UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI PISA Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Nucleare e della Produzione

Lezioni sul Trasporto dei Neutroni

Prof. Bruno Montagnini



Appunti ad uso del corso di Metodi Numerici per Reattori Nucleari a cura di Walter Ambrosini

> Corso di Laurea in Ingegneria Nucleare A.A. 1999-2000

Ultimo aggiornamento eseguito sabato 2 ottobre 1999

Premessa

Questi appunti costituiscono una raccolta delle lezioni sul Calcolo di Cella ed il Trasporto dei Neutroni tenute dal Prof. Bruno Montagnini nell'ambito del Corso di Metodi Numerici per Reattori Nucleari durante gli anni accademici passati.

Poiché dallo scorso anno le lezioni sono state affidate ad altro docente, si di documentare debitamente è la necessità gli sentita argomenti tradizionalmente coperti dal corso allo scopo di garantirne la continuità, mantenendo il più possibile inalterati i contenuti definiti dal Prof. Montagnini sulla base dell'esperienza acquisita in decenni di ricerca nel settore. Essendo già disponibile una documentazione sistematica per la parte del corso relativa ai metodi numerici per l'equazione della diffusione, si è ritenuto opportuno dotare anche la parte relativa al Trasporto di un sussidio, elaborato a partire dal materiale utilizzato dal Prof. Montagnini durante le lezioni, che proponesse una trattazione di riferimento delle relative tematiche.

Il risultato del lavoro svolto a questo scopo è la presente dispensa che copre una parte importante del corso di Metodi Numerici per i Reattori Nucleari. Grazie alle indicazioni degli studenti che ne hanno usufruito lo scorso anno, alcuni errori di stampa presenti nella versione precedente sono stati corretti.

A questo proposito, ulteriori commenti e richieste di cambiamento saranno benvenuti e potranno essere indirizzati al sottoscritto presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Nucleare e della Produzione, durante i colloqui a margine del corso oppure tramite posta elettronica (indirizzo: walter.ambrosini@ing.unipi.it).

Walter Ambrosini

Pisa, 2 Ottobre 1999

Indice

Premessa	
Indice	v
1. Introduzione	1
2. Il Calcolo delle Costanti Nucleari di Cella	3
2.1 Generalità	3
2.2 Metodi elementari	6
2.2.1 Calcolo dei fattori di cella in campo termico ed epitermico	6
2.2.2 Calcolo monocinetico di f con il metodo ABH	17
2.2.3 Termalizzazione dei neutroni in un reticolo (calcolo a due zone)	30
2.3 Metodi Numerici	34
2.3.1 Generalità	34
2.3.2 Calcolo dello spettro fine in macroregioni con buckling assegnato	35
2.3.3 Metodi numerici basati sull'equazione del trasporto	42
3. L'Equazione del Trasporto	49
3.1 Forma integrodifferenziale	49
3.1.1 Derivazione	49
3.1.2 Condizioni alle interfacce e al contorno	52
3.1.3 Equazione del trasporto e bilancio neutronico	54
3.2 L'equazione del trasporto stazionaria monocinetica	55
3.3 Caso stazionario monocinetico in simmetria piana	57
3.3.1 Derivazione dell'equazione	57
3.3.2 Sviluppo in armoniche sferiche	59
3.3.3 Le approssimazioni P _N : il caso particolare della P ₁	61
3.4 Forma integrale	63
3.4.1 Derivazione	63
3.4.2 Caso del corpo isolato	66
3.4.3 Soluzione numerica per il corpo isolato	69
4. Il Metodo delle Armoniche Sferiche	71
4.1 Una teoria più rigorosa per il caso piano	71
4.2 Equazioni P _N per il caso piano con dipendenza dall'energia	74

4.3 Discretizzazione rispetto all'energia	77
4.4 Dipendenza spaziale asintotica: le approssimazioni B _N	78
4.5 Riduzione delle equazioni P _N a sistemi di tipo diffusivo	82
4.6 Cenno alle approssimazioni DP _N	83
5. L'Equazione Integrale	87
5.1 Problemi monodimensionali e bidimensionali per corpo isolato	
5.1.1 Caso 1D	87
5.1.2 Caso 2D	89
5.2 Lo spettro termico nella cella	92
5.2.1 Il problema della omogenizzazione delle costanti termiche	92
5.2.2 Equazione integrale del trasporto con flusso entrante non nullo	92
5.2.3 Problemi bidimensionali	98
5.2.4 Le probabilità di collisione	99
6. Il Metodo delle Ordinate Discrete	103
6.1 Generalità	103
6.2 Il caso monodimensionale in coordinate cartesiane	103
6.2.1 Equazioni discretizzate	103
6.2.2 Algoritmo risolutivo	107
6.3 Il caso monodimensionale in coordinate sferiche	111
6.3.1 Forma dell'equazione del trasporto	111
6.3.2 Equazioni discretizzate	114
6.3.3 Algoritmo risolutivo	117
6.4 Il caso multidimensionale in coordinate cartesiane	120
6.4.1 Equazioni discretizzate	120
6.4.2 Algoritmo risolutivo e scelta delle direzioni ammissibili	122
6.5 Metodi accelerativi per le ordinate discrete	126
6.5.1 Generalità	126
6.5.2 "Coarse mesh-rebalance"	127
6.5.3 Accelerazione sintetica in diffusione (DSA)	130
6.6 "Ray effects"	132
7. Soluzione Analitica per Trasporto con Sorgente Localizzata	135
Bibliografia	147

1. Introduzione

La predizione della distribuzione del flusso neutronico negli attuali reattori nucleari richiede l'utilizzazione di tecniche di calcolo efficienti ed accurate, allo scopo di trattare con uno sforzo computazionale ragionevole la complessa struttura dei reticoli eterogenei.

La presenza nel nocciolo di materiali con proprietà nucleari molto diverse (combustibile, materiali strutturali, moderatore, elementi di controllo) comporta la necessità di utilizzare metodi che permettano descrizioni geometriche dettagliate e che siano sufficientemente affidabili sulle scale di lunghezza caratteristiche del reticolo. Oltre a ciò, l'adozione di diversi arricchimenti del combustibile e dei veleni bruciabili e le molteplici configurazioni delle barre di controllo costringono a ripetere molte volte i calcoli di cella sulla base di parametri diversi, in modo da costituire le librerie di costanti omogeneizzate da utilizzare nel calcolo, stazionario o transitorio, della distribuzione del flusso su tutto il reattore.

I metodi di calcolo basati sulla teoria della diffusione (v. Fisica del Reattore) e sulle teorie elementari sono largamente insufficienti per l'esecuzione di calcoli di cella. Le tecniche diffusive, in particolare, essendo basate su di una teoria approssimata, sono tuttora utilizzate per i calcoli, anche di cinetica, relativi all'intero nocciolo, ma sono giudicate del tutto inadatte per ottenere un'adeguata predizione dell'andamento spazio-energetico del flusso nella cella.

L'equazione del trasporto è invece lo strumento principe per conseguire questo scopo. La sua caratteristica di teoria "esatta" permette di ottenere risposte affidabili, nei limiti dell'accuratezza permessa dalle approssimazioni numeriche scelte per la sua soluzione. Le formule ottenute in base ad essa, quantunque complicate nella loro forma analitica, hanno, inoltre, un chiaro significato fisico, che ne permette, in genere, una immediata lettura intuitiva. Per contro, la soluzione di un problema neutronico in trasporto è più complicata che in diffusione, dal momento che la variabile dipendente è il flusso angolare (o la densità angolare) in luogo del flusso scalare (o della densità). Ciò introduce nel problema nuove variabili indipendenti, necessarie per la definizione della direzione di propagazione dei neutroni, che devono essere trattate in modo adeguato nella risoluzione numerica.

In questi appunti, dopo una breve discussione degli scopi del calcolo di cella e dei metodi elementari adottati a tale scopo, vengono sommariamente descritte le tecniche numeriche fondamentali per la risoluzione dell'equazione del trasporto, con particolare riferimento alle applicazioni di interesse per l'Ingegneria Nucleare. In particolare, il Capitolo 2 è dedicato al calcolo di cella e ai relativi metodi elementari e numerici. Il Capitolo 3 presenta un "tour guidato" in relazione all'equazione del trasporto, comprendente la derivazione delle forme integrodifferenziale ed integrale ed un primo cenno alle principali tecniche di applicazione. Quindi, il Capitolo 4 è interamente dedicato alla tecnica basata sullo sviluppo in armoniche sferiche. Il Capitolo 5 analizza in dettaglio le applicazioni dell'equazione integrale. Il Capitolo 6 presenta le tecniche cosiddette "ad ordinate discrete" basate sulla discretizzazione numerica della variabile angolare. Infine, il Capitolo 7 rappresenta una interessante digressione sulle tecniche analitiche di soluzione dell'equazione del rasporto nel caso di sorgente localizzata.

I metodi Monte Carlo, che pure sono di notevole interesse specialmente nel caso di geometrie complicate, non sono al momento considerati.

2. Il Calcolo delle Costanti Nucleari di Cella

2.1 Generalità

Nei reattori eterogenei il materiale fissile, il moderatore, il refrigerante, i materiali strutturali e di controllo sono generalmente disposti in modo che il nocciolo risulta costituito da schiere di unità elementari. Gli stessi elementi di combustibile ("assemblies") costituiscono, in un certo senso, l'unità la cui ripetizione genera l'intero nocciolo; spesso, però, è più conveniente considerare l'elemento di combustibile come ulteriormente suddiviso in unità elementari più semplici che prendono il nome di "celle" (v. Figura 1).

Anche se la cosa non è più del tutto corretta per i moderni reattori, le cui "assemblies" contengono barrette con diversi arricchimenti, per molti anni è stata proprio la "cella elementare" (la barretta più la porzione di moderatore che le compete) ad essere considerata come la vera unità rappresentativa dell'intero nocciolo per quanto riguarda il comportamento dei neutroni. In ogni caso, è sempre dalla cella che "si comincia": essa viene presa a riferimento per l'esecuzione di calcoli fondamentali il cui scopo è determinare gli andamenti spazio-energetici del flusso neutronico corrispondenti alle diverse composizioni



Figura 1- Elemento di combustibile e cella elementare

(arricchimento, veleni bruciabili, concentrazioni di boro) e ai diversi valori dei parametri fisici (temperatura del refrigerante, temperatura del combustibile, grado di vuoto, burn-up ecc.) che caratterizzano il nocciolo di un dato reattore.

Dal momento che il numero e il dettaglio dei calcoli da eseguire sono generalmente elevati, la cella deve essere schematizzata in modo che si abbia una geometria il più possibile semplice. Allo scopo di semplificare ulteriormente tale geometria, vengono usualmente adottate alcune approssimazioni:

- innanzitutto, l'altezza della cella è considerata molto grande (praticamente infinita) rispetto alle dimensioni radiali, così da poter considerare accettabili i risultati ottenuti da calcoli bidimensionali;
- le celle quadrate o esagonali (i tipi più comuni) possono poi essere ricondotte a celle cilindriche equivalenti, ottenute preservando i volumi delle diverse regioni (approssimazione di Wigner-Seitz); ciò consente di eseguire i calcoli in una sola coordinata spaziale, eventualmente facendo uso di opportune ipotesi per definire le condizioni al contorno più appropriate.

Come mostrato schematicamente in Figura 2, l'esecuzione dei calcoli di cella ha come prerequisiti la conoscenza della esatta geometria della cella stessa e la disponibilità di accurate librerie di dati relativi alle sezioni d'urto dei materiali coinvolti. Il calcolo viene eseguito ottenendo, dapprima, l'andamento spazio-energetico dettagliato del flusso nella cella in corrispondenza ai valori assegnati delle composizioni e dei parametri fisici. In questa fase vengono generalmente utilizzati metodi di calcolo dettagliati basati sull'equazione del trasporto, sebbene sia anche possibile, come vedremo, applicare teorie elementari che permettano di ottenere indicazioni di massima. Il numero di gruppi energetici considerati può essere anche relativamente elevato (ad esempio, 100); in questo modo è possibile tenere conto in modo adeguato delle peculiarità dell'andamento delle sezioni d'urto in funzione dell'energia.



Figura 2 – Schema logico dei calcoli di cella

Una volta procurato l'andamento dettagliato del flusso neutronico, è possibile calcolare le costanti di cella omogeneizzate a pochi gruppi energetici (generalmente due o tre), facendo uso delle formule usuali che consentono di preservare i tassi di reazione (v. Fisica del Reattore). Queste costanti costituiscono la base per il calcolo della distribuzione spazio-temporale del flusso neutronico sull'intero reattore, che viene generalmente eseguito in diffusione.

Coerentemente con quanto già detto in proposito, i metodi a disposizione per i calcoli di cella si distinguono in due grandi categorie:

- metodi elementari: essi possono essere analitici o semi-analitici;
- *metodi numerici*: implementati in codici di calcolo e che prevedono la discretizzazione energetica.

In questo capitolo ci si occuperà dei metodi elementari e numerici per risolvere i problemi legati allo spettro termico e per il calcolo delle costanti epitermiche e veloci, allo scopo di mostrarne potenzialità e limitazioni.

2.2 Metodi elementari

2.2.1 Calcolo dei fattori di cella in campo termico ed epitermico

a) Dati iniziali

Come accennato al paragrafo precedente, il punto di partenza per i calcoli di cella è costituito dall'insieme dei dati relativi alla composizione delle varie regioni della cella e alla loro geometria.

In particolare, per quanto riguarda la composizione è necessario conoscere le densità atomiche (in $at/cm^3 \times 10^{-24}$) dei vari isotopi fissili (N^{235} e N^{238} per l'Uranio, N^{239} , N^{240} e N^{241} per il Plutonio), dei veleni saturabili e non saturabili (N^{Xe} , N^{Sm} e N^{pp}), dell'incamiciatura (N^{Zr}) e del refrigerante-moderatore (N^{H_2O}).

