

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1972

01.72.06

CAP/1972/6

MÉTODO DE CÁLCULO PARA LA OBTENCIÓN DE PARÁMETROS DE DIFUSIÓN

J.E. Volkis* J.V. Lolich y H.J. Abbate**

Centro Atómico Bariloche
Instituto de Física "Dr. José A. Balseiro"
Comisión Nacional de Energía Atómica
Universidad Nacional de Cuyo
Bariloche, Argentina

RESUMEN:

Se desarrolló y puso en operación un sistema de programas para el cálculo teórico de los parámetros de difusión de neutrones en un medio moderador.

Estos son obtenidos a partir de las constantes de decaimiento de un pulso de neutrones en el medio en estudio, para distintas dimensiones del mismo.

El sistema incluye la generación de los datos nucleares involucrados en el cálculo y se utilizó para obtener los parámetros de difusión del agua a temperatura ambiente.

Las diferencias entre los valores de constante de decaimiento calculados y los medidos por otros autores resultaron menores que el 1%.

De la comparación con los cálculos realizados por otros autores con distintos métodos y diferentes modelos para el núcleo de dispersión del agua, se desprende que los valores obtenidos se encuentran en mejor acuerdo que aquéllos con los resultados experimentales.

* Becario de la Armada Argentina

** Ejército Argentino

Junio 1972
Bariloche -- Argentina

1 - INTRODUCCION.

Con el objeto de calcular en forma teórica los parámetros de difusión de neutrones en un medio moderador, se desarrolló y puso en operación un sistema de programas que obtiene dichos parámetros a partir de la variación de la constante de decaimiento de un pulso neutrónico con las dimensiones del medio.

El decaimiento temporal se estudia resolviendo la ecuación de Boltzman para el estado estacionario en aproximación de difusión, por un método que explicita la dependencia temporal implícita en dicha ecuación⁽¹⁾ y utilizando el método multigrupo para el tratamiento de la energía.

El sistema incluye la generación de los datos nucleares puntuales involucrados en el cálculo, tales como núcleo de dispersión y secciones eficaces de dispersión, transporte y total, a partir de los cuales se obtienen los correspondientes datos de grupo.

El método desarrollado se utilizó para el cálculo de los parámetros de difusión del agua a temperatura ambiente empleando el modelo Haywood II para la obtención del núcleo de dispersión de dicha sustancia.

2 - DESCRIPCION DEL METODO DE CALCULO.

En el gráfico 1 se representa un diagrama general del sistema, que comprende el cálculo de:

- Datos nucleares puntuales
- Datos nucleares de grupo
- Constante de decaimiento y parámetros de difusión.

2.1 - CALCULO DE DATOS NUCLEARES PUNTUALES.

El método de cálculo de los datos nucleares puntuales se encuentra esquematizado en el gráfico 2.

El núcleo de dispersión puede expresarse, en su forma más general, como:

$$\sigma(E' \rightarrow E, \mu) = \frac{\sigma_b}{4 \pi k T} \sqrt{\frac{E}{E'}} e^{-\beta/2} S(\alpha, \beta)$$

donde

E' - energía inicial del neutrón

E - energía final del neutrón

μ - coseno del ángulo de dispersión

A - masa del átomo dispersor

T - temperatura del medio

σ_b - sección eficaz del átomo dispersor ligado

$\beta = \frac{E - E'}{k T}$ - intercambio de energía en la colisión

$\alpha = \frac{1}{A k T} (E + E' - 2 \mu \sqrt{E E'})$ - intercambio de momento en la colisión

y $S(\alpha, \beta)$ es la "ley de dispersión", que se calcula con el programa GASKET⁽²⁾ en aproximación de dispersión incoherente, a partir de los distintos modos dinámicos del elemento dispersor y para una temperatura dada. Los modos dinámicos que contempla GASKET son:

- Traslación libre
- Difusión o movimiento browniano
- Vibraciones armónicas isotrópicas con un espectro continuo de frecuencias
- Vibraciones armónicas isotrópicas con un espectro discreto de frecuencias

siendo el movimiento total una combinación de estos modos.

Desarrollando en polinomios de Legendre el núcleo de dispersión resulta:

$$\sigma(E' \rightarrow E, \mu) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sigma^{\ell}(E' \rightarrow E) P_{\ell}(\mu)$$

donde

$$\sigma^{\ell}(E' \rightarrow E) = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu P_{\ell}(\mu) \sigma(E' \rightarrow E, \mu)$$

es el momento de Legendre de orden ℓ .

