

NOTA TÉCNICA
CTA-~~IEA~~/ NT- 013/82

25/NOVEMBRO/82

CTA - EAU - NT - - 013/82.

"INTERAÇÕES ENTRE RESSONÂNCIAS
NA REGIÃO NÃO RESOLVIDA"

POR

SÉRGIO DE QUEIRÓZ BOGADO LEITE

**Centro Técnico Aeroespacial
Instituto de Estudos Avançados
Rodovia dos Tambois, Km 5,5
12.200-São José dos Campos - SP
Brasil**

INTERAÇÕES ENTRE RESSONÂNCIAS NA REGIÃO NÃO RESOLVIDA

por

Sérgio de Queiroz Bogado Leite

RESUMO

O tratamento de ressonâncias não resolvidas é revisto e uma subrotina opcional à subrotina UNRES do código MC² é apresentada. Comparações com o modelo original de ressonância isolada sugerem, em alguns casos, a necessidade de se considerar os efeitos de interações entre ressonâncias do sistema. (autor)

ABSTRACT

The theory on resonance absorption in the unresolved region is reviewed and a subroutine is presented, optional to UNRES in MC² code. Comparisons with the isolated resonance model suggest the necessity, in some cases, of considering interference and overlapping effects among resonances of the system. (author)

I - INTRODUÇÃO

O conhecimento da estrutura ressonante das seções de choque de materiais nucleares como função da energia tem sido o objeto de diversas investigações (1-5) e é de grande interesse em cálculos de reatores rápidos. Tal estrutura, que para elementos pesados pode se estender a energias de aproximadamente 100 Kev, é normalmente sensível a variações de temperatura e se divide em duas regiões: resolvida e não resolvida. Na região resolvida o espaçamento entre ressonâncias é suficiente para que parâmetros individuais possam ser determinados experimentalmente. Estes parâmetros são em seguida utilizados em modelos teóricos na determinação da dependência energética das seções de choque. A região resolvida ocorre na faixa de mais baixas energias e varia em extensão de nuclídeo para nuclídeo. Assim, para elementos férteis onde as ressonâncias são mais espaçadas, a região resolvida chega a energias da ordem de alguns Kev, enquanto que para elementos físseis esta não vai além de algumas centenas de ev. Acima dessas energias, na região não resolvida, os valores a serem usados representam não as ressonâncias individuais, mas parâmetros médios típicos de um comportamento coletivo, resultado da proximidade entre elas (a obtenção desses valores é feita através de extrapolações para a região não resolvida do comportamento estatístico dos parâmetros em torno de suas médias na região resolvida). A reconstrução da estrutura ressonante é feita então utilizando-se distribuições estatísticas conhecidas para seus parâmetros. As seções de choque obtidas por este processo representam portanto médias sobre intervalos de energia contendo muitas ressonâncias.

Neste trabalho, o problema das interações entre ressonâncias no cálculo das seções de choque de captura e fissão na região não resolvida é estudado. Um tratamento analítico aproximado⁽⁶⁾ que permite a avaliação separada dos efeitos de superposição entre ressonâncias de uma seqüência e interferência entre diferentes seqüências de ressonâncias é usado para comparações com o modelo de ressonância isolada, através da implementação do método ao código MC² (7) na forma de uma subrotina opcional à subrotina UNRES. Os resultados mostram que enquanto efeitos de interferência são usualmente pequenos, podem ser desprezados na maioria dos casos, os efeitos de superposição podem ser consideráveis em alguns arranjos críticos.

II - REVISÃO TEÓRICA

A seção de choque efetiva para a reação x do material M é definida como

$$\sigma_x^M = \frac{\int \sigma_x^M(E) \phi(E) dE}{\int \phi(E) dE} \quad (1)$$

Na avaliação da expressão acima, várias aproximações são feitas com o objetivo de reescrever o lado direito da equação (1) em termos de parâmetros conhecidos de ressonância. A primeira delas é a aproximação NR feita para o fluxo de nêutrons e boa para altas energias onde a perda média de energia do nêutron por colisão é grande, comparada com a largura de nível. Com esta aproximação a equação (1) pode ser escrita

$$\sigma_x^M = \frac{\frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \frac{\sigma_x^M(E) dE}{\sigma_t(E)}}{\frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \frac{dE}{\sigma_t(E)}}$$

onde (E_1, E_2) é um intervalo arbitrário contendo a energia E^* para a qual se quer calcular a seção de choque efetiva. Separando $\sigma_t(E)$ em suas partes ressonante e potencial,

$$\sigma_x^M = \frac{\frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \frac{\sum_s^M \sum_j \sigma_{xj}^s dE}{\sum_s \frac{N_s}{N_M} \sum_j \sigma_{rj}^s + \sigma_p} dE}{\frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \frac{dE}{\sum_s \frac{N_s}{N_M} \sum_j \sigma_{rj}^s + \sigma_p}} \quad (2)$$

onde o somatório no denominador de (2) inclui todas as ressonâncias j de todas as sequências s do problema enquanto que $\sum_s^M \sum_j \sigma_{xj}^s$ inclui apenas aquelas referentes ao material M . Nesta equação σ_x e σ_p são seções de choque por átomo do material M enquanto que σ_r refere-se ao material da sequência s . O espalhamento potencial σ_p (a ser calculado na energia E^* não resolvida), além do background total dos materiais presentes, pode incluir efeitos de geometria e heterogeneidade bem como a contribuição em E^* das ressonâncias largas resolvidas dos elementos mais leves da mistura (7). Por ser considerado

constante em (E_1, E_2) , σ_p não inclui as ressonâncias resolvidas estreitas e pronunciadas dos materiais mais pesados.