Per una cella cilindricizzata, i dati geometrici riguardano principalmente il raggio delle "pellet" di combustibile (r_0) e il raggio esterno della zona del refrigerante-moderatore (r_1) . Quando sia necessario, si possono considerare inoltre il raggio esterno dell'incamiciatura (r_2) e il raggio interno del moderatore (r_3) , che è necessario specificare se esiste un gap tra moderatore e camicia (altrimenti si pone $r_3 = r_2 \cong r_0$). Per un reticolo quadrato ed una cella cilindricizzata alla Wigner-Seitz, il raggio esterno della zona refrigerante-moderatore, r_1 , è legato al passo, h, tramite la relazione:

$$r_1 = \frac{h}{\sqrt{\pi}}$$

La libreria di sezioni d'urto microscopiche deve innanzitutto fornire i valori delle sezioni di assorbimento in corrispondenza alla velocità di 2200 m/s. Per esempio, si avrà:

$\sigma_a^{235}(2200) = 681 \ b$	$\sigma_a^{238}(2200) = 2.73 \ b$	$\sigma_a^{239}(2200) = 1011 \ b$
$\sigma_a^{240}(2200) = 286 \ b$	$\sigma_a^{241}(2200) = 1377 \ b$	$\sigma_a^{Xe}(2200) = 2.65 \times 10^6 b$
$\sigma_a^{Sm}(2200) = 4.10 \times 10^4 b$	$\sigma_a^{pp}(2200) \approx 100 \ b$	$\sigma_a^{H_2O}(2200) = 0.65 \ b$

Saranno inoltre assegnati polinomi interpolatori che permettano il calcolo dei fattori g di Westcott (¹). Generalmente, tali polinomi hanno la forma:

$$g_a^x(T) = g_{a0}^x + g_{a1}^x T + g_{a2}^x T^2 + g_{a3}^x T^3 + g_{a4}^x T^4$$

Dovranno essere disponibili anche i valori delle sezioni microscopiche di scattering per i vari materiali e di quelle di fissione. In particolare, si avrà:

$$\sigma_f^{235}(2200) = 582 \ b \qquad \sigma_f^{239}(2200) = 743 \ b \qquad \sigma_f^{241}(2200) = 1009 \ b$$
$$g_f^x(T) = g_{f0}^x + g_{f1}^x T + g_{f2}^x T^2 + g_{f3}^x T^3 + g_{f4}^x T^4$$

Si dovranno quindi calcolare i volumi per unità di altezza (1 cm) delle varie regioni e, in particolare, il volume V_0 del combustibile, il volume V_1 del refrigerante moderatore, il volume V_2 della camicia.

b) Calcolo di T^{eff} e delle sezioni medie termiche nel moderatore

Ecco un semplice metodo approssimato per i calcoli relativi ai neutroni termici. Si assume dapprima che la temperatura efficace dei neutroni (²) nel moderatore sia uguale a quella fisica:

$$T_1^{eff} = T_1$$

$$\overline{\sigma}(T) = g(T) \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sqrt{\frac{293.6}{T}} \sigma(2200)$$

$$T^{eff} = T \left[1 + 0.91A \frac{\Sigma_a}{\Sigma_s} \right]$$

in cui A è il numero di massa del nuclide moderante e gli altri simboli sono noti od ovvi.

 $^(^{1})$ Come si ricorderà dal Corso di Fisica del Reattore, i fattori di Westcott permettono di calcolare in modo semplice la sezione microscopica mediata sullo spettro maxwelliano in funzione della temperatura del mezzo anche per nuclidi che seguano solo approssimativamente la legge dell'assorbimento 1/v tramite una formulazione del tipo:

Ovviamente, per un nuclide che segua esattamente la legge 1/v risulta $g(T) \equiv 1$.

^{(&}lt;sup>2</sup>) Come si ricorderà dal Corso di Fisica del Reattore, la *temperatura efficace dei neutroni* è quella temperatura che utilizzata nella formula dello spettro maxwelliano permette di tenere conto in modo approssimato dell'indurimento dello stesso a causa degli assorbimenti alle basse energie. Una formula per la sua determinazione è dovuta a Coveyou et al.

Si calcolano, quindi, le sezioni d'urto macroscopiche di assorbimento nel combustibile e nel moderatore. Si ha:

$$\begin{split} \dot{\Sigma}_{a0}(T_{1}) &= \left[g_{a}^{235}(T_{1}) N^{235} \sigma_{a}^{235}(2200) + g_{a}^{238}(T_{1}) N^{238} \sigma_{a}^{238}(2200) + g_{a}^{239}(T_{1}) N^{239} \sigma_{a}^{239}(2200) \right. \\ &+ g_{a}^{240}(T_{1}) N^{240} \sigma_{a}^{240}(2200) + g_{a}^{241}(T_{1}) N^{241} \sigma_{a}^{241}(2200) + g_{a}^{Xe}(T_{1}) N^{Xe} \sigma_{a}^{Xe}(2200) \\ &+ g_{a}^{Sm}(T_{1}) N^{Sm} \sigma_{a}^{Sm}(2200) + N^{pp} \sigma_{a}^{pp}(2200) \right] \sqrt{\frac{293.6}{T_{1}}} \end{split}$$

e

$$\dot{\Sigma}_{a1}(T_1) = N^{H_2 O} \sigma_a^{H_2 O} (2200) \sqrt{\frac{293.6}{T_1}} \quad (^3)$$

Inoltre, facendo uso dell'*approssimazione razionale di Wigner* per scattering multiplo (v. oltre), si calcola il rapporto tra i flussi medi nel combustibile e nel moderatore per mezzo della relazione:

$$\frac{\overline{\phi}_0}{\overline{\phi}_1} \cong \frac{1}{1 + 2r_0 \overline{\Sigma}_{a0}} \qquad \text{con} \qquad \overline{\Sigma}_{a0} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \dot{\Sigma}_{a0}(T_1)$$

Una prima omogeneizzazione porta a definire la seguente sezione d'urto di assorbimento

$$\dot{\boldsymbol{\Sigma}}_{a} \cong \left[\dot{\boldsymbol{\Sigma}}_{a1}(T_{1}) + \frac{V_{0}\overline{\boldsymbol{\varphi}}_{0}}{V_{1}\overline{\boldsymbol{\varphi}}_{1}}\dot{\boldsymbol{\Sigma}}_{a0}(T_{1})\right]$$

che verrà utilizzata nella formula di Coveyou et al.. Per la sua applicazione, però, è anche necessario conoscere il valore della sezione macroscopica di scattering del moderatore, nonché la sua massa *A*. Per l'acqua, la presenza del legame chimico e della agitazione termica rendono le cose più complicate.

Si possono adottare le seguenti approssimazioni:

• per la sezione d'urto macroscopica dell'idrogeno, si pone:

$$\sigma_s^H(T_1) = 20.4 + 61.2 \exp\left(-0.77 \frac{T_1}{293.6}\right)$$

^{(&}lt;sup>3</sup>) Si noti che in queste formule, per ora, non è stato introdotto il fattore $\frac{\sqrt{\pi}}{2}$.

$$\Sigma_{s}^{H}(T_{1}) = 2N^{H_{2}O}\sigma_{s}^{H}(T_{1}) \qquad \qquad N^{H_{2}O} = \frac{\rho^{H_{2}O}}{\rho_{rif}^{H_{2}O}}N_{rif}^{H_{2}O}$$

• per il numero di massa dell'idrogeno si adotta la ricetta di Radkowsky

$$A^{H} = A_{app}^{H} = \frac{1}{\sqrt{\frac{81.6}{\sigma_{s}^{H}(T_{1})} - 1}}$$

La *formula di Coveyou et al*. ci permette allora di stimare la temperatura efficace

$$T_1^{eff} = T_1 \left[1 + 0.91 A_{app}^H \frac{\dot{\Sigma}_a}{\Sigma_s^H(T_1)} \right]$$

Si ottiene, inoltre:

$$\Sigma_{tr,1}(T_1^{eff}) = \frac{\rho^{H_2O}}{\rho_{rif}^{H_2O}} \Sigma_{tr,rif}^{H_2O}(296.3) \left(\frac{296.3}{T_1^{eff}}\right)^{0.47} , \qquad \Sigma_{tr,rif}^{H_2O}(296.3) = 2.222 \ cm^{-1}$$

che servirà per calcolare il coefficiente di diffusione secondo la relazione

$$D_1 = \frac{1}{3\Sigma_{tr,1}}$$

Si ha infine:

$$\Sigma_{s1}(T_1^{eff}) = N^{H_2O} \Big[2\sigma_s^H(T_1^{eff}) + \sigma_s^O \Big]$$

in cui per la sezione d'urto microscopica dell'idrogeno si adotta nuovamente la formula

$$\sigma_s^H(T_1^{eff}) = 20.4 + 61.2 \, e^{-0.77 \frac{T_1^{eff}}{293.6}}$$

Assumendo che nell'incamiciatura la temperatura dei neutroni sia uguale a quella nel moderatore si ha:

$$\overline{\Sigma}_{a1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} N^{H_2 O} \sigma_a^{H_2 O} (2200) \sqrt{\frac{293.6}{T_1^{eff}}} \quad \overline{\Sigma}_{a2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} N^{Zr} \sigma_a^{Zr} (2200) \sqrt{\frac{293.6}{T_1^{eff}}}$$

Nota la temperatura efficace nel moderatore è possibile calcolare la corrispondente velocità media maxwelliana dei neutroni

$$\overline{\nu}_{1} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \nu^{(0)} \left(\frac{T_{1}^{eff}}{T^{(0)}} \right)^{1/2} \quad (^{4})$$

in cui

$$v^{(0)} = 2200 \ m/s$$
 e $T^{(0)} = 293.6 \ K$

Lo spettro maxwelliano nel moderatore è quindi dato da

$$\phi_1(E) = \frac{E}{\left(kT_1^{eff}\right)^2} e^{-E/kT_1^{eff}}$$

c) Calcolo di T^{eff} e delle sezioni medie termiche nel combustibile

L'andamento energetico del flusso nel combustibile può essere stimato tramite una formula analoga a quella dell'approssimazione di Wigner, ma con dipendenza dall'energia (v. Par. 2.2.3)

$$\phi_0(E) = \frac{1}{1 + 2r_0 \Sigma_{a0}(E)} \phi_1(E) \tag{1}$$

Facendo uso della precedente è quindi possibile calcolare la velocità media dei neutroni nel combustibile tramite la relazione

$$\bar{v}_{0} = \frac{\int_{0}^{\infty} v \rho_{0}(E) dE}{\int_{0}^{\infty} \rho_{0}(E) dE} = \frac{\int_{0}^{\infty} \phi_{0}(E) dE}{\int_{0}^{\infty} \frac{1}{v} \phi_{0}(E) dE} = \bar{v}_{1} h(s)$$
(2)

in cui si è posto

$$h(s) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\int_{0}^{\infty} \frac{\varepsilon^{3/2} e^{-\varepsilon}}{\varepsilon^{1/2} + s} d\varepsilon}{\int_{0}^{\infty} \frac{\varepsilon e^{-\varepsilon}}{\varepsilon^{1/2} + s} d\varepsilon} \qquad s = 2r_{0} \dot{\Sigma}_{a0} \left(T_{1}^{eff}\right) \qquad \varepsilon = \frac{E}{kT_{1}^{eff}}$$
$$\dot{\Sigma}_{a0} \left(T_{1}^{eff}\right) = \left[g_{a}^{235} \left(T_{1}^{eff}\right) N^{235} \sigma_{a}^{235} (2200) + g_{a}^{238} \left(T_{1}^{eff}\right) N^{238} \sigma_{a}^{238} (2200) + g_{a}^{239} \left(T_{1}^{eff}\right) N^{239} \sigma_{a}^{239} (2200) + g_{a}^{240} \left(T_{1}^{eff}\right) N^{240} \sigma_{a}^{240} (2200) + g_{a}^{241} \left(T_{1}^{eff}\right) N^{241} \sigma_{a}^{241} (2200) + g_{a}^{Xe} \left(T_{1}^{eff}\right) N^{Xe} \sigma_{a}^{Xe} (2200)$$

$$\overline{v} = \frac{\int_{0}^{\infty} v \,\rho(v) \,dv}{\int_{0}^{\infty} \rho(v) \,dv} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \,v_{T} \qquad \text{e che} \qquad \frac{v_{T}}{v^{(0)}} = \sqrt{\frac{2kT}{m}} \,\left/ \sqrt{\frac{2kT^{(0)}}{m}} = \sqrt{\frac{T}{T^{(0)}}} \right.$$

^{(&}lt;sup>4</sup>) Si ricordi che per uno spettro maxwelliano la velocità media, \overline{v} , e quella più probabile, $v_T = \sqrt{2kT/m}$ sono legate dalla relazione

+
$$g_a^{Sm}(T_1^{eff})N^{Sm}\sigma_a^{Sm}(2200) + N^{pp}\sigma_a^{pp}(2200)]\sqrt{\frac{293.6}{T_1^{eff}}}$$

La funzione h(s) viene quindi approssimata con la relazione

$$h(s) = \frac{1 + 0.5186 x}{1 + 0.2769 x} \qquad \text{con} \qquad x = \frac{s}{1 + s}$$

Quindi, per la temperatura efficace dei neutroni nel combustibile si ha:

$$T_0^{eff} = \left(\frac{\overline{v}_0}{\overline{v}_1}\right)^2 T_1^{eff} = h^2(s) T_1^{eff}$$

Nota la temperatura efficace dei neutroni nel combustibile, è possibile calcolare la relativa sezione d'urto d'assorbimento

$$\begin{split} \overline{\Sigma}_{a0}(T_{0}^{eff}) &= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Big[g_{a}^{235}(T_{0}^{eff}) N^{235} \sigma_{a}^{235}(2200) + g_{a}^{238}(T_{0}^{eff}) N^{238} \sigma_{a}^{238}(2200) + g_{a}^{239}(T_{0}^{eff}) N^{239} \sigma_{a}^{239}(2200) \\ g_{a}^{240}(T_{0}^{eff}) N^{240} \sigma_{a}^{240}(2200) + g_{a}^{241}(T_{0}^{eff}) N^{241} \sigma_{a}^{241}(2200) + g_{a}^{Xe}(T_{0}^{eff}) N^{Xe} \sigma_{a}^{Xe}(2200) \\ &+ g_{a}^{Sm}(T_{0}^{eff}) N^{Sm} \sigma_{a}^{Sm}(2200) + g_{a}^{pp}(T_{0}^{eff}) N^{pp} \sigma_{a}^{pp}(2200) \Big] \sqrt{\frac{293.6}{T_{0}^{eff}}} \end{split}$$

d) Calcolo di f ed η col metodo ABH

L'omogeneizzazione delle sezioni d'urto sulla cella, necessaria per il calcolo di f ed η , richiede di stimare i rapporti tra i flussi medi nelle varie regioni della cella.

