

Nukleáris adatok könyvtára a SCALE reaktorfizikai kódrendszer számára

Vértes Péter

Magyar Tudományos Akadémia KFKI Atomenergia Kutató Intézet
Budapest, 1131 Konkoly Thege Miklós út 28-33.

A SCALE (Standardized Computer Analysis for Licensing Evaluations) többtucat számítási modult tartalmazó keretrendszer, amely a reaktorfizikai kutatások különféle területein használható fel. A kódrendszer determinisztikus és Monte Carlo neutron-transzportot számító moduljai lehetővé teszik többek között, hogy kiegészített üzemanyagot hasznosító, egyedi üzemanyagtervekkel felépített reaktorokkal kapcsolatos analíziseket, pl. kritikussági számításokat végezzünk. A számításokhoz használható többcsoportos hatáskeresztmetszet-könyvtárak a legfrissebb ENDF/B-VII (Evaluated Nuclear Data Files) adatbázison alapulnak. Bármennyire is jók ezek a könyvtárak, mégis megkötik a felhasználók kezét, például nehézségekbe ütközhetünk, ha a szokványostól eltérő csoportstruktúrát vagy más kiindulási adatokat szeretnénk használni számításainkhoz. Az alábbiakban bemutatunk egy eljárást, amelynek segítségével – a széles körben alkalmazott NJOY kódrendszert felhasználva – a SCALE-ben előforduló könyvtárformátumnak megfelelő csoportállandó-könyvtárakat tudunk előállítani.

Bevezetés

Amióta neutronokkal működő berendezéseket építenek és működtetnek, szükség van neutron- és gamma-hatáskeresztmetszetekre és egyéb magfizikai állandókra. Hosszú utat jártunk be, míg a 40-es és 50-es években használt BNL-325 grafikus katalógusoktól eljutottunk a napjainkban alkalmazott ENDF rendszerig [1]. Számításainkhoz evaluált nukleáris adatokra volt szükség. Az evaluáltság azt jelenti, hogy az adatokat a legjobbnak minősített magfizikai kísérletek és modellek alapján kellett előállítani, valamint egy meghatározott energia tartományban (legtöbbször 0-tól 20 MeV-ig) hiánytalanul kellett megadniuk a neutronok transzportját meghatározó hatáskeresztmetszeteket. Ezeket az adatokat aztán számítógép által emészthető formátumra, adatállományokba (fájlokba) kellett rendezni. Kezdetben, a 60-as évektől, több ilyen fájl létezett különböző kártyakép formátumban, Nagy Britanniában az UKNDL, Nyugat-Németországban a KEDAK, az Amerikai Egyesült Államokban az ENDF/B, míg a Szovjetunióban a BROND. Ezek „versengéséből” idővel és közmegegyezéssel az ENDF/B került ki győztesen. Ma már egységesen minden evaluált adatot az Egyesült Államokban szabványosított ENDF-6, illetve ENDF-7 formátumban tesznek közzé az erre szakosodott adatközpontok. Intézetünk (KFKI AEKI) elsősorban a NEA (Nuclear Energy Agency), illetve a NAÜ (Nemzetközi Atomenergia Ügynökség) adatközpontjaira támaszkodik.

Az evaluált adatok és a különféle gyakorlati problémák számítására kidolgozott reaktorfizikai kódok közé ékelődnek be a csoportállandók számító és azokat könyvtárrá szervező programok. Több ilyen létezik, illetve létezett, és bár e cikk szerzője is írt egyet, napjainkban az ENDF formátumhoz kötődve az Oak Ridge-ben fejlesztett AMPX-77, illetve a Los

Alamos-ban kidolgozott NJOY kódrendszer használatos [2]. Utóbbi állandóan fejlődik, levelező listája van, és az Egyesült Államokon kívül is jelentős kutatói közösség támogatja. Ennek megfelelően erre a rendszerre alapozva dolgoztuk ki a következő fejezetben bemutatott eljárást, amelynek segítségével a SCALE programrendszer [3] számára állíthatunk elő csoportparamétereket az ENDF nyers adataiból kiindulva.

Csoportállandók előállítása a SCALE reaktorfizikai kódrendszer számára

Bár a SCALE5.1 programrendszerhez, illetve annak javított és kibővített változatához, a SCALE6-hoz több, terjedelmes csoportállandó-könyvtárat is mellékelnek, nem triviális az egyedi csoportstruktúrák kialakítása. A SCALE-ben alapvetően három, a csoportparaméterekhez kapcsolódó könyvtártípus van: a „master” könyvtár, a pontonkénti hatáskeresztmetszetek könyvtára (azaz a „PW” könyvtár), és a munka- (azaz a „working”) könyvtár. Az első kettő fájljai megtalálhatók a SCALE csomagban, míg a munka-könyvtárakat a SCALE egyes moduljai állítják elő és adják tovább a transzport moduloknak. Célunk az volt, hogy összeköttetést teremtsünk az NJOY számított csoportállandók és a SCALE könyvtárak között.