A partir del momento de orden 0 se obtiene la sección eficaz de dispersión, definida como:

$$\begin{aligned} \sigma_S(E) &= 2\pi \int_0^{\infty} dE' \int_{-1}^1 d\mu \sigma(E \rightarrow E', \mu) \\ &= \int_0^{\infty} dE' \sigma^0(E \rightarrow E') \end{aligned}$$

Por otro lado, a partir de $\sigma^1(E' \rightarrow E)$, puede obtenerse el valor medio del coseno del ángulo de dispersión, según:

$$\begin{aligned} \bar{\mu}(E) &= \frac{\int_0^{\infty} \int_{-1}^1 \sigma(E \rightarrow E', \mu) \mu d\mu dE'}{\int_0^{\infty} \int_{-1}^1 \sigma(E \rightarrow E', \mu) d\mu dE'} \\ &= \frac{\int_0^{\infty} \sigma^1(E \rightarrow E') dE'}{\sigma_S(E)} = \frac{\sigma^1(E)}{\sigma_S(E)} \end{aligned}$$

El núcleo de dispersión y sus momentos de Legendre, como así también $\sigma_S(E)$ y $\sigma^1(E)$ son calculados por el programa FLANGE 1 ⁽³⁾, para un conjunto de E y μ dados.

2.2 - CALCULO DE DATOS NUCLEARES DE GRUPO.

Tal como se indica en el gráfico 3, el programa NYRGRUP⁽⁴⁾ obtiene las matrices de transferencia entre grupos a partir de los momentos de Legendre citados, según la expresión:

$$\sigma_{g \rightarrow h}^{\ell} = \frac{\int_{E_{ih}}^{E_{sh}} dE \int_{E_{ig}}^{E_{sg}} dE' \sigma^{\ell}(E' \rightarrow E) \phi(E')}{\int_{E_{ig}}^{E_{sg}} \phi(E) dE}$$

donde E_{ig} y E_{sg} son los límites inferior y superior respectivamente del grupo g, y $\phi(E)$ es un espectro calculado por el método de Horowitz y Tretiakoff⁽⁵⁾, que utiliza el modelo de gas pesado para el cálculo del núcleo de dispersión.

NYRGRUP calcula la sección eficaz de absorción para cada grupo, cuando ésta sigue la ley $1/v$, en la forma:

$$\sigma_{ag} = \frac{\sigma_a(E_0) \sqrt{E_0} \int_g \phi(E) / \sqrt{E} dE}{\int_g \phi(E) dE}$$

donde $E_0 = 0.0253$ eV (energía correspondiente a $v_0 = 2200$ m/seg), y la sección eficaz de transporte, definida como:

$$\begin{aligned} \sigma_{tr}(E) &= \sigma_a(E) + \sigma_s(E) \left[1 - \bar{\mu}(E) \right] \\ &= \sigma_T(E) - \bar{\mu}(E) \sigma_s(E) \end{aligned}$$

que de acuerdo con lo visto en 2.1 puede escribirse:

$$\sigma_{tr}(E) = \sigma_T(E) - \sigma^1(E)$$

siendo $\sigma_T(E)$ la sección eficaz total del elemento dispersor.

Las secciones eficaces de dispersión, transporte y total son proporcionadas por NYRGRUP convenientemente pesadas según la expresión general:

$$\sigma_{xg} = \frac{\int_g \sigma_x(E) \phi(E) dE}{\int_g \phi(E) dE}$$

donde $\phi(E)$ es el espectro mencionado.

A partir de las secciones eficaces microscópicas correspondientes a los distintos elementos que constituyen el medio en estudio y de sus respectivas densidades nucleares, el programa NYR 233 ⁽⁶⁾ obtiene las constantes de grupo macroscópicas en la forma:

$$\Sigma_{xg} = \sum_i N_i \sigma_{xg}^i$$

2.3 - CALCULO DE LOS PARAMETROS DE DIFUSION.

En el gráfico 4 se muestra un esquema general de la última etapa del cálculo.

La constante de decaimiento de un pulso de neutrones termalizado en un cierto medio, se expresa usualmente como un desarrollo en potencias del "buckling" de la forma:

$$\alpha = \alpha_0 + D B^2 - C B^4 + F B^6$$

cuyos coeficientes o parámetros de difusión dependen de la composición, temperatura y densidad del medio.

El problema se reduce entonces al cálculo de α para distintos valores de B^2 , lo que se efectúa resolviendo la ecuación de Boltzman para el estado estacionario en aproximación de difusión. Esta ecuación tiene la forma:

$$\left[\Sigma_T(E) + D(E) B^2 \right] \phi(E) = \int_0^\infty \Sigma_S(E' \rightarrow E) \phi(E') dE' + S(E)$$

donde

$$D(E) = \frac{1}{3 \Sigma_{tr}(E)}$$

y $\Sigma_S (E' \rightarrow E)$ es el momento de Legendre macoscópico de orden 0 del núcleo de dispersión.

