

DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA NO FORMALISMO DE MULTIGRUPOS DE ENERGIA

Andrea Sanchez e Adimir dos Santos

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, CNEN
Caixa Postal 11049 (Pinheiros)
05422-970, São Paulo, Brasil

RESUMO

O objetivo deste trabalho é apresentar um novo formalismo para os cálculos dos parâmetros intermediários de ressonância λ , κ e μ apropriados a cada nuclídeo e no formalismo de multigrupo de energia. Tais cálculos, foram realizados através de um método numérico, utilizando-se a aproximação de primeira ordem para o fluxo de nêutrons e a biblioteca de seções de choque do ENDF/B-IV e, posteriormente, comparando-se a resultados obtidos analiticamente por outros autores. Como exemplo ilustrativo, calculou-se os parâmetros intermediários de ressonância para os grupos 32 e 45 do código HAMMER-TECHNION. Os resultados obtidos apresentaram resultados promissores.

INTRODUÇÃO

Desde o projeto dos primeiros reatores nucleares, foi reconhecido que a região de ressonância resolvida dos nuclídeos actinídeos seria a mais difícil para tratar analiticamente como, também, para obter valores experimentais para servir de padrão de comparação. A consequência da existência de ressonâncias é o efeito de autoblindagem [1,2], que nada mais é do que a depressão do fluxo de nêutrons na região de ressonâncias. Outro efeito é o alargamento Doppler [1,2] que está relacionado com a temperatura da pastilha combustível. Esses dois efeitos são de extrema importância na operação e controle do reator.

Em termos de cálculos celulares, o tratamento da autoblindagem das ressonâncias basicamente se resume a dois métodos aproximados: Nordheim [3] e Bondarenko [4]. O método de Nordheim é um método aproximado que consiste em resolver iterativamente a equação de moderação de nêutrons considerando as absorções parciais e recalculando o fluxo depressionado. Esse método encontra-se implementado no código HAMMER-TECHNION [5], atualmente utilizado na Divisão de Física de Reatores do IPEN/CNEN-SP. A resolução da equação de moderação por esse método torna o código razoavelmente lento, mostrando uma desvantagem no ponto de vista computacional. Além disso, as ressonâncias têm que ser descritas pelo formalismo Single-Level de Breit-Wigner, o que torna difícil a utilização das novas bibliotecas ENDF/B-VI [6] e JENDL 3.1 [7]. Por outro

lado, o método de Bondarenko tem-se mostrado rápido e eficiente ao que tange o processamento computacional. Códigos mais recentes [8,9,10] têm-se utilizado desse método para o tratamento da autoblindagem das ressonâncias resolvidas.

Apesar de inicialmente ter sido desenvolvido para utilização em reatores rápidos, esse método foi estendido a cálculos de reatores térmicos e epitérmicos. No método de Bondarenko o fluxo utilizado como função ponderação é parametrizado através de duas variáveis: seção de choque de diluição (σ_0) e a temperatura (T). Desta forma, a seção de choque efetiva no formalismo de multigrupo dependerá somente de dois parâmetros σ_0 e T .

Na aplicação do método de Bondarenko a um problema específico, interpola-se as seções de choque na temperatura (T) e na diluição (σ_0) da aplicação. No método de Bondarenko não há nenhuma restrição ao formalismo utilizado para descrever as ressonâncias. Para que esse método tenha sucesso em comparação com métodos mais sofisticados [11], é necessário a obtenção dos fatores intermediários de ressonância [12] apropriados a cada nuclídeo e a cada multigrupo.

INTRODUÇÃO TEÓRICA

Para calcular os parâmetros intermediários de ressonância (parâmetros IR) deve-se, antes de tudo, obter-se uma expressão confiável para o fluxo de nêutrons.