Az NJOY a csoportállandókat több lépésben állítja elő. Első lépésben a parametrizált, azaz rezonancia-paraméterekkel meghatározott hatáskeresztmetszetekből pontonkénti, lineárisan interpolálható hatáskeresztmetszeteket kell előállítani. Ennek a feladatnak a megoldására használható a RECONR modul. Ezután a csoportparaméterek hőmérséklet-függését vehetjük figyelembe a BROADR modul segítségével. A feladatlan rezonanciák kezelése után jöhet a tényleges csoportállandók számítása. A számított csoportállandókat az

NJOY úgynevezett GENDF fájlba tömöríti. Ennek feldolgozására több lehetőség közül választhatunk. Mi a MATXSR modult használtuk, amely talán a legrugalmasabb formában tömöríti a számított csoportállandókat. A MATXSR modul által előállított *matxs* fájl a kiindulópont a SCALE „master” és „working” könyvtárainak generálásához. Ehhez mi két különálló programot készítettünk. A „master” könyvtárat az MXS2AM program segítségével állíthatjuk elő a *matxs* fájlból. Az ebben a könyvtárban szereplő nuklidok száma megegyezik a forrásul használt *matxs* állományban lévő nuklidok számával. A „working” könyvtárat szintén a *matxs* fájlból állítjuk elő a TRAMPX programmal, külön meghatározott nuklid együttesre.

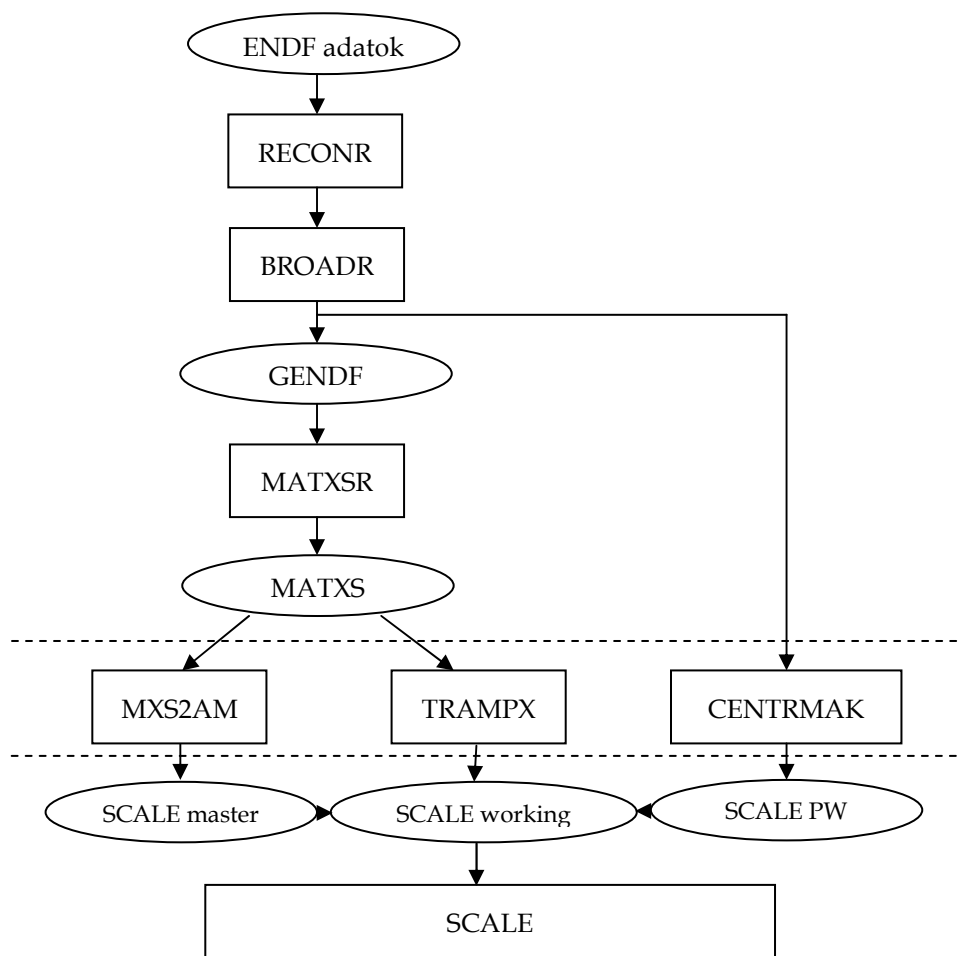
Maga a SCALE rendszer számos funkcionális modult tartalmaz, amelyek szekvenciális hívását úgynevezett kontrollmodulok segítségével oldhatjuk meg. A csoportállandókönyvtár előállítása függ attól, hogy azt a későbbiek során funkcionális vagy kontrollmodulban szeretnénk felhasználni. Mivel a kontrollmodulok maguk végzik a pontonkénti hatáskeresztmetszet-könyvtár összeállítását, így ezek használata esetén információt kell adnunk arról, hogy hogyan férhetünk hozzá egy adott nuklid pontonkénti hatáskeresztmetszeteihez. Az egyes izotópok pontonkénti hatáskeresztmetszet-fájljai ugyanis igen nagyméretűek

