

AJUSTE DE SEÇÕES DE CHOQUE MULTIGRUPO UTILIZANDO
DADOS INTEGRAIS DE REATORES RÁPIDOS

*Carlos Alberto Curi Renke**

1. INTRODUÇÃO

A necessidade de utilização de um formulário de cálculo suficientemente preciso para a estimativa dos parâmetros de projeto dos Reatores Rápidos, dentro dos níveis de precisão requeridos, tem induzido os laboratórios de cálculo à utilização de diversas técnicas de ajuste de seções de choque⁽¹⁾ e à eliminação de inconsistências ainda existentes nos dados nucleares. Estas seções de choque são ajustadas de modo a tornar mínima a diferença entre os valores dos parâmetros integrais medidos e calculados.

Neste trabalho é apresentada uma metodologia para o ajuste de seções de choque multigrupo, estruturada com a finalidade de compatibilizar o limitado número de valores medidos de parâmetros integrais conhecidos e disponíveis, e o grande número de seções de choque a serem ajustadas.

O método permite uma grande economia computacional na determinação dos coeficientes de sensibilidade e no processo de ajuste, devido à redução do número de dados a serem manipulados.

O jogo de seções de choque utilizado neste trabalho é aquele proveniente do sistema de cálculo CARNAVAL II⁽²⁾, entendendo-se como formulário o conjunto de método de cálculo e dados de base.

O ajuste é realizado, utilizando-se o código INCOAJ⁽³⁾, desenvolvido em função de uma formulação estatística, estruturada a partir de considerações "bayesianas", considerando-se os processos de medida de seções de choque e parâmetros integrais definidos em bases estatísticas.

(*) Instituto de Engenharia Nuclear- CNEN

Nesta formulação foi suposto que as distribuições de probabilidade são normais, e que a relação entre os parâmetros integrais e as seções de choque pode ser considerada linear.

O caso de ajustamento, para testar a metodologia, consistiu do ajuste das seções de choque de captura do U^{235} e fissão Pu^{239} , utilizando-se valores medidos de k_{eff} , razões de taxas de reações centrais e efeitos em reatividade centrais do U^{235} de algumas montagens críticas rápidas.

2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Os parâmetros integrais são relacionados às seções de choque através da seguinte expansão até a 1ª ordem em série de Taylor:

$$Q_j = Q_j(\Sigma_1^0, \dots, \Sigma_I^0) + \sum_{i=1}^I \left(\frac{\partial Q_j}{\partial \Sigma_i} \right)_0 (\Sigma_i - \Sigma_i^0) \quad (1)$$

(j=1, 2, ..., J)

onde:

Q_j - são os valores verdadeiros dos parâmetros integrais.

$Q_j(\Sigma_1^0, \dots, \Sigma_I^0) = Q_j^0$ - são os valores dos parâmetros integrais calculados com o conjunto de referência de valores de seções de choque $\{\Sigma_i^0\}_{i=1, \dots, I}$

Σ_i - são os valores verdadeiros das seções de choque

Vamos definir que:

$$S'_{ji} = \left(\frac{\partial Q_j}{\partial \Sigma_i} \right)_0 \quad (2)$$

sendo S'_{ji} os coeficientes de sensibilidade.

Fazendo uso da expressão (2) na equação (1), podemos escrever em notação matricial que:

$$Q = Q^0 + S' (\Sigma - \Sigma^0) \quad (3)$$

As equações de ajuste foram obtidas a partir de uma formulação estatística estruturada a partir de considerações "bayesianas", conforme proposto por Dragt⁽⁴⁾.

