

**UMA NOVA TÉCNICA PARA A GERAÇÃO DE MATRIZES DE TRANSFERÊNCIA PARA
ESPALHAMENTO ELÁSTICO E INELÁSTICO DISCRETO**

por

R. D. M. Garcia



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

UMA NOVA TÉCNICA PARA A GERAÇÃO DE MATRIZES DE TRANSFERÊNCIA PARA
ESPALHAMENTO ELÁSTICO E INELÁSTICO DISCRETO

R. D. M. Garcia



RESUMO

Neste trabalho, uma nova técnica para a geração dos componentes isotrópico e linearmente anisotrópico das matrizes de transferência para espalhamento elástico e inelástico discreto é proposta. A técnica permite que certas integrais angulares sejam expressas em termos de funções que podem ser calculadas por relações de recorrência ou expansões em séries alternativamente à utilização de quadraturas numéricas.

ABSTRACT

In this work, a new technique for generating the isotropic and linearly anisotropic components of elastic and discrete inelastic transfer matrices is proposed. The technique allows certain angular integrals to be expressed in terms of functions that can be computed by recursion relations or series expansions alternatively to the use of numerical quadratures.

1. INTRODUÇÃO

A geração eficiente de matrizes de transferência para utilização em cálculos de reatores tem sido extensivamente estudada nos últimos vinte anos. Uma revisão das técnicas utilizadas para a geração de matrizes de transferência em códigos computacionais foi completada recentemente ⁽¹⁾. Em geral, sendo os mecanismos de espalhamento elástico e inelástico discreto os mais importantes na geração de matrizes de transferência, esforços tem sido concentrados na busca de novas técnicas que permitam tratar esses mecanismos com precisão, sem comprometer irremediavelmente a eficiência computacional. Assim, por exemplo, o tratamento do espalhamento inelástico discreto evoluiu do modelo simplificado ⁽²⁾ adotado no código MC², em que o espalhamento é considerado isotrópico no sistema de laboratório, para o modelo do ângulo fixo ⁽³⁾ utilizado no código MC²-2. Na maioria dos códigos computacionais existentes são empregadas técnicas distintas para o tratamento do espalhamento elástico e inelástico discreto. Isto decorre fundamentalmente de que certas simplificações possíveis no tratamento do espalhamento elástico não se verificam no caso do espalhamento inelástico discreto. Pode-se citar, entre outras, as simplificações decorrentes da utilização de uma estrutura de grupos com largura constante em letargia exploradas pelos códigos MC² e MC²-2 ou dificuldades inerentes ao espalhamento inelástico discreto, como a região de dupla energia ⁽⁴⁾. Uma exceção a esta regra é o tratamento unificado ⁽⁵⁾ provido pelo sistema NJOY em que uma representação no sistema de centros de massa evita as dificuldades originadas pela região de dupla energia no tratamento do espalhamento inelástico discreto. A flexibilidade permitida pelo NJOY na escolha da estrutura de grupos elimina qualquer vantagem de se utilizar um tratamento específico para espalhamento elástico, como no MC².

Neste trabalho, uma nova técnica para a geração dos componentes isotrópico e linearmente anisotrópico das matrizes de transferência para espalhamento elástico e inelástico discreto é proposta. A formulação utilizada é similar ao tratamento unificado provido pelo NJOY, com a distinção que as integrais angulares são expressas em termos de funções que podem ser calculadas por relações de recorrência ou expansões em séries, ao invés de serem calculadas por integração numérica como no NJOY. Espera-se que o tratamento aqui desenvolvido, após implementado, seja útil na geração de matrizes de transferência apropriadas para reatores rápidos.