El tiempo es tratado por el método de frecuencia de colisión⁽¹⁾, que considera la dependencia temporal implícita en la ecuación anterior, y la explícita por un proceso de cálculo iterativo. Partiendo de un pulso de neutrones a tiempo cero, con un cierto espectro en energía, se obtiene el espectro o generación de la población neutrónica luego de cada colisión con los átomos del medio, representada por el núcleo de dispersión. De esta forma, puede obtenerse una completa descripción del espectro neutrónico en tiempo y energía, si se le atribuye a cada generación un tiempo de origen adecuado. Esto se logra definiendo una frecuencia de colisión dependiente de la energía cuya inversa se toma como el tiempo entre dos colisiones sucesivas, según la expresión:

$$t_n(E) = \frac{\int_0^\infty \left[t_{n-1}(E') + \frac{1}{v(E') \Sigma_S(E')} \right] \Sigma_S(E' \rightarrow E) \psi_{n-1}(E') dE'}{\int_0^\infty \Sigma_S(E' \rightarrow E) \psi_{n-1}(E') dE'}$$

donde $\psi_n(E)$ proviene de un desarrollo del flujo de la forma:

$$\phi(E, t) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(E) \right] e^{-\alpha(B^2) t}$$

Este cálculo es realizado por el programa NYRCAGE2, que utiliza el método multigrupo para el tratamiento de la energía y obtiene la constante de decaimiento α del pulso, a partir de la variación temporal calculada de la población neutrónica. El cálculo se repite para un cierto número de valores de B^2 en el rango de interés, y del ajuste de la curva α en función del "buckling" que realiza el programa NYRMIN⁽⁷⁾ por el método de cuadrados mínimos de segundo grado, se obtienen finalmente los parámetros de difusión. Opcionalmente puede realizarse el ajuste únicamente con los tres primeros parámetros.

3. PARAMETROS DE DIFUSION DEL AGUA. -

3.1 - DETALLES DEL CALCULO

El sistema descripto en 2. fue utilizado para el cálculo de los parámetros de difusión del agua a $t = 23^{\circ}\text{C}$.

La ley de dispersión del hidrógeno en agua se calculó con el modelo Haywood II^{(8), (9)}, que considera los siguientes modos dinámicos:

- Traslación libre de la molécula de masa 18.
- Oscilaciones armónicas torsionales de la molécula, con un espectro continuo de frecuencias que posee un pico centrado en aproximadamente 0.07 eV.
- Oscilaciones internas correspondientes a la variación de longitud de las uniones O-H ($\omega = 0.48$ eV) y a la variación del ángulo entre ellas ($\omega = 0.205$ eV).

La ley de dispersión del oxígeno se calculó con el modelo de traslación libre para un gas de masa 18.

Para el cálculo de las secciones eficaces puntuales, se utilizaron 99 valores de energía en el intervalo (0.0005 - 2) eV y 31 valores de μ en el intervalo $\left[(-1) - (1)\right]$, mientras que las constantes de grupo se calcularon para 30 grupos de energía en el intervalo (0.002 - 1.8) eV.

El cálculo de los parámetros de difusión se realizó con 96 valores de α correspondientes a valores de B^2 en el intervalo (0 - 1) cm^{-2} .

3.2 - DISCUSION DE RESULTADOS

3.2.1 - Comparación con valores medidos.

Según puede observarse en la tabla 1, las constantes de decaimiento calculadas difieren en menos del 1% de las medidas para igual valor del "buckling".

En la tabla 2 se comparan los valores calculados de los parámetros de difusión del agua con los obtenidos en distintas experiencias, pudiéndose acotar que:

- α_0 - Es superior a los valores medidos en un 3.3% como máximo.
- D - Difiere en un 2.3% como máximo, estando comprendido dentro del rango de los valores medidos si se tienen en cuenta los errores experimentales.
- C - En el caso de ajuste con 4 términos, la desviación tiene un valor máximo de 9.6%, y está dentro del rango de los valores medidos si son considerados con sus errores. Con respecto al valor de C obtenido del ajuste con 3 términos, las discrepancias entre los valores publicados son del 50% o más, lo que impide sacar alguna conclusión.
- F - Está en buen acuerdo con los valores experimentales.

Comparando por último la función α (B^2) calculada con diversas mediciones (Gráfico 5), se observa muy buen acuerdo con las mismas, principalmente con las publicadas por E. Gon y otros⁽¹²⁾.

3.2.2 - Comparación con valores calculados.

En la tabla 3 pueden observarse los valores publicados obtenidos por los métodos y con los modelos que en cada caso se indica.

La tendencia general es a proporcionar mayores valores para D y menores para C y F que los obtenidos en este trabajo, lo que implica un alejamiento de los valores experimentales.

Mucho más claramente puede apreciarse la mejor aproximación obtenida con el método expuesto en los gráficos 6 y 7, donde, para indicar el grado de acuerdo con los resultados experimentales, se incluyen las mediciones de Gon.

En el gráfico 6, se han representado los resultados obtenidos por un método que resuelve la ecuación de transporte dependiente del tiempo en aproximación de difusión⁽¹⁷⁾, utilizando dos modelos distintos para el núcleo de dispersión del agua: se nota en ambos casos un mayor apartamiento de los resul-

tados experimentales que el que se observa para nuestro cálculo.