lehetnek, és így egy minden izotópot együtt tartalmazó fájl kezelhetetlenül nagy lenne. Ezzel szemben a funkcionális modulok esetén már jól definiált, megfelelőképpen összeállított könyvtárnak kell rendelkezésre állnia.

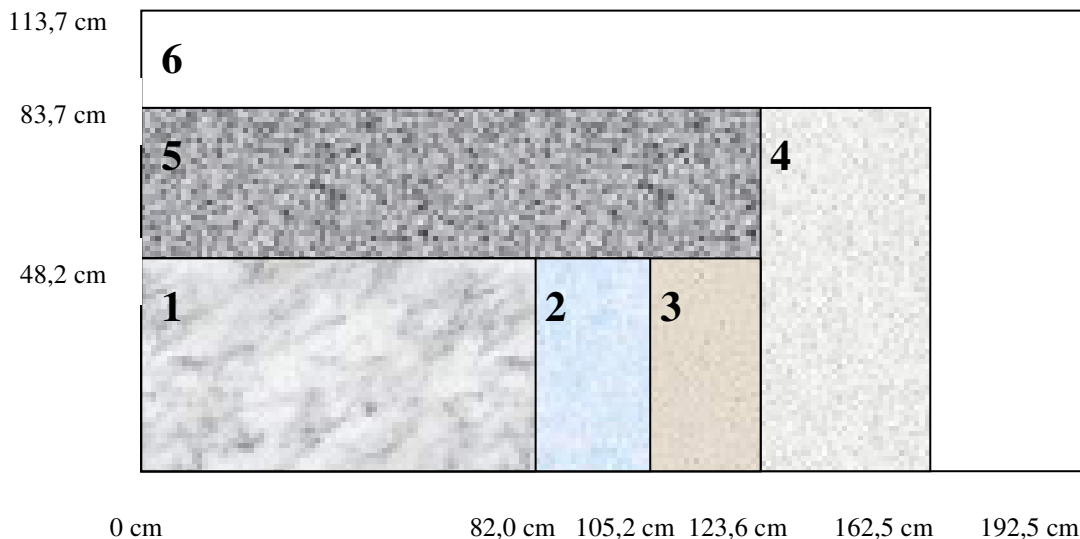
A „working” könyvtárat, mint említettük, a transzportszámítást végző modulok használják. Ez tartalmazza a számítandó rendszer egyes régióinak mikro-csoportállandóit, amelyekből a transzport modul számítja ki a makroállandókat. A *matxs*-ből a „working” könyvtárat a TRAMPX program állítja elő. Ez a program az NJOY kód alkotója által készített TRANSX programból lett alakítva, és tartalmazza ennek az NJOY csoportállandó-számításhoz alkalmazott eljárásait.

A „PW” könyvtárat előállító CENTRMAK program a BROADR modul számításának eredményét használja. Itt két lehetőség van: minden egyes nuklid „PW” hatáskeresztmetszete külön fájlba kerül (kontrollmodulok használata esetén), vagy az összes szükséges nuklid „PW” hatáskeresztmetszetét egy fájlba rendezzük.

Utóbbi esetben ezt a fájlt használja majd a mikro-csoportállandók megfelelő átalakításával foglalkozó SCALE modul, és így megspóroljuk azt a gyűjtőmunkát, amelyet a kontrollmodul végezne.



1. ábra: Út a nyers adatoktól a SCALE programrendszerig.



2. ábra: A BN800 egyszerűsített reaktormodellje.

A fent körvonalazott és az 1. ábrán vázolt eljárás során a következő problémákat kellett megoldani:

- A SCALE a beeső neutron energiájától független hasadási spektrumot használ az NJOY által előállított hasadási mátrix helyett. Ezért fluxussal való átlagolást kell alkalmazni.
- Az n_2n , n_3n , stb. reakciómátrixok az NJOY-jal számolva tartalmazzák a neutronhozamokat. A SCALE-ben azonban ezek a mátrixok egy kimenő neutronra vannak normálva. Ez a probléma egyszerűen áthidalható a mátrixelemek hozammal való osztásával.
- A SCALE-ben a transzfermátrixok leírása élesen különbözik a *matxs* állományban alkalmazottól. Megfelelő programozással sikerült áthidalni a különbségeket.

