

EFEITOS DE SEGUNDA ORDEM EM PROCEDIMENTOS
DE AJUSTE DE SEÇÕES DE CHOQUE (*)

F. Carvalho da Silva

Programa de Engenharia Nuclear - COPPE/UFRJ

A. D'Angelo, A. Gandini e V. Rado

Comitato Nazionale per L'Energia Nucleare

Centro Studi Nucleari della Casaccia

P.O. Box 2400, 00100 ROMA-ITALY

RESUMO

Com a possibilidade que nos deu a Teoria de Perturbação Generalizada (GPT), de calcular coeficientes de sensibilidade de altas ordens, um procedimento iterativo, que possibilita levar em conta efeitos não lineares de certas quantidades integrais com relação as seções de choque, é usado para executar um ajuste de seções de choque de elementos que compõem a blindagem de reatores rápidos. (autor).

I. INTRODUÇÃO

As seções de choque de elementos, tais como Fe e Na, que compõem a estrutura e a blindagem de reatores rápidos, não são tão bem conhecidas como aquelas dos elementos que compõem o núcleo ou aquelas que são usadas para reatores térmicos. Sendo assim, atualmente, junto com o conjunto de seções de choque se fornece também as incertezas ⁽¹⁾ (e suas correlações) associadas com estas seções de choque, como aquelas mostradas na tabela 1 para o caso que trataremos neste trabalho. Todavia, sempre

(*) Apresentado no III Encontro Nacional de Física de Reatores - Itaipava - Dez.82 e submetido a Nuclear Science Engineering.

que novas informações a respeito destas seções de choque são obtidas, parte-se para um novo ajustamento delas.

Em geral, estas novas informações são obtidas de experimentos de propagação, onde se mede a resposta de detetores de ativação de nêutrons (quantidade integral) em diversas posições de penetração num bloco do material específico que se quer estudar. No caso que estudaremos aqui, os detetores são $Rh(n,n')$, $In(n,n')$, $Na(n,\gamma)$, $Au(n,\gamma)$ e $S(n,p)$, os blocos são um de ferro puro e outro de sódio puro e para cada bloco, cuja esquematização geométrica é mostrada na figura 1, a máxima penetração, até onde se fez medida, foi 150 cm e 250 cm, respectivamente.

No entanto, para o caso de blindagem, as respostas dos detetores podem ser intensamente não lineares em relação às variações das seções de choque, logo o procedimento usual⁽²⁾ de ajuste de seções de choque baseado na hipótese de linearidade (bem estabelecido para as seções de choque do núcleo) deve ser modificado para incluir os efeitos de ordens mais altas.

Um procedimento iterativo que fornece a possibilidade de lidar com efeitos de ordens mais altas, já que a GPT^(3,4,5) possibilitou o cálculo dos coeficiente de sensibilidade necessários, foi desenvolvido na Ref. (6) e deve ser brevemente relembrado na seção seguinte.

II. O PROCEDIMENTO DE AJUSTE.

Vamos considerar um número, J , de diferentes quantidades integrais, Q , as quais são funções de I seções de choque de multigrupo. Nós usamos σ_i ($i=1, \dots, I$) para indicar os valores "verdadeiros" destas seções de choque.

Se consideramos um dado conjunto de valores σ_{oi} ,

suficientemente próximos aos valores verdadeiros σ_i , podemos escrever a seguinte expansão em série para Q_j :

$$Q_j(\sigma_1, \dots, \sigma_I) = Q_j^{\text{cal}}(\sigma_{01}, \dots, \sigma_{0I}) + \sum_{i=1}^I \frac{\partial Q_j}{\partial \sigma_i} (\sigma_i - \sigma_{0i}) + \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^I \frac{\partial^2 Q_j}{\partial \sigma_i \partial \sigma_k} (\sigma_i - \sigma_{0i}) (\sigma_k - \sigma_{0k}) ; (j=1, \dots, J) \quad (1)$$