Diferentes expansões para o numerador e denominador da equação acima dão origem a diferentes aproximações para a seção de choque efetiva da reação x . Dessas expansões surgem termos de várias ordens característicos da interferência entre seqüências (tipicamente $\sum_{s' \neq s}$ e $\sum_{s'' \neq s' \neq s}$) e da superposição de ressonâncias de uma seqüência ($\sum_{k \neq j}$ e $\sum_{i \neq j \neq k}$). Algumas dessas expansões e seus possíveis truncamentos serão discutidos mais adiante.

Uma outra aproximação é feita quando se escolhe o modelo a ser adotado para as reações nucleares. O modelo single-level de Breit-Wigner assume que ressonâncias da mesma seqüência, correspondendo ao mesmo estado de momento angular, estão bem separadas, o espaçamento entre duas ressonâncias sendo grande comparado com a largura de nível Γ . Neste modelo

$$\sigma_{xj}^s = \sigma_{oj}^s \frac{\Gamma_{xj}^s}{\Gamma_j^s} \psi(\xi, x) \tag{3a}$$

$$\sigma_{rj}^s = \sigma_{oj}^s a_\ell^s \psi(\xi, x) \tag{3b}$$

onde os fatores $(E_{oj}/E)^{1/2}$ foram feitos iguais a um e

$$\sigma_{oj}^s = 4\pi g^s \kappa_o^2 \frac{\Gamma_{nj}^s}{\Gamma_j^s} \left(\frac{A+1}{A}\right)^2 \tag{3c}$$

$$\xi = \frac{\Gamma_j^s}{\Delta} ; \Delta = \left(\frac{4KTE_{oj}}{A}\right)^{1/2} \tag{3d}$$

$$x = \frac{2(E - E_{oj})}{\Gamma_j^s} \tag{3e}$$

e onde $a_\ell^s = \cos 2\delta_\ell^s$ (com δ_ℓ^s a mudança de fase) é um fator que leva em conta correções de primeira ordem na interferência entre espalhamento potencial e ressonante (6).

Outras aproximações impostas à equação (2) incluem:

1 - A diferença $E_2 - E_1$, que se supõe conter muitas ressonâncias, é substituída por $N^S < D^S >$ onde N^S é o número de ressonâncias em (E_1, E_2) e $< D^S >$ é a distância média entre elas na seqüência S. Para as ressonâncias de cada seqüência, o comportamento da largura de nível Γ_x da reação x (ou da largura reduzida $< \Gamma_n^0 >$ para a reemissão de nêutron) em torno da média $< \Gamma_x >$ é descrito por uma distribuição chi-quadrada de probabilidade com n graus de liberdade, com n o número de canais igualmente prováveis de decaimento do núcleo composto pela reação x. Assim sendo, termos do tipo $\frac{1}{N^S} \sum_j$ que surgem desta aproximação podem ser substituídos por

$$\int A = \int_0^\infty dt P_n(t), \text{ para materiais férteis} \quad (4a)$$

ou

$$\int_0^\infty dt P_n(t) \int_0^\infty du P_f(u), \text{ para materiais físséis} \quad (4b)$$

com

$$t = \frac{\Gamma_n}{< \Gamma_n >}, \quad u = \frac{\Gamma_f}{< \Gamma_f >} \quad e$$

$$P_n(t) dt = \frac{n}{2 \Gamma(\frac{n}{2})} \left(\frac{nt}{2} \right)^{\frac{n}{2} - 1} \exp\left(-\frac{nt}{2}\right) dt$$

2 - Na avaliação da superposição de ressonâncias da mesma seqüência, somatórios do tipo $\sum_{k \neq j}$ são substituídos por integrais pesadas pela probabilidade de se encontrar uma ressonância k em $d|E_k - E_j|$ em torno de $|E_k - E_j|$, independente do número de ressonâncias que possam existir entre k e j.

Esta probabilidade é descrita por

$$\Omega(y) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{py} \frac{\left(\frac{n}{2}\right)^{n/2} dp}{\left(p + \frac{n}{2}\right)^{n/2} - \left(\frac{n}{2}\right)^{n/2}}, \quad (5a)$$

onde

$$y = \frac{|E_k - E_j|}{\langle D \rangle} \quad (5b)$$

e onde $n = 10$ é o número de graus de liberdade que melhor fita os dados experimentais⁽⁸⁾. Para $n = 10$,

$$\begin{aligned} \Omega(y) = 1 + 2 & \left[\exp\left(-10y \sin^2 \frac{\pi}{5}\right) \cos\left(5y \sin \frac{2\pi}{5} + \frac{2\pi}{5}\right) - \right. \\ & \left. - \exp\left(-10y \sin^2 \frac{2\pi}{5}\right) \cos\left(5y \sin \frac{\pi}{5} - \frac{\pi}{5}\right) \right] \quad (5c) \end{aligned}$$