Il *metodo di Amouyal, Benoist, Horowitz (ABH),* di cui parleremo con maggiore dettaglio in seguito, permette di ottenere tali stime tramite formule che coinvolgono la *probabilità di fuga al primo volo* per un neutrone generato nel combustibile, $P_0^{(0)}$. Queste formule sono:

$$\frac{\phi(r_0)}{\overline{\phi}_0} = 1 + \frac{\overline{\Sigma}_{a0}}{\Sigma_{t0}} \left(\frac{1 - P_0^{(0)}}{P_0^{(0)}} - r_0 \Sigma_{t0} \right) \left[1 + \alpha \frac{\Sigma_{s0}}{\Sigma_{t0}} + \beta \left(\frac{\Sigma_{s0}}{\Sigma_{t0}} \right)^2 \right]$$
$$\frac{\phi(r_3) - \phi(r_0)}{\overline{\phi}_0} = r_0 \overline{\Sigma}_{a0} \left(1 - \frac{r_0}{r_3} \right)$$
$$\frac{\overline{\phi}_1 - \phi(r_3)}{\overline{\phi}_0} = \frac{\overline{\Sigma}_{a0} V_0}{\overline{\Sigma}_{a1} V_1} \left\{ \left(\frac{3}{2} d_0 \Sigma_{tr,1} - 1 \right) \frac{r_1^2 - r_3^2}{r_3} \overline{\Sigma}_{a1} + \frac{\kappa_1^2 r_1^2}{2} \left[\frac{(r_1/r_3)^2}{(r_1/r_3)^2 - 1} \ln \frac{r_1}{r_3} - \frac{3}{4} + \frac{1}{4(r_1/r_3)^2} \right] \right\}$$

11

Il rapporto tra i flussi medi nel moderatore e nel combustibile è quindi ottenuto come somma dei tre rapporti

$$\frac{\overline{\phi_1}}{\overline{\phi_0}} = \frac{\overline{\phi_1} - \phi(r_3)}{\overline{\phi_0}} + \frac{\phi(r_3) - \phi(r_0)}{\overline{\phi_0}} + \frac{\phi(r_0)}{\overline{\phi_0}}$$

Nelle formule precedenti si è posto

$$\kappa_{1}^{2} = \frac{1}{L_{1}^{2}} = \frac{\Sigma_{a1}}{D_{1}} = 3\Sigma_{tr,1}\overline{\Sigma}_{a1} \qquad \Sigma_{t0} = \overline{\Sigma}_{a0} + \Sigma_{s0} \qquad x = r_{0}\Sigma_{t0}$$
$$\alpha = 0.071 \ x \ (1 - 0.098 \ x) \qquad \beta = 0.02 + 0.017(2x - 1)e^{-x}$$

 $d_{0} = \begin{pmatrix} lunghezza \ estrapolata \\ al \ bordo \ del \ canale \end{pmatrix} = \frac{1}{\Sigma_{tr,1}} \frac{0.7104 \ y^{2} + 0.6939 \ y + 0.01147}{y^{2} + 0.5416 \ y + 0.00860} \qquad y = r_{3}\Sigma_{tr,1} \qquad (^{5})$

Tra le varie formule disponibili per il calcolo della probabilità di fuga al primo volo, si può scegliere quella dovuta a Sauer

$$P_0^{(0)} \cong \frac{1}{z} \left[1 - \frac{1}{\left(1 + z/4.58\right)^{4.58}} \right] \qquad \text{con} \qquad z = 2r_0 \Sigma_{t0}$$

Tuttavia, in alcuni casi anche la pur accurata formula di Sauer non è sufficiente ed occorre far riferimento alle formule esatte, riportate più oltre (v. Tabella 1).

Noti i rapporti tra i flussi, il calcolo di *f* diventa immediato:

$$f = \frac{\overline{\Sigma}_{a0}V_0\overline{\phi_0}}{\overline{\Sigma}_{a0}V_0\overline{\phi_0} + \overline{\Sigma}_{a1}V_1\overline{\phi_1} + \overline{\Sigma}_{a2}V_2\phi(r_0)} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{1}{f} = 1 + \frac{\overline{\Sigma}_{a1}V_1}{\overline{\Sigma}_{a0}V_0}\frac{\overline{\phi_1}}{\overline{\phi_0}} + \frac{\overline{\Sigma}_{a2}V_2}{\overline{\Sigma}_{a0}V_0}\frac{\phi(r_0)}{\overline{\phi_0}}$$

Le sezioni omogeneizzate sulla cella sono quindi date da:

$$\begin{split} \widetilde{\Sigma}_{a}^{T} &= \frac{\overline{\Sigma}_{a0}V_{0}\overline{\phi_{0}} + \overline{\Sigma}_{a1}V_{1}\overline{\phi_{1}} + \overline{\Sigma}_{a2}V_{2}\phi(r_{0})}{V_{0}\overline{\phi_{0}} + V_{1}\overline{\phi_{1}} + V_{2}\phi(r_{0})} = \frac{\overline{\Sigma}_{a0} + \overline{\Sigma}_{a1}\frac{V_{1}\overline{\phi_{1}}}{V_{0}\overline{\phi_{0}}} + \overline{\Sigma}_{a2}\frac{V_{2}\phi(r_{0})}{V_{0}\overline{\phi_{0}}}}{1 + \frac{V_{1}\overline{\phi_{1}}}{V_{0}\overline{\phi_{0}}} + \frac{V_{2}\phi(r_{0})}{V_{0}\overline{\phi_{0}}}} \\ \widetilde{\Sigma}_{a0}^{T} &= \frac{\overline{\Sigma}_{a0}V_{0}\overline{\phi_{0}}}{V_{0}\overline{\phi_{0}} + V_{1}\overline{\phi_{1}} + V_{2}\phi(r_{0})} = \frac{\overline{\Sigma}_{a0}}{1 + \frac{V_{1}\overline{\phi_{1}}}{V_{0}\overline{\phi_{0}}} + \frac{V_{2}\phi(r_{0})}{V_{0}\overline{\phi_{0}}}} \end{split}$$

Si ha anche

(⁵) Si ricordi che se non c'è gap al bordo del canale risulta $r_3 = r_2$ 12

$$\widetilde{\Sigma}_{tr}^{T} = \frac{\overline{\Sigma}_{s0}V_{0}\overline{\phi_{0}} + \overline{\Sigma}_{tr,1}V_{1}\overline{\phi_{1}} + \overline{\Sigma}_{s2}V_{2}\phi(r_{0})}{V_{0}\overline{\phi_{0}} + V_{1}\overline{\phi_{1}} + V_{2}\phi(r_{0})} = \frac{\overline{\Sigma}_{s0} + \overline{\Sigma}_{tr,1}\frac{V_{1}\overline{\phi_{1}}}{V_{0}\overline{\phi_{0}}} + \overline{\Sigma}_{s2}\frac{V_{2}\phi(r_{0})}{V_{0}\overline{\phi_{0}}}}{1 + \frac{V_{1}\overline{\phi_{1}}}{V_{0}\overline{\phi_{0}}} + \frac{V_{2}\phi(r_{0})}{V_{0}\overline{\phi_{0}}}} \qquad \widetilde{D}^{T} = \frac{1}{3\widetilde{\Sigma}_{tr}}$$

E' possibile infine calcolare η e il valore omogeneizzato del prodotto $v\Sigma_{f}$, procurandosi innanzitutto

$$\nu \overline{\Sigma}_{f0} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[\nu^{235} g_f^{235} (T_0^{eff}) N^{235} \sigma^{235} (2200) + \nu^{241} g_f^{241} (T_0^{eff}) N^{241} \sigma^{241} (2200) \right] \sqrt{\frac{293.6}{T_0^{eff}}}$$

Si ha perciò:

$$\eta = \frac{\nu \overline{\Sigma}_{f0}}{\overline{\Sigma}_{a0}} \qquad \qquad \nu \widetilde{\Sigma}_{f}^{T} = \frac{\nu \overline{\Sigma}_{f0}}{1 + \frac{V_{1}\overline{\phi_{1}}}{V_{0}\overline{\phi_{0}}} + \frac{V_{2}\phi(r_{0})}{V_{0}\overline{\phi_{0}}}}$$

e) Calcolo del fattore p

Per un reticolo (cioè, nel caso eterogeneo) si ha:

$$p = \exp\left\{-\frac{N_0 V_0}{\xi \Sigma_s V} I(T_0)\right\} = \exp\left\{-\frac{N^{238} V_0}{\left(\xi \Sigma_s\right)_{ep}^{UO_2} V_0 + \left(\xi \Sigma_s\right)_{ep}^{H_2 O} V_1} I^{238}(T_0)\right\}$$
(⁶)

Per applicare questa formula è innanzitutto necessario conoscere le sezioni d'urto di scattering in campo epitermico. Dalla libreria si avrà:

$$\sigma_{s,ep}^{H} = 20.3 \ b \qquad \qquad \sigma_{s,ep}^{O} = 4.2 \ b$$

Essendo

$$\xi = 1 + \frac{\alpha}{1 - \alpha} \ln \alpha$$
 $\alpha = \left(\frac{A - 1}{A + 1}\right)^2$

per l'idrogeno risulta

$$\alpha = 0$$
 e $\lim_{\alpha \to 0} \xi = \xi^H = 1$

 $[\]binom{6}{0}$ Si noti che in questa formula compare il valore medio della temperatura fisica del combustibile, T_0 , (in generale, diversa da T_0^{eff}) visto che l'integrale di risonanza dipende direttamente da essa.

mentre per l'ossigeno è

$$\alpha = \left(\frac{15}{17}\right)^2 \cong 0.7785$$
 e $\xi^o = 0.120$

e, infine, per l' U^{238}

$$\alpha = \left(\frac{237}{239}\right)^2 \cong 0.983$$
 e $\xi^U = 0.0084$

Si ha, quindi:

$$\Sigma_{t1} \cong \Sigma_{s1} = N^{H_2O} \left(2\sigma_{s,ep}^H + \sigma_{s,ep}^O \right) = 44.8 N^{H_2O}$$
$$\left(\xi \Sigma_s \right)_{ep}^{H_2O} = N^{H_2O} \left(2\xi^H \sigma_{s,ep}^H + \xi^O \sigma_{s,ep}^O \right) = 41.1 N^{H_2O}$$
$$\left(\xi \Sigma_s \right)_{ep}^{UO_2} = N^{238} \left(\xi^U \sigma_{s,ep}^U + 2\xi^O \sigma_{s,ep}^O \right) \cong 2N^{238} \xi^O \sigma_{s,ep}^O = 1.008 N^{UO_2}$$

Si deve osservare che il valore di N^{H_2O} che compare nelle precedenti relazioni deve essere valutato in corrispondenza della effettiva densità del moderatore-refrigerante. Mentre per il combustibile, che è solido, le variazioni di temperatura non comportano generalmente sostanziali variazioni dimensionali, per il refrigerante non è così, specialmente quando intervengano fenomeni di cambiamento di fase. Si ha quindi:

$$N^{H_2O} = \frac{\rho^{H_2O}}{\rho^{H_2O}_{rif}} N^{H_2O}_{rif}$$

Per l'integrale di risonanza si adotta una formula che lo fa dipendere dalla radice quadrata della temperatura del combustibile:

$$I^{238}(T_0) = I^{238}(300 K) \left\{ 1 + \left[0.0061 + 0.0047 \frac{2(1-C)}{r_0 \rho^{UO_2}} \right] \left(\sqrt{T_0} - \sqrt{300} \right) \right\}$$

in cui

$$I(300 K) = 4.45 + 25.6 \sqrt{\frac{2}{r_0 \rho^{UO_2}} (1 - C)}$$

e C è il *coefficiente di Dancoff-Ginzburg* (v. Fisica del Reattore), che tiene conto del fatto che in un reticolo le barre si schermano a vicenda, diminuendo così l'assorbimento di risonanza rispetto a quello che si avrebbe per barra isolata. Per esso si può adottare la seguente formula di Sauer

$$C = 1 - \frac{e^{-\tau \Sigma_{t_1} \bar{l}_1}}{1 + (1 - \tau) \Sigma_{t_1} \bar{l}_1}$$

in cui, nel caso di reticoli quadrati,

$$\tau = \frac{0.886\sqrt{1 + V_1/V_0} - 1}{V_1/V_0} - 0.08 \qquad \qquad \bar{l}_1 = \frac{4V_1}{S_0} \qquad \qquad S_0 = 2 \pi r_0$$

(sono disponibili altre formule approssimate) oppure si può ricorrere al calcolo diretto del coefficiente relativo a ciascuna coppia di barre adiacenti, appoggiandosi alla tabulazione Dancoff-Ginzburg (v. Rapporto ANL 5800), sommando poi tutti i coefficienti parziali.

f) Calcolo di ε e delle costanti veloci-epitermiche

Dal testo di Lamarsh (Lamarsh, 1966, p.239) si ha:

$$\varepsilon \simeq \frac{1 + 0.690 \left(N^{238} / N^{H_2 O} \right)}{1 + 0.563 \left(N^{238} / N^{H_2 O} \right)}$$

In alternativa a questa formula pratica, valida per gli LWR, si può fare appello alla teoria di Spinrad (v. Fisica del Reattore).