Definindo:

$$y_j = \frac{Q_j - Q_j^{\text{cal}}}{Q_j^{\text{cal}}}, \quad y_{J+i} = \frac{\sigma_i - \sigma_{0i}}{\sigma_{0i}} ; \begin{cases} j=1, \dots, J \\ i=1, \dots, I \end{cases} \quad (2)$$

$$S_{j,i} = \delta_{ji}, \quad S_{j,J+i} = \frac{\sigma_{0i}}{Q_j^{\text{cal}}} \frac{\partial Q_j}{\partial \sigma_i} ; \begin{cases} j=1, \dots, J \\ i=1, \dots, I \end{cases}$$

$$S_{j,i,k} = 0 ; (j=1, \dots, J) \text{ e } (i,k=1, \dots, I)$$

$$S_{j,J+i,J+k} = \frac{\sigma_{0i} \sigma_{0k}}{Q_j^{\text{cal}}} \frac{\partial^2 Q_j}{\partial \sigma_i \partial \sigma_k} ; \begin{cases} j=1, \dots, J \\ i,k=1, \dots, I \end{cases}$$

onde δ_{ji} é a delta de Kronecker. A equação (1) pode ser escrita:

$$\sum_{i=1}^{I+J} S_{j,i} y_i + \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^{I+J} S_{j,i,k} y_i y_k = 0 \quad (3)$$

(j=1, \dots, J)

Os coeficientes de sensibilidade de primeira e de segunda ordem, respectivamente $S_{j,i}$ e $S_{j,i,k}$, são supostamente conhecidos. Se os valores verdadeiros Q_j e σ_i não são conhecidos, o que realmente ocorre, eles podem ser substituídos pelos valores experimentais disponíveis, E_j e σ_i^{ex} , respectivamente. As equações (2), definindo as componentes do vetor \underline{y} , devem ser substituídas por

$$y_j^{\text{ex}} = \frac{E_j - Q_j^{\text{cal}}}{Q_j^{\text{cal}}}, \quad y_{J+i}^{\text{ex}} = \frac{\sigma_i^{\text{ex}} - \sigma_{0i}}{\sigma_{0i}} ; \begin{cases} j = 1, \dots, J \\ i = 1, \dots, I \end{cases}$$

Consideremos que as quantidades experimentais E_j e σ_i^{ex} possuem uma distribuição normal de erros com uma matriz de

dispersão B_y (matriz de variância - covariância de erros). A função de verossimilhança do vetor y é maximizada se escolhermos um vetor estimado \tilde{y} de y tal que

$$(\mathbf{y}^{\text{ex}} - \tilde{\mathbf{y}})^T \mathbf{B}_y^{-1} (\mathbf{y}^{\text{ex}} - \tilde{\mathbf{y}}) = \text{mínimo}$$

com o seguinte vínculo

$$\sum_{i=1}^{I+J} S_{j,i} \tilde{y}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^{I+J} S_{j,i,k} \tilde{y}_i \tilde{y}_k = 0 \quad (4)$$

(j=1, ..., J)

Neste ponto consideraremos o seguinte processo iterativo:

$$\sum_{i=1}^{I+J} S_{j,i}^{(\ell)} \tilde{y}_i^{(\ell)} = 0 ; \quad (j=1, \dots, J) \quad (5)$$

onde os elementos $S_{j,i}^{(\ell)}$, na ℓ 'ésima iteração, são dados como

$$S_{j,i}^{(\ell)} = S_{j,i} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{I+J} S_{j,i,k} \tilde{y}_k^{(\ell-1)} ; \quad \left\{ \begin{array}{l} j=1, \dots, J \\ i=1, \dots, I+J \end{array} \right\} \quad (6)$$

assumindo que os valores de partida $\tilde{y}_k^{(0)}$ são obtidos de um ajuste com os coeficientes de primeira ordem somente.

Deste ponto em diante, segue-se o método já estabelecido para o ajuste a primeira ordem, utilizando o método de multiplicadores de Lagrange, ref. (2), até que a convergência para os valores de \tilde{y} seja alcançada, com referência a um critério de convergência pré-estabelecido.

III. RESULTADOS PARA O BLOCO DE FERRO

Na tabela 2 são mostrados os desvios iniciais, simulados, entre experiência e cálculo $[(E-C)/C]$, com as respectivas incertezas.

É na tabela 3 que são dados os resultados do ajuste das seções de choque do ferro para cada iteração. A iteração zero corresponde ao ajuste usando somente os coeficientes de sensibilidade de primeira ordem. Nesta mesma tabela é dado, para cada iteração, o valor de χ^2 (valor esperado = 16) para o teste de confiabilidade e se nota um melhoramento na confiabilidade do ajuste, devido ao procedimento iterativo, quando se passa do ajuste de primeira ordem para o de segunda ordem.