Com esta definição os somatórios $\sum_{k \neq j}$ são substituídos por

$$\int_{-\infty}^{\infty} d |E_k - E_j| \Omega(|E_k - E_j|) \quad (5d)$$

3 - Para interferência entre seqüências, somatórios em $s' \neq s$ (e $s'' \neq s', s$) são integrados pela probabilidade de se encontrar uma ressonância j' de s' a uma distância $|E_{j'} - E_j|$ da ressonância j de s . Desde que s, s' e s'' não se relacionam, tal probabilidade vale

$$\frac{1}{E_2 - E_1} = \begin{cases} \frac{1}{N^{s'} \langle D^{s'} \rangle}, & \text{para seqüência } s' \quad (6a) \\ \frac{1}{N^{s''} \langle D^{s''} \rangle}, & \text{para seqüência } s'' \quad (6b) \end{cases}$$

e os limites de integração são dados por $\left[(E_1 - E_j), (E_2 - E_j) \right]$. Termos resultantes dessa operação na forma $\frac{1}{N^{s'}} \sum_{j'}$ e $\frac{1}{N^{s''}} \sum_{j''}$ são também substituídos pelas equações (4) acima.

4 - De acordo com a aproximação NR, os limites de integração da equação (2) bem como os das integrações acima são estendidos para $(-\infty, \infty)$. Com essas aproximações (e manipulações convenientes da equação (2)), as seções de choque efetivas de captura e fissão podem ser calculadas nas energias E^* para as quais são fornecidos os parâmetros de ressonância. Na seção

que segue alguns tratamentos são comparados; diversas formas de truncamento das expansões são analisadas dando origem a diferentes ordens de aproximação para a interferência e superposição.

III - MODELO APROXIMADOS

Na expansão da equação (2) numerador e denominador podem ser reescritos usando-se a identidade

$$\frac{1}{A+B} = \frac{1}{A} \left(1 - \frac{B}{A+B} \right) \quad (7)$$

O numerador é então dado por

$$\sum_s^M \sum_j \frac{1}{E_2 - E_1} \left[\frac{\sigma_{xj}^s}{\sigma_{rj}^s + \sigma_p} \left(1 - \sum_{k \neq j} \frac{\sigma_{rk}^s}{\sigma_t} \right) - \sum_{s' \neq s} \frac{N_{s'}}{N_M} \sum_{j'} \frac{\sigma_{rj'}^{s'}}{\sigma_t} \right] dE \quad (8a)$$

enquanto que o denominador por

$$\frac{1}{\sigma_p} \left\{ 1 - \sum_s \frac{N_s}{N_M} \sum_j \frac{1}{E_2 - E_1} \left[\frac{\sigma_{rj}^s}{\sigma_t} dE \right] \right\}$$

ou ainda

$$\frac{1}{\sigma_p} \left\{ 1 - \sum_s \frac{N_s}{N_M} \sum_j \frac{1}{E_2 - E_1} \left[\frac{\sigma_{rj}^s}{\sigma_{rj}^s + \sigma_p} \left(1 - \sum_{k \neq j} \frac{\sigma_{rk}^s}{\sigma_t} - \sum_{s' \neq s} \frac{N_{s'}}{N_M} \sum_{j'} \frac{\sigma_{rj'}^{s'}}{\sigma_t} \right) dE \right] \right\} \quad (8b)$$

RESSONÂNCIA ISOLADA

Na aproximação de ressonância isolada, efeitos entre diferentes resso

nâncias da sequência s bem como interferência entre diferentes seqüências são ignorados. Os somatórios nos integrandos das equações (8) são desprezados e numerador e denominador são escritos como

$$\sum_s^M \sum_j \frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \frac{\sigma_{xj}^s}{\sigma_{rj}^s + \sigma_p} dE \quad (9a)$$

e

$$\frac{1}{\sigma_p} \left\{ 1 - \sum_s \frac{N_s}{N_M} \sum_j \frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \frac{\frac{\sigma_{rj}^s}{\frac{N_s}{N_M} \sigma_{rj}^s + \sigma_p} dE \right\} \quad (9b)$$

respectivamente. O modelo single-level de Breit-Wigner e as aproximações descritas anteriormente, quando aplicados às equações (9) resultam

$$\sum_s^M \frac{1}{a_l^s} \frac{\langle \Gamma_x^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle} \quad (10a)$$

e

$$\frac{1}{\sigma_p} \left\{ 1 - \sum_s \frac{\langle \Gamma_x^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle} \right\} \quad (10b)$$

para numerador e denominador, respectivamente. Nas expressões acima,

$$J^s = \int_0^\infty \frac{\psi^s}{\psi^s + \beta^s} d\lambda \quad (10c)$$

$$\beta^s = \frac{\frac{N_M}{N_s} \sigma_p}{a_l^s \sigma_o^s} \quad (10d)$$

e a notação $\langle \rangle$ é usada para representar a média sobre a distribuição

chi-quadrada descrita por (4).

