

PROYECTO INTEGRADOR DE LA CARRERA DE
INGENIERÍA NUCLEAR

DESARROLLO DE UNA BIBLIOTECA DE TRABAJOS
DE DATOS NUCLEARES

Juan José Fabisik

Dr. Eduardo Villarino
Director

Ing. Federico Sardella
Co-director

Miembros del Jurado
Francisco Leszczynski
Lourdes Torres

Junio de 2014

Departamento de Ingeniería Nuclear – INVAP S.A.

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

Índice de contenidos

Índice de contenidos	i
Índice de figuras	iii
Índice de tablas	iv
Resumen	v
Abstract	vi
1. Introducción	1
1.1. Motivación y objetivos	1
1.2. Archivos de datos evaluados ENDF-6	2
1.2.1. Organización de los archivos	2
1.2.2. Leyes de interpolación	3
1.2.3. Como leer los <i>tapes</i>	3
1.3. Sistema de procesamiento NJOY	4
1.4. Bibliotecas de trabajo ESIN	5
1.4.1. Nuevos parámetros en ESIN II	5
1.4.2. Sobre estructura de grupos	6
2. Metodología	7
2.1. Generación de datos multigrupo: NJOY	7
2.1.1. MODER	7
2.1.2. RECONR	7
2.1.3. BROADR	8
2.1.4. UNRESR	8
2.1.5. THERMR	9
2.1.6. GROUPT	9
2.2. Cálculo de parámetros de la biblioteca	9
2.2.1. Secciones eficaces	10
2.2.2. Tratamiento resonante	12

2.2.3. Datos de Quemado	15
2.2.4. Datos de Neutrones Retardados	15
2.2.5. Espectros de fisión	16
2.3. Conclusiones del capítulo	16
3. Generación de la biblioteca de trabajo ESIN 1	18
3.1. Cálculo de constantes multigrupo	18
3.1.1. RECONR	18
3.1.2. BROADR	18
3.1.3. UNRESR	18
3.1.4. THERMR	19
3.1.5. GROUPT	19
3.2. Extracción de los datos multigrupo	19
3.3. Cálculos de parámetros de biblioteca ESIN 1	20
3.3.1. Integrales de resonancia	20
3.3.2. Factores Goldstein-Cohen	22
3.3.3. Secciones eficaces P0	23
3.3.4. Secciones eficaces P1	27
3.3.5. Datos resonantes smooth	28
3.3.6. Espectro de fisión	29
3.4. Generación de la biblioteca de trabajo	30
3.5. Conclusiones del capítulo	30
4. Validación de la biblioteca	31
4.1. Descripción de celdas BAPL-UO ₂	31
4.2. Descripción de celdas TRX	32
4.3. Resultados y análisis	33
4.3.1. Comparación entre bibliotecas	33
5. Conclusiones	37
A. Datos de NJOY	39
A.1. Input de NJOY	39
A.2. Estructura de grupos XMAS 172	40
B. Inputs de CONDOR para validacion de biblioteca	42
B.1. Input de celda TRX	42
B.2. Input de celda BAPL	43
Bibliografía	44

Índice de figuras

2.1. Esquema de los modulos de NJOY a utilizar en la generacion de datos multigrupo	8
2.2. Numero de neutrones totales producidos por fision de distintos isótopos, en formato continuo y a 69 grupos, utilizando datos de ENDF/B-VII.1	11
2.3. Numero de neutrones retardados producidos por fision del ^{235}U en esquema de 69 grupos, extraidos del archivo GENDF, con datos evaluados de ENDF/B-VII.1	16
2.4. Espectro de los neutrones retardados de ^{235}U en un esquema de 69 grupos, extraidos del GENDF en MF=5/MT=455, utilizando los datos evaluados ENDF/B-VII.1	17
2.5. Espectro de fision de WLUP y del ^{235}U extraido del GENDF en MF=6/MT=18 en un esquema de 69 grupos	17
3.1. Espectro para condensación de secciones eficaces del ^{238}U	20
3.2. Esquema de estructura de datos jerárquica en el código GENDF_READER	21
3.3. Seccion eficaz de absorcion de ^{238}U en el rango resonante a distintas diluciones en esquema multigrupo 172 XSMAS	24
3.4. Factores λ para calculados por la rutina LAMBDA	25
3.5. Comparacion de $\sigma_{scat,elastico}$ de los MT 221 y MT 2 para el ^1H	26
3.6. Esquema de estructura de datos Lista XS del output de la rutina XSP0	27
4.1. Cociente C/E de la celda BAPL-UO ₂ -1 de las tres bibliotecas generadas	34
4.2. Cociente C/E de la celda BAPL-UO ₂ -2 de las tres bibliotecas generadas	35
4.3. Cociente C/E de la celda BAPL-UO ₂ -3 de las tres bibliotecas generadas	35
4.4. Cociente C/E de la celda TRX-1 de las tres bibliotecas generadas	36
4.5. Cociente C/E de la celda TRX-1 de las tres bibliotecas generadas	36

Índice de tablas

3.1. Temperaturas utilizadas en el módulo BROADR, para cada isotopo . .	19
3.2. Diluciones, en barns, usadas en el cálculo de auto-apantallamiento en los isotopos resonantes	19
4.1. Propiedades físicas de la celda BAPL	31
4.2. Propiedades físicas de la celda TRX	32
4.3. Buckling de las distintas celdas	32
4.4. Resultados de benchmark de celda BAPL	33
4.5. Resultados de benchmarks TRX	34
A.1. Estructura de grupos XMAS 172	41

Resumen

El código CONDOR es parte de la línea de cálculo que INVAP utiliza para el análisis y desarrollo de reactores experimentales. Este programa utiliza una biblioteca de secciones eficaces microscópicas para la resolución de las ecuaciones de transporte. Las bibliotecas utilizadas están basadas en datos neutrónicos de los años 60 y 90. En la actualidad existen datos neutrónicos evaluados recientemente publicados, por lo cual es factible la generación de una nueva biblioteca de trabajo.

Los archivos evaluados de datos neutrónicos se almacenan en formatos que permiten la reproducción de las secciones eficaces en un amplio rango energético con un nivel de detalle mucho más alto que el utilizado en las bibliotecas de trabajo de CONDOR. Para que estos datos tengan aplicaciones prácticas es necesario procesarlos y llevarlos a formato multigrupo, donde se considera que las secciones eficaces son constantes en un determinado rango de energía.

Se utilizaron los datos evaluados más recientemente publicados, los cuales están en formato ENDF-6. Se trabajó con el sistema de procesamiento de datos nucleares NJOY para la obtención de constantes multigrupo, y se desarrollaron los algoritmos necesarios para la generación de los parámetros de la biblioteca ESIN. Para validar la metodología utilizada se generó una biblioteca con pocos isótopos y se realizaron benchmarks experimentales utilizando el código CONDOR.

Una vez generados los algoritmos para la generación de bibliotecas en formato ESIN, estos pueden ser fácilmente ampliados para la generación de bibliotecas en un nuevo formato desarrollado por INVAP, ESIN II, que incluye nuevos datos nucleares y tiene una estructura más flexible a cambios y actualizaciones, lo que mejorará la capacidad de cálculo de CONDOR.

Palabras clave: GENERACIÓN DE BIBLIOTECA DE TRABAJOS PARA CONDOR, ARCHIVOS EVALUADOS ENDF-6, SISTEMA DE PROCESAMIENTO NJOY

Abstract

CONDOR lattice code is part of the nuclear calculation system used by INVAP for design and analysis of experimental nuclear reactors. The cross section libraries used by CONDOR are based on nuclear data originating in the sixties and nineties. Currently evaluated neutron data are publicly available, so it is feasible to generate a new working library.

The evaluated nuclear data files are stored in a format that allows the reproduction of cross sections over a wide energy range with a level of detail much higher than that used in CONDOR working libraries. In order to use this data, it is necessary to reduce the detail in the cross section by averaging them over energy groups.

The most recently published evaluated nuclear data was used, along with NJOY nuclear data processing system for generating multigroup constants. All the algorithms necessary for the generation of the ESIN working library were developed and validated by experimental benchmarks.

Once generated and validated, the same algorithms can be upgraded for the generation of the new CONDOR working library: ESIN II, which includes new nuclear data and is flexible to future changes, improving CONDOR calculation capabilities.

Keywords: CONDOR WORKING LIBRARY GENERATION, EVALUATED NUCLEAR DATA FILES ENDF-6, NJOY NUCLEAR DATA PROCESSING SYSTEM

Capítulo 1

Introducción

El código CONDOR [1, 2] es parte de la línea de cálculo neutrónico utilizada por INVAP para el diseño de instalaciones nucleares. Desde sus comienzos, INVAP ha estado mejorando la línea de cálculo, y en la actualidad posee la capacidad de modelar instalaciones nucleares de geometrías complejas de manera simple y clara. Se cuenta también con herramientas para visualización de parámetros, que facilitan la interpretación y análisis de los resultados.

El código de cálculo neutrónico CONDOR es empleado en el cálculo de celdas de elementos combustibles con alto nivel de detalle geométrico con el fin de generar secciones eficaces macroscópicas homogeneizadas, para posteriores cálculos de núcleo con el código CITVAP [3].

1.1. Motivación y objetivos

Para realizar los cálculos CONDOR requiere una biblioteca de secciones eficaces microscópicas de neutrones de los distintos elementos que componen la celda de combustible. Actualmente se utilizan dos bibliotecas: ESIN2001 y Helios-190. La primera fue generada a partir de la biblioteca de 69 grupos de del código WIMS, la cual está basada en datos nucleares de principios de los 60. Por otro lado la biblioteca Helios-190 fue generada con datos de los años 90.

En la actualidad existen bases de datos nucleares evaluados recientemente publicados, por lo tanto es factible la generación de una nueva biblioteca de datos nucleares. Además, la capacidad de generar bibliotecas desde los datos evaluados permite incluir nuevos datos como, por ejemplo, datos resonantes de subgrupos, neutrones retardados, cadenas de quemado, datos de producción gamma, reacciones $(n, 2n)$, etc. Adicionalmente, se podría generar bibliotecas específicas para distintos tipos de reactores. Todo esto mejoraría notablemente la capacidad de cálculo del código CONDOR.

El objetivo de este trabajo es desarrollar la metodología para generar bibliotecas de trabajo, desarrollar los algoritmos y validarlos. Para ello se generara una biblioteca con pocos isotopos utilizando datos evaluados actuales, y se validara realizando benchmarks experimentales.

1.2. Archivos de datos evaluados ENDF-6

Los datos evaluados ENDF-6 [4, 5] son archivos con datos nucleares que describen secciones eficaces, distribuciones en energía y ángulo de los productos de reacción, los distintos núcleos producidos en reacciones nucleares, los modos de decaimiento y los espectros resultantes de dichos decaimientos.

Estos datos son generados a través de la colaboración internacional de un gran número de laboratorios, de esta manera es posible cubrir el amplio rango de energías necesario para la resolución de las ecuaciones de transporte. Cuando no se cuenta con datos experimentales en algún rango de energía, se utilizan modelos teóricos. De esta manera los datos evaluados cubren un rango de energía desde 10^{-5} eV hasta 20 MeV.

Debido al gran volumen de información contenida en estos archivos, es necesaria la definición de un formato común, que permita la comparación de resultados entre laboratorios, actualización, y uso automatizado de la información. En la actualidad el formato utilizado se llama ENDF-6.

1.2.1. Organización de los archivos

Los archivos en formato ENDF-6 poseen una estructura jerárquica para organizar y almacenar los distintos tipos de información. Los distintos niveles son *tape*, *material*, *file* y *section*. Cada nivel posee números que los caracterizan:

- Un *tape* es un archivos que puede contener uno o más materiales.
- Un *material* es un determinado isótopo, identificado por el numero MAT. Cada isótopo tiene asociado un MAT distinto, por ejemplo, 125 es 1H , 825 es ^{16}O , 1325 es ^{27}Al , 9228 es ^{235}U y 9237 es ^{238}U .
- Los *files* almacenan distintos tipos de datos, y su número identificador es MF, por ejemplo:

MF=1 Datos descriptivos,

MF=2 Parámetros resonantes,

MF=3 Secciones eficaces en función de energía,

- MF=4** Distribuciones angulares de productos de reacción,
- MF=5** Distribuciones en energía de los productos de reacción,
- MF=6** distribuciones ángulo-energía de los productos de reacción,
- MF=7** Leyes de scattering térmico,
- MF=8** Datos de decaimiento.

- Una *section* contiene una determinada reacción, y se identifica con el número MT. Por ejemplo, MT=1 contiene la sección eficaz total, MT=2 contiene la sección eficaz de scattering elástico, MT=16 es la reacción $(n, 2n)$, MT=18 contiene la sección eficaz de fisión.

Un *tape* contiene uno o varios materiales, en orden creciente de MAT, un material contiene varios *files*, en orden creciente de MF, un *file* contiene varias *sections* en orden creciente de MT.

1.2.2. Leyes de interpolación

Las secciones eficaces en los tapes se presentan en forma de pares de puntos energía-sección eficaz, junto con leyes de interpolación para calcular los valores entre los distintos puntos. Algunas de las leyes de interpolación son las siguientes:

INT=1: σ es constante en E (constante, histograma)

INT=2: σ es lineal en E (lineal-lineal)

INT=3: σ es lineal en $\ln(E)$ (lineal-log)

INT=4: $\ln(\sigma)$ es lineal en E (log-lineal)

INT=5: $\ln(\sigma)$ es lineal en $\ln(E)$ (log-log)

Para los isótopos resonantes no es práctico usar estas leyes de interpolación para la zona de resonancias, porque se necesitarían demasiados puntos para reproducir cada resonancia. En estos casos se utilizan distintas fórmulas, como ser, Breit-Wigner, Reich-Moore, Adler-Adler, entre otras.

