CAPÍTULO III. Descripción de NJOY.

Introducción

Para modelar (o calcular) el comportamiento de un reactor nuclear se utiliza un esquema de cálculo en el que intervienen varias etapas. El número de éstas depende en parte del tipo de reactor que se esté estudiando pero también de la aproximación que se deseé obtener. La primera etapa es esencialmente la misma para todos los tipos de reactores. En este trabajo sólo se aborda el tema de la segunda etapa que sirve para preparar los datos de la tercera procesando la información de la primera.

Para lograr situar bien la importancia del trabajo, a continuación se describen las dos primeras etapas de cualquier esquema de cálculo.

a. Esquema de cálculo[13]

Primera Etapa

El primer paso es contar con los datos nucleares medidos y evaluados. La principal fuente de estos datos nucleares son experimentos de física nuclear realizados con aceleradores de partículas y reactores nucleares de investigación. Los datos experimentales se complementan con modelos y teorías nucleares. Para las aplicaciones de la tecnología nuclear (reactores de fisión, reactores de fusión, aceleradores de partículas, entre otros), los siguientes cuatro tipos de datos nucleares son importantes:

Constantes nucleares. Incluyen masas nucleares, energías de enlace nuclear de los nucleones y las partículas pesadas y abundancias isotópicas.

Datos de la estructura nuclear. Comprende estados base y excitados del núcleo y sus energías y propiedades cuánticas.

Datos de decaimiento nuclear. Comprende las vidas medias de los núcleos radioactivos y las radiaciones emitidas durante su decaimiento, los espectros de energía de los neutrones emitidos durante la fisión espontánea de los actínidos, etc.

[13]Dr. Juan Luis François Lacouture. "Esquema de cálculo para el Análisis de Reactores Nucleares de agua ligera. Comunicación privada. Facultad de Ingeniería, UNAM. México, D.F. 2007.

Datos de reacciones nucleares. Incluyen los datos de las reacciones nucleares con neutrones, con fotones y con partículas cargadas (p, d, t ^{3}He).

Para el análisis de reactores de fisión, la última categoría de datos, es especialmente importante pues contiene datos tales como las secciones eficaces microscópicas de las diferentes tipos de interacciones que tienen los neutrones y los rayos gama con los materiales del núcleo (combustible, encamisado, moderador, separadores, etc.), los parámetros de resonancia, las distribuciones angulares de los neutrones, las matrices de termalización de los principales moderadores, etc. Los datos cubren generalmente un rango de energía entre 10^{-5} *eV* y 20 *MeV*.

Todos estos datos se encuentran almacenados en bibliotecas. Las principales bibliotecas de datos nucleares son la ENDF/B, desarrollada y mantenida principalmente por Estados Unidos y Canadá, JEFF de los países europeos, la BROND de los rusos y la JENDL de Japón. En esta etapa, la dependencia con la variable energía es muy fina, por ejemplo, una tabla de alguna sección eficaz puede tener hasta 10,000 puntos, con el fin de asegurar una representación física adecuada los las reacciones nucleares y permitir una interpolación lineal o logarítmica entre puntos adyacentes.

En la Figura 23 se puede observar la sección eficaz microscópica de absorción para los tres principales isótopos físiles utilizados en los reactores nucleares. En esta figura se puede observar la dependencia de la sección eficaz con la energía. Cabe destacar la zona de las resonancias, en donde se observan esos grandes "saltos" que tiene la sección eficaz y por lo tanto se destaca la importancia de tener una tabulación muy fina del dato nuclear con la energía. Estas bibliotecas de datos nucleares deben ser procesadas para producir bibliotecas de secciones eficaces adecuadas para los cálculos de “celdas” basados en la ecuación de transporte.

