

PERHITUNGAN TAMPANG LINTANG PELEBARAN DOPPLER DALAM PEMROSESAN DATA NUKLIR DENGAN PROGRAM KOMPUTER NJOY

Riyanto Raharjo

Pusat Pengembangan Informatika - Badan Tenaga Atom Nasional

ABSTRAK

PERHITUNGAN TAMPANG LINTANG PELEBARAN DOPPLER DALAM PEMROSESAN DATA NUKLIR DENGAN PROGRAM KOMPUTER NJOY. Pemrosesan data nuklir adalah suatu langkah yang mengawali perhitungan fisika reaktor. Umumnya data nuklir diproses untuk menyiapkan pustaka data nuklir multigrup yang merupakan bagian yang tak terpisahkan dari program komputer untuk perhitungan fisika reaktor. Salahsatu data nuklir yang diperlukan adalah tampang lintang interaksi pada berbagai suhu. Dikenal konsep pelebaran Doppler untuk menggambarkan fenomena perubahan nilai tampang lintang sebagai fungsi suhu medium. Dan untuk menghitung tampang lintang yang mengalami pelebaran Doppler tersebut, terdapat dua metode: metode pelebaran kernel dan metode psi-chi. Dalam penelitian sederhana ini dilakukan pengujian terhadap kedua metode ini, dengan memanfaatkan suatu program komputer untuk pemrosesan data nuklir bernama NJOY89. Dari hasil perhitungan dapat disimpulkan bahwa metode psi-chi mempunyai beberapa kelemahan, walaupun waktu perhitungannya jauh lebih singkat daripada metode pelebaran kernel.

ABSTRACT

CALCULATION OF DOPPLER BROADENED CROSS SECTION IN NUCLEAR DATA PROCESSING USING NJOY COMPUTER CODE. Nuclear data processing is a step prior to reactor physics calculations. Usually the nuclear data is processed in order to prepare a multigroup nuclear data library, which is an important component of a reactor physics code. One of the nuclear data needed by the code is the interaction cross sections at different temperatures. The concept of Doppler broadening is known to describe the temperature dependency of cross section. There are two methods to actually calculate the Doppler broadened cross section, i.e. the kernel broadening and the psi-chi methods. In this work, an attempt to compare the two methods had been made utilizing the nuclear data processing code NJOY89. The result showed that the psi-chi method has some disadvantages, even though it is superior in terms of computing time as compared to the kernel broadening method.

PENDAHULUAN

Perhitungan fisika reaktor, khususnya di dalam teras reaktor nuklir, pada dasarnya bertujuan menganalisis interaksi antara zarah nuklir dalam teras (neutron, foton, zarah bermuatan) dengan bahan-bahan dalam medium teras. Mekanisme interaksi umumnya dinyatakan dalam bentuk persamaan Boltzman atau persamaan *transport* zarah. Dari penyelesaian persamaan ini dapat diketahui agihan (distribusi) zarah-zarah tersebut di dalam teras. Selanjutnya dari agihan tersebut dapat dihitung berbagai besaran penting seperti faktor pelipatan statis dan dinamis, laju deposisi energi, laju perubahan nuklida dalam teras, dan sebagainya. Dengan demikian jelaslah bahwa perhitungan fisika reaktor tak mungkin dapat dilakukan tanpa tersedianya data tentang kebolehdadian interaksi antara zarah tersebut de-

ngan nuklida-nuklida dalam teras, yang secara umum disebut sebagai data nuklir.

Tersedianya data nuklir untuk keperluan perhitungan fisika reaktor merupakan hasil kerja terus-menerus di bidang fisika nuklir, baik dalam segi eksperimen maupun teori. Pengukuran nilai tampang lintang diferensial umumnya tak dapat mencakup seluruh jangkauan energi yang diperlukan dalam perhitungan fisika reaktor. Oleh karenanya peranan fisika nuklir teori yang mampu memperkirakan nilai tampang lintang sebagai fungsi energi berdasarkan berbagai model nuklir mutlak diperlukan. Setelah data eksperimen dan teoritis tersebut dievaluasi untuk mendapatkan nilai-nilai yang terbaik, kemudian data tersebut disusun dengan format tertentu sehingga terbentuklah apa yang dikenal sebagai Pustaka Data

pelebaran Doppler. Konsep fisika ini digunakan dalam pemrosesan data nuklir untuk menghitung nilai tampang lintang interaksi sebagai fungsi suhu.

