

**Titolo**
**Problemi di fisica del reattore ad acqua leggera e metodi di calcolo  
 neutronico avanzati**
**Descrittori**

**Tipologia del documento:** Rapporto Tecnico  
**Collocazione contrattuale:** Accordo di programma ENEA-MSE: tema di ricerca "Nuovo nucleare da fissione"  
**Argomenti trattati:** Reattori nucleari ad acqua leggera, Fisica del reattore e metodi di calcolo neutronico

**Sommario**

Il presente rapporto espone le principali problematiche di fisica dei reattori ad acqua leggera in relazione al loro calcolo neutronico, con particolare riguardo all'utilizzo di tecniche, metodi e codici avanzati di tipo deterministico. Vengono esposti e sintetizzati i principali progressi compiuti negli ultimi 15 anni circa, in relazione anche alle strutture a gruppi energetici ed ai metodi di calcolo più idonei al trattamento accurato delle sezioni d'urto efficaci e dell'autoschermo. Viene posta in evidenza l'importanza dell'aggiornamento delle sezioni d'urto associato al variare del burnup del combustibile ed alle variazioni spettrali connesse al buildup del plutonio o più in generale di isotopi fortemente assorbenti. Sono poi analizzate le problematiche derivanti dalla necessità di utilizzare combustibile ad alti burnup con il conseguente ricorso a veleni bruciabili per il contenimento della reattività a BOL ed i problemi di modellizzazione ad essi associati. Analogamente è fatto cenno all'impatto sulle tecniche di calcolo dell'utilizzo di combustibile MOX ed alle differenze rispetto a combustibile UOX. Sono poi esaminate le problematiche connesse al calcolo di interfaccia tra nocciolo e riflettore. Infine sono presentate le tecniche delle Probabilità di Collisione e del Metodo delle Caratteristiche per la risoluzione dell'equazione del trasporto dei neutroni per geometrie eterogenee complesse.

Il presente Rapporto costituisce pertanto una base per le discussioni tecniche e per gli approfondimenti scientifici che si terranno nell'ambito dell'accordo STC recentemente firmato da ENEA e CEA sull'utilizzo dei codici deterministici Apollo2 e Cronos2 per il calcolo degli LWR. In particolare contribuisce allo sviluppo ed alla qualificazione di metodi e modelli di analisi e simulazione dei più recenti ed avanzati reattori ad acqua leggera di Generazione III e III+.

**Note**

Autori: G. Glinatsis, G. Grasso, R. Pergreffi, F. Rocchi

**Copia n.**
**In carico a:**

2			NOME			
			FIRMA			
1			NOME			
			FIRMA			
0	EMISSIONE	08/09/2011	NOME	F. Rocchi	S. Baccaro	P. Meloni
			FIRMA	<i>Federico Rocchi</i>	<i>S. Baccaro</i>	<i>P. Meloni</i>
REV.	DESCRIZIONE	DATA	REDAZIONE	CONVALIDA	APPROVAZIONE	

## Indice Generale

Indice Generale.....	2
1. Strutture a gruppi ed autoschermo .....	3
2. Modelli di Calcolo del Resonance Absorption per LWR.....	19
Modello di Fermi – Caso Omogeneo .....	19
Modello di Fermi – Caso Eterogeneo .....	22
Modello di Fermi – Caso Eterogeneo con zona risonante contenente anche materiale non risonante .....	25
Modello di Livolant-Jeanpierre – Caso Omogeneo .....	26
Modello di Livolant-Jeanpierre – Caso Eterogeneo.....	28
Modello di Livolant -Jeanpierre – Versioni avanzate .....	28
Il metodo delle Tabelle di Probabilità.....	29
Modelli semplificati del kernel di rallentamento per l'omogeneizzazione .....	32
Correzioni per considerare l'assorbimento da parte dei moderatori .....	33
3. Alto burnup: Boro, veleni bruciabili e Gadolinio .....	33
4. Il rapporto p/d.....	41
5. Cenni al Rim Effect .....	46
6. Combustibile MOX.....	49
7. Interfaccia nocciolo-riflettore nei codici deterministici .....	55
8. Alcuni codici utilizzati per la neutronica dei LWR .....	59
9. Introduzione al Metodo delle Caratteristiche ed al Metodo delle Probabilità di Collisione .....	61
Appendice 1: Struttura a gruppi SHEM-281 .....	70
Appendice 2: Struttura a gruppi WIMS-69 .....	73
Appendice 3: Struttura a gruppi XMAS-172 .....	74
Bibliografia.....	75
Indice delle Tabelle.....	77
Indice delle Figure .....	77

## 1. Strutture a gruppi ed autoschermo

Il calcolo neutronico, sia esso di progetto o di verifica, dei reattori termici richiede, per la rilevanza industriale e dunque economica che oggi giorno tali reattori hanno e per il ruolo fondamentale che essi rivestono, una precisione ed un'accuratezza sempre maggiore. Non ci si può limitare a calcoli di massima o di semplice fattibilità, lasciando poi a valutazioni future il compito di affinare il progetto, ma occorre dare credibilità al design neutronico mediante l'utilizzo di modelli e metodi il più possibile rigorosi e raffinati, se di tale design si pretende poi un'implementazione industriale. E' evidente che, secondo questo tipo di approccio, il progetto del nocciolo di un reattore termico dovrebbe avvenire in un modo che sia il più possibile consistente e coerente in ogni suo aspetto ed in ogni sua parte, non solo in quella neutronica ma anche in quella termoidraulica, termomeccanica, chimica, del combustibile ecc. Tale approccio integrato, alquanto oneroso sia per quanto riguarda la modellazione fisico-matematica che per la sua realizzazione computazionale, è in effetti ancora in fase di sviluppo. Si cerca oggi giorno non più di accoppiare in cascata i codici di neutronica ai codici di termoidraulica, ma di procedere ad una progettazione che fin dall'inizio tenga in conto le necessità ed i requisiti di ogni singolo aspetto; non più dunque una progettazione iterativa ma una progettazione di tipo multifisico. Sebbene si sia ancora lontani dal poter impiegare proficuamente tale approccio integrato, nondimeno si cerca di raffinare sempre più almeno le singole fasi, ancora purtroppo disgiunte, della progettazione.

In particolare, per quanto riguarda la progettazione neutronica, non basta più ricorrere all'utilizzo di codici testati e validati; è necessario che tali codici siano impiegati con librerie di dati nucleari che siano state anch'esse altrettanto bene testate e validate mediante l'utilizzo dei medesimi codici. Non solo, ma anche un codice ben testato associato ad una libreria ben validata può dare origine ad errori grossolani se impiegato secondo procedure scorrette che non siano state previste da chi ha scritto il codice. A garanzia della qualità del risultato occorre quindi che sia ben definito, testato e validato, in altre parole ottimizzato, l'accoppiamento della terna: codici di calcolo – librerie di dati – schemi di calcolo. Questo è tanto più vero quanto più si deve fare ricorso a calcoli di tipo deterministico per la progettazione o per la verifica di noccioli termici. Se da un lato i codici deterministici devono adottare approssimazioni che ne limitano l'applicabilità a ben determinate situazioni, dall'altro lato sono proprio queste approssimazioni, se controllate e ben costruite, che rendono l'approccio deterministico elettivo per l'ambito industriale, dove molti calcoli, spesso parametrici, devono essere portati a termine in tempi ragionevolmente brevi. Si badi inoltre che calcoli di neutronica accoppiati alla termoidraulica sono necessari molto frequentemente anche durante l'esercizio di un impianto,

specie quando si devono determinare gli effetti di transitori o si vuole migliorare l'efficacia di bruciamento di un dato combustibile.

Analizzando le librerie di dati nucleari, in particolare di sezioni d'urto, va messo in evidenza che non solo queste devono essere aggiornate in relazione alla disponibilità di nuovi o più recenti file di sezioni d'urto valutate, ma devono essere rese disponibili al codice di cella in una struttura a gruppi energetici che sia confacente al tipo di calcolo di interesse. In un reattore a spettro veloce la particolare struttura fine a gruppi in zona epitermica e termica è molto meno importante della struttura a gruppi in zona veloce, proprio perché il flusso in zona di rallentamento è molto più basso di quello in prossimità delle energie di fissione. Viceversa in un reattore termico sarà necessario un infittimento in zona epitermica e termica proprio perché durante il rallentamento i neutroni attraversano la zona energetica delle risonanze risolte dei nuclidi di cui è composto il nocciolo; in zona veloce si può ricorrere più semplicemente ad una struttura a gruppi meno densa. Solo se il collassamento a pochi gruppi operato dal codice di cella, necessario per il successivo calcolo di nocciolo, tiene in conto in maniera efficace degli importanti fenomeni che avvengono in zona epitermica e termica (essenzialmente dovuti a catture neutroniche da parte di vari isotopi: prodotti di fissione, veleni neutronici ed attinidi di varia natura), sarà possibile un calcolo di intero reattore che riproduce fedelmente e con l'accuratezza richiesta il comportamento del nocciolo. E' dunque evidente che se già la struttura a gruppi iniziale non è in grado di descrivere accuratamente i fenomeni in zona epitermica e termica, allora nemmeno le sezioni d'urto collassate a pochi gruppi potranno servire agli scopi della progettazione o verifica dei reattori termici. Va notato che non si tratta semplicemente di infittire od addensare i gruppi nelle zone energetiche di interesse allo scopo di migliorare la convergenza numerica di una procedura o di un particolare algoritmo di calcolo, oppure di poter disporre di un numero maggiore di punti rappresentativi sull'asse energetico, ma di poter mettere in evidenza gli effetti su larga scala spaziale (autoschermo spaziale) e temporale (variazione dello spettro a seguito del burnup) delle numerose risonanze degli isotopi presenti. Tali risonanze risultano infatti molto ravvicinate in energia, al punto da creare interferenza tra loro nonché mutuo autoschermo energetico ("mutual shielding", es. tra  $^{238}\text{U}$  ed il prodotto di fissione  $^{150}\text{Sm}$ ). Se le risonanze sono molto ravvicinate, sino al limite di sovrapporsi, e questo è proprio il caso dei reattori termici, non è più possibile impiegare nel calcolo delle sezioni d'urto efficaci i modelli di rallentamento che facciano ricorso alla soluzione asintotica per il flusso durante il rallentamento stesso (andamento  $1/E$ ), ma si instaureranno per lo spettro neutronico i tipici comportamenti descritti dalle discontinuità di Placzek. Sebbene in misura meno marcata, tale problema si presenta anche in zona intermedia o veloce per le risonanze degli isotopi del refrigerante

e degli strutturali; tra questi si possono citare  $^{16}\text{O}$ ,  $^{23}\text{Na}$ ,  $^{27}\text{Al}$ ,  $^{56}\text{Fe}$ ,  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{55}\text{Mn}$ . In Figura 1 sono evidenziate le principali risonanze di assorbimento tra 0.25 e 4 eV; sono ben messe in evidenza le sovrapposizioni e le interferenze tra le risonanze di vari isotopi attorno a 0.3 eV, 0.6 eV, 1 eV, 1.3 eV, 2.5 eV, 3.8 eV ecc. In Figura 2 sono evidenziate invece le principali risonanze di assorbimento tra 4 e 23 eV. Analogamente in [Figura 3](#) sono messe in evidenza le posizioni reciproche dei picchi di risonanza per le sezioni d'urto totale tra 200 eV e 200 keV.

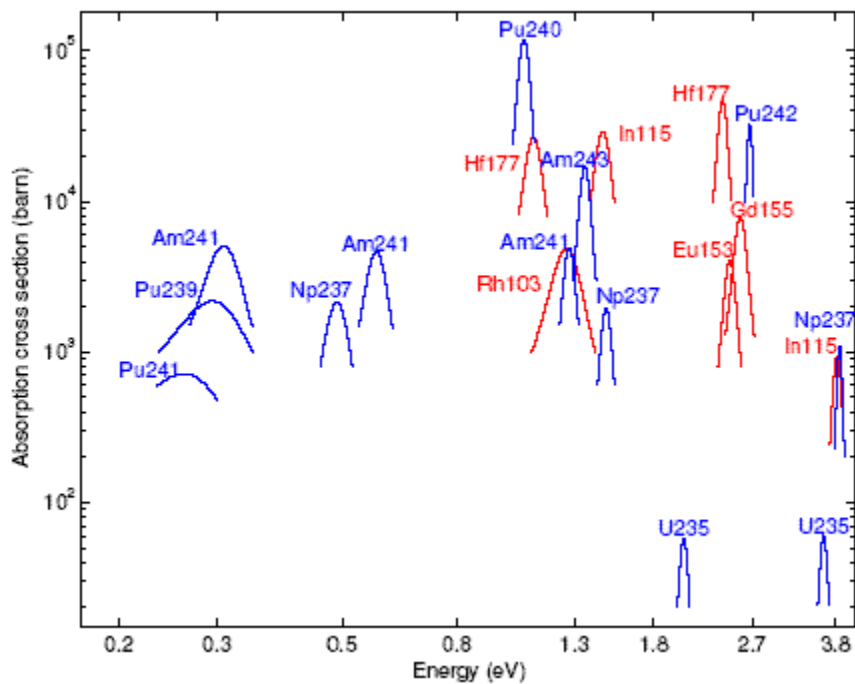


Figura 1: Principali risonanze di assorbimento tra 0.25 e 4 eV.

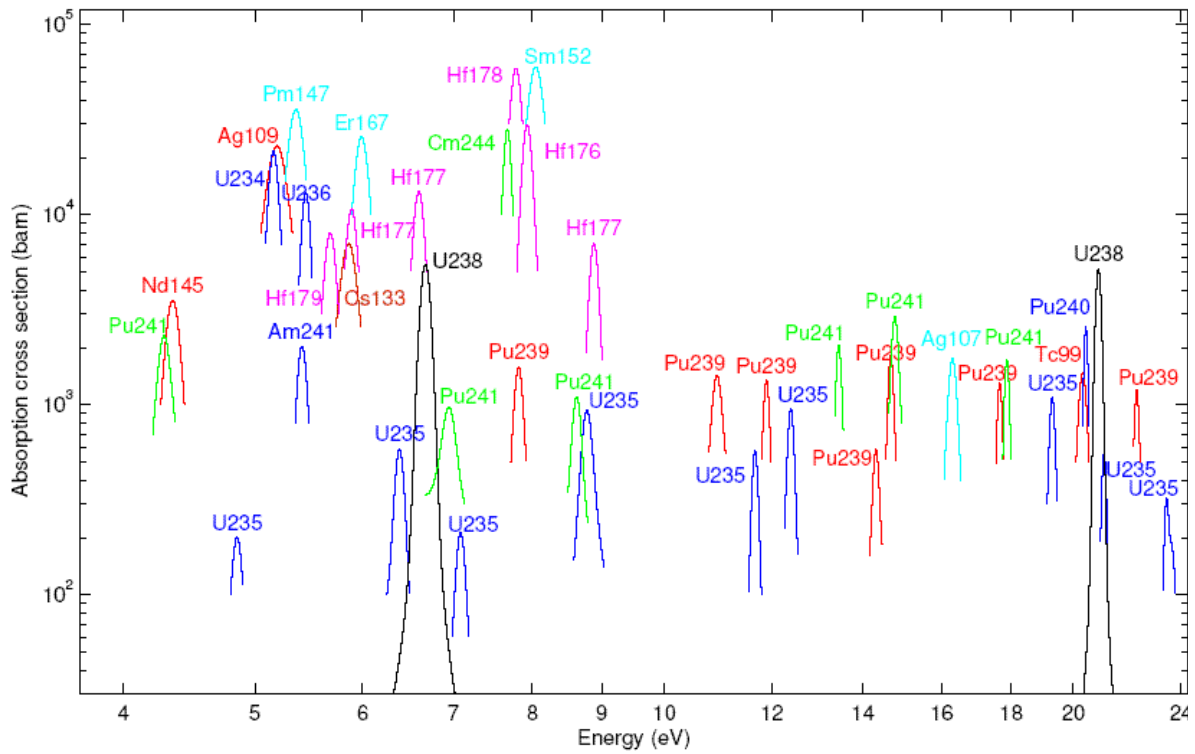


Figura 2: Principali risonanze di assorbimento tra 4 e 23 eV.

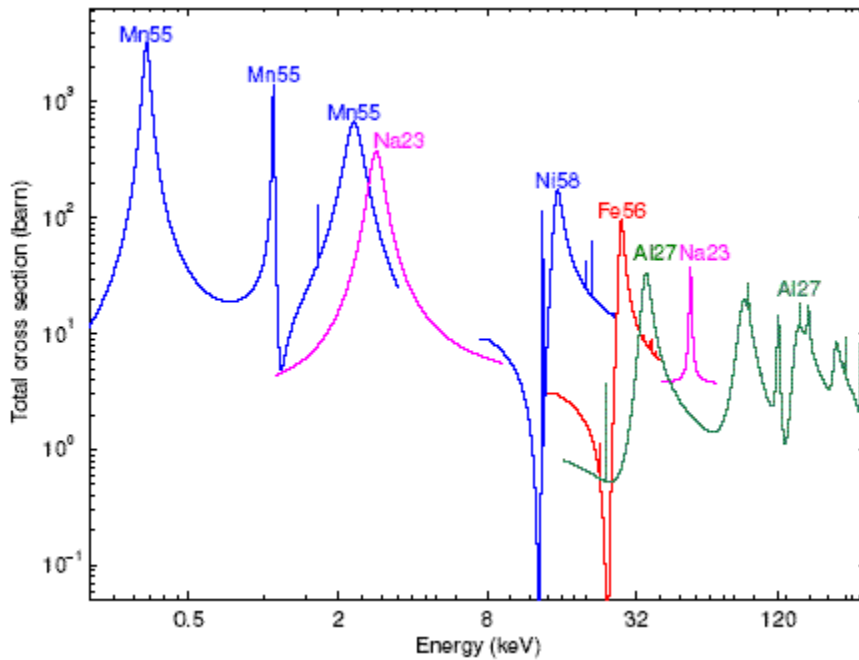


Figura 3: Principali risonanze della sezione d'urto totale tra 200 eV e 200 keV.

Le principali risonanze degli attinidi sono raggruppate in Tabella 1. Le principali risonanze dei prodotti di fissione sono raggruppate in Tabella 2. Le principali risonanze degli assorbitori neutronici e dei

veleni bruciabili sono raggruppate in [Tabella 3](#). Infine le principali risonanze dei materiali strutturali sono raggruppate in [Tabella 4](#).

**Tabella 1: Principali risonanze degli attinidi.**

234U	ER = 5.2 eV
235U	ER = 2.0, 2.8, 3.6, 4.8, 5.4, 6.4, 7.1, 8.8, 9.3, 11.7, 12.4, 14.0, 16.1, 16.7, 19.3, 21.1 eV
236U	ER = 5.4 eV
238U	ER = 6.7, 20.9 eV
237Np	ER = 0.50, 1.5, 3.8, 5.8 eV
238Pu	ER = 18.6eV
239Pu	ER = 0.30, 7.8, 10.9, 11.9, 14.3, 14.7, 17.7, 22.3 eV
240Pu	ER = 1.0, 20.5eV
241Pu	ER = 0.26, 4.3, 8.6, 13.4, 14.8, 17.9 eV
242Pu	ER = 2.7 eV
241Am	ER = 0.31, 0.58, 1.3, 5.4, 5.9 eV
243Am	ER = 1.36 eV
243Cm	ER = 2.3 eV
244Cm	ER = 7.7 eV

**Tabella 2: Principali risonanze dei prodotti di fissione.**

135Xe	ER = 0.08 eV
149Sm	ER = 0.10 eV
103Rh	ER = 1.26 eV
131Xe	ER = 14.4 eV
133Cs	ER = 5.9 eV
147Pm	ER = 5.4 eV
152Sm	ER = 8.1 eV
99Tc	ER = 5.6, 20.3 eV
145Nd	ER = 4.3 eV
153Eu	ER = 2.5 eV
95Mo	ER = 44.9 eV
155Eu	ER = 0.60 eV
154Eu	ER = 0.20 eV

**Tabella 3: Principali risonanze degli assorbitori e dei veleni neutronici.**

107Ag	ER = 16.3 eV
109Ag	ER = 5.2 eV
113Cd	ER = 0.18 eV
115In	ER = 1.5, 3.8 eV
177Hf	ER = 1.1, 2.4, 5.9, 6.6, 8.9, 22.0 eV
176Hf	ER = 7.9 eV
178Hf	ER = 7.8 eV
179Hf	ER = 5.7 eV
155Gd	ER = 2.6 eV
157Gd	ER = 0.03, 16.8, 20.6 eV
167Er	ER = 0.46, 0.58, 6.0 eV

**Tabella 4: Principali risonanze dei materiali strutturali.**

55Mn	ER = 0.34, 1.1, 2.3 KeV
58Ni	ER = 15.3 KeV
56Fe	ER = 27.8 KeV
27Al	ER = 34.7, 87.3, 120 KeV
23Na	ER = 2.8, 53.7 KeV
16O	ER = 434, 1000, 1312 KeV

Una struttura a gruppi che possa includere all'interno di ciascun intervallo energetico poche risonanze, od al limite una sola, evita a priori il problema dell'interferenza tra le risonanze stesse. Si può quindi evitare di impiegare per i gruppi così definiti i formalismi, più o meno accurati che siano, del self-shielding nel calcolo della sezione d'urto di gruppo. Negli ultimi dieci anni sono state dunque sviluppate ed introdotte apposite strutture a gruppi energetici in grado di minimizzare i problemi testé evidenziati. Ad esempio un importante e recente struttura a gruppi è quella denominata SHEM (dal nome degli scienziati che l'hanno introdotta nel 2005: "Santamarina-Hfaiedh Energy Mesh"); è composta da 281 gruppi. La necessità di sviluppare una struttura a gruppi più raffinata è nata dalla constatazione che la struttura a gruppi più comunemente utilizzata dai codici deterministici europei sino alla metà del primo decennio del 2000 era la XMAS-172, una struttura a 172 gruppi sviluppata congiuntamente da Francia e Gran Bretagna, nata però con molti vizi concettuali. Era stata infatti concepita come la semplice unione della struttura a 99 gruppi impiegata dal codice di cella francese Apollo1 e di quella a 69 gruppi del codice di cella britannico WIMS. In conseguenza di ciò la struttura XMAS presenta gruppi abnormi ed irregolari, e non ha raggiunto lo scopo di eliminare gli errori dovuti al self-shielding in zona termica ( $E < 4.0$  eV), in particolar modo quelli dovuti alla risonanza a 2.7 eV di  $^{242}\text{Pu}$ . La struttura SHEM è stata appositamente pensata per evitare a priori calcoli di self-shielding per energie inferiori a 23 eV: le risonanze degli attinidi, dei principali prodotti di fissione e degli assorbitori sono descritte ricorrendo ad un raffinamento della meshatura energetica. Nonostante il maggior numero di gruppi energetici rispetto alla XMAS, il tempo di calcolo di un codice di cella che impieghi la struttura SHEM non aumenta troppo poiché la struttura SHEM stessa è tale che il numero di gruppi per cui è richiesta l'applicazione dei formalismi di self-shielding è pressoché uguale a quello della struttura XMAS. I calcoli risultano tuttavia più accurati grazie ad una meshatura non solo più fitta ma anche più intelligente alle basse energie. Procedendo con la stessa filosofia di approccio, e forti dei miglioramenti introdotti con la struttura SHEM-281, Hébert e Santamarina hanno proposto nel 2008 un raffinamento a 361 gruppi della stessa, denominata SHEM-361. Le modifiche consistono nell'aumentare da 38 a 118 i gruppi nell'intervallo energetico da 22.5 eV a 11.14 keV. Per quanto noto a chi scrive, la struttura SHEM-361 è stata ad oggi implementata nel solo codice di cella Dragon,

tuttavia è facile immaginare che nel giro di pochi anni verrà ampiamente adottata. Secondo Hébert e Santamarina la struttura SHEM-361 potrebbe addirittura rimpiazzare, riducendo molto l'onere computazionale, l'attuale struttura a 1968 gruppi, basata su una griglia letargica di 1/120, tipica dei calcoli di cella per reattori veloci (es. codice ECCO). E' stata studiata anche una griglia energetica intermedia a 295 gruppi non ancora pubblicata ma utilizzabile dal codice Dragon.

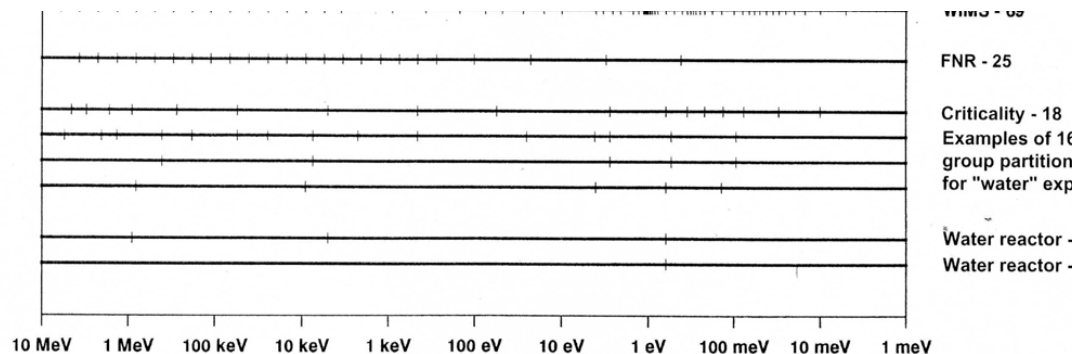


Figura 4: Confronto fra strutture a gruppi.

In Figura 4 vengono confrontate varie strutture a gruppi; si nota che il numero di gruppi diminuisce dall'alto al basso man mano che si passa da codici di cella (es. Apollo e WIMS) a codici di nocciolo (strutture a 2 e 4 gruppi per LWR). Nella figura non compaiono le strutture a 1968 gruppi e le SHEM. La struttura c.d. Universale rappresenta la suddivisione minima per poter fare calcoli accurati senza dover ricorrere a dei modelli per il self-shielding. La struttura a 25 gruppi FNR è usata per calcoli di reattori veloci. Le strutture collassate a 2 e 4 gruppi sono impiegate oggi nei codici di nocciolo per calcoli legati ad esigenze industriali dei LWR; attualmente EdF usa solo due gruppi per la progettazione di reattori ad acqua pressurizzata. Ovviamente i valori delle sezioni d'urto collassate a due gruppi adottati da EdF provengono da calcoli di cella effettuati con strutture molto fini, tipo SHEM-281.

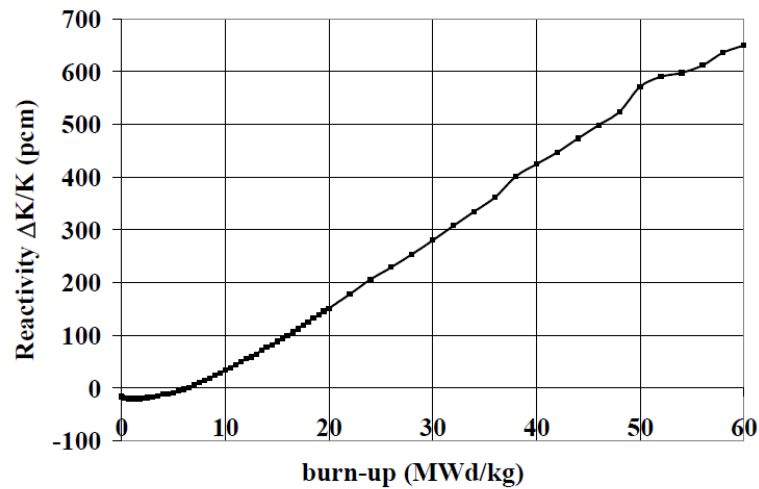
L'importanza di non dover ricorrere a calcoli di autoschermo grazie all'utilizzo di una struttura a gruppi ottimizzata è messa in evidenza da diversi vantaggi:

- 1) in un LWR, durante il bruciamento del combustibile, si ha la produzione di numerosi attinidi (es. gli isotopi del Pu) e di numerosi prodotti di fissione, specie se il reattore è ad alto burnup,

che, catturando molto efficacemente i neutroni durante il rallentamento grazie alle loro risonanze localizzate, sono in grado di alterare sensibilmente lo spettro neutronico, indurendolo, durante il bruciamento stesso. Questo comporta il dover ripetere molte volte il calcolo di cella al variare del burnup e ciò, se il calcolo non è accurato a causa di un autoschermo malamente valutato, comporta l'accumularsi e l'amplificarsi di errori che alla fine diventano inaccettabili. Se il calcolo di cella è semplificato da una struttura a gruppi ottimizzata in modo da minimizzare i calcoli approssimati di self-shielding, allora l'aggiornamento delle sezioni d'urto al variare del burnup risulterà più preciso. Le variazioni delle sezioni d'urto con il burnup sono molto più accentuate in un LWR che in un FR.

- 2) per quanto detto al punto precedente, in un LWR a UO<sub>2</sub> o caricato in parte od in toto a MOX, si ha uno spettro neutronico fortemente variabile con il burnup; questo richiede l'aggiornamento delle sezioni d'urto efficaci e dunque un impegno computazionale molto oneroso in termini di tempo di calcolo. Questo tempo di calcolo, a parità di accuratezza, può essere fortemente ridotto qualora si possa fare a meno di ricorrere, almeno in alcune zone energetiche, a modelli di autoschermo grazie all'adozione di una struttura a gruppi ottimizzata.

Per far capire quanto calcoli imprecisi di autoschermo (punto 1) sopra) possano portare a grandi errori di valutazione di parametri globali quali  $k_{\infty}$  si fa riferimento alla Figura 5 dove sono graficate le differenze tra il  $\Delta k_{\infty}$  di burnup per un assembly UOX calcolato ricorrendo ad una struttura XMAS e ad una struttura SHEM-281. Si può notare che per il combustibile fresco la differenza è relativamente piccola, ma questa può arrivare a +650 pcm a 60 MWd/kg. Un'analisi dei bilanci di reaction rates indica, vedi Tabella 5, che questo effetto è imputabile ad una sovrastima da parte del calcolo con struttura XMAS dell'assorbimento in zona di risonanza da parte degli attinidi minori e dei prodotti di fissione.


**Figura 5: Differenze sul reactivity loss tra strutture SHEM e XMAS.**

In particolare si può notare come la sovrapposizione tra le risonanze di cattura radiativa del  $^{238}\text{U}$  e del  $^{150}\text{Sm}$  (vedi Figura 6) a 20.65 eV e 20.8 eV rispettivamente causino a 60 MWd/kg una discrepanza nel calcolo di circa 90 pcm. Con la struttura SHEM l'avvelenamento da Samario è ridotto di un 30% circa!

