

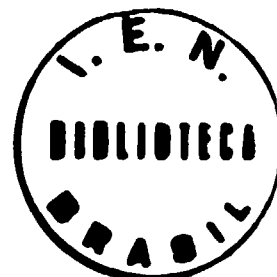
BR9023260

CTA-IEAV-PA--08/85.

RELATÓRIO DE PESQUISA

IEAV-08/85

08 ABR 1985



GERAÇÃO DE MATRIZES DE TRANSFERÊNCIA
ELÁSTICA E INELÁSTICA DISCRETA

por

R.D.M. Garcia

M.D. Santana

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

RELATÓRIO DE PESQUISA
IEAv- 08/85
08 ABR 1985

GERAÇÃO DE MATRIZES DE TRANSFERÊNCIA
ELÁSTICA E INELÁSTICA DISCRETA

por

R.D.M. Garcia
M.D. Santana



RESUMO

Uma técnica desenvolvida para o cálculo dos componentes isotrópico e linearmente anisotrópico de matrizes de transferência elástica e inelástica discreta é apresentada neste trabalho. A implementação da técnica é discutida em detalhe e resultados numéricos obtidos para alguns exemplos são comparados com resultados publicados na literatura ou gerados com o auxílio de diversos códigos de processamento.

ABSTRACT

A technique developed for the calculation of the isotropic and linearly anisotropic components of elastic and discrete inelastic transfer matrices is presented in this work. The implementation of the technique is discussed in detail and numerical results obtained for some examples are compared with results reported in the literature or generated with the use of several processing codes.

1. INTRODUÇÃO

Em um trabalho anterior⁽¹⁾, foi proposta uma técnica para o cálculo dos componentes isotrópico ($k=0$) e linearmente anisotrópico ($k=1$) de ma trizes de transferência elástica e inelástica discreta, expressos por

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

onde g' representa o grupo inicial, com $E' \in (E_{g'}, E_{g'-1})$, g representa o gru po final, com $E \in (E_g, E_{g-1})$, $\sigma_x(E')$ é a seção de choque para o mecanismo de espalhamento x à energia E' e $W(E')$ é a função de ponderaçã, com $W_{g'}$ dado pela integral de $W(E')$ sobre o grupo g' . Os limites de integração são dados por $E_{g'}^* = \max(E_{g'}, E_l)$ e $E_{g'-1}^* = \max(E_{g'-1}, E_l)$, onde E_l representa a energia limiar para espalhamento e a função $F_k(E', g)$ é expressa por⁽¹⁾

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

onde $f_x(E', \ell)$, com $f_x(E', 0) = 1$, são os coeficientes da expansão da distribui ção angular dos nêutrons espalhados em polinômios de Legendre $P_\ell(\omega)$ e $X_{k,\ell}(E', g)$ são integrais angulares⁽¹⁾ que podem ser calculadas eficiente mente por uma técnica semi-analítica⁽²⁾ desenvolvida para $k=0$ e 1.

Na Seção 2 deste trabalho, um algoritmo desenvolvido especialmente pa ra executar a integração sobre energia indicada na eq. (1) de uma forma efi ciente e precisa será descrito. Ainda que aparentemente trivial do ponto de vista numérico, a referida integração envolve aspectos sutis que, se não propriamente considerados, podem vir a prejudicar sensivelmente a precisã o final dos resultados. Na Seção 3, vários exemplos são estudados e resulta dos numéricos apresentados e comparados com resultados de outros métodos. A Seção 4 resume as conclusões principais do trabalho.

É importante salientar que este trabalho considera apenas o componente suave da seção de choque; o componente ressonante pode ser tratado analog amente, uma vez linearizado.

2. O ALGORITMO PARA INTEGRAÇÃO EM ENERGIA

O integrando da eq. (1) é constituído por um produto de três quantida

des, duas das quais fazem uso de dados nucleares fornecidos por bibliotecas de dados avaliados, como a ENDF/B⁽³⁾: a seção de choque $\sigma_x(E')$ é fornecida no arquivo 3 da ENDF/B na forma de pares de pontos $[E_i, \sigma_x(E_i)]$ com esquema de interpolação especificado e a função $F_k(E', g)$, de acordo com a eq. (2), faz uso dos coeficientes $f_x(E', l)$ fornecidos no arquivo 4 da ENDF/B na forma $[E_j, f_x(E_j, l)]$, onde $l = 1, 2, \dots, L \leq 20$, com esquema de interpolação em energia especificado. É claro que esta representação introduz, em geral, descontinuidades na derivada de $\sigma_x(E')$ nos pontos $\{E_i\}$ e na derivada de $F_k(E', g)$ nos pontos $\{E_j\}$. A terceira quantidade presente no integrando da eq. (1), a função de ponderação $W(E')$, pode também, por conveniência, ser utilizada na forma de pares de pontos $[E_k, W(E_k)]$ com esquema de interpolação especificado. Por conseguinte, a derivada de $W(E')$ pode ser descontínua nos pontos $\{E_k\}$.