Data tampang lintang dalam pustaka data nuklir terevaluasi umumnya disajikan sebagai fungsi energi proyektil pada suhu medium 0°K, yang berarti inti sasaran diandaikan berada dalam keadaan diam mutlak. Sedangkan persamaan *transport* mengenai interaksi proyektil dengan inti dinyatakan dalam kerangka acuan laboratorium. Untuk dapat memanfaatkan data tampang lintang dalam penyelesaian persamaan *transport* diperlukan tampang lintang efektif pada suhu medium yang dihitung dalam kerangka acuan laboratorium. Tampang lintang efektif tersebut dikenal sebagai tampang lintang pelebaran Doppler.

Dalam perhitungan tampang lintang pelebaran Doppler digunakan prinsip konservasi laju reaksi. Artinya, laju reaksi dalam suatu kerangka acuan adalah sama dengan laju reaksi bila ditinjau dari kerangka acuan yang lain. Bila suatu medium mengandung inti sasaran dengan agihan kecepatan tertentu, maka kelajuan relatif (V_r) antara seberkas neutron energitunggal yang berinteraksi dengan inti sasaran tersebut akan teragih/terdistribusi pula. Berdasarkan prinsip konservasi laju reaksi, maka laju reaksi per unit neutron yang teramati adalah:

$$V_{\sigma}(V,T) = \int_0^{\infty} V_r \sigma(V_r, 0) P(V_T) dV_T \quad (1)$$

V = kelajuan neutron/proyektil; V_T = kelajuan inti sasaran; V_r = kelajuan relatif ($V_r = |V - V_T|$); $\sigma(V,T)$ = tampang lintang pelebaran Doppler pada suhu T ; $\sigma(V_r, 0)$ = tampang lintang pada suhu 0°K (dari pustaka data nuklir); $P(V_T) dV_T$ = agihan kecepatan ternormalisasi dari inti sasaran.

Dengan mengandaikan bahwa agihan inti sasaran dalam medium mengikuti agihan Maxwell yang bersifat isotropis, persamaan (1) dapat dinyatakan sebagai²:

$$V_{\sigma}(V,T) = \frac{1}{V} \left(\frac{\beta}{\pi} \right)^{1/2} \int_0^{\infty} [V_r \sigma(V_r, 0)] V_r dV_r \cdot [e^{-\beta(V-V_r)^2} - e^{-\beta(V+V_r)^2}] \quad (2)$$

$\beta = \frac{m}{2kT}$; m = massa proyektil; k = tetapan Boltzman

Berdasarkan kesetaraan antara kelajuan dan energi, persamaan (2) dapat dinyatakan dalam energi sebagai berikut²:

$$\sqrt{E} \sigma(E,T) = \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha}{\pi E} \right)^{1/2} \int_0^{\infty} [\sqrt{E_r} \sigma(E_r, 0)] dE_r \cdot [e^{\alpha(\sqrt{E}-\sqrt{E_r})^2} - e^{-\alpha(\sqrt{E}+\sqrt{E_r})^2}] \quad (3)$$

$\alpha = \frac{M}{m kT}$; m = massa inti sasaran; E = energi proyektil ($\frac{1}{2}mV^2$); E_r = energi relatif proyektil ($\frac{1}{2}mV_r^2$)

Persamaan (3) di atas disebut sebagai persamaan pelebaran Doppler, yaitu metode pelebaran kernel dan metode psi-chi ($\psi - \chi$).

Metode Pelebaran Kernel:

Metode ini pada dasarnya menghitung tampang lintang pelebaran Doppler dengan menyelesaikan persamaan pelebaran Doppler di atas secara eksak. Untuk itu data tampang lintang di ruas kanan persamaan (3) harus tersedia dalam bentuk tabulasi sebagai fungsi energi, yang dapat diinterpolasikan secara linier. Karena dalam metode ini tidak diadakan pendekatan, maka tampang lintang pelebaran Doppler dapat dihitung secara teliti pada sembarang daerah energi. Inilah metode pelebaran kernel walaupun di lain pihak perhitungannya memerlukan waktu yang relatif lama.