Na tabela 4 é dada, para cada experiência, a discrepância residual entre cálculo e experiência, onde:

(a)- usando o resultado do ajuste a primeira ordem (iteração zero).

(b)- usando cada quantidade integral recalculada partindo das seções de choque ajustadas (emitidas da iteração zero) com os coeficientes de primeira ordem.

(c)- usando o resultado do ajuste a segunda ordem (quarta iteração).

(d)- usando cada quantidade integral recalculada partindo das seções de choque (emitidas da quarta iteração) com os coeficientes de segunda ordem.

A discrepância entre os casos (a) e (b) acima, indica que o ajuste a primeira ordem não é suficiente e que termos de ordens mais altas são necessários. Similarmente, a discrepância entre os casos (c) e (d) acima, indica que efeitos de ordens mais altas, além da segunda, ainda estão presentes.

Dos resultados da tabela 4 é evidente que efeitos de altas ordens são importantes em todas as respostas de detetores, mas em particular para os detetores de alta energia limiar,

tais como $In(n,n')$ e $Rh(n,n')$. Desta mesma tabela se verifica que o ajuste a primeira ordem falha, na maioria dos casos, quando se compara os resultados do ajuste (a) e do recálculo (b) para dar o sinal correto de $[(Q-E)/Q]$, já o mesmo não ocorre com o ajuste obtido usando os coeficientes de segunda ordem e o processo iterativo. Todavia, para respostas de detetores de alta energia a penetrações mais profundas (tal como a resposta de $In(n,n')$ a 60 cm em ferro), efeitos de ordem mais altas do que a segunda ainda estão presentes e o cálculo até segunda ordem não basta, mas para os detetores de baixa energia ($Na(n,\gamma)$ e $Au(n,\gamma)$), que mostram pouco efeito de ordens mais altas, o cálculo até segunda ordem é geralmente satisfatório.

Contudo, deve ser enfatizado que para todos os casos considerados, os valores de partida impostos para $(E-C)/C$ (tabela 2 e 5), foram tais, que fortes ajustes nas seções de choque se tornaram necessários.

IV. RESULTADOS PARA O BLOCO DE SÓDIO

Cálculos similares àqueles indicados para o bloco de ferro, com os mesmos parâmetros, na mesma faixa de energia, foram executados para o bloco de sódio.

Na tabela 5 os desvios iniciais, simulados, entre experiência e cálculo são dados, com as incertezas associadas.

A tabela 6 mostra o resultado do ajuste das seções de choque do sódio em cada iteração. Neste caso também o teste χ^2 (valor esperado = 15) indica que os resultados do processo iterativo são de confiança. As grandes variações na seções de choque conduzem a fortes efeitos não lineares, os quais são evidenciados nos resultados da tabela 7, onde os valores de $(Q-E)/Q$ definidos no parâ

grafo anterior são indicados. Novamente, se observa que o ajuste a primeira ordem falha, principalmente quando respostas de detetores de alta energia a penetrações profundas são considerados. Já o cálculo de segunda ordem é satisfatório, embora ainda não basta para levar em conta todos os efeitos não lineares, como se verifica para o caso de respostas de detetores de alta energia a penetrações profundas.

Contudo, somente no caso da resposta de $\ln(n, n')$ a 200cm é que o cálculo a segunda ordem dá uma discrepância entre ajuste (c) e recálculo (d) maior do que a incerteza experimental assumida ($\pm 10\%$).

V. CONCLUSÃO

Este exercício de ajuste indicou que efeitos não lineares são importantes em procedimentos de consistência entre quantidades integrais e seções de choque de multigrupo, em particular se respostas de detetores de alta energia são considerados. Um processo iterativo baseado em coeficientes de sensibilidade de segunda ordem, deve fornecer resultados significantes na maioria dos casos, dentro de limites aceitáveis das quantidades de cálculo.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1 - J.D. Drischler and C.R. Weisbin, "Compilation of Multigroup Cross Section Covariance Matrices for Several Important Reactor Materials", ORNL-5318 (ENDF 235), 1977.

2 - A. Gandini, " Nuclear Data and Integral Measurements Correlation for Fast Reactors. Part. 1", RT/FI(73)5, 1973.