1.2.3. Como leer los *tapes*

A continuación se muestra parte de un *tape* en formato ASCII. Los números de la última columna corresponden a un índice que comienza en 1 y termina en 99999 para indicar el final de cada *section*. La segunda columna de derecha izquierda corresponde al MT, que en este caso es 1 y se refiere a la sección eficaz total. La tercera columna de

derecha a izquierda es el MF, en este caso vale 3, que identifica a las secciones eficaces en función de la energía. Luego viene el número 125 que identifica al material, siendo el 1H para este *tape*. En el primer renglón, el primer número que se presenta es el valor ZA ($100*Z+A$), el siguiente número es AWR que es la relación entre la masa del 1H y el neutrón. El tercer renglón contiene la información de la ley de interpolación, y en el cuarto renglón comienzan los pares de punto energía-sección eficaz

```

1.001000+3 9.991673-1      0      0      0      0 125 3 1  1
0.000000+0 0.000000+0      0      0      2      96 125 3 1  2
      30      5      96      2      125 3 1  3
1.000000-5 3.713628+1 2.000000-5 3.224498+1 5.000000-5 2.790478+1 125 3 1  4
1.000000-4 2.571732+1 2.000000-4 2.417056+1 5.000000-4 2.279806+1 125 3 1  5
1.000000-3 2.210633+1 2.000000-3 2.161720+1 5.000000-3 2.118318+1 125 3 1  6
1.000000-2 2.096443+1 2.530000-2 2.076834+1 5.000000-2 2.067250+1 125 3 1  7
      .
      .
      .
1.600000+7 6.040552-1 1.650000+7 5.860577-1 1.700000+7 5.689977-1 125 3 1  33
1.750000+7 5.528040-1 1.800000+7 5.374121-1 1.850000+7 5.227637-1 125 3 1  34
1.900000+7 5.088059-1 1.950000+7 4.954905-1 2.000000+7 4.827735-1 125 3 1  35
0.000000+0 0.000000+0      0      0      0      0 125 3 099999

```

De manera similar se guardan las secciones eficaces de scattering elástico, las inelásticas, las de fisión, etc., para cada isotopo. Para que la información almacenada de esta manera sea útil en la resolución de ecuaciones de transporte por el código CONDOR, es necesario pasar por varias fases de procesamiento de datos. Primero se deben condensar las secciones eficaces a formato multigrupo, luego se deben calcular las secciones eficaces que se usa CONDOR, que se definen de manera distinta a las almacenadas en los datos evaluados, por último es necesario guardar toda la información en el formato específico de las bibliotecas de trabajo de CONDOR, el formato ESIN. La primer parte del proceso, la obtención de constantes multigrupo, se realizó con el sistema de procesamiento NJOY.

1.3. Sistema de procesamiento NJOY

El sistema de procesamiento de datos nucleares NJOY [6, 7] tiene como función convertir datos evaluados ENDF a formatos útiles para distintas aplicaciones. Es un puente entre la física y la ingeniería. Está compuesto por una serie de módulos, cada módulo es esencialmente un programa independiente que realiza una tarea bien definida. Los módulos están conectados a través de archivos de entada y salida. Mas información sobre los distintos módulos a utilizar se dará en el próximo capítulo.

1.4. Bibliotecas de trabajo ESIN

Las secciones eficaces microscópicas se almacenan en una biblioteca de trabajo. El formato de la biblioteca es específico del código de cálculo utilizado, y en el caso de CONDOR el formato se denomina ESIN. Esta biblioteca integra todos los parámetros en un solo archivo binario. Una explicación detallada de la biblioteca ESIN se presenta en [8]. Este formato tiene la desventaja de que no es flexible a modificaciones de secciones eficaces, como actualizaciones, remociones o agregado de nuevos parámetros. INVAP ha desarrollado un nuevo formato denominado ESIN II [9], que consiste en una biblioteca formada por directorios y archivos en una estructura jerárquica. De esta forma se facilita la modificación de la biblioteca.

Además, el formato ESIN II incluye nuevos datos que no se encuentran en el formato anterior, los mismos se describen a continuación.

1.4.1. Nuevos parámetros en ESIN II

Datos de subgrupos

El método de los subgrupos en el tratamiento de las resonancias es muy útil para geometrías complejas. CONDOR utiliza este método calculando los parámetros de subgrupos a partir de las tablas resonantes de la biblioteca ESIN. En el nuevo formato se considera guardar los datos de subgrupos directamente en la biblioteca, y de esta manera evitar calcularlos nuevamente cada vez que se requiera usar el método de subgrupos.

Datos de neutrones retardados

Con los datos de neutrones retardados se podrá realizar cálculos de β_{eff} . Son necesarias las constantes de decaimiento de los precursores y los espectros de los neutrones retardados.

Cadenas de quemado

El formato nuevo propone guardar las cadenas de quemado directamente en la biblioteca. En el formato actual las cadenas de quemado están dentro del código CONDOR. Además las cadenas de quemado incluirán los efectos de reacciones $(n, 2n)$ y $(n, 3n)$

Espectros de fisión

En el formato ESIN se usa el mismo espectro para todos los isotopos fisiles, mientras que en el formato ESIN II se almacenaran los distintos espectros de fisión de cada

isotopo fisil.

Scattering anisotrópico

El formato actual contiene secciones eficaces de scattering de expansiones de Legendre de orden cero y uno (P0 y P1). El formato nuevo incluirá expansiones de mayor orden, para mejorar el tratamiento de la anisotropía de scattering usando el método de características.

Datos gamma

También se considera guardar secciones eficaces gamma, necesarias para el cálculo de la distribución del campo gamma en el núcleo, lo que permitirá realizar cálculos de blindajes y distribuciones de potencia con mayor precisión.

1.4.2. Sobre estructura de grupos

La biblioteca ESIN2001 tiene una estructura de 69 grupos, la Helios-190 tiene 190 grupos. Cuando más discretizado está el rango de energía, menos dependerán las constantes multigrupo de los espectros de pesado, y menos importante serán los efectos de auto-apantallamiento en el tratamiento resonante, pero más grupos también significa más tiempo de cálculo. Una propuesta en el proyecto ESIN II considera generar una biblioteca MASTER a muchos grupos (~ 6000), en la cual no sería necesario realizar tratamiento resonante. Luego a partir de esta biblioteca se podrían generar bibliotecas de trabajo a pocos grupos (~ 100) para algún tipo de reactor en particular.

Capítulo 2

Metodología

En este capítulo se desarrollara la metodología para generar una biblioteca de trabajo para el código CONDOR. El proceso se puede separar en tres fases, la primera es la generación de datos multigrupo utilizando el sistema de procesamiento NJOY. La segunda es el cálculo de los parámetros específicos de la biblioteca de trabajo de CONDOR. La última fase consiste en generar la biblioteca con el formato ESIN.

2.1. Generación de datos multigrupo: NJOY

Para generar los datos multigrupo a partir de los datos evaluados se deben usar una serie de módulos que realizaran distintas tareas sucesivas. Los módulos a usar son: MODER, RECONR, BROADR, UNRESR, THERMR y GROUPE. En la figura 2.1 se esquematiza el orden en el que se usan y como se relacionan. A continuación se describen las tareas que realizan cada módulo.

2.1.1. MODER

Los archivos de datos evaluados se distribuyen en formato ASCII para facilitar la lectura, sin embargo este formato no es el más eficiente para el intercambio de datos entre los distintos módulos de NJOY. El módulo MODER convierte los archivos a formato binario, de esta manera se incrementa la velocidad de cálculo en el procesamiento de datos.

2.1.2. RECONR

Como se describió en la introducción, el formato de los datos evaluados usa distintos tipos de interpolación entre puntos, y funciones para describir las resonancias, de esta manera se puede condensar toda la información en archivos relativamente pequeños. Sin embargo este formato no es práctico para realizar cálculos como sumar dos secciones

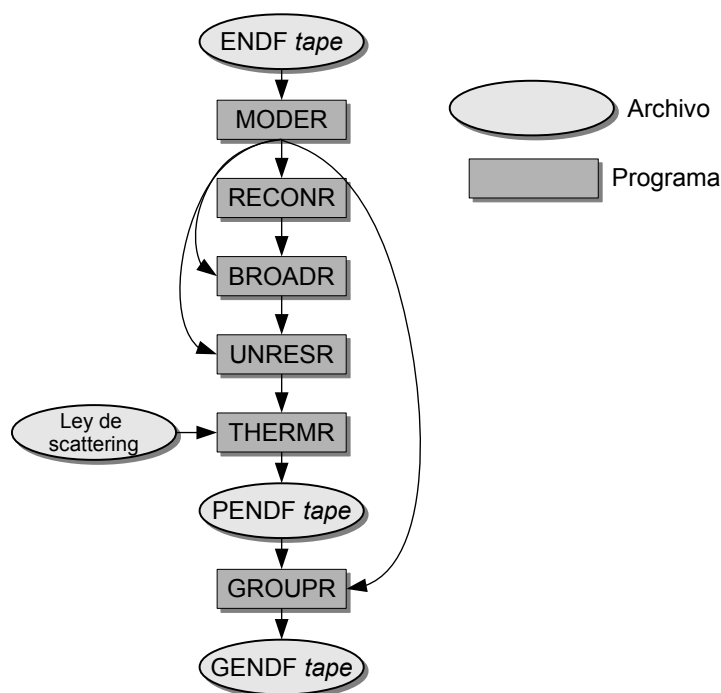


Figura 2.1: Esquema de los módulos de NJOY a utilizar en la generación de datos multigrupo

eficaces, calcular secciones eficaces a distintas temperaturas, o condensar secciones eficaces a formato multigrupo. La función del módulo RECONR es generar una nueva grilla de pares de puntos energía-sección eficaz, de modo que se pueda usar interpolación lineal entre puntos. Esto se hace redefiniendo todos los rangos que tienen interpolación no lineal (log-log, lin-log, etc.), y reconstruyendo las resonancias para ser representadas por pares de puntos e interpolación lineal. El parámetro de entrada principal de este módulo es la tolerancia con la que se quiere reconstruir las secciones eficaces. De ello dependerá la precisión con la que se reconstruyen las secciones eficaces, pero también el tiempo de cálculo necesario. La salida de este módulo es un archivo PENDF (Pointwise ENDF)

2.1.3. BROADR

El módulo BROADR toma la salida del módulo RECONR y efectúa el ensanchamiento doppler para generar las secciones eficaces en función de las distintas temperaturas. La salida de este módulo es un archivo PENDF con múltiples temperaturas.

2.1.4. UNRESR

Este módulo se utiliza para los isótopos resonantes. Recibe como entrada el archivo de salida de BROADR, y realiza el cálculo de autoapantallamiento de las secciones eficaces en el rango de resonancias no resueltas.

2.1.5. THERMR

En el rango térmico la energía de los neutrones es similar a la energía cinética de los átomos de los materiales, por lo tanto no se puede considerar a los átomos blanco como estacionarios, como se hace para energías superiores. El movimiento de los átomos y sus enlaces en las moléculas afectan las secciones eficaces y la distribución en ángulo-energía de los neutrones dispersados. El módulo THERMR se encarga de calcular estos efectos y agrega estas secciones eficaces al archivo PENDF.

El módulo puede usar la teoría de gas libre para tener en cuenta el movimiento de los átomos. Para calcular el efecto de los enlaces moleculares es necesario un archivo extra con la ley de scattering. Existen leyes de scattering calculadas para los moderadores más importantes y algunas estructuras cristalinas (H_2O , D_2O , grafito).

2.1.6. GROUPT

El ultimo modulo a usar es GROUPT. Este módulo toma como entrada el archivo PENDF y genera un archivo GENDF (Groupwise ENDF). Su función es condensar las secciones eficaces a un esquema de grupos determinado. Es necesario definir un espectro para el pesado de las secciones eficaces. El modulo tiene incorporado varios esquemas de grupos y funciones de pesado, y se puede también usar alguna definida por el usuario. También tiene la función de calcular secciones eficaces efectivas para distintas diluciones en el rango resonante.

El archivo GENDF generado tendrá almacenado en el MF=3, todos los vectores de secciones eficaces por grupo. También se generan las matrices de transferencia de un grupo a otro, utilizando la información de distribución en energía de los productos de reacción. Estas matrices se almacenan en el MF=6.

Otra función es la de calcular los elementos de la expansiones de Legendre de las distintas secciones eficaces, utilizando información de la distribución en ángulo contenida en los datos evaluados. El archivo GENDF contiene todos las constantes multigrupo necesarias para la generación de los parámetros de la biblioteca.

2.2. Calculo de parámetros de la biblioteca

El siguiente paso es calcular todos los parámetros necesarios para generar la biblioteca. Los parámetros principales se describen a continuación

2.2.1. Secciones eficaces

Sección eficaz de transporte

Para un grupo g se define la sección eficaz de transporte como:

$$\sigma_{tr,g} = \sigma_{t,g} - \sigma_{s1,g} \quad (2.1)$$

donde $\sigma_{t,g}$ es la sección eficaz total y $\sigma_{s1,g}$ es la corrección por transporte, cuya definición es:

$$\sigma_{s1,g} = \frac{\sum_{g'=1}^{NOG} \sigma_{s1,g' \rightarrow g} J_{g'}}{J_g} \quad (2.2)$$

donde NOG es el número de grupos, $\sigma_{s1,g' \rightarrow g}$ son los elementos de la matriz de scattering P1 de un grupo a otro, y J es el vector corriente, o flujo ϕ_1 . Esta definición implica que se debe conocer la distribución de J . Una aproximación normalmente utilizada es la de considerar que el in-scattering P1 hacia un grupo es igual al out-scattering P1 desde ese grupo,

$$\sum_{g'} \sigma_{s1}^{g' \rightarrow g} J_{g'} \simeq \sum_{g'} \sigma_{s1}^{g \rightarrow g'} J_g \quad (2.3)$$

de esta manera la definición de la corrección de transporte será:

$$\sigma_{s1,g} = \sum_{g'=1}^{NOG} \sigma_{s1,g \rightarrow g'} \quad (2.4)$$

es decir, la suma de los elementos de out-scattering P1.

Sección eficaz de scattering

En los archivos evaluados las secciones eficaces de scattering están separadas en scattering elástico y los distintos scattering inelásticos. Sin embargo, en la resolución de la ecuación de transporte, CONDOR define la sección eficaz de scattering $\sigma_{s,g}$ del grupo g como:

$$\sigma_{s,g} = \sigma_{s,elástico,g} + \sigma_{s,inelástico,g} + 2\sigma_{(n,2n),g} + 3\sigma_{(n,3n),g} \quad (2.5)$$

Las reacciones $(n, 2n)$ y $(n, 3n)$ son sumadas para tener en cuenta la producción de múltiples neutrones. El scattering tiene anisotropía en la distribución angular de neutrones, para tener esto en cuenta CONDOR utiliza las expansiones de Legendre. El módulo GROUPT tiene la capacidad de generar secciones eficaces P_N .

Sección eficaz de absorción

La sección eficaz de absorción $\sigma_{a,g}$ se define como la sección eficaz de fisión más la distintas secciones eficaces de captura. Se deben restar las reacciones $(n, 2n)$ y $(n, 3n)$ para conservar la sección eficaz total.

$$\sigma_{a,g} = \sigma_{n,\gamma} + \sigma_{n,fis} + \sigma_{n,p} + \sigma_{n,d} + \sigma_{n,\alpha} + \dots - \sigma_{(n,2n),g} - 2\sigma_{(n,3n),g} \quad (2.6)$$

Sección eficaz de fisión

La sección eficaz de fisión se extrae directamente de MF=3/MT=18 en forma multigrupo del archivo GENDF.

