

C. N. E. A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1969

02.69.15

EFFECTO DE ESCATTERING DE INTERFERENCIA Y
DE TEMPERATURA EN EL CALCULO DE INTEGRALES
DE RESONANCIA.

R. PAVIOTTI de CORCUERA

(1969)

CNEA-Re-34



RESUMEN:

La formulación operacional del método I-R permite introducir fácilmente los efectos de interferencia y de temperatura.

Las fórmulas que se obtienen cuando se considera scattering de interferencia coinciden con las de Y. ISHIGURO si se hace $b = 0$ y $\alpha = 1$. Esto es consecuencia de la expresión aproximada que emplea Y. ISHIGURO para los operadores de moderación.

La introducción de efecto Doppler en la integral de resonancia conduce al mismo tipo de fórmula que obtuvo Goldstein. La expresión de I , que es proporcional a $\omega \dot{J}(n, \omega)$ difiere de la anterior, a través de ω , en la expresión de los parámetros λ, K_i, μ' .

El cálculo de la integral de resonancia con la inclusión de los dos efectos (Doppler-interferencia) se hace, como es usual a través de la función $\dot{J}(n, \omega, i)$.

EFFECTO DE INTERFERENCIA

Consideremos una celda compuesta por una barra combustible rodeada de un moderador externo.

El combustible está uniformemente mezclado con N diluentes cuyas secciones eficaces por átomo de combustible son σ_i ($i = 1 \dots N$).

La región exterior tiene M moderadores cuyas secciones eficaces S_j ($j = 1 \dots M$) son iguales a $\Sigma_j \cdot V_m / N_f V_f$ donde Σ_j es la sección eficaz macroscópica del moderador j , V_m / V_f es el cociente volumétrico y N_f es la densidad numérica del absorbente resonante.

En un sistema de este tipo la integral de resonancia Ref. 1 y 2 está dada por:

$$I = \frac{I_0}{\gamma} \quad (1)$$

donde I_0 es la integral de resonancia a dilución infinita.

$$I_0 = \frac{\pi \sigma_0 \Gamma_\gamma}{2 E_r}$$

y γ está dado por:

$$\gamma^2 = 1 + \frac{\sigma_0}{\lambda \sigma_0 + \sum_{i=1}^N x_i \sigma_i + S \mu'} \frac{\Gamma_\gamma + \lambda \Gamma_m}{\Gamma} \quad (2)$$

con

$$\mu' = \frac{\sum_{j=1}^M \mu_j S_j}{\sum_{j=1}^M \mu_j S_j (1 - \frac{S}{S_m}) + S}$$

σ_0 , Γ_n , Γ_γ , Γ son la sección eficaz total máxima, los anchos neutrónico, de captura y total y E_r es la energía de resonancia.

Los parámetros de resonancia λ , x_i y μ' Ref. 1) y 2)

están dados por:

$$\lambda = 1 - \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \sigma_a(x) \psi_f^{(1)}(x) \left\{ \sigma_p - K_f(\sigma_s \psi_f) \right\} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \sigma_a(x) \psi_f^{(1)}(x) \left\{ \sigma_p - \sigma_s(x) \psi_f(x) \right\} dx}$$

$$\chi_i = 1 - \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \sigma_a(x) \psi_f^{(1)}(x) \left\{ 1 - K_{om_i}(\psi_f(x)) \right\} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \sigma_a(x) \psi_f^{(1)}(x) [1 - \psi_f(x)] dx}$$

(3)

$$\mu' = 1 - \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \sigma_a(x) \psi_f^{(1)}(x) \left\{ 1 - \sum_{j=1}^m S_j^{-1} \sum_{i=1}^m S_j K_{mj}(\psi_m(x)) \right\} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \sigma_a(x) \psi_f^{(1)}(x) [1 - \psi_f(x)] dx}$$

$$\sigma_s = \sigma_f + \sigma_p \quad \alpha = \frac{2}{F} (E - E_f)$$

En estas expresiones σ_p , $\sigma_a(x)$, $\sigma_f(x)$ son las secciones eficaces microscópicas potencial, de absorción y de scattering resonante respectivamente para el material combustible, $\psi_f^{(1)}(x)$ y $\psi_m^{(1)}(x)$ son las funciones de prueba para el combustible y el moderador. Los K_i son los operadores integrales de moderación como se definen en Ref. 1) y 2).