Terdapat beberapa sifat menarik dari pelebaran Doppler dengan metode pelebaran kernel ini³. Tampang lintang yang sebanding dengan $1/v$ tak akan terpengaruh oleh kenaikan suhu. Sedangkan tampang lintang yang konstan terhadap energi akan mendapat tambahan ekor $1/v$ di daerah energi rendah bila mengalami pelebaran Doppler. Bentuk suatu puncak resonansi berubah dengan adanya pelebaran Doppler, kecuali di daerah energi tinggi ($E \gg kT/m$). Makin tinggi suhu, makin landai bentuk suatu resonansi.

Metode Psi-Chi:

Dalam metode ini dilakukan beberapa pendekatan terhadap persamaan (3) sehingga diperoleh rumus tampang lintang pelebaran Doppler sebagai fungsi parameter resonansi, energi proyektil, dan suhu. Pendekatan yang dilakukan antara lain: pengabaian bentuk eksponensial kedua pada ruas kanan persamaan (3), pengandaian $\sqrt{E_r}$ dapat dideretkan dalam deret Taylor di sekitar E atau energi resonansi E_R , serta pengandaian batas bawah integrasi pada ruas kanan persamaan (3) dapat

diperlebar dari 0 ke $-\infty$. Dengan mensyaratkan bahwa tampang lintang harus dinyatakan dengan parameter resonansi Breit-Wigner aras-tunggal, maka penerapan pendekatan di atas menghasilkan rumus tampang lintang pelebaran Doppler berdasarkan metode psi-chi sebagai berikut:

- tampang lintang serapan dan fisi :

$$\sigma(E,T) = \frac{2}{\Gamma_T(E)} \left(\frac{E_R}{E} \right)^{1/2} A(E) \psi(X, \xi_R) \quad (4)$$

- tampang lintang hamburan :

$$\sigma(E,T) = \frac{2}{\Gamma_T(E)} \{ B(E) \psi(X, \xi_R) + C(E) \chi(X, \xi_R) \}$$

E_R = energi resonansi, Γ_T = lebar total resonansi (resonance total width), $A(E)$, $B(E)$, $C(E)$ = besaran yang berhubungan dengan jenis reaksi, $X = 2(E_r - E_R)/\Gamma_T$, $Y = 2(E - E_R)/\Gamma_T$, $\xi_R = \Gamma_T (A(E)/4kTE_R)^{1/2}$

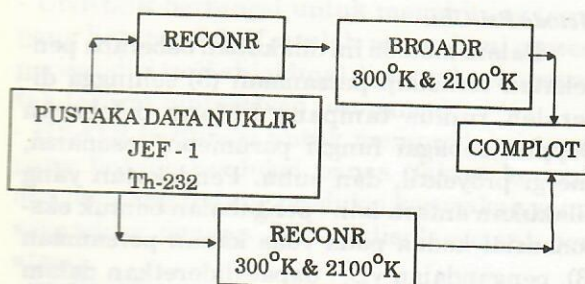
$$\psi(X, \xi_R) = \frac{\xi_R}{2} \left(\frac{1}{\Pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ - \left[\frac{X-Y}{2} \xi_R \right]^2 \right\} \frac{dY}{Y^2 + 1}$$

$$\chi(X, \xi_R) = \frac{\xi_R}{2} \left(\frac{1}{\Pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ - \left[\frac{X-Y}{2} \xi_R \right]^2 \right\} \frac{Y dY}{Y^2 + 1}$$

Kelebihan metode psi-chi adalah waktu komputasi yang diperlukan jauh lebih singkat dibandingkan metode pelebaran kernel. Sedangkan kekurangan utama dari metode psi-chi adalah metode ini hanya dapat diterapkan pada data tampang lintang yang dinyatakan dengan parameter resonansi Breit-Wigner aras-tunggal.

