

KFK-384

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM  
KARLSRUHE**

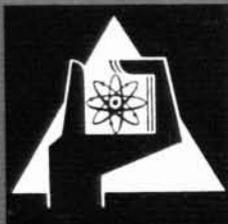
Dezember 1965

KFK 384

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Interpolationsformel für Selbstabschirmungsfaktoren

E. Kiefhaber, K. Ott



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.  
KARLSRUHE

Dezember 1965

K F K 384

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Interpolationsformel für Selbstabschirmungsfaktoren

von

E. Kiefhaber und K. Ott x)

- x) Diese Arbeit wurde im Rahmen der Assoziation zwischen der Europäischen Atomgemeinschaft und der Gesellschaft für Kernforschung mbH., Karlsruhe, auf dem Gebiet der schnellen Reaktoren durchgeführt.

Gesellschaft für Kernforschung m.b.H., Karlsruhe

## I. Einführung

Die Theorie der Berechnung der energetischen Selbstabschirmung von Resonanzen in Neutronenwirkungsquerschnitten ist mittlerweile gut entwickelt und wird fast überall in nahezu derselben Weise benutzt. Dagegen ist die Art der praktischen Berücksichtigung der Selbstabschirmung in Multigruppenberechnungen von Reaktoren fast überall verschieden. In der vorliegenden Arbeit wird das Karlsruher Verfahren der praktischen Berücksichtigung der Selbstabschirmung beschrieben (III). In Abschnitt II werden die Argumente angegeben, die zu seiner Auswahl führten. Im IV-ten Abschnitt wird die Genauigkeit des Verfahrens diskutiert. Im Anhang sind die auf diesem Verfahren basierenden Erweiterungen beschrieben, die vor der Benutzung des russischen Gruppenkonstantensatzes durchgeführt wurden.

Die Selbstabschirmung wird, wie in den meisten Sätzen von Gruppenkonstanten, in Form von Faktoren an den nicht abgeschirmten Gruppenkonstanten berücksichtigt (vgl. z.B. [ 1 ], [ 2 ], [ 3 ] und [ 5 ]). Diese Faktoren hängen, außer von dem betreffenden Isotop, von dem auf die Konzentration der "Aufisotope" bezogenen Potentialquerschnitt der Mischung der betrachteten Reaktorzone ab. Ist  $N$  die Anzahl der "Aufkerne" pro  $\text{cm}^3$  und  $\Sigma_{\text{pot}}$  der makroskopische Potentialquerschnitt der Materialmischung, dann bezeichnet

$$(1) \quad \sigma_{\text{pot}} = \frac{\Sigma_{\text{pot}}}{N}$$

den Potentialquerschnitt pro Aufkern. Zunächst hängen die Selbstabschirmungsfaktoren von  $\sigma_{\text{pot}}$  nach (1) ab. Man kann jedoch wie in [ 2 ] statt  $\sigma_{\text{pot}}$  auch

$$(2) \quad \sigma_{\circ} = \sigma_{\text{pot}} - \sigma_{\text{p}}$$

eingeführen, wenn man den Potentialquerschnitt der Aufkernsorte ( $\sigma_{\text{p}}$ ) abzieht. Der Wertebereich von  $\sigma_{\text{pot}}$  liegt zwischen  $\sigma_{\text{p}}$  und  $\infty$ , der von  $\sigma_{\circ}$  zwischen 0 und  $\infty$ , wobei jeweils der erste Wert für die reine Aufsubstanz gilt, der letzte für unendliche Verdünnung [  $N \rightarrow 0$  in (1) ].

Damit schreiben sich alle mikroskopischen Gruppenkonstanten in der Form

$$(3) \quad \sigma(\sigma_0, T) = c_{ns} \cdot f(\sigma_0, T),$$

worin  $\sigma_{ns}$  die nicht selbstabgeschirmte Gruppenkonstante bezeichnet:

$$(4) \quad \sigma_{ns} = \sigma(\sigma_0 = \infty, T) \quad \text{für alle Temperaturen } T(^{\circ}\text{K})$$

$f(\sigma_0, T)$  ist der Selbstabschirmfaktor. Im folgenden wird nur die Interpolation in  $\sigma_0$  bei konstantem  $T$  behandelt. Deshalb wird  $T$  der Einfachheit halber aus der Bezeichnung fortgelassen.

