-7)
1	1,1549883	1,1549759	3,18512	3,18512	5,69676(-3)	5,69676(-3)
2	1,1422396	1,1421738	3,11727	3,11727	3,44516(-2)	3,44533(-2)
3	1,1317682	1,1314840	3,03510	3,03510	6,75785(-2)	6,75948(-2)
4	1,1297867	1,1298029	2,95559	2,95555	9,78857(-1)	9,79813(-2)
5	1,1098175	1,1098824	2,87842	2,87835	1,25791(-1)	1,25941(-1)
6	1,0991507	1,0994768	2,80337	2,80323	1,51602(-1)	1,51895(-1)
7	1,0886688	1,0893154	2,73026	2,73005	1,75571(-1)	1,75992(-1)
8	1,0787745	1,0795841	2,65895	2,65868	1,97896(-1)	1,98415(-1)
9	1,0692053	1,0700464	2,58934	2,58899	2,18727(-1)	2,,19399(-1)
10	1,0599079	1,0607939	2,52133	2,52094	2,38204(-1)	2,38929(-1)

8 – CONCLUSÃO

As diferenças notadas na Tabela IV são relativamente pequenas, mas elas são importantes porque os erros tendem a se propagar. O erro relativo verificado na massa do U-235 no passo 10 é de aproximadamente 0,02%. O mesmo erro se verificará na massa do U-238, pois de acordo com a Figura 1, as variações percentuais nas seções de choque são aproximadamente iguais. A massa do Pu 239, que é originário do U-238, já apresenta um erro relativo de aproximadamente 0,3%. A análise feita aqui é de um modelo de reator muito simplificado. Então, é de se esperar que os erros tendem a crescer com o aumento do tamanho do reator, do número de zonas, do número de passos de queima, e em análises de multiciclos de combustível. Um outro fator que minimizou o erro do exemplo foi o número de conjuntos de seções de choque, pois como pode ser visto nas Tabelas I e II, houve necessidade de se gerar conjuntos até para 15000 MWD/T.

ABSTRACT

The purpose of this work was to modify the CITATION code in order to compute the accumulated burnup after each burnup step for each reactor zone and to allow the use of updated microscopic cross sections for each zone according to the accumulated burnup. Some input data was introduced in the code. The modifications reported here were checked and some comparisons were made with results obtained by running the code with and without these modifications.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS*

1. BALTAZAR, O. Definições preliminares dos parâmetros do projeto de um reator nuclear experimental de potência utilizando urânio natural e grafita e refrigerado por gás hélio. São Paulo, 1978. (Dissertação de mestrado, Instituto de Energia Atômica). (IEA-Dt-065).
2. BARRY, R. F. *LEOPARD: a spectrum dependent non-spatial depletion code for the IBM-7094*. Pittsburg, Penn., Westinghouse Electric Corporation, Sep. 1963. (WCAP-3269-26).
3. FOWLER, T. B.; VONDY, D. R.; CUNNINGHAM, G. N. *Nuclear reactor core analysis code: CITATION*. Oak Ridge Tn., Oak Ridge National Lab., July 1971. (ORNLTM-2496 Rev. 2).

(*) As referências bibliográficas relativas a documentos localizados pelo IPEN – CNEN/SP foram revistas e enquadradas na NB-66 da Associação Brasileira de Normas Técnicas.

**COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR/SP
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES**

Caixa Postal, 11049 – Pinheiros

CEP 05508

01000 – São Paulo – SP

Telefone: 211-6011

Endereço Telegráfico -- IPENUCLEAR

Telex -- (011) 23592 - IPEN - BR