Admite-se uma aproximação de fluxo plano, que será analisado em duas regiões consistindo do combustível e do moderador, representados respectivamente por f e m , e determinado pelas equações de balanço de nêutrons [13], dadas por:

$$\sigma_f(E)\Phi_f(E) = [1 - P_f(E)]\{K_f(\sigma_s\Phi_f) + \sigma_{am}K_{am}(\Phi_f)\} + P_m(E)s_mK_m(\Phi_m) \quad (1)$$

que representa o balanço de nêutrons no meio absorvedor, e:

$$s_m\Phi_m(E) = P_f(E)\{K_f(\sigma_s\Phi_f) + \sigma_{am}K_{am}(\Phi_f)\} + [1 - P_m(E)]s_mK_m(\Phi_m) \quad (2)$$

que expressa o balanço de nêutrons na região do moderador; todos os símbolos utilizados acompanham as definições da referência [13]. O operador K_j das duas equações, representa a fonte de moderação de nêutrons devido ao espalhamento pelo nuclídeo j e, é definido por:

$$K_j(\varphi) = \int_E^{E/\alpha_j} \frac{\varphi(E')dE'}{(1 - \alpha_j)E'} \quad (3)$$

Partindo-se das equações dadas e assumindo-se a Aproximação Racional de Wigner para a probabilidade de escape corrigida pela introdução do fator de Bell [1], \bar{A} , e a relação da reciprocidade [1] e, posteriormente, introduzindo-se o parâmetro intermediário de ressonância, do moderador externo, dado por μ [13], definido como:

$$K_m(\Phi_m) = \mu + (1 - \mu)\Phi_m(E) \quad (4)$$

desacopla-se o sistema de equações (1) e (2) e obtém-se uma equação referente ao fluxo de nêutrons no absorvedor, dada por:

$$[\sigma_f + \bar{A}s - \bar{A}sQ(1 - \mu)]\Phi_f = K_f(\sigma_s\Phi_f) + \sigma_{am}K_{am}(\Phi_f) + \{1 - Q(1 - \mu)\}\bar{A}s \quad (5)$$

A essa equação introduz-se agora os parâmetros intermediários de ressonância λ e κ [13], que são, respectivamente:

$$K_f(\sigma_s\Phi_f) = \lambda\sigma_p + (1 - \lambda)\sigma_s(E)\Phi_f(E) \quad (6)$$

$$\sigma_{am}K_{am}(\Phi_f) = \kappa\sigma_{am} + (1 - \kappa)\sigma_{am}\Phi_f(E) \quad (7)$$

Fazendo-se as considerações impostas acima, e através de uma elaboração matemática, conforme mostrado na Ref. [13], chega-se às equações para λ , κ e μ , admitindo-se que a integral de ressonância exata seja igual integral de ressonância com o fluxo de primeira ordem:

$$\lambda = 1 - \frac{Z_f}{W_f} \quad (8)$$

$$\kappa = 1 - \frac{Z_{am}}{W_m} \quad (9)$$

$$\mu = 1 - \frac{Z_m}{W_m} \quad (10)$$

onde, λ , κ e μ são, respectivamente, os parâmetros intermediários de ressonância para o absorvedor, para o moderador da mistura e para o moderador externo e,

$$Z_f = \int \left[K_f(\sigma_s\Phi_f) - \frac{\sigma_p}{E} \right] \sigma_a\Phi_f^{(1)} dE \quad (11)$$

$$W_f = \int \left[\sigma_s\Phi_f - \frac{\sigma_p}{E} \right] \sigma_a\Phi_f^{(1)} dE \quad (12)$$

$$Z_{am} = \int \left[K_{am}(\Phi_f) - \frac{1}{E} \right] \sigma_a\Phi_f^{(1)} dE \quad (13)$$

$$W_m = \int \left(\Phi_f - \frac{1}{E} \right) \sigma_a\Phi_f^{(1)} dE \quad (14)$$

$$Z_m = \int \left[K_m(\Phi_f) - \frac{1}{E} \right] \sigma_a\Phi_f^{(1)} dE \quad (15)$$

e o fluxo de primeira ordem dado na Ref. [14,15], e definido como:

$$\Phi_f^{(1)} = \frac{(\tilde{\sigma}_p + \tilde{A}s)}{(\tilde{\sigma}_f + \tilde{A}s)} \quad (16)$$

Utilizando-se essas expressões, recorre-se a um processo iterativo para a determinação de λ , κ e μ , assumindo-se inicialmente todos os parâmetros iguais a 1, e admitindo o fluxo de nêutrons do absorvedor conhecido. Os métodos utilizados anteriormente [14,15] utilizam-se do formalismo de Breit-Wigner a zero Kelvin para a descrição das ressonâncias assumidas isoladas, as integrais são estendidas no intervalo $(-\infty, +\infty)$ e são elaboradas analiticamente. Os parâmetros IR são obtidos a partir de um processo recursivo, visto que as equações são transcendentais. Se desejado, pode-se obter correções para a temperatura.

A obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância no formalismo de multigrupo proposto neste trabalho segue o mesmo procedimento, diferindo somente no intervalo de energia das integrais Z_f , W_f , Z_{am} , W_m , e Z_m , que são efetuadas no grupo de interesse. No método proposto não há restrições à temperatura e nem ao formalismo utilizado para descrever as ressonâncias. Além disso, não há restrição de ressonâncias isoladas. Podem, inclusive, haver várias ressonâncias no mesmo grupo.

OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

As equações (8), (9) e (10) constituem o sistema de equações para a obtenção dos parâmetros IR dado Φ_f e $\Phi_f^{(1)}$.

A quantidade Φ_f é calculada exatamente pela solução da equação (5) que pode ser obtida através do código NJOY. Embora essa seja a intenção final do trabalho que está em andamento, nessa etapa será considerada a aproximação de 1ª ordem da equação (5), dada pela equação (16) [14,15]. Esse procedimento foi amplamente utilizado por vários pesquisadores no cálculo de λ , κ e μ [13,14,15].

No trabalho considerado aqui, serão efetuadas algumas simplificações, tendo em vista, ilustrar o procedimento de obtenção dos parâmetros IR para cada grupo de energia. Segue-se abaixo os passos para obtenção dos parâmetros:

1- Introduzir a aproximação $\mu \rightarrow 1$, na equação (5) que torna-se:

$$(\sigma_t + \bar{A}s)\Phi_f = K_f(\sigma_s\Phi_f) + \sigma_{am}K_{am}(\Phi_f) + \frac{\bar{A}s}{E} \quad (17)$$

onde $\bar{A}s$, compatibilizando-se com o código NJOY, representa σ_0 .

2- Introduzir método numérico para cálculo de K_f , K_m , Z_f , W_f , Z_m e W_m no grupo de energia de interesse.

3- Assumir que o urânio-238 representa o absorvedor e que, o oxigênio representa o meio moderador do meio absorvedor.

Conforme a Fig.1, a região epitérmica consiste de várias ressonâncias, sendo a mais importante a ressonância de 6.67 eV do urânio 238, da mistura UO_2 . Alguns autores consideram ainda a ressonância em 192 eV do urânio 238, da mistura UO_2 como uma das mais importantes por ser uma das maiores.

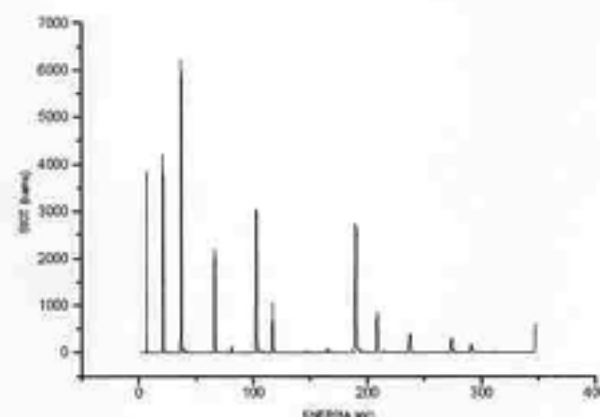


FIGURA 1- Gráfico da seção de choque total versus a energia

As figuras que seguem mostram a importância dos dois grupos estudados aqui, grupo 45 (de 6.476 eV até 8.315 eV) que contém a ressonância de 6.67 eV, e o grupo 32 (de 167.0 eV até 275.4 eV) que contém a ressonância de 192 eV, do código HAMMER-TECHNION. Os gráficos mostram dois casos opostos que ocorrem no formalismo de multigrupo. Na Fig.2 tem-se uma única ressonância que engloba mais de um grupo (grupos 46 e 45), estando a maior parte no grupo 45. No segundo gráfico, tem-se uma série de ressonâncias em um único grupo de energia, o que dificulta os cálculos já que a maioria dos métodos utilizados tratam de ressonâncias isoladas.