Am Rande sei noch vermerkt, daß die räumliche Resonanzselbstabschirmung und der Einfluß benachbarter Resonanzserien in der Berechnungsvorschrift für  $\sigma_0$  zu berücksichtigen wären. Darauf wird im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht eingegangen.

## II. Herleitung einer Näherungsformel

$f(\sigma_0, T) \equiv f(\sigma_0)$  läßt sich streng berechnen, wenn man die folgenden vereinfachenden Annahmen macht:

1. Betrachtung einer einzigen Resonanz.
2. Beschränkung auf die natürliche Linienform ( $T = 0$ ).
3. Narrow-resonance-Approximation.

Damit ergibt sich für das Resonanzintegral der betrachteten einzelnen Resonanz (vgl. z.B. L. Dresner [4]):

$$(5) \quad I(\sigma_{pot}, T=0) = \frac{1}{2} \frac{\pi \sigma_{pot} \sigma_m}{\sqrt{\sigma_{pot}(\sigma_{pot} + \sigma_m)}} \frac{\Gamma_{\gamma}}{E_0}$$

und für unendliche Verdünnung (d.h. für  $\sigma_{pot} \rightarrow \infty$ ):

$$(6) \quad I(\infty, T=0) = \frac{\pi}{2} c_m \frac{\Gamma_{\gamma}}{E_0}$$

Darin bezeichnet  $\Gamma_{\gamma}$  die Strahlungsbreite,  $E_0$  die Lage der Resonanz

auf der Energieachse.  $\sigma_m$  (bei Dresner  $\sigma_o$  genannt) ist der totale Wirkungsquerschnitt in der Resonanzspitze für  $T = 0$ .

Der Quotient von (5) und (6) gibt in dem hier behandelten einfachen Fall den Selbstabschirmungsfaktor:

$$(7) \quad f(\sigma_o, T=0) = \sqrt{\frac{\sigma_{pot}}{\sigma_{pot} + \sigma_m}} = \sqrt{\frac{\sigma_o + \sigma_p}{\sigma_o + \sigma_m + \sigma_p}}$$

Da die Voraussetzungen 1. und 2. nicht erfüllt sind, kann (7) nicht in Strenge gelten. Man darf jedoch erwarten, daß die Form der Abhängigkeit von  $\sigma_o$  erhalten bleibt. Man wird deshalb eine brauchbare Näherungsformel erhalten, wenn man die neben  $\sigma_o$  im Zähler und Nenner vorkommenden Konstanten geeignet bestimmt.

### III. Formulierung der Interpolationsvorschrift

In Anlehnung an (7) wählen wir als Interpolationsformel:

$$(8) \quad f(\sigma_o) = \sqrt{\frac{\sigma_o + a}{\sigma_o + b}}$$

Darin werden a und b aus den beiden, das Intervall begrenzenden, Stützpunkten bestimmt ( $f_1 = f(\sigma_{o;1})$  und  $f_2 = f(\sigma_{o;2})$ ):

$$(8b) \quad b = \frac{\sigma_{o;2}(1-f_2^2) - \sigma_{o;1}(1-f_1^2)}{f_2^2 - f_1^2}$$

$$(8a) \quad a = f_1^2 b - \sigma_{o;1}(1-f_1^2)$$

Die Formel (8) stellt nach (7) mit geeigneten a und b für den ganzen  $\sigma_o$ -Bereich eine Näherungsformel dar. Benützt man (8) jedoch nicht als Näherungsformel sondern "nur" zur Interpolation, so darf man erwarten, daß man schon mit einem weitmaschigen Netz von Stützpunkten eine hohe Genauigkeit erhält. Für die praktische Anwendung bedeutet es weiterhin eine wesentliche Vereinfachung, wenn dieses Netz von Stützpunkten von der Kernsorte, dem Wirkungsquerschnittstyp und von der Lage der Energiegruppe unabhängig ist. Wir wählen deshalb ganz generell als Stützpunktnetz:

$$(9) \quad \sigma_0 = 0; 10; 10^2; 10^3; 10^4; 10^5; 10^6 \text{ und } 10^7 \text{ barn.}$$

Die obere Grenze  $10^7$  ist so gewählt, daß die höchste vorkommende Resonanz keine merkliche Selbstabschirmung mehr zeigt.