En el gráfico 7 se compara con un método que resuelve la ecuación de transporte dependiente del tiempo, en aproximación $P_n^{(17)}$ (con $n = 11$), observándose la misma discrepancia anterior.

4. CONCLUSIONES.

- El presente método reproduce razonablemente bien los valores medidos de constantes de decaimiento.
- Permite obtener los parámetros de difusión en buen acuerdo con los valores medidos.
- La mejor aproximación obtenida con respecto a otros métodos de cálculo publicados, ratifica las bondades de la teoría de difusión para el tratamiento de estos problemas y las del modelo Haywood II para la representación de la dispersión de neutrones por el agua.

REFERENCIAS

1. P. d'OULTREMONT, 'Time dependent analysis of subcritical and nonmultiplying systems', Nucl. Sci. Eng., 37, 104 (1969).
2. J.U. KOPPEL, J.R. TRIPLETT, y Y.D. NALIBOFF, 'GASKET - A unified code for thermal neutron scattering', GA-7417, March 1967.
3. H.C. HONECK y Y.D. NALIBOFF, 'Integral Neutron Thermalization - Annual Summary Report', October 1964 through September 1965, Appendix E, GA-6824.
4. J.E. VOLKIS, 'NYRGRUP - Programa para el cálculo de constantes de grupo', ACNYR, CAB, CNEA, Marzo 1972.
5. K.H. BECKURTS and K. WIRTZ, 'Neutron Physics', Springer-Verlag, 1964, pág. 203.
6. M.J. ABBATE, 'NYR233 - Combinación de secciones eficaces microscópicas', ACNYR, CAB, CNEA, 1972.
7. J.V. LOLICH, 'NYRMIN', ACNYR, CAB, CNEA, 1972.
8. J.U. KOPPEL, 'Neutron scattering by hydrogenous moderators', GA-7055, March 1966.
9. J.U. KOPPEL y D.H. HOUSTON, 'Reference Manual for ENDF Thermal Neutron Scattering Data', GA-8774, December 1968.
10. W.M. LOPEZ y J.R. BEYSTER, Nucl. Sci. Eng., 12, 190, (1962).
11. M.C. PAIANO y S. PAIANO, 'Neutron Thermalization and Reactor Spectra', Proc. of a Symposium, Ann Arbor, IAEA, Vol. II, Pág. 395.
12. E. GON, L. LIDOFISKY y H. GOLDSTEIN, Trans. Am. Nucl. Soc., 8, 274 (1965).
13. E. MARTINHO y M.M. COSTA PAIVA, Nucl. Sci. Eng., 45, 3, 308 (1971).
14. D. COKINOS y E. MELKONIAN, Trans. Am. Nucl. Soc., 11, 2, 585 (1968).
15. W.H. DIO, Nukleonik, 1, 13 (1958).
16. E. ARAI y M. KUCHLE, Nukleonik, 7, 416 (1965).
17. W.W. CLENDENIN, Nucl. Sci. Eng., 18, 351 (1964).
18. A.K. GHATAK y H.C. HONECK, Nucl. Sci. Eng., 21, 227 (1965).
19. J. DORNING, Nucl. Sci. Eng., 41, 22 (1970).

T A B L A 1

CONSTANTES DE DECAIMIENTO
COMPARACION CON VALORES MEDIDOS

B^2	ESTE TRABAJO	VALORES MEDIDOS	DESVIAC.	REF.
cm^{-2}	seg^{-1}	seg^{-1}	%	
0.0385	6313	6271	0.67	11
0.0887	8107	8132	0.31	10
0.1472	10174	10230	0.55	12
0.2624	14178	14050	0.90	11
0.2647	14257	14330	0.51	10
0.3038	15595	15560	0.22	12
0.4889	21796	21830	0.16	12
0.4913	21875	21656	1.00	10
0.5500	23796	23990	0.82	12
0.9472	36263	36210	0.15	12

T A B L A 2

PARAMETROS DE DIFUSION DEL AGUA
PARA NEUTRONES TERMICOS (a 23°C)

COMPARACION CON VALORES MEDIDOS

REF.	α_0	D	C	F	METODO O TECNICA DE MEDICION
	seg ⁻¹	cm ² /seg	cm ⁴ /seg	cm ⁶ /seg	
11	4883±16	36414±202	5463±425	373±97	Neutrones pulsados
13		36434±180	3219±110		Medición de L en soluciones envenenadas
14	4891±14	36340±200	2926±500		Neutrones pulsados
12	4817±29	36111±650	3706±620		Neutrones pulsados
10	4762±23	37048±366	5122±776		Neutrones pulsados
15	4800±90	35570±600	3606±700	214±139	Neutrones pulsados
16	4782±15	36020±78	3426±170		Neutrones pulsados
-	4926	36171	3560	318	Este trabajo