FUNCIONES DE PRUEBA CON INCLUSION DE SCATTERING DE INTERFERENCIA

Consideremos para las secciones eficaces microscópicas las expresiones de Breit Wigner con inclusión de scattering de interferencia

$$\sigma_u(x) = \sigma_0 \frac{\Gamma}{\Gamma} \frac{1}{x^2+1} \quad y \quad \sigma_s(x) = \sigma_p \frac{x^2 + 2\theta_\infty x + \beta_\infty^2}{x^2+1}$$

(4)

con $\beta_\infty^2 = 1 + \frac{\sigma_0 \Gamma_m}{\Gamma \sigma_p}$ y $\theta_\infty^2 = \frac{\sigma_0 \theta \Gamma_m}{\Gamma \sigma_p}$

Siguiendo luego el procesamiento detallado en Ref. 1) y empleando para los operadores de moderación la aproximación lineal de la misma referencia se obtienen las siguientes funciones de prueba para un problema a dos regiones:

$$\psi_{(x)}^{(1)} = \frac{x^2+1}{x^2+2\theta x+\gamma^2}$$

$$\psi_m^{(1)} = \frac{x^2+\varepsilon^2}{x^2+2\theta x+\gamma^2}$$

(5)

donde

$$\theta = \frac{\lambda \theta_\infty \sigma_p}{\lambda \sigma_p + \sum_{i=1}^N \kappa_i \sigma_i + \mu' s}$$

$$\varepsilon^2 = 1 + \mu' \left(1 - \frac{s}{s_m}\right) (\gamma^2 - 1) \quad s = \frac{a(1-c)}{N_f \ell_f}$$

a, c, ℓ_f son el factor de Bell, el factor de Dancoff y la cuerda media Ref. (3).

CALCULO DE LOS PARAMETROS DE RESONANCIA λ , κ , μ'

Si empleamos las secciones eficaces dadas en 4) y las funciones de prueba de las expresiones 5) en las fórmulas 3) se tiene:

$$\lambda = 1 - \left[C_1 - C_2 F_2(\alpha_\lambda, \delta_\lambda, \zeta) + C_3 F_3(\alpha_\lambda, \delta_\lambda, \zeta) \right] - \frac{2(\theta - \theta_\infty)\zeta}{\zeta^2 - (\theta - \theta_\infty)^2} \cdot \left[-\frac{C_1}{A} + C_3 F_2(\alpha_\lambda, \delta'_\lambda, \zeta) + C_2 F_3(\alpha_\lambda, \delta'_\lambda, \zeta) \right]$$

$$x_i = 1 - \left[C_1 - C_2 F_2(\alpha_{am_i}, \delta_{am_i}, \zeta) + C_3 F_3(\alpha_{am_i}, \delta'_{am_i}, \zeta) \right] - \frac{\theta \zeta}{\zeta^2 - (1 + \theta^2)} \left[-\frac{C_1}{A} + C_3 F_2(\alpha_{am_i}, \delta'_{am_i}, \zeta) + C_2 F_3(\alpha_{am_i}, \delta'_{am_i}, \zeta) \right] \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \mu' = 1 - \frac{\zeta^2 - (\theta^2 + \varepsilon^2)}{\zeta^2 - (1 + \theta^2)} & \left[C_1 - C_2 \sum_{j=1}^M (S_j / S_m) F_2(\alpha_{mj}, \delta'_{mj}, \zeta) + \right. \\ & + C_3 \sum_{j=1}^M \frac{S_j}{S_m} F_3(\alpha_{mj}, \delta'_{mj}, \zeta) - \frac{2\theta\zeta}{\zeta^2 - (1 + \theta^2)} \left[-\frac{C_1}{A} + C_3 \sum_{j=1}^M \frac{S_j}{S_m} F_2(\alpha_{mj}, \delta'_{mj}, \zeta) + \right. \\ & \left. \left. + C_2 \sum_{j=1}^M \frac{S_j}{S_m} F_3(\alpha_{mj}, \delta'_{mj}, \zeta) \right] \right] \end{aligned}$$