2. ANÁLISE

A seção de choque de transferência de nêutrons do grupo g' , com energia

$E' \in (E_{g'}, E_{g'-1})$, para o grupo g , com energia $E \in (E_g, E_{g-1})$, através de espalhamento elástico ou inelástico discreto, é dada por

$$\sigma_x(g' \rightarrow g, \mu) = [2\pi W_{g'}]^{-1} \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} dE' W(E') \sigma_x(E') \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE f_x(E' \rightarrow E, \mu) \quad (1)$$

onde $\sigma_x(E')$ é a seção de choque para o mecanismo x à energia E' , $f_x(E' \rightarrow E, \mu)$ descreve a probabilidade de um nêutron com energia E' originar, através do mecanismo x , um nêutron com energia E e ângulo entre as direções de movimento inicial e final no sistema de laboratório dado por $\cos^{-1} \mu$ e $W(E')$ é a função de ponderação, com W_g dado pela integral de $W(E')$ sobre o grupo g' . Se $x=n$, o mecanismo considerado é o de espalhamento elástico, enquanto que $x=n'i$ denota espalhamento inelástico discreto envolvendo o nível de excitação i do núcleo espalhador. A distribuição $f_x(E' \rightarrow E, \mu)$ é normalizada tal que integrada sobre todas as energias finais possíveis e sobre $\mu \in [-1, 1]$ fornece a unidade. Considerando a conhecida relação⁽⁴⁾ entre μ e ω , o cosseno do ângulo de espalhamento no sistema de centro de massa,

$$\mu = \frac{1 + \gamma(E')\omega}{[1 + 2\gamma(E')\omega + \gamma^2(E')]^{1/2}} \quad (2)$$

com

$$\gamma(E') = A \left(1 + \frac{A+1}{A} \frac{Q_i}{E'} \right)^{1/2}, \quad (3)$$

onde A é a razão entre a massa do núcleo espalhador e a do nêutron e $Q_i \leq 0$, $i = 0, 1, \dots, I$, é a energia de excitação do nível i do núcleo espalhador ($i = 0$ é um nível fictício com $Q_0 = 0$, representando espalhamento elástico), pode-se escrever formalmente

$$f_x(E' \rightarrow E, \mu) = f_x(E' \rightarrow E) \delta[\mu - S(\omega, E')] \quad (4)$$

onde

$$S(\omega, E') = \frac{1 + \gamma(E')\omega}{[1 + 2\gamma(E')\omega + \gamma^2(E')]^{1/2}} \quad (5)$$

Utilizando a transformação

$$f_x(E' \rightarrow E) = f_x(E', \omega) \left| \frac{d\omega}{dE} \right| \quad (6)$$

e representando $f_x(E', \omega)$ por uma expansão em polinômios de Legendre truncada após $(L+1)$ termos, a eq.(4) pode ser escrita como

$$f_x(E' \rightarrow E, \mu) = \frac{1}{2} \delta[\mu - S(\omega, E')] \frac{d\omega}{dE} \sum_{l=0}^L (2l+1) f_x(E', l) P_l(\omega), \quad (7)$$

onde $f_x(E', l)$ são coeficientes da expansão de $f_x(E', \omega)$. Note que o valor ab soluto empregado na eq.(6) foi removido da eq.(7) pois da relação ⁽⁴⁾

$$E = \frac{E'}{(A+1)^2} [1 + 2\gamma(E')\omega + \gamma^2(E')] \quad (8)$$

é fácil verificar que, para E' fixo, E cresce monotonicamente com ω . A fig. 1 mostra a variação da energia final E com a energia inicial E' para vários valores de $\omega \in [-1, 1]$ no caso de espalhamento inelástico envolvendo o primeiro nível do Li^7 ($Q_1 = -0,478$ MeV). A energia limiar para espalhamento inelástico $E_l = -(A+1) Q_1/A$, é, neste exemplo, igual a aproximadamente 0,546 MeV. A energia limiar de retroespalhamento, $E_x = -A Q_1/(A-1)$, corresponde, no gráfico, ao ponto B. No caso de espalhamento elástico, os pontos A e B coincidem e se movem para a origem do plano (E', E) e a família de curvas representadas no gráfico degenera numa família de segmentos de retas.