3 - A. Gandini, Nucl. Sci. Eng., 67, 91(1978) see also Nucl. Sci.Eng., 70,112 (1979)

4 - A. Gandini, Nucl. Sci. Eng. 73,298 (1980)

5 - A. Gandini, Nucl. Sci. Eng. 77,316 (1981)

6 - A. Gandini, " Nuclear Data and Integral Measurements Correlation for Fast Reactors. Part. 4",RT/FI (CNEN -ITALY).

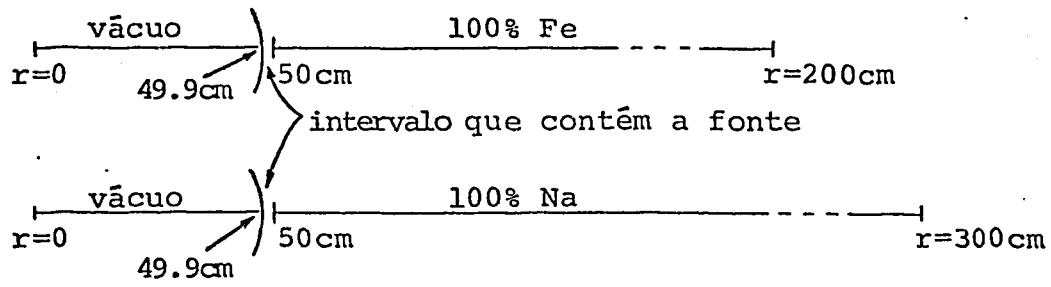


Fig. 1 - Esquemática Geométrica; blocos de Fe e Na.

Nome (*)	Na				Fe			
	Desvio Padrão %	Correl.	Var.	Covar.	Desvio Padrão %	Correl.	Var.	Covar.
in 1	40		1.60E-1		15		2.25E-2	
		-0.97		-5.82E-2		-0.92		-9.66E-3
el 1	15		2.25E-2		7		4.90E-2	
in 2	20		4.00E-2		6		3.60E-2	
		-0.22		-1.76E-3		-0.33		-5.94E-4
el 2	4		1.60E-2		3		9.00E-4	
tot 1	5		2.50E-2		3		9.00E-4	
tot 2	7		4.90E-2		5		2.50E-3	

(*) in 1 - σ_{in} (14.2 Mev - 1.35 Mev) el 2 - σ_{el} (1.35 Mev - 408 Kev)

el 1 - σ_{el} (14.2 Mev - 1.35 Mev) tot 1 - σ_{tot} (408 Kev - 67 Kev)

in 2 - σ_{in} (energia < 1.35 Mev) tot 2 - σ_{tot} (67 Kev - 167 eV)

Tabela 1 - Matrizes de Variância-Covariância.

Pos. (cm)	S/(S(20cm))	In	Rh	Na/(Na(50cm))	Au/(Au(50cm))
30	30 ± 10	47 ± 10			
40	53 ± 10	51 ± 10			
50	80 ± 10	53 ± 10			
60		55 ± 10			
80			57 ± 20		
100			62 ± 20	36 ± 9	35 ± 7
120			68 ± 20	43 ± 9	43 ± 7
150				54 ± 9	52 ± 7

Tabela 2 - $(E-Q^{cal})/Q^{cal}$ em % ; Discrepância Inicial.

Iter.	tot 1	tot 2	in 1	in 2	el 1	el 2	χ^2
0	-6.3 ± 2.2	-11.9 ± 1.8	-31.1 ± 3.6	-6.4 ± 5.5	12.2 ± 3.8	-5.7 ± 2.4	25
1	-5.5 ± 2.1	-9.7 ± 1.6	-21.3 ± 2.7	-6.0 ± 5.4	8.3 ± 3.6	-4.8 ± 2.3	18
2	-5.6 ± 2.1	-10.0 ± 1.6	-23.6 ± 2.9	-6.1 ± 5.4	9.3 ± 3.7	-4.9 ± 2.4	19
3	-5.6 ± 2.1	-9.9 ± 1.6	-23.0 ± 2.9	-6.1 ± 5.4	9.0 ± 3.7	-4.9 ± 2.4	19
4	-5.6 ± 2.1	-9.9 ± 1.6	-23.2 ± 2.9	-6.1 ± 5.4	9.1 ± 3.7	-4.9 ± 2.4	19

Tabela 3 - $(\bar{\sigma} - \sigma_0)/\sigma_0$ em % ; Correção a seção de choque.