Per le sezioni macroscopiche relative al moderatore gruppo energetico veloce, si ha:

$$\Sigma_{s,0}^{F} = N^{238} \left(\sigma_{s}^{238,F} + 2\sigma_{s}^{O,F} \right) = N^{238} (9.6 + 2 \times 4.0) = 17.6 N^{238}$$
$$\Sigma_{s,1}^{F \to T} = \frac{\rho^{H_{2}O}}{\rho_{rf}^{H_{2}O}} \Sigma_{s1,rif}^{F \to T} \qquad \Sigma_{s1,rif}^{F \to T} = 0.0419 \ cm^{-1}$$
$$\Sigma_{s,2}^{F} \cong 0$$

$$\Sigma_{tr,1}^{F} = \frac{\rho_{rif}^{H_2O}}{\rho_{rif}^{H_2O}} \Sigma_{tr1,rif}^{F} \qquad \Sigma_{tr1,rif}^{F} = 0.2950 \ cm^{-1}$$

Le costanti omogeneizzate sono date da

$$\widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T} = \frac{\Sigma_{s,1}^{F \to T} \frac{V_{1}}{V_{0}}}{1 + \frac{V_{1}}{V_{0}} + \frac{V_{2}}{V_{0}}} \qquad \qquad \widetilde{\Sigma}_{r}^{F} = \frac{\Sigma_{s,0}^{F} + \Sigma_{r,1}^{F} \frac{V_{1}}{V_{0}} + \Sigma_{s,2}^{F} \frac{V_{2}}{V_{0}}}{1 + \frac{V_{1}}{V_{0}} + \frac{V_{2}}{V_{0}}} \qquad \qquad \widetilde{D}^{F} = \frac{1}{3\widetilde{\Sigma}_{rr}^{F}}$$

in cui si è trascurato il contributo al rallentamento dovuto al combustibile e all'incamiciatura, e

$$\widetilde{\Sigma}_{a}^{F} = \frac{1-p}{p} \widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T} \qquad \qquad \nu \widetilde{\Sigma}_{f}^{F} = (\varepsilon - 1) \nu \widetilde{\Sigma}_{f}^{T} \frac{p \widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T}}{\widetilde{\Sigma}_{a}^{T}}$$

Queste due ultime relazioni possono essere ottenute tramite le seguenti considerazioni. In un reattore infinito, detta S_f^F la sorgente di fissione nel gruppo veloce, dovrà risultare, in stazionario,

$$S_f^F = \left(\widetilde{\Sigma}_a^F + \widetilde{\Sigma}_s^{F \to T}\right) \phi^F$$

formula che esprime che i neutroni di fissione, generati tutti nel gruppo veloce, sono in parte assorbiti (si intende, ovviamente, per assorbimento epitermico), in parte rimossi dal gruppo veloce per scattering. Perciò, per la definizione di probabilità di fuga alle risonanze si ha

$$p = \frac{\widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T} \phi^{F}}{S_{f}^{F}} = \frac{\widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T} \phi^{F}}{\widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T} \phi^{F} + \widetilde{\Sigma}_{a}^{F} \phi^{F}}$$

da cui la formula per $\tilde{\Sigma}_{a}^{F}$. Inoltre, considerando un bilancio stazionario a due gruppi per un reattore infinito, si ha:

$$\begin{cases} -\widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T} \phi^{F} + v \widetilde{\Sigma}_{f}^{F} \phi^{F} + v \widetilde{\Sigma}_{f}^{T} \phi^{T} = 0 \\ -\widetilde{\Sigma}_{a}^{T} \phi^{T} + p \widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T} \phi^{F} = 0 \end{cases}$$
⁽⁷⁾

Dalla seconda equazione, si ottiene

$$\frac{\phi^{F}}{\phi^{T}} = \frac{\widetilde{\Sigma}_{a}^{T}}{p\widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T}} \qquad ;$$

d'altra parte, per definizione di fattore di moltiplicazione veloce, è

$$\varepsilon = \frac{\nu \widetilde{\Sigma}_{f}^{F} \phi^{F} + \nu \widetilde{\Sigma}_{f}^{T} \phi^{T}}{\nu \widetilde{\Sigma}_{f}^{T} \phi^{T}}$$

perciò

$$\varepsilon - 1 = \frac{v \widetilde{\Sigma}_{f}^{F} \phi^{F}}{v \widetilde{\Sigma}_{f}^{T} \phi^{T}} = \frac{v \widetilde{\Sigma}_{f}^{F}}{v \widetilde{\Sigma}_{f}^{T}} \frac{\widetilde{\Sigma}_{a}^{T}}{p \widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T}}$$

 $^(^{7})$ Si noti che in questo bilancio si è omesso il termine di assorbimento del gruppo veloce, preferendo far intervenire direttamente il fattore p nel termine di sorgente di rallentamento per il gruppo termico.

da cui la relazione per $\nu \tilde{\Sigma}_{f}^{F}$.

A questo punto siamo in possesso di tutte le costanti necessarie per impostare un calcolo a due gruppi sulla cella omogeneizzata. Le equazioni possono essere scritte in modi diversi, a seconda che si faccia uso esplicitamente di p e di ε oppure si utilizzino solo le costanti omogeneizzate di cella:

$$\begin{cases} \widetilde{D}^{F} \nabla^{2} \phi^{F} - \left(\widetilde{\Sigma}_{a}^{F} + \widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T}\right) \phi^{F} + \frac{1}{k} \left(\nu \widetilde{\Sigma}_{f}^{T} \phi^{T} + \nu \widetilde{\Sigma}_{f}^{F} \phi^{F} \right) = 0 \\ \widetilde{D}^{T} \nabla^{2} \phi^{T} - \widetilde{\Sigma}_{a}^{T} \phi^{T} + \widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T} \phi^{F} = 0 \end{cases}$$

oppure

$$\begin{cases} \widetilde{D}^{F} \nabla^{2} \phi^{F} - \widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T} \phi^{F} + \frac{1}{k} \varepsilon v \widetilde{\Sigma}_{f}^{T} \phi^{T} = 0\\ \widetilde{D}^{T} \nabla^{2} \phi^{T} - \widetilde{\Sigma}_{a}^{T} \phi^{T} + p \widetilde{\Sigma}_{s}^{F \to T} \phi^{F} = 0 \end{cases}$$

Si può notare che in assenza di fughe, considerando, ad esempio, il secondo sistema di equazioni, si ha:

$$\frac{1}{k} \varepsilon p \, \nu \widetilde{\Sigma}_{f}^{T} \phi^{T} = \widetilde{\Sigma}_{a}^{T} \phi^{T} \implies \qquad k = k_{\infty} = \varepsilon p \, \frac{\nu \widetilde{\Sigma}_{f}^{T}}{\widetilde{\Sigma}_{a0}^{T}} \frac{\widetilde{\Sigma}_{a0}^{T}}{\widetilde{\Sigma}_{a}^{T}} = \varepsilon p \, \eta f$$

2.2.2 Calcolo monocinetico di f con il metodo ABH

a) Assorbimento neutronico nella cella

Il metodo di Amouyal, Benoist e Horowitz (ABH) permette il calcolo del fattore di utilizzazione termica in modo più accurato della teoria della diffusione, anche se risulta di poco più complicato.

Si consideri una cella cilindrica costituita, per semplicità, dalle sole regioni del combustibile e del moderatore (v. Figura 3), delimitate da circonferenze di raggio r_0 ed r_1 , rispettivamente, e sia *S* la superficie che le separa. Al bordo della cella ($r = r_1$) si assume che la corrente netta sia nulla.

Considerato un qualunque punto sulla superficie *S*, si avrà che:

$$J = J \cdot \vec{u_e} = J^+ - J^-$$

Poiché si assume che non vi siano sorgenti di neutroni termici nel volume V_0 , la differenza tra neutroni entranti ed uscenti attraverso la superficie *S* fornirà il numero di neutroni assorbiti nel combustibile. Si ha:

$$\begin{pmatrix} numero \ di \ neutroni \\ assorbiti \ in \ V_0 \ per \ unità \ di \ t \end{pmatrix} = (J^- - J^+)S$$

Si introduce il concetto di *opacità* della regione del combustibile come la probabilità che un neutrone entrante attraverso *S* ha di essere assorbito in V_0 , cioè

$$\Pi_{0} = \frac{neutroni\,assorbiti\,inV_{0}}{neutroni\,entranti\,in\,V_{0}\,attraverso\,S}$$

In modo analogo, definiamo l'opacità del moderatore

$$\Pi_{1} = \frac{neutroni\,assorbiti\,inV_{1}}{neutroni\,entranti\,in\,V_{1}\,attraverso\,S}$$

Risulta, perciò:

$$\begin{pmatrix} numero \ di \ neutroni \\ assorbiti \ in \ V_0 \ per \ unità \ di \ t \end{pmatrix} = J^- S \Pi_0$$

e quindi

$$(J^{-} - J^{+})S = J^{-}S\Pi_{0} \qquad \Rightarrow \qquad J^{+} = (1 - \Pi_{0})J^{-} \qquad (3)$$

D'altra parte, anche nel moderatore si avranno assorbimenti. In questo caso, è utile distinguere tra due categorie di assorbimenti:



Figura 3 - Cella considerata nel metodo ABH

18

<u>1^a categoria</u>: neutroni che nascono e muoiono nel moderatore senza mai entrare nel combustibile; detta P₁ la probabilità che un neutrone nato in V₁ da sorgenti uniformi ed isotrope attraversi almeno una volta la superficie S, si ha:

assorbimenti di 1^a categoria =
$$V_1q_1(1-P_1)$$

in cui q_1 è la sorgente di neutroni (uniforme) in V_1 ;

 <u>2^a categoria</u>: neutroni che, prodotti dalle sorgenti nel moderatore, entrano una o più volte nel combustibile prima di essere assorbiti nel moderatore; facendo uso della definizione di opacità, si ha:

assorbimenti di 2^a categoria = $J^+ S \Pi_1$

Il bilancio complessivo dei neutroni emessi ed assorbiti nella cella, assume perciò la forma:

$$q_1 V_1 = J^- S \Pi_0 + J^+ S \Pi_1 + q_1 V_1 (1 - P_1)$$
(4)

che esprime che i neutroni prodotti dalle sorgenti nel moderatore sono assorbiti in parte nel combustibile e in parte nel moderatore (tramite l'una o l'altra categoria di assorbimenti). Essendo nulla la corrente alla frontiera della cella non si hanno, perciò, termini di fuga.

Tenendo conto della (3), dalla (4) si ottiene:

$$J^{-}S = \frac{q_1 V_1 P_1}{\Pi_0 + (1 - \Pi_0)\Pi_1}$$
(5)

Dalla definizione di fattore di utilizzazione termica si ha:

$$\frac{1}{f} = \frac{neutronichetermalizzano}{neutroniassorbitinelcombustibile} = \frac{q_1 V_1}{J^- S \Pi_0} = \frac{1}{P_1} \left(1 + \frac{1 - \Pi_0}{\Pi_0} \Pi_1 \right)$$
(6)

Perciò, il calcolo di f è ricondotto al calcolo delle opacità Π_0 e Π_1 e della probabilità P_1 (nonché, come vedremo, di P_0).

<u>Osservazione</u>. Allo scopo di semplificare il calcolo delle opacità e delle probabilità, notiamo che in un mezzo infinito ed omogeneo dotato di sorgenti uniformi ed isotrope, il flusso angolare è anch'esso spazialmente uniforme ed angolarmente isotropo:



Figura 4 – Isotropia del flusso angolare alla frontiera di un semispazio con densità di emissione isotropa

$$\phi\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) = \frac{1}{4\pi}\phi = c \, o \, s \, t.$$

Ciò vale anche in corrispondenza alla frontiera di un semispazio (Figura 4) limitatamente alle direzioni uscenti e purché la densità di emissione $\psi = \sum_s \phi + q$ sia in esso uniforme ed isotropa, come conseguenza del fatto che i neutroni che fuoriescono in ogni direzione $\vec{\Omega}$ uscente provengono da zone interne al mezzo con sorgenti uniformi ed isotrope (⁸).

Sulla base di queste considerazioni si conclude che anche nel nostro caso il flusso angolare in direzione entrante nel combustibile è isotropo, dato che la sorgente q_1 è stata ipotizzata uniforme ed isotropa e anche il flusso è abbastanza piatto nel moderatore. Perciò:

$$\phi\left(\vec{r}_{s},\vec{\Omega}\right) = C^{-} \qquad \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_{e} < 0$$

Sebbene non sia possibile a rigore sostenere un'argomentazione analoga nel caso delle direzioni uscenti dal combustibile, in cui $q_0 = 0$ e $\phi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ non è costante, si assume in ogni caso che sia anche:

^{(&}lt;sup>8</sup>) Nei problemi reali le "sorgenti" comprendono sia le sorgenti indipendenti che gli eventi di scattering; poiché vicino alla frontiera il flusso si abbassa, anche la densità di scattering, e quindi la densità di emissione che costituisce la "sorgente" complessiva, non potrà essere costante, se non nel caso di un mezzo puramente assorbente ($\Sigma_s = 0$).

$$\phi\left(\vec{r}_{s},\vec{\Omega}\right)=C^{+}\qquad \quad \vec{\Omega}\cdot\vec{u}_{e}>0$$

Ciò è giustificabile, ai nostri scopi, perché i neutroni uscenti da V_0 sono in numero minore di quelli uscenti dal moderatore e perché l'opacità, in realtà, non è molto sensibile al tipo di distribuzione angolare del flusso.

b) Relazione tra opacità e probabilità di fuga

Con le ipotesi adottate, valgono le relazioni

$$\Pi_{0} = \frac{4V_{0}}{S} \Sigma_{a0} P_{0} \qquad \qquad \Pi_{1} = \frac{4V_{1}}{S} \Sigma_{a1} P_{1}$$
(7)

Dimostreremo solo la prima. A tale scopo si ipotizza che la barra di combustibile sia circondata da un mezzo infinito costituito dallo stesso materiale, con una densità di emissione $q_0 \neq 0$ uniforme ed isotropa ovunque.(⁹)

La situazione è descritta in Figura 5. Data l'uniformità e l'isotropia della densità di emissione risulta che il flusso scalare è ovunque uniforme e il flusso angolare è uniforme ed isotropo

$$\phi(\vec{r}) = \frac{q_0}{\Sigma_{a0}} \qquad \qquad \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r})$$

Per la semicorrente entrante in un qualunque punto della superficie *S* si ha (si ricordi che $d\Omega = sen \theta d\theta d\phi$):

$$J^{-}(\vec{r}_{s}) = \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_{e} < 0} \left| \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_{e} \right| \phi(\vec{r}_{s}, \vec{\Omega}) d\Omega = \frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r}_{s}) \int_{0}^{2\pi} d\phi \int_{\pi/2}^{\pi} \left| \cos \theta \right| \sin \theta \, d\theta$$

e, ponendo

$$\mu = \cos \theta \qquad \Rightarrow \qquad d\mu = -\sin \theta d\theta$$

 $^(^9)$ Non deve stupire il fatto che per dimostrare la relazione tra opacità e probabilità di fuga si passi a considerare una situazione fisica decisamente diversa da quella della cella presa a riferimento per descrivere il metodo ABH. Infatti, le definizioni di Π_0 e P_0 hanno validità del tutto generale e i loro valori dipendono solo dalle caratteristiche geometriche e fisiche della barra di combustibile. In particolare, Π_0 e P_0 non sono affatto influenzati dalle caratteristiche del mezzo esterno.