Considerando-se o teorema de Bayes⁽⁵⁾, podemos escrever:

$$p(\Sigma_i | Q_j^{\text{exp}}) \propto p(\Sigma_i) \cdot p(Q_j^{\text{exp}} | \Sigma_i) \quad (4)$$

onde:

$p(\Sigma_i | Q_j^{\text{exp}})$ é a distribuição de probabilidade posterior para $\{\Sigma_i\}_{i=1, \dots, I}$

$p(\Sigma_i)$ é a distribuição de probabilidade prévia para $\{\Sigma_i\}_{i=1, \dots, I}$

$p(Q_j^{\text{exp}} | \Sigma_i)$ é a distribuição de probabilidade condicional para os valores experimentais dos parâmetros integrais $\{Q_j^{\text{exp}}\}_{j=1, \dots, J}$
 α é uma constante de proporcionalidade, sendo determinada a partir da condição de normalização.

O uso da equação (4) é considerada controversa, a menos que $p(\Sigma_i)$ seja uma distribuição de probabilidade estimada, baseada em alguns dados ou considerada como uma hipótese. De modo a contornar este problema vamos considerar que $p(\Sigma_i)$ seja baseada em alguns dados, que são os valores médios ou valores esperados $\{\Sigma_i^0\}_{i=1, 2, \dots, I}$. Assim, a equação (4) passa a ser escrita como:

$$p(\Sigma_i | Q_j^{\text{exp}}, \Sigma_i^0) \propto p(\Sigma_i | \Sigma_i^0) \cdot p(Q_j^{\text{exp}} | \Sigma_i, \Sigma_i^0) \quad (5)$$

sendo:

$$p(\Sigma_i | \Sigma_i^0) = C_1 \exp \left\{ -1/2 (\Sigma - \Sigma^0)^t B_{\Sigma}^{-1} (\Sigma - \Sigma^0) \right\} \quad (6)$$

$$p(Q_j^{\text{exp}} | \Sigma_i, \Sigma_i^0) = C_2 \exp \left\{ -1/2 (Q^{\text{exp}} - Q)^t B_Q^{-1} (Q^{\text{exp}} - Q) \right\} \quad (7)$$

$$p(\Sigma_i | Q_j^{\text{exp}}, \Sigma_i^0) = C_3 \exp \left\{ -1/2 (\Sigma - \Sigma^0)^t B_{\Sigma}^{-1} (\Sigma - \Sigma^0) \right\} \quad (8)$$

onde:

B_{Σ} é a matriz de variância-covariância da seções de choque.

B_Q é a matriz de variância - covariância dos parâmetros integrais Σ^0 são os valores estimados das seções de choque.

B_Σ^1 é a matriz de variância - covariância das seções de choque ajustadas.

Substituindo-se as equações (6), (7) e (8) na expressão (5), utilizando-se a equação (3) e considerando-se a igualdade dos expoentes, podemos obter, após alguma manipulação algébrica, as equações básicas para o ajuste.

Os valores ajustados das seções de choque serão então dados por:

$$\Sigma^0 = \Sigma^0 + B_\Sigma S'^t (S' B_\Sigma S'^t + B_Q)^{-1} (Q^{\text{exp}} - Q^{\text{cal}}) \quad (9)$$

e a nova matriz de variância - covariância das seções de choque poderá ser obtida a partir de :

$$B_\Sigma^1 = B_\Sigma + B_\Sigma S'^t (S' B_\Sigma S'^t + B_Q)^{-1} S' B_\Sigma \quad (10)$$

3. MÉTODOS DE CÁLCULO E PROCEDIMENTOS

Utilizando-se os dados a 25 grupos, provenientes do código HETAIRE^(2,6), os coeficientes de sensibilidade são calculados numa estrutura adequada, a 14 grupos de energia, utilizando-se a teoria da perturbação variacional, integrante do código de sensibilidade VARI-1D⁽⁷⁾. Posteriormente, esses coeficientes são colapsados para uma estrutura com apenas 6 macrogrupos de energia, conforme tabela 1.

Para o ajuste é utilizado o código INCOAJ⁽³⁾, desenvolvido em função de uma formulação estatística, cujos fundamentos teóricos foram apresentados na seção precedente. Este programa permite ainda efetuar-se análises de incertezas dos parâmetros integrais em função das incertezas dos dados de base e testes de consistência do conjunto de dados, no senso do qui-quadrado (χ^2).