A função $F_k(E', g)$ pode apresentar ainda outras descontinuidades na sua derivada, originárias das integrais angulares $X_{k, \ell}(E', g)$. Para explicar a origem dessas descontinuidades, deve-se notar que, pela definição⁽¹⁾

$$X_{k, \ell}(E', g) = \int_{\omega_g(E')}^{\omega_{g-1}(E')} d\omega P_k \{ [1 + \gamma(E')\omega] [1 + 2\gamma(E')\omega + \gamma^2(E')]^{-1/2} \} P_\ell(\omega), \quad (3)$$

onde ω é o co-seno do ângulo de espalhamento no sistema de centro de massa, as integrais angulares dependem basicamente dos limites de integração $\omega_g(E') = \max\{-1, \min[\omega(E_g, E'), 1]\}$ e $\omega_{g-1}(E') = \min\{1, \max[\omega(E_{g-1}, E'), -1]\}$, onde

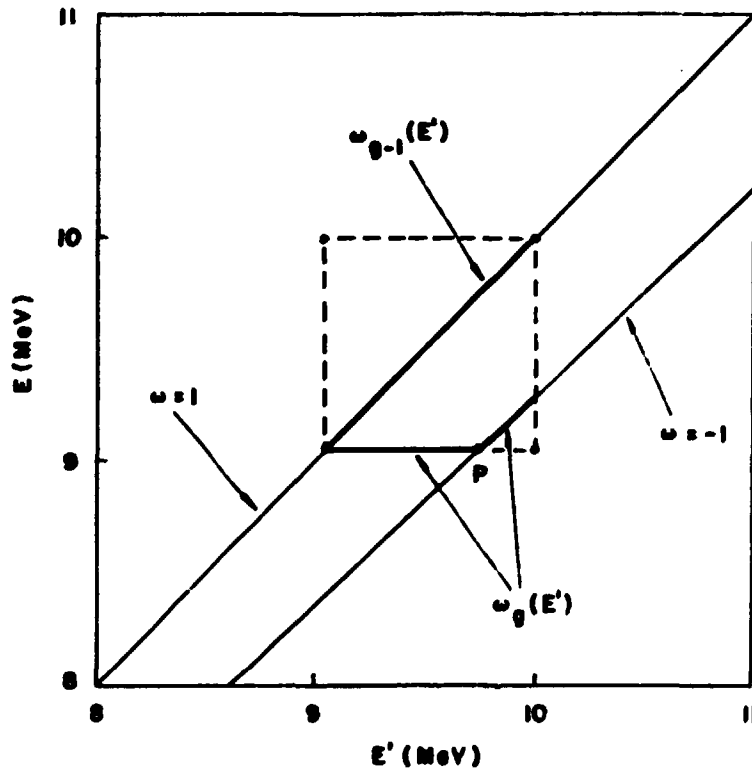
$$\omega(E, E') = \frac{1}{2} \left\{ [(A+1)^2 \frac{E}{E'} - 1] \frac{1}{\gamma(E')} - \gamma(E') \right\}. \quad (4)$$

O parâmetro $\gamma(E')$ presente nas eqs. (3) e (4) é dado por

$$\gamma(E') = A \left(1 + \frac{A+1}{A} \frac{Q_i}{E'} \right)^{1/2}, \quad (5)$$

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, com $Q_0 = 0$ representando espalhamento elástico. Assim, uma possível descontinuidade na derivada de qualquer um dos limites de integração da eq. (3) em relação a E' provocará uma descontinuidade na derivada de $X_{k, \ell}(E', g)$. Para exemplificar este tipo de descontinuidade, na Figura 1 pode-se observar

um ponto de descontinuidade na derivada de $X_{k,l}(E',g)$ que ocorre no cálculo da transferência elástica do grupo 5 (9,0484 - 10 MeV) da estrutura GAM-II⁽⁴⁾ para o mesmo grupo, no ^{27}Al . Tal descontinuidade, indicada pelo ponto P, é provocada pela descontinuidade na derivada do limite inferior $\omega_g(E')$ em $E' = 9,7512$ MeV.



(FIG.-1): Exemplo de descontinuidade na derivada de $\omega_g(E')$ para o ^{27}Al .