HASIL DAN PEMBAHASAN

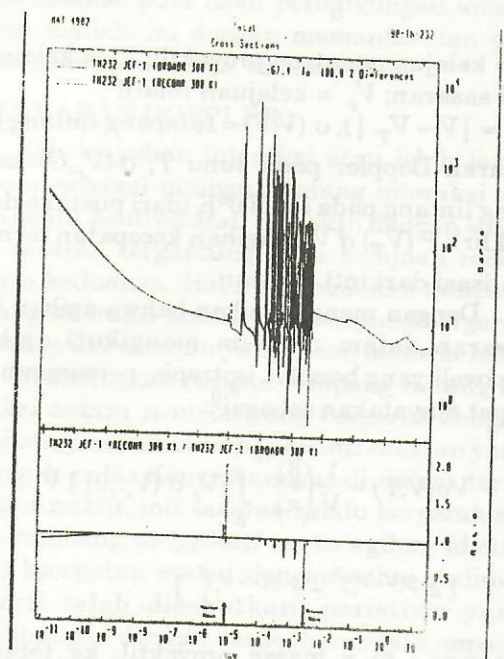
Perhitungan pelebaran Doppler dengan menggunakan program pemrosesan data nuklir NJOY dapat dilakukan dalam modul RECONR maupun modul BROADR. RECONR menggunakan metode psi-chi, sedang BROADR menggunakan metode pelebaran kernel. Seperti telah



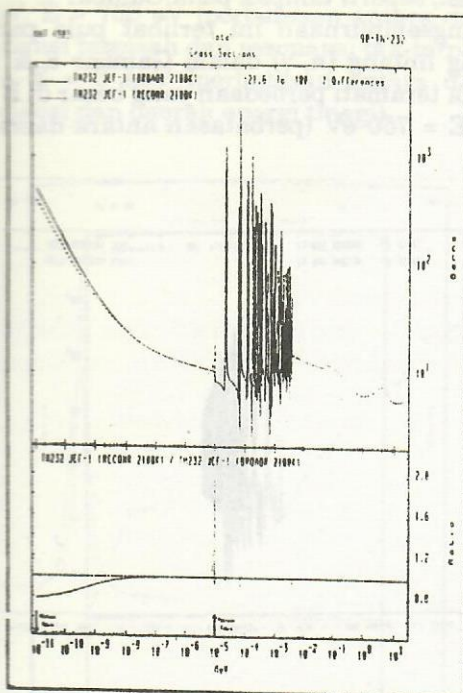
Gambar 1. Bagan percobaan perbandingan metode pelebaran Doppler

disebutkan, metode pelebaran kernel dapat diterapkan pada tampang lintang di seluruh jangkauan energi. Namun berhubung metode pelebaran kernel mensyaratkan data masukan harus berupa tampang lintang dalam bentuk tabel linier $\sigma - E$, maka masukan BROADR harus merupakan keluaran RECONR.

Untuk dapat membandingkan kemampuan kedua metode pelebaran Doppler tersebut di atas, dalam penelitian sederhana ini dipilih data nuklir yang parameter resonansinya dinyatakan dalam representasi Breit-Wigner aras-tunggal, yaitu data Th-232 dari pustaka data nuklir terevaluasi JEF-1. Suhu 300°K dan 2100°K dipilih sebagai suhu percobaan, karena kedua suhu ini adalah batas bawah dan batas atas yang lazim diperlukan dalam pustaka data nuklir multigrup dari program perhitungan fisika reaktor. Langkah-langkah yang dilakukan dalam penelitian ini dapat digambarkan dengan suatu bagan seperti terlihat pada Gambar 1. Dengan menggunakan program komputer COMPLIT⁴ diperoleh kurva tampang lintang sebagai fungsi energi, seperti terlihat pada Gambar 2 s/d 10. Gambar bagian atas adalah dua kurva tampang lintang pelebaran Doppler yang masing-masing dihitung dengan metode pelebaran kernel (garis sambung sempurna) dan metode psi-chi (garis putus), digambarkan dalam satu sumbu koordinat; sedang gambar bagian bawah menunjukkan rasio tampang lintang hasil perhitungan dengan metode psi-chi terhadap hasil perhitungan dengan metode pelebaran kernel.