A seção de choque efetiva para a reação x fica, nesse caso,

$$\sigma_x^M = \sum_s^M \frac{\sigma_p}{a_\ell^s} \frac{\langle \Gamma_x^s J^s \rangle / \langle D^s \rangle}{1 - \sum_s \frac{\langle \Gamma^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle}}$$

ou, usando a equação (7),

$$\sigma_x^M = \sum_s^M \frac{\sigma_p}{a_\ell^s} \frac{\frac{\langle \Gamma_x^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle}}{1 - \frac{\langle \Gamma^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle}} \left[1 + \sum_{s' \neq s} \frac{\frac{\langle \Gamma^{s'} J^{s'} \rangle}{\langle D^{s'} \rangle}}{1 - \sum_s \frac{\langle \Gamma^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle}} \right] \quad (11)$$

De acordo com as aproximações feitas anteriormente, despreza-se coerentemente na equação (11) o termo de interferência entre seqüências. Assim, para o modelo de ressonância isolada,

$$\sigma_x^M = \sum_s^M \frac{\sigma_p}{a_\ell^s} \frac{\frac{\langle \Gamma_x^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle}}{1 - \frac{\langle \Gamma^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle}} \quad (12)$$

Esta expressão se aproxima daquela utilizada pela subrotina UNRES do código MC² (7) a menos do fator a_ℓ^s que a altas energias deve ser incluído pois pode significativamente desviar-se de 1.0 para nêutrons com $\ell = 0$.

MÉTODO DE HWANG

Considere nas equações (8) o efeito de superposição entre ressonâncias de s ignorando novamente os termos característicos da interferência entre seqüências. Neste caso, o numerador se escreve

$$\sum_s^M \left\{ \sum_j \frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \frac{\sigma_{xj}^s dE}{\sigma_{rj}^s + \sigma_p} - \sum_j \frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \frac{\sigma_{xj}^s \sum_{k \neq j} \sigma_{rk}^s}{(\sigma_{rj}^s + \sigma_p) (\sigma_p + \sigma_{rj}^s + \sum_{k \neq j} \sigma_{rk}^s)} dE \right\} \quad (13)$$

com uma expressão similar sendo obtida para o denominador.

Equação (13) se transforma, tal como antes, em

$$\sum_s^M \left\{ \frac{\langle \Gamma_x^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle} - \frac{\langle \Gamma_x^s H^s \rangle}{\langle D^s \rangle} \right\} \quad (14a)$$

com

$$H^s = \int_0^\infty \frac{\psi_j^s \sum_{k \neq j} A_k \psi_k^s}{(\psi_j^s + \beta_j^s) (\psi_j^s + \beta_j^s + \sum_{k \neq j} A_k \psi_k^s)} dx_j \quad (14b)$$

$$A_k = \frac{\sigma_{ok}}{\sigma_{oj}} \quad (14c)$$

e onde desprezou-se a_ℓ^s .

Aqui os termos característicos da superposição não foram ainda substituídos pela integração dada por (5d).

O integrando de (14b) é desenvolvido por Hwang⁽⁹⁾ (para sistemas diluídos onde $\Sigma_p \gg \Sigma_r$) primeiro em potências de $\frac{1}{\beta_j}$ e em seguida de

$\sum_{k \neq j} \sigma_{ok} \psi_k / \sigma_p$ para dar

$$\sum_{m,n=1}^{\infty} (-1)^{m+n} \frac{(m+n-1)!}{n! (m-1)!} \left(\frac{\psi_j}{\beta_j} \right)^m \left(\sum_{k \neq j} \frac{\psi_k}{\beta_k} \right)^n$$

Desprezando produtos cruzados em $\left(\sum_{k \neq j} \psi_k / \beta_k \right)^n$ e substituindo $\sum_{k \neq j}$ pela integração dada por (5d) e representada por [], obtemos

$$\frac{\langle \Gamma_x^H \rangle}{\langle D \rangle} = \frac{1}{\langle D \rangle} \sum_{m,n=1}^{\infty} (-1)^{m+n} \frac{(m+n-1)!}{n! (m-1)!} \left[\left\langle \frac{\Gamma_x}{\beta_j^m \beta_k^n} \int_0^{\infty} \psi_j^m \psi_k^n dx_j \right\rangle \right] \quad (15)$$

Equações (14a) e (15), com expressões similares para o denominador, constituem a solução de Hwang para a seção de choque efetiva da reação x com superposição de ressonâncias da mesma seqüência. O somatório sobre os estados possíveis no denominador, tal como na equação (11), é substituído pelo termo correspondente no numerador, a soma sobre $s' \neq s$ é desprezada por não se considerar a interferência no modelo.

Outras aproximações usadas por Hwang na avaliação da equação (15) são o uso de 8 (ao invés de 10) graus de liberdade para n na equação (5a) e a forma assintótica de ψ válida quando $\Gamma_j \ll \Delta$. Com estas aproximações o problema se simplifica, pois as integrações em (15) podem ser resolvidas analiticamente. Claramente, para os casos onde a relação $\Gamma_j \ll \Delta$ não for válida ou para sistemas altamente concentrados, a solução acima deve sofrer modificações para evitar tais aproximações.

O efeito de interferência entre seqüências pode ainda ser incluído neste modelo se adicionarmos a σ_t as contribuições das outras seqüências s' que não s de M , dando origem a uma expressão mais geral que aquela dada por (13)⁽¹⁾, mas com idênticas restrições no que tange a aplicabilidade do modelo diante das aproximações acima.