**Tabella 5: Bilancio delle reaction rates: confronto XMAS vs SHEM.**

ISOTOPE	Concent.	Abs. Rate discrepancy  > 10 pcm <sup>(a)</sup>			1 group cross section
	(S-X)/X (%)	XMAS (pcm)	S-X (pcm)	(S-X)/X (%)	(S-X)/X (%)
H2O	0.0	3309	-22	-0.7	-0.1
B10	0.0	3566	-27	-0.7	-0.2
ZR91	0.0	496	-17	-3.5	-3.0
U236	-0.1	971	-19	-2.0	-1.4
AM243	0.0	464	-8	-1.7	-1.1
CM244	-2.4	96	2	2.1	5.4
MO95	0.4	321	-18	-5.5	-5.3
TC99	0.6	647	-20	-3.0	-3.0
XE131	4.9	794	-41	-5.2	-9.2
CS133	-1.0	871	25	2.9	4.6
PM147	7.2	449	-16	-3.6	-9.6
SM149	-0.7	619	-10	-1.6	-0.3
SM150	6.6	309	-70	-22.6	-27.0
SM151	-12.9	512	-70	-13.6	-0.2
SM152	-8.6	596	-59	-9.8	-0.8
EU153	-7.0	530	-37	-7.0	0.6
EU154	-5.7	483	-32	-6.7	-0.4
EU155	-5.3	507	-30	-6.0	-0.2
Total		15540	-468		

(a) Source normalised at 100000 neutrons

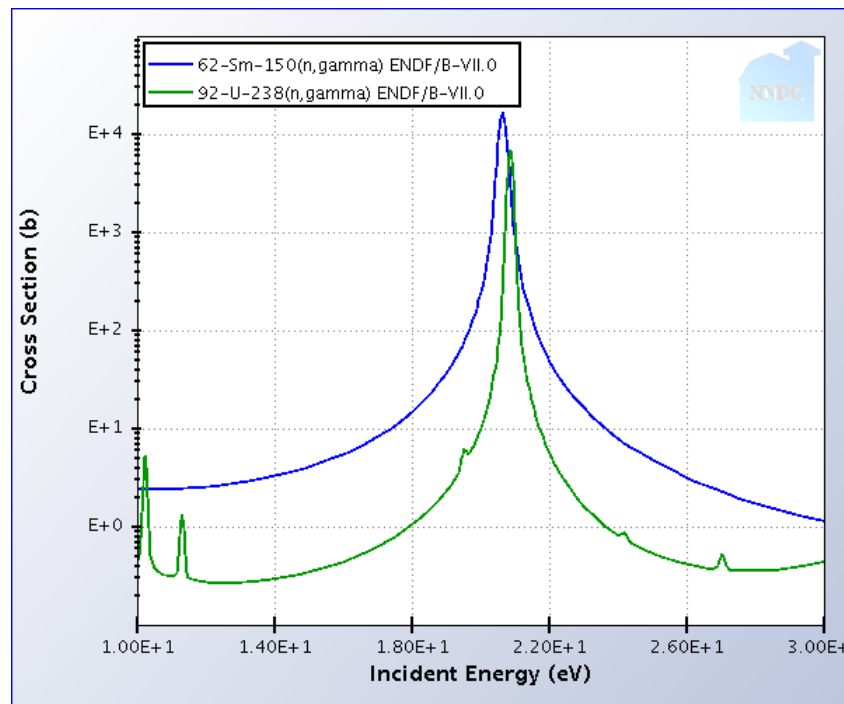


Figura 6: Risonanze sovrapposte in zona termica di 238U e 150Sm.

Per dare invece un'idea della grande variabilità delle sezioni d'urto efficaci indotte da variazioni dello spettro al variare del burnup nei reattori termici si fa riferimento all'esempio di Figura 7. E' ivi graficata la sezione d'urto microscopica efficace di assorbimento per  $^{240}\text{Pu}$  al variare del burnup per un tipico assembly di PWR con un arricchimento iniziale in  $^{235}\text{U}$  del 3% in massa, una densità dell'acqua di  $0.7135 \text{ g/cm}^3$ , ed irraggiato a 40 MW/MTU per 1500 giorni (tratta dal manuale del codice OrigenArp).

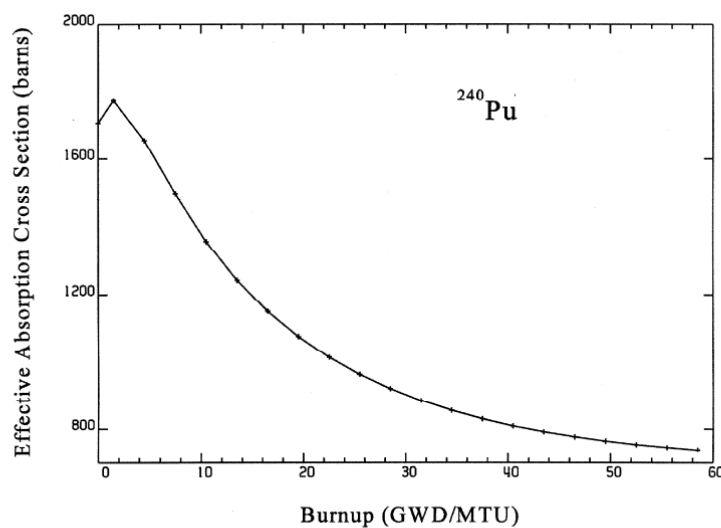
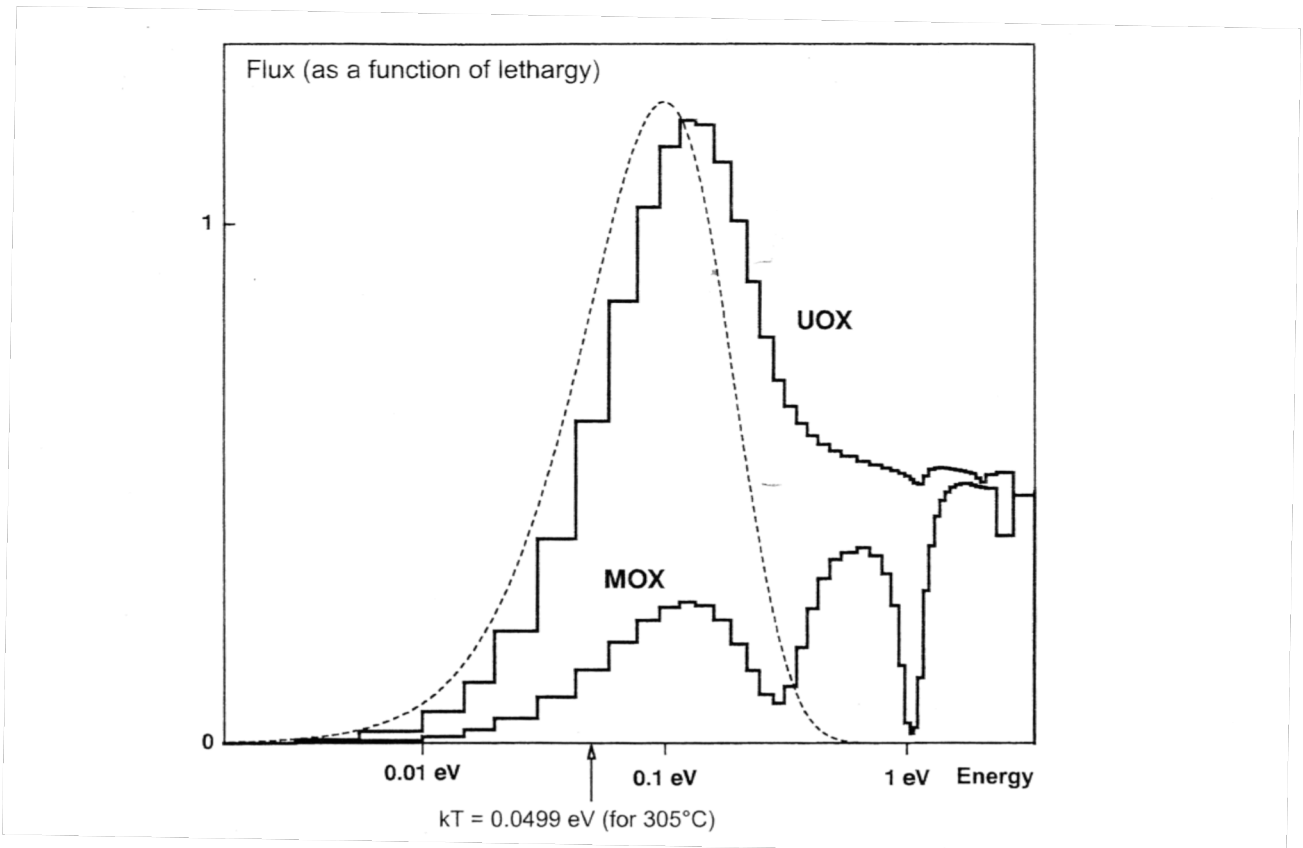


Figura 7: Variazione col burnup della xs efficace di assorbimento di  $^{240}\text{Pu}$  in un PWR.

Una giustificazione a tale grande variazione (superiore ad un fattore 2) può essere fornita esaminando le grosse differenze tra gli spettri in funzione della letargia neutronica in zona termica (qui definita da  $E < 3.38$  eV, corrispondente agli ultimi 48 gruppi della struttura a 99 gruppi) di uno stesso PWR caricato a UOX (3.7%  $^{235}\text{U}$ ) ed a MOX (6.5% Pu) rispettivamente, Figura 8.



**Figura 8: Spettri in zona termica per PWR a UOX e MOX.**

Nella stessa figura è rappresentato a linea tratteggiata lo spettro maxwelliano all'energia  $kT = 0.0499$  eV (corrispondente a  $T=305^\circ\text{C}$ ) normalizzato allo stesso numero di neutroni dello spettro per UOX; si può notare come tale spettro riproduca quello dell'UOX a meno del tipico shift alle basse energie (absorption cooling). La principale differenza tra le situazioni UOX e MOX che salta subito agli occhi è che il numero di neutroni in zona termica è molto più basso per il caso MOX: circa 4 volte meno. Si parlava infatti poco sopra di indurimento dello spettro. Ciò è dovuto al maggiore assorbimento neutronico in zona termica di un combustibile che contenga Pu rispetto ad un combustibile privo di Pu. Si possono citare tre spiegazioni distinte a questo fenomeno:

- il contenuto di plutonio che sostituisce  $^{235}\text{U}$  è solamente circa  $2/3$  fissile rispetto al contenuto di  $^{235}\text{U}$ ; è infatti ottenuto dal reprocessing di combustibile precedentemente irraggiato di un PWR. Il vettore isotopico del Pu è pertanto composto da:

$$^{238}/^{239}/^{240}/^{241}/^{242} : 2/58/23/11/6 (\%)$$

i cui isotopi ad A pari sono fissionabili ma non fissili;

- le sezioni d'urto microscopiche di assorbimento a 2200 m/s (0.025 eV) sono più alte per gli isotopi fissili del plutonio che per 235U;
- la presenza di potenti risonanze molto larghe per gli isotopi di Pu: 0.3 eV per 239Pu e 241 Pu; 1.06 eV per 240Pu e 2.5 eV per 242Pu (vedi Figura 1).

Le risonanze a 0.3 e 1.06 eV sono in grado di generare le spettacolari depressioni visibili nello spettro di Figura 8 e quindi di indurire molto lo spettro stesso rispetto al caso UOX. La risonanza di 242Pu a 2.5 eV è malamente descritta proprio a causa della struttura a gruppi troppo povera.

Un'altra diretta conseguenza dello scostamento di uno spettro di fuel contenente plutonio da un andamento maxwelliano è proprio l'impossibilità, pena produrre gravi errori, di ricorrere ad uno spettro maxwelliano per produrre sezioni d'urto efficaci.

L'evoluzione di un combustibile UOX all'aumentare del burnup può essere, almeno in prima approssimazione, immaginato avere degli effetti sullo spettro tali da far evolvere lo spettro stesso da quello tipico dell'UOX (BOL) a quello tipico del MOX (EOL), passando per tutte le forme intermedie. E' evidente che questo ha pesanti ripercussioni a livello fisico (alcune saranno evidenziate successivamente) ma anche a livello computazionale. Ad esempio se si vuole evitare di ricorrere ai modelli per l'autoschermo, sempre approssimati (si veda oltre) ed onerosi in termini di tempo macchina, impiegando una struttura a gruppi più fine per gli intervalli energetici di interesse, è necessario utilizzare una struttura che già sin dall'inizio preveda la presenza ad alto burnup di quegli isotopi che hanno forti e potenti risonanze il cui effetto si manifesta al crescere del burnup. Questo è proprio il ruolo di una struttura tipo SHEM.

In Figura 9 è evidenziata l'evoluzione al variare del burnup per gli isotopi del plutonio in un LWR inizialmente arricchito al 4.5% in 235U.

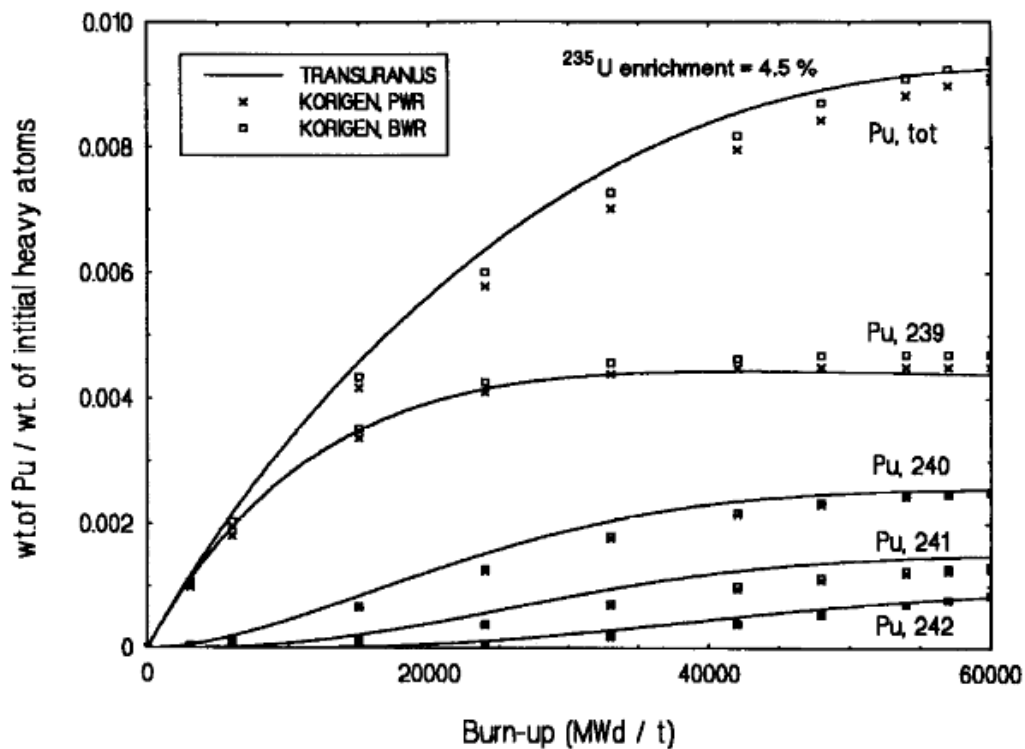



Figura 9: Evoluzione degli isotopi del plutonio in un LWR.

Un altro grosso impatto di questi fenomeni legati alla variazione dello spettro con il burnup è sulle procedure consigliate, o se si preferisce il termine, sugli schemi computazionali consigliati per un dato tipo di calcolo. Più sopra si parlava dell'esigenza dell'utilizzo di una terna ottimizzata codici di calcolo – librerie di dati – schemi di calcolo; sinora si è accennato parzialmente all'impatto delle librerie di dati e solo marginalmente ai codici di calcolo, ma quanto appena detto impatta direttamente anche sullo schema di calcolo. Infatti occorrerà avere a priori un'idea su quante volte, ed a quali valori di burnup, ripetere il calcolo di cella per avere una buona descrizione dell'evoluzione del fuel e quindi dello spettro di un LWR. Questo fa parte delle best-practices che vengono consigliate dagli sviluppatori di codici, in funzione anche delle librerie utilizzate. Un esempio verrà dato successivamente quando si affronteranno le modalità di calcolo per il gadolinio usato come veleno bruciabile. Può essere dato qua un altro esempio, che ha più a che fare con la fisica dell'autoschermo cui si accennerà a breve, tratto dalle best-practices consigliate dal CEA per l'utilizzo di Apollo2.

Sino al 2004, cioè prima dell'introduzione delle librerie con struttura SHEM, il CEA raccomandava per l'analisi dei LWR la catena o terna Apollo2.5/CEA-97/CEA93.V6. La versione del codice di cella consigliato era la 2.5 di Apollo, unitamente alle librerie CEA93 versione 6, basate sulla struttura XMAS

a 172 gruppi e con xs derivate da JEF 2.2, e lo schema di calcolo era quello codificato come CEA-97. Come si vedrà, lo schema di calcolo era alquanto complicato, anche a causa della struttura XMAS. Esso consisteva nelle seguenti raccomandazioni:

- **Calcolo del Flusso:**
  - uso del metodo  $UP_1$ ;
  - gap di acqua tra gli assembly integrato nelle sole celle periferiche di un assembly;
  - raggruppamento delle celle con flusso simile in un'unica cella "fisica"; per un assembly 17x17 ad UOX ciò consiste nell'adozione di 18 celle fisiche per il fuel, 2 celle fisiche per i tubi guida ed una cella fisica per il tubo strumentato;
  - le pellet devono essere splittate volumetricamente in almeno quattro anelli concentrici;
  - gli assembly con ossido di Gadolinio non devono avere celle fisiche;
- **Calcolo del self-shielding:**
  - $^{238}U$ ,  $^{235}U$ ,  $^{236}U$ ,  $^{239}Pu$ ,  $^{240}Pu$ ,  $^{241}Pu$ ,  $^{242}Pu$ ,  $^{241}Am$  e gli isotopi dello Zirconio devono essere sottoposti a calcolo di autoschermo;
  - per le risonanze larghe di  $^{238}U$  si deve ricorrere al metodo  $UP_1$ , mentre per gli altri isotopi è bastevole il metodo  $UP_0$ ;
  - l'autoschermo spaziale deve essere tenuto in conto mediante il metodo della Matrice di Background;
  - per  $^{238}U$  tre pin devono essere differenziate per tenere in conto le differenze sul coefficiente di Dancoff a causa del gradiente di flusso in prossimità dei tubi guida;
- **Calcolo di depletion:**
  - è consigliato di ricalcolare il self-shielding ai seguenti step: 0, 37, 75, 112.5, 150, 325, 500, 750, 1000, 1500, 2000, 2500, 3000 e poi a step di 1000 MWd/ $t_m$ ;
  - per gli assembly gadolinati la spaziatura temporale è più fine; la discretizzazione del volume è in 11 anelli concentrici;
  - la catena deve prevedere almeno 20 attinidi (da  $^{234}U$  a  $^{247}Cm$ ) e 85 FP;
- **Collassamento e omogeneizzazione:**
  - condensazione da 172 a 20 gruppi;
  - omogeneizzazione cella per cella;

 <b>Ricerca Sistema Elettrico</b>	<b>Sigla di identificazione</b>	<b>Rev.</b>	<b>Distrib.</b>	<b>Pag.</b>	<b>di</b>
	NNFISS – LP5 – 022	0	R	17	78

- utilizzo del metodo SPH;
- Calcoli di nocciolo:
  - trasporto P1/S8;
  - schema nodale lineare/lineare.

Siccome la più parte del tempo di calcolo è impiegata nella parte relativa al self-shielding, è evidente che ogni miglioria in questo ambito (es.: XMAS → SHEM) è ben vista.

Dal 2005, a seguito anche dell'introduzione della struttura SHEM e dell'implementazione in Apollo del Metodo delle Caratteristiche (MOC), il CEA ha istituito una nuova "route" di calcolo, indicata con Apollo2.8/REL2005/CEA2005-SHEM. La libreria a 281 gruppi CEA2005-SHEM è basata sulle valutazioni JEFF 3.1<sup>1</sup>. Lo schema REL2005 può essere descritto come un approccio a due livelli costituito da un primo calcolo fine in energia ma grossolano in spazio, seguito poi da un raffinamento che consiste in un calcolo grossolano in energia ma fine in spazio. Nel primo step lo spettro neutronico è calcolato ricorrendo alle probabilità di collisione  $P_{ij}$  ( $UP_1$ ) su quello che è definito "mezzo di primo livello"; le pellets devono essere discretizzate in 4 anelli concentrici (UOX) o 6 anelli concentrici (pellets gadolinate) per dare un'adeguata rappresentazione dell'assorbimento di 238U e degli isotopi pari del Gadolinio. L'autoschermo è calcolato solo per  $E > 23$  eV, come previsto dalla struttura SHEM; al di sopra di tale energia il self-shielding è calcolato sempre con il metodo della Matrice di Background. Calcolato lo spettro, le sezioni d'urto vengono collassate, senza alcuna omogeneizzazione spaziale, non più a 20 gruppi ma a 26 gruppi. La struttura a 26 gruppi è stata adottata poiché un'analisi dettagliata del bilancio neutronico per assembly MOX aveva mostrato alcuni problemi causati dalla mancanza di discretizzazione della risonanza a 1.06 eV di 240Pu. Il gruppo che includeva questa risonanza è stato splittato in 7 gruppi, portando la struttura dai vecchi 20 agli attuali 26 gruppi; questa struttura è consigliata sia per assembly UOX che MOX.

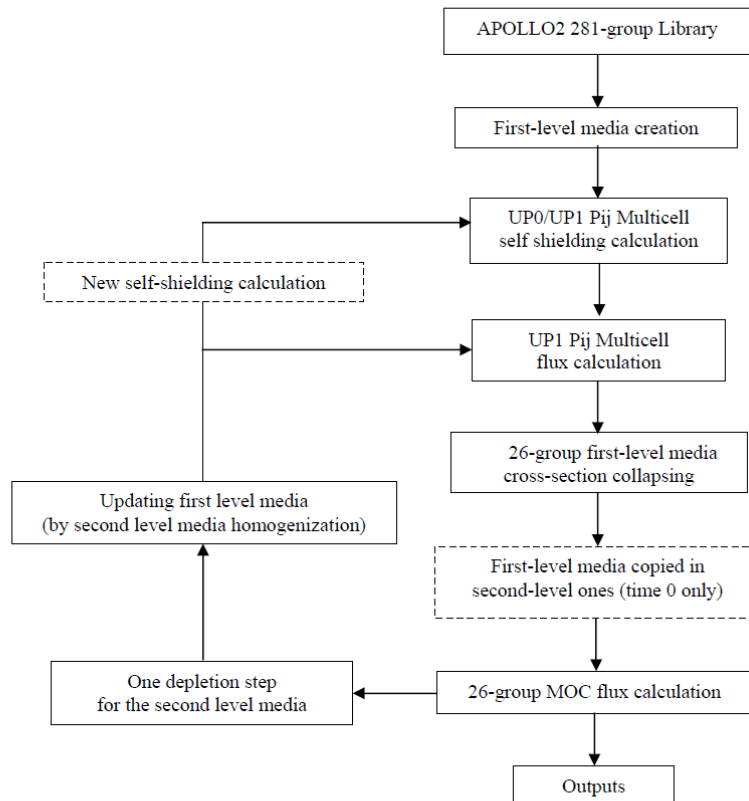
Nel secondo step di REL2005 viene fatto un calcolo in geometria eterogenea esatta ("mezzo di secondo livello") a 26 gruppi, ricorrendo alla potenza delle mesh non strutturate, che consentono di descrivere esattamente la geometria senza approssimazioni, ed alla possibilità di trattare scattering anisotropo tipiche del Metodo delle Caratteristiche (MOC).

Se è richiesto un calcolo di bruciamento, questo è fatto solo per i mezzi di secondo livello con i flussi calcolati dal MOC con le nuove concentrazioni che vengono passate ai mezzi di primo livello al fine di ripetere i calcoli di spettro su struttura fine SHEM-281, e così via. Gli step di bruciamento consigliati per l'aggiornamento delle sezioni d'urto sono: 4, 8, 12, 24, 36, 48 ecc. MWd/kg.

<sup>1</sup> L'utilizzo delle librerie valutate JEFF3.1 al posto delle precedenti JEF 2.2 ha consentito tra l'altro di risolvere alcuni problemi nel calcolo degli LWR, tra cui le discrepanze osservate nelle previsioni di buildup di 236U, 237Np e 242Pu, sia in fuel UOX che MOX.

La meshatura spaziale deve essere fatta cercando anche di seguire la forma spaziale del flusso termico che è quello soggetto ai più forti gradienti spaziali in prossimità delle zone di assorbimento.

Lo schema REL2005 è illustrato in Figura 10.



**Figura 10: Schema di calcolo CEA REL2005.**

Per dare un esempio delle potenzialità del nuovo schema di calcolo si può citare che alcuni benchmark effettuati nel 2008 hanno evidenziato come il calcolo dell'efficacia delle barre di controllo a carburo di boro per un BWR sia affetto da un errore di sovrastima; tale errore è stato ridotto da un +2.1% usando lo schema di calcolo Apollo2.5/CEA-97/CEA93.V6 ad un +1.4% usando lo schema REL2005.

Un altro importante improvement in Apollo2.8 è stato l'introduzione di un raffinato metodo di trattamento del self-shielding in miscele di isotopi risonanti per le energie intermedie (33 – 200 eV) che consente di tenere rigorosamente in conto il mutuo autoschermo ("mutual self-shielding") delle risonanze degli attinidi minori. Questo metodo sofisticato è richiesto per gli assembly MOX e nella parte superiore dei noccioli BWR (caratterizzata da alte frazioni di vuoto); particolare attenzione è

rivolta alla sovrapposizione delle risonanze di  $^{238}\text{U}/^{240}\text{Pu}$  a 37 eV, di  $^{238}\text{U}/^{240}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$  a 66 eV (quarta risonanza di  $^{238}\text{U}$ , gruppo 85 della struttura SHEM, vedi Figura 11).

Per capire quanto questa parte della Fisica del Reattore sia complessa e purtroppo approssimata, occorre fare una breve panoramica sui principali modelli e metodi usati per il calcolo dell'autoschermo nei reticoli dei LWR.

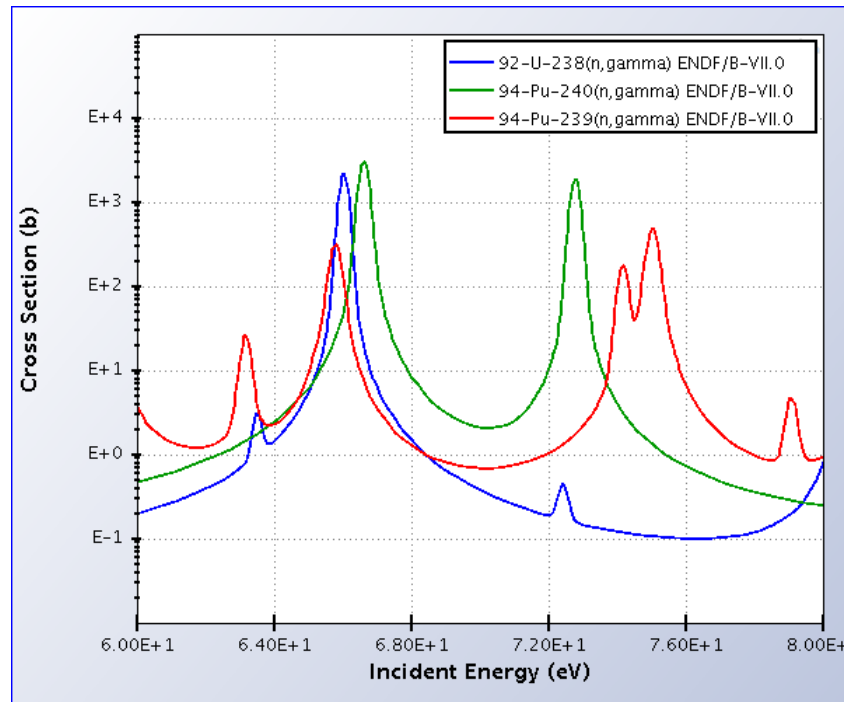


Figura 11: Sovrapposizione risonanze di  $^{238}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$  e  $^{240}\text{Pu}$  a 66 eV.

## 2. Modelli di Calcolo del Resonance Absorption per LWR

### Modello di Fermi – Caso Omogeneo

Si distinguono solo un materiale risonante (denotato con il pedice 0) ed un materiale non risonante (puramente moderante, denotato con il pedice 1). L'equazione di bilancio neutronico durante il rallentamento si scrive come:

$$(\Sigma_0 + \Sigma_1)\Phi(u) = D$$

dove  $D$  è la densità di neutroni che giungono per scattering alla letargia  $u$ . Le sezioni d'urto macroscopiche sono ovviamente da intendersi come totali, in quanto devono esprimere la rimozione dalla letargia  $u$ . Si nota che  $\Sigma_1$  e  $D$  sono funzioni regolari e lentamente variabili con  $u$  ( $D$  lo è poiché il rallentamento da parte del materiale risonante 0 è considerato trascurabile); viceversa  $\Sigma_0$  e  $\phi$  hanno una struttura alquanto complicata e molto rapidamente variabile a causa delle risonanze. Per separare l'andamento risonante e complicato da quello regolare si è soliti scomporre l'espressione per il flusso nel prodotto di due fattori

$$\Phi(u) = \frac{D}{(\Sigma_0 + \Sigma_1)} = \Psi \varphi = \frac{D}{\Sigma_1} \frac{\Sigma_1}{(\Sigma_0 + \Sigma_1)}$$

il primo dei quali  $\Psi = \frac{D}{\Sigma_1}$  viene chiamato *flusso macroscopico* o *flusso regolare* ed il secondo  $\varphi = \frac{\Sigma_1}{(\Sigma_0 + \Sigma_1)}$  è il c.d. *fattore di autoschermo*. Quest'ultimo fattore descrive gli effetti delle risonanze sulla struttura fine del flusso; si nota che quanto più  $\Sigma_0$  è grande rispetto a  $\Sigma_1$ , ad esempio nell'intorno di una risonanza, tanto più piccolo è il fattore di autoschermo e tanto più depresso risulterà nello stesso intorno il flusso neutronico (prodotto del flusso regolare per il fattore di autoschermo). In Figura 12 è schematizzata la decomposizione del flusso nella sua parte regolare macroscopica e nella parte periodica di struttura fine.

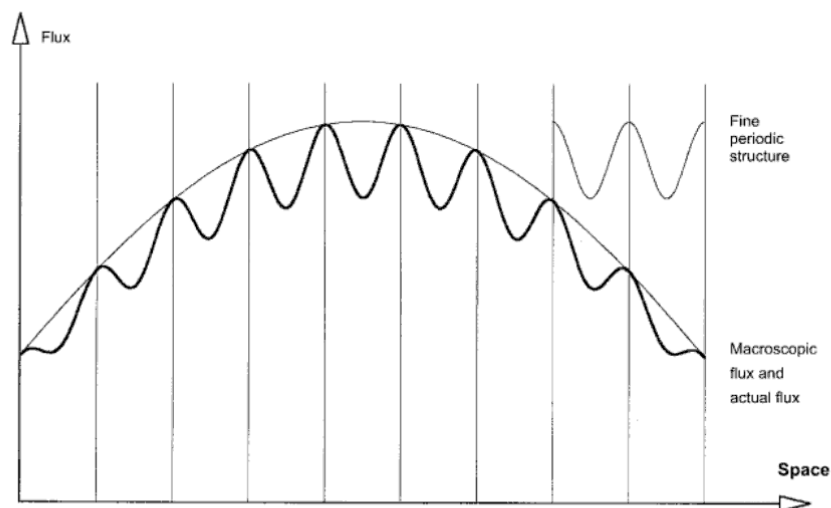


Figura 12: Schematizzazione di reticolo piano con flusso macroscopico e struttura fine.