Die Vorschrift (8) ist noch nicht vollständig, da es drei Ausnahmefälle gibt, in denen (8) nicht unmittelbar angewendet werden kann.

Sonderfälle:

1. Beim Fehlen von Resonanzen tritt keine Selbstabschirmung auf und  $f(\sigma_0) \equiv 1$  für alle  $\sigma_0$ . Für die Behandlung dieses Falls ist keine Sonderregelung erforderlich, da er formal in den Sonderfällen 2 und 3 mit enthalten ist.

Die beiden anderen Sonderfälle haben wegen der Monotonie von  $f(\sigma_0)$  ihre Ursache in Rundungseffekten, wie sie insbesondere bei der Angabe von nur wenigen gültigen Ziffern vorkommen:

2.  $f_1 = f_2$  für  $\sigma_{0;1} < \sigma_{0;2}$

In diesem Fall wird für  $\sigma_0$  aus  $\sigma_{0;1} \leq \sigma_0 \leq \sigma_{0;2}$

$f(\sigma_0) = f_1 = f_2$  gesetzt.

Für  $f_1 = f_2 = 1$  ist dies exakt. Ist  $f_1 = f_2 \neq 1$ , dann ist der Fehler wegen der Monotonie der f-Faktoren höchstens gleich den Rundungsfehlern an den Stützpunkten.

3.  $f_1 \neq 1; f_2 = 1$  bei endlichem  $\sigma_{0;2}$ .

Diese durch Aufrundung erzeugte Situation kann mit (8) nicht beschrieben werden. Sie kann aber praktisch auch nur dann vorkommen, wenn  $f_1$  ohnehin schon nahe an 1 liegt. Dann ist die Selbstabschirmung klein und es ist ausreichend, eine vereinfachte Version der Formel (8) zu verwenden:

$$(9a) \quad f = \sqrt{\frac{\sigma_0 + 10 \text{ barn}}{\sigma_0 + b}}$$

worin für a ein für alle Resonanzkerne nicht unvernünftiger Wert von 10 barn eingesetzt ist. Da der 3. Sonderfall nur bei hohem  $\sigma_0$  auftreten kann, kommt es auf den genauen Wert von a nicht an. Der Parameter b wird aus dem Wert  $f_1$  an der Stelle  $\sigma_{0;1}$  bestimmt:

$$(9b) \quad b = \frac{\sigma_{0;1} + 10 \text{ barn}}{f_1^2} - \sigma_{0;1}$$

( $f_1$  ist immer  $\neq 0$ ). Dabei tritt an der Stelle  $\sigma_2$  eine Unstetigkeit auf, die mit dem Rundungsfehler vergleichbar ist. <sup>+)</sup>

#### IV. Genauigkeit der Interpolationsformel

Zur Prüfung der Genauigkeit der Interpolationsformel wird die f-Tabelle des russischen Gruppenkonstantensatzes [ 2 ] herangezogen. Die Stützpunkte (in  $\sigma_0$ ) liegen im allgemeinen um einen Faktor 10 auseinander. Der Vergleich der graphischen Darstellung mit den Ergebnissen der Interpolationsformel führt zu keinem Test, da die Unsicherheit, mit der eine Kurve graphisch durch die genannten Stützpunkte gelegt werden kann, wahrscheinlich größer ist, als die Ungenauigkeit der Interpolationsformel.