Sección eficaz de nu-fisión

La sección eficaz de nu-fisión, o sección eficaz de producción, se define como:

$$\sigma_{nu-fis,g} = \nu_{T,g} * \sigma_{fis,g} \quad (2.7)$$

donde $\nu_{T,g}$ es la suma de la producción de neutrones instantáneos y retardados. En la figura 2.2 se muestran los $\nu_T(E)$ de ^{235}U y ^{239}Pu , extraídos de los datos evaluados ENDF/B-VII.1. y el $\nu_T(E)$ en esquema multigrupo del ^{235}U , extraído del archivo de salida de GROUPE.

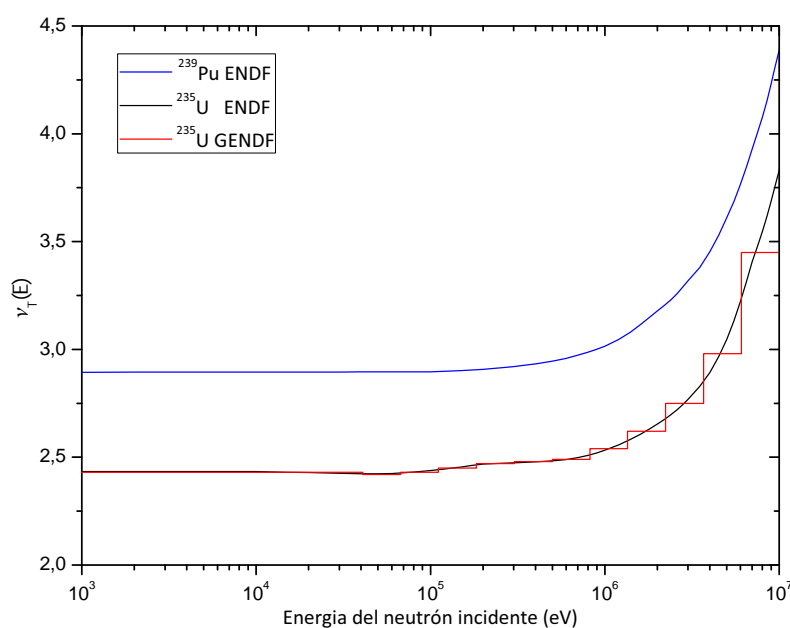


Figura 2.2: Numero de neutrones totales producidos por fisión de distintos isótopos, en formato continuo y a 69 grupos, utilizando datos de ENDF/B-VII.1

in-scattering P0

Es un vector que contiene los elementos de scattering P0 desde todos los grupos hacia el grupo g . Sus elementos se definen de la misma manera que la sección eficaz de out-scattering, pero al elemento de self-scattering se le realiza la misma corrección de transporte que lleva la sección eficaz de transporte.

Poder de moderación por unidad de letargia

Es un parámetro utilizado en el tratamiento resonante, se define como: $\frac{\xi\sigma_p}{\Delta u}$, donde ξ , es el decremento logarítmico medio y Δu es el ancho del grupo en letargia. Δu se puede calcular a partir de la estructura de grupos en MF=1/ MT=451 del archivo GENDF.

Sección eficaz potencial

La sección eficaz potencial es utilizada en el tratamiento resonante. Para los isótopos no resonantes se puede utilizar la sección eficaz de scattering. Para los isótopos resonantes, se la puede definir como:

$$\sigma_p = 4\pi a^2 \quad (2.8)$$

Donde a es el radio atómico.

2.2.2. Tratamiento resonante

Las secciones eficaces efectivas del rango resonante son fuertemente dependientes de la concentración de los isótopos resonantes, moderadores y de la geometría en la que se encuentran, debido al auto-apantallamiento. Es imposible guardar las secciones eficaces para cada mezcla y geometría de celda. CONDOR realiza el cálculo de las secciones eficaces efectivas utilizando la teoría de equivalencias [8], donde el sistema que se calcula se considera equivalente a una combinación de sistemas homogéneos moderados en hidrógeno. Para ello es necesario tabular las integrales resonantes a distintas diluciones, y se necesitan los factores lambda de resonancia intermedia, que determina la equivalencia de los distintos isótopos con el hidrógeno. Estos datos no son calculados directamente por NJOY, por lo que hay que desarrollar un código externo que los calcule.

Calculo de las integrales resonantes

El código CONDOR calcula las secciones eficaces efectivas a una determinada dilución interpolando las tablas de integrales resonantes, de la siguiente manera:

$$\sigma_{abs} = \frac{\sigma_B RI_{abs}(\sigma_B)}{\sigma_B - RI_{abs}(\sigma_B)} \quad (2.9)$$

$$\nu\sigma_{fis} = \frac{\sigma_B RI_{fis}(\sigma_B)}{\sigma_B - RI_{abs}(\sigma_B)} \quad (2.10)$$

Donde RI_{abs} y RI_{fis} son las integrales resonantes de absorción y fisión respectivamente, y σ_B es la sección eficaz de background. La metodología a utilizar para generar las integrales resonantes consiste en calcular, primero las secciones eficaces efectivas a distintas diluciones, y despejar el valor de las RI de las ecuaciones 2.9 y 2.10, es decir:

$$RI_{abs}(\sigma_B) = \frac{\sigma_B \sigma_{abs}(\sigma_B)}{\sigma_B + \sigma_{abs}(\sigma_B)} \quad (2.11)$$

$$RI_{fis}(\sigma_B) = \frac{\sigma_B \nu\sigma_{fis}(\sigma_B)}{\sigma_B + \sigma_{abs}(\sigma_B)} \quad (2.12)$$

En ambos casos σ_{abs} se calcula según la formula 2.6. El módulo GROUPE calcula el espectro de una mezcla homogénea infinita de resonante para obtener las secciones eficaces efectivas a distintas diluciones y temperaturas. De esta manera se puede generar integrales de resonancia de manera relativamente simple. Una opción un poco más compleja es la de calcular los espectros utilizando geometrías heterogéneas, como un pin, en lugar de mezclas homogéneas. Por otro lado, si la estructura de grupos es suficientemente grande sería posible evitar el tratamiento resonante. Este es un camino que vale la pena explorar, pero escapa al alcance de este trabajo.

Calculo de los factores lambda

Los factores lambda provienen de la teoría de resonancias intermedias. Estos dependen del ancho de la resonancia y de la energía promedio perdida por scattering, relacionada con el peso atómico de isótopo moderador. En la práctica, todas las resonancias se pueden considerar angostas para el hidrógeno, por lo que λ para el hidrógeno vale uno. Los factores lambda para el resto de los isótopos se obtienen comparando las secciones eficaces efectivas de una mezcla de resonante e hidrógeno con las secciones eficaces efectivas de la misma mezcla pero con una fracción del hidrógeno reemplazada por el isótopo cuyo factor lambda se desea calcular.

El módulo GROUPE tiene una función llamada FLUX CALCULATOR, con la posibi-

lidad de calcular las secciones eficaces efectivas para mezclas homogéneas infinitas de un resonante y distintos moderadores, resolviendo la ecuación de moderación.

Como el ^{238}U es el isótopo resonante más importante en la mayoría de los reactores, lo más lógico es calcular los factores lambda con respecto a este isótopo. El procedimiento para calcular λ para un dado isótopo, por ejemplo ^{16}O , y por simplicidad para un dado grupo de energía, es el siguiente:

1. Calcular las secciones eficaces efectivas de absorción para una mezcla homogénea infinita de $^{238}\text{U}:\text{}^1\text{H}$ a distintas diluciones, es decir distintos σ_0 , definido como:

$$\sigma_0 = \frac{N_{1\text{H}}\sigma_{P,1\text{H}}}{N_{238\text{U}}} \quad (2.13)$$

Donde N indica la densidad numérica y σ_P el scattering potencial. Luego armar una tabla de dilución (σ_0) vs. sección eficaz efectiva (σ_{abs})

2. Por otro lado calcular las secciones eficaces efectivas de absorción para la mezcla homogénea de $^{238}\text{U}:\text{}^1\text{H}:\text{}^{16}\text{O}$.
3. Calcular la dilución equivalente $\sigma_{0,equiv.}$ que se debería tener en la mezcla $^{238}\text{U}:\text{}^1\text{H}$ para obtener la misma sección eficaz efectiva σ_{abs} obtenida en la mezcla $^{238}\text{U}:\text{}^1\text{H}:\text{}^{16}\text{O}$. Esto se hace interpolando el valor de σ_{abs} en la tabla generada en el ítem 1. Es decir:

$$\sigma_{0,equiv.} = \frac{\sigma_{abs} - \sigma_{abs}^{tabla}(\sigma_{0,1})}{\sigma_{abs}^{tabla}(\sigma_{0,2}) - \sigma_{abs}^{tabla}(\sigma_{0,1})}\sigma_{0,2} + \frac{\sigma_{abs} - \sigma_{abs}^{tabla}(\sigma_{0,2})}{\sigma_{abs}^{tabla}(\sigma_{0,1}) - \sigma_{abs}^{tabla}(\sigma_{0,2})}\sigma_{0,1} \quad (2.14)$$

Donde σ_{abs}^{tabla} son las secciones eficaces efectivas tabuladas en el ítem 1., y $\sigma_{0,1}$ y $\sigma_{0,2}$ son las diluciones de la mezcla $^{238}\text{U}:\text{}^1\text{H}$ cuya σ_{abs} son más cercanas a la de la mezcla $^{238}\text{U}:\text{}^1\text{H}:\text{}^{16}\text{O}$.

4. Por último, el valor de $\lambda_{16\text{O}}$ debe ser tal que la dilución de la mezcla $^{238}\text{U}:\text{}^1\text{H}:\text{}^{16}\text{O}$ sea igual a $\sigma_{0,equiv.}$, es decir,

$$\sigma_{0,equiv.} = \frac{N_{1\text{H}}\sigma_{P,1\text{H}} + \lambda_{16\text{O}}N_{16\text{O}}\sigma_{P,16\text{O}}}{N_{238\text{U}}} \quad (2.15)$$

Despejando el valor de lambda:

$$\lambda_{16\text{O}} = \frac{N_{238\text{U}}\sigma_{0,equiv.} - N_{1\text{H}}\sigma_{P,1\text{H}}}{N_{16\text{O}}\sigma_{P,16\text{O}}} \quad (2.16)$$

El mismo procedimiento se deberá realizar para todos los grupos resonantes.

Datos de subgrupos

En este trabajo no se desarrolló el tema de los parámetros de subgrupo. Por el momento, se utilizarán los datos de subgrupo que calcula CONDOR a partir de las integrales de resonancia y factores lambda, los cuales están optimizados para la biblioteca ESIN2001 de 69 grupos. Información detallada de este tratamiento se puede encontrar en [10].

2.2.3. Datos de Quemado

Los datos de quemado incluyen yields de fisión, que se encuentran en el MF=8 de los archivos evaluados. En el MT=454 están los yields independientes, es decir, yields directos de fisión. En el MT=459 están los yields acumulados, teniendo en cuenta todas las cadenas de decaimiento. Algunos isótopos tienen datos a más de una energía de neutrón incidente, por lo que se podrán generar datos de quemado para distintos tipos de reactores utilizando espectros típicos de cada reactor. Las constantes de decaimiento se presentan en MF=8/MT=457.

2.2.4. Datos de Neutrones Retardados

En el formato nuevo ESIN II se incluyen datos de neutrones retardados. Los datos de neutrones retardados en ENDF/B-VII.1 están basados en el esquema de 6 grupos de precursores. El número promedio de neutrones retardados producidos por fisión $\bar{\nu}_d(E)$ como función de la energía del neutrón incidente se encuentran en MF=1/MT=455, junto con las constantes de decaimiento de cada grupo de precursores. En el esquema multigrupo que se obtiene en el output de GROUPT, $\bar{\nu}_d(E)$ se encuentra en MF=3/MT=455, y es un vector de longitud NOG. A modo de ejemplo, se muestra en la figura 2.3 el $\bar{\nu}_d(E)$ para ^{235}U , en un esquema de 69 grupos.

La fracción de neutrones retardados, $P_i(E)$, para cada familia de precursores se encuentran en MF=5/MT=455. Estos contienen también el espectro de los neutrones retardados. Se muestra en la figura 2.4 la información contenida en el GENDF MF=5/MT=455 del ^{235}U en un esquema de 69 grupos. Los $P_i(E)$ están normalizados, de modo que:

$$\sum_{i=1}^6 \int_{E_{Min}}^{E_{Max}} P_i(E) d(E) = 1 \quad (2.17)$$

Además, para cada grupo de precursores, se verifica que:

$$b_i = \frac{\beta_i}{\beta} = \int_{E_{Min}}^{E_{Max}} P_i(E) d(E) \quad (2.18)$$

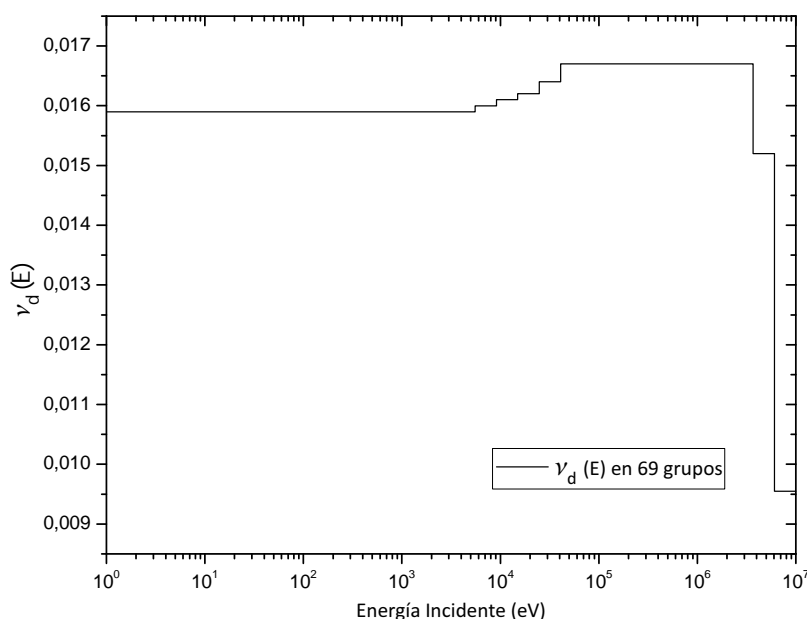


Figura 2.3: Numero de neutrones retardados producidos por fisión del ^{235}U en esquema de 69 grupos, extraídos del archivo GENDF, con datos evaluados de ENDF/B-VII.1

Es decir, el espectro de cada precursor no se encuentra normalizado a la unidad, sino a la fracción b_i correspondiente a cada familia de precursores.