MODELO DE HEENAN E ADKINS

A conveniência de uma solução constituída de termos típicos da superposição ou da interferência e válida para situações outras que não somente aquelas das aproximações de Hwang, justifica o desenvolvimento do presente modelo. Aqui, efeitos de superposição e interferência são incluídos até terceira ordem, expandindo os somatórios em $k \neq j$ e $s' \neq s$ no integrando das equa

ções (8) uma vez mais de acordo com (7) e retendo termos envolvendo produtos cruzados de até três ressonâncias. Dessas expansões, e características das interações de terceira ordem, surgem somas em $i \neq k, j$ e $s'' \neq s', s$. Equações (3) são em seguida usadas no numerador e denominador das expansões acima que são novamente modificadas por expansões e truncamentos convenientes⁽⁶⁾. As aproximações descritas na seção anterior são então aplicadas e a solução final é dada por

$$\sigma_x^M = \frac{\sigma_p \sum_s^M \frac{1}{a_s} (T_{0x} - T_{1x} + T_{2x} + T_{3x} + T_{4x} + T_{5x} - T_{6x} + T_{7x} + T_{8x} + T_{9x})}{1 - \sum_s (T_0 - T_1 + T_2 + T_3 + T_4 + T_5 - T_6 + T_7 + T_8 + T_9)} \quad (16)$$

com

$$T_{0x} = \frac{\langle \Gamma_x^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle}$$

$$T_{1x} = \frac{\langle \Gamma_x^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle} \sum_{s' \neq s} \frac{\langle \Gamma^{s'} J^{s'} \rangle}{\langle D^{s'} \rangle}$$

$$T_{2x} = \frac{\langle \Gamma_x^s J^{*s} \rangle}{\langle D^s \rangle} \sum_{s' \neq s} \frac{\langle \Gamma^{s'} (J^{s'} - J^{*s'}) \rangle}{\langle D^{s'} \rangle}$$

$$T_{3x} = \frac{\langle \Gamma_x^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle} \sum_{s' \neq s} \frac{\langle \Gamma^{s'} (J^{s'} - J^{*s'}) \rangle}{\langle D^{s'} \rangle} \sum_{s'' \neq s', s} \frac{\langle \Gamma^{s''} J^{s''} \rangle}{\langle D^{s''} \rangle} -$$

$$- 2 \frac{\langle \Gamma_x^s J^{*s} \rangle}{\langle D^s \rangle} \sum_{s' \neq s} \frac{\langle \Gamma^{s'} J^{s'} \rangle}{\langle D^{s'} \rangle} \sum_{s'' \neq s', s} \frac{\langle \Gamma^{s''} J^{s''} \rangle}{\langle D^{s''} \rangle}$$

$$T_{4x} = \int A \int_0^\infty dx \frac{\Gamma_x^s}{\langle D^s \rangle} \left[\alpha(x) - 2\alpha^2(x) \right] \int_0^\infty dz \frac{\Gamma^s}{\langle D^s \rangle} w(z, x) \gamma(z) \sum_{s' \neq s} \frac{\langle \Gamma^{s'} J^{s'} \rangle}{\langle D^{s'} \rangle} -$$

$$- \int A \int_0^\infty dx \frac{\Gamma_x^s}{\langle D^s \rangle} \alpha(x) \int_0^\infty dz \frac{\Gamma^s}{\langle D^s \rangle} w(z, x) \gamma(z) \sum_{s' \neq s} \frac{\langle \Gamma^{s'} J^{*s'} \rangle}{\langle D^{s'} \rangle}$$

$$T_{5x} = \frac{\langle \Gamma_x^s (J^s - 2J^{*s}) \rangle}{\langle D^s \rangle} \sum_{s' \neq s} \left[A' \int_0^\infty dx' \frac{\Gamma_{x'}^{s'}}{\langle D^{s'} \rangle} \alpha(x') \int_0^\infty dz' \frac{\Gamma_{z'}^{s'}}{\langle D^{s'} \rangle} w(z', x') \gamma(z') \right] -$$

$$- \frac{\langle \Gamma_x^s J^s \rangle}{\langle D^s \rangle} \sum_{s' \neq s} \left[A' \int_0^\infty dx' \frac{\Gamma_{x'}^{s'}}{\langle D^{s'} \rangle} \alpha^2(x') \int_0^\infty dz' \frac{\Gamma_{z'}^{s'}}{\langle D^{s'} \rangle} w(z', x') \gamma(z') \right]$$

$$T_{6x} = \int A \int_0^\infty dx \frac{\Gamma_x^s}{\langle D^s \rangle} \alpha(x) \int_0^\infty dz \frac{\Gamma_z^s}{\langle D^s \rangle} \gamma(z) w(z, x)$$

$$T_{7x} = \int A \int_0^\infty dx \frac{\Gamma_x^s}{\langle D^s \rangle} \alpha^2(x) \int_0^\infty dz \frac{\Gamma_z^s}{\langle D^s \rangle} w(z, x) \left[\gamma(z) - \gamma^2(z) \right]$$

$$T_{8x} = \int A \int_0^\infty dx \frac{\Gamma_x^s}{\langle D^s \rangle} \left[\alpha(x) - 2\alpha^2(x) \right] \int_0^\infty dz \frac{\Gamma_z^s}{\langle D^s \rangle} w(z, x) \gamma(z) \sum_{s' \neq s} \frac{\langle \Gamma_{z'}^{s'} J^{s'} \rangle}{\langle D^{s'} \rangle} -$$