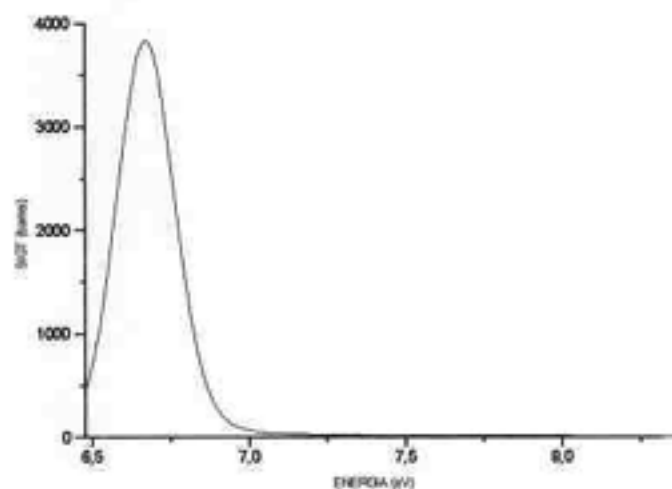


FIGURA 2- Gráfico da seção de choque total versus energia para o grupo 45.

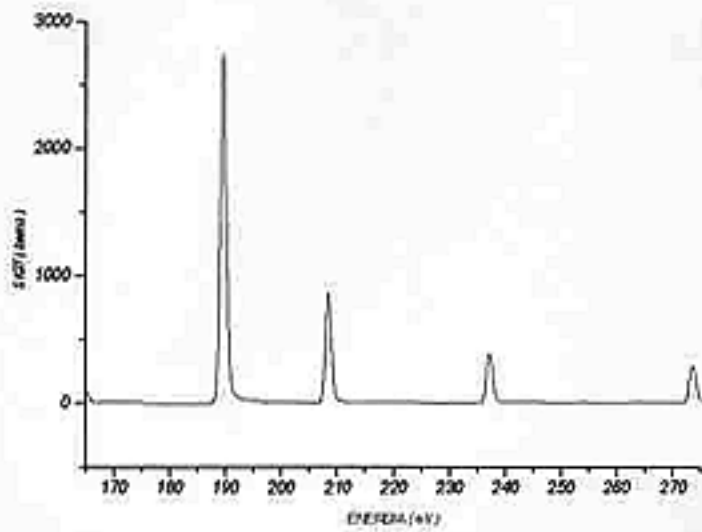


FIGURA 3- Gráfico da seção de choque total versus energia para o grupo 32.

O primeiro passo dado, foi executar o programa de uma maneira similar a outros autores, como já dito anteriormente, com a aproximação de 1ª ordem do fluxo e tratando-se de ressonâncias isoladas descritas pelo formalismo de Breit-Wigner [2], para efeito de comparação do formalismo proposto.

Calculou-se, primeiramente, os parâmetros IR para a ressonância de 192 eV, considerando-se a não interferência de espalhamento. Os dados foram os mesmos usados por Ishiguro [15] e por Goldstein e Cohen [14] para a obtenção de λ e κ . Segue-se, agora, os dados utilizados [13]:

$E_r = 192$ eV; $\Gamma = 0.165$ eV; $\Gamma_\gamma = 0.025$ eV; $\Gamma_n = 0.140$ eV; $\sigma_1 = 11600$ barns; $\alpha = 0.9832$; $\sigma_p = 10.0$ barns; $E_1 = 200$ eV; $E_2 = 180$ eV.

e os resultados obtidos foram:

TABELA 1- Parâmetros IR para a ressonância de 192 eV a 0K.