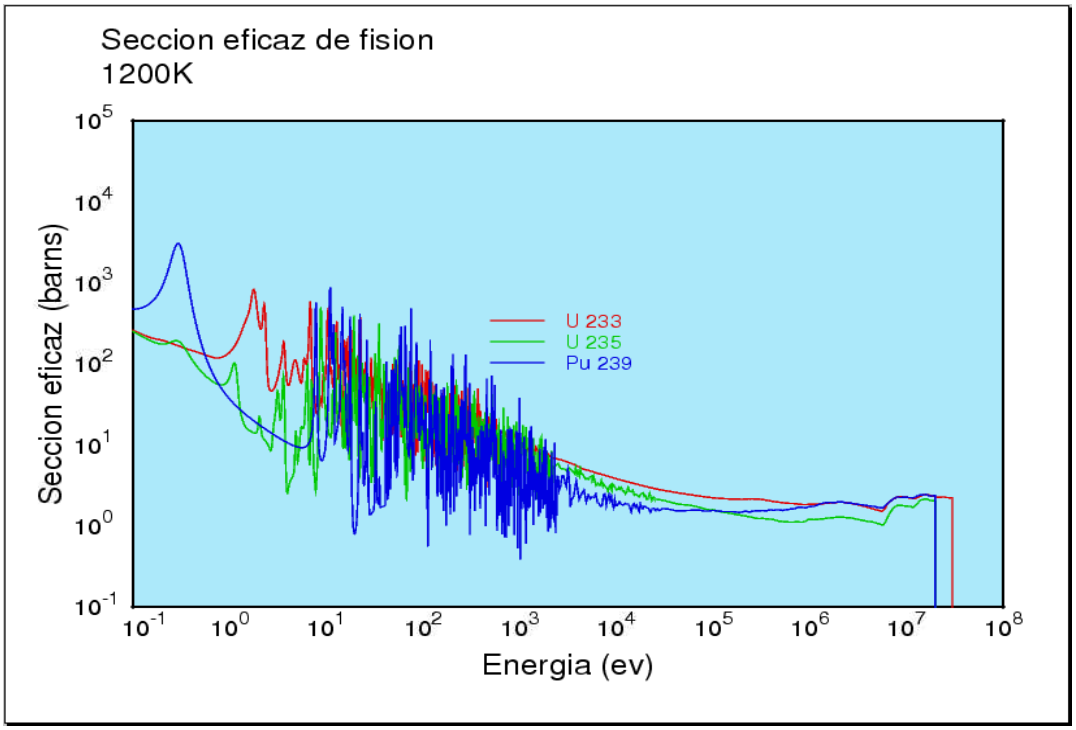

Figura 23. Sección eficaz de fisión de los principales isótopos físiles. [8]

Segunda Etapa

En esta etapa del esquema de cálculo, las bibliotecas de datos nucleares son colapsadas mediante el uso de funciones de peso adecuados, desde miles de puntos de energía hasta decenas o cientos de grupos de energía, dependiendo del código de transporte que se utilice. La función de peso puede ser escogida arbitrariamente, pero desde el punto de vista de la conservación de las razones de reacción, al pasar de una estructura fina (miles de puntos) a una estructura de multigrupos (decenas o cientos de grupos) de energía, se acostumbra utilizar espectros de neutrones (o gamas) adecuados para colapsar las secciones eficaces. Por ejemplo, para los reactores térmicos, como los LWR, se utiliza un espectro de Maxwell, para el rango de las energías térmicas (de 10^{-5} *eV* a 1 *eV*), un espectro de tipo 1/E para el rango intermedio (de 1 *eV* a 800 *eV*) y un espectro de fisión para el rango rápido (800 *eV* a 10 *MeV*). NJOY, programa desarrollado en el Laboratorio de los Álamos en Estados Unidos de América, es un buen ejemplo de código de procesamiento de datos nucleares y el más utilizado actualmente por la comunidad internacional.

b. Generalidades de NJOY

El sistema procesador de datos nucleares NJOY es un código computacional diseñado para leer y transformar datos evaluados en formato ENDF y formato JEFF*, y obtener como resultado bibliotecas que son utilizadas en diversas aplicaciones. Este código se compone de varios módulos, los cuales son programas independientes, que realizan tareas específicas para el flujo de datos y se comunican entre sí mediante variables comunes contenidas en una biblioteca interna de NJOY y archivos de entrada y salida.