T A B L A 3

PARAMETROS DE DIFUSION DEL AGUA
PARA NEUTRONES TERMICOS (a 23°C)

COMPARACION CON DISTINTOS METODOS DE CALCULO

REF.	α_0	D	C	F	M E T O D O D E C A L C U L O	
	seg ⁻¹	cm ² /seg	cm ⁴ /seg	cm ⁶ /seg	APROXIMACION	MODELO
17	4887	37970	3380	210	Transporte; P11	Nelkin
17	4887	37610	3470	180	Difusión dependiente de t	Nelkin
17	4887	38630	2730	250	Transporte; P11	Radkowsky
17	4887	38340	2990	240	Difusión dependiente de t	Radkowsky
18		37435	3367	169	Difusión dependiente de t	Nelkin
19		36457	2955	171	Transporte; P1	Nelkin anisotrópico
ESTE TRAB.	4926	36171	3560	318	Difusión, frecuencia de colisión	Haywood II

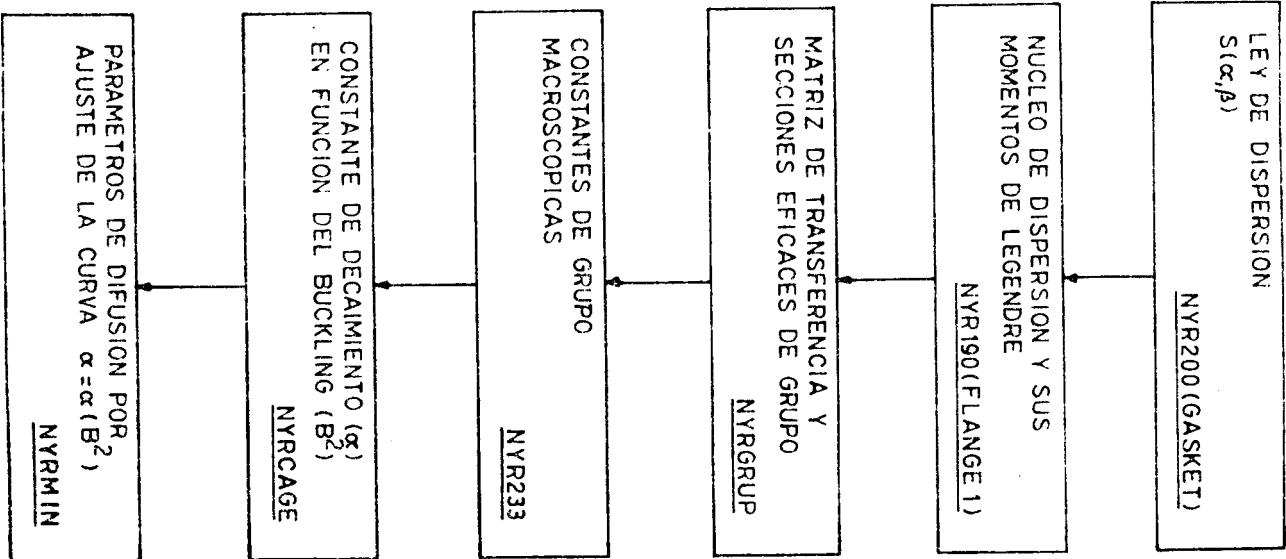
DIAGRAMA DEL SISTEMA DE CALCULO

CALCULO DE:

- DATOS NUCLEARES PUNTUALES.

- DATOS NUCLEARES DE GRUPO.