Utilizando a expressão para $f_x(E' \rightarrow E, \mu)$ fornecida pela eq.(7) na eq.(1) e considerando o sub-intervalo de integração em E' para o qual o integrando não se anula, obtém-se

$$\sigma_x(g' \rightarrow g, \mu) = [4\pi W_g]^{-1} \int_{E_g^*}^{E_{g'-1}^*} dE' W(E') \sigma_x(E') \sum_{l=0}^L (2l+1) f_x(E', l) \times \int_{\omega(E_g, E')}^{\omega(E_{g-1}, E')} d\omega P_l(\omega) \delta[\mu - S(\omega, E')], \quad (9)$$

onde $E_g^* = \max(E_{g-1}, E_l)$, $E_{g'-1}^* = \max(E_{g'-1}, E_l)$ e os limites da integra

ção em μ são determinados com auxílio da eq.(8). Na prática, ao invés de se utilizar $\sigma_x(g' \rightarrow g, \mu)$ diretamente, costuma-se expandir $\sigma_x(g' \rightarrow g, \mu)$ em polinômios de Legendre e utilizar os componentes da expansão,

$$\sigma_x(g' \rightarrow g, k) = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu P_k(\mu) \sigma_x(g' \rightarrow g, \mu), \quad k = 0, 1, \dots, K. \quad (10)$$

A substituição da eq.(9) na eq.(10) resulta em

$$\sigma_x(g' \rightarrow g, k) = W_{g'}^{-1} \int_{E_g^*}^{E_{g'-1}^*} dE' \cdot W(E') \sigma_x(E') F_k(E', g) \quad (11)$$