Túljutva ezeken a buktatókon, lényegében tetszőleges csoportstruktúrát állíthatunk elő a nyers ENDF adatokból, és kedvünkre használhatjuk azokat a SCALE számításokban.

Egy alkalmazás

A fent vázolt eljárással előállított könyvtárakat egy nátriumhűtésű gyorsreaktor kritikusági számításán próbáltuk ki. Ennél a problémánál a kiegészített VVER üzemanyagból kivont plutóniumot és aktinidákat tenyésztő reaktorban használjuk fel, ahol a fertilis anyag tórium. A 2. ábrán látható geometriai elrendezésben (ez egy henger függőleges metszete a közepétől a széléig), az 1-es, 2-es és 3-as régiók különböző mennyiségű plutóniumot és egyéb transzuránokat, valamint tóriumot tartalmazó aktív zónákat jelölnek. A 4-es és 5-ös régió a tórium-köpeny, a 6-os a reaktortartály. Ez a modell a BN800-as gyorsreaktor koncepcióján alapul, amelyről további részleteket ismerhet meg az Olvasó a [4]-es hivatkozásból.

Az adott probléma vizsgálatára 30 energiacsoporthoz számítást végeztünk, két úton. Az első esetben előállítottuk a „master” és PW könyvtárakat az ENDF/B-VII adatokból. Ezután a

SCALE rendszer BONAMI-WORKER-CENTRM-PMC-WORKER funkcionális moduljainak sorozatával elkészítettük a „working” könyvtárat, amelyet a KENOVA funkcionális modulban használtunk fel. A BONAMI modul a fel nem bontott, míg a WORKER-CENTRM-PMC modulok a felbontott rezonanciatartományokban végzik el a hatáskeresztmetszetek rezonancialeáryékolását. Ezeket az adatokat használjuk fel a KENOVA modulban, amely egy kritikusságot számító Monte Carlo kód. Az adatokból a KENOVA meghatározza az effektív sokszorozási tényezőt. Az adott probléma esetén a számított effektív sokszorozási tényező: $k_{\text{eff}} = 1,1322 \pm 0,0014$.

A másik út az, hogy TRAMPX programmal közvetlenül egy „working” könyvtárat generálunk, és ezt használja a KENOVA. Az eredmény ebben az esetben $k_{\text{eff}} = 1,1318 \pm 0,0013$. Tehát a TRAMPX programmal pótolhatjuk a BONAMI, WORKER, CENTRM és PMC modulokat.

A két sokszorozási tényező közötti jó egyezés gyakorlatilag bizonyítja, hogy helyesen generáltuk a könyvtárakat.

Összefoglaló

Összefoglalva, a SCALE5.1 kódrendszerhez sikeresen állítottunk elő könyvtárakat az NJOY-jal generált sokcsoporthoz tartozó állandókból. Érdemes megemlíteni, hogy már korábban is létezett hasonló próbálkozás - az úgynevezett GENDF fájlból -, azonban az ott alkalmazott eljárás jóval összetettebb volt. Sajnálatos, hogy könyvtáraink a SCALE6 kontrollmodulokkal nem tudnak együttműködni, ugyanis ez a rendszer olyan bináris fájlformátumot használ, amelyet a rendelkezésünkre álló fordítóprogramok nem támogatnak. Annyit ugyanakkor sikerült elérni, hogy a SCALE6-ban megadott könyvtárakat át lehet fordítani az általunk használt formátumra, és így lehetséges ezeket a SCALE5.1 rendszerben használni.

Irodalomjegyzék

- [1] Chadwick et al., ENDF/B-VII 0: Next Generation Evaluated Nuclear Data Library for Nuclear Science and Technology, Nuclear Data Sheets, 107, 2931, (2006)
- [2] MacFarlan R.E., Muir D.W., The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 91, Report LA-12740-M, (October 1994)
- [3] SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation, NUREG/CR-0200, Rev. 6 (ORNL/NUREG/CSD-2/R6), Vols. I, II, and III (September 1998). Available from Radiation Shielding Information Computational Center as CCC-545/SCALE4.4.
- [4] Dekusar V.M., et. al., Feasibility Studies of BN-800 Type Reactor with (Pu-Th)O₂ Fuel for Effective Incineration of Minor Actinides, Technical Meeting of the CRP on Studies of Advanced Reactor Technology Options for Effective Incineration of Radioactive Waste, 22-26 November 2004, Hefei, China