Una biblioteca de datos nucleares en formato ENDF tiene una estructura jerárquica dada por la cinta (tape), el material, el archivo, y la sección. Cada uno de estos niveles tiene un identificador numérico característico:

- Una "cinta" ENDF es un archivo que contiene uno o más materiales ENDF.

- Etiquetas MAT y materiales ENDF. En versiones anteriores de bibliotecas ENDF/B, los números fueron asignados de acuerdo al término de las evaluaciones respectivas. Las etiquetas MAT se refieren a un número asignado a los materiales.

- Etiquetas MF y archivos ENDF. Los archivos se utilizan para almacenar diferentes tipos de datos como son:

  MF=1 contiene datos descriptivos y misceláneos.
  MF=2 contiene los parámetros de resonancia.
  MF=3 contiene las secciones transversales de reacción vs energía.
  MF=4 contiene distribuciones angulares.
  MF=5 contiene distribuciones de energía.
  MF=6 contiene distribuciones energía-ángulo.
  MF=7 contiene datos térmicos de dispersión.
  MF=8 contiene datos de radiactividad.
  MF=9-10 contienen datos de la producción del nuclido.
  MF=12-15 contienen datos de la producción del fotón.
  MF=30-36 contienen los datos de covariancia.

* Los archivos de datos o también llamadas librerías, en formato ENDF y formato JEFF pueden ser obtenidos en el Banco de datos nucleares de la Nuclear Energy Agency.

- Etiquetas MT y secciones ENDF. Las secciones se utilizan generalmente para llevar a cabo diversas reacciones. Por ejemplo, MT=1 es la sección representativa total, MT=2 es dispersión elástica, MT=16 es la reacción (n, 2n). MT=18 es fisión, y MT=102 es captura radiactiva. El incremento en el uso de los datos en formato ENDF ha llevado a un aumento continuo en el número y los tipos de reacciones que pueden ser representadas: Lista de MT de ENDF.

Una cinta de ENDF contiene uno o más (MAT). Cada material contiene varios archivos de datos (MF). Cada archivo contiene varias secciones (MT).

El flujo de datos a través de los módulos es controlado por archivos de entrada y salida llamados "tapes" que se enumeran a partir del número 20 ya que los anteriores son archivos internos del código. Cada módulo lee los datos en un "tape" de entrada, los modifica y escribe los resultados en un "tape" de salida, éste puede ser a su vez un "tape" de entrada útil para otro módulo.

c. Módulos de NJOY[14]

En NJOY se cuenta con 23 diferentes módulos con tareas específicas descritos en el manual. A continuación se explican los que fueron utilizados para crear las bibliotecas de datos nucleares que se hicieron durante este trabajo de tesis.

- **RECONR** Reconstruye secciones eficaces punto por punto (dependientes de energía) a partir de parámetros de resonancias y esquemas de interpolación ENDF.

- **BROADR** Calcula el ensanchamiento Doppler y obtiene secciones eficaces punto por punto.

- **THERMR** Produce las secciones eficaces y las matrices de energía a energía para dispersores libres y moleculares (enlazados), en el rango de energía térmica.

[14] T-2 Nuclear Information Service. Understanding NJOY. NJOY 99. Marzo 2000. http://t2.lanl.gov/njoy/title.html.

- **MODER** Convierte “archivos” ENDF del formato ASCII al formato binario de NJOY y viceversa.

- **ACER** Prepara las librerías en formato ACE para el código de Monte Carlo MCNP de energía-continua de Los Álamos.

- **PLOTR** Lee archivos en formato ENDF y prepara gráficas de las secciones eficaces o vistas en perspectiva de distribuciones, utilizando el módulo VIEWR.