Deshalb werden Stützpunkte ausgelassen und die interpolierten Werte an den ausgelassenen Stützpunkten geprüft. Zusammengefaßt ergab sich dabei:

- A) Es gibt Fälle, in denen es möglich ist, alle Tabellenwerte mit Hilfe eines einzigen Parametersatzes (a, b) wiederzugeben. In vielen Fällen ist dies allerdings unmöglich.
- B) In den meisten Fällen, in denen in den Tabellen die f-Faktoren zu  $\sigma_0 = 1$  barn angegeben sind, liefert die angegebene Interpolationsformel ziemlich gut den richtigen Wert, wenn man als Stützstellen  $\sigma_{0;1} = 0$  barn und  $\sigma_{0;2} = 10$  barn verwendet.
- C) Bei der Interpolation in dem weiten Bereich  $\sigma_{0;1} = 10$  barn  $\sigma_{0;2} = 1000$  barn erhält man in vielen Fällen recht gut den Tabellenwert bei  $\sigma_0 = 100$  barn. Es ist daher zu erwarten, daß die Formel bei der Interpolation in engeren Bereichen ebenfalls gute Ergebnisse für die interpolierten f-Faktoren liefert.

Alles in allem zeigten die Prüfungen, daß die angegebene Interpolationsvorschrift in der Lage ist, die Selbstabschirmfaktoren mit mehr als ausreichender Genauigkeit zu beschreiben. Stellenweise Schwierigkeiten waren meist leicht auf zu großzügige Aufrundungen in Tabellenwerten zurückzuführen.

---

<sup>+)</sup> Eine Detailuntersuchung zeigte, daß die Unstetigkeit im schlimmsten Fall, der 1.05eV-Resonanz von Pu<sup>240</sup> bei  $\sigma_2 = 10^7$  nur 1% beträgt.

Anhang:

Extrapolation der Selbstabschirmfaktoren im russischen Gruppenkonstantensatz [ 2 ] .

Die Tabellenwerte in [ 2 ] sind für die bei einem durchschnittlichen Reaktor vorkommenden Konzentrationen gedacht. Extrapolation nach oben und unten ist der Vollständigkeit halber notwendig; die zugehörigen  $\sigma_0$ -Werte beziehen sich jedoch auf selten auftretende Konzentrationen. Sie werden deshalb für normale Reaktoren kaum benötigt; eventuelle Ungenauigkeiten bei der Extrapolation werden daher keine allzu großen Auswirkungen haben.

Zur Extrapolation soll die bei der Interpolation benutzte Formel verwendet werden, mit der sehr zufriedenstellende Ergebnisse gewonnen wurden. Prinzipiell könnten zur Extrapolation die Ein- und Zwei-Parameter-Formeln benutzt werden. Es zeigt sich jedoch, daß zur Extrapolation nach unten die Zwei-Parameter-Formel ungeeignet ist, da

1. negative Werte von a und b vorkommen können, d.h. der berechnete f-Faktor sich zu Null ergibt für einen Wert von  $\sigma_{0;G} > 0$  - für  $\sigma_0 < \sigma_{0;G}$  wird f dann imaginär - , und da
- 2, bei Anpassung der beiden Parameter a und b bei hohen  $\sigma_0$ -Werten die genauen Werte der Parameter stark von den Rundungsfehlern der Tabellenwerte abhängen können und deshalb für eine Extrapolation nach unten unbrauchbar sind. Damit bleibt zur Extrapolation nach unten lediglich die Ein-Parameter-Formel.

$$(10) \quad f = \sqrt{\frac{\sigma_0 + a}{\sigma_0 + b}}$$

$$(11) \quad b = \frac{\sigma_{0;1} + a}{f_1^2} - \sigma_{0;1} \quad , \quad a \text{ vorgegeben.}$$

Eine Extrapolation nach oben mit der Zwei-Parameter-Formel ist in jedem Fall möglich, in dem die Bedingung

$0 \leq f(\sigma_{0;1}) < f(\sigma_{0;2}) < 1$  für  $0 \leq \sigma_{0;1} < \sigma_{0;2} < \infty$  erfüllt ist, da dann a und b größer als  $-\sigma_{0;1}$  sind. Es könnten höchstens