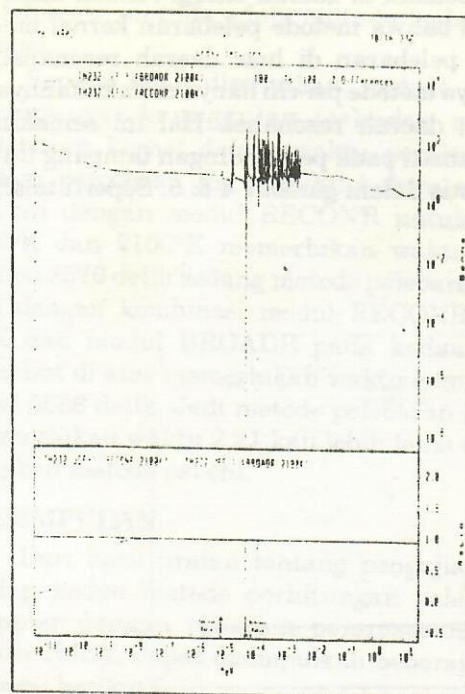


Gambar 2



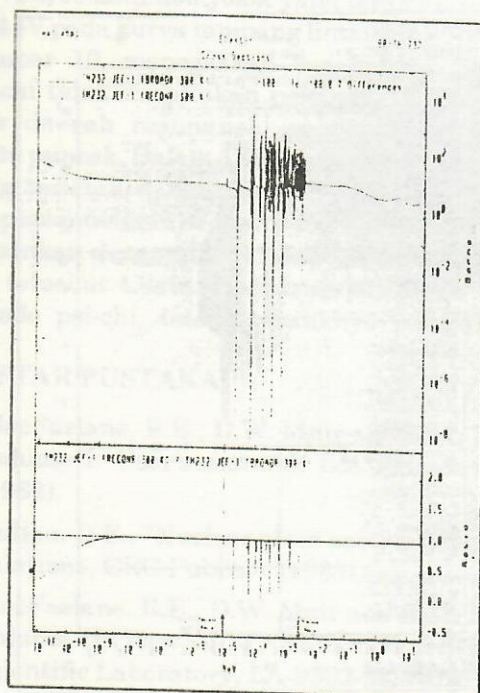
Gambar 3

Gambar 2 & 3 menunjukkan perbandinganampang lintang total pada jangkau energi 10^{-5} eV - 20 MeV. Terlihat bahwa pada daerah energi rendah ($E < 0,1$ eV) terdapat perbedaan hasil perhitungan dengan kedua metode, ter-

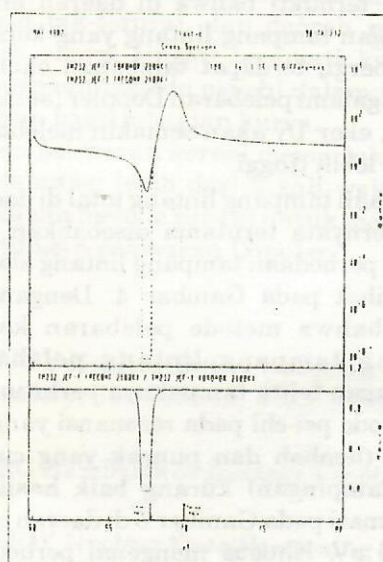


Gambar 5

utama pada suhu 2100°K. Sedang di daerah resonansi, khususnya pada suhu 300°K, terdapat beberapa perbedaan yang cukup menyolok. Namun di daerah energi tinggi ($E > 3$ keV) tidak teramati adanya perbedaan.



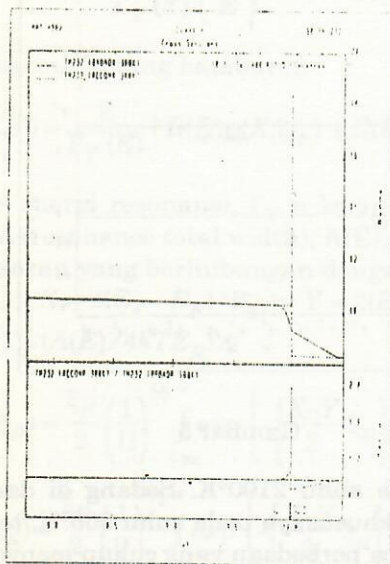
Gambar 4



Gambar 6

Perbedaan di daerah energi rendah membuktikan bahwa metode pelebaran kernel melakukan pelebaran di luar daerah resonansi, sebaliknya metode psi-chi hanya melakukannya di dalam daerah resonansi. Hal ini semakin jelas teramati pada perbandingan tampang lintang elastis dalam gambar 4 & 5. Seperti telah