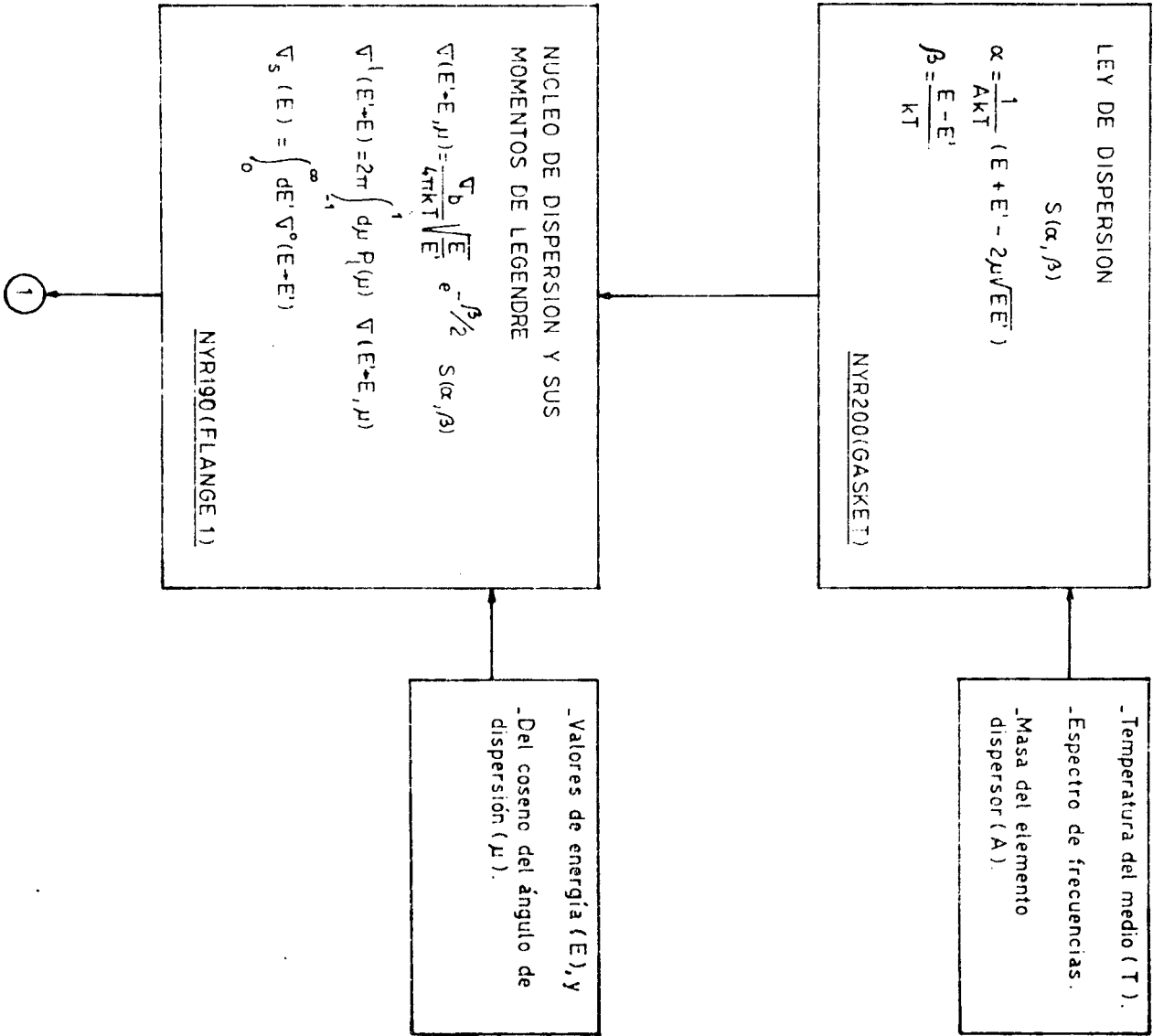
- PARAMETROS DE DIFUSION



CALCULO DE DATOS NUCLEARES PUNTUALES

CALCULO

DATOS