As seções de choque a serem ajustadas e a sua matriz variância - covariância são também colapsadas para os 6 macrogrupos de energia da tabela 1, utilizando-se uma função peso adequada.

Neste trabalho não foram consideradas as correlações entre as seções de choque, e desta forma a sua matriz de variância-covariância é uma matriz diagonal. As correlações entre os parâmetros integrais também não foram incluídas, sendo supostos, portanto, in correlacionados.

Os experimentos integrais utilizados neste trabalho são valores de k_{eff} , razões de taxas de reações centrais e efeitos em reatividade centrais do U^{235} medidos nas montagens críticas ZPR-3-48⁽⁸⁾, ZPR-3-49⁽⁹⁾ e ZPR-3-50⁽¹⁰⁾, que constituem-se de especial interesse por terem um espectro de fluxo direto e adjunto similar daqueles esperados em Reatores Rápidos de potência, com razoável carregamento de plutônio, mantendo porém simplicidade em sua composição e arranjo.

Os valores experimentais considerados no processo de ajuste são mostrados na tabela 2. Os valores calculados foram determinados com os códigos MUDE⁽¹¹⁾ e VARI-1D⁽⁷⁾ em cálculos a 1 dimensão.

4. APRESENTAÇÃO E ANÁLISE DOS RESULTADOS

A fim de testarmos a metodologia, executamos um caso de ajuste com as seções de choque de captura do U^{238} e fissão do Pu^{239} .

Os efeitos do ajustamento sobre os parâmetros integrais são mostrados na tabela 3.

Observamos que a tendência geral do ajuste é de aproximar os valores ajustados aos valores experimentais, o que está em concordância com a expectativa do método. Os desvios padrões ajustados apresentam também um bom comportamento, mostrando-se menores que

os desvios padrões originais.

Os desvios padrões calculados representam as incertezas no cálculo dos parâmetros integrais devido às incertezas ora existentes nas seções de choque de captura do U^{238} e fissão do Pu^{239} , considerando-se a contribuição de toda a faixa de energia.

Os valores iniciais e finais de χ^2 dos parâmetros integrais são mostrados na tabela 4.

O valor obtido para o χ^2 inicial por grau de liberdade foi 2.64. Este valor reflete o grau de consistência inicial dos dados.

Observamos que os valores finais de χ^2 individual são menores que a unidade para a maioria dos parâmetros, com exceção do 29,39 e 79, indicando a permanência de alguma inconsistência para estes casos. Contudo, observamos uma tendência ainda favorável à consistência, tendo em vista que os valores finais de χ^2 diminuíram em relação aos valores finais para quase todos os dados.

Os resultados do ajuste para as seções de choque são mostrados na tabela 5.

Conforme podemos notar, os valores dos desvios padrões ajustados são inferiores aos valores originais, o que atende à expectativa. Observamos também que o ajustamento dos dados é inferior a 1 desvio padrão. Portanto, as seções de choque ajustadas e originais, neste caso, são totalmente consistentes.

Os valores obtidos para as seções de choque do grupo VI, que incluem a faixa térmica e, portanto, suficientemente conhecidas, não foram considerados, embora tais dados tenham sido incluídos no processo estatístico.

Os efeitos do ajuste sobre as seções de choque são mostrados nas figuras 1 e 2.

O valor obtido para o χ^2 final por grau de liberdade foi 1.87

que, apesar de se apresentar menor que o valor inicial, ainda é um pouco elevado, revelando a existência de uma alguma inconsistência no conjunto de dados.

5. CONCLUSÕES

O objetivo deste trabalho foi o de analisar o comportamento de um caso de ajuste com a metodologia de cálculo apresentada e não propriamente de utilizar os resultados obtidos, porque um ajuste de seções de choque deve ser, na medida do possível, um processo global, ou seja, deve envolver simultaneamente as principais seções de choque da biblioteca, o que não foi feito neste caso.