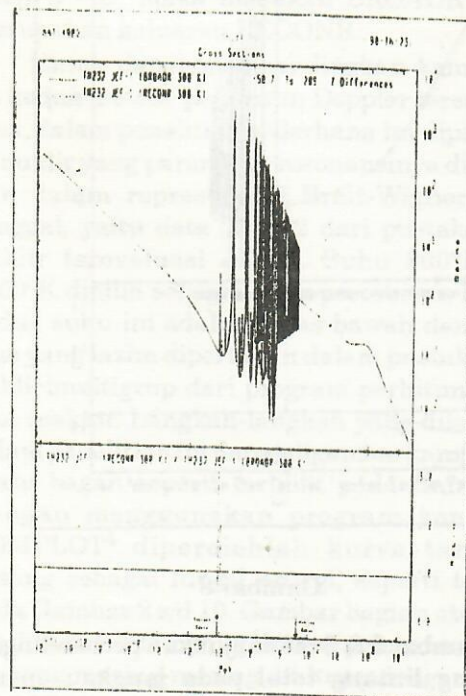
resonansi, seperti tampak pada Gambar 7. Kekurangsempurnaan ini terlihat pula pada tampang lintang (n, γ) dalam Gambar 8 & 9, sehingga teramati perbedaan yang besar di $E = 10$ eV, $E = 750$ eV (perbatasan antara daerah



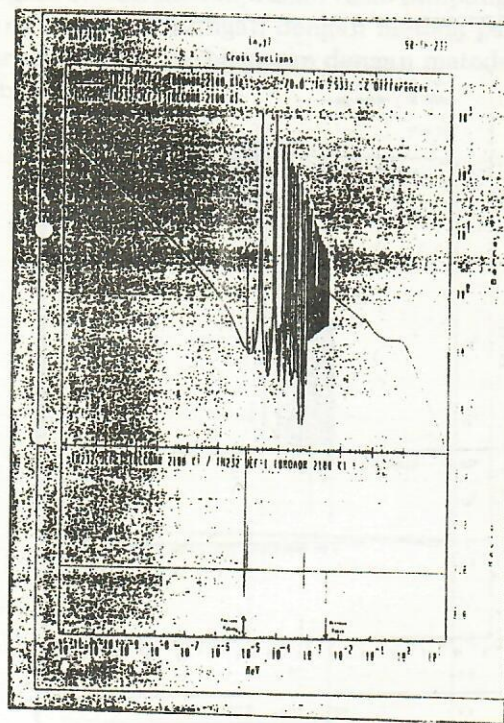
Gambar 7

disebutkan, terbukti bahwa di daerah energi rendah dengan tampang lintang yang konstan terhadap energi, terdapat tambahan ekor $1/v$ setelah mengalami pelebaran Doppler ; semakin tinggi suhu, ekor $1/v$ akan semakin melebar ke energi yang lebih tinggi.

Perbedaan tampang lintang total di daerah resonansi ternyata terutama disebabkan oleh sumbangan perbedaan tampang lintang elastis, seperti terlihat pada Gambar 4. Dengan pemahaman bahwa metode pelebaran kernel menghitung tampang lintang pelebaran Doppler dengan teliti, tampaknya perhitungan dengan metode psi-chi pada resonansi yang sangat tajam (lembah dan puncak yang curam saling berdampingan) kurang baik hasilnya. Hal ini teramati pada Gambar 6 di daerah energi $E = 6,75$ eV. Khusus mengenai perbedaan besar yang teramati di daerah energi $E = 10$ eV, dapat diduga bahwa ini disebabkan kurang sempurnanya metode psi-chi dalam menggabungkan kurva tampang lintang di perbatasan antara daerah energi rendah dan daerah

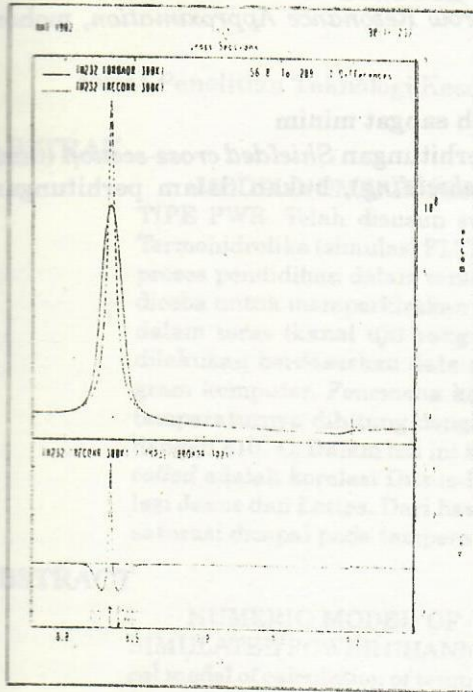


Gambar 8



Gambar 9

10 eV, $E = 750$ eV (perbatasan antara daerah resonansi terpisah dan resonansi tak-terpisah), serta $E = 3$ keV (perbatasan antara daerah resonansi dan daerah energi tinggi).