Per chiudere il modello occorre trovare una relazione tra la densità di collisione per unità di letargia  $D$  o la densità di rallentamento  $Q$ , ed il flusso macroscopico. Si ricorda che la funzione  $Q$  è definita mediante l'equazione:

$$\frac{dQ}{du} = -\Sigma_{a0}\Phi$$

nell'ipotesi che l'assorbimento sia dovuto al materiale 0 e che i contributi diretti delle sorgenti di fissione possano essere trascurati nel range energetico delle risonanze.

Il più vecchio modo di chiudere il modello è quello proposto da Fermi, che collega  $Q$  al flusso regolare:

$$Q \cong (\xi\Sigma_s)_1\Psi$$

Si ha allora un sistema di due equazioni in due incognite:

$$\begin{cases} \frac{dQ}{du} = -\Sigma_{a0}\Phi = -\Sigma_{a0}\varphi\Psi \\ Q \cong (\xi\Sigma_s)_1\Psi \end{cases}$$

che fornisce l'equazione  $\frac{dQ}{du} = -\frac{\Sigma_{a0}\varphi}{(\xi\Sigma_s)_1}Q$  ovvero

$$Q(u) = Q(0)e^{-\int_0^u \frac{\Sigma_{a0}\varphi}{(\xi\Sigma_s)_1} du'} = p(u)Q(0)$$

in cui il fattore di fuga alle risonanze  $p$  può essere riscritto come:

$$p = \exp\left(-\frac{N_0}{N_1} \frac{I_{eff}}{(\xi\sigma_s)_1}\right)$$

con l'integrale di risonanza definito come:

$$I_{eff} = \int \sigma_{a0eff} du$$

e la sezione d'urto effettiva definita come:

$$\sigma_{a0eff} = \sigma_{a0}\varphi$$

Per ogni dato nuclide risonante e per ogni data temperatura, la sezione d'urto effettiva e l'integrale di risonanza dipendono dunque da un solo parametro che prende il nome di *sezione d'urto di diluizione* o *sezione d'urto di background*  $\sigma_d = \Sigma_1/N_0$ , dato che la struttura fine del flusso può essere scritta come:

$$\varphi(u) = \frac{\sigma_d}{\sigma_d + \sigma_0}$$

Poiché in pratica la sezione d'urto di diluizione è costante, e dunque facilmente tabulabile, il modello qui presentato può essere impiegato abbastanza facilmente, a patto di disporre di dette tabulazioni.

## Modello di Fermi – Caso Eterogeneo

Nel caso eterogeneo è sufficiente sostituire le probabilità di prima collisione  $\Sigma_1/(\Sigma_1+\Sigma_0)$  e  $\Sigma_0/(\Sigma_1+\Sigma_0)$  del caso omogeneo con quelle calcolate per il mezzo eterogeneo, ad esempio con il metodo delle Probabilità di Collisione,  $P_{00}$  e  $P_{01}$ , che rappresentano la probabilità che un neutrone generato nel materiale 0 subisca la sua prima collisione nel materiale 0 stesso o nel materiale 1 rispettivamente. Si ottiene:

$$p = \exp\left(-\frac{V_0 N_0}{V_1 N_1} \frac{I_{eff}}{(\xi \sigma_s)_1}\right)$$

ed al posto della sezione d'urto di diluizione  $\sigma_d$  si deve usare la *sezione d'urto di diluizione equivalente*  $\sigma_e$ , pari a

$$\sigma_e = \sigma_0 \frac{1 - P_{00}}{P_{00}}$$

Ora però nasce il problema che la sezione d'urto equivalente è una funzione risonante poiché dipende da  $\sigma_0$  e dipende non solo dai materiali ma anche dalla geometria tramite le Probabilità di Collisione (a loro volta anch'esse dipendenti da  $\sigma_0$ ); è quindi molto complicato tabulare tali sezioni d'urto. Fortunatamente nei casi pratici la variazione di  $\sigma_e$  con  $u$  è di poche decine di %, contrariamente alla variazione di  $\sigma_0$  che è molto maggiore, in genere alcune decine di volte. In conseguenza di ciò non si commette errore grave nel rimpiazzare  $\sigma_e$  con un suo valore medio da

usare nell'espressione dell'integrale di risonanza del caso omogeneo come approssimazione all'integrale di risonanza del caso eterogeneo. Questa approssimazione viene solitamente indicata come "equivalenza eterogeneo-omogeneo", e può essere interpretata come l'approssimazione di Wigner-Bell della probabilità  $P_{00}$ : la geometria reale viene normalizzata ad una geometria omogenea equivalente il cui integrale di risonanza può essere tabulato a priori.

Secondo la teoria di Wigner-Bell la probabilità  $P_{00}$  può essere espressa dalla seguente approssimazione razionale:

$$P_{00} \cong \frac{l\Sigma_0}{1 + l\Sigma_0}$$

in cui  $l$  è il valor medio della corda della zona risonante, pari a  $l = \frac{4V_0}{S_0}$ , con  $V_0$  volume della zona risonante ed  $S_0$  superficie della zona risonante. Con l'approssimazione di Wigner-Bell la sezione d'urto di diluizione equivalente risulta esattamente costante, dunque tabulabile, e pari a

$$\sigma_e \cong \frac{1}{lN_0}$$

in cui il prodotto  $lN_0$  (in genere espresso in barn<sup>-1</sup>) è talvolta, sebbene impropriamente, denominato *opacità* poiché quanto più esso è grande tanto più la sezione d'urto di diluizione tende a zero. Per rendersi conto della validità dell'approssimazione di Wigner-Bell è utile graficare (vedi Figura 13) l'andamento del c.d. Fattore di Bell  $b$  in funzione dell'opacità; tale fattore è una correzione che viene introdotta a  $P_{00}$  ed a  $\sigma_e$  nella forma

$$P_{00} \cong \frac{l\Sigma_0}{b + l\Sigma_0}$$

$$\sigma_e \cong \frac{b}{lN_0}$$

Si nota che all'aumentare dell'opacità il Fattore di Bell si avvicina sempre più ad 1, valore che è ottenuto costantemente ed identicamente per un mezzo omogeneo.

Occorre spendere qualche parola in più sul concetto di opacità. Va notato che il concetto di opacità è utilizzabile per stabilire se un determinato volume o mezzo è "grande" o "piccolo". Se è grande, le

eterogeneità del mezzo influenzeranno molto la distribuzione del flusso, mentre se è piccolo le eterogeneità saranno ininfluenti. Le dimensioni di una zona devono essere valutate in relazione al libero cammino medio (dunque anche dell'energia)  $\lambda$  del neutrone, pari all'inverso della sezione d'urto macroscopica totale, da usare come unità di misura dell'estensione della zona stessa. Si ricorre poi all'uso della corda media  $l$ , cioè del valor medio della distanza che separa il punto di ingresso di un neutrone dal suo punto di uscita in un mezzo convesso, come valutazione della dimensione caratteristica del mezzo stesso. Si invoca quindi un teorema di geometria integrale, dovuto a Cauchy<sup>2</sup> nel 1832 e pubblicato nel 1850, per cui la corda media risulta  $l = \frac{4V}{S}$  in cui  $V$  ed  $S$  sono il volume e la superficie del mezzo. L'ipotesi di convessità viene introdotta allo scopo di evitare che un neutrone fuoriuscito dal mezzo possa rientrarvi per puro effetto geometrico, prolungando così la distanza percorsa<sup>3</sup>. L'opacità  $\omega$  del mezzo, detta anche *opacità adimensionale*, numero puro, è infine definita come:

$$\omega = \frac{4V\Sigma}{S} = \frac{l}{\lambda} = \sigma l N$$

Se essa risulta minore di 1 allora il mezzo viene detto piccolo (dunque "trasparente" ai neutroni); se risulta maggiore di 1 il mezzo viene detto grande (dunque "opaco" ai neutroni). Il prodotto  $\sigma l$  può essere interpretato come il volume di mezzo interessato da una sola collisione di un solo neutrone su un solo nucleo, di conseguenza il prodotto  $\sigma l N$  può essere visto come il numero medio di collisioni singole nel mezzo; è evidente allora associare il concetto di opacità o trasparenza a seconda che tale numero sia maggiore o minore di 1.

<sup>2</sup> Una dimostrazione indiretta del teorema di Cauchy basata sulla matematica della teoria della diffusione monoenergetica dei neutroni, è data in P. Reuss, *Neutron Physics*, pg. 112-3 e 116. Tale dimostrazione mette bene in luce che la formula di Cauchy è valida solo se tutte le direzioni di moto dei neutroni sono equiprobabili (isotropia). Cfr. A. Mazzolo, B. Roesslinger, C. M. Diop, *Annals of Nuclear Energy* 30 (2003), 1391-1400, nonché i numerosi riferimenti ivi citati.

<sup>3</sup> Si omette in questa trattazione la teoria della correzione mediante il fattore di Dancoff, che è in grado di tenere in conto della fuoriuscita di un neutrone dalla zona risonante del fuel e del suo ingresso in un'altra zona di fuel senza aver fatto collisioni in una zona di moderatore. Si tratta ovviamente di un caso in cui il mezzo non può più essere considerato semplicemente connesso. Tale situazione non è tuttavia affatto irrealistica, verificandosi fisicamente nei reticoli molto stretti.

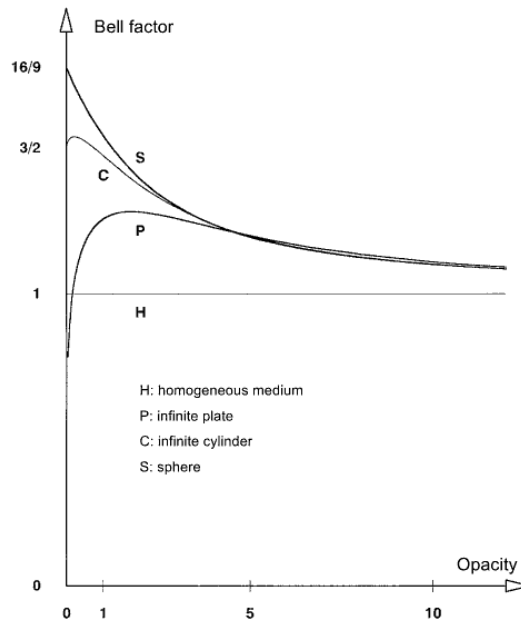


Figura 13: Andamento del Fattore di Bell in funzione dell'opacità adimensionale.

## Modello di Fermi – Caso Eterogeneo con zona risonante contenente anche materiale non risonante

Senza entrare nei dettagli del modello, è sufficiente dire che è possibile estendere i risultati precedentemente esposti correggendo la sezione d'urto di diluizione equivalente in:

$$\sigma_e \cong \frac{b}{LN_0} + \frac{\Sigma_2}{N_0}$$

in cui  $\Sigma_2$  è la sezione d'urto macroscopica totale del materiale non risonante miscelato nella zona di materiale risonante. Questo caso è di interesse applicativo concreto per le zone di fuel in cui siano presenti anche altri isotopi, ad esempio se il fuel stesso è  $UO_2$ . L'ossigeno viene considerato il materiale non risonante. La presenza di ossigeno miscelato a  $^{238}U$  nel fuel di un PWR riduce l'effetto del self-shielding: mediante scattering sull'ossigeno, i neutroni da fissione vengono infatti parzialmente moderati; questo solo effetto farebbe aumentare  $p$  di circa +235 pcm rispetto al caso di fuel privo di ossigeno (aumenta il denominatore dell'esponente nell'espressione per  $p$ ). Tuttavia il rallentamento può essere tale da far sì che i neutroni abbiano energie di risonanza proprio in una zona di materiale risonante; la sezione d'urto di diluizione equivalente subisce un aumento rispetto al caso di fuel privo di ossigeno, aumenta quindi l'integrale di risonanza e dunque anche il

numeratore dell'esponente nell'espressione per  $p$ . A ciò è associata una diminuzione di  $p$  pari a circa -1800 pcm. L'effetto combinato dei due fenomeni fa sì che nettamente  $p$  cali per l'introduzione di ossigeno nel fuel.

## Modello di Livolant-Jeanpierre – Caso Omogeneo

Alla fine degli anni '60 del secolo scorso, Michel Livolant e Francois Jeanpierre hanno introdotto un nuovo modello per affinare il trattamento delle risonanze, modello che prende anche il nome di Metodo delle Reaction Rate Efficaci.

Si considera una miscela omogenea di un nuclide risonante (di indice 0) ed uno o più nuclidi non risonanti (di indice 1). Nel range delle risonanze, dove la sorgente di fissione è trascurabile, l'equazione per il rallentamento neutronico si riduce a:

$$R_0\Phi + R_1\Phi = (\Sigma_0 + \Sigma_1)\Phi$$

in cui gli operatori di rallentamento sono definiti dalle seguenti relazioni integrali lineari (ovviamente valide per il rallentamento da urto elastico):

$$R_0 = N_0 r_0$$

$$R_1 = \sum_{i \neq 0} N_i r_i$$

$$r_i \Phi(u) \equiv \int_{u-\varepsilon_i}^u \sigma_{si}(u') \frac{e^{-(u'-u)}}{1-\alpha_i} \Phi(u') du'$$

$$\varepsilon_i = -\ln \alpha_i$$

Si nota che le dimensioni dell'operatore  $r$  sono quelle di una sezione d'urto microscopica. Ancora una volta si scompone il flusso nelle due componenti macroscopica e microscopica  $\Phi = \Psi\varphi$ , dove il fattore adimensionale di autoschermo  $\varphi$  si riduce ad 1 se non si è in presenza di risonanze. E' utile ricorrere ad un'espressione del flusso macroscopico del tipo:

$$\Psi = \frac{R_1 \Phi}{\Sigma_1}$$

Si può infatti verificare che tale funzione è molto lentamente variabile, ovvero ha variazioni trascurabili su intervalli di ampiezza dell'ordine di una risonanza, od anche dell'ordine di  $\epsilon_0$ , il massimo guadagno letargico per scattering sul nuclide risonante. Il denominatore dell'espressione scelta per il flusso macroscopico è infatti poco variabile (anzi, praticamente costante), mentre la natura integrale a lungo raggio dell'operatore a numeratore smorza le irregolarità del flusso. Stante questa proprietà, intimamente legata come si è detto alla scelta dell'espressione per il flusso macroscopico, è possibile adottare la seguente approssimazione:

$$R_0(\varphi\Psi) \approx \Psi R_0(\varphi)$$

che inserita nell'equazione per il rallentamento fornisce

$$R_0\varphi + \Sigma_1 = (\Sigma_0 + \Sigma_1)\varphi$$


Introducendo ancora una volta la sezione d'urto di diluizione  $\sigma_d = \Sigma_1/N_0$  l'equazione del rallentamento si riduce alla sua forma canonica, ovvero un'equazione per il fattore di autoschermo:

$$r_0\varphi + \sigma_d = (\sigma_0 + \sigma_d)\varphi$$

Per un dato nuclide e per una data temperatura, tale equazione dipende solo dal parametro  $\sigma_d$  che svolge anche il ruolo di termine noto o forzante nell'equazione stessa. Può dunque essere risolta per alcuni valori di riferimento del parametro ed i risultati salvati per ogni altro caso futuro. In realtà quello che si fa è salvare l'insieme delle reaction rates efficaci multigruppo (calcolate su una determinata struttura a gruppi) per ogni reazione x:

$$\tau_{g,x} = \int_g \sigma_{x,0}(u)\varphi(u)du$$

Infine queste reaction rates efficaci sono utilizzate per il calcolo delle sezioni d'urto multigruppo.

 <b>Ricerca Sistema Elettrico</b>	<b>Sigla di identificazione</b>	<b>Rev.</b>	<b>Distrib.</b>	<b>Pag.</b>	<b>di</b>
	NNFISS – LP5 – 022	0	R	28	78

## Modello di Livolant-Jeanpierre – Caso Eterogeneo

Il modello può essere applicato ad un caso eterogeneo a due zone, una con il materiale risonante ed una con il materiale non risonante. L'approccio adottato è simile a quello del modello eterogeneo di Fermi, ovvero fa ricorso alle Probabilità di Collisione ed all'uso della sezione d'urto di diluizione equivalente. Si deve ricorrere all'imposizione di un'ulteriore equazione di chiusura che consiste nella conservazione dell'integrale di risonanza tra il caso eterogeneo ed il caso omogeneo equivalente (c.d. relazione di equivalenza). Per imporre tale conservazione è però necessario semplificare il kernel di rallentamento e una delle ipotesi adottabili è quella di *narrow resonances* (NR). Tale ipotesi è abbastanza ben verificata ad energie elevate e funziona quindi abbastanza bene per i reattori a spettro veloce. Se la risonanza è stretta e  $u$  è in corrispondenza della risonanza, allora quasi tutti i valori  $u'$  che contribuiscono all'integrale  $r_0\phi$  devono trovarsi prima della risonanza, dove la sezione d'urto di scattering del nuclide risonante è ridotta alla sua sola parte potenziale ed il fattore di autoschermo vale  $\phi(u') \approx 1$ . Si ha dunque :

$$r_0\phi \cong \sigma_{p,0} \quad \text{e} \quad \phi(u) \cong \frac{\sigma_{p,0} + \sigma_d}{\sigma_0(u) + \sigma_d}$$


La relazione di equivalenza si ottiene imponendo che si abbia:

$$\int \frac{\sigma_{p,0} + \sigma_e}{\sigma_0(u) + \sigma_e} \sigma_{a,0} du = \int \frac{\sigma_{p,0} + \sigma_d}{\sigma_0(u) + \sigma_d} \sigma_{a,0} du$$

in cui il membro di sinistra è relativo al caso eterogeneo e quello di destra al caso omogeneo. In tale equazione  $\sigma_e$  è esplicitata in funzione di  $\sigma_0$  ricorrendo alle Probabilità di Collisione, così come era fatto nel metodo di Fermi, e  $\sigma_d$  è l'incognita che deve essere calcolata facendo uso della relazione di equivalenza. Per rendere il calcolo più semplice, gli integrali di Riemann vengono rimpiazzati da integrali di Lebesgue sulla variabile  $\sigma_0$  a loro volta risolti col metodo delle Tabelle di Probabilità.

## Modello di Livolant -Jeanpierre – Versioni avanzate

Molte modifiche al modello di Livolant e Jeanpierre sono state pensate ed introdotte nei codici di calcolo allo scopo di eliminare le ipotesi restrittive di un solo nuclide risonante in una sola zona risonante e di due sole zone. Nessuna di esse è però esente da problemi. Ne verranno esaminate

 <b>Ricerca Sistema Elettrico</b>	<b>Sigla di identificazione</b>	<b>Rev.</b>	<b>Distrib.</b>	<b>Pag.</b>	<b>di</b>
	NNFISS – LP5 – 022	0	R	29	78

due. La prima, proposta dagli stessi Livolant e Jeanpierre e nota col nome di Approssimazione PIC, serve a trattare problemi con più zone risonanti. Questo è ovviamente fondamentale per risolvere spazialmente le reazioni di cattura nel fuel. Consiste nell'introdurre una struttura fine  $\varphi_\alpha$  per ogni zona risonante  $\alpha$ . Se è valida l'ipotesi NR allora è possibile operare altre approssimazioni che conducono ad un set di sottoproblemi tra loro indipendenti analoghi al caso elementare della teoria di Livolant e Jeanpierre. Quando l'ipotesi NR non è valida l'estensione proposta del metodo porta a gravi errori di calcolo. Un altro esempio di avanzamento del metodo di Livolant e Jeanpierre è quello per cercare di descrivere la compresenza di più nuclidi risonanti in una miscela. La proposta va sotto il nome di Calcolo "one by one". Si inizia col considerare un primo nuclide e trattarlo con il metodo base di Livolant e Jeanpierre, tutti gli altri nuclidi risonanti essendo considerati come non risonanti (cioè puramente scatteranti). Poi si valuta un secondo nuclide considerato risonante e si procede analogamente, considerando scatteranti tutti gli altri nuclidi, anche il primo nuclide trattato precedentemente, e così via. La prima domanda che emerge analizzando questa metodologia è quali sezioni d'urto devono essere usate per i nuclidi risonanti quando vengono considerati come scatteranti. Non esiste risposta a tale domanda e si possono solo dare consigli per minimizzare gli errori del calcolo approssimato. Ad esempio gli sviluppatori del codice Apollo forniscono le seguenti raccomandazioni:

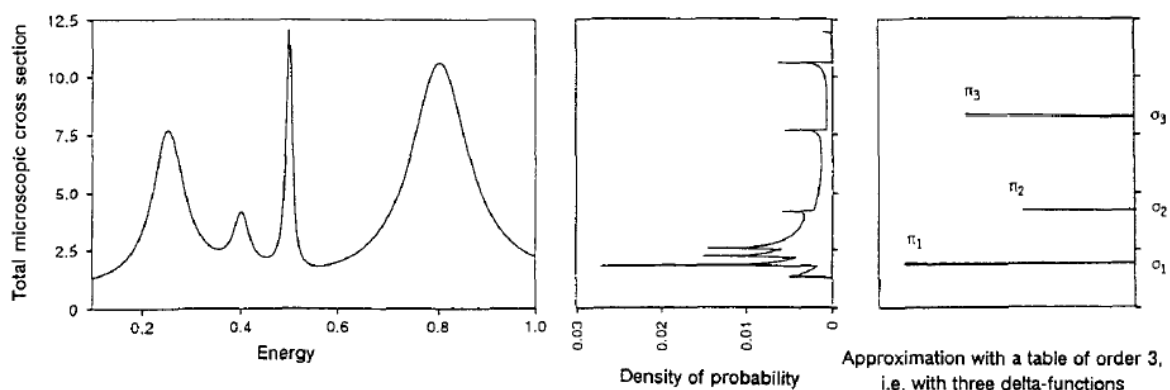
- per i nuclidi risonanti considerati scatteranti, se il self-shielding non è già stato trattato, si usino le sezioni d'urto senza trattamento di self-shielding;
- se il self-shielding è già stato trattato, si usino le sezioni d'urto autoschermate;
- si trattino i nuclidi risonanti in ordine decrescente di assorbimenti per risonanza, ad esempio 238U prima di 235U;
- non iterare la procedura.

Come si può vedere, la compresenza in una miscela di più isotopi risonanti complica molto il calcolo e non sempre è possibile giungere a sezioni d'urto autoschermate corrette. L'utilizzo di una struttura a gruppi che possa permettere di separare tra loro più risonanze consente certamente di minimizzare il problema e portare a risultati più accurati.

## Il metodo delle Tabelle di Probabilità

Il termine *tabella di probabilità* è stato usato per la prima volta da L. B. Levitt nel 1972; una versione del metodo era stata però introdotta, con il nome di *metodo del sottogruppo* o *metodo multibanda*, un paio di anni prima a Obninsk da M. N. Nikolaev. Sono state sviluppate diverse implementazioni, ad

esempio: *metodo di Levitt, metodo del sottogruppo, metodo di Cullen* ecc. In un dato gruppo energetico la struttura delle risonanze può essere assai complessa e complicata, tuttavia non tutti i suoi dettagli sono realmente necessari per caratterizzare in modo sufficientemente accurato l'assorbimento risonante. Infatti si può notare che la posizione esatta e la forma precisa delle risonanze all'interno di un dato gruppo energetico non sono fondamentali, ciò che è veramente importante sono i valori assunti dalla sezione d'urto e la distribuzione di questi valori all'interno del gruppo. Inoltre, come accade per ogni distribuzione di probabilità, e dunque anche per una sezione d'urto, ciò che è praticamente importante è conoscere l'insieme dei primi momenti della distribuzione: la distribuzione può essere rimpiazzata praticamente ricorrendo ad alcuni dei parametri descrittivi rappresentati dai primi due, tre momenti della distribuzione stessa. La quantità di informazione richiesta è dunque relativamente piccola. Su questi presupposti si basa l'approccio delle Tabelle di Probabilità. Il principio è illustrato in Figura 14. L'intervallo energetico di interesse è rimappato tra 0 ed 1 (primo grafico di Figura 14); si procede dunque alla misura della somma  $\pi(\sigma)d\sigma$  degli intervalli energetici elementari in cui la sezione d'urto assume valore compreso tra  $\sigma$  e  $\sigma + d\sigma$  (secondo grafico di Figura 14); la funzione  $\pi(\sigma)$  è dunque una densità di probabilità. Matematicamente è l'integrale di Lebesgue della sezione d'urto. Infine, disponendo di una funzione che è una densità di probabilità, la si approssima per semplicità con una distribuzione più semplice, ad esempio una somma di Delta di Dirac pesate, che conservi i momenti della distribuzione originale (terzo grafico di Figura 14).



**Figura 14: Schema concettuale del metodo delle Tabelle di Probabilità.**

La distribuzione è dunque rimpiazzata da un insieme di coppie  $(\sigma_i, \pi_i)$ , la c.d. Tabella di Probabilità, che possono essere utilizzate come punti di quadratura. A questo punto qualunque integrale di una

funzione generica della sezione d'urto può essere approssimato utilizzando usuali relazioni di quadratura. Se ad esempio si è interessati a calcolare la quantità

$$I \equiv \int_g F(\sigma(E))dE$$

e si dispone di un'approssimazione con  $N$  Delta di Dirac, cioè del tipo

$$\pi(\sigma) \cong \sum_{i=1}^N \pi_i \delta(\sigma - \sigma_i)$$

con

$$\sum_{i=1}^N \pi_i = 1$$

allora si può scrivere:

$$I \equiv \int_g F(\sigma(E))dE = \int_{\sigma_{min}}^{\sigma_{max}} F(\sigma)\pi(\sigma)d\sigma \approx \sum_{i=1}^N F(\sigma_i)\pi_i$$

Fissato che sia l'intero  $N$  si può dimostrare che la miglior scelta di elementi per la Tabella di Probabilità è quella che deriva dalla conservazione di  $2N$  momenti, ovvero risolvendo le  $2N$  equazioni

$$\int_g \sigma^k(E)dE = \int \sigma^k \pi(\sigma)d\sigma = \sum_{i=1}^N \sigma_i^k \pi_i \quad k = -N + 1..N$$

Si fa notare che è raccomandato usare anche momenti negativi e che, nel caso in cui fosse  $k = 0..2N - 1$ , la quadratura usata coinciderebbe con quella di Gauss.

Il metodo delle Tabelle di Probabilità è molto accurato quando le risonanze sono ad alta energia e quindi molto strette (applicabilità per reattori a spettro veloce); sfortunatamente se la risonanza è larga, e ciò accade alle energie termiche, la densità di neutroni scatterati all'interno di una risonanza risente molto della reale struttura risonante. E' possibile correggere i calcoli per tenere in conto di questo fenomeno, ma un approccio tipo Livolant-Jeanpierre è certamente più semplice.

Occorre infine ricordare che il metodo delle Tabelle di Probabilità non è in grado di distinguere tra sezioni d'urto diverse che siano però rappresentate dalla stessa funzione di distribuzione  $\pi(\sigma)$ , come ad esempio quelle di Figura 15.

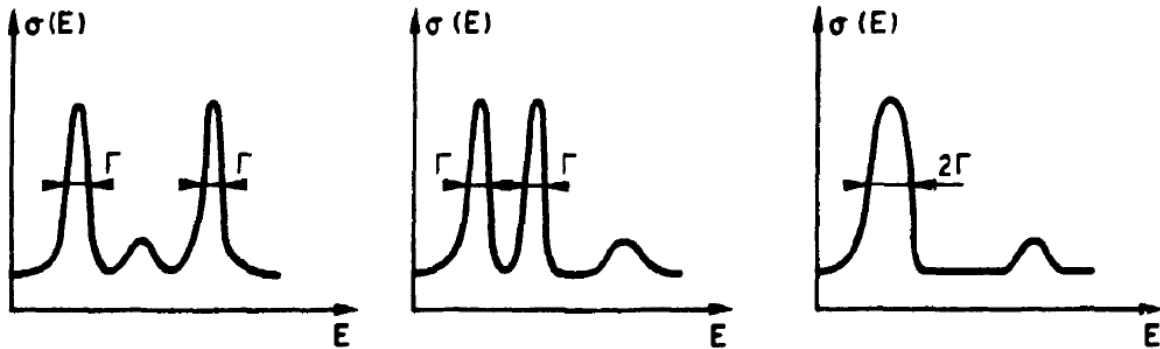


Figura 15: Tre sezioni d'urto rappresentate dalla stessa Tabella di Probabilità.


### Modelli semplificati del kernel di rallentamento per l'omogeneizzazione

Si è visto più sopra che è necessario ricorrere ad un modello semplificato per il kernel di rallentamento per scrivere una relazione di equivalenza tra caso eterogeneo ed omogeneo nell'ambito della teoria di Livolant e Jeanpierre. Si era detto che un modello usato frequentemente era basato sull'ipotesi di narrow resonances. Sono tuttavia stati introdotti anche altri modelli semplificati. Ad esempio, quando le risonanze sono larghe, situazione tipica alle basse energie e dunque di interesse per reattori termici, si può fare ricorso all'ipotesi semplificativa di *wide resonances* (WR). Se  $u$  è in corrispondenza di una risonanza, allora quasi tutti i valori  $u'$  che contribuiscono all'integrale  $r_0\varphi$  sono in un intorno di  $u$  e dunque si può porre  $\sigma_{s0}(u') \cong \sigma_{s0}(u)$  e dunque:

$$r_0\varphi \cong \sigma_{s0}\varphi(u) \text{ e } \quad \varphi(u) \cong \frac{\sigma_d}{\sigma_{a0}(u) + \sigma_d}$$

per cui si ottiene la seguente relazione di equivalenza:

$$\int \frac{\sigma_e}{\sigma_{a0}(u) + \sigma_e} \sigma_{a0} du = \int \frac{\sigma_d}{\sigma_{a0}(u) + \sigma_d} \sigma_{a0} du$$

 <b>Ricerca Sistema Elettrico</b>	<b>Sigla di identificazione</b>	<b>Rev.</b>	<b>Distrib.</b>	<b>Pag.</b>	<b>di</b>
	NNFISS – LP5 – 022	0	R	33	78

Altri modelli a disposizione sono quello di *intermediate resonances* (IR), lo *statistical model* (ST), detto anche a “*molte risonanze*” e il modello a “*tutte risonanze*” (AR). In alcuni codici di cella, ad esempio in Apollo2, è concesso all’utente di specificare per quale range energetico applicare un modello anziché un altro, in modo da sfruttare le proprietà migliori di ogni modello nel range energetico adatto.