Uma maneira simples de se evitar estas descontinuidades é subdividir o intervalo de integração em energia da eq. (1), de tal forma que, dentro de cada subdivisão, o integrando da eq. (1) e sua derivada sejam contínuos. Assim, a eq. (1) é escrita inicialmente como

$$\sigma_x(g' \rightarrow g, k) = W_{g'}^{-1} \sum_{m=1}^M \int_{E_m(g',g)}^{E_{m+1}(g',g)} dE' W(E') \sigma_x(E') F_k(E',g) \quad (6)$$

onde $E_m(g',g)$, $m = 1, 2, \dots, M + 1$, são os limites de subintervalos, localizados nas $M + 1$ possíveis descontinuidades da derivada de $X_{k,l}(E',g)$. Para localizar estas descontinuidades, deve-se determinar os pontos de interseção entre os lados do retângulo com vértices (E_g^*, E_g) , (E_{g-1}^*, E_g) , (E_g^*, E_{g-1})

e $(E_{g,-1}^*, E_{g-1})$ e as curvas

$$E = \frac{E'}{(A+1)^2} [1 \pm \gamma(E')]^2 \quad (7)$$

no plano (E', E) . Os resultados dessa análise são apresentados a seguir.

Caso 1: $E_g^* \geq - \left(\frac{A}{A-1} \right) Q_i$.

$$E_1(g', g) = \max \{ E_g^*, \min [E_{g,-1}^*, \Gamma(E_g, 1)] \} , \quad (8a)$$

$$E_2(g', g) = \min \{ a, b \} , \quad (8b)$$

$$E_3(g', g) = \max \{ a, b \} , \quad (8c)$$

$$E_4(g', g) = \min \{ E_{g,-1}^*, \max [E_g^*, \Gamma(E_{g-1}, -1)] \} , \quad (8d)$$

onde

$$a = \max \{ E_g^*, \min [E_{g,-1}^*, \Gamma(E_{g-1}, 1)] \} , \quad (9a)$$

$$b = \min \{ E_{g,-1}^*, \max [E_g^*, \Gamma(E_g, -1)] \} \quad (9b)$$

e

$$\Gamma(E, \omega) = \frac{E}{(A-1)^2} \left\{ \frac{A^2 - 1 - A(A-1)Q_i/E}{[A^2 - 1 - A(A-1)Q_i/E + \omega^2]^{1/2} + \omega} \right\}^2 . \quad (10)$$

Caso 2a: $E_g^* < - \left(\frac{A}{A-1} \right) Q_i$ e $E_g > - \frac{Q_i}{A(A+1)}$.

Os resultados são idênticos aos do Caso 1.

Caso 2b: $E_g^* < - \left(\frac{A}{A-1} \right) Q_i$ e $E_{g-1} \leq - \frac{Q_i}{A(A+1)}$.

$$E_1(g', g) = \max \{ E_g^*, \min [E_{g,-1}^*, \Gamma(E_{g-1}, 1)] \} , \quad (11a)$$

$$E_2(g', g) = \max \{ E_g^*, \min [E_{g,-1}^*, \Gamma(E_g, 1)] \} , \quad (11b)$$

$$E_3(g', g) = \min \{ E_{g,-1}^*, \max [E_g^*, \Gamma(E_g, -1)] \} , \quad (11c)$$

$$E_4(g', g) = \min \{E_{g', -1}^*, \max [E_g^*, \Gamma(E_{g-1}, -1)]\} \quad (11d)$$

Caso 2c: $E_{g'}^* < -\left(\frac{\Lambda}{\Lambda-1}\right)Q_i, E_{g-1} > -\frac{Q_i}{\Lambda(\Lambda+1)}$ e $E_g < -\frac{Q_i}{\Lambda(\Lambda+1)}$.

$$E_1(g', g) = E_g^* \quad (12a)$$

$$E_2(g', g) = \min \{c, d\} \quad (12b)$$

$$E_3(g', g) = \max \{c, d\} \quad (12c)$$

$$E_4(g', g) = \min \{E_{g', -1}^*, \Gamma(E_g, -1)\} \quad (12d)$$

$$E_5(g', g) = \min \{E_{g', -1}^*, \Gamma(E_{g-1}, -1)\} \quad (12e)$$

onde

$$c = \max \{E_g^*, \min [E_{g', -1}^*, \Gamma(E_{g-1}, 1)]\} \quad (13a)$$

e

$$d = \max \{E_{g'}^*, \min [E_{g', -1}^*, \Gamma(E_g, 1)]\} \quad (13b)$$

A seguir, cada um dos M subintervalos é dividido tantas vezes quantas necessárias, de modo que os limites de cada uma de suas subdivisões sejam os pontos de descontinuidade $\{E_i\}$, $\{E_j\}$ e $\{E_k\}$, eventualmente presentes dentro do subintervalo. Desta maneira, as descontinuidades nas derivadas de $\sigma_x(E')$, $f_x(E', l)$ e, se for o caso, $W(E')$ são evitadas. Finalmente, a integração da eq. (1) é realizada com a utilização de uma quadratura de Gauss-Legendre de baixa ordem em cada uma das subdivisões de cada subintervalo.