2.2.5. Espectros de fisión

En el formato ESIN se utiliza un mismo espectro de fisión para todos los isótopos fisiles, mientras que en el formato ESIN II se guarda un espectro de fisión para cada isótopo fisil. El espectro de fisión $\chi(E)$, independiente de la energía del neutrón incidente, para un dado isótopo en esquema multigrupo se encuentra en el GENDF MF=6/MT=18, en forma de vector de NOG elementos. En la figura 2.5 se muestra el $\chi(E)$ para el ^{235}U extraído del output de GROUPT utilizando datos de ENDF/B-VII.1, y el $\chi(E)$ utilizado en el Proyecto de Actualización de Librerías WIMS-D [11]. Este último está compuesto por la suma pesada de los espectros de ^{235}U , ^{238}U y ^{239}Pu , siendo sus pesos 54 %, 8 %, y 38 % respectivamente.

2.3. Conclusiones del capítulo

Se desarrolló una metodología que cubre la generación de datos multigrupo mediante el uso de los distintos módulos del sistema de procesamiento NJOY, también se definieron las secciones eficaces utilizadas por el código CONDOR y se desarrolló una metodología para obtener datos resonantes. Por otro lado, se habló sobre algunos parámetros necesarios para el desarrollo de bibliotecas en el nuevo formato ESIN II.

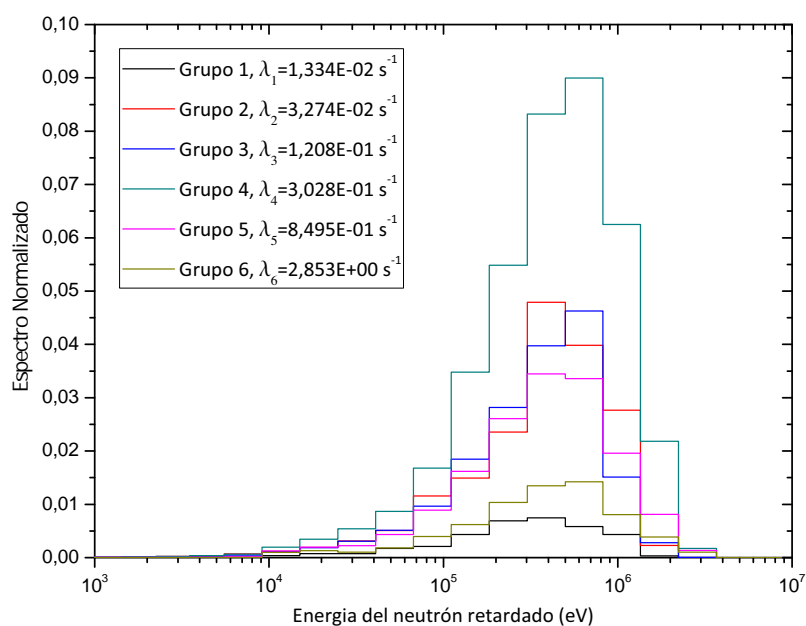


Figura 2.4: Espectro de los neutrones retardados de ^{235}U en un esquema de 69 grupos, extraídos del GENDF en MF=5/MT=455, utilizando los datos evaluados ENDF/B-VII.1

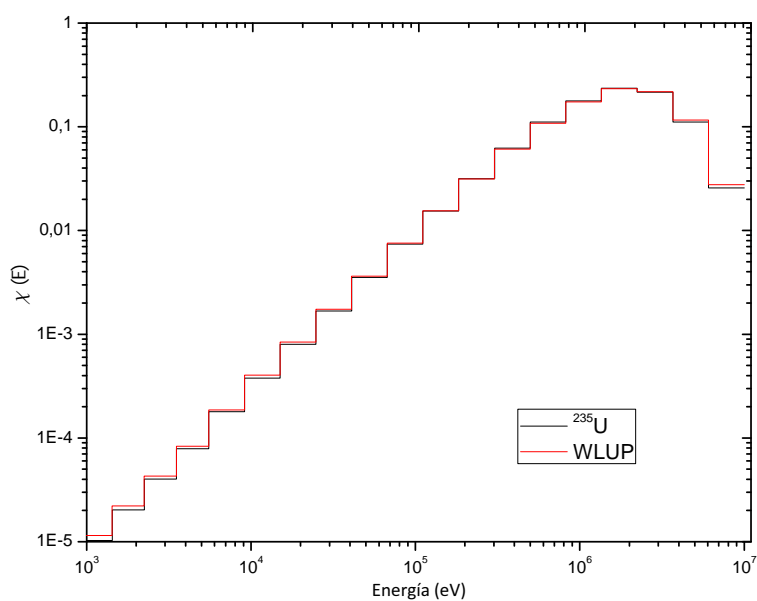


Figura 2.5: Espectro de fisión de WLUP y del ^{235}U extraído del GENDF en MF=6/MT=18 en un esquema de 69 grupos

Capítulo 3

Generación de la biblioteca de trabajo ESIN 1

En este capítulo se explicara en detalle la implementación de la metodología propuesta en el capítulo anterior. Para validar la metodología del cálculo de los distintos parámetros de la biblioteca se generó una biblioteca con cinco isótopos: ^1H , ^{16}O , ^{27}Al , ^{235}U y ^{238}U , con el fin de realizar algunos benchmarks básicos. Se decidió generar una biblioteca en el formato de ESIN 1, ya que el formato ESIN II aún está en etapa de desarrollo.

3.1. Cálculo de constantes multigrupo

Se trabajó con la versión 99.393 de NJOY. Los parámetros utilizados en cada módulo se describen a continuación. En el apéndice [A.1](#) se presenta un ejemplo de input de NJOY.

3.1.1. RECONR

Se utilizó una tolerancia de reconstrucción de 0,1 % para todos los isótopos, excepto para el ^{238}U y ^{235}U para el cual se utilizó 0,5 % para reducir los tiempos de cálculo.

3.1.2. BROADR

Se trabajó con una tolerancia de 0,1 % para todos los isótopos. Las temperaturas elegidas para cada isótopo se presentan en la tabla [3.1](#).

3.1.3. UNRESR

Para el cálculo del auto-apatallamiento en la zona no resuelta, para los isótopos ^{235}U y ^{238}U , se usaron las diluciones que se presentan en la tabla [3.2](#).

Tabla 3.1: Temperaturas utilizadas en el módulo BROADR, para cada isotopo

Isótopos	Temperaturas
^1H	296, 350, 400, 450, 500, 600
^{16}O	293, 450, 600, 900, 1100
^{27}Al	293
^{235}U	293, 600, 900, 1100
^{238}U	293, 600, 900, 1100

Tabla 3.2: Diluciones, en barns, usadas en el cálculo de auto-apantallamiento en los isotopos resonantes

Isótopo	Diluciones (σ_0)									
^{235}U	200	500	800	1200	1800	2800	4500	8000	$3,0 \times 10^4$	$1,0 \times 10^{10}$
^{238}U	10	28	52	64	140	260	1000	3600	$2,0 \times 10^4$	$1,0 \times 10^{10}$

3.1.4. THERMR

Para el ^1H se utilizó la ley de scattering de H en H_2O , mientras que para los otros 4 isotopos se usó el modelo de gas libre. La tolerancia se fijó a 0,1 %, y la energía máxima del tratamiento térmico se fijó en 4 eV.

3.1.5. GROUPE

Se utilizó la estructura de grupos XMAS de 172 grupos. Esta estructura se desarrolló en Francia y es utilizada generalmente para el cálculo de reactores térmicos debido a que tiene una discretización fina en el rango de las resonancias de baja energía del ^{238}U . La estructura XSMAS 172 está incorporada entre las opciones del módulo GROUPE (IGN=18, xmas nea-lanl). En el apéndice A.2 se presenta la estructura de los grupos.

Para la condensación de las secciones eficaces se utilizó un espectro de un PWR a mitad de vida. Esta opción también está incorporada en el módulo GROUPE (IWT=5, epri-cell lwr).

Para los isotopos ^{238}U y ^{235}U , se utilizó la función Flux Calculator de GROUPE para calcular el espectro en el rango resonante de forma detallada. En la figura 3.1 se muestra el espectro en formato multigrupo para el pesado de las secciones eficaces del ^{238}U para dos diluciones distintas.

3.2. Extracción de los datos multigrupo

El siguiente paso para poder generar la biblioteca a partir de los datos procesados por NJOY es extraer la información del output del módulo GROUPE. Las secciones efi-

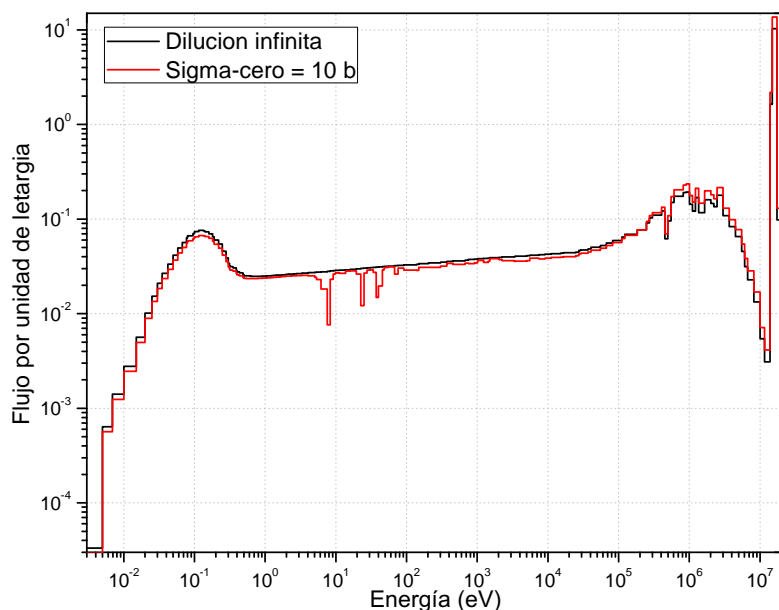


Figura 3.1: Espectro para condensación de secciones eficaces del ^{238}U

caces contenidas en dicho output mantienen la misma estructura jerárquica que poseen los archivos de datos evaluados. Para realizar esta función se desarrolló el programa GENDF_READER que recibe el output de GROUPT como entrada y devuelve un arreglo con estructura tipo árbol. Todos los programas desarrollados se escribieron en el lenguaje de programación Python. La estructura tiene seis niveles: MF, MT, Temperatura, Sigma-cero, Orden de expansión de Legendre y finalmente las secciones eficaces correspondientes, esta estructura se esquematiza en la figura 3.2. Los MF que contienen datos útiles para la generación de la biblioteca ESIN 1 son el MF 1, 3 y 6. En el MF 1 se guardan la estructura de grupos, los sigma-cero correspondientes a las distintas diluciones del tape, y el peso atómico del isótopo. En el MF 3 se guardan todos los datos con estructura de vector: secciones eficaces por grupo, vectores χ , ν y ξ . En el MF 6 se guardan las matrices de transferencia de un grupo a otro.

La salida de este programa se utiliza en las distintas rutinas que calculan los distintos parámetros de la biblioteca.

3.3. Cálculos de parámetros de biblioteca ESIN 1

A continuación se calculan los distintos parámetros de la biblioteca de trabajo.

3.3.1. Integrales de resonancia

Se desarrolló la rutina TABLAS_RI que calcula las integrales de resonancia. La rutina tiene como input las siguientes variables:

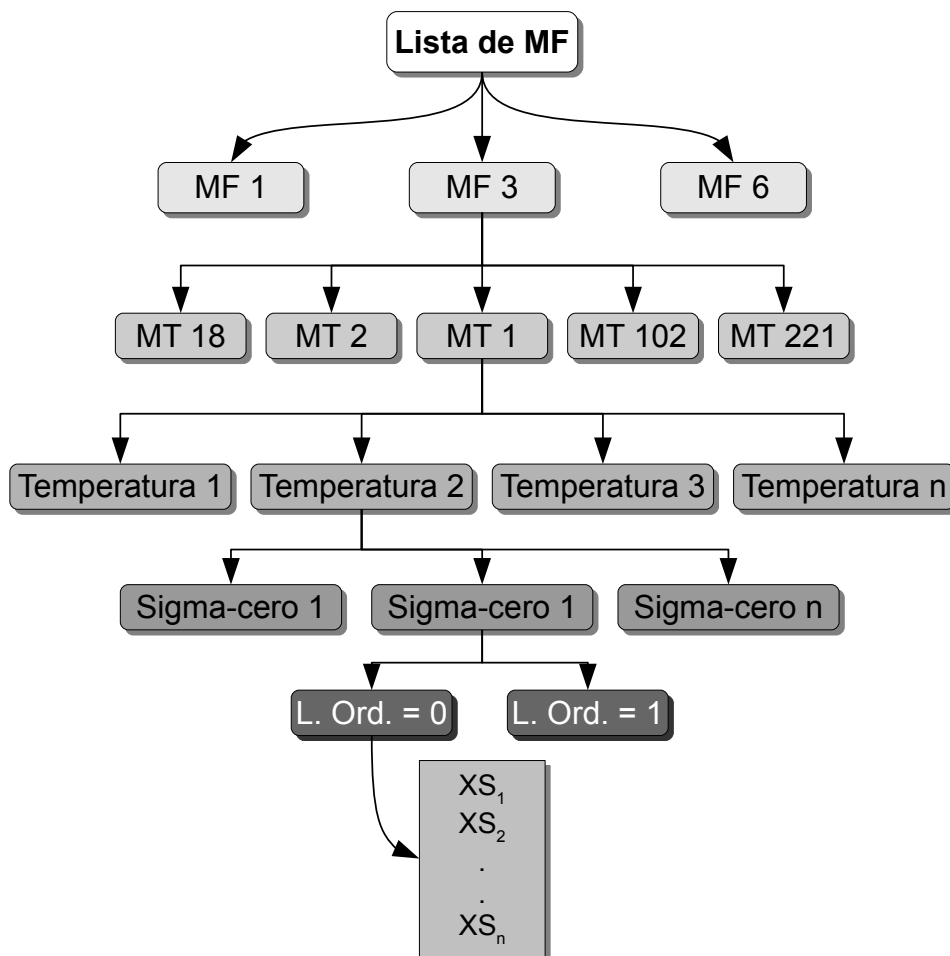


Figura 3.2: Esquema de estructura de datos jerárquica en el código GENDF_READER

- Lista MF que se generó en GENDF_READER, ver figura 3.2
- El identificador IDCODÉ que determina si el resonante es fisiónable o solo absorbente
- El producto $\lambda * \sigma_P$ del resonante
- El grupo resonante de menor energía y el de mayor energía.