### Correzioni per considerare l’assorbimento da parte dei moderatori

Si è detto più sopra che la procedura “one by one” viene adottata quando si è in presenza di una miscela di assorbitori risonanti. Un nuclide alla volta viene considerato risonante ed i rimanenti vengono considerati puramente scatteranti. Tuttavia questa ipotesi di nuclide puramente scatterante può essere troppo forte. Si può allora introdurre nell’equazione di rallentamento di Livolant e Jeanpierre un fattore correttivo  $\gamma = \Sigma_s / \Sigma$  che distingue tra scattering e sezione d’urto totale; l’introduzione avviene solo nel termine forzante dell’equazione:

$$r_0\varphi + \gamma\sigma_{ae} = (\sigma_0 + \sigma_e)\varphi$$

In conseguenza di ciò è sufficiente a livello matematico moltiplicare per  $\gamma$  il flusso e le reaction rates efficaci ottenuti per il caso “one by one” semplice.

### 3. Alto burnup: Boro, veleni bruciabili e Gadolinio

Un’altra importante richiesta industriale con notevoli ricadute sull’economia dei cicli di carico/scarico del combustibile e dunque con largo impatto sul miglioramento del fattore di carico in un impianto LWR, è l’estensione del burnup ad alti valori. Come si può vedere in Figura 16 (fonte: EPRI), il burnup medio allo scarico del combustibile è cresciuto, con un rateo leggermente maggiore per i BWR, passando da 25-35 GWd/t degli inizi degli anni ’90 ai 40-45 GWd/t del 2006.

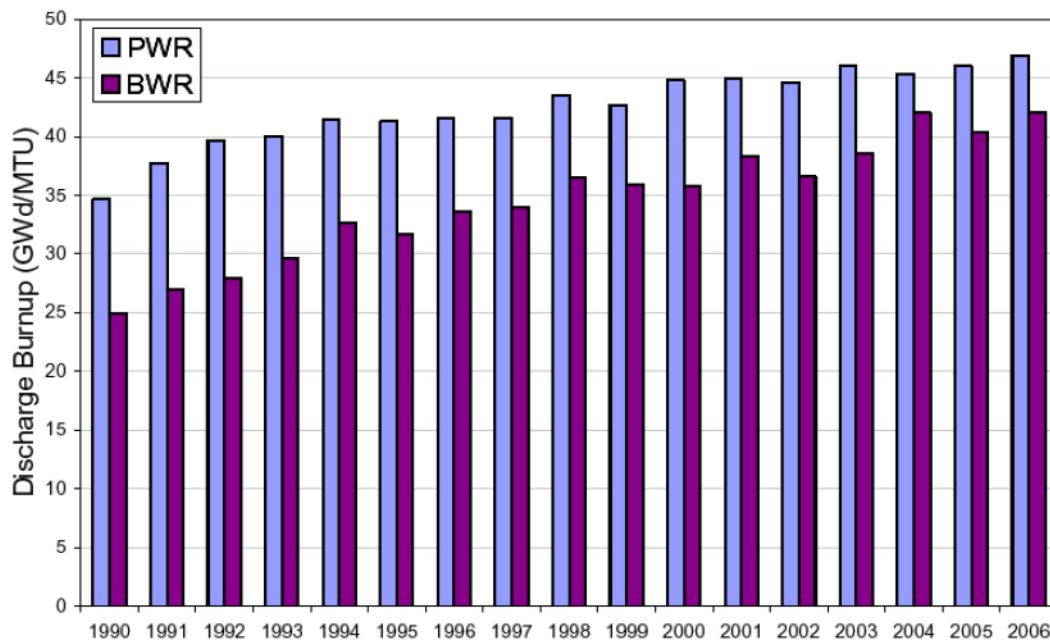


Figura 16: Burnup medio allo scarico per LWR.

La possibilità di aumentare il burnup allo scarico è essenzialmente legata alla possibilità di aumentare il surplus di reattività disponibile, e questo è essenzialmente dato per combustibili UOX dall'arricchimento iniziale. Infatti il ruolo di accumulo di  $^{239}\text{Pu}$  cessa di contribuire al margine di reattività di un LWR ad UOX allorché la sua concentrazione raggiunge il livello di equilibrio. Il ruolo di  $^{239}\text{Pu}$  nella criticità di un LWR è oggi giorno fondamentale; all'aumentare del burnup, una percentuale sempre maggiore della potenza totale generata è dovuta al nuovo fissile prodotto all'interno del nocciolo. Ad un burnup di 30 GWd/t, circa il 30% dell'energia totale generata deriva dal bruciamento del plutonio prodotto per breeding; a 40 GWd/t la percentuale sale a circa il 40%; questo corrisponde ad un breeding ratio di circa 0.4-0.5, cioè quasi il 50% del fissile viene prodotto nei noccioli stessi. I reattori LWR di III Generazione sono stati progettati per consentire burnup molto elevati (per un EPR tra 55 e 65 GWd/t, 5% di arricchimento; le utilities francesi stanno in questi ultimi anni valutando di estendere il burnup per LWR a 80 GWd/t) e quindi alti breeding ratios, dell'ordine di 0.7-0.8, con un miglioramento dell'economia del combustibile, rispetto ai più avanzati reattori di seconda generazione, di un 15% circa. Il livello di equilibrio di  $^{239}\text{Pu}$  però viene raggiunto abbastanza rapidamente. Ecco quindi la necessità di ricorrere ad elevati arricchimenti in  $^{235}\text{U}$  ad inizio vita. Il trend del burnup allo scarico continuerà ovviamente ad aumentare negli anni, stanti i benefici economici derivanti, tuttavia ci sono dei limiti importanti imposti proprio dal massimo arricchimento consentito in  $^{235}\text{U}$ , dettato quest'ultimo da ragioni connesse alla security ed alla non proliferazione. In Figura 17 è mostrato il legame tra arricchimento iniziale in  $^{235}\text{U}$  e massimo burnup raggiungibile

per un LWR. E' immediato concludere dai dati del grafico che se si vuole limitare l'arricchimento al 5% (LEU) occorre accontentarsi di un burnup massimo di circa 60 GWd/t, valore questo che già comprende in sé gli effetti benefici derivanti dall'adozione dei rimedi tipici atti a limitare l'eccesso di reattività ad inizio vita dovuto ad un elevato arricchimento. Tali rimedi consistono nell'utilizzo dei ben noti veleni bruciabili. Ad oggi il burnup massimo consentito alle utilities dagli enti regolatori è di circa 55 GWd/t (60 GWd/t in Germania e Svizzera).

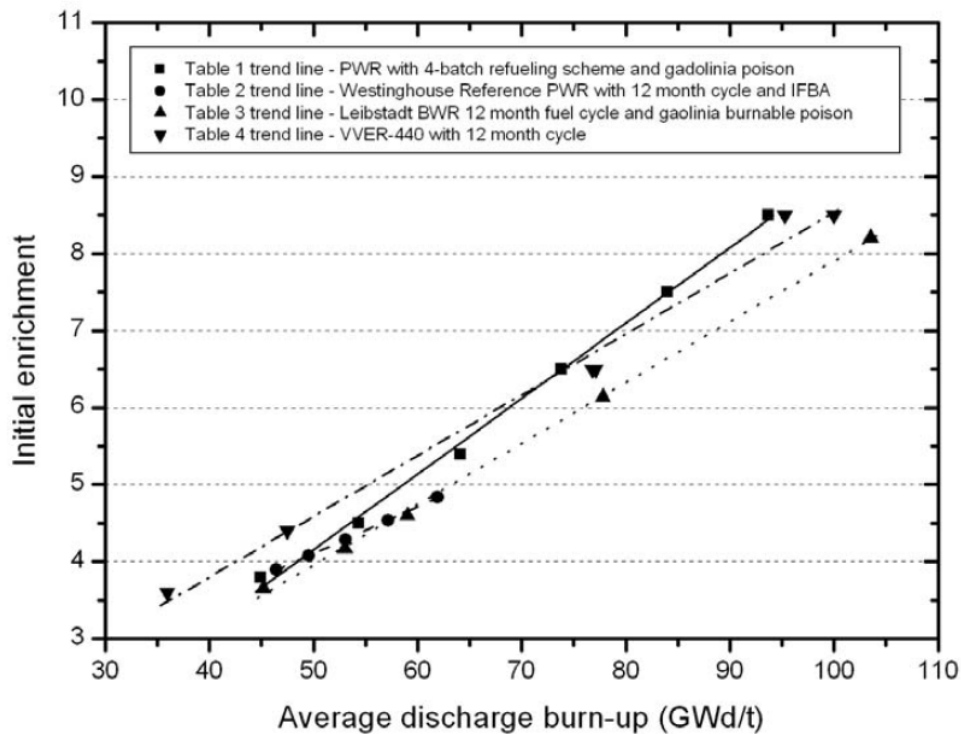


Figura 17: Discharge burn-up vs arricchimento iniziale (w%) in 235U.

I codici di neutronica per LWR sono ad oggi poco o per nulla validati per valori di burnup allo scarico molto elevati. Inoltre i codici di progetto tipicamente prendono in esame solo un numero limitato di prodotti di fissione e di attinidi, numero che potrebbe essere inadatto per l'accuratezza richiesta dai calcoli ad alto burnup. E' dunque evidente che le librerie ed i codici di neutronica dovranno essere adattati anche per soddisfare la richiesta di calcoli ad alto burnup. Un'altra possibile limitazione dei codici attuali è che le costanti a pochi gruppi utilizzate nei calcoli di nocciolo o di bruciamento rapido (es. Origen) siano parametrizzate proprio in funzione del burnup o di altri parametri tecnologici (densità, temperatura, concentrazioni isotopiche); le parametrizzazioni dovranno pertanto essere estese nel caso si voglia fare calcoli a burnup più elevati. E' quindi necessario raffinare la modellizzazione della catena di depletion e le parametrizzazioni a pochi gruppi per ottenere risultati accurati.

Un esempio delle difficoltà di calcolo associate a queste esigenze è la descrizione del bruciamento del gadolinio. Stanti infatti i problemi neutronici connessi all'uso di acido borico nei PWR, si preferisce oggi ricorrere al gadolinio come veleno bruciabile. Il principale vantaggio nell'uso dell'acido borico  $B(OH)_3$  in soluzione acquosa consiste nel fatto che la distribuzione dell'acido borico nel nocciolo è omogenea e dunque non altera la distribuzione di potenza. Il principale svantaggio è legato al fatto che l'acido borico aggiunge un contributo positivo al coefficiente negativo di temperatura del nocciolo. Le proprietà di cattura della soluzione di boro sono aggiunte a quelle del moderatore nel numeratore dell'espressione  $1/f-1$  (ad esempio con 1000 ppm di boro nel nocciolo la sezione d'urto di assorbimento del moderatore è circa triplicata rispetto a quella dell'acqua priva di boro): l'aggiunta del boro abbassa il fattore  $f$  e quindi  $k_{\infty}$ , proprio come si desidera, con un tasso di circa -8 pcm per ogni ppm di boro per un fuel UOX, e di circa -4 pcm per ogni ppm di boro per un fuel MOX, la differenza essendo causata dallo spettro più duro tipico di un nocciolo MOX. L'aggiunta del boro però deforma la curva del prodotto  $pf$  (vedi oltre) spostando il punto di moderazione ottima verso valori molto bassi del rapporto  $p/d$  (da circa 4 in assenza di boro a circa 2 con 1000 ppm). I progettisti devono scegliere un valore abbastanza basso del rapporto  $p/d$  per avere un minimo di flessibilità nell'uso dell'acido borico senza compromettere la sicurezza dell'impianto; c'è però un limite minimo al rapporto  $p/d$  dettato da considerazioni termiche, meccaniche ed idrauliche e dunque un limite al quantitativo massimo di acido borico solubile in acqua, e questo si riflette in uno scarso potere di contenimento del surplus di reattività ad inizio vita in caso di alto arricchimento. La ragione del contributo positivo dell'acido borico al coefficiente di temperatura è dovuta al fatto che anche il boro si espande con l'acqua all'aumentare della temperatura. Ecco dunque che per minimizzare questi effetti si cerca di ricorrere a veleni bruciabili solidi come il gadolinio. La concentrazione di un veleno bruciabile obbedisce alla seguente equazione:

$$\frac{dn_{bp}}{dt} = -f_{bp}(n_{bp})n_{bp}\sigma_{bp}\phi$$

in cui  $f_{bp}$  è l'autoschermo del veleno, ovvero il rapporto tra il flusso nell'elemento avvelenato ed il flusso in un elemento adiacente. La concentrazione iniziale di veleno viene scelta in modo che l'autoschermo spaziale sia molto elevato ( $f_{bp} \ll 1$ ) all'inizio del ciclo di bruciamento per schermare il veleno dalla cattura neutronica, rendendo abbastanza costante nel tempo il tasso di cattura neutronica. Dopo un certo tempo la concentrazione si è sufficientemente ridotta al punto che  $f_{bp}$  aumenta ed il veleno inizia ad essere bruciato sempre più velocemente. Se il veleno inizia ad essere bruciato considerevolmente circa allo stesso momento in cui l'effetto di reattività dovuta al

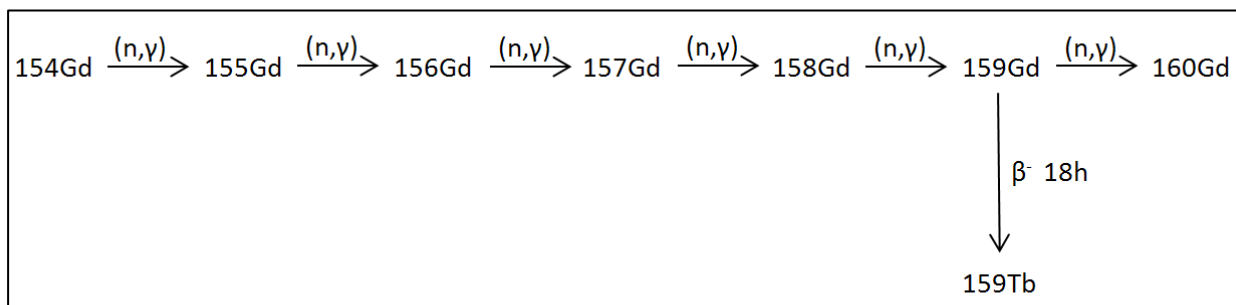
bruciamento del fuel diviene sempre più negativo (cioè in pratica quando la concentrazione di  $^{239}\text{Pu}$  inizia a saturare), allora il bruciamento del veleno può, almeno parzialmente, compensare la diminuzione di reattività dovuta al bruciamento del fuel.

Il gadolinio, metallo di numero atomico 64, possiede 7 isotopi stabili naturali la cui abbondanza isotopica naturale è data in [Tabella 6](#). Fonde a  $1312\text{ }^\circ\text{C}$ .

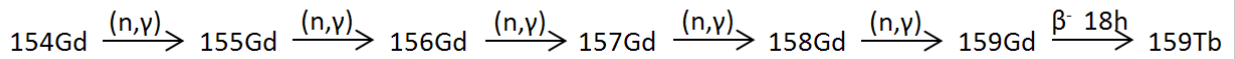
**Tabella 6: Alcuni dati sugli isotopi naturali del Gadolinio**

Isotopo	Abbondanza (%)	$\sigma_c$ (b) @ 0.025 eV
152	0.20	1100
154	2.15	85
155	14.73	51000
156	20.47	1.5
157	15.68	254000
158	24.87	2.5
160	21.90	0.77

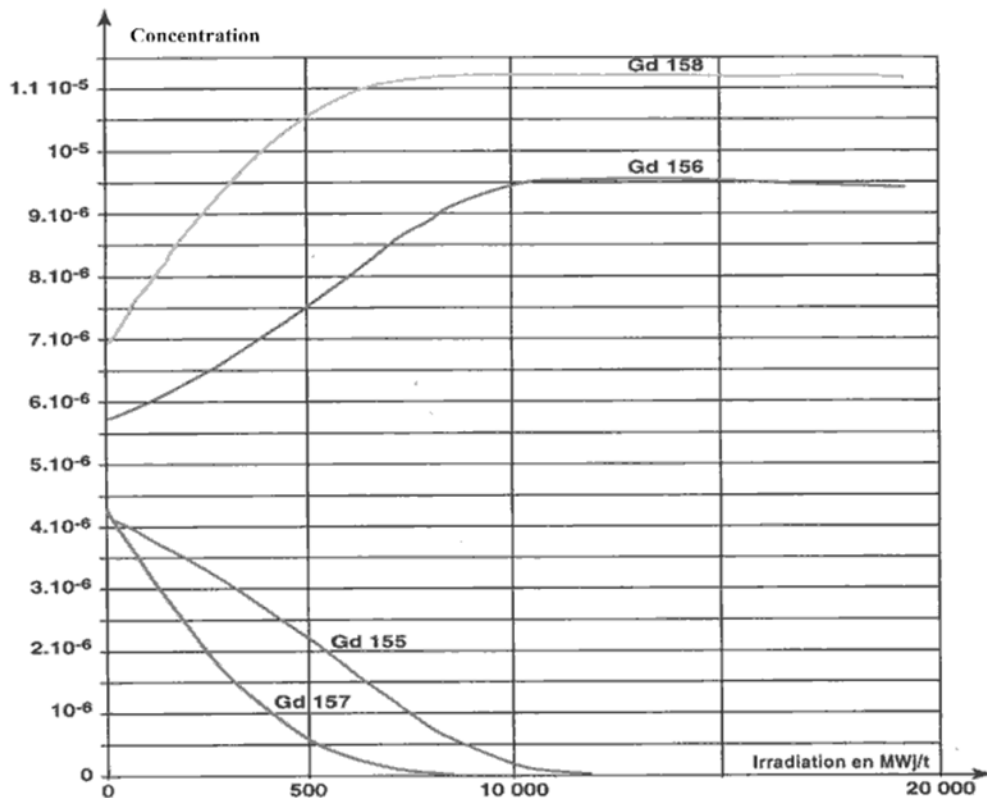
Il gadolinio viene introdotto sotto forma di ossido  $\text{Gd}_2\text{O}_3$ , che ha una temperatura di fusione più elevata del metallo ( $2340\text{ }^\circ\text{C}$ ), al fine di assorbire neutroni termici all'interno di pellet di  $\text{UO}_2$  a bassissimo arricchimento (0.02-0.03%). La motivazione risiede nel fatto che l'ossido misto  $\text{UO}_2\text{-Gd}_2\text{O}_3$  possiede una conduttività termica molto bassa e dunque occorre limitare la potenza generata per fissione al fine di limitare la temperatura massima del combustibile gadolinato. Gli isotopi del gadolinio formano una catena continua grazie alle reazioni di cattura neutronica, vedi [Figura 18](#). Tenuto conto dell'abbondanza isotopica e delle sezioni d'urto, la catena può essere semplificata, vedi [Figura 19](#).



**Figura 18: Catena del Gadolinio.**


**Figura 19: Catena semplificata del Gadolinio.**

Analizzando abbondanze isotopiche e sezioni d'urto a 0.025 eV, si può concludere che gli isotopi dispari 155 e 157 giocano il ruolo preponderante; in seconda istanza si considerano gli isotopi pari 156 e 158, e da ultimi gli isotopi 154 e 160. Nel corso dell'evoluzione del combustibile l'importanza degli isotopi 156 e 158 cresce per la diminuzione degli isotopi dominanti (155 e 157) e per l'aumento della loro stessa concentrazione (cf. Figura 20).


**Figura 20: Evoluzione degli isotopi del gadolinio per un assembly PWR a 16 elementi gadolinati.**

Un aumento dell'efficacia del gadolinio come veleno bruciabile sembra più legato ad un arricchimento negli isotopi dominanti piuttosto che in un incremento del tenore di gadolinio negli elementi, anche per non deteriorare troppo la conducibilità termica delle pastiglie. Tipicamente il tenore di ossido di gadolinio varia tra il 4 ed il 10% in massa. Grazie all'impoverimento in <sup>235</sup>U nelle

pastiglie gadolinate, si può senza grosso errore ritenere che la temperatura di centro pellet delle pastiglie gadolinate coincida praticamente con quella della guaina. In un PWR da 900 MWe, arricchito al 4.5% in  $^{235}\text{U}$  la temperatura di bulk del moderatore è di circa  $305\text{ }^{\circ}\text{C}$  e la temperatura di guaina è di circa  $335\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

Un tipico assembly per il PWR appena descritto è del tipo 17x17; un quarto di tale assembly è mostrato in Figura 21. E' composto da 248 elementi di combustibile, 25 tubi guida e 16 elementi gadoliniati.

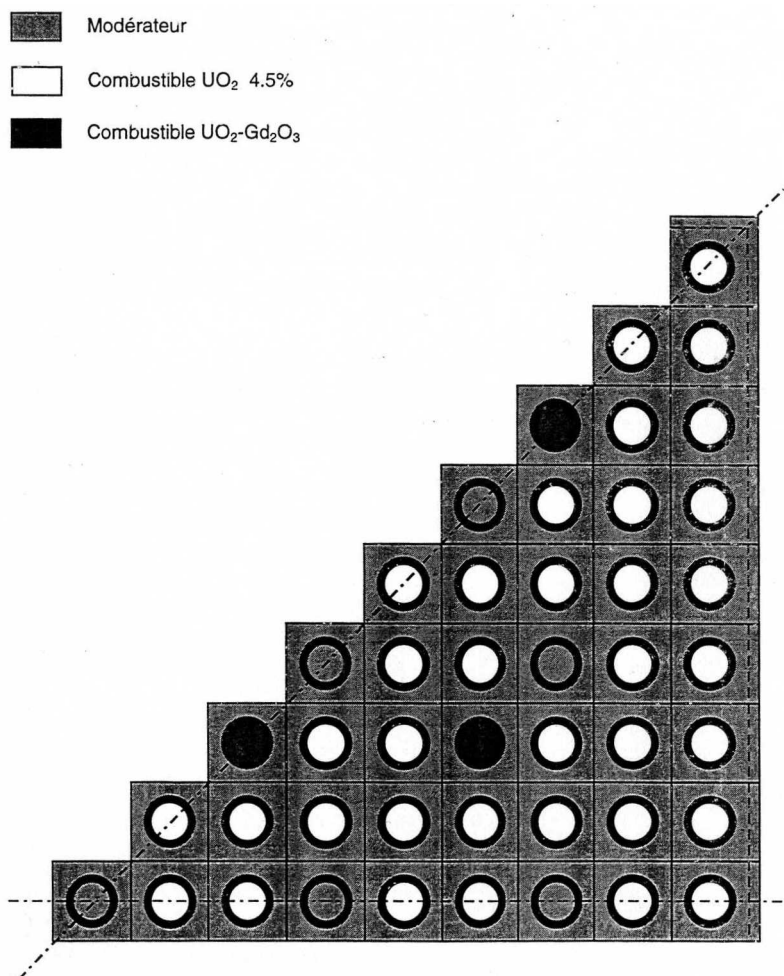


Figura 21: Un quarto di assembly gadolinato PWR 17x17.

L'introduzione di elementi gadoliniati perturba fortemente il flusso termico in prossimità degli elementi stessi, a causa del fortissimo assorbimento; si instaura pertanto un forte gradiente del flusso che richiede, per essere studiato accuratamente, un grande infittimento del magliaggio in prossimità degli elementi nella discretizzazione spaziale del flusso. Tale gradiente si instaura anche

all'interno delle pellet gadolinate a causa del fortissimo autoschermo; per tenere in conto tale effetto e per calcolare accuratamente il bruciamento del gadolinio, occorre discretizzare le pellet in una serie di corone circolari concentriche. Studi parametrici condotti dal CEA hanno mostrato, usando il codice Apollo2, che sarebbero necessarie 11 corone circolari per riprodurre i calcoli, assunti come riferimento, fatti con un codice Montecarlo. Questo ovviamente implica lunghi tempi di calcolo. Come soluzione di trade-off tra i tempi di calcolo e l'accuratezza, il CEA propone di limitare all'atto pratico il numero di corone a 6 (Apollo2.960/CEA93.V2 a 172 gruppi). Una discretizzazione in corone circolari è altrettanto necessaria per gli elementi di combustibile (vedi oltre); la proposta CEA è di usare sempre 6 corone. Il calcolo a BOL dunque è costituito dall'utilizzo di 6 corone sia per gli elementi di combustibile che per gli elementi gadolinati; gli isotopi che devono essere processati per l'autoschermo sono  $^{238}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$ ,  $^{91}\text{Zr}$ ,  $^{155}\text{Gd}$ ,  $^{157}\text{Gd}$ ,  $^{158}\text{Gd}$ ,  $^{156}\text{Gd}$ ; non è necessario processare  $^{154}\text{Gd}$  e  $^{160}\text{Gd}$ . Il calcolo eterogeneo viene eseguito con le Probabilità di Collisione in geometria 2D esatta. Per lo studio del combustibile in evoluzione è necessario schermare anche gli isotopi  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Pu}$ ,  $^{242}\text{Pu}$ . Tra 0 e 80 Gwd/t occorrono almeno 104 passi temporali non uniformi di evoluzione; l'autoschermo deve essere ricalcolato 16 volte al raggiungimento dei seguenti burnup: 2000, 4000, 5000, 7000, 10000, 12000, 13000, 14000, 16000, 18000, 20000, 24000, 36000, 48000, 60000, 72000 MWd/t. Il risultato è mostrato in Figura 22.

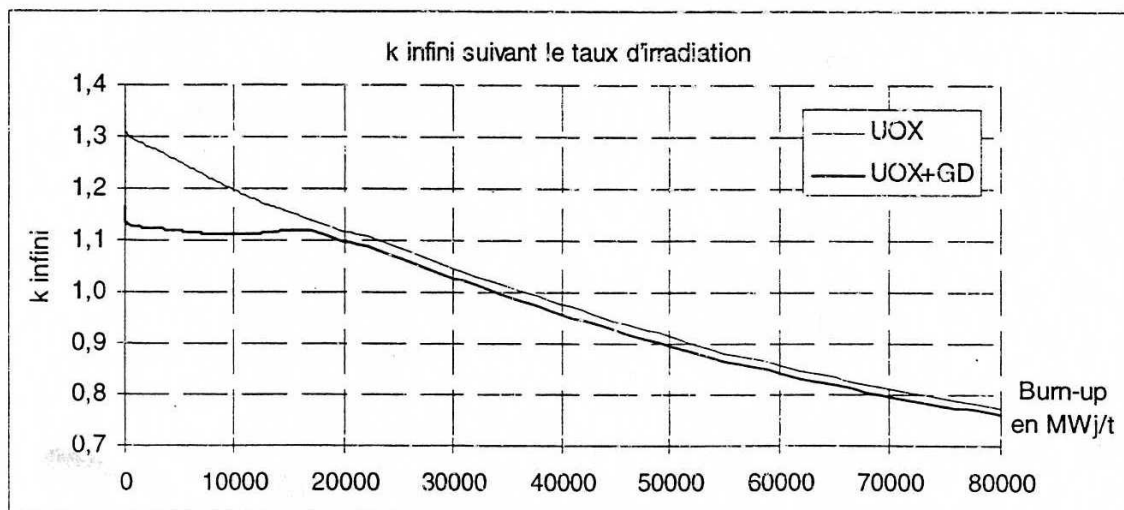


Figura 22: Evoluzione di  $k_{\infty}$  per l'assembly PWR gadolinato.

In tale figura viene mostrato l'andamento del fattore di moltiplicazione infinita per un assembly non gadolinato e per lo stesso assembly in cui 16 elementi siano stati sostituiti da elementi gadolinati come descritti precedentemente. Si vede come l'effetto del bruciamento del gadolinio termini

attorno a 18 GWd/t; al proseguire del burnup le due curve si mantengono parallele e scostate tra loro di quella quantità che viene denominata *penalità residua*, pari a circa 1800 pcm. Tale penalità è data solo in minima parte da un eventuale residuo di gadolinio ed in massima parte è dovuta al fatto che gli assembly gadoliniati hanno sottratto fissile all'assembly in quanto in essi l'uranio è fortemente impoverito. La c.d. *penalità iniziale*, che altro non è se non l'effetto voluto di contenimento della reattività iniziale, è di circa 14400 pcm; il bruciamento del gadolinio tra 0 e 18 GWd/t è tale per cui  $k_{\infty}$  rimane circa costante. Lo studio non ha preso in esame la contemporanea presenza di acido boric disciolto nell'acqua. Il burnup massimo consentito da questa configurazione (studiata nel 1997) era, come ben messo in evidenza dalla figura, di circa 30 GWd/t.

Altri possibili veleni bruciabili che sono stati presi in considerazione, specie negli USA, sono i c.d. IFBA e gli isotopi dell'erbio. Gli IFBA consistono in un sottile strato superficiale di diboruro di zirconio depositato sulla superficie degli elementi di combustibile. Gli isotopi dell'erbio sono usati similmente al gadolinio in forma di ossido  $Er_2O_3$ .

#### 4. Il rapporto p/d

Il rapporto p/d, passo su diametro, per una cella elementare di un reticolo di un assembly è uno dei parametri fondamentali, non solo dal punto di vista neutronico, di un reattore termico. Esso infatti è correlabile al rapporto tra volume di moderatore e volume di fuel nella cella elementare, rapporto che prende comunemente il nome di *rapporto di moderazione*. Assumendo una cella quadrata di altezza unitaria e trascurando il cladding risulta infatti:

$$\frac{V_m}{V_f} = \frac{p^2 - \pi/4 d^2}{\pi/4 d^2} = \frac{p^2}{\pi/4 d^2} - 1 \rightarrow \frac{p}{d} = \sqrt{\frac{4}{\pi} \left( 1 + \frac{V_m}{V_f} \right)}$$

Il rapporto di moderazione influenza il fattore di utilizzazione termica  $f$  e la probabilità di fuga alle risonanze  $p$  nella formula dei quattro fattori. Se il rapporto di moderazione aumenta da 0 a  $+\infty$ ,  $p$  aumenta da 0 a 1 (senza moderatore i neutroni non potrebbero infatti essere rallentati e viceversa se il moderatore è infinitamente vasto la moderazione è tale che tutti i neutroni sfuggono alle risonanze). Viceversa il fattore  $f$  decresce da 1 a 0 all'aumentare del rapporto di moderazione; vale infatti:

$$\frac{1}{f} - 1 = \frac{V_m \Sigma_{a,m} \Phi_m}{V_f \Sigma_{a,f} \Phi_f} = \frac{N_m V_m \sigma_{a,m} \Phi_m}{N_f V_f \sigma_{a,f} \Phi_f}$$

Il rapporto tra il flusso nel moderatore e nel fuel, il c.d. *fattore di svantaggio termico*, è maggiore di 1 a causa dell'autoschermo spaziale; in un PWR a UO<sub>2</sub> vale circa 1.05, mentre per combustibile MOX, a causa del maggior autoschermo dovuto alle ben più efficaci risonanze del plutonio, vale circa 1.1.