3. EXEMPLOS NUMÉRICOS

Um programa denominado TRAMA foi escrito e implementado no sistema CYBER 170/750 do IEAv/CTA para testar o algoritmo descrito na Seção 2. Vários exemplos tratados anteriormente na literatura foram utilizados e os

resultados obtidos com o programa TRAMA foram comparados com resultados de diversos códigos de processamento. Ainda que a precisão numérica exigida para as matrizes de transferência seja, na prática, muito inferior à obtida com o programa TRAMA nos exemplos estudados (5 algarismos significativos), acreditamos ser importante a apresentação de resultados com tal grau de precisão por dois motivos: primeiro, a busca de resultados com precisão elevada pode revelar possíveis erros de programação difíceis de detectar e, por último, a publicação de resultados precisos para problemas bem definidos, facilita a comparação com resultados de outros métodos. Os dados nucleares necessários foram extraídos da biblioteca ENDF/B, versão IV⁽³⁾.

3.1. Espalhamento Inelástico no ^{16}O

Este exemplo foi utilizado por Brockmann para testar o programa TRACS⁽⁵⁾. Consiste em calcular a matriz de espalhamento inelástico envolvendo o primeiro nível excitado ($Q_1 = -6,052$ MeV) do ^{16}O (MAT = 1276) para os 12 primeiros grupos da estrutura fina do código GAM - II⁽⁴⁾, com função de ponderação da forma $1/E$. Os limites de cada grupo de energia considerados foram obtidos arredondando os valores publicados na Ref. 4 para 4 casas decimais e são dados explicitamente na Ref. 5.

Na Tabelas 1 e 2, resultados obtidos com a utilização de 4 pontos de quadratura por subdivisão no programa TRAMA para os componentes isotrópico e linearmente anisotrópico da matriz de transferência inelástica do ^{16}O são comparados com resultados de diversos códigos de processamento. Nota-se que os resultados do TRAMA e do NJOY⁽⁶⁾ apresentam uma boa concordância, sendo o desvio máximo relativo observado no NJOY de 0,19%. Quanto aos resultados do XLACS⁽⁷⁾ e do ETOG3⁽⁸⁾, dada a simplicidade dos modelos adotados nesses códigos para descrever o mecanismo de espalhamento inelástico discreto⁽⁹⁾, apresentam, como esperado, desvios bastante elevados em relação aos resultados mais precisos do TRAMA e do NJOY. A concordância entre os resultados publicados por Brockmann⁽⁵⁾ e os do programa TRAMA é excelente.

3.2. Espalhamento Inelástico no ^7Li

Este exemplo consiste em calcular a matriz de espalhamento inelástico para o primeiro nível excitado ($Q_1 = -0,478$ MeV) do ^7Li (MAT = 1272), com a mesma estrutura de grupos e função de ponderação do exemplo anterior. Resultados numéricos para este exemplo foram publicados por Hong e Shultis⁽¹⁰⁾

(TABELA-1) - O componente isotrópico $\sigma_x(g' \rightarrow g, 0)$ da matriz de transferência inelástica para o nível de 6,052 MeV do ^{16}O .

g'	g	TRAMA	NJOY	XLACS	ETOG-3
1	6	3,4629(-3)	3,462(-3)	0	0
1	7	1,2888(-2)	1,289(-2)	4,5789(-3)	5,0744(-3)
1	8	1,3103(-2)	1,310(-2)	2,2848(-2)	2,3517(-2)
1	9	8,2994(-3)	8,299(-3)	1,4635(-2)	1,3478(-2)
1	10	3,8343(-3)	3,833(-3)	0	0
1	11	4,8202(-4)	4,811(-4)	0	0
2	8	5,5013(-3)	5,506(-3)	0	0
2	9	1,3874(-2)	1,387(-2)	9,0062(-3)	1,0016(-2)
2	10	1,3821(-2)	1,382(-2)	2,4096(-2)	2,4722(-2)
2	11	9,8142(-3)	9,813(-3)	1,5779(-2)	1,4142(-2)
2	12	5,0077(-3)	5,006(-3)	0	0
3	9	1,6156(-5)	1,616(-5)	0	0
3	10	7,2168(-3)	7,219(-3)	0	0
3	11	2,1737(-2)	2,174(-2)	1,0929(-2)	1,7321(-2)
3	12	2,5913(-2)	2,591(-2)	4,2035(-2)	4,2600(-2)
4	12	4,4720(-3)	4,478(-3)	0	0

(TABELA-2) - O componente linearmente anisotrópico $\sigma_x(g' \rightarrow g, 1)$ da matriz de transferência inelástica para o nível de 6,052 MeV do ^{16}O .