Figura 5 – Situazione considerata per dimostrare la relazione tra $\Pi_0 e P_0$

si ha

$$J^{-}(\vec{r}_{s}) = \frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r}_{s}) \int_{0}^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{0} |\mu| d\mu = \frac{1}{4} \phi(\vec{r}_{s})$$

e, infine

$$J^{-}\left(\vec{r}_{s}\right) = \frac{q_{0}}{4\Sigma_{a0}} \tag{8}$$

Considerando che la corrente netta attraverso *S* è nulla (come discende dal fatto che il flusso angolare è isotropo, per cui $J^+ = J^- \Rightarrow J = 0$), si conclude che in condizioni stazionarie il numero di neutroni prodotti in V_0 è uguale a quello dei neutroni in esso assorbiti:

$$\begin{pmatrix} neutroni \\ prodotti in V_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} neutroni \\ assorbiti in V_0 \end{pmatrix}$$

Inoltre, i neutroni assorbiti in V_0 sono in parte costituiti da neutroni prodotti in V_0 che vengono assorbiti prima di attraversare la frontiera *S* e in parte da neutroni che entrano attraverso *S* e vengono quindi assorbiti; perciò:

 $\begin{pmatrix} neutroni \\ prodotti in V_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} neutroni prodotti in V_0 e assorbiti \\ prima di uscire attraverso S \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} neutroni entrati attraverso S \\ che vengono assorbiti \end{pmatrix}$ ovvero

$$q_0 V_0 = q_0 V_0 (1 - P_0) + J^- S \Pi_0$$

Combinando la precedente con la (8), si ha quanto si doveva dimostrare

$$\Pi_0 = \frac{4V_0}{S} \Sigma_{a0} P_0$$

Perciò, facendo uso delle (7), la (6) diventa:

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{P_1} \left[1 + \frac{1 - (4V_0/S)\Sigma_{a0}P_0}{(4V_0/S)\Sigma_{a0}P_0} \frac{4V_1}{S}\Sigma_{a1}P_1 \right] = \frac{1}{P_1} + \frac{V_1\Sigma_{a1}}{V_0\Sigma_{a0}} \frac{1}{P_0} - \frac{4V_1}{S}\Sigma_{a1}$$
(9)

e il calcolo di f è quindi ricondotto alla determinazione delle sole probabilità di fuga.

c) Calcolo di P_1

Per la definizione di P_1 come probabilità che un neutrone prodotto in V_1 attraversi la frontiera *S* con V_0 , essa può essere calcolata come il fattore di utilizzazione termica nel caso in cui si assuma che la barra di combustibile sia "nera", cioè infinitamente assorbitiva. In tale caso, infatti, ogni neutrone termico prodotto in V_1 che attraversi la frontiera non ha alcuna possibilità di tornare nel moderatore e viene definitivamente assorbito nel combustibile.

Perciò:

$$P_{1} = \frac{neutroni \ che \ attraversano \ S}{neutroni \ prodotti \ in \ V_{1}} = \frac{neutroni \ assorbiti \ nella \ barra "nera"}{neutroni \ prodotti \ in \ V_{1}} = f_{nero}$$

Per eseguire il calcolo ci si affida alla teoria della diffusione, cercando di rimediare alla sua inaffidabilità in vicinanza delle interfacce per mezzo della solita tecnica di imporre la condizione di annullamento del flusso alla distanza estrapolata all'interno della barra o, meglio ancora, una condizione di estrapolazione imposta proprio alla sua frontiera fisica effettiva (v. Figura 6) $(^{10})$. Si ha:

^{(&}lt;sup>10</sup>) Infatti, la condizione di lunghezza di estrapolazione $\phi_1 - d_0 \frac{d\phi_1}{dr}\Big|_{r_0=0}$ è valida per qualunque valore coppia di valori di r_0 e d_0 , mentre la condizione di annullamento alla distanza estrapolata $\phi(r_0 - d_0)$ ha senso soltanto se $r_0 - d_0 > 0$, cioè se $d_0 < r_0$.



Figura 6 – Calcolo di P_1 in diffusione con barra "nera"

$$\begin{cases} D_{1}\left(\frac{d^{2}\phi_{1}}{dr^{2}}+\frac{1}{r}\frac{d\phi_{1}}{dr}\right)-\Sigma_{a1}\phi_{1}+q_{1}=0\\ \frac{1}{\phi_{1}}\frac{d\phi_{1}}{dr}\Big|_{r=r_{0}}=\frac{1}{d_{0}}\\ \frac{d\phi_{1}}{dr}\Big|_{r=r_{1}}=0 \end{cases}$$

Per la lunghezza di estrapolazione di ϕ_1 verso la barra, d_0 , è necessario adottare formulazioni ottenute sulla base della teoria del trasporto. Per $r_0 \rightarrow \infty$ si otterrebbe il valore relativo al semispazio: $d_0 = 0.71 l_{s1} = 0.71/\Sigma_{s1}$.

Risolvendo l'equazione differenziale ed applicando le relative condizioni al contorno si ottiene:

$$\phi_{1}(r) = \frac{q_{1}}{\Sigma_{a1}} \left[1 + \frac{K_{1}(\kappa_{1}r_{1})I_{0}(\kappa_{1}r) + I_{1}(\kappa_{1}r_{1})K_{0}(\kappa_{1}r)}{[d_{0}\kappa_{1}I_{1}(\kappa_{1}r_{0}) - I_{0}(\kappa_{1}r_{0})]K_{1}(\kappa_{1}r_{1}) - [d_{0}\kappa_{1}K_{1}(\kappa_{1}r_{0}) + K_{0}(\kappa_{1}r_{0})]I_{1}(\kappa_{1}r_{1})} \right]$$

in cui $\kappa_1^2 = \Sigma_{a1}/D_1$ e $D_1 = 1/3\Sigma_{s1}$.

Il fattore di utilizzazione termica viene quindi calcolato tramite la relazione:

$$f = \frac{neutroni\ assorbiti\ nella\ barra}{neutroni\ generati\ nella\ cella} = \frac{S \cdot D_1 \frac{d\Phi_1}{dr}\Big|_{r=r_0}}{q_1 V_1}$$

con $S = 2\pi r_0$; perciò, con qualche passaggio si ottiene

24

$$\frac{1}{P_{1}} = \frac{1}{f_{nero}} = \frac{3}{4} d_{0} \Sigma_{s1} \Sigma_{a1} \frac{4V_{1}}{S} + E(\kappa_{1}r_{0}, \kappa_{1}r_{1})$$

in cui la funzione *E* è data da (v. Fisica del Reattore)

$$E(\kappa_{1}r_{0},\kappa_{1}r_{1}) = \frac{r_{1}^{2} - r_{0}^{2}}{2r_{0}} \frac{I_{0}(\kappa_{1}r_{0})K_{1}(\kappa_{1}r_{1}) + I_{1}(\kappa_{1}r_{1})K_{0}(\kappa_{1}r_{0})}{I_{0}(\kappa_{1}r_{1})K_{1}(\kappa_{1}r_{0}) - I_{1}(\kappa_{1}r_{0})K_{0}(\kappa_{1}r_{1})}$$

d) Calcolo di P_0

Per definizione P_0 rappresenta la probabilità che un neutrone generato da una sorgente uniforme ed isotropa in V_0 oltrepassi almeno una volta la frontiera S. Le modalità con cui un neutrone può raggiungere la frontiera sono però diverse; in particolare, un neutrone può raggiungere la frontiera al primo volo o dopo una o più collisioni di scattering.

In considerazione di ciò, considerato un numero *N* di neutroni generati in V_0 da sorgenti uniformi ed isotrope e detta $P_0^{(0)}$ *la probabilità di fuga al primo volo* (sempre per neutroni generati in V_0 da sorgenti uniformi ed isotrope) si ha:

$$N P_0^{(0)} = \begin{pmatrix} numero \ di \ neutroni \\ che \ sfuggono \ al \ primo \ volo \end{pmatrix}$$

$$N(1 - P_0^{(0)})\frac{\sum_{s_0}}{\sum_{t_0}}P_0^{(0)} = \begin{pmatrix} numero \ di \ neutroni \ che \ fuggono \ da \ S \ dopo \ uno \ scattering \end{pmatrix}$$
$$= N\begin{pmatrix} probabilità \ di \ collidere \ in \ V_0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} probabilità \ che \ la \ collisione \ sia \ scattering \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} probabilità \ di \ fuga \ attraverso \ S \end{pmatrix}$$
$$N\Big[(1 - P_0^{(0)})\frac{\sum_{s_0}}{\sum_{t_0}}\Big]^2 P_0^{(0)} = \begin{pmatrix} numero \ di \ neutroni \ che \ fuggono \ da \ S \ dopo \ du \ scattering \end{pmatrix}$$
$$N\Big[(1 - P_0^{(0)})\frac{\sum_{s_0}}{\sum_{t_0}}\Big]^2 P_0^{(0)} = \begin{pmatrix} numero \ di \ neutroni \ che \ fuggono \ da \ S \ dopo \ du \ scattering \end{pmatrix}$$
$$= N\begin{pmatrix} probabilità \ di \ collisione \ sia \ scattering \end{pmatrix} \begin{pmatrix} probabilità \ di \ la \ collisione \ sia \ scattering \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} probabilità \ di \ fuga \ attraverso \ S \ fuga \ attraverso \ S \ sia \ scattering \end{pmatrix}$$

eccetera.

Nelle formule precedenti si è introdotta la semplificazione consistente nell'assumere che $P_0^{(0)}$ rappresenti la probabilità di fuga anche per neutroni emergenti da uno o più scattering. Sarebbe stato necessario, invece, considerare probabilità differenziate $P_0^{(1)}$, $P_0^{(2)}$, ..., $P_0^{(k)}$ per neutroni emergenti dal primo, dal secondo o dal *k*-esimo scattering, le cui sorgenti non sono distribuite in modo uniforme. Poiché, però, si dimostra che per $k \to \infty$ le $P_0^{(k)}$ convergono ad un valore limite, di solito al di sopra di un certo k = M si assegna lo stesso valore a tutte le probabilità di fuga. Nel nostro caso, per maggiore semplicità, si è assunto M = 0.

Quindi, risulta

$$P_{0} = P_{0}^{(0)} + P_{0}^{(0)} \left(1 - P_{0}^{(0)}\right) \frac{\Sigma_{s0}}{\Sigma_{t0}} + P_{0}^{(0)} \left[\left(1 - P_{0}^{(0)}\right) \frac{\Sigma_{s0}}{\Sigma_{t0}} \right]^{2} + \dots = \frac{P_{0}^{(0)}}{1 - \left(1 - P_{0}^{(0)}\right) \frac{\Sigma_{s0}}{\Sigma_{t0}}}$$

Ricondotto definitivamente il calcolo alla determinazione della probabilità di fuga al primo volo $P_0^{(0)}$ per neutroni emessi da sorgenti uniformi ed isotrope, è ora necessario procurarci il suo valore. A tale scopo si consideri il volume elementare dV intorno al generico punto \vec{r} in V_0 (Figura 7); poiché le sorgenti di neutroni in esso contenute sono isotrope, il numero di neutroni prodotti nell'unità di tempo in dV all'interno di un angolo solido elementare $d\Omega$ intorno alla generica direzione Ω è dato da

$$\frac{q_0}{4\pi}dV\,d\Omega$$

Detta perciò s la distanza di \vec{r} da S misurata lungo $\vec{\Omega}$

$$s = s(\vec{r}, \vec{\Omega}) = |\vec{r} - \vec{r}_s|$$

il numero dei neutroni prodotti nell'unità di tempo entro dV e $d\Omega$ che raggiungeranno *S* senza collidere sarà

$$\frac{q_0}{4\pi}e^{-\Sigma_{r0}s}dV\,d\Omega$$



Figura 7 – Definizioni rilevanti per il calcolo di $P_0^{(0)}$

Perciò, il numero totale di neutroni prodotti in V_0 che nell'unità di tempo raggiungerà *S* senza subire collisione sarà:

$$\int_{V_0} \int_{4\pi} \frac{q_0}{4\pi} e^{-\Sigma_{t0} s\left(\bar{r}, \bar{\Omega}\right)} d\Omega \, dV$$

E' quindi immediato concludere che

$$P_{0}^{(0)} = \frac{\iint_{V_{0} 4\pi} \frac{q_{0}}{4\pi} e^{-\Sigma_{r0} s(\vec{r},\vec{\Omega})} d\Omega \, dV}{\iint_{V_{0} 4\pi} \frac{q_{0}}{4\pi} d\Omega \, dV} = \frac{1}{4\pi V_{0}} \iint_{V_{0} 4\pi} e^{-\Sigma_{r0} s(\vec{r},\vec{\Omega})} d\Omega \, dV$$

L'esecuzione dell'integrale sul volume V_0 e tutte le direzioni dell'esponenziale è in generale molto laborioso in quanto *s* è una funzione complicata della geometria del sistema. Le formule relative ad alcuni casi semplici sono riportate in Tabella 1.