σ_0 (barns)	Programa Elaborado		Ishiguro		Goldstein	
	λ	κ	λ	κ	λ	κ
10	0.287	0.916	0.315	0.908	0.247	0.899
20	0.314	0.928	0.359	0.920	0.297	0.913
30	0.381	0.935	0.392	0.928	0.335	0.922
50	0.436	0.943	0.442	0.939	0.392	0.933
70	0.475	0.949	0.477	0.945	0.435	0.940
100	0.518	0.955	0.519	0.952	0.482	0.948

Para σ_0 pequenos observa-se que, os valores de λ excedem 8% de desvio em relação aos dados de Ishiguro e 16% aos dados de Goldstein e Cohen, porém, à medida que σ_0 aumenta, o desvio diminui até 0.19% para Ishiguro e 7.47% para Goldstein e Cohen. O mesmo ocorre para o moderador, porém, com um desvio percentual muito inferior a λ , que se mostra um parâmetro muito difícil de

ser obtido conforme a seção de choque de espalhamento do absorvedor usada no cálculo dos parâmetros IR.

O segundo passo foi executar o programa para a ressonância de 6.7 eV, considerando os seguintes dados [16]:

$E_r = 6.7$ eV; $\Gamma = 0.02752$ eV; $\Gamma_\gamma = 0.026$ eV; $\Gamma_n = 0.00152$ eV; $\sigma_1 = 21530$ barns; $\alpha = 0.9832$; $\sigma_p = 10.75$ barns; $E_1 = 18.0$ eV; $E_2 = 2.0$ eV.

os valores encontrados foram:

TABELA 2- Parâmetros IR para a ressonância de 6.7 eV a 0K.

σ_0 (barns)	Programa Elaborado		Ishiguro		Goldstein	
	λ	κ	λ	κ	λ	κ
10	-0.001	0.286	0.017	0.453	0.004	0.368
20	0.002	0.407	0.018	0.503	0.008	0.452
30	0.004	0.477	0.019	0.542	0.010	0.505
50	0.008	0.561	0.023	0.598	0.015	0.574
70	0.012	0.612	0.027	0.637	0.021	0.618
100	0.016	0.662	0.035	0.678	0.028	0.664

Nessa última tabela observa-se uma discrepância maior entre os dados obtidos pelo programa, em comparação com os dados dos dois autores em questão. Nota-se que os valores de λ diferem, e muito, dos valores comparados, mesmo à medida que aumenta-se σ_0 . Para os valores de κ , nota-se que o desvio é grande para σ_0 pequeno, mas torna-se desprezível para σ_0 grande, principalmente em comparação com os valores de Goldstein/Cohen. Embora o desvio encontrado para λ seja grande, esse parâmetro é próximo de zero, o que não afetará sensivelmente o cálculo de autoblindagem.

Um terceiro passo foi, executar o programa utilizando-se como dados: as seções de choque, total e de espalhamento, do urânio 238 vindas do ENDF-B/IV e processadas com o código NJOY a 1500K, e não calculadas como anteriormente, através das larguras de ressonâncias. Os grupos estudados foram:

- grupo 45 ($E_1 = 8.315$ eV; $E_2 = 6.476$ eV), onde se encontra a ressonância de 6.67 eV;

- grupo 32 ($E_1 = 275.4$ eV; $E_2 = 167.0$ eV), onde se encontra a ressonância de 192 eV.

À seguir os dados obtidos na Tabela 3:

TABELA 3- Parâmetros IR para os grupos 45 e 32.

σ_0 (barns)	GRUPO 45		GRUPO 32	
	λ	κ	λ	κ
10	0.006	0.617	-	-
20	0.008	0.665	-	-
30	0.010	0.694	0.014	0.781
50	0.139	0.729	0.232	0.829
70	0.189	0.750	0.308	0.850
100	0.313	0.770	0.370	0.867

- * não houve convergência.

Observa-se na tabela acima que os resultados para os parâmetros IR tanto para o absorvedor como para o moderador estão dentro dos valores esperados, porém, para o grupo 32 com σ_0 inferiores a 26 barns, não atingiu-se a convergência, por razões desconhecidas.

CONCLUSÕES

Segundo o exposto neste trabalho utilizando-se o formalismo de Single-Level Breit-Wigner, conforme amplamente utilizado por Ishiguro e Goldstein/Cohen, obteve-se resultados compatíveis com os mesmos autores com uma margem de desvio satisfatória.