g'	g	TRAMA	NJOY
1	6	2,9883(-3)	2,988(-3)
1	7	8,5827(-3)	8,586(-3)
1	8	3,9849(-3)	3,983(-3)
1	9	-2,2956(-3)	-2,297(-3)
1	10	-2,5254(-3)	-2,525(-3)
1	11	-4,3297(-4)	-4,322(-4)
2	8	4,5548(-3)	4,558(-3)
2	9	8,5560(-3)	8,554(-3)
2	10	3,2986(-3)	3,297(-3)
2	11	-2,9485(-3)	-2,949(-3)
2	12	-3,2433(-3)	-3,242(-3)
3	9	1,6010(-5)	1,602(-5)
3	10	5,9871(-3)	5,989(-3)
3	11	1,4015(-2)	1,402(-2)
3	12	8,0943(-3)	8,090(-3)
4	12	3,7394(-3)	3,744(-3)

para vários componentes da matriz de transferência entre os grupos 1 e 5 da estrutura supracitada, porém com valores das energias de grupo ligeiramente diferentes das utilizadas no exemplo anterior, devido a um critério de arredondamento distinto ter sido aplicado sobre os valores publicados na Ref. 4.

Nas Tabelas 3 e 4, os resultados obtidos com a utilização de 4 pontos de quadratura por subdivisão no programa TRAMA para os componentes isotrópico e linearmente anisotrópico da matriz de transferência inelástica do ${}^7\text{Li}$ para os 2 primeiros grupos de energia da estrutura considerada são comparados com resultados de diversos códigos de processamento. Como no exemplo anterior, os resultados do TRAMA e do NJOY apresentam boa concordância (desvio máximo relativo de 0,17%) e a diferença observada em relação aos resultados dos códigos XLACS e ETOG3 ficou ainda mais evidenciada, pois os modelos simplificados adotados nestes códigos para espalhamento inelástico não fornecem bons resultados quando aplicados a núcleos leves. Uma comparação adicional, utilizando o programa TRAMA com valores de energias de grupo exatamente iguais aos da Ref. 10, resultou em concordância perfeita para o componente $\sigma_x(1 \rightarrow 5, 0)$ obtido com o programa TRAMA e o melhor valor reportado na Ref. 10, enquanto que o componente $\sigma_x(1 \rightarrow 5, 1)$ apresentou uma diferença de apenas 1 no 5º algarismo significativo, levando-se em consideração um fator de 3, pois os resultados reportados na Ref. 10 estão multiplicados por $2l + 1$.

3.3. Espalhamento Elástico no ${}^{239}\text{Pu}$

Este exemplo foi utilizado por Henryson et al⁽¹¹⁾ na avaliação de alguns métodos computacionais disponíveis no código MC^2 -2⁽¹²⁾. Consiste em calcular a matriz de espalhamento elástico do ${}^{239}\text{Pu}$, com função de ponderação constante, para alguns grupos da estrutura ultrafina⁽¹³⁾ do código MC^2 , mostrados na Tabela 5.

Nas Tabelas 6 e 7, os resultados obtidos com a utilização de 8 pontos de quadratura por subdivisão no programa TRAMA para os componentes isotrópico e linearmente anisotrópico da matriz de transferência elástica do ${}^{239}\text{Pu}$ são comparados com resultados do NJOY, XLACS e MC^2 . Novamente, os resultados do TRAMA e do NJOY apresentam boa concordância (desvio máximo relativo de 0,28%). Os resultados do código XLACS, obtidos com o uso de 20 pontos no grupo inicial e 40 no grupo final, estão num plano inferior, enquanto que os resultados do código MC^2 estão distantes dos valores encontrados com o TRAMA

(TABELA-3) - O componente isotrópico $\sigma_x(g' \rightarrow g, 0)$ da matriz de transferência inelástica para o nível de 0,478 MeV do ${}^7\text{Li}$.

g'	g	TRAMA	NJOY	XLACS	ETOG-3
1	1	3,8568(-3)	3,854(-3)	0	0
1	2	1,5730(-2)	1,574(-2)	0	0
1	3	1,5280(-2)	1,528(-2)	1,1772(-2)	1,2336(-2)
1	4	1,3826(-2)	1,383(-2)	6,8592(-2)	6,8029(-2)
1	5	1,2510(-2)	1,251(-2)	0	0
1	6	1,1320(-2)	1,132(-2)	0	0
1	7	7,4754(-3)	7,476(-3)	0	0
1	8	3,6551(-4)	3,649(-4)	0	0
2	2	3,6155(-3)	3,620(-3)	0	0
2	3	1,6801(-2)	1,680(-2)	0	0
2	4	1,6653(-2)	1,666(-2)	8,9821(-3)	9,9427(-3)
2	5	1,5068(-2)	1,507(-2)	7,8327(-2)	7,7366(-2)
2	6	1,3635(-2)	1,364(-2)	0	0
2	7	1,2337(-2)	1,234(-2)	0	0
2	8	8,6151(-3)	8,615(-3)	0	0
2	9	5,8402(-4)	5,839(-4)	0	0