Pos. (cm)	S/(S(20cm))	In	Rh	Na/(Na(50cm))	Au/(Au(50cm))
30	-0.96 ^(a) +7.7 ^(b) -4.4 ^(c) -2.2 ^(d)	-4.1 +19.2 -4.7 - 2.0			
40	+3.1 +34.5 +1.1 + 8.7	-6.0 +21.7 -5.2 - 1.4			
50	+1.6 +72.6 +5.04 +15.2	-5.5 +22.1 -4.1 + 0.8			
60		-7.0 +21.4 -4.5 - 0.5			
80			-18.0 - 7.5 -17.3 -16.5		
100			-14.0 + 1.2 -11.4 -10.1	-4.6 + 0.5 -5.8 -5.7	-3.6 + 3.7 -4.5 - 2.3
120			-11.1 +10.3 - 5.9 - 3.6	-3.1 +5.3 -3.5 -3.2	-1.6 + 7.8 -1.3 - 3.0
150				-2.1 +14.0 -0.1 + 1.2	-2.5 +16.0 +1.7 + 3.0

Tabela 4 - $(\bar{Q} - E)/Q^{cal}$ em % ; Discrepância residual.

iter.	tot 1	tot 2	in 1	in 2	el 1	el 2	χ^2
0	-5.8 \pm 4.7	-15.9 \pm 4.3	-40.4 \pm 3.4	-19.0 \pm 19.0	11.1 \pm 4.4	-1.6 \pm 4.0	19
1	-5.5 \pm 4.7	-15.3 \pm 3.9	-23.5 \pm 2.6	-22.1 \pm 18.5	5.0 \pm 4.0	-1.6 \pm 4.0	16
2	-5.4 \pm 4.7	-15.2 \pm 3.9	-28.4 \pm 2.9	-21.2 \pm 18.6	6.9 \pm 4.1	-1.6 \pm 4.0	15
3	-5.4 \pm 4.7	-15.3 \pm 3.9	-26.8 \pm 2.8	-21.5 \pm 18.6	6.3 \pm 4.1	-1.6 \pm 4.0	15
4	-5.4 \pm 4.7	-15.3 \pm 3.9	-27.3 \pm 2.8	-21.4 \pm 18.6	6.5 \pm 4.1	-1.6 \pm 4.0	15

Tabela 6 - $(\bar{\sigma} - \sigma_0)/\sigma_0$ em % ; Correção a seção de choque

Pos.	S/(S(20cm))	In	Rh	Na/(Na(50cm))	Au/(Au(50cm))
100	+4.2 ^(a) +17.2 ^(b)	+3.1 +35.3	-11.7 +8.8	-7.3 -8.3	-5.4 -5.0
	-3.8 ^(c) -3.3 ^(d)	-3.6 - 1.1	-16.0 -14.5	-7.6 -7.9	-5.6 -5.6
150	+11.1 +70.6	+1.5 +88.7	-14.2 +42.4	-6.5 -7.0	-4.6 -2.6
	+ 3.7 + 9.1	-5.8 + 8.7	-15.5 - 9.7	-6.4 -6.6	-4.2 -4.2
200	+8.1 +167.6	-12.1 +180.0	-24.2 +102.0	-6.1 -5.4	-3.9 +0.5
	+10.1 + 29.0	-3.0 +22.3	-17.5 -1.2	-5.3 -5.6	-2.4 -2.1

Tabela 7 - $(\bar{Q}-E)/Q^{cal}$ em % ; Discrepância residual.

Pos. (cm)	S/(S(20cm))	In	Rh	Na/(Na(50cm))	Au/(Au(50cm))
100	38 \pm 10	69 \pm 10	61 \pm 20	15 \pm 9	13 \pm 7
150	74 \pm 10	96 \pm 10	92 \pm 20	22 \pm 9	21 \pm 7
200	121 \pm 10	146 \pm 10	132 \pm 20	28 \pm 9	28 \pm 7

Tabela 5 - $(E-Q^{cal})/Q^{cal}$ em % ; Discrepância inicial.