Da análise dos resultados obtidos podemos concluir que:

- O comportamento dos valores do conjunto de dados ajustados e seus desvios padrões foi satisfatório e concordam com a expectativa da estratégia de ajustamento.
- A redução do valor do χ^2 demonstrou a consistência do processo como um todo. O valor obtido para o χ^2 final pode ser considerado razoável, tendo em vista o número reduzido de dados envolvidos neste processo estatístico. Este valor deve tender para a unidade a medida que se aumenta o número de dados. Realmente verificamos esta tendência ao duplicarmos o número de dados de nossa estatística, obtendo-se neste caso, um valor final de χ^2 igual a 1.32. Este assunto merece porém uma investigação mais criteriosa e está previsto em nossos futuros trabalhos.

Finalmente, destacamos a necessidade de um estudo metódico sobre a importância dos diferentes fatores que influenciam os resultados de um ajustamento. Fica evidenciado também a necessidade de obtenção de um conjunto de valores experimentais de boa qualidade e de matrizes de dispersão que reflitam a real dispersão dos dados.

TABELA 1 - LIMITES DE ENERGIA DA ESTRUTURA EM SEIS MACROGRUPOS

MACROGRUPOS	LIMITES DE ENERGIA	GRUPOS DA BIBL. CARNAVAL II
I	1.35 - 14.5 MeV	1,2,3
II	0.498 - 1.35 MeV	4,5
III	40.9 - 498 KeV	6,7,8,9,10
IV	9.12 - 40.9 KeV	11,12,13
V	0.454 - 9.12 KeV	14,15,16,17,18,19
VI	term. - 454 eV	20,21,22,23,24,25

TABELA 2 - VALORES MEDIDOS DOS PARÂMETROS INTEGRAIS

PARÂMETRO INTEGRAL	REATOR	VALOR EXPERIMENTAL	INCERTEZA
k_{eff}	ZPR-3-49	1.000	± 0.001
σ_{c8}/σ_{f5}	ZPR-3-48	0.1310	± 0.0017
σ_{f8}/σ_{f5}	ZPR-3-48	0.0307	± 0.0003
σ_{f9}/σ_{f5}	ZPR-3-48	0.976	± 0.010
	ZPR-3-50	0.903	± 0.009
	ZPR-3-49	0.986	± 0.010
ρ_5	ZPR-3-48	3.582	± 0.054
	ZPR-3-50	4.989	± 0.086

TABELA 3- EFEITOS DO AJUSTAMENTO SOBRE OS PARÂMETROS INTEGRAIS

PAR. INTEGRAL	$\frac{C - E}{C}$ (%)	$\frac{A - E}{C}$ (%)	DESVIOS PADRÕES			RAZÃO DOS DESVIOS PADRÕES	
			EXP. (%)	CAL. (%)	AJUST. (%)	AJUST./EXP.	AJUST./CALC.
k_{eff} (ZPR-3-49)	-0.095	0.020	0.10	3.87	0.10	0.99	0.03
σ_{C8}/σ_{f5} (ZPR-3-48)	-1.708	-1.669	1.30	11.65	1.03	0.79	0.09
σ_{f8}/σ_{f5} (ZPR-3-48)	2.229	2.137	0.98	4.11	0.53	0.54	0.13
σ_{f9}/σ_{f5} (ZPR-3-48)	-0.816	-0.660	1.03	6.10	0.50	0.49	0.08
σ_{f9}/σ_{f5} (ZPR-3-50)	1.106	0.723	1.00	7.49	0.69	0.69	0.09
σ_{f9}/σ_{f5} (ZPR-3-49)	0.182	0.322	1.01	5.81	0.60	0.59	0.10
ρ_5 (ZPR-3-48)	3.761	3.031	1.51	15.19	1.05	0.70	0.07
ρ_5 (ZPR-3-50)	-3.786	-1.238	1.72	18.56	1.52	0.88	0.08