(TABELA-4) - O componente linearmente anisotrópico $\sigma_x(g' \rightarrow g, 1)$ da matriz de transferência inelástica para o nível de 0,478 MeV do ${}^7\text{Li}$.

g'	g	TRAMA	NJOY
1	1	3,5646(-3)	3,562(-3)
1	2	1,2017(-2)	1,202(-2)
1	3	6,7865(-3)	6,785(-3)
1	4	1,4714(-3)	1,472(-3)
1	5	-2,8901(-3)	-2,891(-3)
1	6	-6,4420(-3)	-6,443(-3)
1	7	-6,2977(-3)	-6,298(-3)
1	8	-3,5407(-4)	-3,535(-4)
2	2	3,3575(-3)	3,361(-3)
2	3	1,3038(-2)	1,304(-2)
2	4	7,6829(-3)	7,687(-3)
2	5	1,8735(-3)	1,873(-3)
2	6	-2,8958(-3)	-2,897(-3)
2	7	-6,7804(-3)	-6,783(-3)
2	8	-7,1609(-3)	-7,161(-3)
2	9	-5,6225(-4)	-5,621(-4)

e com o NJOY, conforme esperado. Como uma versão mais antiga que a versão IV da biblioteca ENDF/B foi utilizada para obter os resultados publicados na Ref. 11, não foi possível uma comparação com aqueles resultados.

(TABELA-5) - Estrutura de grupos utilizada no cálculo do espalhamento elástico no ^{239}Pu .

Grupo	Energia Inferior (MeV)	Energia Superior (MeV)
1	6,1160620	6,1672421
2	6,0653066	6,1160620
3	6,0149724	6,0653066
4	5,9650559	6,0149724

(TABELA-6) - O componente isotrópico $\sigma_x(g' \rightarrow g, 0)$ da matriz de transferência elástica do ^{239}Pu .

g'	g	TRAMA	NJOY	XLACS	MC^2
1	1	3,3656	3,366	3,3686	1,880
1	2	5,2051(-1)	5,203(-1)	5,2260(-1)	1,993
1	3	9,5879(-2)	9,585(-2)	9,0836(-2)	1,081(-1)
1	4	2,7928(-5)	2,785(-5)	0	1,256(-3)
2	2	3,3765	3,377	3,3795	1,886
2	3	5,2300(-1)	5,228(-1)	5,2509(-1)	2,000
2	4	9,5864(-2)	9,587(-2)	9,0814(-2)	1,083(-1)
3	3	3,3877	3,388	3,3907	1,893
3	4	5,2554(-1)	5,255(-1)	5,2761(-1)	2,007
4	4	3,3987	3,399	3,3971	1,900

(TABELA-7) - O componente linearmente anisotrópico $\sigma_x(g' \rightarrow g, 1)$ da matriz de transferência elástica do ^{239}Pu .

g'	g	TRAMA	NJOY	XLACS	MC ²
1	1	3,1424	3,143	3,1454	1,880
1	2	1,9883(-1)	1,986(-1)	2,0058(-1)	7,479(-2)
1	3	-6,2996(-2)	-6,299(-2)	-6,0840(-2)	-3,162(-1)
1	4	-2,7665(-5)	-2,759(-5)	0	-1,256(-3)
2	2	3,1522	3,152	3,1552	1,886
2	3	1,9968(-1)	1,995(-1)	2,0142(-1)	7,505(-2)
2	4	-6,2636(-2)	-6,264(-2)	-6,0483(-2)	-3,167(-1)
3	3	3,1623	3,162	3,1653	1,893
3	4	2,0053(-1)	2,005(-1)	2,0226(-1)	7,531(-2)
4	4	3,1720	3,172	3,1708	1,900

3.4. Espalhamento Elástico no ^{27}Al

Este exemplo foi utilizado por Weisbin et al.⁽¹⁴⁾ na avaliação do código MINX⁽¹⁵⁾. Consiste em calcular a matriz de espalhamento elástico do ^{27}Al numa estrutura com 11 grupos no intervalo 0,414 eV - 10 MeV e função de ponderação tabelada, apresentadas na Ref. 14.

Nas Tabelas 8 e 9, os resultados obtidos com a utilização de 4 pontos de quadratura por subdivisão no programa TRAMA para os componentes isotrópico e linearmente anisotrópico da matriz de transferência elástica do ^{27}Al são comparadas com resultados do NJOY e do XLACS. A concordância entre os resultados do TRAMA e do NJOY é excelente (desvio máximo relativo de 0,03%). Quanto aos resultados do XLACS, apesar de obtidos com o uso de 80 pontos no grupo inicial e 160 no final, apresentam desvios muito maiores, acima de 10% para alguns dos valores mostrados nas Tabelas 8 e 9.