$$- \int A \int_0^\infty dx \frac{\Gamma_x^s}{\langle D^s \rangle} \alpha(x) \int_0^\infty dz \frac{\Gamma_z^s}{\langle D^s \rangle} w(z, x) \gamma^2(z) \sum_{s' \neq s} \frac{\langle \Gamma_{z'}^{s'} J^{s'} \rangle}{\langle D^{s'} \rangle}$$

$$T_{9x} = \int A \int_0^\infty dx \frac{\Gamma_x^s}{\langle D^s \rangle} \left[\alpha(x) - 2\alpha^2(x) \right] \int_0^\infty dz \frac{\Gamma_z^s}{\langle D^s \rangle} \gamma(z) w(z, x) \int_0^\infty dy \frac{\Gamma_y^s}{\langle D^s \rangle} \theta(y) w(y, z) -$$

$$- \int A \int_0^\infty dx \frac{\Gamma_x^s}{\langle D^s \rangle} \alpha(x) \int_0^\infty dz \frac{\Gamma_z^s}{\langle D^s \rangle} w(z, x) \gamma^2(z) \int_0^\infty dy \frac{\Gamma_y^s}{\langle D^s \rangle} \theta(y) w(y, z)$$

Nas expressões acima,

$$J^{*s} = \int_0^\infty \alpha^2(x) dx,$$

$\theta(y)$, $\gamma(z)$ e $\alpha(x)$ são dados por $\frac{\psi}{\psi+\beta}$ das respectivas variáveis e $w(z, x)$

se relaciona com $\Omega (| E_k - E_j |)$ das equações (5) por $w(z, x) =$

$$= \frac{\langle D \rangle}{2} \left[\Omega(z+x) + \Omega(|z-x|) \right],$$

com x, y e z dados por $\frac{2}{\Gamma_j^s} (E_j - E_{oj})$, $\frac{2}{\Gamma_i^s} (E_i - E_{oi})$ e $\frac{2}{\Gamma_k^s} (E_k - E_{ok})$,

respectivamente.

Da equação acima, vários níveis de aproximação são obtidos ao se reter um, dois ou mais termos T_i na expressão. Dessa forma, termos possuindo somatórios em $s' \neq s$ e $s'' \neq s', s$ serão termos que contribuirão para a interferência de segunda e terceira ordem entre seqüências, respectivamente, enquanto que termos envolvendo apenas parâmetros de ressonância referentes à seqüência s serão relativos à superposição entre ressonâncias da referida seqüência. Nos casos em que se despreza os termos de interferência, despreza-se coerentemente no denominador as contribuições para o somatório das seqüências que não s de M . Assim, por exemplo, no caso mais simples de ressonância isolada, os únicos termos retidos são para $i = 0$ e a solução se reduz a

$$\sigma_x = \sum_s^M \frac{\sigma_p T_{ox}}{a_\ell^s (1 - T_o)}$$

(expressão idêntica à equação 12)

Para o caso onde se inclui superposição de terceira ordem, sem interferência,

$$\sigma_x = \sum_s^M \frac{\sigma_p}{a_\ell^s} \frac{(T_{ox} - T_{6x} + T_{7x} + T_{9x})}{[1 - (T_o - T_6 + T_7 + T_9)]}$$

Os vários níveis possíveis de aproximação deste modelo são

- 1 - ressonância isolada (com termo de interferência a_ℓ^s);
- 2 - segunda ordem para superposição, sem interferência;

- 3 - segunda ordem para interferência, sem superposição;
- 4 - segunda ordem para interferência e superposição;
- 5 - terceira ordem para superposição, sem interferência;
- 6 - terceira ordem para interferência, sem superposição;
- 7 - terceira ordem para interferência e superposição.

A vantagem da equação (16) sobre a solução de Hwang reside não somente no fato de que (16) contém superposição de ressonâncias e interferência entre seqüências de até terceira ordem mas também que na análise de Heenan e Adkins, em nenhum momento foi necessário fazer as aproximações assumidas por Hwang. Em contrapartida, pode-se esperar que a avaliação numérica de termos envolvidos no superposição de segunda e terceira ordens seja relativamente demorada e nos cálculos envolvendo vários elementos em várias energias não resolvidas, o desacoplamento de tais integrais passa a ser de grande interesse. O tempo gasto na avaliação dos termos de (16) é, na verdade, a grande limitação do presente método.

IV - CONSIDERAÇÕES NUMÉRICAS E ILUSTRAÇÃO AO MODELO DE HEENAN E ADKINS

Uma subrotina opcional à subrotina UNRES foi elaborada com a finalidade de, usando as mesmas variáveis de entrada e saída da UNRES, calcular as seções de choque efetivas de captura e fissão a vários níveis de aproximação (conforme especificado no modelo de Heenan e Adkins) e compará-las com o modelo original de ressonância isolada. Dentre as modificações e inserções introduzidas, relacionam-se:

- 1 - A subrotina QFJ foi modificada para opcionalmente calcular

$$J^* = \int_0^{\infty} \alpha^2(x) dx$$

Para isso uma variável inteira IS definida em QFJ especifica a potência de $\alpha(x)$ a ser integrada no intervalo.