Poiché nella formula dei quattro fattori  $p$  ed  $f$  sono tra loro moltiplicati, esisterà un valore del rapporto di moderazione che massimizza tale prodotto e dunque il fattore di moltiplicazione infinito. Tale rapporto è pertanto il valore ottimale dal punto di vista dell'ottenimento della criticità. In Figura 23 vengono mostrati gli andamenti tipici per un PWR a UO<sub>2</sub> dei fattori  $p$  ed  $f$  e del loro prodotto. Il prodotto  $pf$  presenta una concavità verso il basso ed un solo massimo. L'ottimo è a valori del rapporto di moderazione leggermente al di sopra di 4. I reticoli con rapporto di moderazione superiori all'ottimo vengono detti *sovramoderati*; i reticoli con rapporto di moderazione inferiori all'ottimo vengono detti *sottomoderati*. Il progettista sceglie di usare reticoli sottomoderati, rinunciando ad un certo margine di reattività, per ragioni di sicurezza; infatti se per una qualunque ragione, anche incidentale, la temperatura del moderatore dovesse aumentare si avrebbe uno spostamento verso sinistra del rapporto di moderazione sulla curva di Figura 23, causato dalla diminuzione di densità, con conseguente inserzione di reattività negativa che tende a ridurre l'aumento di temperatura ed a riportare il funzionamento del reattore nello stato precedente (funzionamento stabile). Viceversa, se il  $p/d$  scelto dal progettista fosse tale da trovarsi a destra del punto di ottimo, un aumento di temperatura, che tenderebbe sempre a spostare verso sinistra il punto di funzionamento, produrrebbe un'inserzione di reattività positiva che esalterebbe molto pericolosamente l'aumento di temperatura stesso (funzionamento instabile).

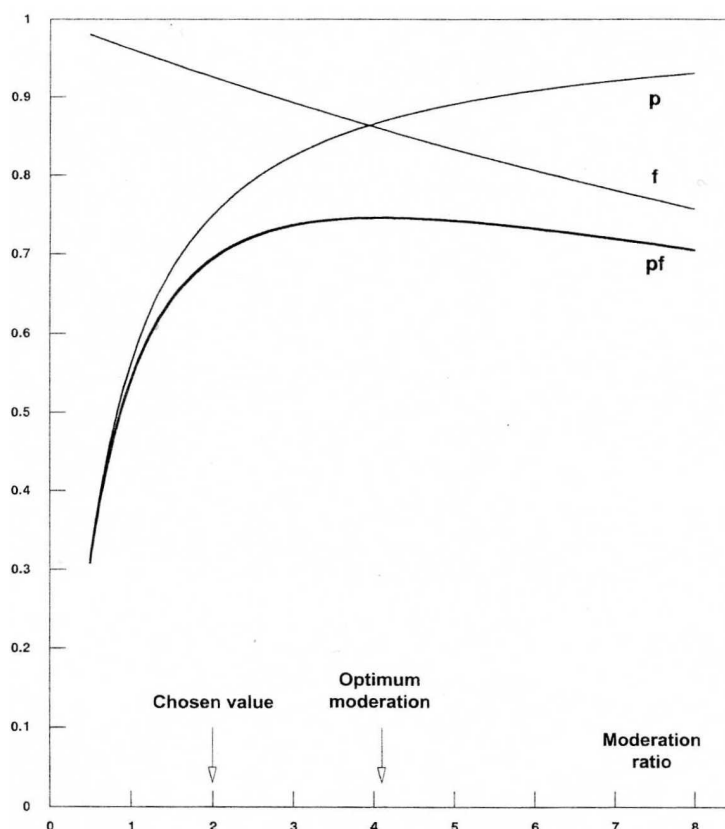


Figura 23: Prodotto  $pf$  in funzione del rapporto di moderazione.

D'altra parte la penalizzazione di avere una reattività inferiore a quella massima è attenuata dal fatto che, in reticoli sottomodernati, le maggiori catture in zona risonante del  $^{238}\text{U}$  si traducono in maggior produzione di  $^{239}\text{Pu}$  con possibilità dunque di un'estensione della vita utile del combustibile in reattore.

L'introduzione di acido boricco disciolto nel moderatore, come già anticipato più sopra, provoca sì una diminuzione di  $k_{\infty}$  ma anche una più forte diminuzione di  $f$ , col risultato che il punto di ottimo si sposta molto a sinistra (vedi Figura 24), attorno a 2.5 per una concentrazione di circa 1000 ppm di boro. Il valore tipicamente scelto dal progettista di un PWR è circa 2, in modo da poter comunque rendere l'utente in grado di contare sino ad un massimo di 1000 ppm di boro ( $\Delta k \approx -8000$  pcm).

Nel caso in cui il combustibile fosse MOX, si avrebbe il vantaggio che il fattore  $f$  diminuisce molto meno all'aumentare del rapporto di moderazione, col risultato che il punto di ottimo risulta molto più a destra di quello per fuel  $\text{UO}_2$  (vedi Figura 25); questo consente un maggior margine di operatività nell'uso di acido boricco.

Un ulteriore vantaggio derivante dall'utilizzo di un basso rapporto di moderazione è dato dal fatto che in questo modo il nocciolo risulta anche dimensionalmente più compatto.

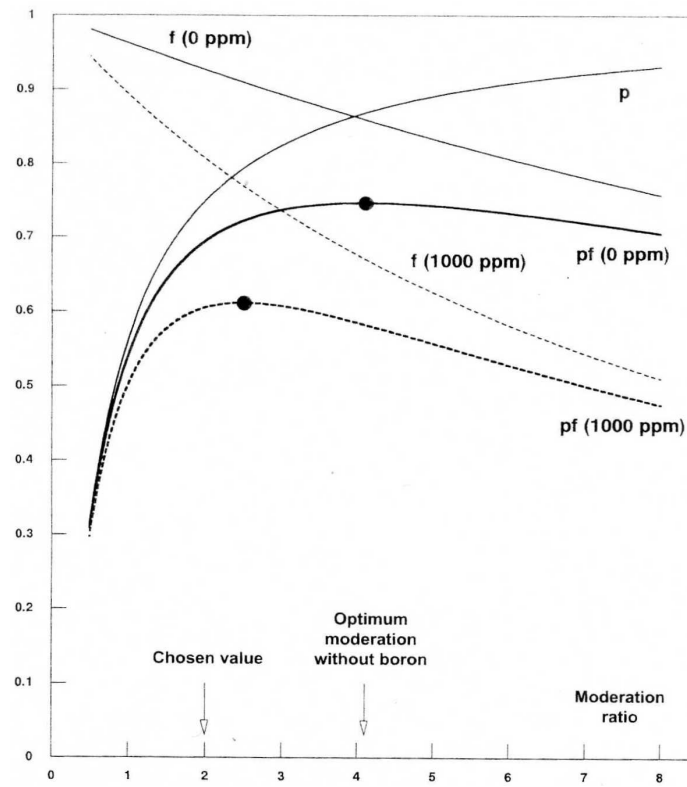


Figura 24: Variazione del prodotto  $pf$  a seguito di aggiunta di boro.

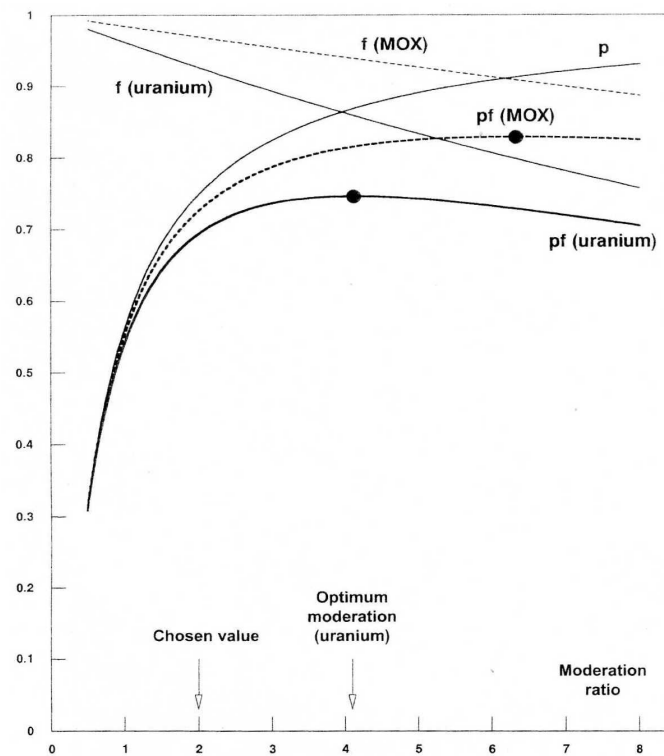


Figura 25: Effetto del plutonio sul prodotto  $pf$ .

In Figura 26 e Figura 27 sono schematizzati gli andamenti del prodotto  $pf$  al variare del rapporto di moderazione ed in funzione dell'arricchimento in  $^{235}\text{U}$  e del raggio della barretta di combustibile rispettivamente. All'aumentare dell'arricchimento il punto di ottimo si sposta leggermente verso valori maggiori del rapporto di moderazione. La dipendenza dal raggio della barretta di combustibile, a parità di rapporto di moderazione, è assai interessante poiché mette ben in evidenza l'effetto di fenomeni tra loro contrastanti. Al diminuire del raggio aumenta infatti il rapporto superficie su volume del combustibile, con conseguente aumento degli assorbimenti di risonanza (che avvengono nello strato esterno della pellet). L'opacità della barretta di combustibile allo stesso modo diminuisce. Un secondo effetto è la riduzione del picco di flusso neutronico nel moderatore e della sua depressione nel combustibile, con una diminuzione del fattore di svantaggio. Infatti, a parità di rapporto di moderazione, al diminuire del raggio della barretta si ha anche una diminuzione del passo; questo equivale ad una maggiore omogeneizzazione del combustibile per i neutroni termici. In noccioli sottomodernati prevale l'effetto di assorbimento per risonanza. Infine la diminuzione di  $k_{\infty}$  al diminuire del rapporto di moderazione è più accentuata per un assembly con raggio di barretta minore, e questo implica un coefficiente di reattività maggiormente negativo. Tutti questi motivi, unitamente alla possibilità di avere una densità lineare di potenza termica minore, hanno fatto sì che nel tempo gli assembly per LWR avessero una struttura con numero di barrette sempre maggiori a parità di rapporto  $p/d$  (per un PWR si è passati dagli assembly  $14 \times 14$  agli attuali  $17 \times 17$ ).

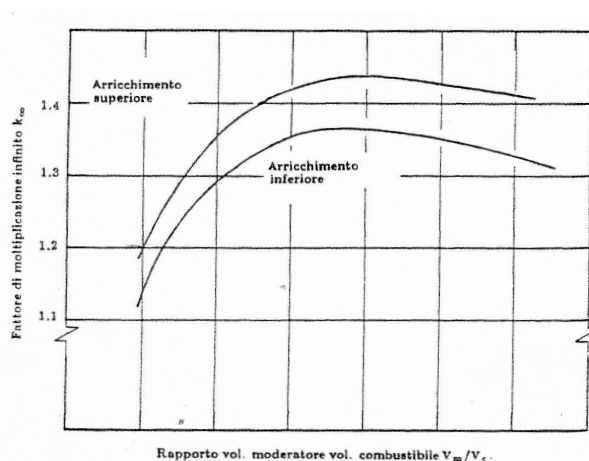


Figura 26: Variazione di  $pf$  al variare dell'arricchimento.

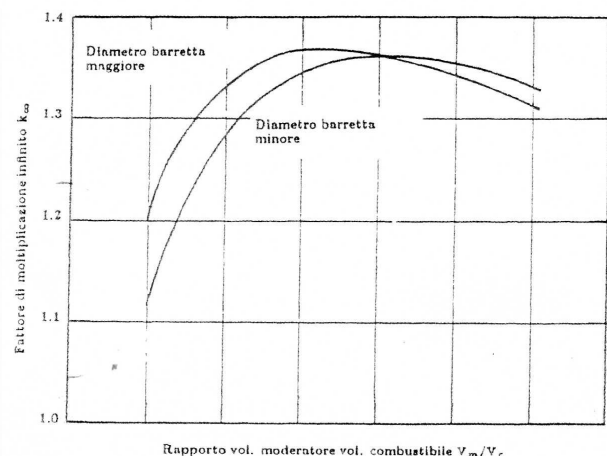


Figura 27: Variazione di  $pf$  al variare del raggio della barretta.

In Figura 28 sono riassunti gli effetti descritti sinora.

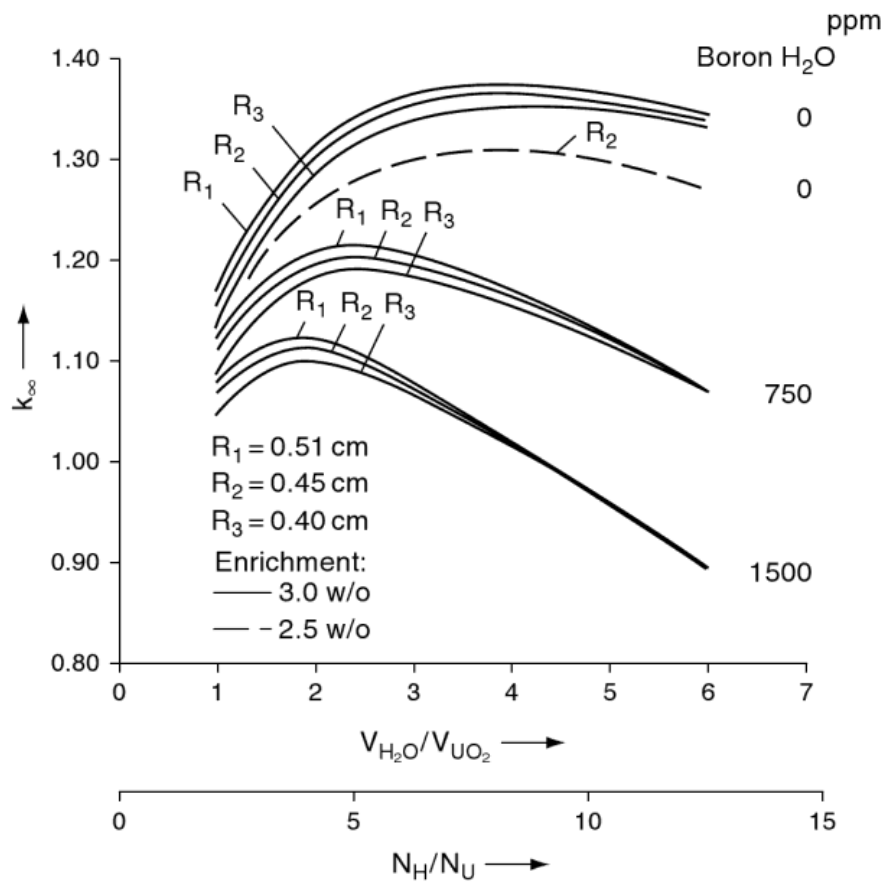
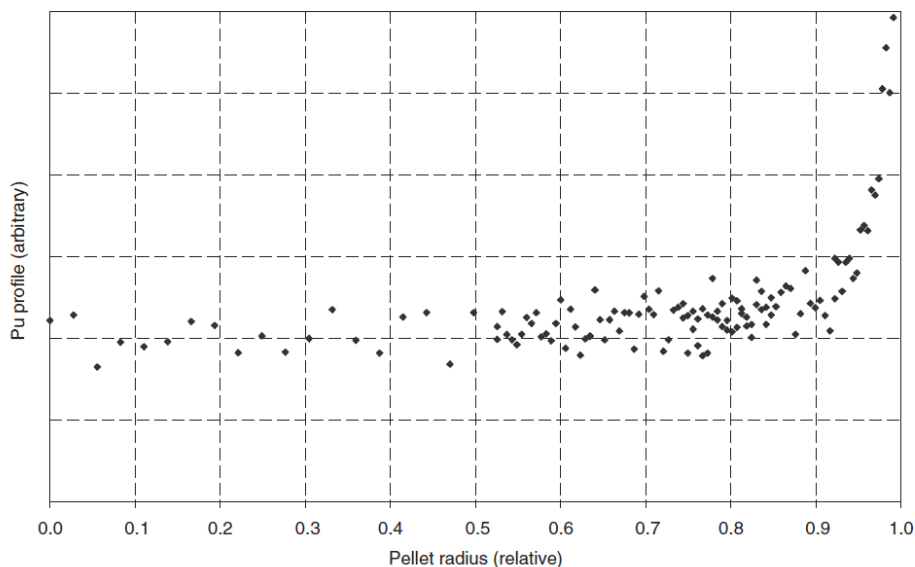


Figura 28: Variazione di  $k_{\infty}$  per un PWR al variare del rapporto di moderazione.

## 5. Cenni al Rim Effect

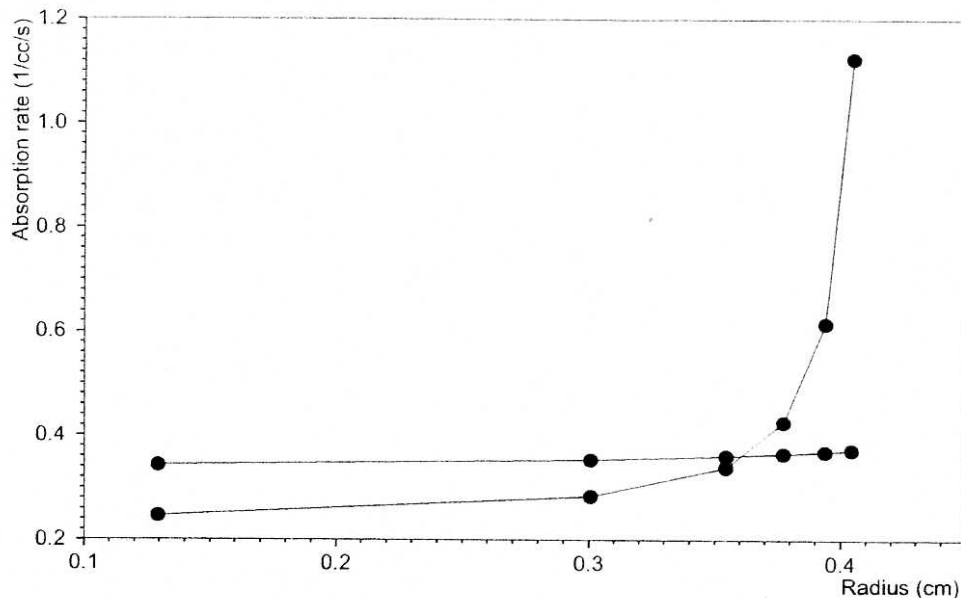
Un importante fenomeno che deve essere tenuto in debita considerazione nella modellizzazione dei LWR è il c.d. *Rim Effect*. Esso consiste nella non uniforme produzione di plutonio e di prodotti di fissione all'interno di una pellet. A causa dell'autoschermo spaziale infatti si ha un'accentuazione degli assorbimenti neutronici nella periferia radiale delle pellet di combustibile; in conseguenza di ciò si ha un accumulo di plutonio e di prodotti di fissione proprio in queste zone, con aumento della porosità del combustibile. Tuttavia le potenti e vigorose risonanze del plutonio in zona termica fanno sì che il fenomeno venga accentuato man mano che il plutonio stesso viene prodotto dalla cattura dell'uranio. Lo stesso vale per l'accumulo dei prodotti di fissione. Il calcolo accurato del non uniforme bruciamento della pellet potrebbe sembrare a prima vista di scarsa utilità ma così non è per molte ragioni. In primo luogo si ha un incremento dello schermaggio delle zone interne del combustibile che varia al variare del burnup con conseguente impatto sulla reattività del sistema. In secondo luogo

una corretta conoscenza della distribuzione degli isotopi del plutonio è di fondamentale importanza per gli studi di criticality safety degli impianti di riprocessamento del combustibile: il primo step di riprocessamento consiste nel tagliare gli elementi di combustibile in segmenti lunghi alcuni centimetri (30-35 mm) e nel dissolverli, privi del cladding, in acido nitrico bollente; poiché la dissoluzione chimica avviene a partire dalle zone esterne, è essenziale conoscere quali isotopi sono ivi concentrati per evitare rischi di criticità. La conoscenza della distribuzione dei prodotti di fissione è essenziale per lo studio della loro migrazione e del rilascio della frazione gassosa (al fine di dimensionare correttamente il cladding ed il plenum dei prodotti di fissione), nonché per predire l'interazione con la struttura cristallina della matrice di combustibile stessa (swelling). La stessa formazione concentrata alla periferia degli isotopi del plutonio può creare problemi, specie se ad alto burnup, al reticolo cristallino originario, modificandone le proprietà macroscopiche chimiche, termiche e meccaniche di stato solido. In Figura 29 è mostrato un tipico profilo radiale misurato della distribuzione di plutonio in una pellet portata ad alto bruciamento (81 GWd/t;  $r=1$  corrisponde all'esterno della pellet); è immediato osservare come l'aumento di concentrazione di plutonio sia esponenziale nel decimo esterno della pellet stessa. Per poter descrivere accuratamente questo fenomeno è necessario, come già accennato precedentemente, discretizzare in anelli concentrici la pellet e fare il calcolo dell'autoschermo in ognuna delle zone di discretizzazione. In Figura 30 è mostrato l'impatto sulla reaction rate di assorbimento di un calcolo fatto a 6 zone concentriche di una pellet, con e senza autoschermo diviso nelle sei zone. E' immediato vedere come il calcolo con un'unica zona di autoschermo sovrastimi gli assorbimenti nel centro pellet e non riesca a riprodurre il rim effect.



**Figura 29: Distribuzione di plutonio misurata in una pellet bruciata a 81 GWd/t.**

La formazione di strutture di bordo nella pellet porta con sé anche effetti di natura termomeccanica, quali la degradazione (di un 15-30%) ad alta concentrazione di plutonio, dunque ad alto burnup (attorno ai 40 GWd/t di burnup medio), della conducibilità termica del combustibile.



**Figura 30: Reaction rate di assorbimento in una pellet e rim effect.**

L'aumento della porosità si manifesta attorno ai 60 GWd/t. I profili di distribuzione radiale sono ben descritti matematicamente da curve del tipo:

$$f(r) = 1 + p_1 e^{-p_2(r_{out}-r)^{p_3}}$$

con  $p_1$ ,  $p_2$  e  $p_3$  costanti determinabili dalle analisi sperimentali. Una stima del burnup medio della zona di rim porta a valori che sono circa 1.3 volte maggiori rispetto al burnup medio di tutta la pellet. In linea di massima le correlazioni tra le sezioni d'urto dei nuclidi risonanti di una miscela risonante sono deboli: la probabilità che un dato nuclide risonante abbia un'elevata sezione d'urto e che un altro nuclide risonante l'abbia bassa è la stessa del caso opposto in cui il primo nuclide ha una sezione d'urto bassa ed il secondo l'abbia elevata. Questa è la principale giustificazione della bontà del metodo di trattamento delle risonanze "un nuclide alla volta" in caso di miscele. In alcuni casi l'ipotesi di piccole correlazioni può essere in grave difetto. L'esempio più tipico di forte correlazione è il problema dei gradienti di temperatura nelle pellet. In condizioni nominali ci possono essere differenze tra centro pellet e periferia di molte centinaia di gradi, con la conseguenza che l'allargamento Doppler delle risonanze è più pronunciato al centro pellet che in periferia. Anche in

questo caso è necessario splittare radialmente la pellet in una serie di anelli concentrici; tuttavia tra le diverse zone risonanti c'è altissima correlazione poiché l'allargamento Doppler è ovviamente diverso, ma le risonanze sono esattamente le stesse. Il formalismo di Livolant e Jeanpierre in questo caso è poco adatto e l'approccio mediante le Tabelle di Probabilità è certamente migliore.

L'update delle sezioni d'urto si rende dunque doppiamente necessario se, all'aumentare del burnup, il rim effet innesca forti variazioni della conducibilità termica che modificano i gradienti di temperatura nelle pellet. Infine un calcolo accurato del reale tasso di produzione/burnup del plutonio nel fuel è essenziale per stimarne l'effetto sulla reattività del sistema, in considerazione di quanto si diceva nel paragrafo precedente relativamente all'assorbimento per risonanza nella pelle delle pellets dei reticoli sottomodernati.

La tipica suddivisione radiale della pellet è mostrata in Figura 31; essa è ottenuta in modo che i volumi racchiusi dalle shell cilindriche siano rispettivamente il 40%, 30%, 10%, 10%, 5% ed 5% del volume totale, ovvero i cui raggi siano pari a 63.246%, 54.772%, 31.623%, 31.623%, 22.361%, 22.361% del raggio esterno della pellet rispettivamente.

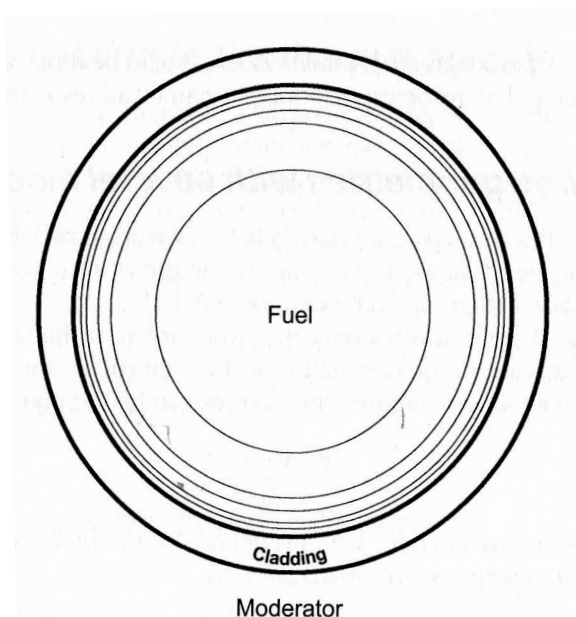


Figura 31: Suddivisione tipica di una pellet in 6 shell radiali.

## 6. Combustibile MOX

Molte sono le differenze tra un combustibile UOX e MOX; esse vanno ovviamente ad impattare sul disegno di nocciolo. Una prima differenza è nella conducibilità termica, che è leggermente inferiore per un combustibile MOX. In Figura 32 è mostrata conducibilità termica di un combustibile MOX

arricchito in Pu al 9.9% in peso (pallini bianchi) rispetto alla conducibilità termica di un combustibile UOX (linea continua). Si può vedere che i pallini bianchi sono mediamente leggermente al di sotto della curva continua.

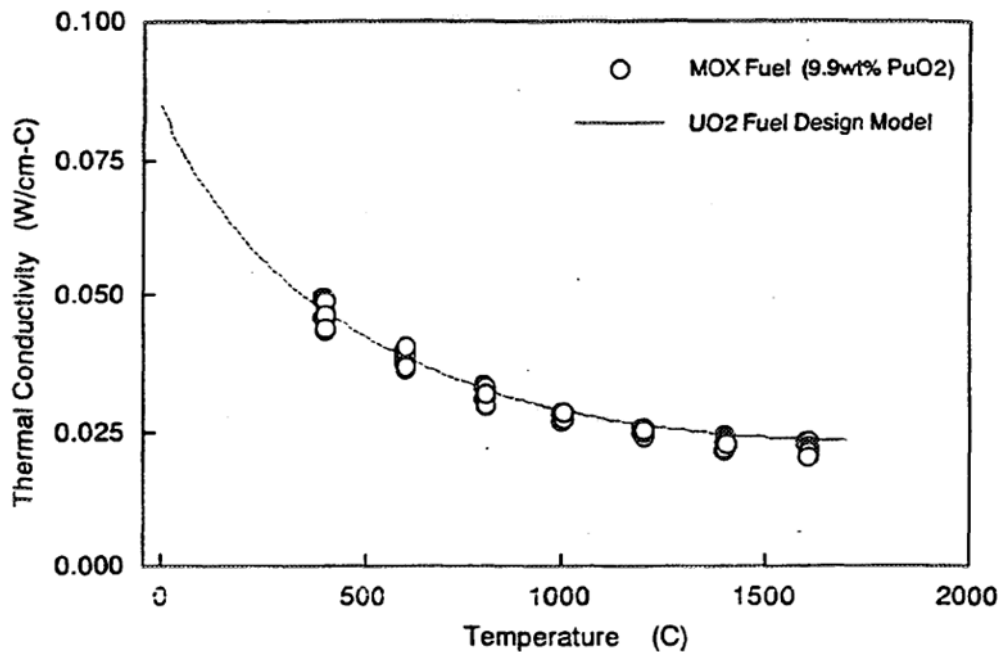


Figura 32: Conducibilità termica di combustibili UOX e MOX.

La presenza di plutonio, come già accennato precedentemente, ha grande impatto anche a livello neutronico. Le forti risonanze del  $^{239}\text{Pu}$  comportano un indurimento dello spettro neutronico che ha come conseguenza una diminuzione della capacità effettiva di assorbimento delle barre di controllo o dei veleni come il boro. Poiché in un reattore a UOX si ha produzione di plutonio al crescere del burn-up, occorrerà per i codici deterministici, come già accennato, ripetere i calcoli di sezioni d'urto efficaci a molti step di bruciamento per tenere in debita considerazione gli effetti della variazione isotopica del combustibile sullo spettro e dunque sulle proprietà neutroniche dei vari componenti del nocciolo. Per limitare la diminuzione di efficienza dei sistemi di barre di controllo negli LWR caricati a MOX, molti enti di sicurezza richiedono tipicamente che il numero massimo di assembly a MOX in un nocciolo sia limitato, ad esempio fino ad 1/3 del totale degli assembly, in modo da fornire garanzie di sicurezza in ogni evenienza. Questo crea un'inevitabile accostamento tra assembly ad uranio ed assembly a plutonio con considerevoli discontinuità nelle proprietà neutroniche all'interfaccia tra essi. Queste discontinuità causerebbero inaccettabili picchi di potenza localizzati che devono essere in qualche modo attenuati. Gli assembly MOX vengono caricati dunque con almeno tre diversi valori dell'arricchimento, più basso in periferia, vicino cioè all'interfaccia con assembly ad uranio, e più alto

al centro. In Figura 33 è mostrato un tipico assembly MOX 17x17 per PWR destinato ad un nocciolo caricato ad 1/3 MOX; si possono notare le tre barrette ad arricchimenti in plutonio differenti.