(TABELA-8) - O componente isotrópico $\sigma_x(g' \rightarrow g, 0)$ da matriz de transferência elástica do ^{27}Al .

g'	g	TRAMA	NJOY	XLACS
1	1	6,3721(-1)	6,373(-1)	6,3476(-1)
1	2	1,2429(-1)	1,243(-1)	1,2676(-1)
2	2	8,5505(-1)	8,551(-1)	8,4984(-1)
2	3	2,2224(-1)	2,222(-1)	2,2743(-1)
3	3	1,3205	1,321	1,3157
3	4	1,8801(-1)	1,880(-1)	1,9287(-1)
4	4	3,0851	3,085	3,0843
4	5	1,3893(-1)	1,389(-1)	1,3983(-1)
5	5	5,0225	5,022	5,0224
5	6	6,3153(-2)	6,314(-2)	6,3213(-2)
6	6	3,4335	3,434	3,4334
6	7	4,2925(-2)	4,293(-2)	4,3264(-2)
7	7	1,4630	1,463	1,4579
7	8	4,5057(-2)	4,506(-2)	5,0115(-2)
8	8	1,3050	1,305	1,3049
8	9	4,2191(-2)	4,219(-2)	4,2294(-2)
9	9	1,3143	1,314	1,3143
9	10	3,2979(-2)	3,298(-2)	3,3015(-2)
10	10	1,3148	1,315	1,3149
10	11	3,2456(-2)	3,246(-2)	3,2402(-2)
11	11	1,3161	1,316	1,3159

(TABELA-9) - O componente linearmente anisotrópico $\sigma_x(g' \rightarrow g, 1)$ da matriz de transferência elástica do ^{27}Al .

g'	g	TRAMA	NJOY	XLACS
1	1	4,7788(-1)	4,779(-1)	4,7773(-1)
1	2	-2,0063(-2)	-2,007(-2)	-1,9117(-2)
2	2	6,2454(-1)	6,246(-1)	6,2413(-1)
2	3	-3,0460(-2)	-3,047(-2)	-2,7929(-2)
3	3	8,0954(-1)	8,096(-1)	8,0797(-1)
3	4	4,0843(-3)	4,083(-3)	5,4647(-3)
4	4	1,0634	1,063	1,0617
4	5	-3,1636(-2)	-3,164(-2)	-3,0285(-2)
5	5	3,3898(-1)	3,389(-1)	3,3813(-1)
5	6	-2,3081(-2)	-2,308(-2)	-2,3051(-2)
6	6	1,0026(-1)	1,003(-1)	9,9983(-2)
6	7	-1,3617(-2)	-1,362(-2)	-1,3600(-2)
7	7	5,1928(-2)	5,193(-2)	5,3383(-2)
7	8	-1,4343(-2)	-1,434(-2)	-1,5907(-2)
8	8	4,7044(-2)	4,704(-2)	4,7023(-2)
8	9	-1,3468(-2)	-1,347(-2)	-1,3470(-2)
9	9	4,4128(-2)	4,413(-2)	4,4080(-2)
9	10	-1,0550(-2)	-1,055(-2)	-1,0543(-2)
10	10	4,3949(-2)	4,395(-2)	4,3857(-2)
10	11	-1,0372(-2)	-1,037(-2)	-1,0334(-2)
11	11	4,3575(-2)	4,358(-2)	4,3577(-2)

4. CONCLUSÕES

Os resultados obtidos com o programa TRAMA para os exemplos apresentados na seção anterior permitem concluir que a técnica descrita neste trabalho é capaz de fornecer resultados numéricos com alta precisão para os componentes isotrópico e linearmente anisotrópico das matrizes de transferência elástica e inelástica discreta. Assim, a referida técnica pode ser utilizada, como neste trabalho, para produzir resultados numéricos de referência para problemas selecionados, facilitando a avaliação da precisão dos códigos de processamento existentes. Dos códigos examinados no presente estudo, o sistema NJOY é o que, inegavelmente, forneceu os melhores resultados, apesar de algumas anomalias terem sido detetadas nas matrizes de espalhamento originárias dos grupos de energia mais alta e mais baixa. Tais dificuldades foram levadas ao conhecimento dos responsáveis pelo código.