Allo scopo di ottenere una stima semplice e generale di $P_0^{(0)}$ è possibile fare uso dell'*approssimazione razionale di Wigner* che fornisce

$$P_0^{(0)} \approx \frac{1}{1 + \sum_{t_0} \bar{l_0}}$$
 con $\bar{l_0} = \frac{4V_0}{S}$

Per una sfera ed un cilindro infinito entrambi di raggio a, $\overline{l_0}$ assume i valori 4a/3 e 2a rispettivamente. Inoltre, è interessante notare che l'approssimazione diviene esatta nelle due condizioni limite

27

Strato di spessore <i>a</i>	$P_0^{(0)} = \frac{1}{x} \left[\frac{1}{2} - E_3(x) \right] \text{con} E_n(x) = \int_1^\infty e^{-xt} \frac{dt}{t^n} \text{e} x = \Sigma_{t0} a$
Sfera di raggio <i>a</i>	$P_0^{(0)} = \frac{3}{8x^3} \left[2x^2 - 1 + (1 + 2x)e^{-2x} \right] \text{con} x = \Sigma_{t0}a$
Cilindro infinito di raggio <i>a</i>	$P_0^{(0)} = \frac{2}{3} x \left\{ 2 [x I_1(x) K_1(x) + I_0(x) K_0(x) - 1] + \frac{1}{x} I_1(x) K_1(x) + I_0(x) K_1(x) - I_1(x) K_0(x) \right\}$
	$\operatorname{con} x = \Sigma_{t0} a$

Tabella 1 – Formule per il calcolo di $P_0^{(0)}$ in alcuni casi semplici

$$\begin{split} \Sigma_{\iota_0} \bar{l}_0 &\to 0 \qquad \text{in cui } P_0^{(0)} \to 1 \\ \Sigma_{\iota_0} \bar{l}_0 &\to \infty \qquad \text{in cui } P_0^{(0)} \to 0 \end{split}$$

Nel caso del cilindro, però, questa formula può comportare una sottostima di $P_0^{(0)}$ che può arrivare fino al 16% quando $\Sigma_{r_0} \bar{l}_0 \approx 1$. Sono state perciò proposte altre formule aventi un livello di semplicità analogo a quello dell'approssimazione razionale di Wigner, ma che risultano molto più accurate. Una di esse è la formula di Sauer utilizzata al Paragrafo 2.2.1.

e) Considerazioni conclusive sul metodo ABH

Come si è visto, il metodo ABH consente di calcolare il fattore di utilizzazione termica nella cella sulla base dei valori delle probabilità di fuga per i neutroni prodotti in ciascuna regione. Esso consente, inoltre, di calcolare il rapporto tra i flussi medi nelle due regioni e tra il flusso alla superficie di separazione tra le due regioni ed il flusso medio nel combustibile.

Infatti, tenendo conto che

$$\frac{1}{f} = 1 + \frac{\Sigma_{a1}V_1\phi_1}{\Sigma_{a0}V_0\overline{\phi}_0}$$

dalla (9) risulta

$$\frac{\Phi_1}{\overline{\Phi}_0} = \frac{1}{P_0} - \frac{4V_0}{S} \Sigma_{a0} + \frac{\Sigma_{a0}V_0}{\Sigma_{a1}V_1} \frac{1 - P_1}{P_1}$$

Inoltre, tenendo conto che

$$\phi(r_0) = \int_{4\pi} \phi(r_0, \vec{\Omega}) d\Omega$$

e ricordando che si è assunto

$$\phi(r_0,\vec{\Omega}) = C^- \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e < 0 \qquad e \qquad \phi(r_0,\vec{\Omega}) = C^+ \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e > 0$$

si ottiene

$$\phi(r_0) = \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e > 0} \phi(r_0, \vec{\Omega}) d\Omega + \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e < 0} \phi(r_0, \vec{\Omega}) d\Omega = 2\pi (C^+ + C^-)$$
$$J^+ = \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e > 0} (\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e) \phi(r_0, \vec{\Omega}) d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^1 C^+ \mu \, d\mu = \pi C^+$$
$$J^- = \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e < 0} \left| \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e \right| \phi(r_0, \vec{\Omega}) \, d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^0 C^- |\mu| \, d\mu = \pi C^-$$

e quindi

$$\phi(r_0) = 2(J^+ + J^-)$$

Perciò, ricordando ancora che valgono le relazioni

$$J^{+} = (1 - \Pi_{0})J^{-} \qquad \Pi_{0} = \frac{4V_{0}}{S}\Sigma_{a0}P_{0}$$

e considerando che per definizione di opacità risulta

$$\Sigma_{a0}\phi_0 V_0 = SJ^-\Pi_0$$

si ottiene

$$\frac{\phi(r_0)}{\overline{\phi}_0} = \frac{1}{P_0} - \frac{4V_0}{S} \frac{\Sigma_{a0}}{2}$$

Sebbene la trattazione precedente riguardi il caso semplice di una cella con solo combustibile e moderatore, è inoltre possibile applicare il metodo ABH al caso di una cella contenente anche l'incamiciatura. Le formule relative sono già state mostrate al Paragrafo 2.1 per il calcolo del fattore di utilizzazione termica.

2.2.3 Termalizzazione dei neutroni in un reticolo (calcolo a due zone)

Il rapporto tra i flussi medi nelle varie zone del reticolo è in realtà una funzione dell'energia. Allo scopo di ottenere valutazioni più realistiche dei parametri di cella questo effetto deve essere adeguatamente considerato.

Come già visto al Paragrafo 2.2.1, è possibile utilizzare formule semplici che facciano dipendere il fattore di svantaggio dall'energia (ad esempio, la (1)). Allo scopo di dare una giustificazione di queste formulazioni, si esegue il bilancio delle collisioni in un reticolo a due zone, assumendo che il flusso sia piatto in ciascuna delle due regioni (11).

Con la solita ipotesi di considerare la sorgente ad energia infinita, si ha:

$$V_0 \Sigma_{t0}(E) \phi_0(E) = V_0 P_{0\to 0}^{(0)}(E) \int \Sigma_{s0}(E' \to E) \phi_0(E') dE' + V_1 P_{1\to 0}^{(0)}(E) \int \Sigma_{s1}(E' \to E) \phi_1(E') dE'$$

$$V_{1}\Sigma_{t1}(E)\phi_{1}(E) = V_{0}P_{0\to1}^{(0)}(E)\int \Sigma_{s0}(E'\to E)\phi_{0}(E')dE' + V_{1}P_{1\to1}^{(0)}(E)\int \Sigma_{s1}(E'\to E)\phi_{1}(E')dE'$$

in cui compaiono i flussi (piatti) nelle due regioni, $\phi_0 \in \phi_1$, e le $P_{i \to j}^{(0)}$ rappresentano la probabilità che un neutrone nato da una distribuzione di sorgenti uniformi ed isotrope nella regione *i* abbia la sua prima collisione nella regione *j*. Si noti che $\Sigma_s(E' \to E)$ rappresenta in questo caso la sezione differenziale di scattering per il caso particolare della termalizzazione. Ad esempio, considerando il modello più semplice disponibile, quello relativo al gas libero, si ha:

$$\begin{split} \Sigma_{s}(E' \to E) &= N\sigma_{s} \frac{(A+1)^{2}}{8AE'} \Biggl\{ erf\Biggl(\frac{A+1}{2\sqrt{A}}\sqrt{\frac{E}{kT}} - \frac{A-1}{2\sqrt{A}}\sqrt{\frac{E'}{kT}}\Biggr) \pm erf\Biggl(\frac{A+1}{2\sqrt{A}}\sqrt{\frac{E}{kT}} + \frac{A-1}{2\sqrt{A}}\sqrt{\frac{E'}{kT}}\Biggr) \\ &+ e^{\frac{E'-E}{kT}}\Biggl[erf\Biggl(\frac{A+1}{2\sqrt{A}}\sqrt{\frac{E'}{kT}} - \frac{A-1}{2\sqrt{A}}\sqrt{\frac{E}{kT}}\Biggr) \mp erf\Biggl(\frac{A+1}{2\sqrt{A}}\sqrt{\frac{E'}{kT}} + \frac{A-1}{2\sqrt{A}}\sqrt{\frac{E}{kT}}\Biggr) \Biggr] \Biggr\} \end{split}$$

in cui il segno superiore viene assunto quando E' > E, quello inferiore quando E' < E. Rispetto al caso del rallentamento, nella termalizzazione (cioè, per E < 1 eV), il contributo dell'up-scattering non può essere generalmente trascurato.
Per la risoluzione generale delle due equazioni integrali di cui sopra non resta a questo punto che fare uso del calcolatore, dopo aver discretizzato la variabile energetica ed essere passati ad un sistema lineare. Ma soffermiamoci su un caso molto semplice, quello in cui il combustibile sia costituito da nuclidi così pesanti da non moderare apprezzabilmente; in un tale caso, si può porre:

$$\Sigma_{s0}(E' \to E) = \Sigma_{s0}(E)\delta(E' - E)$$

che esprime, appunto, che lo scattering con il combustibile lascia inalterata l'energia del neutrone incidente (infatti, $\Sigma_{s0}(E' \rightarrow E) \neq 0$ solo se E = E'). Facendo uso di questa relazione, si ha:

$$V_{0}\Sigma_{t0}(E)\phi_{0}(E) = V_{0}P_{0\to0}^{(0)}(E)\Sigma_{s0}(E)\phi_{0}(E) + V_{1}P_{1\to0}^{(0)}(E)\int\Sigma_{s1}(E'\to E)\phi_{1}(E')dE'$$
$$V_{1}\Sigma_{t1}(E)\phi_{1}(E) = V_{0}P_{0\to1}^{(0)}(E)\Sigma_{s0}(E)\phi_{0}(E) + V_{1}P_{1\to1}^{(0)}(E)\int\Sigma_{s1}(E'\to E)\phi_{1}(E')dE'$$

Risolvendo la prima per ϕ_0

$$\phi_0(E) = \frac{V_1 P_{1 \to 0}^{(0)}(E)}{V_0 \left[\Sigma_{t0}(E) - P_{0 \to 0}^{(0)}(E) \Sigma_{s0}(E) \right]} \int \Sigma_{s1}(E' \to E) \phi_1(E') dE'$$
(10)

e sostituendo nella seconda, si ha

$$\Sigma_{t1}(E)\phi_1(E) = \left[P_{0\to1}^{(0)}(E)\Sigma_{s0}(E)\frac{P_{1\to0}^{(0)}(E)}{\Sigma_{t0}(E) - P_{0\to0}^{(0)}(E)\Sigma_{s0}(E)} + P_{1\to1}^{(0)}(E)\right] \int \Sigma_{s1}(E' \to E)\phi_1(E')dE'$$

la quale, facendo uso delle relazioni

$$P_{0\to0}^{(0)} + P_{0\to1}^{(0)} = 1 \qquad \qquad P_{1\to0}^{(0)} + P_{1\to1}^{(0)} = 1 \qquad \qquad \Sigma_{t0} = \Sigma_{s0} + \Sigma_{a0}$$

diventa

$$\Sigma_{t1}(E)\phi_1(E) = \frac{\Sigma_{a0}(E) \left[1 - P_{1\to0}^{(0)}(E) \right] + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)}{\Sigma_{a0}(E) + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)} \int \Sigma_{s1}(E' \to E) \phi_1(E') dE'$$

Questa relazione può essere ulteriormente trasformata in modo da ottenerne una forma conveniente. Si ha di seguito:

$$\Sigma_{t1}(E) \frac{\Sigma_{a0}(E) + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)}{\Sigma_{a0}(E) \left[1 - P_{1\to0}^{(0)}(E)\right] + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)} \phi_1(E) = \int \Sigma_{s1}(E' \to E) \phi_1(E') dE'$$

^{(&}lt;sup>11</sup>) Questa tecnica è in linea di principio identica a quella che ha dato luogo al metodo numerico di Nordheim per risonanze nei reticoli eterogenei.

$$\begin{split} &\left\{ \Sigma_{t1}(E) + \Sigma_{t1}(E) \frac{\Sigma_{a0}(E) + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)}{\Sigma_{a0}(E) \left[1 - P_{1\to0}^{(0)}(E) \right] + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)} - \Sigma_{t1}(E) \right\} \phi_{1}(E) = \int \Sigma_{s1}(E' \to E) \phi_{1}(E') dE' \\ &\left\{ \Sigma_{t1}(E) + \frac{\Sigma_{t1}(E) P_{1\to0}^{(0)}(E)}{\Sigma_{a0}(E) \left[1 - P_{1\to0}^{(0)}(E) \right] + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)} \Sigma_{a0}(E) \right\} \phi_{1}(E) = \int \Sigma_{s1}(E' \to E) \phi_{1}(E') dE' \\ &\left\{ \Sigma_{a1}(E) + \frac{\Sigma_{t1}(E) P_{1\to0}^{(0)}(E)}{\Sigma_{a0}(E) \left[1 - P_{1\to0}^{(0)}(E) \right] + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)} \Sigma_{a0}(E) \right\} \phi_{1}(E) = \int \Sigma_{s1}(E' \to E) \phi_{1}(E') dE' \\ &\left\{ \Sigma_{a1}(E) + \frac{\Sigma_{t1}(E) P_{1\to0}^{(0)}(E)}{\Sigma_{a0}(E) \left[1 - P_{1\to0}^{(0)}(E) \right] + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)} \Sigma_{a0}(E) \right\} \phi_{1}(E) = \int \Sigma_{s1}(E' \to E) \phi_{1}(E') dE' \\ &- \Sigma_{s1}(E) - \sum_{s1}(E' \to E) \phi_{1}(E') dE' \\ &\left\{ \Sigma_{a1}(E) + \frac{\Sigma_{a0}(E) \left[1 - P_{1\to0}^{(0)}(E) \right] + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)}{\Sigma_{a0}(E) \left[1 - P_{1\to0}^{(0)}(E) \right] + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)} \\ &\sum_{s1}(E' \to E) \phi_{1}(E') dE' \\ &\sum_{s1}(E' \to E) \phi_$$

da cui, ponendo:

$$\Sigma_{a1}^{*}(E) = \Sigma_{a1}(E) + \frac{\Sigma_{i1}(E)P_{1\to0}^{(0)}(E)}{\Sigma_{a0}(E)[1-P_{1\to0}^{(0)}(E)] + \Sigma_{s0}(E)P_{0\to1}^{(0)}(E)}\Sigma_{a0}(E)$$
$$L_{1}\phi_{1}(E) = \int \Sigma_{s1}(E'\to E)\phi_{1}(E')dE' - \Sigma_{s1}(E)\phi_{1}(E)$$

si ha

$$\Sigma_{a1}^*(E)\phi_1(E) = L_1\phi_1(E)$$

Si nota che questa relazione ha l'aspetto di *una equazione della termalizzazione* in un mezzo infinito. Essa, infatti, può essere scritta come:

$$\left[\Sigma_{a1}^{*}(E) + \Sigma_{s1}(E)\right]\phi_{1}(E) = \int \Sigma_{s1}(E' \to E)\phi_{1}(E')dE'$$
(11)

in cui si nota che il mezzo infinito e omogeneo "equivalente" al reticolo a due regioni ha la stessa sezione macroscopica di scattering del moderatore ed una sezione macroscopica di assorbimento che risulta maggiore di quella del moderatore in considerazione degli assorbimenti che avvengono nel combustibile.