- **VIEWR** Toma la salida del modulo PLOTR, o gráficos especiales de HEATR, COVR, DTFR, o HACER, y convierte las gráficas en formato PostScript para su impresión o visión en pantalla.

d. Entradas y salidas

Todas las entradas tienen una forma libre, compuestas por líneas de entrada que a su vez se componen de cadenas de variables. La línea de entrada que consiste en palabras que comienzan con un caracter alfabético no requiere delimitadores. Las cadenas con espacios y caracteres especiales deben ser rodeadas por comillas simples. Las cantidades numéricas pueden ser dadas con o sin decimales, y "E" o "e" puede ser utilizado para la notación científica.

Las líneas de entrada para NJOY suelen organizarse en cadenas, de manera que los parámetros en los extremos de las líneas tengan valores por defecto (*default*). Por lo tanto, a menudo se pueden omitir estos valores en las líneas, siendo sustituidos por el caracter ‘/’ .

Ejemplo:

```
1  reconr
2  20 21
3  1395 1/
4  .01/
5  '92-U-235'/
```

La línea 1 es un valor de cadena que no necesita delimitadores. La línea 2 es una línea con sólo dos valores en la lista de entrada y salida, y ambas están dadas. La línea 3 es una línea con tres elementos, la última variable, es decir, tendrá su valor por defecto de 0. La línea 4 tiene 4 valores, y los tres últimos serán por defecto .01, éste valor también podría ser escrito como 1e-2 o 1.0E-2. La línea 5 tiene un solo valor, que es una cadena. Dado que la cadena tiene espacios y comienza con un dígito, tiene que ser delimitado con comillas simples. Cualquier línea que consta de datos de cadena debe terminar con el carácter '/'.

Uso de archivos PENDF y GENDF

Los archivos PENDF y GENDF, son creados durante el flujo de datos en todos los ejemplos de NJOY, por lo que son completamente definidos a continuación.

Archivo PENDF:
Es una versión puntual de un archivo en formato ENDF donde cada resonancia y rango de interpolación no lineal ha sido convertido en secciones eficaces puntuales, útiles para interpolación lineal y de acuerdo a los criterios de precisión especificados.

Archivo GENDF:
Es una versión multigrupo de un archivo en formato ENDF con las estructuras de grupo, temperaturas y secciones eficaces de fondo.

El uso de estos archivos normalizados apoya la naturaleza modular de NJOY. Los diferentes módulos pueden ser ejecutados en distinto orden y combinados de diversas formas. Internamente, todos los módulos de NJOY utilizan un conjunto común de subrutinas para leer y escribir los archivos ENDF, PENDF, y GENDF.

Los archivos ENDF son recibidos desde un punto de distribución, ya sea ENDF/B, JEF, JENDL, CENDL, o BROND, y vienen en un formato ASCII de modo que puede ser fácilmente leído o impreso. Sin embargo, éste no es el formato más eficiente de establecer la comunicación entre los distintos módulos de procesamiento de NJOY.

Los archivos en formato binario son mucho más eficientes, porque no es necesario convertir los datos en varias ocasiones entre el formato binario utilizado en la memoria y el formato ASCII de los archivos originales.

Aunque el ENDF especifica un formato binario de modo estándar, NJOY utiliza un formato binario especial que divide cada registro ENDF en uno o más bloques de datos de tamaño limitado. Las subrutinas de NJOY que leen y escriben los registros ENDF saben cómo manejar el formato binario y la forma de convertir entre binario y ASCII y viceversa. NJOY normalmente utiliza un tamaño de página de 326 palabras para estos bloques en formato binario, que es lo suficientemente pequeño para uso conveniente y lo suficientemente grande como para reducir el número total de archivos de entrada y salida a un valor razonable.

NJOY contiene un módulo especial llamado MODER para convertir entre formato ASCII y binario y viceversa. Utiliza los números negativos para indicar las unidades de archivos binarios.

e. Ejecución de NJOY

Para realizar la ejecución de un caso de NJOY desde la plataforma LINUX, debemos ingresar a una terminal y ubicarnos en la carpeta que contenga dicho caso y teclear “xnjoy<(nombre del caso)”.