De la Lista MF se extraen los MT 18, 102 y 452 del MF 3, es decir las secciones eficaces de fisión, absorción, y el vector ν . Se recorren todas las temperaturas y diluciones del tape, y para cada grupo resonante se calcula la integral de resonancia de absorción según la fórmula 2.11. Si el isótopo es fisiónable se calcula también la integral de resonancia de fisión según la fórmula 2.12.

A continuación se extrae el vector de σ_0 del MF 1. El sigma-cero utilizado en el cálculo

de las secciones eficaces efectivas en el módulo GROUPR se define como:

$$\sigma_0 = \sum_{j \neq R} \frac{N_j \lambda_j \sigma_{P,j}}{N_R} \quad (3.1)$$

Donde N es la densidad atómica, σ_P es el scattering potencial, λ es el factor de resonancia intermedia, y R identifica al isotopo resonante. A diferencia de σ_0 , el σ_B utilizado en el código CONDOR para interpolar en las tablas resonantes incluye en la sumatoria al isotopo resonante, por lo tanto se calculan los σ_B de cada dilución como:

$$\sigma_B = \sigma_0 + \lambda_R * \sigma_{P,R} \quad (3.2)$$

Es por esta razón que los factores λ y la sección de scattering potencial para los isotopos resonantes se deben considerar constantes para todo los grupos. Todos los parámetros generados por GROUPR tienen una estructura de grupos de menor a mayor energía, mientras que CONDOR tiene una estructura de grupos de mayor a menor energía. Por lo tanto, todas las rutinas generadas deben realizar una inversión en el orden de sus constantes. Finalmente la rutina devuelve una estructura tipo árbol, con las integrales resonantes en función de la dilución, para todas las temperaturas y diluciones que contenía el output de GROUPR.

3.3.2. Factores Goldstein-Cohen

Para los isotopos con tablas de integrales resonantes se usa un valor constante de λ . En este trabajo se utilizó $\lambda = 0,2$ para el ^{235}U y ^{238}U , valor extraído del proyecto de actualización de las bibliotecas de WIMS-D [11].

Para calcular los factores λ para los isotopos no resonantes se escribió la rutina LAMB-DAS. El input de esta rutina contiene los siguientes archivos:

- Lista MF generada por GENDF_READER de la mezcla homogénea ^{238}U y ^1H
- Lista de la mezcla homogénea ^{238}U , ^1H y el isotopo X , cuyo λ_X se va a calcular
- El grupo de mayor y menor energía en el rango de grupos resonantes
- La fracción γ del isotopo X en la mezcla $^{238}\text{U} : ^1\text{H} : X$

El primer paso es extraer los MT 102 y MT 18 del MF3, es decir las secciones eficaces de captura y fisión, con los cuales se calculan la sección eficaz de absorción. Luego se calculan los $\sigma_{0,equiv.}$ con la formula 2.14.

La implementación de la formula 2.16 para el cálculo de λ en cada grupo se realiza teniendo en cuenta las siguientes relaciones:

En la mezcla $^{238}\text{U} : ^1\text{H} : \text{X}$ se tiene que

$$\frac{N_H \sigma_{P,H}}{N_R} = \sigma_0(1 - \gamma) \quad (3.3)$$

$$\frac{N_X \sigma_{P,X}}{N_R} = \sigma_0 \gamma \quad (3.4)$$

Reemplazando estas relaciones en la ecuación 2.16 se llega a:

$$\lambda_X = \frac{\frac{\sigma_{0,equiv.}}{\sigma_0} - 1 + \gamma}{\gamma} \quad (3.5)$$

Que es la ecuación que utiliza el código LAMBDA, cuyo output es un vector con los factores λ para cada grupo resonante.

Este método de cálculo tiene problemas para los grupos en el rango resonante que en realidad no poseen una resonancia, pues las secciones eficaces de estos grupos dependerán muy poco de la dilución, o directamente serán independientes de la dilución, trayendo problemas en el calculo de $\sigma_{0,equiv.}$. En la figura 3.3 se muestra la sección eficaz de absorción del ^{238}U en el rango resonante, en el esquema de 172 grupos de energía, donde se puede observar que en ciertos grupos no hay dependencia con el nivel de dilución. Esto produce que los factores λ salgan del rango $[0,1]$, lo que no tiene significado físico. Para solucionar esto, lo que se hace es calcular otro set de factores λ utilizando ^{235}U como isotopo resonante, que es el siguiente resonante más importante luego del ^{238}U . Entonces, para los grupos en los que la mezcla de ^{238}U produce factores λ fuera de rango, se usan los valores obtenidos con el ^{235}U . Sin embargo, en el esquema 172 grupos, siguen quedando grupos resonantes en los que ni el ^{235}U ni el ^{238}U tienen resonancias, y los factores λ salen del rango $[0,1]$. En estos casos, el código utiliza el valor de λ del grupo anterior, que haya estado dentro del rango aceptable. En la figura 3.4 se muestran los factores calculados para el ^{16}O y el ^{27}Al .

Si bien en este trabajo se extrajo el valor de $\lambda = 0, 2$ para el uranio del proyecto WLUP, un valor constante de lambda se puede obtener condensando la sección eficaz efectiva de todo el rango resonante en un solo grupo, y luego usar el mismo algoritmo descrito en esta sección para hallar lambda.

3.3.3. Secciones eficaces P0

La rutina XSP0 se encarga de calcular las secciones eficaces de transporte, absorción, fisión, nu-fisión, scattering y vector de in-scattering.

La entrada de este programa consiste en los siguientes elementos:

- Lista MF con los datos evaluados del isótopo.
- vector J para el cálculo de la sección eficaz de transporte.

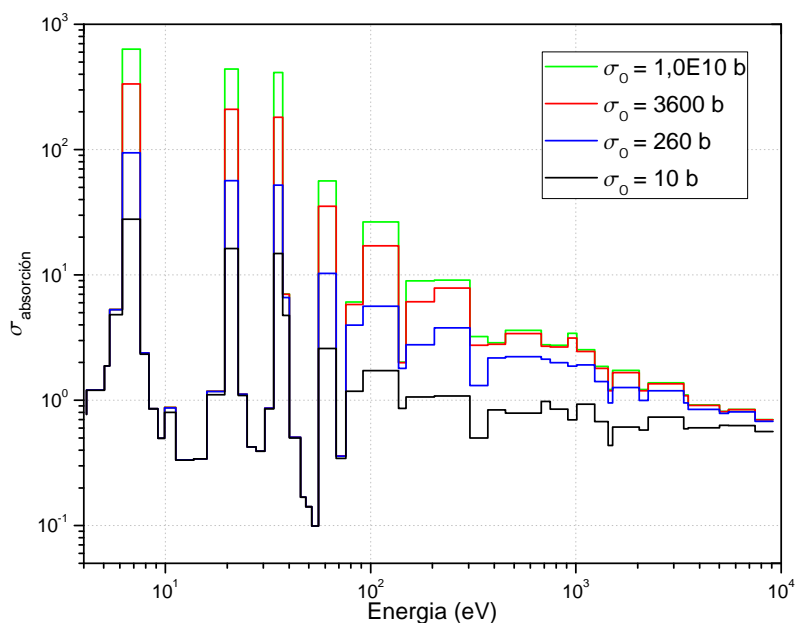


Figura 3.3: Sección eficaz de absorción de ^{238}U en el rango resonante a distintas diluciones en esquema multigrupo 172 XSMAS

De la lista MF se extraen todos los datos necesarios para el cálculo de cada sección eficaz, los cuales se definen a continuación.

Sección eficaz de scattering y vector de in-scattering

Se utilizan los siguientes MT extraídos del MF 3 y MF 6:

- MT 2: Sección eficaz de scattering elástico.
- MT 221: Sección eficaz de scattering elástico para energías térmicas, calculadas por el módulo THERMR.
- MT 16 y 17: secciones eficaces $(n, 2n)$ y $(n, 3n)$ respectivamente.
- MF 3, MT 4: Suma de todas las secciones eficaces de scattering inelástico.
- MF 6, los MT entre 51 y 91: todas las matrices de scattering inelástico.

Sección eficaz de absorción

Se utilizan los siguientes MT extraídos del MF 3:

- MT 102: Sección eficaz de captura radiativa.
- MT 18: Sección eficaz de fisión.
- MT 16 y 17: secciones eficaces $(n, 2n)$ y $(n, 3n)$ respectivamente.

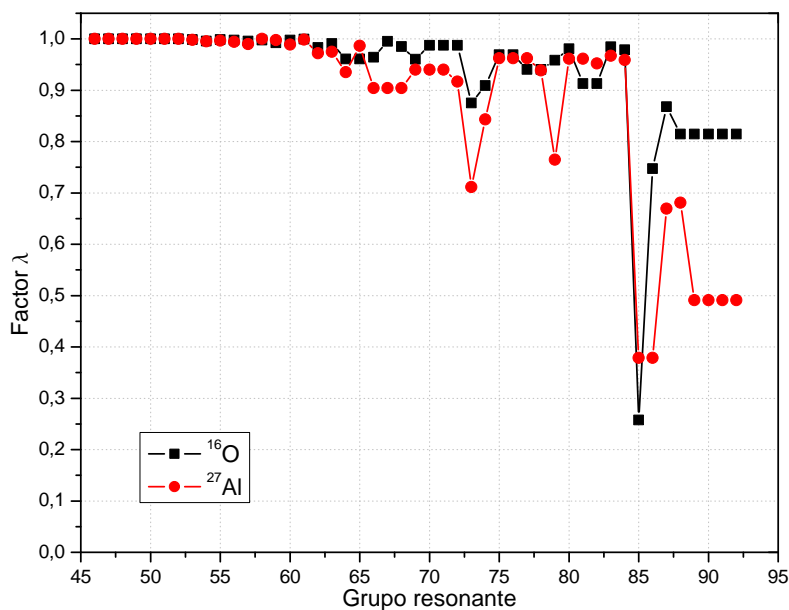


Figura 3.4: Factores λ para calculados por la rutina LAMBIDAS

Sección eficaz de transporte

Se utilizan los mismos MT que la sección eficaz de absorción y scattering, para reconstruir la sección eficaz total, y para realizar la corrección de transporte se extraen las siguientes matrices del MF 6

- MT 2: Sección eficaz de scattering elástico.
- MT 221: Sección eficaz de scattering elástico para energías térmicas, calculadas por el módulo THERMR.
- Los MT entre 51 y 91: todas las matrices de scattering inelástico.

Sección eficaz de fisión y nu-fisión

Se extraen del MF3:

- MT 18: Sección eficaz de fisión.
- MT 452: Vector de producción de neutrones por fisión (instantáneos mas retardados).

Se realiza un loop sobre todas las temperaturas presentes. La sección eficaz de absorción, fisión y nu-fisión se calculan directamente como se describe en el capítulo anterior.

El cálculo de la sección eficaz de scattering elástico se separa en dos partes, en el rango de energías térmicas se usan las secciones eficaces del módulo THERMR en MT 221,

en el rango epitérmico se utilizan las secciones eficaces del MT 2. En la figura 3.5 se comparan ambas secciones eficaces.

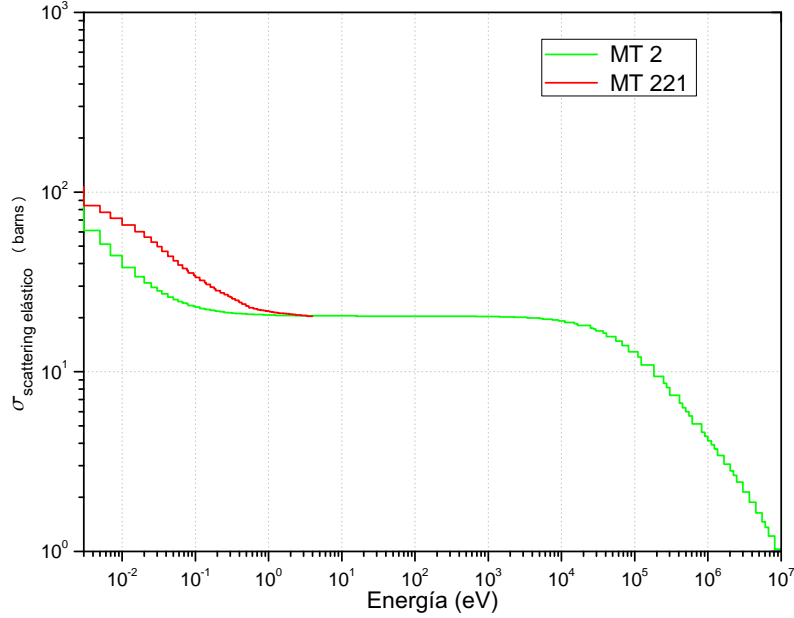


Figura 3.5: Comparación de $\sigma_{scat,elastico}$ de los MT 221 y MT 2 para el ^1H

Una vez definido el scattering elástico se suma al inelástico y se corrige con las secciones eficaces $(n, 2n)$ y $(n, 3n)$ como se definió en la fórmula 2.5

El cálculo del término de corrección de transporte se realiza extrayendo los elementos de la expansión de Legendre de orden 1 de las matrices de scattering. El tratamiento es distinto para el rango térmico y el epitérmico. En el rango térmico se resuelve la siguiente ecuación:

$$\sigma_{S1,g} = \frac{\sum_{g'=1}^{NOG} \sigma_{S1,g' \rightarrow g} J_{g'}}{J_g} \quad (3.6)$$

Donde $\sigma_{S1,g' \rightarrow g}$ son los elementos de la matriz calculada como la suma de las matrices de scattering elástico de THERMER, MT 221, y todas las secciones eficaces inelásticas, MT entre 51 y 91, siempre utilizando los elementos de la expansión de Legendre de orden 1.

El vector corriente J que se usa en este trabajo se corresponde con el utilizado en el proyecto de actualización de la biblioteca WIMS-D (WLUP) [11], el cual se calculó con el código CONDOR utilizando el método B_1 .