Tenendo conto della relazione di reciprocità tra le probabilità di collisione

$$V_1 \Sigma_{t1} P_{1 \to 0}^{(0)} = V_0 \Sigma_{t0} P_{0 \to 1}^{(0)}$$

è possibile far comparire ovunque solo la probabilità $P_{0\to1}^{(0)}$, che coincide con la $P_0^{(0)}$ introdotta nella discussione del metodo ABH (si noti, infatti, che attraversare al primo volo la frontiera tra combustibile e moderatore significa avere la prima collisione nel moderatore).

Dalla (10), si ha perciò:

$$\phi_0(E) = \frac{V_1 P_{1 \to 0}^{(0)}(E)}{V_0 \left[\Sigma_{t0}(E) - P_{0 \to 0}^{(0)}(E) \Sigma_{s0}(E) \right]} \int \Sigma_{s1}(E' \to E) \phi_1(E') dE'$$

$$= \frac{V_0 P_{0\to1}^{(0)}(E) \Sigma_{t0} / \Sigma_{t1}}{V_0 \Big[\Sigma_{t0}(E) - \Big(1 - P_{0\to1}^{(0)}(E) \Big) \Sigma_{s0}(E) \Big]} \int \Sigma_{s1}(E' \to E) \phi_1(E') dE'$$
$$= \frac{P_{0\to1}^{(0)}(E)}{1 - \frac{\Sigma_{s0}(E)}{\Sigma_{t0}(E)} \Big[1 - P_{0\to1}^{(0)}(E) \Big]} \frac{1}{\Sigma_{t1}(E)} \int \Sigma_{s1}(E' \to E) \phi_1(E') dE'$$

ossia

$$\phi_0(E) = \frac{P_0^{(0)}(E)}{1 - \frac{\sum_{s0}(E)}{\sum_{t0}(E)} \left[1 - P_0^{(0)}(E)\right]} \frac{1}{\sum_{t1}(E)} \int \Sigma_{s1}(E' \to E) \phi_1(E') dE'$$

e grazie alla (11) si ha

$$\phi_0(E) = \frac{P_0^{(0)}(E)}{1 - \frac{\sum_{s0}(E)}{\sum_{t0}(E)} \left[1 - P_0^{(0)}(E)\right]} \frac{\sum_{s1}^*(E) + \sum_{s1}(E)}{\sum_{t1}(E)} \phi_1(E)$$
(12)

Analogamente

$$\begin{split} \Sigma_{a1}^{*}(E) &= \Sigma_{a1}(E) + \frac{\Sigma_{t1}(E) P_{1\to0}^{(0)}(E)}{\Sigma_{a0}(E) \left[1 - P_{1\to0}^{(0)}(E)\right] + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)} \Sigma_{a0}(E)} \\ &= \Sigma_{a1}(E) + \frac{V_0 \Sigma_{t0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E) / V_1}{\Sigma_{a0}(E) \left[1 - \frac{V_0 \Sigma_{t0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)}{V_1 \Sigma_{t1}(E)}\right] + \Sigma_{s0}(E) P_{0\to1}^{(0)}(E)} \\ &= \Sigma_{a1}(E) + \frac{V_0 / V_1}{1 + \frac{\Sigma_{a0}(E)}{\Sigma_{t0}(E)} \left[\frac{1 - P_{0\to1}^{(0)}(E)}{P_{0\to1}^{(0)}(E)} - \frac{V_0 \Sigma_{t0}(E)}{V_1 \Sigma_{t1}(E)}\right]} \\ & \Sigma_{a0}(E) + \frac{V_0 / V_1}{1 + \frac{\Sigma_{a0}(E)}{\Sigma_{t0}(E)} \left[\frac{1 - P_{0\to1}^{(0)}(E)}{P_{0\to1}^{(0)}(E)} - \frac{V_0 \Sigma_{t0}(E)}{V_1 \Sigma_{t1}(E)}\right]} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 \Sigma_{t0}(E)}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ \end{bmatrix} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 \Sigma_{t0}(E)}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 \Sigma_{t0}(E)}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} \\ & \Sigma_{a0}(E) - \frac{V_0 V_1 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma_{t1}(E)} - \frac{V_0 V_1}{V_1 \Sigma$$

ovvero

$$\Sigma_{a1}^{*}(E) = \Sigma_{a1}(E) + \frac{V_{0}/V_{1}}{1 + \frac{\Sigma_{a0}(E)}{\Sigma_{t0}(E)} \left[\frac{1 - P_{0}^{(0)}(E)}{P_{0}^{(0)}(E)} - \frac{V_{0}\Sigma_{t0}(E)}{V_{1}\Sigma_{t1}(E)}\right]} \Sigma_{a0}(E)$$
(13)

Infine, calcolando $P_0^{(0)}$ tramite l'approssimazione razionale di Wigner con la correzione di Bell per l'effetto d'ombra reciproca delle barre

$$P_0^{(0)} = \frac{1}{1 + \Sigma_{t0}(E)\bar{l}_0 \left(1 + \frac{1}{\Sigma_{t1}(E)\bar{l}_1}\right)}$$

in cui $\bar{l}_0 = 4V_0 / S$ e $\bar{l}_1 = 4V_1 / S$, dopo un po' di algebra si ottiene

$$\phi_0(E) = \frac{1}{1 + \sum_{a0}(E)\bar{l}_0} \phi_1(E)$$
(14)

$$\Sigma_{a1}^{*}(E) = \Sigma_{a1}(E) + \frac{V_0/V_1}{1 + \Sigma_{a0}(E)\bar{l_0}} \Sigma_{a0}(E)$$
(15)

Le relazioni precedenti insieme alla (11) permettono di calcolare lo spettro energetico nel moderatore e nel combustibile sulla base delle sezioni d'urto macroscopiche e della geometria del sistema. Come visto al paragrafo 2.2.1, ciò permette di calcolare il fattore di svantaggio (cioè, $\overline{\phi}_1/\overline{\phi}_0$) in funzione dell'energia, in modo da fornire stime un po' più attendibili dei parametri di cella.

Tenendo conto che la sezione d'urto macroscopica del combustibile tende a crescere al diminuire dell'energia, si può notare che la (14) predice uno spettro neutronico più duro nel combustibile che nel moderatore. Inoltre, la (15) mostra chiaramente che una semplice pesatura delle sezioni d'urto di assorbimento sui volumi non consente una omogeneizzazione affidabile ai fini del calcolo dello spettro energetico; è interessante notare, infatti, che tenendo conto della (14) dalla (15) si ha:

$$\Sigma_{a1}^{*}(E) = \Sigma_{a1}(E) + \frac{V_{0}\phi_{0}(E)}{V_{1}\phi_{1}(E)}\Sigma_{a0}(E) \implies V_{1}\Sigma_{a1}^{*}(E)\phi_{1}(E) = V_{1}\Sigma_{a1}(E)\phi_{1}(E) + V_{0}\Sigma_{a0}(E)\phi_{0}(E)$$

cioè, come deve essere per costruzione, il fattore di svantaggio compare direttamente nella omogeneizzazione in modo che il tasso di assorbimento nel mezzo omogeneo "equivalente" sia lo stesso che si ha nel reticolo.

2.3 Metodi Numerici

2.3.1 Generalità

Nel Par. 2.2 il problema della determinazione dall'andamento spazio-energetico del flusso neutronico nella cella è stato affrontato facendo uso di metodi elementari, basati su ipotesi alquanto onerose (flusso piatto in ogni regione, sorgenti uniformi ed isotrope, ecc.). E' evidente che ipotesi di questo genere non possono rendere ragione dell'effettiva struttura fine (sia spaziale che energetica) del flusso neutronico in una cella. E' quindi necessario munirsi di strumenti più adatti per affrontare adeguatamente questo problema.

In primo luogo è necessario discretizzare l'intervallo energetico di interesse in un numero di gruppi energetici generalmente abbastanza grande, in modo da ottenere il dettaglio necessario ad affrontare, ad esempio, i problemi legati all'assorbimento di risonanza.

Come si vedrà nel seguito, è possibile in linea di principio applicare la teoria della diffusione per ottenere lo spettro fine necessario alla definizione delle costanti omogeneizzate da utilizzare per il calcolo a pochi gruppi del comportamento dell'intero reattore. Le piccole dimensioni che caratterizzano la cella elementare di un reattore consigliano, però, l'adozione dell'equazione del trasporto, che sarà oggetto di studio nei prossimi capitoli, in una trattazione spazio-energetica completa.

2.3.2 Calcolo dello spettro fine in macroregioni con buckling assegnato

Si consideri il reattore suddiviso in regioni sufficientemente grandi per giustificare l'applicazione della teoria della diffusione (macroregioni), che verranno assunte omogenee. Ci interesseremo qui principalmente della fase di rallentamento, per cui l'intervallo energetico da 0.65-1.3 eV a 14 MeV viene suddiviso in un numero *G* relativamente grande di intervalli energetici (ad esempio, si assumerà G = 100) di ampiezza letargica circa costante.

Nella macroregione si assume, dunque, la separabilità spazio-energetica del flusso:

$$\phi(\vec{r}, E) = \phi_{\infty}(E)\phi(\vec{r})$$

e si assume che $\varphi(\vec{r})$ sia soluzione dell'equazione

$$\nabla^2 \varphi + B^2 \varphi = 0$$

con $B^2 = B_{mat}^2 = (k_{\infty} - 1) / M^2$ e $M^2 = L_1^2(1 - f) + \tau_t$ (¹²).

In ciascun intervallo energetico si definiscono i valori medi del flusso

$$\phi_{g}(\vec{r}) = \int_{\Delta E_{g}} \phi(\vec{r}, E) dE = \phi(\vec{r}) \int_{\Delta E_{g}} \phi_{\infty}(E) dE = \phi(\vec{r}) \phi_{\infty,g}$$

Dalle equazioni a moltissimi gruppi che, in generale, sono

$$\tilde{D}_{g}^{(h)} \nabla^{2} \phi_{g}(\vec{r}) - \tilde{\Sigma}_{r,g}^{(h)} \phi_{g}(\vec{r}) + \sum_{g' < g} \tilde{\Sigma}_{s,g' \to g}^{(h)} \phi_{g'}(\vec{r}) + S_{g}(\vec{r}) = 0 \qquad (g = 1, ..., G)$$

se si assume che anche la sorgente abbia lo stesso andamento spaziale del flusso

$$S_g(\vec{r}) = S_g \varphi(\vec{r})$$

si ottiene

$$-\left(\widetilde{\Sigma}_{r,g}^{(h)} + D_g^{(h)}B^2\right)\phi_{\infty,g} + \sum_{g' < g}\widetilde{\Sigma}_{s,g' \to g}^{(h)}\phi_{\infty,g} + S_g = 0 \qquad (g = 1,...,G) \qquad (16)$$

che costituisce un sistema con matrice triangolare e, quindi, facile a risolversi per sostituzione.

Di solito si assegna:

$$S_g = \chi_g \qquad (g = 1, \dots, G)$$

Risolte le (16) e ottenuto il vettore dei flussi $\{\phi_{\infty,g}\}_{1}^{G}$, che costituisce lo *spettro fine asintotico* nella regione *h*, si passa a calcolare le costanti a pochi gruppi.

Ad esempio, il calcolo diffusivo a valle può prevedere tre soli gruppi energetici:

GRUPPO I: gruppo veloce (14 $MeV \rightarrow 20 \ keV$) corrispondente ai gruppi g = 1,...,40 della suddivisione fine;

GRUPPO II : gruppo epitermico (20 keV \rightarrow 1.3 eV) corrispondente ai gruppi g = 41,...,100 della suddivisione fine;

$$L^{2} = \frac{\widetilde{D}}{\widetilde{\Sigma}_{a}} = \frac{1}{3\widetilde{\Sigma}_{a}\widetilde{\Sigma}_{tr}} = L_{1}^{2} \left(1 - f\right) \left(1 + \frac{V_{0}\overline{\phi}_{0}}{V_{1}\overline{\phi}_{1}}\right)^{2} \left/ \left(1 + \frac{\Sigma_{tr,0}V_{0}\overline{\phi}_{0}}{\Sigma_{tr,1}V_{1}\overline{\phi}_{1}}\right) \text{ che qui si approxima con } L_{1}^{2} \left(1 - f\right) \left(1 + \frac{V_{0}\overline{\phi}_{0}}{V_{1}\overline{\phi}_{1}}\right)^{2} \right)$$

^{(&}lt;sup>12</sup>) Si ricorderà dal Corso di Fisica del Reattore che la lunghezza di diffusione in un reticolo risulta data da:

GRUPPO III : gruppo termico $(1.3 \ eV \rightarrow 0 \ eV)$ che qui interessa solo marginalmente.