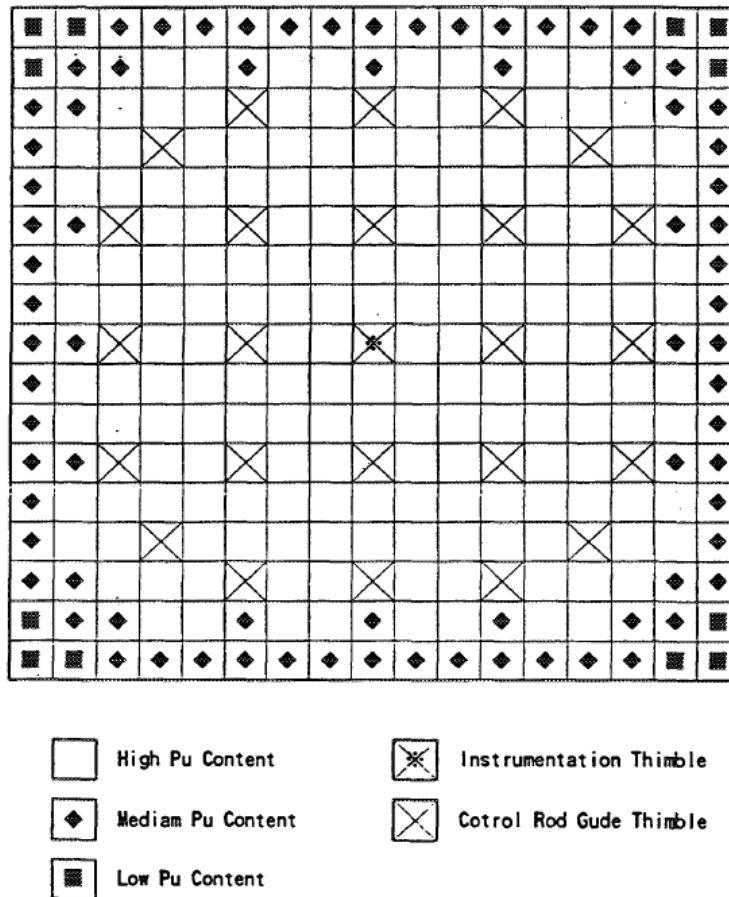


Figura 33: Tipico assembly MOX 17x17 per nocciolo PWR ad 1/3 MOX.

In Figura 34 sono riportati gli andamenti dell'efficacia relativa delle barre di controllo e dell'acido borico in un LWR con combustibile parzialmente a MOX, rispetto a quelli per un reattore ad UOX puro. Sono altresì indicati i due punti corrispondenti a 1/3 di nocciolo caricato a MOX. Si vede come tali assorbitori perdano di efficacia all'aumentare del quantitativo di plutonio nel nocciolo.

La presenza di plutonio ha anche un impatto sulla cinetica del reattore.

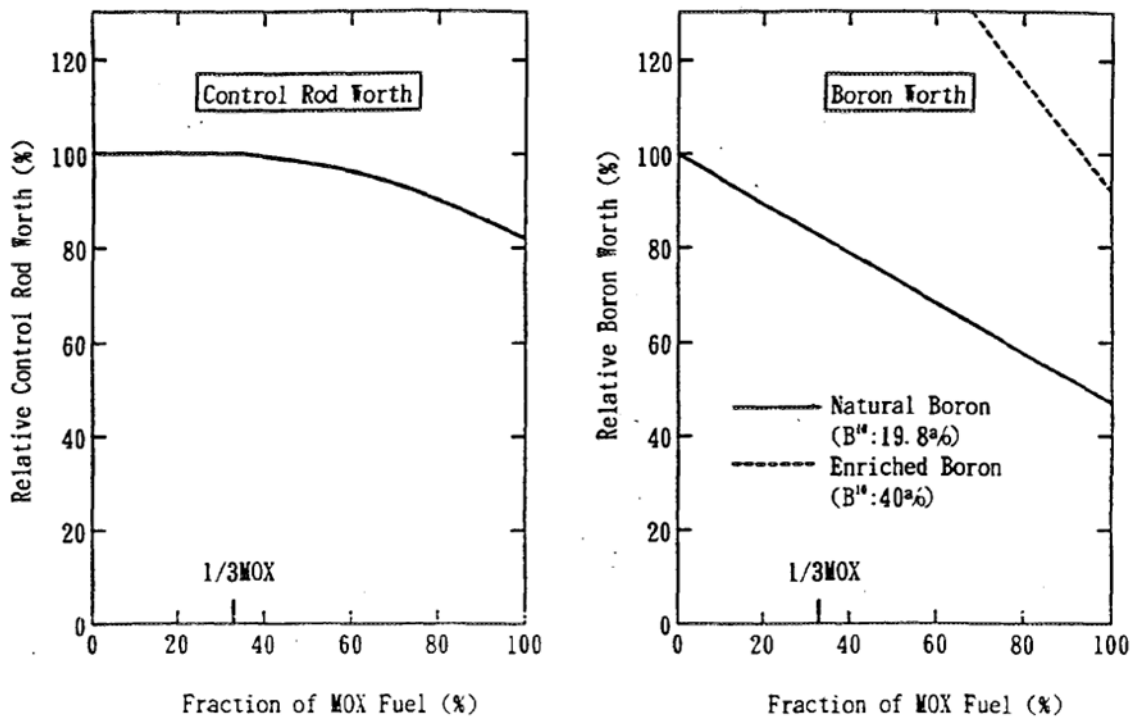


Figura 34: Valore delle barre di controllo e del boro in funzione della frazione di fuel MOX nel nocciolo.

Il  $\beta_{\text{eff}}$  del reattore passa da circa 600 pcm a 400 pcm al variare del quantitativo di MOX da 0 a 100%; la parte di destra della Figura 35 indica chiaramente come la frazione efficace di neutroni ritardati vari tra inizio e fine ciclo e poiché non c'è praticamente variazione tra inizio e fine ciclo per un nocciolo 100% MOX, si può dire che in prima approssimazione le differenze tra inizio e fine ciclo per un nocciolo non interamente MOX siano imputabili in larga parte al build-up di plutonio. Il coefficiente di temperatura del moderatore è più negativo in un nocciolo anche solo parzialmente caricato a MOX (parte di sinistra di Figura 35), sempre a causa dell'instaurarsi di uno spettro neutronico più duro in un nocciolo MOX.

I combustibili MOX portano ovviamente anche a spent fuel con caratteristiche molto diverse da quelli derivanti da combustibili ad uranio. Ad esempio il calore residuo è 2-3 volte maggiore in un combustibile esausto MOX (vedi Figura 36). Questo fatto deve essere tenuto in debito conto nel dimensionamento dei sistemi di raffreddamento delle piscine di combustibile esausto che debbano ospitare combustibile MOX. La composizione dello spent fuel è anch'essa molto diversa, essendo gli attinidi minori a breve vita media prodotti in un assembly MOX in quantitativi molto maggiori rispetto ad assembly UOX a parità di burn-up; ad esempio un grande contributo al calore di decadimento è dato dal  $^{244}\text{Cm}$  che ha un tempo di dimezzamento di 18.1 anni. Al contrario  $^{241}\text{Am}$ , con 432 anni di tempo di dimezzamento, giustifica il calore residuo a lunga distanza temporale dallo scarico (cioè per lunghi tempi di raffreddamento), vedi Figura 37 e Figura 38.

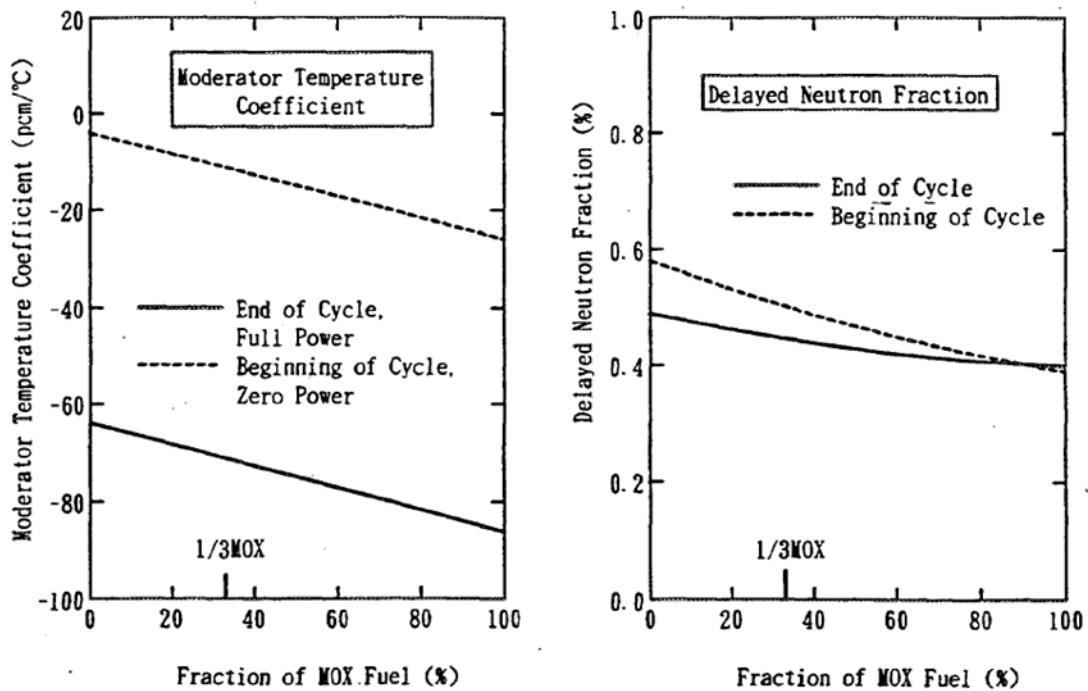


Figura 35: Coefficiente di temperatura del moderatore e frazione efficace di neutroni ritardati al variare del quantitativo di MOX.

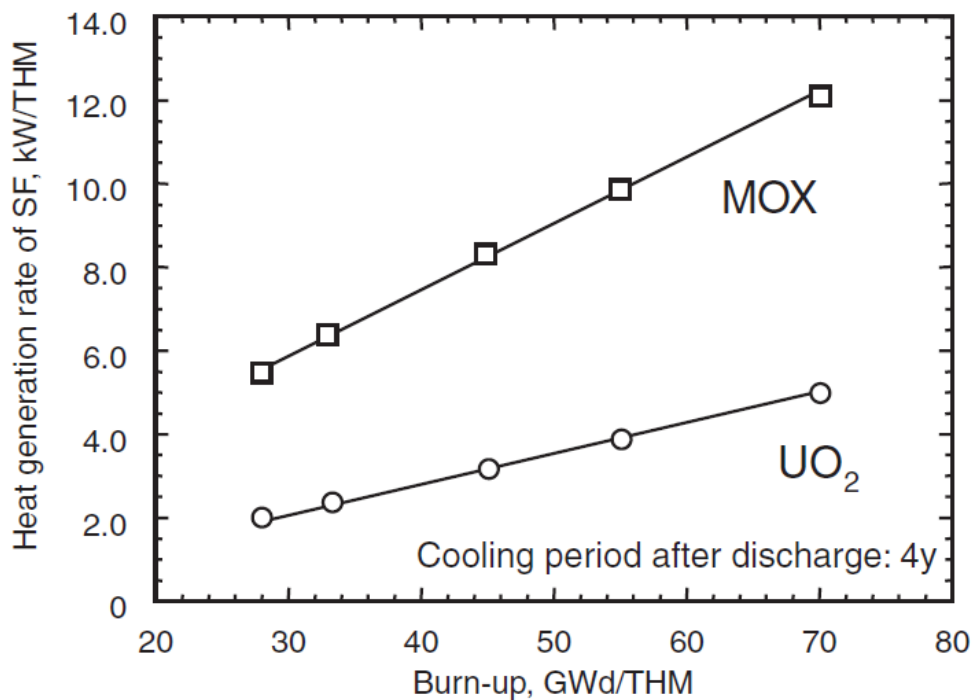


Figura 36: Generazione di calore da combustibile esausto: UO<sub>2</sub> vs MOX.

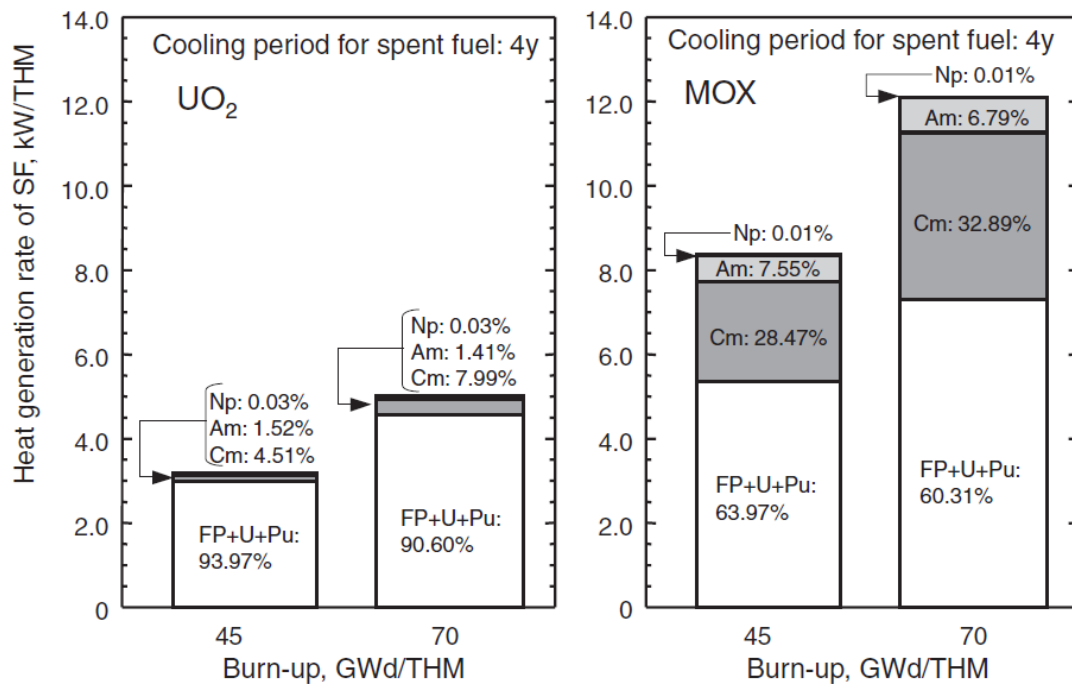


Figura 37: Contributi percentuali alla generazione di calore residuo per cooling time fissato.

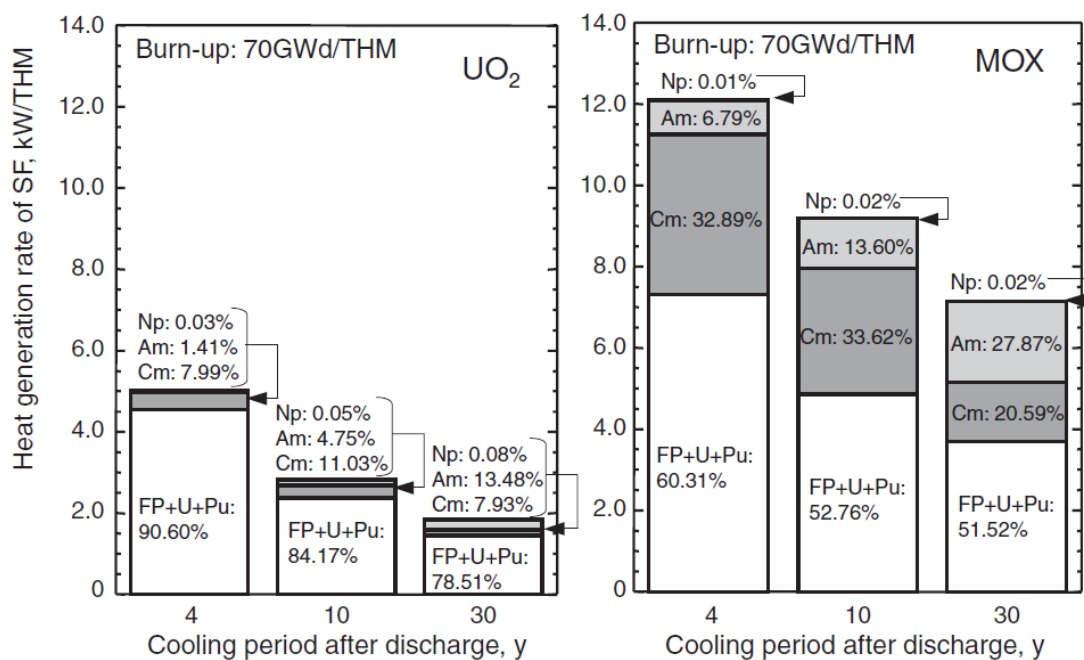



Figura 38: Contributi percentuali alla generazione di calore residuo per burn-up fissato.

 <b>Ricerca Sistema Elettrico</b>	<b>Sigla di identificazione</b>	<b>Rev.</b>	<b>Distrib.</b>	<b>Pag.</b>	<b>di</b>
	NNFISS – LP5 – 022	0	R	55	78

## 7. Interfaccia nocciolo-riflettore nei codici deterministici

Uno dei problemi più ardui da risolvere nel calcolo deterministico degli LWR è l'influenza del riflettore. Lo scopo di un calcolo di nocciolo è ottenere la reattività e la distribuzione di potenza nel nocciolo di un reattore; un calcolo molto accurato del flusso nel riflettore è in genere di scarso interesse. Di conseguenza una strategia di modellizzazione può consistere nell'uso di un'appropriata condizione al contorno, quale ad esempio la conservazione di albedo multigruppo all'interfaccia tra nocciolo e riflettore. Una tale condizione al contorno è di difficile implementazione nella maggior parte dei codici ad oggi disponibili per calcoli di nocciolo che sono basati su mesh di calcolo cartesiane; è quindi divenuta prassi rimpiazzare il riflettore e le strutture ad esso associate con un riflettore omogeneo equivalente. In questo caso si devono determinare le sezioni d'urto di un sistema omogeneo che preservino un dato set di albedo multigruppo ottenuto per un sistema od una condizione di riferimento. Questa può essere ad esempio uno slab monodimensionale con flusso angolare imposto su una faccia e condizione al contorno di vuoto imposta sulla faccia opposta. Si perviene ad una matrice degli albedo di riferimento calcolata per gli stessi flussi entranti ma con la completa descrizione geometrica di tutte le differenti strutture che circondano il nocciolo sino ad arrivare al vessel. Questo calcolo è in genere affidato ad una tecnica montecarlo, mentre i flussi entranti possono essere ottenuti da un dettagliato calcolo di trasporto effettuato su una geometria a slab che rappresenti una parte del nocciolo e del riflettore. Il problema è del più grande interesse. Ad esempio nei recenti reattori di Gen. III+ come l'EPR, il tipico riflettore presente nei reattori di seconda generazione, costituito da un "baffle" di acciaio di 2 cm di spessore seguito da una zona di acqua di alcuni centimetri di spessore, è stato sostituito da un c.d. "heavy reflector" in acciaio dallo spessore di 22 cm al cui interno scorrono molti tubi sottili per la circolazione dell'acqua di raffreddamento. Tutti i PWR francesi di Gen. II, quali ad esempio i CPO, CP1 e CP2 da 900 MWe, i P4 e P'4 da 1300 MWe e gli N4 da 1450 MWe, hanno il riflettore a baffle sottile; esso presenta però numerosi problemi di neutronica. A causa infatti del troppo piccolo spessore i neutroni veloci emessi dal nocciolo attraversano indenni il baffle, vengono termalizzati dall'acqua dietro al baffle, vengono retroreflessi da questa, ma, nel riattraversare il baffle in direzione del nocciolo, vengono catturati dal baffle stesso a causa delle forti risonanze in zona termica degli isotopi del ferro (effetto "trappola di flusso"). In altre parole il baffle è un pessimo riflettore neutronico. Un riflettore molto spesso in acciaio presenta molteplici benefici, ad esempio:

- limita il leakage radiale poiché è in grado di riscatterare verso il nocciolo la componente veloce del flusso;

- riduce la fluenza dei neutroni veloci al vessel, riducendone il DPA cumulato nella vita dell'impianto;
- ottimizza la distribuzione radiale di potenza.

La cattura neutronica è infatti preponderante per piccoli spessori di riflettore in acciaio (1-2 cm), mentre gli effetti dello scattering aumentano all'aumentare dello spessore (il cammino libero medio dei neutroni veloci nell'acciaio è di poco superiore ai 10 cm). Quando lo spessore è piccolo l'assorbimento è dunque più importante della riflessione e la reattività del sistema diminuisce. Questa condizione continua a perdurare, all'aumentare dello spessore, fino al punto in cui l'importanza relativa dei due fenomeni non si inverte. E' ovvio che l'importanza neutronica di un neutrone riflesso sarebbe maggiore se il neutrone fosse completamente termalizzato, tuttavia il grande numero di neutroni veloci ed epitermici riflessi verso il core compensa ampiamente la loro scarsa importanza neutronica. Ecco dunque la necessità di fare accurati calcoli neutronici per i riflettori spessi. Tuttavia il calcolo neutronico e l'ottimizzazione di un riflettore molto massiccio e fortemente eterogeneo (presenza dei canali sottili di acqua per il raffreddamento) non è affatto semplice. Le eterogeneità non possono essere tenute in conto esplicitamente nei tipici schemi di calcolo industriali che sono basati principalmente su approcci di tipo nodale con maglie larghe ed un piccolo numero di gruppi energetici. Le tecniche "omogenee" cui si accennava precedentemente possono essere applicate solo se si dispone di matrici di albedo adeguate, tuttavia il grande spessore del riflettore mette in gioco fenomeni fisici in precedenza trascurabili, quali l'autoschermo delle risonanze degli isotopi catturatori dell'acciaio. Gli stessi dati nucleari possono risultare inadeguati; ad esempio l'esperimento integrale critico PERLE del 2008 presso la facility francese EOLE è stato pensato proprio al fine di qualificare sperimentalmente i dati nucleari dell'acciaio proprio in funzione del riflettore dell'EPR. I risultati sono stati che le sezioni d'urto di Fe, Cr e Ni di JEFF3.1 possono certamente essere migliorate ma sono abbastanza accurate per effettuare un calcolo industriale di un LWR. Discrepanze tra dati sperimentali e valori calcolati sono state trovate e sono state imputate al magliaggio troppo grossolano della struttura a 172 gruppi che non è adatta a trattare accuratamente le larghe risonanze per gli isotopi di massa intermedia che non siano trattati per l'autoschermo. Il formalismo standard di molti codici di cella, tra cui Apollo2, non è sufficiente a calcolare le sezioni d'urto del ferro e del nickel che hanno risonanze che si sovrappongono. La struttura SHEM prescrive un trattamento di autoschermo per il ferro naturale nel gruppo 68 (risonanza a 1.2 keV) e per il <sup>52</sup>Cr nel gruppo 66 (risonanza a 1.6 keV). Calcoli effettuati con la struttura SHEM sul riflettore dell'EPR mettono in luce l'inadeguatezza del metodo della matrice di background per il ferro (-700 pcm sul calcolo di keff) e la bontà del metodo dei sottogruppi (tabelle di

probabilità) sopra i 25 keV sia per il ferro naturale che per il <sup>52</sup>Cr. La [Tabella 7](#) mostra l'effetto di vari tipi di autoschermo degli isotopi del ferro e del <sup>52</sup>Cr del riflettore dell'EPR in termini di pcm.

**Tabella 7: Effetti dell'autoschermo su alcuni isotopi del riflettore dell'EPR.**

<b>Opzioni per Ferro naturale</b>	<b>Gruppi nei quali è effettuato autoschermo</b>			
Matrice di Background	15 – 93		68	68
Tabelle di Probabilità		15 – 93	15 – 50	15 – 50
<b>Opzioni per <sup>52</sup>Cr</b>				
Matrice di Background	66	66	66	66
Tabelle di Probabilità				15 – 50
<b><math>\Delta\rho</math> (pcm) rispetto ad un calcolo montecarlo di riferimento</b>	-702	32	-4	-49

E' immediato constatare che l'autoschermo nei gruppi 66 e 68 col metodo della matrice di background e nei gruppi da 15 a 50 col metodo delle tabelle di probabilità fornisce ottimo accordo con i calcoli di riferimento.

A livello di dati nucleari valutati occorre altresì ricordare che le valutazioni per il ferro, il cromo ed il nichel in ENDF/B-VII.0 sono purtroppo le stesse che erano presenti in ENDF/B-VI.8 e che per il <sup>56</sup>Fe queste risalgono addirittura alla release ENDF/B-VI.1. Le valutazioni della libreria JEFF3.1, specie quelle degli isotopi del ferro, sono più recenti di quelle di ENDF/B-VII.0

Va inoltre ricordato che per ottenere buoni andamenti spaziali del flusso occorre anche prevedere una meshatura particolarmente fitta per gli assembly periferici vicini al riflettore per tenere in conto la rapida variazione di flusso (forti gradienti di flusso) all'interfaccia tra nocciolo e riflettore stesso.

Da ultimo può essere aggiunto che recentemente sono stati intrapresi con grande successo calcoli di nocciolo intero, compreso il riflettore, con tutte le eterogeneità del caso, direttamente usando un codice di cella estendendo la geometria a tutto quanto il sistema; la fattibilità di tali calcoli è stata ottenuta, tra l'altro, grazie all'implementazione nei codici di cella del potentissimo metodo delle caratteristiche per il trattamento della parte spaziale dell'equazione del trasporto. In [Figura 39](#), [Figura 40](#) e [Figura 41](#) è presentato il riflettore dell'EPR.

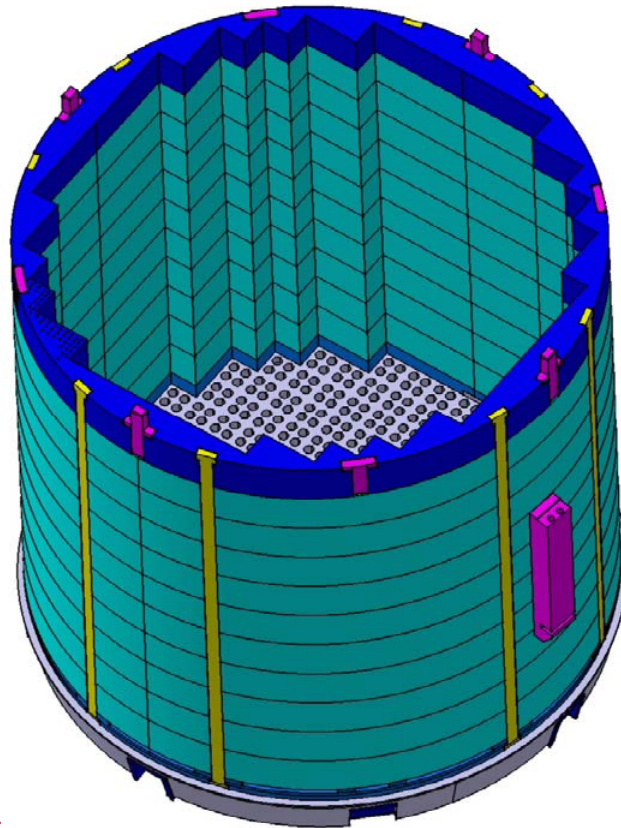


Figura 39: Riflettore dell'EPR.

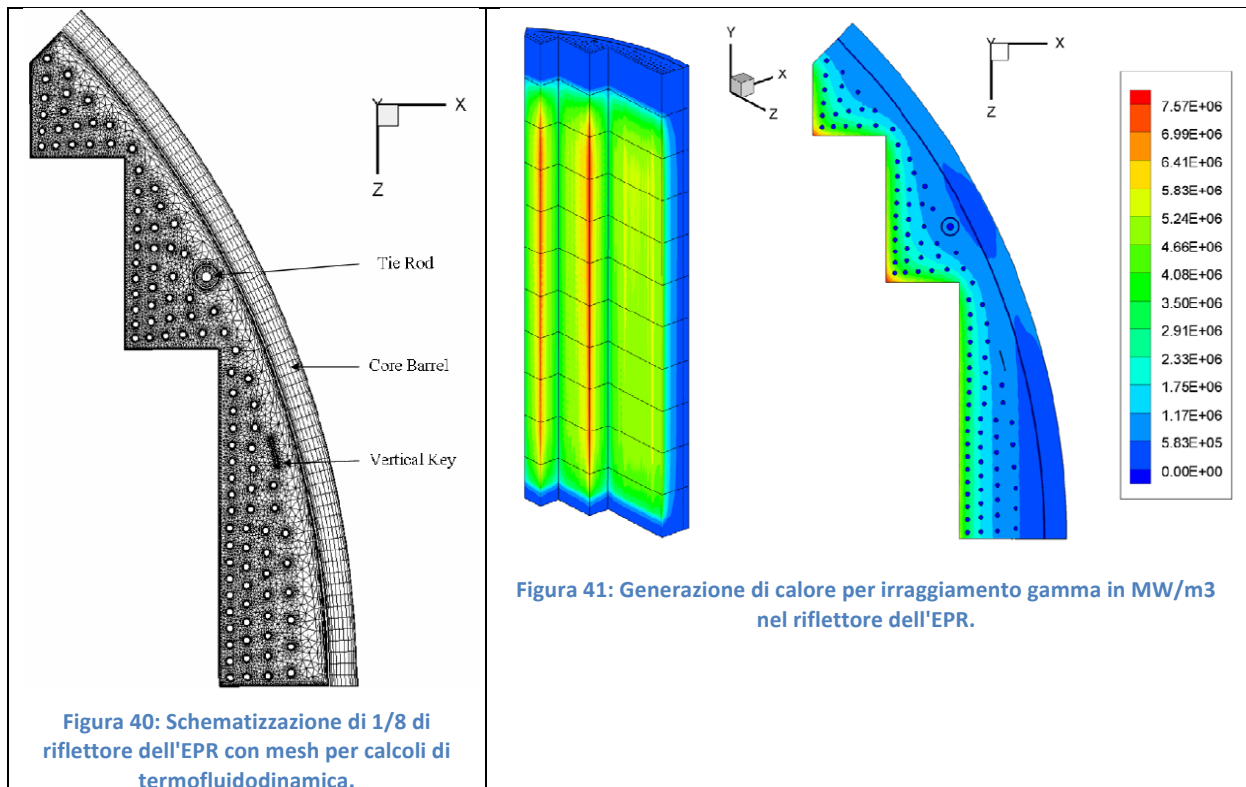
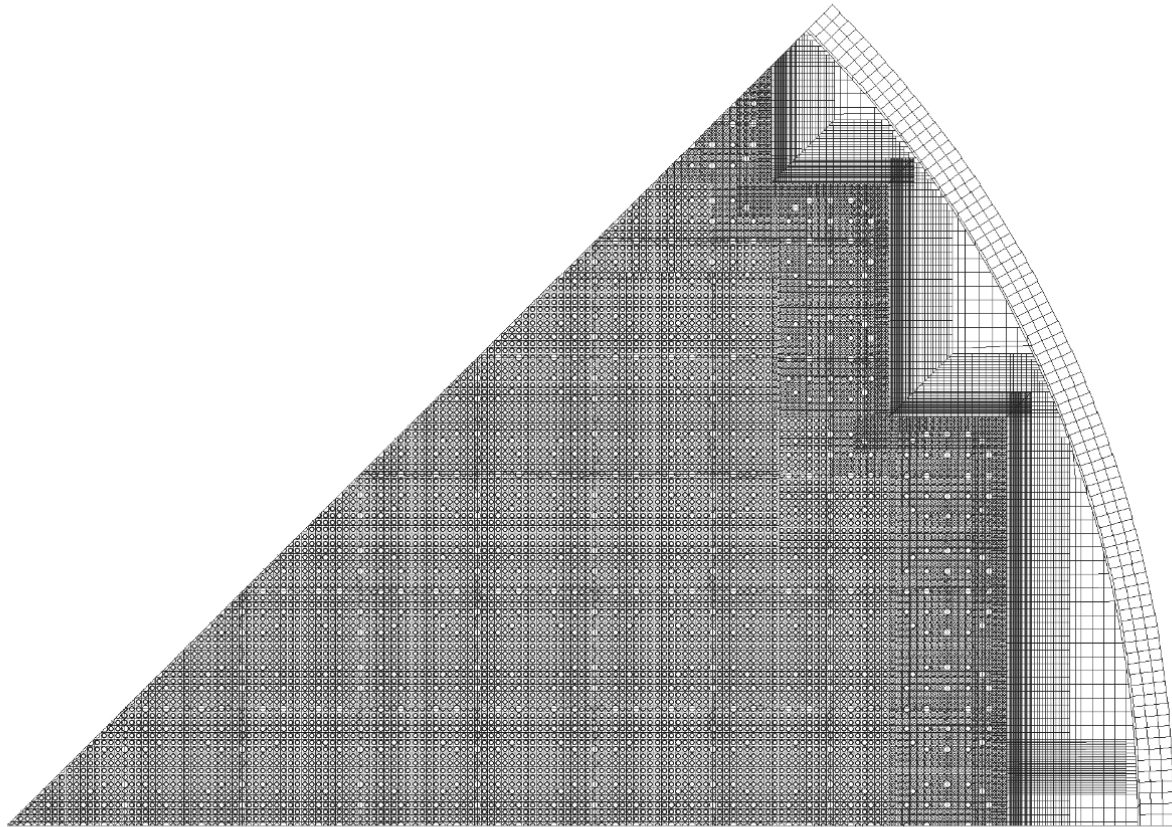


Figura 40: Schematizzazione di 1/8 di riflettore dell'EPR con mesh per calcoli di termofluidodinamica.