En el rango epitérmico la corrección de transporte se realiza de la siguiente manera:

$$\sigma_{S1,g} = \sum_{g'=1}^{NOG} \sigma_{S1,g \rightarrow g'} \quad (3.7)$$

En este caso $\sigma_{S1,g \rightarrow g'}$ son los elementos P1 de la matriz calculada como la suma de las matrices de scattering inelástico más la matriz de scattering elástico del MT 2.

El cálculo de los vectores de in-scattering se lleva a cabo sumando todas las matrices de scattering inelástico, más las matrices $(n, 2n)$ y $(n, 3n)$ normalizadas, más la matriz de scattering elástico, donde nuevamente se usa el MT 221 para energías térmicas y MT 2 para energías epitérmicas. Luego se realiza la corrección de transporte a los elementos de la diagonal. Aquí se usa la misma corrección de transporte que se usó para calcular la sección eficaz de transporte. Por último se guarda la matriz en forma de vectores con los elementos de in-scattering a cada grupo.

En este trabajo se realizó la corrección de transporte completa solo para la zona térmica porque se contaba con el vector J calculado en el proyecto WLUP. Sin embargo, el vector J se puede calcular para cualquier estructura de grupos, generando primero una biblioteca sin la corrección de transporte completa y con ella calcular con CONDOR el espectro de corriente B1, para luego utilizarlo en la generación de la biblioteca final. Finalmente el programa XSP0 devuelve una lista que contiene todas las secciones eficaces P0, cuya estructura se esquematiza en la figura 3.6

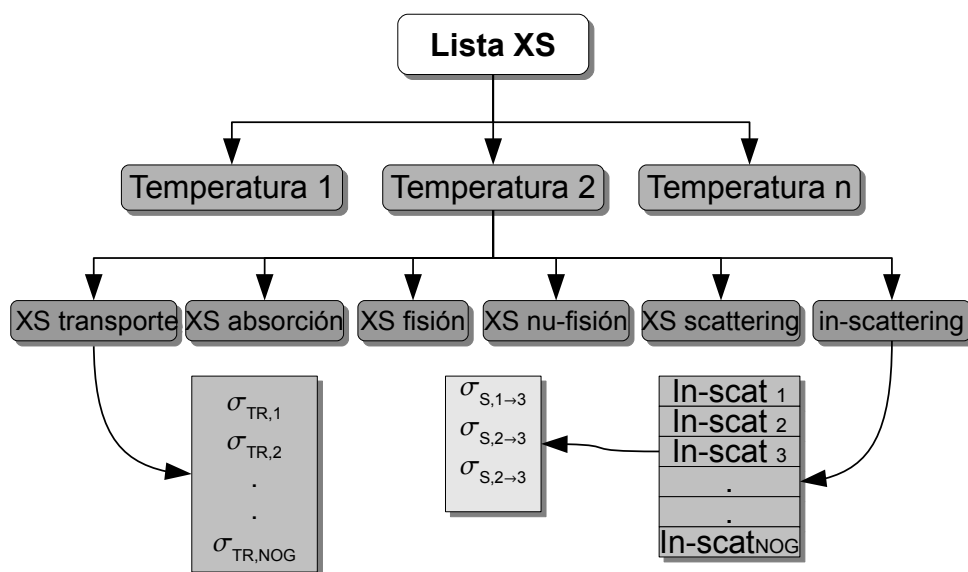


Figura 3.6: Esquema de estructura de datos Lista XS del output de la rutina XSP0

3.3.4. Secciones eficaces P1

La rutina P1DATA se encarga de calcular las secciones eficaces de scattering P1 y el vector de in-scattering P1. La entrada de este programa consiste en una lista MF generada por GENDF_READER.

La forma de obtener la matriz de scattering P1 es idéntica a como se obtiene la matriz de scattering P0, tomando los elementos de la expansión de Legendre de orden 1 en

lugar de orden 0. El vector de in-scattering P1 se obtiene de la misma manera que el in-scattering P0, y la sección eficaz de scattering P1 se calcula sumando los elementos de out-scattering en cada grupo.

Esta rutina pudo haber estado incluida en la rutina XSP0, pues realiza acciones idénticas, pero se decidió separarla pensando en la posibilidad de expandirla para calcular secciones eficaces de mayores órdenes de expansión de Legendre, que será útil en la generación de bibliotecas en formato ESIN II.

3.3.5. Datos resonantes smooth

Los datos resonantes smooth son las secciones eficaces que se usan en el rango resonante, pero que no presentan resonancias. A diferencia de las integrales de resonancia, se presentan para todos los isótopos de la biblioteca.

Se escribió la rutina SMOOTH que calcula los parámetros resonantes smooth descritos en el capítulo 2. La rutina recibe como input los siguientes elementos:

- Lista MF generada por la rutina GENF_READER,
- Lista XS generada por la rutina XSP0,
- vector de factores λ generado por la rutina LAMBDA_S,
- grupo resonante de mayor energía y grupo resonante de menor energía,
- bandera IFIS que determina si el isótopo es resonante o no,
- σ_p calculado como $4\pi a^2$ donde a es el radio atómico. Este valor se usa solo para los isótopos resonantes y se lee si IFIS es mayor a uno.

Los datos resonantes smooth no dependen de la temperatura. Todos los elementos que se extraen de la Lista MF y Lista XS corresponden con los de la primera temperatura de la lista. El cálculo de los parámetros se realiza de manera distinta dependiendo de si el isótopo tendrá tablas de resonancia o no. A continuación se explica cómo se calcula cada parámetro.

Sección eficaz potencial (SPOT)

La sección eficaz potencial σ_p , como se comentó en la sección 3.3.1 se considera constante para isótopos resonantes. Si IFIS es mayor a uno, se lee σ_p del input y se copia el mismo valor para todos los grupos de energía resonantes. Si IFIS es cero, es decir, el isótopo no posee integrales de resonancia, se extrae la sección eficaz de scattering elástico de la Lista XS generada por XSP0 y se seleccionan los grupos resonantes.

Lambda*Sección eficaz potencial (LSPOT)

El producto $\lambda\sigma_p$ también se calcula usando σ_p calculado en el paso anterior. Si el isotopo no tiene tablas resonantes, se utiliza el vector de λ_g calculadas por la rutina LAMBDA. Si el isotopo tiene tablas de integrales resonantes, como se describió en la sección 3.3.1, el valor de λ debe ser constante. En este caso se lee el input de lambda como si fuese una constante, y se copia el mismo valor a todos los grupos resonantes.

Poder de moderación (XISDPU)

Para calcular el poder de moderación $\frac{\xi\sigma_p}{\Delta u}$ se deben extraer de la Lista MF:

- Del MF 3, MT 252 se extrae el vector ξ
- Del MF 1 se extrae la estructura energética de los grupos, para el cálculo de Δu

Los valores de Δu para cada grupo se calculan como:

$$\Delta u_g = \ln\left(\frac{E_{max,g}}{E_{min,g}}\right) \quad (3.8)$$

Donde $E_{max,g}$ y $E_{min,g}$ son los límites superior e inferior del grupo g . Se calcula $\frac{\xi\sigma_p}{\Delta u}$ para cada uno de los grupos resonantes.

Vector ν (RNJU)

Si el isotopo no es fisil, se genera un vector de ceros. Si el isotopo es fisil se extraen los valores de ν en el rango de energías resonantes del MF 3, MT 452.

Finalmente la rutina devuelve una lista de cuatro elementos conteniendo los vectores SPOT, LSPOT, XISDPU y RJNU.

3.3.6. Espectro de fisión

La biblioteca ESIN usa el mismo espectro de fisión para todos los isotopos fisiles. En este trabajo se tienen dos isotopos fisiles: ^{235}U y ^{238}U . Para decidir que espectro de fisión usar se modelo un pin de óxido de uranio levemente enriquecido en CONDOR con la biblioteca ESIN2001 para obtener la tasa de fisiones en el ^{235}U y ^{238}U . De esta manera se encontró que el 93 % de las fisiones se daban en el ^{235}U y el 7 % en el ^{238}U . Entonces se calculó el espectro de fisión como la suma pesada de los espectros de fisión de ^{235}U y ^{238}U , siendo estos pesos de 0,93 y 0,07 respectivamente.

3.4. Generación de la biblioteca de trabajo

Una última rutina utiliza todas las rutinas anteriores para generar cada parámetro, calcula los distintos datos de la cabecera de la biblioteca, y genera el archivo de la biblioteca de trabajo en formato ASCII. Este archivo se pasa a formato binario utilizando el programa ESINLM (ESIN Library Management) desarrollado en INVAP.

3.5. Conclusiones del capítulo

Se describió cómo implementar mediante códigos la metodología para el desarrollo de las bibliotecas. La implementación se hizo con una biblioteca de 5 isotopos, adecuada para la validación mediante benchmark básicos. En el próximo capítulo se trata la validación de la biblioteca con el código CONDOR.

Capítulo 4

Validación de la biblioteca

Se generaron tres bibliotecas ESIN 1 a 172 grupos, utilizando tres fuentes distintas de datos evaluados: ENDF-B-VII.1, CENDL-3.1, JEFF-3.2. Para validar la biblioteca ESIN 1 generada con la metodología propuesta se utilizaron cinco benchmarks: BAPL-UO₂ – 1, BAPL-UO₂ – 2 y BAPL-UO₂ – 3 [12] y TRX-1 y TRX-2 [13].

4.1. Descripción de celdas BAPL-UO₂

Es un benchmark experimental que consiste en un pin de óxido de uranio con un enriquecimiento de 1,311 w% y un diámetro de 0,9728 cm en un arreglo triangular, moderado con agua liviana. Las propiedades físicas de la celda se presentan en la tabla 4.1. Los bucklings reportados se presentan en la tabla 4.3.

Tabla 4.1: Propiedades físicas de la celda BAPL

Región	Radio exterior (cm)	Isótopo	Concentración (10 ²⁴ átomos/cm ³)
Combustible	0,4864	²³⁵ U	3,1120 × 10 ⁻⁴
		²³⁸ U	2,3127 × 10 ⁻²
		¹⁶ O	4,6946 × 10 ⁻²
Vacío	0,5042	-	
Vaina	0,5753	²⁷ Al	6,025 × 10 ⁻²
Moderador	*	¹ H	6,676 × 10 ⁻²
		¹⁶ O	3,338 × 10 ⁻²

* Los *pitch* entre celdas son de 1,55780, 1,65230 y 1,80570 cm para BAPL 1, 2 y 3 respectivamente.

4.2. Descripción de celdas TRX

Es un benchmark experimental que consiste en un pin de uranio metálico con un enriquecimiento de 1,3 w% y un diámetro de 0,98297 cm en un arreglo triangular, moderado con agua liviana. Las propiedades físicas de la celda se presentan en la tabla 4.2. Los bucklings reportados se presentan en la tabla 4.3.

Tabla 4.2: Propiedades físicas de la celda TRX

Región	Radio exterior (cm)	Isótopo	Concentración (10^{24} átomos/cm ³)
Combustible	0,4915	²³⁵ U	$6,253 \times 10^{-4}$
		²³⁸ U	$4,7205 \times 10^{-2}$
Vacío	0,5042	-	
Vaina	0,5753	²⁷ Al	$6,025 \times 10^{-2}$
Moderador	*	¹ H	$6,676 \times 10^{-2}$
		¹⁶ O	$3,338 \times 10^{-2}$

* Los *pitch* entre celdas son de 1,8060 y 2,1740 cm para TRX 1 y 2 respectivamente.

Tabla 4.3: Buckling de las distintas celdas

Celda	Buckling [cm ⁻²]
BAPL-UO ₂ -1	$3,259 \times 10^{-3}$
BAPL-UO ₂ -1	$3,547 \times 10^{-3}$
BAPL-UO ₂ -1	$3,422 \times 10^{-3}$
TRX-1	$5,700 \times 10^{-3}$
TRX-2	$5,469 \times 10^{-3}$

Los parámetros integrales analizados son los siguientes:

- Relación entra capturas epitérmicas-térmicas del ²³⁸U:

$$\rho^{28} = \frac{\Sigma_{C,epth}^{238}}{\Sigma_{C,th}^{238}} \quad (4.1)$$

- Relación entra fisiones epitérmicas-térmicas del ²³⁵U:

$$\delta^{25} = \frac{\Sigma_{f,epth}^{235}}{\Sigma_{f,th}^{235}} \quad (4.2)$$

- Relación entra fisiones de ^{238}U y ^{235}U :

$$\delta^{28} = \frac{\Sigma_f^{238}}{\Sigma_f^{235}} \quad (4.3)$$

- Relación entra capturas de ^{238}U y fisiones de ^{235}U :

$$C^{*} = \frac{\Sigma_C^{238}}{\Sigma_f^{235}} \quad (4.4)$$

Todos los parámetros integrales fueron calculados utilizando corte térmico en 0,625 eV.

4.3. Resultados y análisis

El análisis de los parámetros se realizó con el código CONDOR v2.61. Se trabajó con el método de probabilidad de colisión y el método B1. Los inputs de CONDOR se encuentran en el apéndice B. Los resultados de los benchmarks BAPL se presentan en la tabla 4.4 y los TRX en la tabla 4.5 junto con los valores experimentales. Se presentan también los cocientes entre valores calculados y experimentales (C/E) graficados en las figuras 4.1, 4.2, 4.3, 4.4 y 4.5.