- 2 - Três novas funções QFJD, QFJT e TOTL foram introduzidas para calcular integrais do tipo

$$\int_0^{\infty} \alpha^n(x) dx \quad \int_0^{\infty} \gamma^m(z) w(z,x) dz$$

e

$$\int_0^{\infty} \alpha^n(x) dx \int_0^{\infty} \gamma^m(z) w(z,x) dz \int_0^{\infty} \theta^k(y) w(y,z) dy ,$$

O procedimento computacional aqui é semelhante ao usado em QFJ, as integrações em $(0, \infty)$ sendo desmembradas em duas integrações sobre intervalos finitos e calculadas usando quatro pontos de quadratura no esquema Gauss-Legendre. Os intervalos são escolhidos na forma

$$\int_0^{\infty} dx = \int_0^{x_1} dx + \int_0^{1/x_1} \frac{dx}{x^2}$$

com x_1 sendo dado pelo maior dentre

$$\sqrt{\frac{1+\beta}{\beta}} \text{ e } \frac{2}{\xi} \left\{ -\ln \left[0.15 / \left(1 + 0.753 \frac{\xi}{\beta} \right) \right] \right\}^{1/2}$$

e com o resto, neste caso, nulo.

O termo de acoplamento w é calculado através de chamadas à função FW, para cada combinação possível dos pontos de quadratura de x , y e z .

3 - O termo a_ℓ^s responsável pela interferência no espalhamento é calculado como

$$a_\ell^s = \cos 2 \delta_\ell^s$$

com δ_ℓ^s dado por

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{R}{\kappa} , \text{ para } \ell = 0 \\ \text{ou} \\ \frac{R}{\kappa} - \tan^{-1} \frac{R}{\kappa} , \text{ para } \ell = 1 \text{ ou } 2. \end{array} \right.$$

4 - O cálculo completo das seções de choque efetivas é feito antes de se passar para uma nova energia não resolvida E^* . Assim sendo, somatórios em

$s'f_s$ e $s''f_s',s$ podem ser armazenados em variáveis não indexadas e o resultado apagado ao final de cada cálculo.

5 - Nos cálculos de interferência entre seqüências, interpolações lineares são feitas ao se avaliar os parâmetros de ressonância não resolvidos de materiais que não M nas energias E^* do material M (tais interpolações são necessárias se parâmetros de diferentes materiais forem fornecidos a diferentes energias não resolvidas).

6 - O cálculo de σ_p^s é feito para o material da seqüência S segundo o mesmo esquema usado pelo MC² original. Ainda, o número de materiais do problema está limitado a um máximo de 20, o dimensionamento de algumas variáveis devendo ser refeito em caso de se ultrapassar este número.

7 - As médias sobre distribuições chi-quadradas definidas por (4) são calculadas como

$$\int_0^{\infty} dx P_n(x) f(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (17a)$$

Aqui, tal como no programa original, dez pontos de quadratura ($N = 10$) são fornecidos no início da subrotina para o cálculo das médias. Assim é que sendo

$$\Gamma_{f,j} = \langle \Gamma_f \rangle x_j^f, \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (17b)$$

e

$$\Gamma_{n,i} = \langle \Gamma_n \rangle x_i^n, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (17c)$$

com $\langle \Gamma_n \rangle = \langle \Gamma_n^0 \rangle \cdot \text{SRE}$ (SRE sendo o fator de penetração e x as quadraturas*), usamos as equações acima no cálculo de $\sigma_{0,i,j}^s$ necessário à computação das funções β dadas por (10d). Claramente, para elementos físseis, a equação (17a) é substituída pelo duplo somatório em i e j da função calculada nas combinações possíveis de i e j e dividida por N^2 .

* Tais quadraturas são fornecidas em quatro grupos de dez correspondendo a $n = 1, 2, 3$ ou 4 , o número de canais de desexcitação do núcleo composto por fissão ou emissão de nêutron.

Tabelas I e II foram preparadas para ilustrar os efeitos de interferência e superposição no cálculo da seção de choque efetiva da reação x a vários níveis de aproximação para uma mistura homogênea contendo Pu-239 ($N_M = 6 \times 10^{21}$ at./cm³), U-238 ($N_M = 2.5 \times 10^{22}$ at./cm³) e Pu-240 ($N_M = 5 \times 10^{20}$ at./cm³) a temperaturas de 300°K e 1900°K, respectivamente. Nessas tabelas, a opção 0 (zero) é a usada pelo MC² original e se obtém do modelo de ressonância isolada com $a_i^s = 1$. Uma análise dos resultados mostra que enquanto efeitos de interferência costumam ser secundários, a superposição pode, por outro lado, ser significativa. Assim é que no exemplo da tabela II, a diferença entre as opções 1 e 5 na seção de choque de captura do Pu-239 é de 12.7%. Esse efeito no entanto diminui com a temperatura (como mostra a tabela I) e também para sistemas mais diluídos. Como consequência, a opção de ressonância isolada melhora sob tais circunstâncias.