Figura 41: Generazione di calore per irraggiamento gamma in MW/m<sup>3</sup> nel riflettore dell'EPR.



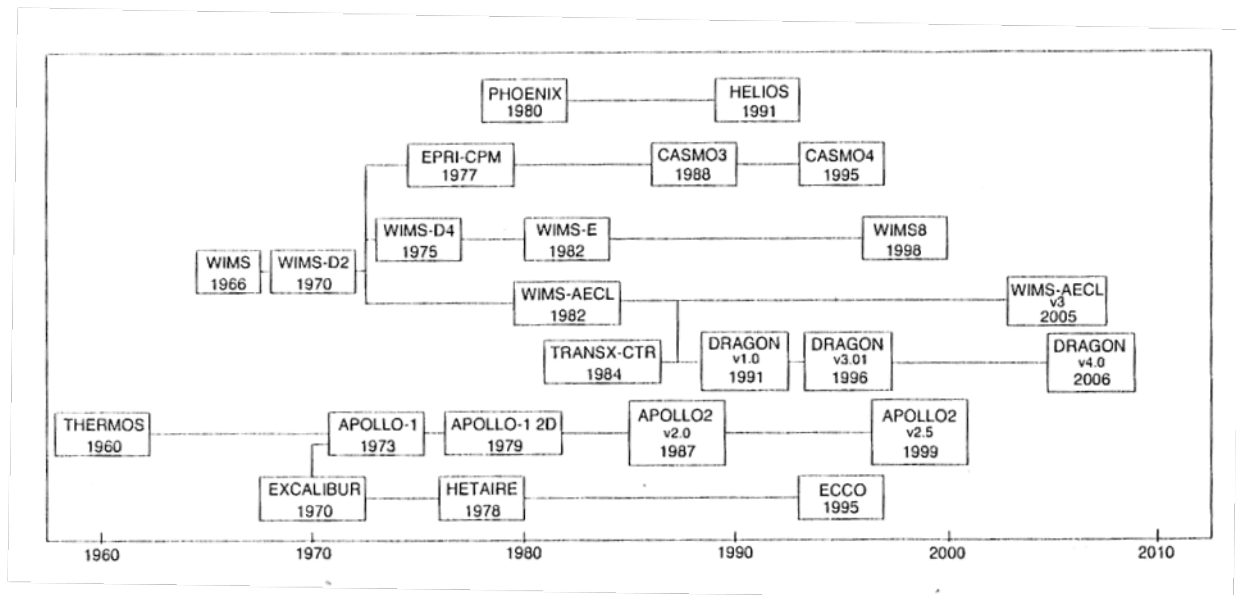
**Figura 42: Meshatura in Apollo2 per 1/8 di nocciolo EPR.**

In Figura 42 è mostrata la meshatura ad 1/8 di nocciolo del reattore EPR predisposta per il calcolo del codice Apollo2. Si nota l’infittimento delle mesh per gli assembly prossimi al riflettore.

## 8. Alcuni codici utilizzati per la neutronica dei LWR

Nel tempo sono stati sviluppati molti codici per lo studio neutronico dei LWR. I codici di cella vengono classificati come di prima o seconda generazione a seconda che si basino su una rappresentazione a gruppi della variabile energia con meno o più di 50 gruppi rispettivamente. In Figura 43 è mostrato uno schema con l’evoluzione temporale sino al 2006 e le relazioni di “parentela” metodologica fra i principali codici di cella di II generazione. Tutti i codici presentati in figura non si basano sulla formula dei quattro fattori, né assumono una distribuzione energetica di Maxwell o di Westcott per il flusso, ma risolvono l’equazione del trasporto in spazio ed energia. Ogni codice di cella ad oggi disponibile sembra in un modo o nell’altro essere derivato o dal codice

THERMOS, sviluppato al MIT nel 1960, o dal codice WIMS, sviluppato presso il centro di ricerca di Winfrith nel 1966. Il codice svedese HELIOS (sviluppato da Studsvik ed ora alla versione 2) ha invece storia a sé. I codici Apollo2 (CEA) ed ECCO (codice europeo) sono derivazioni dell'approccio introdotto dal codice THERMOS; i codici CASMO (ora alla versione 5, sviluppato da Studsvik ed utilizzato tra gli altri anche da AREVA) e DRAGON (Canada) sono derivazioni del codice WIMS. Il codice DRAGON, open source, è stato sviluppato da un team di persone che per anni ha lavorato estesamente allo sviluppo di Apollo2 e dunque DRAGON ha ereditato molte caratteristiche, sia a livello di modellizzazione fisica che di implementazione numerica, del codice francese; essendo tuttavia al momento il risultato di uno sforzo scientifico accademico, DRAGON non ha potuto usufruire dei contributi, anche a livello di validazione e certificazione in garanzia di qualità, tipici del mondo industriale.



**Figura 43: Sviluppo dei principali codici di cella di II generazione.**

I codici CASMO4, HELIOS2, Apollo2 e DRAGON hanno implementato recentemente, tra gli altri metodi già disponibili, il potente e rapido metodo delle caratteristiche per la risoluzione in spazio dell'equazione del trasporto, con la possibilità di sfruttare mesh spaziali non strutturate e descrivere esattamente anche le geometrie più complesse. Sia Apollo2 che DRAGON usano set di sezioni d'urto multigruppo ottenute con i codici NJOY e Calendf.

Tra i principali codici di nocciolo per LWR si possono annoverare Cronos (CEA), da accoppiare con il codice di cella Apollo2, SIMULATES (Studsvik), da accoppiare con il codice di cella CASMO, Attila (USA, codice commerciale sviluppato da Transpire in grado di utilizzare elementi finiti non strutturati tetraedrici) e i codici DORT e TORT (USA, integrati nella suite DOORS, sviluppati da Oak Ridge e basati

sui metodi delle ordinate discrete e delle differenze finite). Il maggiore problema dei codici di nocciolo che non si basano su codici di cella per la produzione di sezioni d'urto è proprio l'essere legati a librerie generiche, molto spesso datate, di sezioni d'urto, poco adatte ad essere utilizzate con successo ai molteplici problemi trattabili con i codici di nocciolo stessi.

Si annoverano infine i codici multipurpose montecarlo MCNP/MCNPX e KENO.

Menzione a sé deve essere fatta al codice di bruciamento rapido ORIGEN (incluso nella suite SCALE) che consente di stimare il bruciamento del combustibile fino ad alti burnup per i reattori LWR commerciali; non esegue calcoli di trasporto ma fa ricorso a sezioni d'urto efficaci precalcolate ad hoc per i vari tipi di fuel assembly.

## 9. Introduzione al Metodo delle Caratteristiche ed al Metodo delle Probabilità di Collisione

Il trattamento della variabile spaziale dell'equazione del trasporto neutronico avviene generalmente ricorrendo al metodo delle Probabilità di Collisione (CP). In tempi recenti è stata introdotta in alcuni codici di cella la possibilità di ricorrere all'alternativa, assai efficace per trattare forti eterogeneità e geometrie complesse, del Metodo delle Caratteristiche (MOC). Entrambi questi metodi verranno in questo paragrafo rapidamente introdotti.

Il MOC consiste nella versione specializzata all'equazione del trasporto neutronico del metodo di risoluzione analitica delle equazioni differenziali alle derivate parziali noto appunto col nome di Metodo delle Caratteristiche. Tale metodo si prefigge lo scopo di integrare l'equazione lungo un set di direzioni particolari, dette curve caratteristiche, di una o più variabili, scelte in maniera tale da trasformare l'equazione iniziale da equazione alle derivate parziali in equazione differenziale ordinaria, dunque di assai più semplice risoluzione, anche a livello numerico.

Il primo step consiste nello scrivere la c.d. *versione caratteristica* dell'equazione del trasporto neutronico; poiché l'applicazione del metodo avviene nel formalismo multigruppo, la derivazione che verrà qui fatta sarà fatta per un solo gruppo energetico, senza però perdere né di generalità né di validità.

Poiché il termine di streaming, a causa della ben nota redistribuzione angolare, correla la variabile spaziale con la variabile angolare del flusso neutronico angolare, la scelta delle caratteristiche dovrà avvenire in maniera tale da rendere il più semplice possibile l'operatore di streaming che, lo ricordiamo, è l'unico nell'equazione del trasporto ad operare sulle variabili spaziali.

Si considera come curva caratteristica una linea retta di direzione  $\vec{\Omega}$  coincidente con la direzione di volo del neutrone; ad ogni istante il neutrone si troverà ad una distanza  $s$  da un punto  $\vec{r}$  sulla linea caratteristica assunto a riferimento, così che la posizione assoluta risulterà essere  $\vec{r} + s\vec{\Omega}$ ; la derivata totale rispetto alla variabile  $s$  può essere scritta come

$$\frac{d}{ds} = \frac{dx}{ds} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{dy}{ds} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{dz}{ds} \frac{\partial}{\partial z}$$

inoltre, per definizione di linea caratteristica, sarà

$$d\vec{r} = ds\vec{\Omega} = dx\hat{i} + dy\hat{j} + dz\hat{k}$$

per cui si ottiene

$$\frac{d}{ds} = (\vec{\Omega} \cdot \hat{i}) \frac{\partial}{\partial x} + (\vec{\Omega} \cdot \hat{j}) \frac{\partial}{\partial y} + (\vec{\Omega} \cdot \hat{k}) \frac{\partial}{\partial z} = \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla}$$

ovvero la trasformazione dell'operatore alle derivate parziali in un operatore differenziale ordinario. L'equazione del trasporto assume allora la sua forma caratteristica:

$$\frac{d}{ds} \Phi_g(\vec{r} + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) + \Sigma_g(\vec{r} + s\vec{\Omega}) \Phi_g(\vec{r} + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = Q_g(\vec{r} + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega})$$

in cui  $Q_g$  è un operatore integrale in energia che tiene conto delle sorgenti neutroniche (interne od esterne) e del trasferimento da un gruppo generico al gruppo  $g$ . La denominazione più appropriata di tale equazione dovrebbe essere forma caratteristica *retrograda*, poiché deriva dalla posizione  $\vec{r} + s\vec{\Omega}$ ; è possibile ricavare un'equazione analoga, ma con segni diversi, detta *in avanti*, che deriva dalla posizione, ugualmente lecita,  $\vec{r} - s\vec{\Omega}$  per la posizione assoluta del neutrone. Si fa notare, per inciso, che l'integrazione analitica dell'equazione caratteristica lungo una caratteristica porta all'equazione del trasporto in forma integrale per una data direzione. Il MOC risolve l'equazione caratteristica seguendo i percorsi rettilinei del neutrone; l'approccio è basato su un calcolo iterativo del flusso su tracce parallele che attraversino l'intero dominio di interesse. L'applicazione del metodo avviene su domini spaziali composti da regioni di forma assolutamente arbitraria aventi però proprietà nucleari uniformi (od almeno uniformi a tratti) e sufficientemente piccole da poter considerare uniforme al

loro interno il termine di sorgente  $Q_g$ . Il flusso scalare nella regione e nel dato gruppo energetico viene costruito raccogliendo tutti i flussi angolari medi ricavati in termini di flussi angolari entrante ed uscente nella regione. E' interessante mettere in evidenza come il MOC possa basarsi sulle stesse tecniche di ray tracing del metodo montecarlo o del metodo CP, esistendo in partenza analogia formale (e concettuale) tra le equazioni di partenza (essenzialmente tutte variazioni della formulazione integrale dell'equazione del trasporto).

Per un dato gruppo  $g$ , il flusso in una data regione  $i$  sarà dato allora da

$$V_i \Phi_i = \int_{V_i} d^3r \int_{4\pi} d^2\Omega \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_Y d^2\Omega d^2p \int_{-\infty}^{+\infty} ds C(\vec{T}, s) \Phi(\vec{p} + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega})$$

in cui  $Y = \{\vec{T}\}$  è l'insieme delle caratteristiche. Una caratteristica  $\vec{T}$  è determinata dalla sua orientazione  $\vec{\Omega}$  e dal punto di partenza  $\vec{p}$  definito su un piano di riferimento ortogonale a  $\vec{T}$ ; la funzione caratteristica  $C(\vec{T}, s)$  vale 1 se il punto  $\vec{p} + s\vec{\Omega}$  della caratteristica  $\vec{T}$  appartiene alla regione  $i$ , altrimenti vale 0. L'insieme delle caratteristiche viene poi sostituito da un insieme di elementi discreti  $\vec{T}_m$  a cui vengono associati dei pesi  $\omega_m$  in modo da poter definire un set di quadratura che consenta di esprimere gli integrali sulle caratteristiche in forma di sommatorie.

Si consideri la generica equazione retrograda per un dato gruppo, scritta per la caratteristica  $m$  ( $m=1..M$ ) all'interno di una regione di indice  $i$ :

$$\frac{d}{ds} \Phi_{i,k}(s, \Omega_m) + \Sigma_i \Phi_{i,k}(s, \Omega_m) = Q_i(\Omega_m)$$

$\Phi_{i,k}(s, \Omega_m)$  è il flusso angolare nella regione  $i$  ad una distanza  $s$  lungo il segmento di linea  $k$ . L'equazione può essere risolta analiticamente con data condizione iniziale:

$$\Phi_{i,k}(s, \Omega_m) = \Phi_{i,k}^{IN}(\Omega_m) e^{-\Sigma_i s} + (1 - e^{-\Sigma_i s}) \frac{Q_i(\Omega_m)}{\Sigma_i}$$

La condizione iniziale esprime fisicamente il flusso angolare al punto di ingresso dove un neutrone entra nella regione  $i$  lungo il segmento  $k$ . Analogamente si può ricavare il flusso angolare uscente dalla regione  $i$  lungo il segmento  $k$  con lunghezza di segmento  $s_{i,k}$ :

$$\Phi_{i,k}^{OUT}(\Omega_m) = \Phi_{i,k}^{IN}(\Omega_m)e^{-\Sigma_i s_{i,k}} + (1 - e^{-\Sigma_i s_{i,k}}) \frac{Q_i(\Omega_m)}{\Sigma_i}$$

Integrando il flusso angolare lungo il segmento k si può ottenere il flusso angolare medio del segmento ed esprimerlo in funzione solo delle condizioni al contorno del segmento e del termine di sorgente:

$$\bar{\Phi}_{i,k}(\Omega_m) = \frac{\Phi_{i,k}^{IN}(\Omega_m) - \Phi_{i,k}^{OUT}(\Omega_m)}{\Sigma_i s_{i,k}} + \frac{Q_i(\Omega_m)}{\Sigma_i}$$

che altro non è che un'equazione di bilancio per il flusso angolare, medio sul segmento k della regione i, lungo la caratteristica m.

Analogamente si può effettuare una media pesata sui segmenti per avere il valor medio del flusso angolare lungo la caratteristica m nella regione i:

$$\bar{\Phi}_i(\Omega_m) = \frac{\sum_k \bar{\Phi}_{i,k}(\Omega_m) s_{i,k} \delta A_k}{\sum_k s_{i,k} \delta A_k}$$

in cui  $\delta A_k$  è la "larghezza" del segmento k (parametro introdotto a soli scopi numerici non potendosi in un calcolatore esprimere grandezze finite come somma di infinitesimi). Infine il flusso scalare medio nella regione i sarà l'integrale sulle caratteristiche m, ovvero, ricordando la scelta delle direzioni operata per poter usare formule di quadratura:

$$\phi_i = \sum_{m=1}^M \omega_m \bar{\Phi}_i(\Omega_m)$$

in cui sono state evidenziate le M direzioni ed i corrispondenti pesi  $\omega_m$ . In Figura 44 è riportato uno schema con le grandezze usate nel metodo MOC.

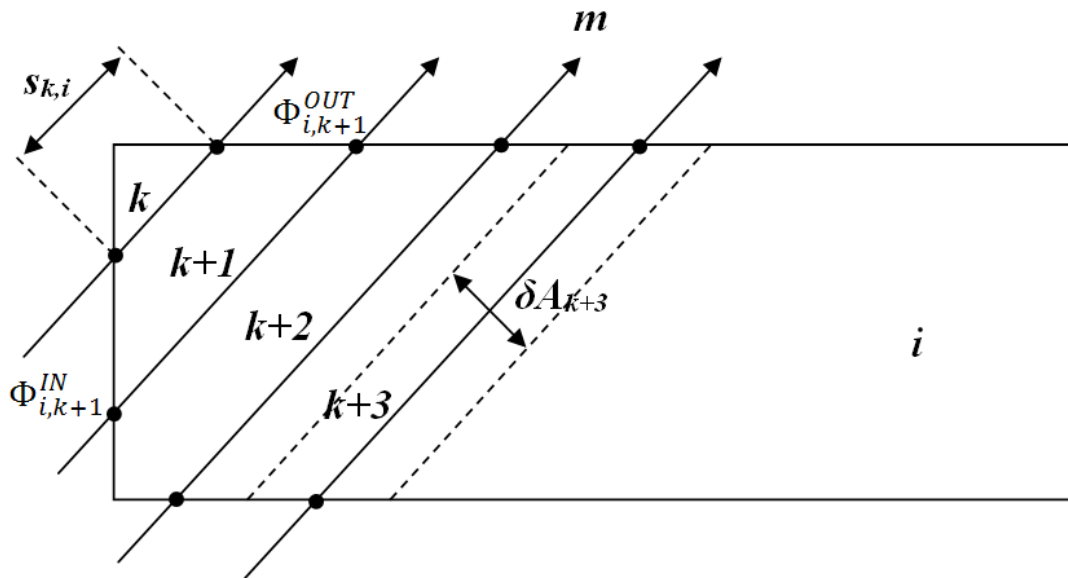
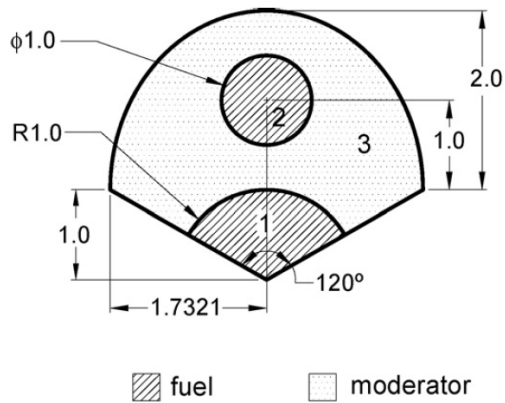


Figura 44: Elementi del metodo MOC.

I principali limiti del metodo MOC sono la mancata convergenza delle iterazioni della sorgente di scattering quando il rapporto  $\Sigma_s/\Sigma_t$  si avvicina molto a 1, e la difficoltà di definire delle maglie larghe da usare per schemi di accelerazione delle iterazioni in domini con mesh non strutturate.

Grazie alla possibilità di descrivere accuratamente le geometrie più complicate, sino ad interi noccioli, il MOC può essere impiegato con successo anche a LWR di ricerca o sperimentali, ove canali di irraggiamento o di alloggiamento di strumentazione in grado di alterare il campo di flusso (un esempio recente è il reattore Jules Horowitz) renderebbero troppo approssimati i calcoli fatti con altri metodi. A titolo di esempio si riportano i risultati di un codice MOC applicato al benchmark ideale, con geometria fortemente irregolare, di Figura 45. Le condizioni al contorno erano miste, in parte di vuoto ed in parte di riflessione. Di tale sistema sono state proposte due zonizzazioni per il metodo MOC mostrate in Figura 46, la prima con 500 regioni e la seconda con 1380 regioni; per entrambe queste due meshature irregolari sono state usate le seguenti direzioni caratteristiche: 8 angoli azimutali uniformemente distribuiti tra 0 e  $\pi$ , e 4 angoli polari tra 0 e  $\pi/2$  scelti tra i pesi della quadratura di Gauss. Il calcolo di riferimento è stato effettuato con MCNP, usando 50000 storie, 50 cicli inattivi e 450 cicli attivi. I risultati sono mostrati in Tabella 8; si può chiaramente vedere come il metodo MOC con meshatura fine fornisca gli stessi risultati del metodo montecarlo, non solo per l'autovalore del sistema, ma anche per il flusso ad 1 gruppo. La meshatura grossolana fornisce invece risultati troppo in disaccordo con il calcolo di riferimento. Va inoltre aggiunto che per il benchmark in esame il rapporto  $\Sigma_s/\Sigma_t$  per il fuel valeva 0.7, cioè abbastanza prossimo ad 1.



fuel      moderator

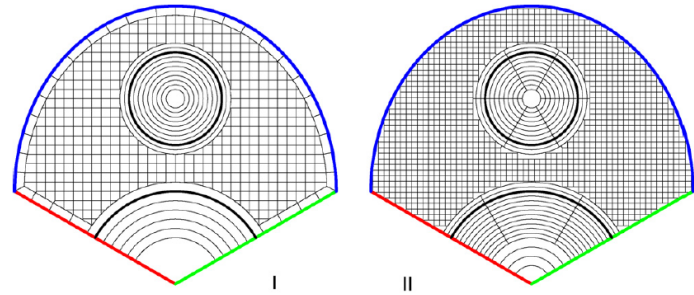


Figura 46: Due zonizzazioni del sistema di Figura 43 per metodo MOC.

Figura 45: Sistema a geometria complessa.

Tabella 8: Confronto MOC vs metodo Montecarlo.

		Regione 1	Regione 2	Regione 3	Keff
<b>MCNP</b>		0.79818	0.20895	0.15192	1.20173 ± (20 pcm)
<b>Mesh I</b>	Flusso	0.79542	0.21269	0.15288	1.19584
	Differenza	-0.346%	1.79%	0.632%	490 pcm
<b>Mesh II</b>	Flusso	0.79769	0.20966	0.15279	1.20162
	Differenza (pcm)	-0.061%	0.342%	0.567%	-9 pcm

Il metodo CP si basa su un'integrazione dell'equazione del trasporto in forma integrale eseguita su volumi finiti all'interno dei quali le proprietà nucleari possano essere considerate uniformi. L'equazione integrale è:

$$\Phi(\vec{r}, E) = \int \left( \int \Sigma_s(\vec{r}', E' \rightarrow E) \Phi(\vec{r}', E') dE' + S(\vec{r}', E) \right) \frac{e^{-\Sigma_t(E)|\vec{r}' - \vec{r}|}}{4\pi|\vec{r}' - \vec{r}|^2} d\vec{r}'$$

Suddividendo il dominio di interesse in N regioni omogenee di volumi  $V_i$  con  $i=1..N$ , considerando un approccio multigruppo, moltiplicando ambo i membri per la sezione d'urto totale della regione  $i$ , ed integrando l'equazione del trasporto sui singoli volumi  $V_i$  si ottiene, per ogni gruppo  $g$ , il sistema di N equazioni algebriche in N incognite del tipo:

$$V_i \Sigma_{ti} \Phi_i = \sum_j P_{ji} V_j (\Sigma_{sj} \Phi_j + S_j) = \sum_j P_{ji} V_j Q_j$$

in cui è

$$\Phi_j = \frac{\int_{V_j} \Phi(\vec{r}) d\vec{r}}{V_j}$$

$$S_j = \frac{\int_{V_j} S(\vec{r}) d\vec{r}}{V_j}$$

$$P_{ji} = \frac{\Sigma_{ti} \int_{V_i} \int_{V_j} Q(\vec{r}) \left( \frac{e^{-\Sigma_t s}}{4\pi s^2} \right) d\vec{r}' d\vec{r}}{\int_{V_j} Q(\vec{r}) d\vec{r}}$$

$$Q_j = \frac{\int_{V_j} Q(\vec{r}) d\vec{r}}{V_j}$$

Gli elementi  $P_{ji}$ , detti probabilità di collisione, rappresentano la probabilità che un neutrone, generato isotropicamente nella regione  $j$ , giunga incolliso sino alla regione  $i$  e lì subisca la sua prima collisione. E' importante notare, vedi Figura 47, che il segmento di linea retta di lunghezza  $s$ , congiungente i due punti all'interno dei volumi  $j$  ed  $i$  rispettivamente, può attraversare, con tratti di lunghezza parziale  $s_k$ , molte regioni diverse del dominio, ognuna con proprietà nucleari diverse. Pertanto sarà:

$$\Sigma_t s = \sum_k \Sigma_{tk} s_k$$

sotto condizione che

$$s = \sum_k s_k$$

Se i volumi di integrazione sono sufficientemente piccoli si può considerare uniforme la sorgente  $Q$  (questa ipotesi viene detta di "Flusso Piatto"), analogamente a quanto fatto per il metodo MOC, e dunque le probabilità di collisione si semplificano in

$$P_{ji} \cong \frac{\Sigma_{ti} \int_{V_i} \int_{V_j} \left( \frac{e^{-\Sigma_t s}}{4\pi s^2} \right) d\vec{r}' d\vec{r}}{V_j}$$

In questo modo si aggiunge l'ulteriore approssimazione che il neutrone generato nella regione  $j$ , oltre ad essere emesso isotropicamente, deve essere anche prodotto uniformemente entro  $j$ ; tale

approssimazione è ovviamente tanto migliore quanto più piccole sono le regioni in cui è suddiviso il dominio. La presenza della sezione d'urto totale per la regione  $i$  ad entrambi i membri delle  $N$  equazioni del metodo CP deriva dal voler interpretare le  $P_{ji}$  come probabilità di prima collisione in  $i$  ed in modo da interpretare fisicamente il primo membro delle equazioni come densità di collisione. In alcuni codici piuttosto datati infatti veniva cercata come soluzione al problema di cella direttamente la densità di collisione, anziché la funzione flusso. Questo però generava molti problemi numerici di malcondizionamento delle matrici da invertire numericamente allorché si volevano cercare soluzioni in regioni vuote o con materiali a bassissima densità atomica. Codici più recenti, come Apollo2, usano come incognita il flusso anziché la densità di collisione, cosicché non c'è più bisogno di moltiplicare ambo i membri dell'equazione integrale per  $\Sigma_{ti}$  e le matrici possono essere invertite senza problemi di malcondizionamento.

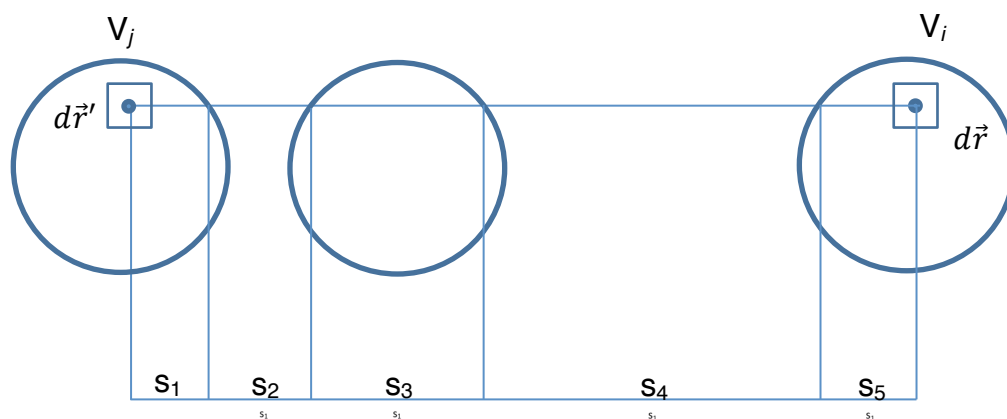


Figura 47: Segmento s.

E' utile notare che gli elementi  $P_{ji}$  sono definiti anche per  $j=i$  e rappresentano la probabilità che un neutrone emesso nell'elemento di volume  $i$  compia lì la propria prima collisione.

Gli integrali doppi che definiscono le  $P_{ji}$  sono simmetrici e questo comporta la seguente relazione di reciprocità:

$$V_i \Sigma_i P_{ij} = V_j \Sigma_j P_{ji}$$

E' evidente infatti che la probabilità che un neutrone che viaggia da un punto all'altro del sistema senza collidere non deve cambiare invertendo la direzione di volo. Inoltre, in assenza di leakage, si può scrivere una relazione c.d. di complementarità, ovvero che un neutrone compirà prima o poi una collisione, e che dunque deve essere

$$\sum_{i=1}^N P_{ji} = 1$$

Le due relazioni testé scritte consentono di ridurre di quasi il 50% il numero di calcoli di integrali doppi necessari a descrivere un sistema tramite le CP. In pratica però è necessario considerare non solo probabilità di collisione di volume, ma anche probabilità di uscita attraverso una superficie: la probabilità  $P_{jS}$  andrà dunque a rappresentare la probabilità che un neutrone prodotto nel volume  $j$  esca da tale volume attraverso la superficie  $S$ , oppure la probabilità  $P_{Si}$  che un neutrone, entrando in  $i$  attraverso la superficie  $S$  compia la prima collisione in  $i$  stesso, od infine la probabilità  $P_{SS}$  che un neutrone entrato in un volume attraverso la superficie  $S$  esca dal volume attraverso la stessa superficie.