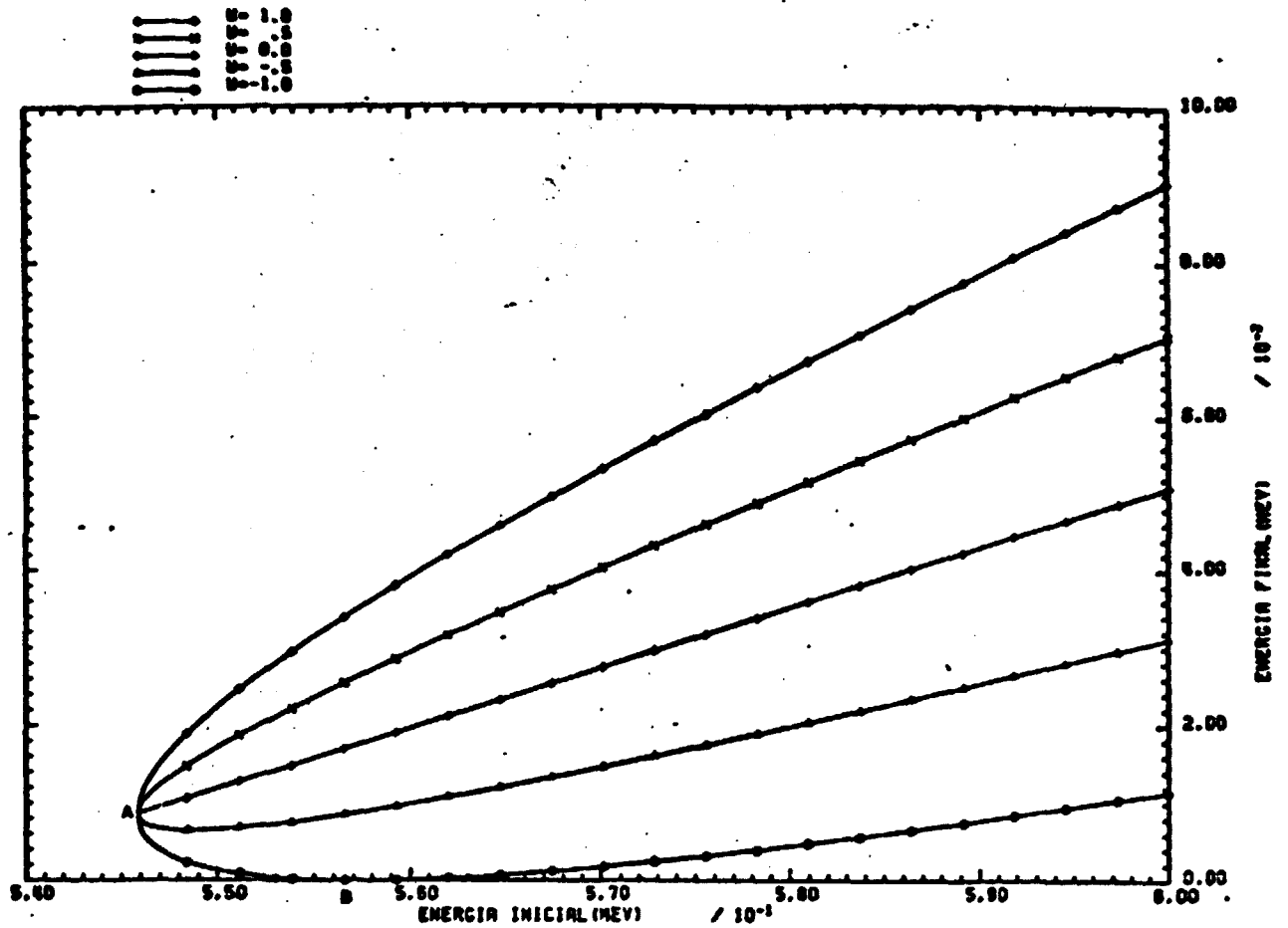
onde

$$F_k(E', g) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L (2l+1) f_x(E', l) X_{k,l}(E', g) \quad (12)$$

Na equação (12), as funções $X_{k,l}(E', g)$ são definidas como

$$X_{k,l}(E', g) = \int_{\omega_g(E')}^{\omega_{g-1}(E')} d\omega P_k[S(\omega, E')] P_l(\omega) \quad (13)$$

onde $\omega_g(E') = \max \{ -1, \min [\omega(E_g, E'), 1] \}$ e $\omega_{g-1}(E') = \min \{ 1, \max [\omega(E_{g-1}, E'), -1] \}$. O caso especial da eq.(13) em que $\omega_g(E') = -1$ e $\omega_{g-1}(E') = 1$ tem sido extensivamente estudado^(6,7). Na prática, em cálculos de reatores, são os componentes isotrópico ($k=0$) e linearmente anisotrópico ($k=1$) de $\sigma_x(g' \rightarrow g, \mu)$ são importantes. Por esta razão, este trabalho se restringe ao estudo destes componentes. O problema se resume em calcular as funções $X_{0,l}(E', g)$ e $X_{1,l}(E', g)$ pois $\sigma_x(E')$ e $f_x(E', l)$ são fornecidas ou calculadas a partir de dados básicos armazenados em bibliotecas como a ENDF/B⁽⁸⁾ e a função de ponderação $W(E')$ é escolhida entre formas simples tais como E^n , $n=-1, 0, 1$ ou então pré-calculada e fornecida em forma tabular. Para $k=0$, é possível mostrar, com auxílio das propriedades dos polinômios de Legendre⁽⁹⁾, que as funções



(FIG.-1) : Relação entre a energia final E e a energia inicial E' para espalhamento inelástico discreto envolvendo o primeiro nível de excitação do Li^7 .

$$X_{0,l}(E',g) = \int_{\omega_g(E')}^{\omega_{g-1}(E')} d\omega P_l(\omega) \quad (14)$$

são dadas por

$$X_{0,l}(E',g) = \left(\frac{1}{2l+1} \right) [P_{l+1}(\omega) - P_{l-1}(\omega)] \Big|_{\omega_g(E')}^{\omega_{g-1}(E')} \quad (15)$$

com $P_{-1}(\omega) = 0$. A eq.(15) pode ser utilizada para calcular as funções

$X_{0,l}(E',g)$ requeridas na eq.(12) com $k=0$. Para $k=1$, é conveniente definir

$$Y_l(E',g) = \int_{\omega_g(E')}^{\omega_{g-1}(E')} d\omega [1 + 2\gamma(E')\omega + \gamma^2(E')]^{-1/2} P_l(\omega) \quad (16)$$

de modo que

$$X_{1,l}(E',g) = \int_{\omega_g(E')}^{\omega_{g-1}(E')} d\omega \frac{1 + \gamma(E')\omega}{[1 + 2\gamma(E')\omega + \gamma^2(E')]^{1/2}} P_l(\omega) \quad (17)$$

podem ser expressas por

$$\begin{aligned} X_{1,l}(E',g) &= Y_l(E',g) \\ &+ \frac{\gamma(E')}{2l+1} [(l+1) Y_{l+1}(E',g) + l Y_{l-1}(E',g)] \end{aligned} \quad (18)$$