CALCULO DE DATOS NUCLEARES DE GRUPO

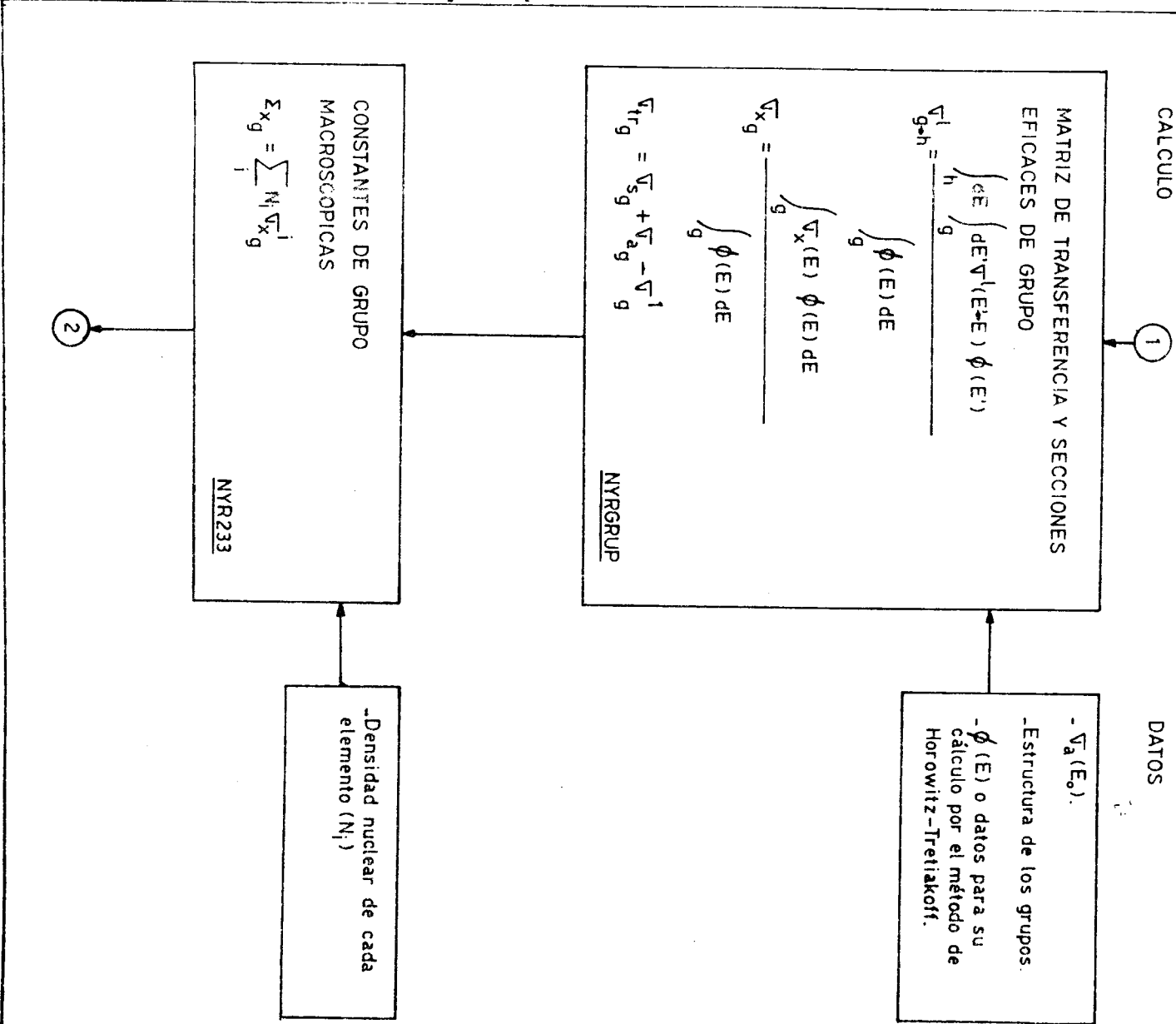


GRAFICO N°3

CALCULO DE LOS PARAMETROS DE DIFUSION