Gambar 10

Perbedaan menyolok yang teramati di $E = 8,34$ eV pada kurva tampang lintang (n, γ) dalam Gambar 10, menegaskan lagi bahwa metode psi-chi tidak melakukan pelebaran Doppler di luar daerah resonansi, walaupun terdapat suatu puncak. Dalam JEF-1, puncak $E = 8,34$ eV yang terletak di luar daerah resonansi tidak direpresentasikan dengan parameter resonansi, melainkan dengan tabel $\sigma - E$. Akibatnya puncak tersebut tidak mengalami pelebaran oleh metode psi-chi, tetapi sebaliknya mengalami

pelebaran metode oleh metode pelebaran kernel.

Seperti telah disebutkan, metode psi-chi mempunyai keunggulan terhadap metode pelebaran kernel dalam waktu perhitungan. dalam percobaan ini terbukti bahwa metode psi-chi dengan modul RECONR untuk suhu 300°K dan 2100°K memerlukan waktu komputasi 2526 detik sedang metode pelebaran kernel dengan kombinasi modul RECONR pada 0°K dan modul BROADR pada kedua suhu tersebut di atas memerlukan waktu komputasi total 5586 detik. Jadi metode pelebaran kernel memerlukan waktu 2,21 kali lebih lama dibandingkan metode psi-chi.

KESIMPULAN

Dari hasil uraian tentang pengujian terhadap kedua metode perhitungan pelebaran Doppler dengan program pemrosesan data nuklir NJOY, dapat disimpulkan beberapa hal sebagai berikut :

1. Metode pelebaran kernel melakukan pelebaran Doppler di seluruh jangkauan energi, sedang metode psi-chi hanya di daerah resonansi yang direpresentasikan dengan parameter resonansi Breit-Wigner aras-tunggal.
2. Perhitungan dengan metode psi-chi pada resonansi yang sangat tajam memberikan hasil yang kurang teliti.
3. Pada perbatasan antara beberapa daerah energi (daerah energi rendah - daerah resonansi, daerah resonansi terurai - daerah resonansi tak-terurai, dan daerah resonansi daerah energi tinggi) teramati kekurangan-kekurangan metode psi-chi dalam menggabungkan bagian-bagian kurva.
4. Metode pelebaran kernel memerlukan waktu komputasi lebih dari 2 kali waktu yang diperlukan metode psi-chi untuk melakukan perhitungan pelebaran Doppler.

DAFTAR PUSTAKA

1. MacFarlane, R.E., D.W. Muir and R.M. Boicourt, The NJOY Nuclear Data Processing System, Volume I: User's manual, Los Alamos Scientific Laboratory, LA-9303-M, Vol.I (ENDF-324) (1982)
2. Cullen, D.E., "Nuclear cross section preparation", in CRC Handbook of Nuclear Reactors Calculations, CRC Publisher (1988)
3. MacFarlane, R.E., D.W. Muir and R.M. Boicourt, The NJOY Nuclear Data Processing System, Volume II: The NJOY, RECONR, BROADR, HEATR, and THERMR Modules, Los Alamos Scientific Laboratory, LA-9303-M, Vol.II (ENDF-324) (1982)
4. Cullen, D.E. and P.K. McLaughlin, 1989 ENDF Pre-Processing Codes, IAEA Nuclear Data Section, IAEA-NDS-104 (1989)

DISKUSI:

Syarip:

1. Sampai sejauh mana kontribusi kita (BATAN) dalam bidang ini? (tambahan pada library tampang lintang)
2. Ada lagi (kalau tidak salah) metode pendekatan *Narrow Resonance Approximation*, mohon penjelasan.

Riyanto:

1. Kemampuan BATAN dalam masalah data nuklir masih sangat minim
2. *Narrow Resonance Approximation* digunakan dalam perhitungan *Shielded cross-section* (tampang lintang yang mengalami proses perisai diri/*self-shielding*), bukan dalam perhitungan pelebaran Doppler.