Para o programa executado com as seções de choque total e de espalhamento, obtidas com o código NJOY, observa-se que os resultados para a região de 6.67 eV tem os valores esperados, tanto para o absorvedor, como para o moderador. Convém salientar que neste caso existe uma única ressonância nesse grupo e o procedimento é direto. Já para a obtenção dos valores dos parâmetros IR no grupo 32, não foi atingida a convergência imposta para a diluições (σ_0) inferiores a 26 barns, porém para σ_0 maiores, o resultado foi satisfatório. Deve-se lembrar que esses cálculos foram feitos admitindo-se a aproximação de primeira ordem do fluxo e que no grupo 32 existem quatro ressonâncias. Cabe ressaltar, ainda, que esses parâmetros deverão ser calculados com o fluxo exato vindo da saída do módulo GROUPT do código NJOY.

Como conclusão final o método proposto para o cálculo dos fatores intermediários de ressonância no formalismo de multigrupo obteve resultados promissores.

REFERÊNCIAS

- [1] Bell, G. I. and Glasstone, S., **Nuclear Reactor Theory**, Van Nostrand Reinhold Company, New York (1970).
- [2] Lamarsh, J. R., **Introduction to Nuclear Reactor Theory**, Addison-Wesley Publishing Company (1972).
- [3] Nordheim, L. W., Nucl. Sci. Eng., **12**, 457 (1962).

[4] Bondarenko, J. J., Ed. **Group Constants for Nuclear Reactor Calculations**, Consultants Bureau, New York (1964).

[5] Barhein, J., Rothenstein, W. and Taviv, E., **The HAMMER Code System**, Technion Israel Institute of Technology, Haifa Israel, NP-565 Oct. (1978).

[6] Lemmel, H. D., **ENDF/B-VI, The U. S. Evaluated Nuclear Data Library for Neutron Reaction Data**, IAEA-NDS-100, June (1990).

[7] Shibata, K., et alli, **Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 3 - JENDL-3**, JAERI - 1319 (1990).

[8] Hoffman, A., et ali, - APOLLO: Code multigroup de resolution de l'equation du transport pour les neutron, CEA-n-1610.

[9] Tsuchihashi, K., Takano, H., Horikami, K. and Ishiguro, Y., **SRAC: JAERI Thermal Reactor Standard Code System for Reactor Design and Analysis**, JAERI-1285, Japan Atomic Energy Research Institute (1983).

[10] Yamamoto, M., Sakurada, K., Mizuta, H. and Makino, K., **Validation of the HELIOS.HX code for high conversion light water reactor lattice analysis**, Nuclear Technology vol.80, p.240-249, Febv. (1988).

[11] Briesmeister, J. F., **MCNP - A General Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport - Version 3A**. LA-7396-M. Los Alamos National Laboratory, USA.

[12] Goldstein, R. and Brooks, H., **Intermediate Resonance Absorption in Nonhomogeneous System**, Nucl. Sci. Eng., **20**, 331 (1964).

[13] Mizuta, H. and Yamamoto, M., **Improved Intermediate Resonance Approximation in Heterogeneous System**, Journal Nucl. Sci. Technol., **21**[3], 161 (1984).

[14] Goldstein, R. and Cohen, E.R., **Theory of Resonance Absorption of Neutrons**, Nuclear Sci. and Eng., **13**, 132 (1962).

[15] Ishiguro, Y., **Exact Treatment of the Resonance Absorption of Neutrons of Intermediate Energy**, Journal Nucl. Sci. Technol., **32**, 422 (1968).

[16] Ishiguro, Y. and Takano, H., **Intermediate Neutron Resonance Absorption with Interference Scattering in Heterogeneous Systems**, Journal Nucl. Sci. Technol., **6**[7], 380 (1969).

ABSTRACT

This work shows a new method for the calculation of the resonance intermediate parameters (IRP) λ , κ , ϵ , μ on the multigroup formalism. The method is based on a numerical formalism, using the first order approximation for the neutron flux and cross sections from ENDF/B-IV. The calculated values of the IRP were initially calculated similarly to the usual methods which were based on an analytical process. As an illustrative example, one has calculated the IRP for groups 32 and 45 of HAMMER-TECHNION code. The results obtained can be considered satisfactory.