donde

$$S_m = \sum_{j=1}^M S_j$$

$$C_1 = \frac{2A^2}{1+A^2} \quad C_2 = 2A \frac{3-A^2}{(1+A^2)^2} \quad C_3 = \frac{2(1-3A^2)}{(1+A^2)^2}$$

$$A = \frac{b\zeta}{1-b\theta}$$

$$b = r/2E_r$$

$$F_2(\alpha, \delta', \zeta) = \frac{\zeta}{2\delta'} \ln \left[\frac{(1+\alpha)^2 + \delta'^2/\zeta^2}{4} \right], \quad \delta' = \delta(1-b\theta)$$

$$F_3(\alpha, \delta, \zeta) = \frac{\zeta}{\delta'} \arctang \frac{\delta'}{\delta(1+\alpha)}$$

$$\zeta^2 = \gamma^2 - \theta^2 \quad \theta_\infty = \frac{(\sigma_{og} \Gamma_m)^{1/2}}{(\Gamma \sigma_p)^{1/2}}$$

Para hallar las expresiones 6) se emplearon las ec.3) y los integrales que allí figuran se calcularon en el campo complejo ref.3).

Como ya tenemos los parámetros de resonancia solo nos resta hallar la expresión de la integral de resonancia, esto puede hacerse siguiendo el procedimiento indicado en referencia 1) y el resultado es:

$$I = \frac{I_0}{\zeta} \quad (7)$$

Es interesante destacar que si hacemos $b=0$ y $\alpha=1$ en las ec. 6) se obtienen las expresiones que da Y.Ishiguro ref. 4) y si hacemos $\theta=0$ se obtienen las expresiones de ref. 1) que corresponden al caso en que se ignora el scattering de interferencia.

EFFECTO DE LA TEMPERATURA

Las secciones eficaces que hemos empleado en la sección anterior no consideraban el movimiento térmico de los núcleos. Si se pretende tenerlo en cuenta es necesario emplear las secciones eficaces modificadas por efecto Doppler.

Las expresiones para estas secciones eficaces despreciando el efecto de interferencia son Ref. 5) Dresner (1960).

$$\sigma_a = \sigma_0 \frac{\Gamma}{\Delta} \bar{\Psi}(\eta, x) \quad \sigma_r = \sigma_0 \frac{\Gamma_m}{\Gamma} \bar{\Psi}(\eta, x) \quad (8)$$

donde $\eta = \frac{\Gamma}{\Delta} \quad \Delta = \left(\frac{4 E_r k T}{A} \right)^{1/2}$

$$\bar{\Psi}(\eta, x) = \frac{\eta}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{1}{4}\eta^2(x-y)^2}}{1+y^2} dy;$$

$$y = \frac{2}{\Gamma} (E' - E_0)$$

Δ se llama ancho Doppler.

Introduciendo las expresiones (8) en las ecuaciones de balance de Ref. 1) y procediendo como allí se indicase obtienen las siguientes funciones de prueba.

$$\psi_g^{(a)}(x, \eta) = \frac{1}{1 + \bar{\Psi}(x, \eta)(\gamma^2 - 1)}$$

$$\psi_m^{(a)}(x, \eta) = \frac{1 + \bar{\Psi}(x, \eta)(\epsilon^2 - 1)}{1 + \bar{\Psi}(x, \eta)(\gamma^2 - 1)} \quad (9)$$

La tabulación más extensa de funciones Doppler es la de Seth K.K. and R.H. Tabony (1964) Ref. 6).