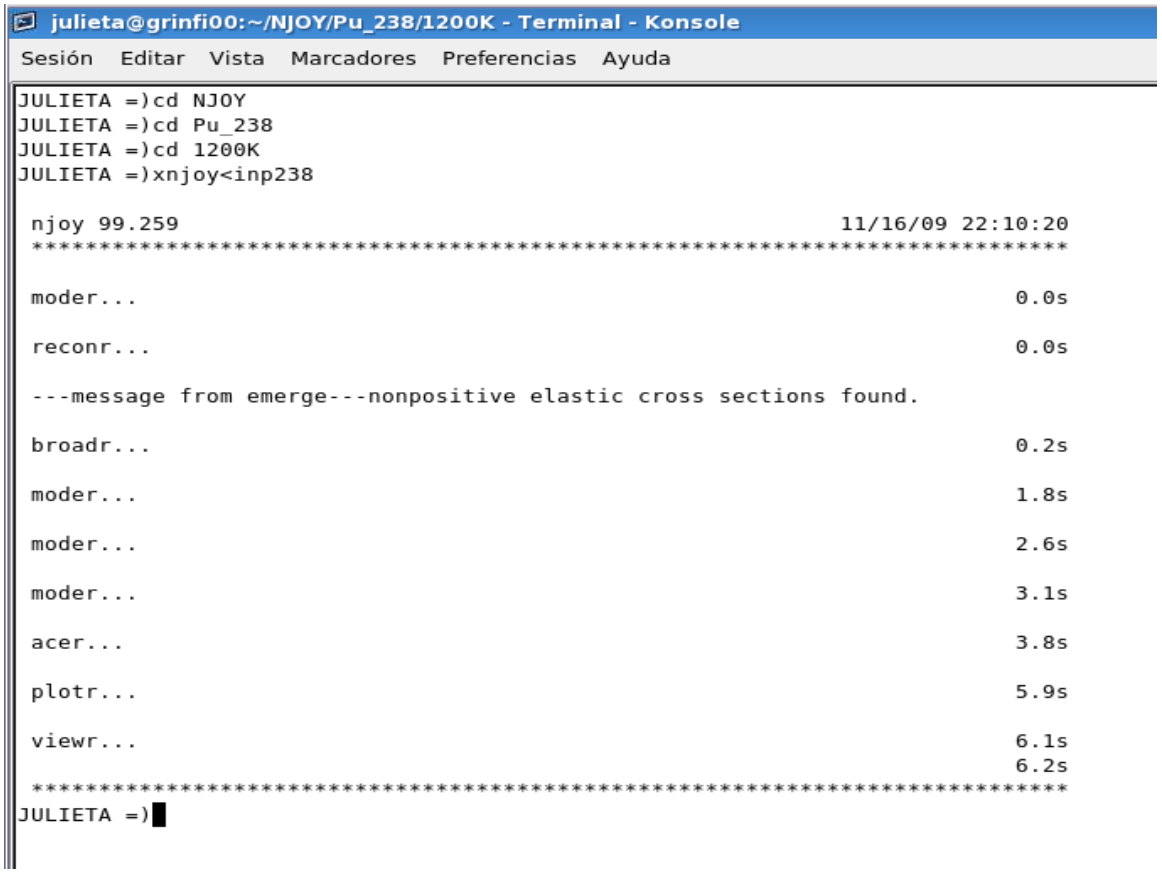

Figura 24. Ejecución de un ejemplo en el código NJOY [9]

f. Aplicación de NJOY

En el Laboratorio de Análisis de Ingeniería de Reactores Nucleares (LAIRN) de la Facultad de Ingeniería se realiza actualmente investigación sobre el modelado de nuevos conceptos de combustible de reactores avanzados. El uso de NJOY permite preparar los datos nucleares a diferentes temperaturas y para todos los materiales que componen el núcleo y para aquellos que se forman a partir de las reacciones nucleares que se producen.

El sistema procesador de datos nucleares NJOY es un código computacional diseñado para leer y transformar datos evaluados en formato ENDF, y obtener como resultado bibliotecas que son utilizadas en diversas aplicaciones. En el caso de este trabajo de tesis nos ayudará a obtener archivos útiles para la simulación de celdas de combustible en código MCNPX.