V - CONCLUSÕES

Do que foi visto pode-se concluir que o método de Heenan e Adkins trata adequadamente a região não resolvida, onde em alguns casos o modelo de ressonância isolada pode não fornecer resultados satisfatórios. Cuidado deve ser tomado no entanto na região mais baixa de energia não resolvida onde a aproximação NR mostra-se menos apropriada. Nestes casos, erros sistemáticos podem surgir no cálculo dos efeitos de interferência e superposição de ressonâncias pouco espaçadas⁽¹⁰⁾ (avaliações de tais efeitos em misturas contendo U-235 nas primeiras energias não resolvidas do U-235 confirmaram esse argumento). A reformulação do problema para a obtenção de expressões mais apropriadas para o fluxo nesta região torna-se então conveniente e pode ser feita por exemplo em termos da função de Placzek⁽¹¹⁾ ou melhorando a aproximação IR, como proposto por Gast⁽¹²⁾.

Estudos complementares para otimizar o cálculo de integrações duplas do tipo daquelas relativas à superposição de ressonâncias do modelo de Heenan e Adkins são recomendados. Otimizações deste tipo analisadas por Hwang⁽¹³⁾ sugerem que economias consideráveis em tempo podem ser obtidas se os termos de superposição puderem ser expandidos em séries de rápida convergência como ilustrado no MC²-2⁽¹⁴⁾.

AGRADECIMENTOS:

O autor agradece ao Dr. R.P. KESAVAN NAIR pela valiosa colaboração prestada através de discussões neste e em tópicos relacionados.

REFERÊNCIAS

- 1 - Hwang, R.N., em Reactor Physics in the Resonance and Thermal Regions Vol II, p. 319, Editado por A.J. Goodjohn e G.C. Pomraning (MIT Press, 1966).
- 2 - Hwang, R.N., Proc. Conf. Breeding, Economics and Safety in Large Fast Reactors, 727, ANL-6792 (1963).
- 3 - Codd, J. e Collins, P.J., ibid., 711.
- 4 - Froelich, R., Ott, K. e Schmidt, J.J., ibid., 777.
- 5 - Keane, A., Nucl. Sci. Eng. 25, 296 (1966).
- 6 - Heenan, T.F. e Adkins, C.R., Nucl. Sci. Eng. 45, 279 (1971).
- 7 - Toppel, B.J., Rago, A.L. e O'Shea, D.M., "MC², A Code to Calculate Multigroup Cross Sections", ANL-7318 (1967).
- 8 - Nicholson, R.B., Atomic Power Development Associates Report APDA- 139 (1960).
- 9 - Hwang, R.N., Nucl. Sci. Eng. 21, 523 (1965).
- 10 - Adler, F.T. e Adler, D.B., em Reactor Physics in the Resonance and Thermal Regions, Vol. II, p. 47. Editado por A.J. Goodjohn e G.C. Pomraning (MIT Press, 1966).
- 11 - Weinberg, A.M. e Wigner, E.P., "Proceedings of the Brookhaven Conference on Resonance Absorption of Neutrons in Nuclear Reactors", Brookhaven National Laboratory Report BNL-433 (1965).
- 12 - Gast., P.F., Nucl. Sci. Eng. 21, 121 (1965).
- 13 - Hwang, R.N., Nucl. Sci. Eng. 52, 157 (1973).
- 14 - Toppel, B.J., "The new multigroup cross section code, MC²-2", Proc. Conf. New Developments in Reactor Mathematics and Applications, March 29-31, 1971, Idaho Falls, Idaho, USAEC Rep. CONF-710302, Vol. 2 (1971) 968.

TABELA I - SEÇÕES DE CHOQUE EFETIVAS DE CAPTURA E FISSÃO (BARNS) A 3009K

OPÇÃO	Pu-239 (E=1.47 Kev)		U-238 (E=4 Kev)	Pu-240 (E=3.91 Kev)	
	σ_c	σ_f	σ_c	σ_c	σ_f
0	2.5105	3.7422	0.61975	1.7459	0.12883
1	2.5141	3.7462	0.62309	1.7472	0.12890
2	2.3911	3.5535	0.61858	1.7462	0.12884
3	2.5213	3.7543	0.62848	1.7396	0.12816
4	2.3983	3.5626	0.62127	1.7389	0.12815
5	2.3950	3.5628	0.61848	1.7462	0.12884
6	2.5219	3.7568	0.63899	1.7523	0.12918
7	2.4030	3.5749	0.63182	1.7523	0.12922

TABELA II - SEÇÕES DE CHOQUE EFETIVAS DE CAPTURA E FISSÃO (BARNs) A 19009K

OPÇÃO	Pu-239 (E=1.47 Kev)		U-238 (E=4 Kev)		Pu-240 (E=3.91 Kev)	
	σ_c	σ_f	σ_c	σ_f	σ_c	σ_f
0	2.9881	4.2306	0.80172		1.7832	0.13080
1	2.9888	4.2315	0.80477		1.7836	0.13083
2	2.5649	3.7194	0.78639		1.7799	0.13063
3	2.9892	4.2318	0.79287		1.7700	0.12971
4	2.5702	3.7262	0.77133		1.7694	0.12975
5	2.6099	3.7782	0.78563		1.7799	0.13063
6	2.9902	4.2352	0.82008		1.7860	0.13097
7	2.6174	3.7924	0.79873		1.7893	0.13129