Empleando las funciones de prueba de ec' 9) la integral de resonancia está dada por:

$$I = \sigma_0 \frac{\bar{\Psi}}{\bar{\Psi}_r} \omega J(\eta, \omega) \quad \omega = \frac{1}{\gamma^2 - 1}. \quad (10)$$

$$J(\eta, \omega) = \int_0^{\infty} \frac{\Psi(\eta, x)}{\omega + \Psi(\eta, x)} dx \quad (11)$$

Esta función está tabulada para distintos valores de η y ω en el libro de Dresner (1960) en el mismo hay también referencias sobre más tabulaciones en distintos rangos de θ y ω

Para obtener ω pueden emplearse los parámetros K, λ y μ calculados temperatura cero según las fórmulas de Ref. 1). B.R. Sehgal (1965) Ref 7) y M.H. Mc Kay Ref. 8) realizaron este tipo de cálculo y encontraron que los parámetros calculados a cero grado pueden ser empleados para otras temperaturas sin que esto altere en forma apreciable el resultado.

Sin embargo si se pretende mayor exactitud pueden calcularse los parámetros con efecto Doppler empleando las funciones de prueba de ec. 9) y las secciones eficaces de ec.8) en las fórmulas 3).

N.M. Steen ref 9) da una manera práctica muy útil de calcular $J(\eta, \omega)$ mediante una fórmula de aproximación válida, en todo el rango de variación de η y ω .

Sintetizando podemos decir entonces que $j(n, \omega)$ puede calcularse de cuatro maneras

- a) Mediante tablas entrando con un ω calculado a cero grado (es decir empleando las fórmulas 25 y 35 de Ref 1).
- b) Mediante tablas entrando con ω calculado a la temperatura que se desee. Es decir empleando las fórmulas 3 con las funciones de prueba dadas por (9) y las secciones eficaces de (8).
- c) Mediante la fórmula de aproximación de N.M. Steen con ω calculado como en a).
- d) Mediante la misma fórmula con ω calculado como en b).

Para sistemas multinucleares homogéneos ~~y~~ heterogéneos el valor de ω a cero grado puede obtenerse mediante el programa "Cop. R" escrito en FORTRAN IV para GE-625 por C. Grant.

El valor de η para distintas temperaturas y varios isótopos se calcula mediante el programa ETA del cual se adjunta una copia.

Con dicho programa se calculó η para U^{233} , Pu^{240} , Th^{232} , Pu^{239} , U^{238} , U^{235} con temperaturas de en rango de 293 a 2.000°

El Namelist de este programa emplea una biblioteca de datos nucleares actualizada y revisada.

Esta biblioteca está preparada de manera tal que las mismas tarjetas (duplicadas y con previa incorporación de los demás datos) pueda ser utilizada con los programas "Resonancias" o "Cop. R" para obtener ω .

Los mencionados parámetros nucleares, se tomaron de Ref. 10) para U^{238} , U^{235} , Pu^{239} de Ref 11) para Th^{232} y U^{233} , de Ref. 12) para Pu^{240} .

EFFECTO DOPPLER Y SCATTERING INTERFERENCIA

Si consideramos ensanchamiento Doppler y scattering de interferencia entonces la expresión de ec (8) para σ_r se transforma en:

$$\sigma_r = \sigma_0 \frac{\Gamma_m}{\Gamma} \Psi(\eta, x) + \sigma_p \theta_\infty \chi(\eta, x) \quad (12)$$

donde

$$\chi(\eta, x) = \frac{\eta}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{1}{4}\eta^2(x-y)^2}}{1+y^2} 2y dy$$

Las probabilidades de esta función pueden verse en Ref (5) y la tabulación en Ref (6).

FUNCIONES DE PRUEBA

Las fórmulas equivalentes a las (5) son ahora:

$$\begin{aligned} \psi^{(1)} &= \frac{1}{1 + \theta \chi(\eta, x) + (\gamma^2 - 1) \Psi(\eta, x)} \\ \psi_m^{(1)} &= \frac{1 + (\epsilon^2 - 1) \dot{\Psi}(\eta, x)}{1 + \theta \chi(\eta, x) + (\gamma^2 - 1) \Psi(\eta, x)} \end{aligned} \quad (13)$$

Empleando estas funciones de prueba la integral de resonancia está dado por:

$$I = \sigma_0 \frac{\Gamma_r}{E_r} \frac{\omega}{2} j(\eta, \omega, i) \quad (14)$$

donde $j(N, \omega, i)$ está definido por:

$$j(\eta, \omega, i) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\dot{\Psi}(\eta, x) dx}{\omega + (\omega i)^{1/2} \chi(\eta, x) + \dot{\Psi}(\eta, x)}$$

con $i = \omega \theta^2$

Esta función $j(n, \omega, i)$ puede ser calculado a partir de $j(n, \omega)$ como lo demuestra Dresner Ref (5) pag. 45, 47.