E' evidente che se è concesso al neutrone di uscire dal sistema la relazione di complementarità si scriverà come

$$\sum_{i=1}^N P_{ji} + P_{jS} = 1$$

E' possibile dimostrare che valgono le seguenti relazioni di reciprocità e complementarità per la probabilità di superficie (si ricordi il concetto di opacità adimensionale introdotto più sopra):

$$P_{Si} = \frac{4V_i \Sigma_i}{S} P_{iS}$$

$$\sum_{i=1}^N P_{Si} + P_{SS} = 1$$

E' importante ricordare che  $P_{Si}$  è per definizione inferiore ad 1, mentre l'opacità adimensionale può essere a rigore anche molto maggiore di 1, tuttavia al crescere dell'opacità decresce anche  $P_{iS}$  in modo tale che  $P_{Si}$  mantenga correttamente il proprio significato probabilistico.

Il calcolo delle probabilità di collisione in geometria piana monodimensionale richiede il ricorso alle funzioni esponenziali integrali  $E_n$  di ordine 1 e 3; il calcolo in geometria piana bidimensionale richiede il ricorso alle funzioni di Bickley-Naylor  $Ki_n$  di ordine 2 e 3.

E' infine possibile definire delle probabilità di collisione direzionali, cioè definite su un insieme di direzioni angolari prefissate, a partire dall'equazione integro-differenziale del trasporto.

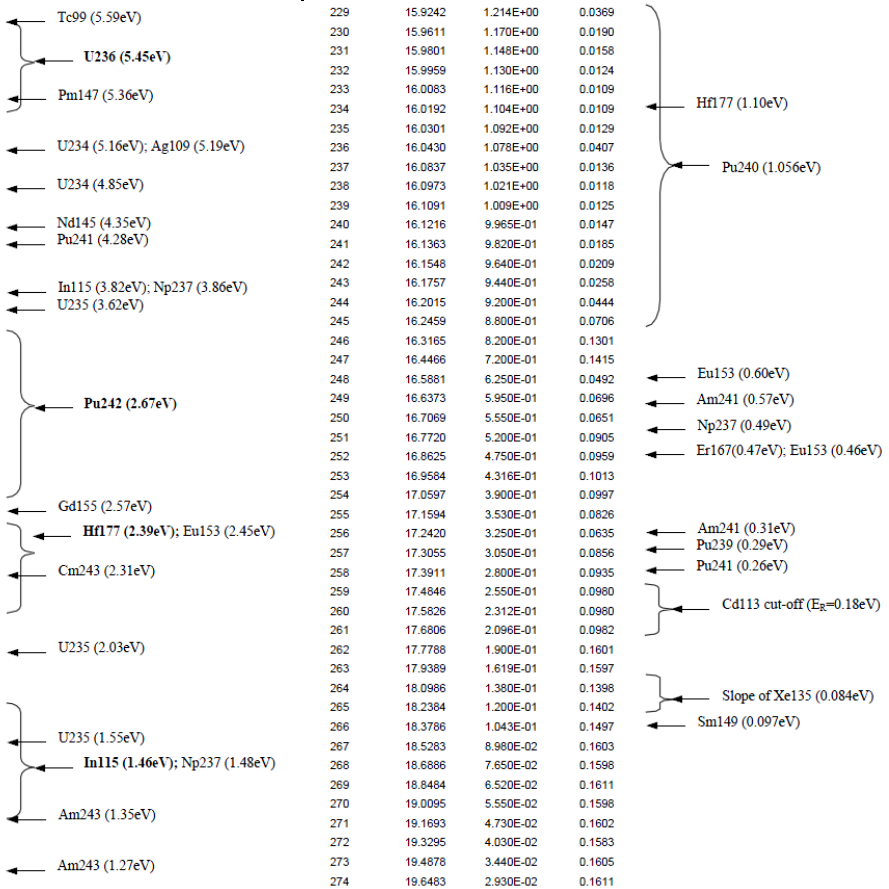
## Appendice 1: Struttura a gruppi SHEM-281

La tabella mostra l'indice di gruppo, la letargia dell'estremo inferiore del gruppo, l'energia corrispondente (cioè l'estremo superiore del gruppo) in eV, l'ampiezza letargica del gruppo e le risonanze che cadono all'interno del gruppo stesso.

Group	Umin	Emax	Du						
1	-0.6750	1.964E+07	0.2750						
2	-0.4000	1.492E+07	0.0750	← Neutrons 14MeV (D,T)					
3	-0.3250	1.384E+07	0.1750						
4	-0.1500	1.162E+07	0.1500						
5	0.0000	1.000E+07	0.1000						
6	0.1000	9.048E+06	0.1000						
7	0.2000	8.187E+06	0.1000						
8	0.3000	7.408E+06	0.1000						
9	0.4000	6.703E+06	0.1000						
10	0.5000	6.065E+06	0.2000						
11	0.7000	4.968E+06	0.2000						
12	0.9000	4.068E+06	0.2000						
13	1.1000	3.329E+06	0.2000						
14	1.3000	2.725E+06	0.2000						
15	1.5000	2.231E+06	0.1600						
16	1.6600	1.901E+06	0.1500						
17	1.8100	1.637E+06	0.1520						
18	1.9620	1.406E+06	0.0502						
19	2.0122	1.337E+06	0.0381						
20	2.0503	1.287E+06	0.1021						
21	2.1524	1.162E+06	0.1003						
22	2.2527	1.051E+06	0.1000						
23	2.3527	9.511E+05	0.1007						
24	2.4534	8.600E+05	0.1966						
25	2.6500	7.065E+05	0.2000						
26	2.8500	5.784E+05	0.1578						
27	3.0078	4.940E+05	0.0800						
28	3.0878	4.560E+05	0.1003						
29	3.1881	4.125E+05	0.0719						
30	3.2600	3.839E+05	0.1800						
31	3.4400	3.206E+05	0.1800						
32	3.6200	2.678E+05	0.1522						
33	3.7722	2.300E+05	0.1651						
34	3.9373	1.950E+05	0.1671						
35	4.1044	1.650E+05	0.1643						
36	4.2687	1.400E+05	0.1313						
37	4.4000	1.228E+05	0.0600	← Al27 (120keV)					
38	4.4600	1.156E+05	0.2000						
39	4.6600	9.466E+04	0.1400	← Al27 (87keV)					
40	4.8000	8.230E+04	0.2000						
41	5.0000	6.738E+04	0.2000						
42	5.2000	5.517E+04	0.1000	← Na23 (53keV)					
43	5.3000	4.992E+04	0.2000						
44	5.5000	4.087E+04	0.1000						
45	5.6000	3.698E+04	0.1000						
46	5.7000	3.346E+04	0.1334						
47	5.8334	2.928E+04	0.0668						
48	5.9000	2.739E+04	0.0484						
49	5.9484	2.610E+04	0.0431						
50	5.9915	2.500E+04	0.0965						
51	6.0880	2.270E+04	0.2000						
52	6.2880	1.858E+04	0.1373						
53	6.4253	1.620E+04	0.0837						
54	6.5090	1.490E+04	0.0910						
55	6.6000	1.360E+04	0.2000						
56	6.8000	1.114E+04	0.2000						
57	7.0000	9.119E+03	0.2000						
58	7.2000	7.466E+03	0.2000						
59	7.4000	6.113E+03	0.2000						
60	7.6000	5.005E+03	0.2000						
61	7.8000	4.097E+03	0.1630						
62	7.9630	3.481E+03	0.1500						
63	8.1130	2.996E+03	0.1500						
64	8.2630	2.579E+03	0.1500						
65	8.4130	2.220E+03	0.1500						
66	8.5630	1.910E+03	0.1686						
67	8.7316	1.614E+03	0.1823						
68	8.9139	1.345E+03	0.1698						
69	9.0837	1.135E+03	0.0637						
70	9.1474	1.065E+03	0.1600						
71	9.3074	9.075E+02	0.1926						
72	9.5000	7.485E+02	0.2000						
73	9.7000	6.128E+02	0.2000						
74	9.9000	5.017E+02	0.2000						
75	10.1000	4.108E+02	0.1500						
76	10.2500	3.536E+02	0.1000						
77	10.3500	3.199E+02	0.1200						
78	10.4700	2.838E+02	0.1600						
79	10.6300	2.418E+02	0.2000						
80	10.8300	1.980E+02	0.2000						
81	11.0300	1.621E+02	0.2000						
82	11.2300	1.327E+02	0.2000						
83	11.4300	1.086E+02	0.2000						
84	11.6300	8.895E+01	0.1700						
85	11.8000	7.505E+01	0.2000						
86	12.0000	6.144E+01	0.1540						
87	12.1540	5.267E+01	0.1400						
88	12.2940	4.579E+01	0.0400						
89	12.3340	4.400E+01	0.0910						
90	12.4250	4.017E+01	0.1750						
91	12.6000	3.372E+01	0.2000						



184	14.3918	5.620E+00	0.0161		229	15.9242	1.214E+00	0.0369	
185	14.4079	5.530E+00	0.0076		230	15.9611	1.170E+00	0.0190	
186	14.4155	5.488E+00	0.0143		231	15.9801	1.148E+00	0.0158	
187	14.4298	5.410E+00	0.0056		232	15.9959	1.130E+00	0.0124	
188	14.4354	5.380E+00	0.0112		233	16.0083	1.116E+00	0.0109	
189	14.4466	5.320E+00	0.0209		234	16.0192	1.104E+00	0.0109	
190	14.4675	5.210E+00	0.0194		235	16.0301	1.092E+00	0.0129	
191	14.4869	5.110E+00	0.0352		236	16.0430	1.078E+00	0.0407	
192	14.5221	4.933E+00	0.0341		237	16.0837	1.035E+00	0.0136	
193	14.5562	4.768E+00	0.0758		238	16.0973	1.021E+00	0.0118	
194	14.6320	4.420E+00	0.0252		239	16.1091	1.009E+00	0.0125	
195	14.6572	4.310E+00	0.0211		240	16.1216	9.965E-01	0.0147	
196	14.6783	4.220E+00	0.0535		241	16.1363	9.820E-01	0.0185	
197	14.7318	4.000E+00	0.0299		242	16.1548	9.640E-01	0.0209	
198	14.7617	3.882E+00	0.0448		243	16.1757	9.440E-01	0.0258	
199	14.8065	3.712E+00	0.0466		244	16.2015	9.200E-01	0.0444	
200	14.8531	3.543E+00	0.1201		245	16.2459	8.800E-01	0.0706	
201	14.9732	3.142E+00	0.0857		246	16.3165	8.200E-01	0.1301	
202	15.0589	2.884E+00	0.0385		247	16.4466	7.200E-01	0.1415	
203	15.0974	2.775E+00	0.0124		248	16.5881	6.250E-01	0.0492	
204	15.1098	2.741E+00	0.0077		249	16.6373	5.950E-01	0.0696	
205	15.1175	2.720E+00	0.0073		250	16.7069	5.550E-01	0.0651	
206	15.1248	2.700E+00	0.0225		251	16.7720	5.200E-01	0.0905	
207	15.1473	2.640E+00	0.0076		252	16.8625	4.750E-01	0.0959	
208	15.1549	2.620E+00	0.0115		253	16.9584	4.316E-01	0.1013	
209	15.1664	2.590E+00	0.0156		254	17.0597	3.900E-01	0.0997	
210	15.1820	2.550E+00			255	17.1594	3.530E-01	0.0826	
211	15.2139	2.470E+00	0.0583		256	17.2420	3.250E-01	0.0635	
212	15.2722	2.330E+00	0.0248		257	17.3055	3.050E-01	0.0856	
213	15.2970	2.273E+00	0.0249		258	17.3911	2.800E-01	0.0935	
214	15.3219	2.217E+00	0.0275		259	17.4846	2.550E-01	0.0980	
215	15.3494	2.157E+00	0.0411		260	17.5826	2.312E-01	0.0980	
216	15.3905	2.070E+00	0.0395		261	17.6806	2.096E-01	0.0982	
217	15.4300	1.990E+00	0.0462		262	17.7788	1.900E-01	0.1601	
218	15.4762	1.900E+00	0.0653		263	17.9389	1.619E-01	0.1597	
219	15.5415	1.780E+00	0.0644		264	18.0986	1.380E-01	0.1398	
220	15.6059	1.669E+00	0.0497		265	18.2384	1.200E-01	0.1402	
221	15.6556	1.588E+00	0.0438		266	18.3786	1.043E-01	0.1497	
222	15.6994	1.520E+00	0.0513		267	18.5283	8.980E-02	0.1603	
223	15.7507	1.444E+00	0.0238		268	18.6886	7.650E-02	0.1598	
224	15.7745	1.410E+00	0.0208		269	18.8484	6.520E-02	0.1611	
225	15.7953	1.381E+00	0.0369		270	19.0095	5.550E-02	0.1598	
226	15.8322	1.331E+00	0.0289		271	19.1693	4.730E-02	0.1602	
227	15.8611	1.293E+00	0.0331		272	19.3295	4.030E-02	0.1583	
228	15.8942	1.251E+00	0.0300		273	19.4878	3.440E-02	0.1605	
					274	19.6483	2.930E-02	0.1611	
					275	19.8094	2.494E-02	0.2202	
					276	20.0296	2.001E-02	0.2996	
					277	20.3292	1.483E-02	0.3500	
					278	20.6792	1.045E-02	0.3802	
					279	21.0594	7.145E-03	0.4500	
					280	21.5094	4.556E-03	0.6002	
					281	22.1096	2.500E-03	3.1235	



## Appendice 2: Struttura a gruppi WIMS-69


La tabella mostra l'indice di gruppo e l'energia corrispondente all'estremo superiore del gruppo in eV.

Fast groups		Resonant groups		Thermal groups	
Group	E <sub>max</sub> (eV)	Group	E <sub>max</sub> (eV)	Group	E <sub>max</sub> (eV)
1	1.00000E+07	15	9.11800E+03	28	4.00000E+0
2	6.06550E+06	16	5.53000E+03	29	3.30000E+0
3	3.67900E+06	17	3.51910E+03	30	2.60000E+0
4	2.23100E+06	18	2.23945E+03	31	2.10000E+0
5	1.35300E+06	19	1.42510E+03	32	1.50000E+0
6	8.21000E+05	20	9.06899E+02	33	1.30000E+0
7	5.00000E+05	21	3.67263E+02	34	1.15000E+0
8	3.02500E+05	22	1.48729E+02	35	1.12300E+0
9	1.83000E+05	23	7.55014E+01	36	1.09700E+0
10	1.11000E+05	24	4.80520E+01	37	1.07100E+0
11	6.73400E+04	25	2.77000E+01	38	1.04500E+0
12	4.08500E+04	26	1.59680E+01	39	1.02000E+0
13	2.47800E+04	27	9.87700E+00	40	9.96000E-01
14	1.50300E+04			41	9.72000E-01
				42	9.50000E-01
				43	9.10000E-01
				44	8.50000E-01
				45	7.80000E-01
				46	6.25000E-01
				47	5.00000E-01
				48	4.00000E-01
				49	3.50000E-01
				50	3.20000E-01
				51	3.00000E-01
				52	2.80000E-01
				53	2.50000E-01
				54	2.20000E-01
				55	1.80000E-01
				56	1.40000E-01
				57	1.00000E-01
				58	8.00000E-02
				59	6.70000E-02
				60	5.80000E-02
				61	5.00000E-02
				62	4.20000E-02
				63	3.50000E-02
				64	3.00000E-02
				65	2.50000E-02
				66	2.00000E-02
				67	1.50000E-02
				68	1.00000E-02
				69	5.00000E-03
					1.00000E-05

### Appendice 3: Struttura a gruppi XMAS-172

La tabella mostra l'indice di gruppo e l'energia corrispondente all'estremo superiore del gruppo in eV.


Fast groups		Resonant groups		Thermal groups			
g	E <sub>max</sub> (eV)	g	E <sub>max</sub> (eV)	g	E <sub>max</sub> (eV)	g	E <sub>max</sub> (eV)
1	1.96403E+07	46	9.11882E+03	93	4.00000E+00	140	4.33000E-01
2	1.73325E+07	47	7.46586E+03	94	3.38075E+00	141	4.00000E-01
3	1.49182E+07	48	5.53085E+03	95	3.30000E+00	142	3.91000E-01
4	1.38403E+07	49	5.00450E+03	96	2.76792E+00	143	3.50000E-01
5	1.16183E+07	50	3.52662E+03	97	2.72000E+00	144	3.20000E-01
6	1.00000E+07	51	3.35463E+03	98	2.60000E+00	145	3.14500E-01
7	8.18731E+06	52	2.24867E+03	99	2.55000E+00	146	3.00000E-01
8	6.70320E+06	53	2.03468E+03	100	2.36000E+00	147	2.80000E-01
9	6.06531E+06	54	1.50733E+03	101	2.13000E+00	148	2.48000E-01
10	5.48812E+06	55	1.43382E+03	102	2.10000E+00	149	2.20000E-01
11	4.49329E+06	56	1.23410E+03	103	2.02000E+00	150	1.89000E-01
12	3.67879E+06	57	1.01039E+03	104	1.93000E+00	151	1.80000E-01
13	3.01194E+06	58	9.14242E+02	105	1.84000E+00	152	1.60000E-01
14	2.46597E+06	59	7.48518E+02	106	1.75500E+00	153	1.40000E-01
15	2.23130E+06	60	6.77287E+02	107	1.67000E+00	154	1.34000E-01
16	2.01897E+06	61	4.53999E+02	108	1.59000E+00	155	1.15000E-01
17	1.65299E+06	62	3.71703E+02	109	1.50000E+00	156	1.00000E-01
18	1.35335E+06	63	3.04325E+02	110	1.47500E+00	157	9.50000E-02
19	1.22456E+06	64	2.03995E+02	111	1.44498E+00	158	8.00000E-02
20	1.10803E+06	65	1.48625E+02	112	1.37000E+00	159	7.70000E-02
21	1.00259E+06	66	1.36742E+02	113	1.33750E+00	160	6.70000E-02
22	9.07180E+05	67	9.16609E+01	114	1.30000E+00	161	5.80000E-02
23	8.20850E+05	68	7.56736E+01	115	1.23500E+00	162	5.00000E-02
24	6.08101E+05	69	6.79040E+01	116	1.17000E+00	163	4.20000E-02
25	5.50232E+05	70	5.55951E+01	117	1.15000E+00	164	3.50000E-02
26	4.97871E+05	71	5.15780E+01	118	1.12535E+00	165	3.00000E-02
27	4.50492E+05	72	4.82516E+01	119	1.11000E+00	166	2.50000E-02
28	4.07622E+05	73	4.55174E+01	120	1.09700E+00	167	2.00000E-02
29	3.01974E+05	74	4.01690E+01	121	1.07100E+00	168	1.50000E-02
30	2.73237E+05	75	3.72665E+01	122	1.04500E+00	169	1.00000E-02
31	2.47235E+05	76	3.37201E+01	123	1.03500E+00	170	6.90000E-03
32	1.83156E+05	77	3.05113E+01	124	1.02000E+00	171	5.00000E-03
33	1.22773E+05	78	2.76077E+01	125	9.96000E-01	172	3.00000E-03
34	1.11090E+05	79	2.49805E+01	126	9.86000E-01		1.00000E-05
35	8.22975E+04	80	2.26033E+01	127	9.72000E-01		
36	6.73795E+04	81	1.94548E+01	128	9.50000E-01		
37	5.51656E+04	82	1.59283E+01	129	9.30000E-01		
38	4.08677E+04	83	1.37096E+01	130	9.10000E-01		
39	3.69786E+04	84	1.12245E+01	131	8.60000E-01		
40	2.92830E+04	85	9.90555E+00	132	8.50000E-01		
41	2.73944E+04	86	9.18981E+00	133	7.90000E-01		
42	2.47875E+04	87	8.31529E+00	134	7.80000E-01		
43	1.66156E+04	88	7.52398E+00	135	7.05000E-01		
44	1.50344E+04	89	6.16012E+00	136	6.25000E-01		
45	1.11378E+04	90	5.34643E+00	137	5.40000E-01		
		91	5.04348E+00	138	5.00000E-01		
		92	4.12925E+00	139	4.85000E-01		

 <b>Ricerca Sistema Elettrico</b>	<b>Sigla di identificazione</b>	<b>Rev.</b>	<b>Distrib.</b>	<b>Pag.</b>	<b>di</b>
	NNFISS – LP5 – 022	0	R	75	78

## Bibliografia

- Paul Reuss, Neutron Physics, EDP Sciences, Les Ulis 2008.
- Alain Hebert, Applied Reactor Physics, Press Internationales Polytechnique, Montreal 2010.
- Weston M. Stacey, Nuclear Reactor Physics, John Wiley&Sons, New York 2001.
- Rudi J. J. Stamm'ler, M. J. Abbate, Methods of Steady-State Reactor Physics in Nuclear Design, Academic Press, London 1983.
- J. Taieb, P. Magat, A. Nicolas, Determination d'un schéma de référence pour le calcul d'un assemblage REP gadolinie à l'aide du code Apollo2, CEA SERMA/LENR/2136, 1997.
- P. Reuss, M. Coste-Delclaux, Development of Computational Models used in France for Neutron Resonance Absorption in Light Water Lattices, Progress in Nuclear Energy 42/3, 2003, 237-282.
- A. Hebert, A Review of Legacy and Advanced Self-Shielding Models for Lattice Calculations, M&C2005, Avignon.
- A. Santamarina, C. Collignon, C. Garat, French Calculation Schemes for Light Water Reactor Analysis, PHYSOR 2004, Chicago.
- D. Bernard, A. Santamarina, A. Malvagi, L. Daudin, Experimental Validation of the Apollo2 Code for High Burnup MOX Fuel. JEF2.2 Results and JEFF3.0 Improvements, PHYSOR 2004, Chicago.
- V. Marotte, F. Clement, S. Thareau, S. Misu, I. Zmijarevic, Industrial Application of Apollo2 to Boiling Water Reactors, PHYSOR 2006, Vancouver.
- C. Vaglio-Gaudard, A. Santamarina, A. Sargeni, R. Le Tellier, J. F. Vidal, Qualification of Apollo2 BWR Calculation Scheme, PHYSOR 2006, Vancouver.
- M. Coste-Delclaux, A. Aggery, N. Huot, New Developments in Resonant Mixture Self-shielding Treatment with Apollo2 Code and Application to Jules Horowitz Reactor Core Calculation, M&C2005, Avignon.
- N. Huot, A. Aggery, D. Blanchet, C. D'Aletto, J. Di Salvo, C. Doderlein, P. Sireta, G. Willermoz, The JHR Neutronics Calculation Scheme Based on the Method of Characteristics, M&C2005, Avignon.
- M. Coste-Delclaux, GALILEE: A Nuclear Data Processing System for Transport, Depletion and Shielding Codes, PHYSOR 2008, Interlaken.
- R. Sanchez, I. Zmijarevic, M. Coste-Delclaux, E. Masiello, S. Santandrea, E. Martinolli, L. Villate, N. Schwartz, N. Guler, Apollo2 Year 2010, Nuclear Engineering and Technology 42/5, 2010, 474-499.
- P. Reuss, A Generalization of the Livolant-Jeanpierre Theory for Resonance Absorption Calculation, NSE 92, 1986, 261-266.
- J. F. Vidal, O. Litaize, D. Bernard, A. Santamarina, C. Vaglio-Gaudard, R. Tran, New Modelling of LWR Assemblies using the Apollo2 Code Package, M&C2007, Monterey.
- A. Santamarina, N. Hfaideh, R. Letellier, V. Marotte, S. Misu, A. Sargeni, C. Vaglio, I. Zmijarevic, Advanced Neutronics Tools for BWR Design Calculations, Nuclear Engineering and Design 238, 2008, 1965-1974.

- R. Sanchez, J. Mondot, Z. Stankovski, A. Cossic, I. Zmijarevic, Apollo2: A User-Oriented Portable Modular Code for Multigroup Transport Assembly Calculations, NSE 100, 1988, 352-362.
- H. Golfier, C. Poinot-Salanon, N. Taieb, R. Enderle, Deterministic and Montecarlo Calculation Schemes of the EPR Core and its heavy Steel Reflector, PHYSOR 2006, Vancouver.
- J. F. Vidal, R. Le Tellier, P. Blaise, G. Guillot, N. Huot, O. Litaize, A. Santamarina, N. Thiollay, C. Vaglio-Gaudard, PHYSOR 2008, Interlaken.
- N. Hfaiedh, A. Santamarina, Determination of the Optimized SHEM Mesh for Neutron Transport Calculations, M&C2005, Avignon.
- A. Hebert, A. Santamarina, Refinement of the Santamarina-Hfaiedh Energy Mesh between 22.5 eV and 11.4 keV, PHYSOR 2008, Interlaken.
- I. Zmijarevic, E. Masiello, R. Sanchez, Flux Reconstruction Methods for Assembly Calculations in the Code Apollo2, PHYSOR 2006, Vancouver.
- I. Zmijarevic, H. Golfier, S. Santandrea, Z. Stankovski, C. Guenaut, Use of 2D Whole-Core Reactor Models for PWR Analysis with Apollo2, PHYSOR 2008, Interlaken.
- H. Golfier, R. Lenain, C. Calvin, J. Lautard, A. Baudron, Ph. Fougeras, Ph. Magat, E. Martinolli, Y. Dutheillet, Apollo3: A Common Project of CEA, AREVA and EDF for the Development of a new Deterministic Multi-purpose Code for Core Physics Analysis, M&C2009, Saratoga Springs.
- Q. Chen, H. Wu, L. Cao, AutoMOC: a 2D Neutron Transport Code for Arbitrary Geometry based on the Method of Characteristics and Customization of AutoCAD, Nuclear Engineering and Design 238, 2008, 2828-2833.

 <b>Ricerca Sistema Elettrico</b>	Sigla di identificazione	Rev.	Distrib.	Pag.	di
	NNFISS – LP5 – 022	0	R	77	78

## Indice delle Tabelle

Tabella 1: Principali risonanze degli attinidi.....	7
Tabella 2: Principali risonanze dei prodotti di fissione. ....	7
Tabella 3: Principali risonanze degli assorbitori e dei veleni neutronici.....	7
Tabella 4: Principali risonanze dei materiali strutturali. ....	8
Tabella 5: Bilancio delle reaction rates: confronto XMAS vs SHEM.....	11
Tabella 6: Alcuni dati sugli isotopi naturali del Gadolinio.....	37
Tabella 7: Effetti dell'autoschermo su alcuni isotopi del riflettore dell'EPR. ....	57
Tabella 8: Confronto MOC vs metodo Montecarlo. ....	66

## Indice delle Figure

Figura 1: Principali risonanze di assorbimento tra 0.25 e 4 eV. ....	5
Figura 2: Principali risonanze di assorbimento tra 4 e 23 eV. ....	6
Figura 3: Principali risonanze della sezione d'urto totale tra 200 eV e 200 keV.....	6
Figura 4: Confronto fra strutture a gruppi.....	9
Figura 5: Differenze sul reactivity loss tra strutture SHEM e XMAS. ....	11
Figura 6: Risonanze sovrapposte in zona termica di $^{238}\text{U}$ e $^{150}\text{Sm}$ .....	12
Figura 7: Variazione col burnup della xs efficace di assorbimento di $^{240}\text{Pu}$ in un PWR.....	12
Figura 8: Spettri in zona termica per PWR a UOX e MOX. ....	13
Figura 9: Evoluzione degli isotopi del plutonio in un LWR. ....	15
Figura 10: Schema di calcolo CEA REL2005.....	18
Figura 11: Sovrapposizione risonanze di $^{238}\text{U}$ , $^{239}\text{Pu}$ e $^{240}\text{Pu}$ a 66 eV.....	19
Figura 12: Schematizzazione di reticolo piano con flusso macroscopico e struttura fine.....	20
Figura 13: Andamento del Fattore di Bell in funzione dell'opacità adimensionale. ....	25
Figura 14: Schema concettuale del metodo delle Tabelle di Probabilità. ....	30
Figura 15: Tre sezioni d'urto rappresentate dalla stessa Tabella di Probabilità.....	32
Figura 16: Burnup medio allo scarico per LWR.....	34
Figura 17: Discharge burn-up vs arricchimento iniziale (w%) in $^{235}\text{U}$ .....	35
Figura 18: Catena del Gadolinio.....	37
Figura 19: Catena semplificata del Gadolinio.....	38
Figura 20: Evoluzione degli isotopi del gadolinio per un assembly PWR a 16 elementi gadolinati...	38
Figura 21: Un quarto di assembly gadolinato PWR 17x17. ....	39
Figura 22: Evoluzione di $k_{\infty}$ per l'assembly PWR gadolinato.....	40
Figura 23: Prodotto pf in funzione del rapporto di moderazione.....	43
Figura 24: Variazione del prodotto pf a seguito di aggiunta di boro. ....	44
Figura 25: Effetto del plutonio sul prodotto pf.....	44
Figura 26: Variazione di pf al variare dell'arricchimento. ....	45
Figura 27: Variazione di pf al variare del raggio della barretta.....	45
Figura 28: Variazione di $k_{\infty}$ per un PWR al variare del rapporto di moderazione. ....	46
Figura 29: Distribuzione di plutonio misurata in una pellet bruciata a 81 Gwd/t. ....	47

<b>Figura 30: Reaction rate di assorbimento in una pellet e rim effect.</b> .....	<b>48</b>
<b>Figura 31: Suddivisione tipica di una pellet in 6 shell radiali.</b> .....	<b>49</b>
<b>Figura 32: Conducibilità termica di combustibili UOX e MOX.</b> .....	<b>50</b>
<b>Figura 33: Tipico assembly MOX 17x17 per nocciolo PWR ad 1/3 MOX.</b> .....	<b>51</b>
<b>Figura 34: Valore delle barre di controllo e del boro in funzione della frazione di fuel MOX nel nocciolo.</b> .....	<b>52</b>
<b>Figura 35: Coefficiente di temperatura del moderatore e frazione efficace di neutroni ritardati al variare del quantitativo di MOX.</b> .....	<b>53</b>
<b>Figura 36: Generazione di calore da combustibile esausto: UO<sub>2</sub> vs MOX.</b> .....	<b>53</b>
<b>Figura 37: Contributi percentuali alla generazione di calore residuo per cooling time fissato.</b> .....	<b>54</b>
<b>Figura 38: Contributi percentuali alla generazione di calore residuo per burn-up fissato.</b> .....	<b>54</b>
<b>Figura 39: Riflettore dell'EPR.</b> .....	<b>58</b>
<b>Figura 40: Schematizzazione di 1/8 di riflettore dell'EPR con mesh per calcoli di termofluidodinamica.</b> .....	<b>58</b>
<b>Figura 41: Generazione di calore per irraggiamento gamma in MW/m<sup>3</sup> nel riflettore dell'EPR.</b> .....	<b>58</b>
<b>Figura 42: Meshatura in Apollo2 per 1/8 di nocciolo EPR.</b> .....	<b>59</b>
<b>Figura 43: Sviluppo dei principali codici di cella di II generazione.</b> .....	<b>60</b>
<b>Figura 44: Elementi del metodo MOC.</b> .....	<b>65</b>
<b>Figura 45: Sistema a geometria complessa.</b> .....	<b>66</b>
<b>Figura 46: Due zonizzazioni del sistema di Figura 43 per metodo MOC.</b> .....	<b>66</b>
<b>Figura 47: Segmento s.</b> .....	<b>68</b>