Utilizando as propriedades dos polinômios de Legendre, é possível mostrar que as funções $Y_l(E',g)$ satisfazem à relação de recorrência, para $l \geq 0$,

$$\begin{aligned} (2l+3) Y_{l+1}(E',g) &= (1 - \delta_{0,l}) (1 - 2l) Y_{l-1}(E',g) - (2l+1) \\ &\times \left[\frac{1}{\gamma(E')} + \gamma(E') \right] Y_l(E',g) + \frac{1}{\gamma(E')} \\ &\times \left\{ [1 + 2\gamma(E')\omega + \gamma^2(E')]^{1/2} [P_{l+1}(\omega) - P_{l-1}(\omega)] \right\} \Bigg|_{\omega_g(E')}^{\omega_{g-1}(E')} \end{aligned} \quad (19)$$

a qual pode ser utilizada juntamente com o valor inicial

$$Y_0(E',g) = \frac{1}{\gamma(E')} [1 + 2\gamma(E')\omega + \gamma^2(E')]^{1/2} \Bigg|_{\omega_g(E')}^{\omega_{g-1}(E')} \quad (20)$$

para calcular as funções $Y_{\ell}(E', g)$ requeridas na eq.(18) para estabelecer as funções $X_{1,\ell}(E', g)$. É aparente que a relação de recorrência expressa pela eq.(19) não é adequada nos limites $\gamma(E') \gg 1$ e $\gamma(E') \ll 1$. Nesses casos, torna-se então necessário um tratamento alternativo. Para $\gamma(E') \gg 1$, pode-se utilizar a representação⁽⁹⁾

$$[1 + 2\gamma(E') \omega + \gamma^2(E')]^{-1/2} = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \left[\frac{1}{\gamma(E')} \right]^{m+1} P_m(\omega) , \quad (21)$$

válida para $\gamma(E') > 1$, na eq.(17), obtendo-se a série

$$X_{1,\ell}(E', g) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m S_{m,\ell}(E', g) \times \left[\left(\frac{m+2}{2m+3} \right) - \left(\frac{m}{2m-1} \right) \gamma^2(E') \right] \left[\frac{1}{\gamma(E')} \right]^{m+1} \quad (22)$$

onde

$$S_{m,\ell}(E', g) = \int_{\omega_g(E')}^{\omega_{g-1}(E')} d\omega P_m(\omega) P_{\ell}(\omega) . \quad (23)$$

Claramente, $S_{m,\ell}(E', g) = S_{\ell,m}(E', g)$. Além disso, pode-se mostrar, com auxílio das propriedades dos polinômios de Legendre, que, para $m \neq \ell$,

$$\begin{aligned} [m(m+1) - \ell(\ell+1)] S_{m,\ell}(E', g) &= \left\{ \frac{m(m+1)}{2m+1} P_{\ell}(\omega) [P_{m+1}(\omega) - P_{m-1}(\omega)] \right. \\ &\quad \left. - \frac{\ell(\ell+1)}{2\ell+1} P_m(\omega) [P_{\ell+1}(\omega) - P_{\ell-1}(\omega)] \right\} \int_{\omega_g(E')}^{\omega_{g-1}(E')} d\omega \end{aligned} \quad (24)$$

e, para $m = \ell$,

$$\begin{aligned}
(2l+3) S_{l+1, l+1}(E', g) &= (2l+1) S_{l, l}(E', g) \\
&+ \left\{ \frac{l+2}{2l+3} [P_{l+2}(\omega) - P_l(\omega)] P_{l+1}(\omega) - \frac{l}{2l+1} \right. \\
&\times [P_{l+1}(\omega) - P_{l-1}(\omega)] P_l(\omega) \left. \right\} \begin{matrix} \omega_{g-1}(E') \\ \omega_g(E') \end{matrix} \quad (25)
\end{aligned}$$

com

$$S_{0,0}(E', g) = \omega_{g-1}(E') - \omega_g(E') \quad (26)$$

Para $\gamma(E') \ll 1$, a representação (9)

$$[1 + 2\gamma(E') \omega + \gamma^2(E')]^{-1/2} = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \gamma^m(E') P_m(\omega) \quad (27)$$

válida para $0 \leq \gamma(E') < 1$, substituída na eq. (17), fornece a série

$$X_{1,l}(E', g) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m S_{m,l}(E', g) \left[\left(\frac{m-1}{2m-1} \right) - \left(\frac{m+1}{2m+3} \right) \gamma^2(E') \right] \gamma^m(E'). \quad (28)$$

As equações (22) e (28) podem, portanto, ser utilizadas para calcular eficientemente as funções $X_{1,l}(E', g)$ nas situações em que a estabilidade da relação de recorrência, eq. (19), é comprometida.