TABELA 4 - VALORES INICIAIS E FINAIS DO QUI-QUADRADO
DOS PARÂMETROS INTEGRAIS

PAR. INTEGRAL	χ^2 INICIAL	χ^2 FINAL
k_{eff} (ZPR-3-49)	0.90	0.03
σ_{c9}/σ_{f5} (ZPR-3-48)	1.68	1.60
σ_{f8}/σ_{f5} (ZPR-3-48)	5.44	5.00
σ_{f9}/σ_{f5} (ZPR-3-48)	0.62	0.41
σ_{f9}/σ_{f5} (ZPR-3-50)	1.26	0.54
σ_{f9}/σ_{f5} (ZPR-3-49)	0.03	0.10
ρ_5 (ZPR-3-48)	6.72	4.36
ρ_5 (ZPR-3-50)	4.48	0.48

TABELA 5 - RESULTADOS DO AJUSTE PARA AS SEÇÕES DE CHOQUE

SEÇÕES DE CHOQUE	VARIÇÃO (%)	DESVIO PADRÃO (%)		RAZÃO DOS D.P. AJUSTADO/ORIGINAL	
		ORIGINAL	AJUSTADO		
$\sigma_C - U^{239}$	I	2.27	11.58	11.30	0.98
	II	3.91	12.79	12.20	0.95
	III	-5.80	25.00	15.12	0.60
	IV	5.85	25.00	18.07	0.72
	V	-0.58	20.00	13.78	0.69
	VI (*)	0.00	19.79	19.79	1.00
$\sigma_F - Pu^{239}$	I	2.59	8.48	7.03	0.83
	II	-4.38	6.89	6.69	0.97
	III	-2.01	8.57	5.13	0.60
	IV	7.88	14.00	11.50	0.82
	V	3.22	23.00	7.47	0.32
	VI (*)	0.00	22.88	22.88	1.00