También puede emplearse la aproximación de Muller (ver Pag. 158 de Ref (13)).

CALCULO DE LOS PARAMETROS DE RESONANCIA

Para calcular λ , κ , μ' se pueden emplear las fórmulas (6) que corresponden al caso de temperatura cero.

Si se quiere incluir el efecto de temperatura en los parámetros se deben usar las expresiones (3) con la sección eficaz σ dada por (12) y las funciones de prueba dadas por (13).

Sin embargo vimos que cuando se desprecia el efecto de interferencia es posible emplear los valores λ , κ , μ' a cero grado para otras temperaturas sin que esto afecte la exactitud del cálculo en forma apreciable.

Por lo tanto podríamos pensar que para este caso es posible aplicar lo anterior también.

CONCLUSIONES:

La inclusión del scattering de interferencia en la forma descripta conduce a valores que no difieren sustancialmente de los obtenidos por Y. ISHIGURO. Es decir, el hecho de considerar $\alpha \neq 1$ y $b \neq 0$ en los operadores de moderación no mejora en forma apreciable los valores que da Y. ISHIGURO.

Es importante destacar que las aproximaciones NR y WR no son buenas para emplear en interpolación en casos de gran interferencia (β grande) que son justamente los casos en que el método IR requiere de una corrección.

Para estos casos sucede ^{para} el valor de λ que hace $I(1) = I$ exact. está fuera del intervalo 0-1 incluso a veces llega a ser negativo.

Esto estaría indicando la imperiosa necesidad de introducir mejores funciones de prueba, que las que aquí se utilizan.

Sobre este particular es interesante leer el comentario que hace H. Neltrup y J. Mikkelsen Ref. 14).

Con respecto a la introducción de corrección por temperatura lo más aconsejable parece ser el empleo del método de N. M. Steen Ref. 9).

En cuanto a introducción simultánea de efecto Doppler y scattering de interferencia, sería necesario emplear aquellas funciones de prueba que den buenos resultados cuando se contempla scattering de interferencia.

REFERENCIAS

- 1) R. PAVIOTTI de CORCUERA and R. SOLANILLA (1969) J. Nucl. Energy (en imprenta).
- 2) R. PAVIOTTI de CORCUERA and R. SOLANILLA (1969) Publicación CNEA (en imprenta).
- 3) B.R. SEHGAL and R. GOLDSTEIN (1966) Nucl. Sci. Engng. 25, 174
- 4) Y. ISHIGURO (1968) Nucl. Sci. Engng. 32, 422.
- 5) DRESNER L. ((1960) Resonance Absorption in Nuclear Reactors, Pergamon Press, Inc. New York.
- 6) SETH K.K. and R.H. TABONY "A tabulation of the Doppler Integrals $\psi(x,t)$ and $\chi(x,t)$ " "United States Atomic Energy Commission Report TID - 21304, February 1964.
- 7) B.R. SEHGAL (1965) J. Nucl. Energy 19, 921.
- 8) M.H. Mc.KAY and J. P. POLLARD (1963) Nucl. Sci. Engng 16, 243.
- 9) N.M. STEEN (1969) Approximate $j(\theta, \beta)$ function "Trans. Am. Nucl. Soc. 12, 209.
- 10) SCHMIDT J.J. (1966) "Neutron Cross Sections for fast reactor Materials". KFK 120 (EANDC - E - 35 U).
- 11) STEHN JOHN R. et al (1965) Rep. BNL - 325 2do Edn, Suppl. 2.
- 12) YIFTAH et. al (1968) Rep. IA -1152 Israel Atomic Energy Commission.
- 13) MULLER (1968) "Fast Reactor Physics" Vol. I International Atomic Energy Agency . Vienna.
- 14) H. NELTRUP and J. MIKKELSEN. J. Nucl. Energy, 22, 601, (1968)