die Rundungsfehler der Tabellenwerte ziemlich ungenaue Werte für a und b bewirken, wenn von relativ kleinen  $\sigma_0$ -Werten, z.B.  $\sigma_0 \leq 100$ , nach oben extrapoliert werden muß und die zur Anpassung verwendeten f-Werte sich nur wenig unterscheiden und außerdem relativ weit von 1 entfernt sind. Die Ergebnisse der Ein-Parameter-Formel waren in den meisten nachgeprüften Fällen nur wenig schlechter als die der Zwei-Parameter-Formel - in einigen auch besser als diese. Insgesamt erscheint es daher zweckmäßig, für alle Extrapolationen die Ein-Parameter-Formel zu verwenden, besonders wenn man berücksichtigt, daß dann einige Sonderfälle, die bei Benutzung der Zwei-Parameter-Formel einen Übergang zur Ein-Parameter-Formel erfordert hätten, automatisch wegfallen (z.B. 1. wenn nur ein Tabellenwert vorhanden ist, 2. wenn die beiden letzten Tabellenwerte untereinander gleich, aber verschieden von 1 sind und 3. wenn  $f(\sigma_{0;1}) \neq 1$   $f(\sigma_{0;2}) = 1$  ist).

#### Ausnahmefälle

Bei der Benutzung der Ein-Parameter-Formel zur Extrapolation sind bei der Erstellung der f-Faktoren folgende Ausnahmefälle zu beachten (auf die Wahl des Parameters a wird weiter unten eingegangen):

1.) Bei Extrapolation nach unten:

$\alpha$ )  $f(\sigma_{0;\min}) = 1$ , wobei  $\sigma_{\min}$  der kleinste angegebene Tabellenwert sein soll. Dann ist für alle  $\sigma_0 \leq \sigma_{0;\min}$  die Funktion  $f(\sigma_0) = 1$  zu setzen.

$\beta$ )  $f(\sigma_{\min}) = 0$ , dann ist für alle  $\sigma_0 \leq \sigma_{0;\min}$  die Funktion  $f(\sigma_0) = 0$  zu setzen, wobei zu bemerken ist, daß dieser Fall wahrscheinlich nie auftreten wird.

2.) Bei Extrapolation nach oben:

$\alpha$ )  $f(\sigma_{0;\min}) = f(\sigma_0) \equiv 1$  für alle angegebenen Tabellenwerte von  $\sigma_0$ . Dann ist auch bei der Extrapolation nach oben  $f(\sigma_0) = 1$  zu setzen.

$\beta$ ) Bei der Extrapolation nach oben ist an dem letzten Tabellenwert, der von 1 verschieden ist, eine Ein-Parameter-Formel anzupassen und damit zu höheren Werten von  $\sigma_0$  zu extrapolieren. Dabei müssen gegebenenfalls f-Faktoren aus den Tabellen, die gleich 1 waren, durch die so berechneten Werte ersetzt werden. Dieses Vorgehen bringt zwei Vorteile:

- A) Bei der Interpolation treten bis auf die Stelle  $\sigma_0 = 10^7$  barn keine Unstetigkeiten auf. Diese Unstetigkeiten wären auch bei der ausschließlichen Verwendung der Tabellenwerte im allgemeinen gering ( $\lesssim 2 - 3\%$ ). Schlimmstenfalls könnten sie jedoch bei der Berechnung von Differenzreaktoren zu Interpretationsschwierigkeiten führen, wenn nämlich die Zusammensetzungen derart sind, daß  $\sigma_0$  einmal dicht oberhalb und einmal dicht unterhalb der Unstetigkeitsstelle liegen würde.
- B) Da die Unstetigkeitsstellen bei der Interpolation mit den Tabellenwerten, wie erwähnt, ziemlich klein sind, macht man beim Ersetzen der f-Faktoren, die gleich 1 sind, durch die neu berechneten Werte meist keine großen Fehler - oft innerhalb der Rundungsfehler. In einigen Fällen z.B. Spaltprodukte U 235 21. Gruppe in [ 2 ] ist der Anstieg des f-Faktors auf 1 jedoch unglaublich steil -  $f(10^3) = 0,56$ ;  $f(10^4) = 1$ . In diesen Fällen ist anzunehmen, daß der mit der Ein-Parameter-Formel extrapolierte Wert richtiger als der Tabellenwert sein wird.