Em termos de tempo de processamento, apesar do algoritmo para integração angular utilizado no programa TRAMA ser, em geral, mais rápido que a integração numérica utilizada no NJOY⁽²⁾, observamos que os tempos de processamento do TRAMA foram superiores aos dos NJOY (porém, inferiores aos do XLACS). A razão é que o algoritmo para integração sobre a energia inicial do TRAMA utiliza uma discretização distinta de E' para cada grupo final, de modo a evitar as descontinuidades na derivada de $X_{k,l}(E',g)$ discutidas na Seção 2. O sistema NJOY, no entanto, não distingue entre os diversos grupos finais, empregando a mesma discretização em E' para todos eles. Isto, sem dúvida, torna o tempo de execução do NJOY mais rápido, porém a confiabilidade dos resultados é inferior, em consequência do menor rigor matemático do algoritmo do NJOY.

Em particular, no tocante à geração de matrizes de transferência para espalhamento inelástico discreto, verificou-se que os códigos que não consideram a distribuição angular dos nêutrons espalhados, como os programas XLACS e ETOG3 utilizados neste trabalho, produzem resultados com desvios e levados em relação aos valores corretos, especialmente para núcleos leves. A influência das aproximações utilizadas por esses códigos na reatividade e alguns índices espectrais para certos sistemas rápidos foi analisada⁽¹⁶⁾, porém um estudo mais completo desses efeitos seria altamente desejável.

Finalmente, a técnica discutida neste trabalho pode, após generalização que permita sua aplicação a ressonâncias e processamento de todas as representações possíveis no arquivo 4 da ENDF/B, ser facilmente implementada em substituição a técnicas mais antigas que são utilizadas em códigos de proces

samento existentes ou incorporada ao novo código de processamento em desenvolvimento no Centro de Dados Nucleares do Instituto de Estudos Avançados.

AGRADECIMENTOS

Os autores desejam expressar seus agradecimentos a J. Anaf, S. Bogado Leite, E.S. Chalhoub e R.P. Kesavan Nair por diversas discussões sobre vários aspectos deste trabalho bem como pelo auxílio na utilização dos códigos de processamento.

REFERÊNCIAS

- (1) R.D.M. Garcia, "Uma Nova Técnica para a Geração de Matrizes de Transferência para Espalhamento Elástico e Inelástico Discreto", Nota Técnica IEAv/NT-010/84, Instituto de Estudos Avançados, 1984.
- (2) R.D.M. Garcia, "Estudo da Eficiência Computacional de uma Técnica Semi-Analítica para Avaliação de Integrais Angulares Encontradas na Geração de Matrizes de Transferência", Nota Técnica IEAv/NT-011/84, Instituto de Estudos Avançados, 1984.
- (3) D. Garber, C. Dunford e S. Pearlstein, "Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File, ENDF", BNL - NCS - 50496, Brookhaven National Laboratory, 1975.
- (4) G.D. Joanou e J.S. Dudek, "GAM-II: A B_3 Code for the Calculation of Fast-Neutron Spectra and Associated Multigroup Constants", GA - 4265, General Atomic, 1963.
- (5) H. Brockmann, Atomkernenergie-Kerntechnik, 35, 15 - 19, 1980.
- (6) R.E. MacFarlane, D.W. Muir e R.M. Boicourt, "The NJOY Nuclear Data Processing System, Volume I: User's Manual", LA - 9303 - M, Los Alamos National Laboratory, 1982.
- (7) N.M. Greene, J.L. Lucius, J.E. White, R.Q. Wright, C.W. Craven, Jr. e M.L. Tobias, "XLACS: A Program to Produce Weighted Multigroup Neutron

Cross Section from ENDF/B", ORNL - TM - 3646, Oak Ridge National Laboratory, 1972.

- (8) S.Q. Bogado Leite, "Utilização do Código ETOG3 na Preparação de Biblioteca Epitérmica para HAMMER com Dados do ENDF/B-IV", Nota Informal NI/ENU/001/83, Instituto de Estudos Avançados, 1983.
- (9) 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 IEAv/RI-008/84, Instituto de Estudos Avançados, 1984.
- (10) K.J. Hong e J.K. Shultis, Nucl. Sci. Eng., 80, 570 - 578, 1982.
- (11) H. Henryson, II, C.G. Stenberg e B.J. Toppel, "Calculation of Elastic Scattering Matrices", Applied Physics Division Annual Report July 1, 1969 to June 30, 1970, ANL - 7710, Argonne National Laboratory, 1971.
- (12) 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.
- (13) 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.
- (14) C.R. Weisbin, P.D. Soran e J.S. Hendricks, Nucl. Sci. Eng., 55, 329-341, 1974.
- (15) C.R. Weisbin, P.D. Soran, R.E. MacFarlane, D.R. Harris, R.J. LaBauve, J.S. Hendricks, J.E. White e R.B. Kidman, "MINX: A Multigroup Interpretation of Nuclear X-Sections from ENDF/B", LA-6486-MS, Los Alamos Scientific Laboratory, 1974.
- (16) M. Segev, Nucl. Sci. Eng., 45, 269 - 278, 1971.