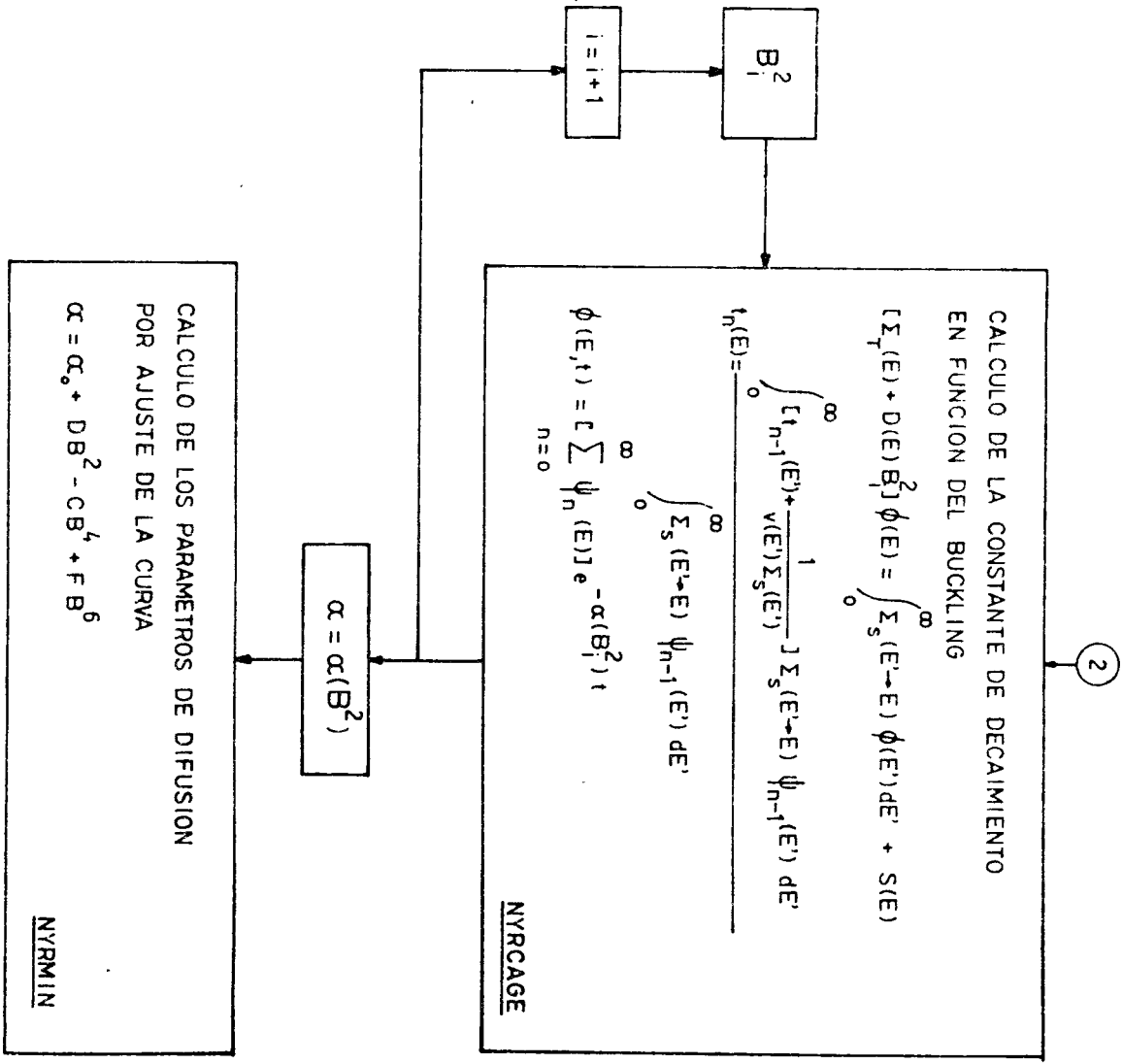
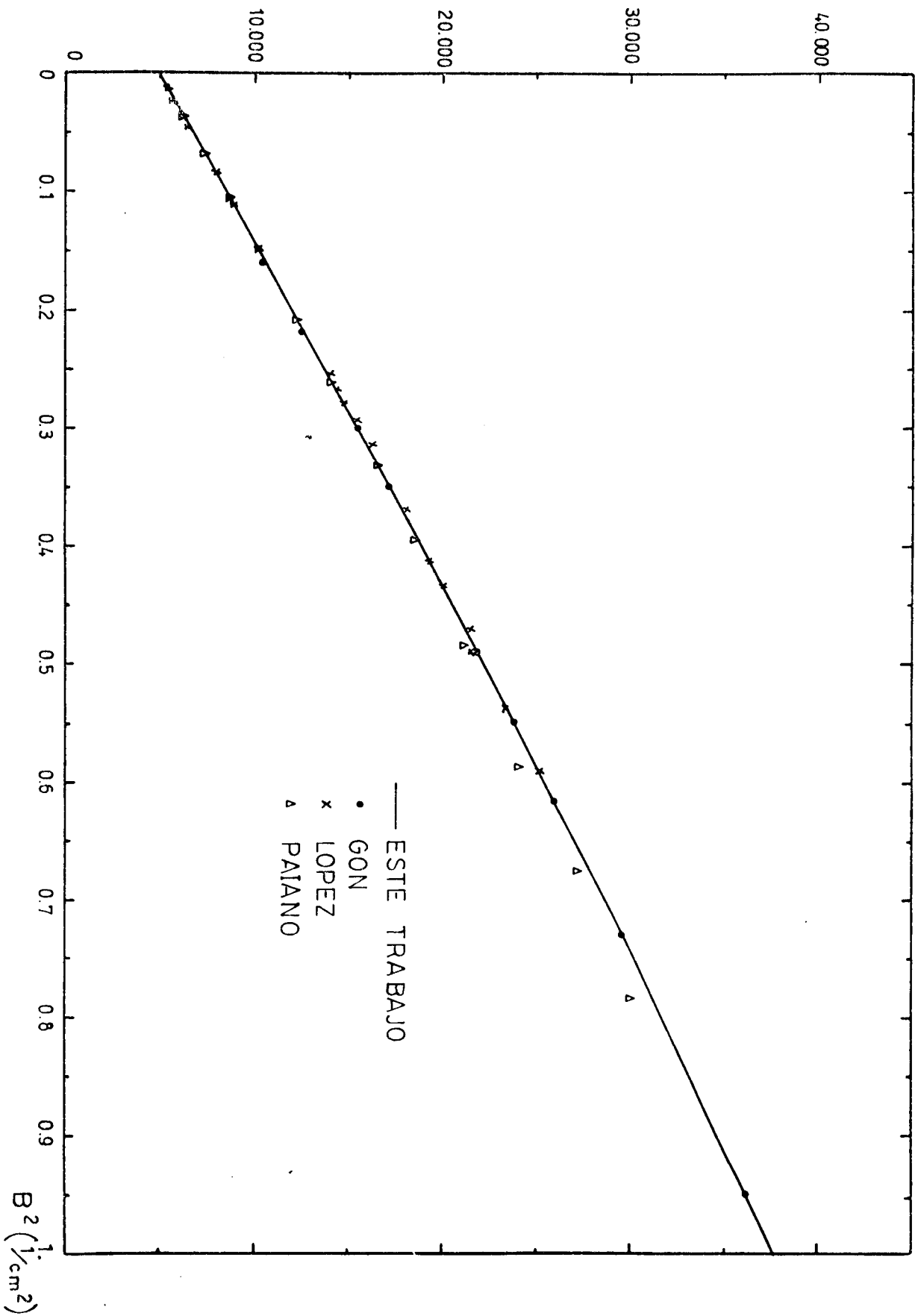


GRAFICO N°4

α (seg⁻¹)

GRAFICO Nº 5



α (seg⁻¹),

GRAFICO Nº 6