3. CONSIDERAÇÕES FINAIS

As expressões fornecidas na seção anterior permitem que as integrais angulares encontradas na geração dos componentes isotrópico e linearmente anisotrópico

trópico das matrizes de transferência para espalhamento elástico e inelástico discreto sejam avaliadas sem recorrer a integração numérica. Considerando que as representações de $f_x(E', \omega)$ em polinômios de Legendre fornecidas pela biblioteca ENDF/B podem incluir até 21 termos na expansão, dependendo do elemento e do valor da energia inicial, a técnica de integração numérica requer quadraturas de ordem > 10 na execução da integração angular, exigindo a avaliação dos polinômios de Legendre para cada um dos nós da quadratura selecionada, enquanto que a técnica aqui proposta requer a avaliação dos polinômios de Legendre apenas nos limites de integração. Além disso, obviamente, na técnica de integração numérica, os resultados dependem da quadratura selecionada.

Após a integração angular tratada detalhadamente neste trabalho, a geração dos componentes isotrópico e linearmente anisotrópico das matrizes de transferência para espalhamento elástico e inelástico discreto, envolve a integração sobre energia indicada na eq.(11). Existem, em princípio, várias maneiras de executar essa integração, variando desde aproximações lineares como as utilizadas pelos códigos MC² e MC²-2 em estruturas ultra e hiperfinas respectivamente, até quadraturas gaussianas como as empregadas no sistema NJOY. Nossa intenção ao implementar o método, é empregar a regra trapezoidal na malha obtida ao se adicionar a estrutura discreta utilizada na biblioteca ENDF/B para armazenar $\sigma_x(E')$ (no caso de ressonâncias resolvidas será utilizada a malha obtida no processo de reconstrução) e $f_x(E', \ell)$ com os limites de integração da eq.(11), o que minimizará, no nosso entender, o número de interpolações necessárias, sem comprometer a precisão do resultado final.

A técnica descrita neste trabalho será brevemente implementada, o que permitirá uma avaliação concreta do seu desempenho frente às outras técnicas presentemente utilizadas na geração de matrizes de transferência para espalhamento elástico e inelástico discreto.

REFERÊNCIAS

- 1 - R.D.M. Garcia, "Revisão dos Métodos de Geração de Matrizes de Transferência em Códigos Computacionais Baseados na Biblioteca de Dados ENDF/B", Relatório Interno submetido, Instituto de Estudos Avançados, 1984.
- 2 - B.J. Toppel, A.L. Rago e D.M. O'Shea, "MC², a Code to Calculate Multigroup Cross Sections", ANL-7318, Argonne National Laboratory, 1967.
- 3 - H. Henryson, II, B.J. Toppel e C.G. Stenberg, "MC²-2: A Code to Calculate

Fast Neutron Spectra and Multigroup Cross Sections", ANL-8144, Argonne National Laboratory, 1976.

- 4 - H. Brockmann, Nucl. Sci. Eng., 77, 377-414, 1981.
- 5 - R.E. MacFarlane, R.J. Barret, D.W. Muir e R.M. Boicourt, "NJOY: A Comprehensive ENDF/B Processing System", Proceedings of a Seminar - Workshop on Multigroup Nuclear Cross-Section Processing, Oak Ridge, Tennessee, March 14-16, 1978, ORNL/RSIC-41, Oak Ridge National Laboratory, 1978.
- 6 - P.F. Zweifel e H. Hurwitz, Jr., J. Appl. Phys., 25, 1241-1245, 1954.
- 7 - H. Amster, J. Appl. Phys., 29, 623-627, 1958.
- 8 - D. Garber, C. Dunford e S. Pearlstein, "Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File, ENDF", BNL-NCS-50496, Brookhaven National Laboratory, 1982.
- 9 - I.S. Gradshteyn e I.M. Ryzhik, "Table of Integrals, Series, and Products", Academic Press, New York, 1980.