#### Zur Wahl des Parameters a

Wie bei der Interpolation erwähnt wurde, ist laut Ableitung der Formel für den Fall  $T = 0$ , der Parameter a mit dem Potentialquerschnitt des Aufatoms zu identifizieren. Deshalb wird in dem Energiebereich, in dem die f-Faktoren benötigt werden, für jedes Material ein Potentialquerschnitt angegeben. Bei der Extrapolation wird der Parameter a dann gleich diesem Potentialquerschnitt gesetzt. Da für jedes Material im gesamten Energiebereich nur ein Potentialquerschnitt  $\sigma_p$  angegeben wird und der Bereich u.U. ziemlich groß sein kann, ist bei der Wahl von  $\sigma_p$  folgendes zu beachten:

Sind die f-Werte nahe an 1 so bedeutet dies für  $\sigma_{0;1}$ -Werte  $\lesssim 100$ , daß a und b etwa gleich groß sind; eine Änderung von a bewirkt infolgedessen eine ungefähr gleich große Änderung von b (der Wert von  $f_1$  bleibt konstant!), sodaß für alle  $\sigma_0$ -Werte der Quotient  $(\sigma_0 + a)/(\sigma_0 + b)$  sich dadurch nur wenig ändert. Ist jedoch der zum Anpassen verwendete f-Wert  $f_1 \ll 1$ , dann bewirkt eine kleine Änderung von a bei nicht zu großen Werten von  $\sigma_{0;1}$  wegen  $b = -\sigma_{0;1} + (a + \sigma_{0;1})/f_{0;1}$ <sup>2</sup> eine relativ große Änderung von b. Der Quotient  $(\sigma_0 + a)/(\sigma_0 + b)$

und damit der f-Faktor ist bei anderen  $\sigma_o$ -Werten, die bei der Extrapolation auftreten, wesentlich stärker vom genauen Wert von  $a$  abhängig als im vorigen Fall mit  $f_1 \approx 1$ . Daraus leitet sich die Forderung ab, daß, so weit möglich, für  $a$  ungefähr der Potentialquerschnitt in derjenigen Energiegruppe einzusetzen ist, die den kleinsten f-Wert besitzt, von dem aus extrapoliert werden muß. Die Zahlenwerte dieser Potentialquerschnitte sind in Tab. 1 zu finden.

Tabelle 1

Mat	$\sigma_{pot}$	Mat	$\sigma_{pot}$
H	20,3	Cu	6,80
D	3,40	Zr	6,20
Li <sup>6</sup>	0,90	Nb	6,20
Li <sup>7</sup>	1,10	Mo	5,50
Be	2,20	Ta	6,0
B <sup>10</sup>	3,30	W	5,0
B <sup>11</sup>	3,80	Re	14,0
C	0,85	Pb	5,35
N	1,79	Bi	9,0
O	3,50	Th232	12,0
Na	2,40	U233	12,5
Mg	3,50	U234	10,0
Al	1,40	U235	12,0
Si	2,20	U236	10,0
K	2,00	U238	10,7
Ca	3,00	Pu239	10,5
Ti	4,20	Pu240	10,0
V	4,90	Pu241	10,0
Cr	4,20	Pu242	10,0
Fe	8,7	Spaltprod. U233	15,6
Ni	8,0	" U235	16,4
		" Pu239	14,7

Wir danken Herrn Dr. J.J. Schmidt für seine Hilfe bei der Bestimmung der Potentialquerschnitte der Tabelle 1.

Literatur:

- [ 1 ] G.E. Hansen, W.H. Roach:  
Six and Sixteen Group Cross Sections for Fast and  
Intermediate Critical Assemblies LAMS-2543.
- [ 2 ] L.P. Abagjan, N.O. Bazazjenc, I.I. Bondarenko, M.N. Nikolaev:  
Gruppenkonstanten schneller und intermediärer Neutronen  
für die Berechnung von Kernreaktoren, KFK - tr - 144.  
Originalliteratur: M. Gosatomisdat, 1964
- [ 3 ] ANL Multigroup Constant Code (MCC),  
private Mitteilung.
- [ 4 ] L. Dresner:  
Resonance Absorption in Nuclear Reactors, International  
Series of Monographs on Nuclear Energy.  
Pergamon Press, 1960.
- [ 5 ] J.L. Rowlands  
ABEW - M 398, Internal Winfrith Memorandum.