(*) veja seção 4

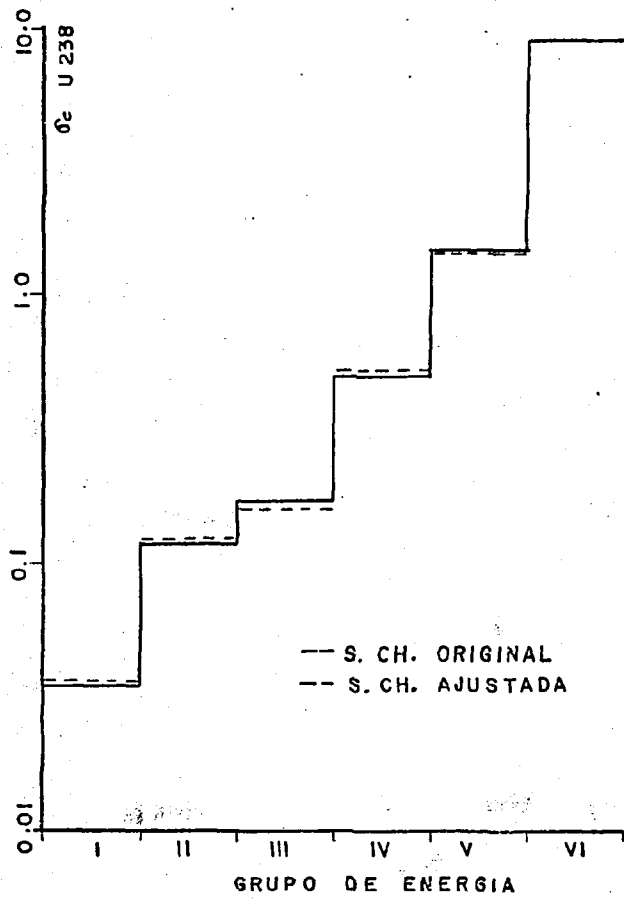


FIG. 1- EFEITOS DO AJUSTE SOBRE A $\sigma_c U^{238}$

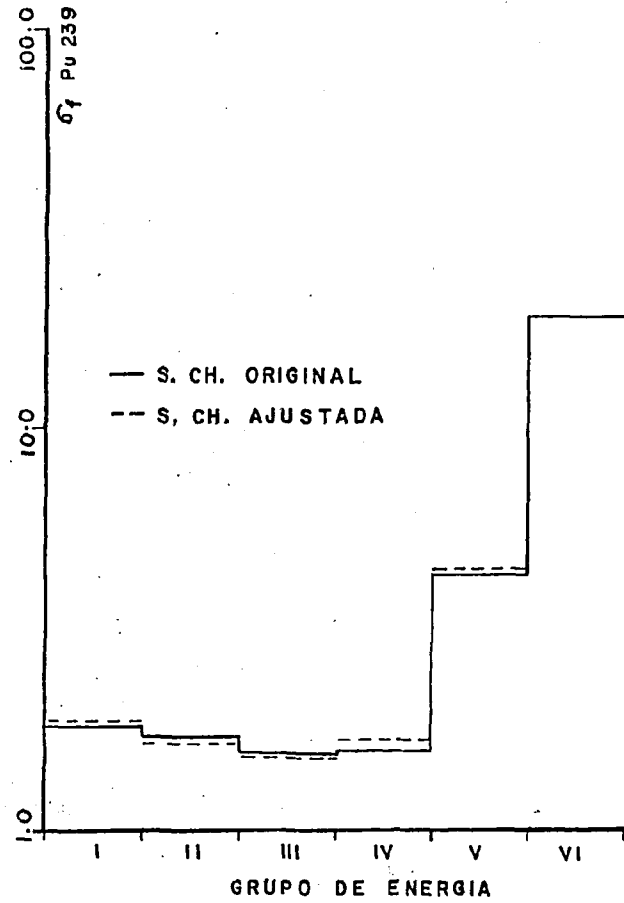


FIG. 2- EFEITOS DO AJUSTE SOBRE A $\sigma_f Pu^{239}$

REFERÊNCIAS

- 1- GANDINI, A. - Nuclear Data and Integral Measurements Correlation for Fast Reactors Part 2: Review of Methods. RT/FI(73) 22, Comitato Nazionale Energia Nucleare (1973).
- 2- CHAUDAT, M.- Formulário CARNAVAL II (Código HETAIRE). Nota Técnica DIPRO/IEN/GN 3/76, NUCLEBRÁS/IEN.
- 3- RENKE, C.A. C. - INCOAJ: Um Código para Análise de Incertezas, Testes de Consistência e Ajuste de Seções de Choque Multigrupo. IEN/DERE/C.T.DINEU a ser publicada.
- 4- DRAGT, J.B. - Statistical Considerations on Techniques for Adjustment of Differential Cross Sections with Measured Integral Parameters - RCN 122 (1970).
- 5- LARSON, H.J. - Introduction to Probability Theory and Statistical Inference. John Wiley & Sons, 1969, 387p..
- 6- KHAIRALLAH, A. et RECOLIN, J. - Specifications du Code HETAIRE-CARNAVAL II. Note Interne DRE/SPNR/75/007/AK/JR/MB, Cadarache, 1976.
- 7- STACEY, Jr., W. M. and REGIS, J.R. - VARI-1D: A One-Dimensional Variational Sensitivity Code, ANL (1973).
- 8- BROOMFIELD, A.M. et al.- ZPR-3 Assemblies 48, 48A and 48B: The Study of a Dilute Plutonium - Fueled Assembly and Its Variants. ANL-7759, December 1970, p.19.
- 9- ZPR-3-49. Critical Assembly. Reactor Development Program Progress Report. ANL-7357, July 1967, p.62.
- 10- ZPR-3-50 Critical Assembly. Reactor Development Program Progress Report. ANL-7371, August 1967, p.60.
- 11- BORE, C. et al.- Resolution de l'Equation Multigruppe de la Diffusion dans Une Geometrie a Une Dimension et Calculs Annexes. Code MUDE, Rapport C.E.A., R-2923, 1965.