Tabla 4.4: Resultados de benchmark de celda BAPL

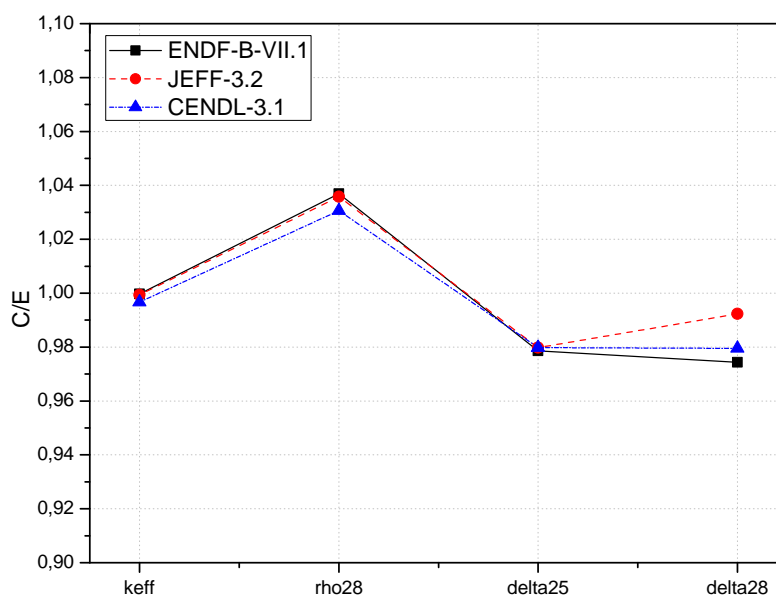
Celda	Parámetro	Experimental	ENDF-B-VII.1	JEFF-3.2	CENDL-3.1
BAPL-1	k_{eff}	1,0000	0,9997 (-27 pcm)	0,9994 (-62 pcm)	0,9967 (-330 pcm)
	ρ^{28}	$1,390 \pm 0,010$	1,4413 (3,69 %)	1,4398 (3,58 %)	1,4326 (3,06 %)
	δ^{25}	$0,084 \pm 0,002$	0,0822 (-2,10 %)	0,0823 (-2,07 %)	0,0823 (-1,99 %)
	δ^{28}	$0,078 \pm 0,004$	0,0760 (-2,53 %)	0,0774 (-0,75 %)	0,0764 (-2,04 %)
BAPL-2	k_{eff}	1,0000	1,0012 (118 pcm)	1,0009 (91 pcm)	0,9984 (-161 pcm)
	ρ^{28}	$1,120 \pm 0,010$	1,1933 (6,55 %)	1,1921 (6,44 %)	1,1860 (5,89 %)
	δ^{25}	$0,068 \pm 0,001$	0,0670 (-1,54 %)	0,0670 (-1,50 %)	0,0670 (-1,45 %)
	δ^{28}	$0,070 \pm 0,004$	0,0655 (-6,42 %)	0,0668 (-4,62 %)	0,0657 (-6,16 %)
BAPL-3	k_{eff}	1,0000	1,0016 (164 pcm)	1,0014 (142 pcm)	0,9992 (-84 pcm)
	ρ^{28}	$0,906 \pm 0,010$	0,9413 (3,89 %)	0,9403 (3,78 %)	0,9354 (3,24 %)
	δ^{25}	$0,052 \pm 0,001$	0,0515 (-1,02 %)	0,0515 (-0,97 %)	0,0515 (-0,95 %)
	δ^{28}	$0,057 \pm 0,0030$	0,0537 (-5,82 %)	0,0548 (-3,92 %)	0,0537 (-5,80 %)

4.3.1. Comparación entre bibliotecas

Los parámetros calculados con las tres bibliotecas tienen tendencias similares. Casi todos los resultados caen dentro de los límites de las incertezas experimentales. Para las bibliotecas generadas con datos ENDF-B-VII.1 y CEND3.1 el parámetro δ^{28} cae dentro de dos sigma del error experimental para las celdas BAPL-2 y 3, mientras

Tabla 4.5: Resultados de benchmarks TRX

Celda	Parámetro	Experimental	ENDF-B-VII.1	JEFF-3.2	CENDL-3.1
TRX-1	k_{eff}	1,0000	0,9945 (-552 pcm)	0,9940 (-601 pcm)	0,9913 (-873 pcm)
	ρ^{28}	$1,3200 \pm 0,0210$	1,3785 (4,43 %)	1,3765 (4,28 %)	1,3709 (3,86 %)
	δ^{25}	$0,0987 \pm 0,0010$	0,0972 (-1,56 %)	0,0972 (-1,53 %)	0,0973 (-1,43 %)
	δ^{28}	$0,0946 \pm 0,0041$	0,0977 (3,25 %)	0,0993 (4,95 %)	0,0984 (4,00 %)
	C^*	$0,7970 \pm 0,0080$	0,8002 (0,40 %)	0,7996 (0,32 %)	0,8083 (1,42 %)
TRX-2	k_{eff}	1,0000	0,9958 (-418 pcm)	0,9956 (-444 pcm)	0,9932 (-681 pcm)
	ρ^{28}	$0,8370 \pm 0,0160$	0,8721 (4,19 %)	0,8709 (4,05 %)	0,8673 (3,62 %)
	δ^{25}	$0,0614 \pm 0,0008$	0,0598 (-2,66 %)	0,0598 (-2,62 %)	0,0598 (-2,57 %)
	δ^{28}	$0,0693 \pm 0,0035$	0,0695 (0,33 %)	0,0709 (2,24 %)	0,0697 (0,58 %)
	C^*	$0,6470 \pm 0,0060$	0,6465 (-0,07 %)	0,6461 (-0,14 %)	0,6534 (0,99 %)

Figura 4.1: Cociente C/E de la celda BAPL-UO₂-1 de las tres bibliotecas generadas

que el parámetro ρ^{28} es levemente sobreestimado por las tres bibliotecas en los tres benchmarks. Los valores de k_{eff} están, en general, en concordancia con los valores experimentales. Estos resultados son satisfactorios, considerando la simplicidad de la metodología de generación de datos resonantes. Se espera que los resultados mejoren con el desarrollo de tablas resonantes a partir de mezclas heterogéneas, o con la generación de datos de subgrupos. Por otro lado se espera que el tratamiento resonante tenga menos peso para bibliotecas con mayor número de grupos.

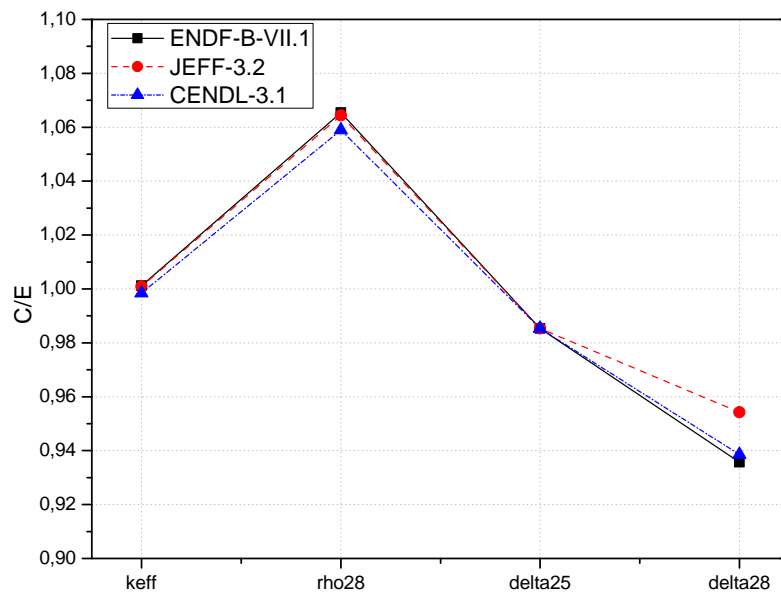


Figura 4.2: Cociente C/E de la celda BAPL-UO₂-2 de las tres bibliotecas generadas

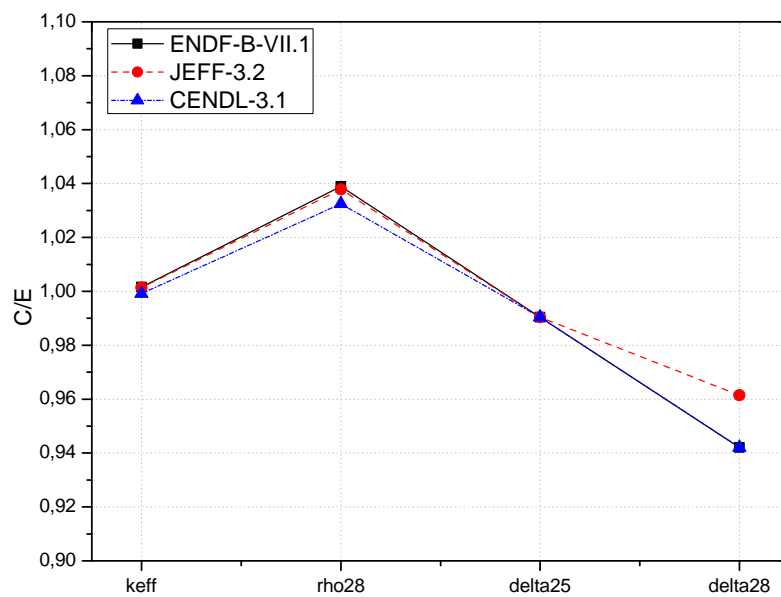


Figura 4.3: Cociente C/E de la celda BAPL-UO₂-3 de las tres bibliotecas generadas

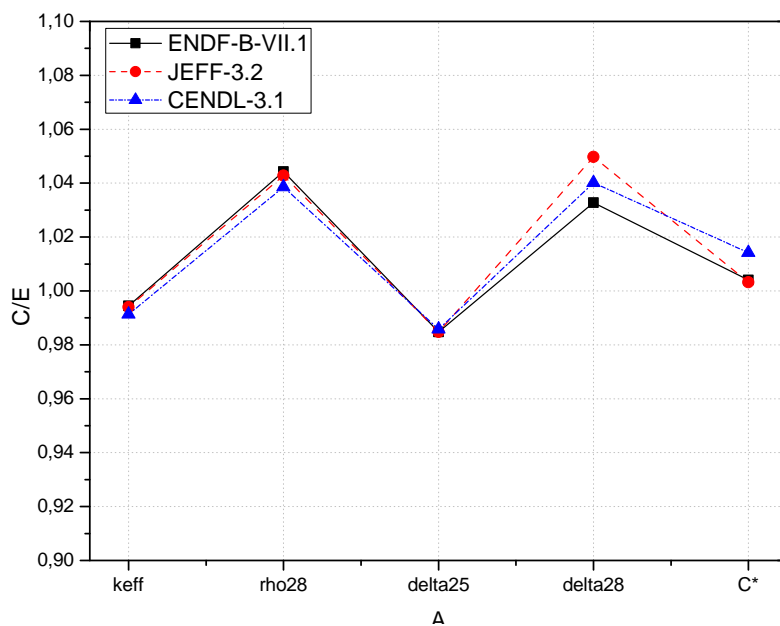


Figura 4.4: Cociente C/E de la celda TRX-1 de las tres bibliotecas generadas

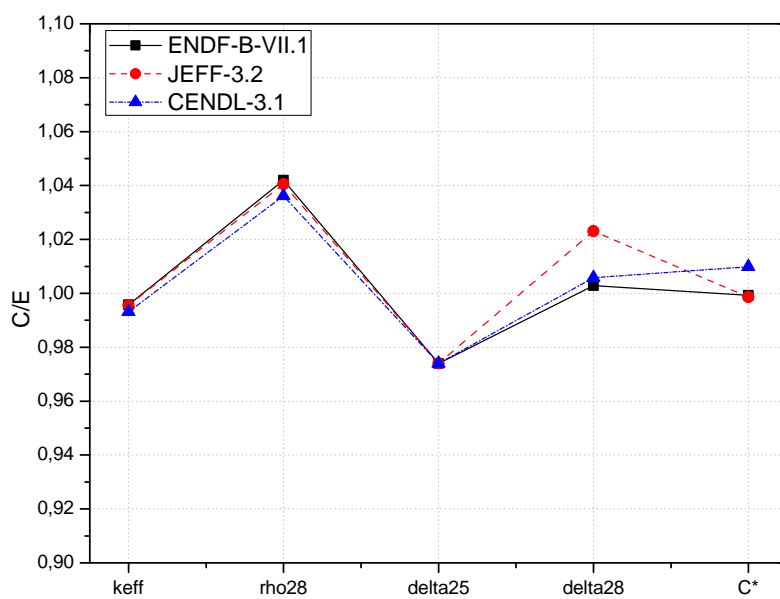


Figura 4.5: Cociente C/E de la celda TRX-1 de las tres bibliotecas generadas

Capítulo 5

Conclusiones

Las bibliotecas de trabajo de CONDOR están basadas en datos nucleares de los años 60 y 90, por lo que es necesaria una actualización de los datos nucleares. Se desarrolló una metodología para generar bibliotecas de trabajo a partir de datos nucleares evaluados, se generaron los algoritmos necesarios y se validó la metodología contra benchmarks experimentales hallándose buenos resultados.

La metodología desarrollada se separó en tres fases: La primera es la obtención de constantes multigrupo a partir de los datos evaluados. Esta tarea se realizó con el sistema de procesamiento NJOY. Se utilizaron los módulos: MODER, RECONR, BROADR, UNRESR, THERMR y GROUPT. La segunda fase es la de calcular los parámetros de la biblioteca ESIN. Para ello se definieron las secciones eficaces que utiliza el código de cálculo CONDOR, describiendo como se construyen a partir de los datos nucleares evaluados. También se desarrolló un sistema para la obtención de parámetros resonantes para el método de las integrales de resonancia. La última fase consiste en la generación de la biblioteca como archivo binario en el formato específico ESIN. La implementación de la metodología se hizo generando los algoritmos en el lenguaje de programación Python.

Para validar los algoritmos se generó una biblioteca de cinco isótopos: ^1H , ^{16}O , ^{27}Al , ^{235}U y ^{238}U . Se realizaron los benchmarks experimentales BAPL- UO_2 y TRX, y se compararon parámetros integrales encontrándose resultados satisfactorios, demostrando que la metodología de generación de bibliotecas es válida.

Debido a que los datos evaluados usan formatos muy similares para almacenar los distintos tipos de datos nucleares, los algoritmos generados para extraer información de los archivos GENDF pueden ser fácilmente ampliados para extraer datos de neutrones retardados, datos de quemado, matrices de scattering de mayores ordenes de

expansión de Legendre, y todos los datos necesarios para la generación de la nueva biblioteca ESIN II. Por otro lado, los mismos datos utilizados en la generación de tablas resonantes pueden ser utilizados para la generación de parámetros de subgrupo, y de esta manera mejorar el tratamiento resonante.

Además, las metodologías desarrolladas también se pueden aplicar a la obtención de datos de producción gamma, lo que permitiría expandir el código CONDOR para el cálculo de problemas de blindaje, calentamiento gamma de estructuras, y distribuciones de potencia gamma en el núcleo.

Por último, los mismos algoritmos pueden ser utilizados para generar bibliotecas de miles de grupos. Una biblioteca de este estilo permitiría eliminar el tratamiento resonante de autoapantallamiento, logrando resultados más exactos. Si bien el tiempo de cálculo crecería enormemente, esto no sería un problema si se paraleliza el código CONDOR, tema en el que se está trabajando actualmente.

Apéndice A

Datos de NJOY

A.1. Input de NJOY

A continuación se presenta un input de NJOY. En este caso es el usado para la obtención de constantes multigrupo para el ^1H .

```
moder
1 -31/                                [card1] nin nout
'JEFF 3.2 1-H-1 en H20' /            [card2] tpid
30 1/                                  [card3] nin matd
0 /
moder
1 -21/                                [card1] nin nout
'JEFF 3.2 1-H-1' /                  [card2] tpid
20 125/                               [card3] nin matd
0 /
reconr
-21 -22
'JEFF 3.2 1-H-1'/
125 2 /
0.001 0. /
'JEFF 3.2 1-H-1'/
'JEFF 3.2 1-H-1'/
0 /
broadr
-21 -22 -23
125 6 0 0 0 /
0.001 /
296. 350. 400. 450. 500. 600.
0 /
thermr
-31 -23 -26
1 125 12 6 4 0 2 221 1
296. 350. 400. 450. 500. 600.
0.001 4.0
groupr
```

```

-21 -26 0 25 / [card1] nendf npend ngout1 ngout2
 125 18 0 5 1 6 1 / [card2] matb ign igg iwt lord ntemp nsigz
'JEFF 3.2 1-H-1'/ [card3] title
296. 350. 400. 450. 500. 600./ [card4] temp
1.E10 / [card5] sigz
3 / [card9] 296K
3 221 /
3 252 /
6 /
6 221 /
0 /
3 / 350K
3 221 /
6 /
6 221 /
0 /
3 / 400K
3 221 /
6 /
6 221 /
0 /
3 / 450K
3 221 /
6 /
6 221 /
0 /
3 / 500K
3 221 /
6 /
6 221 /
0 /
3 / 600K
3 221 /
6 /
6 221 /
0 /
0 /
stop

```

A.2. Estructura de grupos XMAS 172

En la tabla [A.1](#) se presenta la estructura de grupos energéticos utilizadas en la generación de las bibliotecas.

Tabla A.1: Estructura de grupos XMAS 172

Grupos rápidos		Grupos resonantes		Grupos térmicos			
Grupo	Energía superior (eV)	Grupo	Energía superior (eV)	Grupo	Energía superior (eV)	Grupo	Energía superior (eV)
1	$1,9640 \times 10^7$	46	$9,1188 \times 10^3$	93	$4,0000 \times 10^0$	140	$4,3300 \times 10^{-1}$
2	$1,7333 \times 10^7$	47	$7,4659 \times 10^3$	94	$3,3808 \times 10^0$	141	$4,0000 \times 10^{-1}$
3	$1,4918 \times 10^7$	48	$5,5308 \times 10^3$	95	$3,3000 \times 10^0$	142	$3,9100 \times 10^{-1}$
4	$1,3840 \times 10^7$	49	$5,0045 \times 10^3$	96	$2,7679 \times 10^0$	143	$3,5000 \times 10^{-1}$
5	$1,1618 \times 10^7$	50	$3,5266 \times 10^3$	97	$2,7200 \times 10^0$	144	$3,2000 \times 10^{-1}$
6	$1,0000 \times 10^7$	51	$3,3546 \times 10^3$	98	$2,6000 \times 10^0$	145	$3,1450 \times 10^{-1}$
7	$8,1873 \times 10^6$	52	$2,2487 \times 10^3$	99	$2,5500 \times 10^0$	146	$3,0000 \times 10^{-1}$
8	$6,7032 \times 10^6$	53	$2,0347 \times 10^3$	100	$2,3600 \times 10^0$	147	$2,8000 \times 10^{-1}$
9	$6,0653 \times 10^6$	54	$1,5073 \times 10^3$	101	$2,1300 \times 10^0$	148	$2,4800 \times 10^{-1}$
10	$5,4881 \times 10^6$	55	$1,4338 \times 10^3$	102	$2,1000 \times 10^0$	149	$2,2000 \times 10^{-1}$
11	$4,4933 \times 10^6$	56	$1,2341 \times 10^3$	103	$2,0200 \times 10^0$	150	$1,8900 \times 10^{-1}$
12	$3,6788 \times 10^6$	57	$1,0104 \times 10^3$	104	$1,9300 \times 10^0$	151	$1,8000 \times 10^{-1}$
13	$3,0119 \times 10^6$	58	$9,1424 \times 10^2$	105	$1,8400 \times 10^0$	152	$1,6000 \times 10^{-1}$
14	$2,4660 \times 10^6$	59	$7,4852 \times 10^2$	106	$1,7550 \times 10^0$	153	$1,4000 \times 10^{-1}$
15	$2,2313 \times 10^6$	60	$6,7729 \times 10^2$	107	$1,6700 \times 10^0$	154	$1,3400 \times 10^{-1}$
16	$2,0190 \times 10^6$	61	$4,5400 \times 10^2$	108	$1,5900 \times 10^0$	155	$1,1500 \times 10^{-1}$
17	$1,6530 \times 10^6$	62	$3,7170 \times 10^2$	109	$1,5000 \times 10^0$	156	$1,0000 \times 10^{-1}$
18	$1,3534 \times 10^6$	63	$3,0433 \times 10^2$	110	$1,4750 \times 10^0$	157	$9,5000 \times 10^{-2}$
19	$1,2246 \times 10^6$	64	$2,0400 \times 10^2$	111	$1,4450 \times 10^0$	158	$8,0000 \times 10^{-2}$
20	$1,1080 \times 10^6$	65	$1,4863 \times 10^2$	112	$1,3700 \times 10^0$	159	$7,7000 \times 10^{-2}$
21	$1,0026 \times 10^6$	66	$1,3674 \times 10^2$	113	$1,3375 \times 10^0$	160	$6,7000 \times 10^{-2}$
22	$9,0718 \times 10^5$	67	$9,1661 \times 10^1$	114	$1,3000 \times 10^0$	161	$5,8000 \times 10^{-2}$
23	$8,2085 \times 10^5$	68	$7,5674 \times 10^1$	115	$1,2350 \times 10^0$	162	$5,0000 \times 10^{-2}$
24	$6,0810 \times 10^5$	69	$6,7904 \times 10^1$	116	$1,1700 \times 10^0$	163	$4,2000 \times 10^{-2}$
25	$5,5023 \times 10^5$	70	$5,5595 \times 10^1$	117	$1,1500 \times 10^0$	164	$3,5000 \times 10^{-2}$
26	$4,9787 \times 10^5$	71	$5,1578 \times 10^1$	118	$1,1254 \times 10^0$	165	$3,0000 \times 10^{-2}$
27	$4,5049 \times 10^5$	72	$4,8252 \times 10^1$	119	$1,1100 \times 10^0$	166	$2,5000 \times 10^{-2}$
28	$4,0762 \times 10^5$	73	$4,5517 \times 10^1$	120	$1,0970 \times 10^0$	167	$2,0000 \times 10^{-2}$
29	$3,0197 \times 10^5$	74	$4,0169 \times 10^1$	121	$1,0710 \times 10^0$	168	$1,5000 \times 10^{-2}$
30	$2,7324 \times 10^5$	75	$3,7267 \times 10^1$	122	$1,0450 \times 10^0$	169	$1,0000 \times 10^{-2}$
31	$2,4724 \times 10^5$	76	$3,3720 \times 10^1$	123	$1,0350 \times 10^0$	170	$6,9000 \times 10^{-3}$
32	$1,8316 \times 10^5$	77	$3,0511 \times 10^1$	124	$1,0200 \times 10^0$	171	$5,0000 \times 10^{-3}$
33	$1,2277 \times 10^5$	78	$2,7608 \times 10^1$	125	$9,9600 \times 10^{-1}$	172	$3,0000 \times 10^{-3}$
34	$1,1109 \times 10^5$	79	$2,4981 \times 10^1$	126	$9,8600 \times 10^{-1}$		$1,0000 \times 10^{-5}$
35	$8,2298 \times 10^4$	80	$2,2603 \times 10^1$	127	$9,7200 \times 10^{-1}$		
36	$6,7380 \times 10^4$	81	$1,9455 \times 10^1$	128	$9,5000 \times 10^{-1}$		
37	$5,5166 \times 10^4$	82	$1,5928 \times 10^1$	129	$9,3000 \times 10^{-1}$		
38	$4,0868 \times 10^4$	83	$1,3710 \times 10^1$	130	$9,1000 \times 10^{-1}$		
39	$3,6979 \times 10^4$	84	$1,1225 \times 10^1$	131	$8,6000 \times 10^{-1}$		
40	$2,9283 \times 10^4$	85	$9,9056 \times 10^0$	132	$8,5000 \times 10^{-1}$		
41	$2,7394 \times 10^4$	86	$9,1898 \times 10^0$	133	$7,9000 \times 10^{-1}$		
42	$2,4788 \times 10^4$	87	$8,3153 \times 10^0$	134	$7,8000 \times 10^{-1}$		
43	$1,6616 \times 10^4$	88	$7,5240 \times 10^0$	135	$7,0500 \times 10^{-1}$		
44	$1,5034 \times 10^4$	89	$6,1601 \times 10^0$	136	$6,2500 \times 10^{-1}$		
45	$1,1138 \times 10^4$	90	$5,3464 \times 10^0$	137	$5,4000 \times 10^{-1}$		
		91	$5,0435 \times 10^0$	138	$5,0000 \times 10^{-1}$		
		92	$4,1293 \times 10^0$	139	$4,8500 \times 10^{-1}$		

Apéndice B

Inputs de CONDOR para validacion de biblioteca

B.1. Input de celda TRX

```
*** TRX 1 ***
NEW CASE esinlib=172endfv2.bib
option program 6 7 10 / 54635 8016 1001
define pitch=1.806
PIN RING 1 / 0.0 0.0 1
PIN TYPE 1 / 0.4915 1 0.5042 2 0.5753 3 <pitch/2-0.001> 4 / mesh 3 1 1 6
OUT PIN <pitch/2/cos(30)> 4 /poly=6 30
COMP 1 /NUME 92235 0.0006253 92238 0.047205
      2 /      0.0014 8016 100
      3 /NUME 13027 0.06025
      4 /NUME 1001 0.06676 8016 0.03338
CORE DATA BUCKLIN=<0.00285*2>
CRITICAL B1
TEMPERATURES 293
symmetry 30
boundary specular
EDIT ISOTOPES 1 / 92235 92238 / CAPTURE FISSION
EDIT GROUP 1 / 0.625 0.0
EDIT OUTPUT 1 / REACTION_RATES / GROUP=1 / ISOTOPES=1
READY
pre case
TEXT TITLE= *** TRX 2 ***
define pitch=2.1740
PIN TYPE 1 / 0.4915 1 0.5042 2 0.5753 3 <pitch/2-0.001> 4 / mesh 3 1 1 6
OUT PIN <pitch/2/cos(30)> 4 /poly=6 30
CORE DATA BUCKLIN=<0.0027345*2>
CRITICAL B1
READY
END
```

B.2. Input de celda BAPL

```
*** BAPL 1 ***
NEW CASE esinlib=172endfv2.bib
option program 6 7 10 / 54635 8016 1001
define pitch=1.55780
PIN RING 1 / 0.0 0.0 1
PIN TYPE 1 / 0.4864 1 0.5042 2 0.5753 3 <pitch/2-0.001> 4 / mesh 3 1 1 6
OUT PIN <pitch/2/cos(30)> 4 /poly=6 30
COMP 1 /NUME 92235 0.0003112 92238 0.023127 8016 0.046946
      2 /      0.0014 8016 100
      3 /NUME 13027 0.06025
      4 /NUME 1001 0.06676 8016 0.03338
CORE DATA BUCKLIN=<0.0016295*2>
CRITICAL      B1
TEMPERATURES 296
symmetry 30
boundary specular
EDIT ISOTOPES 1 / 92235 92238 / CAPTURE FISSION
EDIT GROUP    1 / 0.625 0.0
              2 / library
EDIT REGION   1 / COMP=1
EDIT OUTPUT   1 / REACTION_RATES / GROUP=1 / ISOTOPES=1
              2 / XS_PO=ISO /I=1/G=2/R=1

READY
pre CASE
text title=*** BAPL 2 ***
define pitch=1.65230
PIN TYPE 1 / 0.4864 1 0.5042 2 0.5753 3 / mesh 3 1 2
OUT PIN <0.5753/cos(30)+0.001> 4 <pitch/2/cos(30)> 4 /poly=6 30/mesh 1 10
CORE DATA BUCKLIN=<0.0017735*2>
CRITICAL      B1
READY
pre CASE
TEXT TITLE=*** BAPL 3 ***
define pitch=1.80570
PIN TYPE 1 / 0.4864 1 0.5042 2 0.5753 3 / mesh 3 1 2
OUT PIN <0.5753/cos(30)+0.001> 4 <pitch/2/cos(30)> 4 /poly=6 30/mesh 1 10
CORE DATA BUCKLIN=<0.001711*2>
CRITICAL      B1
READY
END
```

Bibliografía

- [1] Villarino, E. A. CONDOR v2.61 Neutronic calculation code. INVAP S.E., 2010. [1](#)
- [2] Mochi, I. INVAP's nuclear calculation system. *Science and Technology of Nuclear Installations*, **2011**, 2010. URL <http://dx.doi.org/10.1155/2011/215363>. [1](#)
- [3] Villarino, E. A., Lecot, C. A., Mochi, I. CITVAP v3.6 Reactor Calculation code. INVAP S.E. [1](#)
- [4] MacFarlane, R. E. An introduction formats ENDF formats. *Los Alamos Natinal Laboratory*, 2000. [2](#)
- [5] Herman, M., Trkov, A. ENDF-6 Formats Manual, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files ENDF/B-VI and ENDF/B-VII. Brookhaven National Laboratory, July 2010. [2](#)
- [6] MacFarlane, R. E., Muir, D. The NJOY Nuclear Data Processing System. Los Alamos National Laboratory, 12 2012. [4](#)
- [7] MacFarlane, R. E. Undersanding NJOY. Los Alamos National Laboratory, 2000. [4](#)
- [8] Stamm'ler, R. J. Methods of steady-state Reactor Physics in Nuclear design. 1983. [5](#), [12](#)
- [9] Sardella, F. New ESIN nuclear data library version: ESIN II. Inf. téc., INVAP, 2011. [5](#)
- [10] Ibarra, V. Analisis de sensibilidad a secciones eficaces de subgrupos. trabajo especial para la carrera de ingenieria nuclear. instituto balseiro, 1990. [15](#)
- [11] Leszczynski, F., Lopez Aldama, F., Trkov, A. WIMS-D library update. *IAEA*, 2007. [16](#), [22](#), [26](#)
- [12] Hellens, R. L., Price, G. A. Reactor physics data for water-moderated lattices od slightly enriched uranium. *Reactor Technology Selected Reviews*, pág. 529, 1964. [31](#)

-
- [13] Hardy, J., Klein Jr., D., Volpe, J. A study of physics parameters in several water-moderated lattices of slightly enriched and natural uranium. *WAPD-TM-931*, Marzo 1970. [31](#)