In questo caso, le sezioni d'urto dei grandi gruppi I e II saranno:



Formule simili valgono anche per le altre sezioni d'urto. Per quelle di trasferimento si avrà:

$$\widetilde{\Sigma}_{s}^{I \to II} = \frac{\sum_{g=41g'=1}^{100} \sum_{s,g'=1}^{40} \Sigma_{s,g' \to g}^{(h)} \phi_{\infty,g'}}{\sum_{g'=1}^{40} \phi_{\infty,g'}}$$

(si è temporaneamente sospeso l'indice h).

Il programma fornirà, quindi, tutta la matrice di trasferimento a grandi gruppi, includendo i termini di trasferimento al gruppo termico:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \widetilde{\Sigma}_{s}^{I \to II} & 0 & 0 \\ \widetilde{\Sigma}_{s}^{I \to III} & \widetilde{\Sigma}_{s}^{II \to III} & 0 \end{bmatrix}$$



Per quanto riguarda l'assorbimento e, più particolarmente, per l'assorbimento di risonanza occorre tuttavia un maggior grado di dettaglio.

Distinguiamo due casi: quello di un mezzo omogeneo e quello di un mezzo eterogeneo, anche se nella realtà è soprattutto di quest'ultimo che ci si dovrà occupare.

Figura 8 – Gruppi energetici

<u>1. Mezzo omogeneo.</u>

In questo caso non c'è ovviamente alcuna omogeneizzazione spaziale da fare, ma solo delle medie sull'energia, per passare dai gruppi fini ai grandi gruppi.

I gruppi fini, però, per quanto numerosi non sono mai abbastanza fini per le risonanze, anzi la loro ampiezza è sufficiente, in generale a contenere per intero una o anche due o tre risonanze molto vicine (in generale, il gruppo fine g-esimo ne conterrà K_g). Ciascuna risonanza richiede a sua volta un trattamento analitico (*risonanza stretta* o *larga*), semianalitico (*risonanza intermedia*) o numerico (*calcolo alla Nordheim*) per il calcolo dell'integrale di risonanza.

Eccettuate le risonanze ad energia relativamente alta, che possono essere trattate con l'approssimazione analitica di risonanza stretta, per l'U²³⁸ c'è almeno una decina di risonanze, ad energia più bassa, per le quali è necessario adottare un calcolo alla Nordheim (con qualche eccezione: ad esempio il codice WIMS, che normalmente fa uso del metodo della "intermediate resonance"). Ma il metodo numerico di Nordheim si basa su di una suddivisione dell'intervallo di risonanza in 200 o 300 subintervalli: nasce così all'interno della "divisione fine" g = 1, ..., G, una suddivisione energetica "iperfine". Si perviene così alla valutazione dell'*integrale di risonanza* per la *k*-esima risonanza del gruppetto *g* tramite la relazione

$$I_g^k = \int_{\Delta u_g} \left[\sigma_{a0}(u) \right]_{eff} du = \int_{u_g}^{u_{g+1}} \sigma_{a0}(u) \frac{\phi(u)}{\phi_{as}} du$$

e la sezione macroscopica di assorbimento del gruppetto g-esimo sarà

$$\Sigma_{a,g} = \frac{\int_{u_g}^{u_{g+1}} N_0 \boldsymbol{\sigma}_{a0}(u) \phi(u) du}{\int_{u_g}^{u_{g+1}} \phi(u) du}$$

ossia, dividendo numeratore e denominatore per il flusso asintotico ϕ_{as} (in assenza di risonanza) e considerando separatamente i diversi contributi delle risonanze

$$\Sigma_{a,g} = N_0 \frac{\sum_{k=1}^{K_g} I_g^k}{\int\limits_{\Delta u_g} \frac{\phi(u)}{\phi_{as}} du}$$

Se le risonanze occupano solo una piccola parte di Δu_g , così che si possa accettare che il fattore di autoschermo sia pressochè uguale ad 1 su tutto l'intervallo, la formula precedente diviene

$$\Sigma_{a,g} = N_0 \frac{\sum_{k=1}^{K_g} I_g^k}{\Delta u_g}$$

dove, come sappiamo in base alla definizione di letargia, $\Delta u_g = \ln(E_{g+1}/E_g)$; ma questa approssimazione si rivela essere troppo grossolana per le risonanze più basse (che sono notevolmente larghe) ed oggi viene evitata.

Le sezioni d'assorbimento $\Sigma_{a,g}$ possono a questo punto venire processate nel collassamento a pochi gruppi, come tutte le altre.

2. Mezzo eterogeneo (reticoli).

L'integrale di risonanza assume in questo caso la forma

$$I_g^k = \int_{\Delta u_g} \left[\sigma_{a0}(u) \right]_{eff} du = \int_{u_g}^{u_{g+1}} \sigma_{a0}(u) \frac{\phi_0(u)}{\phi_{as}} du$$

dove $\phi_0(u)$ è il flusso di risonanza nel combustibile (da considerarsi come media spaziale su tale regione, visto che si usa l'approssimazione di flusso piatto) e la sezione macroscopica mediata sul gruppetto *g*-esimo e spazialmente omogeneizzata è data dalla formula

$$\widetilde{\Sigma}_{a,g} = \frac{V_0 \int_{\Delta u_g} N_0 \sigma_{a0}(u) \phi_0(u) du}{V_0 \int_{\Delta u_g} \phi_0(u) du + V_1 \int_{\Delta u_g} \phi_1(u) du}$$

dove V_0 e V_1 sono i volumi rispettivamente del combustibile e del moderatore e $\phi_1(u)$ è il flusso, anch'esso spazialmente costante, sul moderatore. Se si assume che valga approssimativamente la relazione $\phi_1(u) \cong \phi_{as}$, può scriversi

$$\widetilde{\Sigma}_{a,g} = \frac{V_0 \int\limits_{\Delta u_g} N_0 \sigma_{a0}(u) \frac{\phi_0(u)}{\phi_{as}} du}{V_0 \int\limits_{\Delta u_g} \frac{\phi_0(u)}{\phi_{as}} du + V_1 \Delta u_g} = \frac{\widetilde{N}_0 \sum\limits_{k=1}^{K_g} I_g^k}{\frac{V_0}{V} \int\limits_{\Delta u_g} \frac{\phi_0(u)}{\phi_{as}} du + \frac{V_1}{V} \Delta u_g} \qquad \widetilde{N}_0^{(h)} = N_0 \frac{V_0}{V}$$

dove $V = V_0 + V_1$ è il volume della cella; se si accettasse l'ipotesi che anche $\phi_0(u) \approx \phi_{as}$ su gran parte di Δu_g si otterrebbe

$$\widetilde{\Sigma}_{a,g} = \widetilde{N}_0 \frac{\sum_{k=1}^{K_g} I_g^k}{\Delta u_g}$$

ovvia estensione al caso eterogeneo della formula vista per il caso omogeneo.

<u>Osservazione 1.</u> Per ragioni di semplicità abbiamo sostanzialmente trattato il problema in modo che il procedimento di calcolo sarebbe esatto se l'intervallo contenesse $K_g = 1$ risonanze. A rigore bisognerebbe scrivere (ad es. nel caso omogeneo)

$$I_{g}^{k} = \int_{u_{g}}^{u_{g+1}} \sigma_{a0}^{k}(u) \frac{\phi^{k}(u)}{\phi_{as}} du$$

dove σ_{a0}^{k} si riferisce proprio alla risonanza *k*-esima e ϕ^{k} è il flusso che la subroutine NORDHEIM calcola per tale risonanza.

<u>Osservazione 2.</u> In queste formule si è assunto che esista un solo nuclide risonante (ad es., U^{238}); in caso contrario la $\tilde{\Sigma}_{a,g}^{(h)}$ sarà la somma delle sezioni di tutti i nuclidi risonanti esistenti. Ovviamente, sarà necessario tenere conto delle interferenze (anche se non lo fa quasi nessuno).

<u>Osservazione 3.</u> Le subroutines NORDHEIM o I.R. richiedono che sia assegnata la geometria della cella elementare (almeno il raggio r_0 della pellet e il coefficiente di Dancoff) e anche della temperatura (fisica) del combustibile, T_0 , visto che tengono conto dell'effetto Doppler.

<u>Osservazione 4</u>.La formula (16) per il calcolo dello spettro fine è quella che si riferisce all'opzione più semplice presente nei codici di cella, e cioè quella di diffusione. In alternativa a questa equazione possono essere adottate (pur sempre

nell'ipotesi di separabilità spazio-energetica e quindi con l'uso del buckling) le equazioni $P_N e B_N$ (v. Cap. 4) nella forma multigruppo, di solito con $N \le 3$.

Per ottenere questi risultati, le librerie dovranno fornire i dati delle costanti relative al flusso "fine", cioè $\Sigma_{tr}^{(h)}$, I_g^k e la matrice triangolare $\Sigma_{s,g' \to g}^{(h)}$. Peraltro, la LIBRERIA contiene i parametri di tutte le risonanze dei nuclidi più importanti, cosicché in input si devono solo dare le densità atomiche (quelle "vere" cioè "lumped", oppure già omogeneizzate sulla cella, pesando sui volumi: $\tilde{N}_i = N_i (V_i / V_{cella})$.

La libreria contiene anche le altre σ_{g} , nonché la matrice di scattering

$$\sigma_{s,g' \to g} = \sigma_{s,g'} \frac{\int_{\Delta E_g} dE \int_{\Delta E_{g'}} P(E' \to E) \frac{dE'}{E'}}{\int_{\Delta E_{g'}} \frac{dE'}{E'}}$$

di tutti i nuclidi importanti. Per calcolare le sezioni macroscopiche Σ_g (non di assorbimento) il codice si limita a moltiplicare le σ_g per le densità atomiche omogeneizzate.

Il codice calcola anche le $\sigma_{r,g} = \sigma_{s,g} (1 - \overline{\mu})$ (con $\overline{\mu}$ il coseno medio dell'angolo di scattering nel sistema del laboratorio = 2/3A) e, collassando a grandi gruppi, le $\tilde{\Sigma}_{rr}^{I}$, $\tilde{\Sigma}_{rr}^{II}$ e quindi $\tilde{D}^{I} = 1/3\tilde{\Sigma}_{rr}^{II}$ e $\tilde{D}^{II} = 1/3\tilde{\Sigma}_{rr}^{II}$. Il programma fornisce perciò tutte le costanti epitermiche e veloci. Le costanti termiche sono, invece, da ottenersi per altra via.

E' così possibile impostare il calcolo diffusivo sull'intero nocciolo a tre gruppi:

$$\begin{cases} \widetilde{D}_{1}^{(h)} \nabla^{2} \phi_{1} - \Sigma_{r,1}^{(h)} \phi_{1} + \frac{1}{k} \chi_{1} \Big(\nu_{1} \widetilde{\Sigma}_{f,1}^{(h)} \phi_{1} + \nu_{2} \widetilde{\Sigma}_{f,2}^{(h)} \phi_{2} + \nu_{3} \widetilde{\Sigma}_{f,3}^{(h)} \phi_{3} \Big) = 0 \\ \widetilde{D}_{2}^{(h)} \nabla^{2} \phi_{2} - \Sigma_{r,2}^{(h)} \phi_{2} + \Sigma_{s,1 \to 2}^{(h)} \phi_{1} + \frac{1}{k} \chi_{2} \Big(\nu_{1} \widetilde{\Sigma}_{f,1}^{(h)} \phi_{1} + \nu_{2} \widetilde{\Sigma}_{f,2}^{(h)} \phi_{2} + \nu_{3} \widetilde{\Sigma}_{f,3}^{(h)} \phi_{3} \Big) = 0 \\ \widetilde{D}_{3}^{(h)} \nabla^{2} \phi_{3} - \Sigma_{r,3}^{(h)} \phi_{3} + \Sigma_{s,1 \to 3}^{(h)} \phi_{1} + \Sigma_{s,2 \to 3}^{(h)} \phi_{2} = 0 \end{cases}$$

(si noti che si è usata una diversa notazione per indicare le costanti relative ai gruppi energetici; ad esempio $\tilde{D}^{\prime} \rightarrow \tilde{D}_{1}$).

Uno dei punti deboli di questo metodo è il calcolo dei coefficienti di diffusione. Si è usato infatti il tipo più semplice di "correzione di trasporto", per tenere conto dell'anisotropia. Per migliorare le cose, è opportuno rivedere tutto partendo da un approccio più generale e rigoroso.

2.3.3 Metodi numerici basati sull'equazione del trasporto

Lo schema di calcolo generale di un moderno codice di cella, destinato alla produzione delle sezioni a pochi gruppi, non si distacca poi troppo dallo schema "semplice" visto sinora. Anche qui distinguiamo due sezioni: quella destinata allo studio della parte veloce ed epitermica dello spettro e quella destinata alla parte termica. La differenza rilevante rispetto a quanto visto finora è che per questi calcoli si fa uso in modo generale della teoria del trasporto.

a) Calcoli di spettro veloce-epitermico nella cella

Il codice deve sempre poter attingere ad ampie librerie veloci-epitermiche a G = 100-200 gruppi. Tali librerie includono i parametri delle risonanze di molti nuclidi. I primi calcoli che il codice effettua sono proprio quelli degli integrali di risonanza, che gli consentono di completare la libreria a G gruppi anche con appropriate sezioni di assorbimento (cattura e fissione) omogeneizzate così da tener conto dell'autoschermo.

Nei codici più semplici (¹³), il calcolo degli integrali di risonanza viene fatto con la subroutine di Nordheim o, addirittura, col metodo dell'Intermediate Resonance e, quando possibile, con le semplici approssimazioni di risonanza stretta e larga, come nel codice inglese WIMS. Codici sviluppati successivamente prevedono versioni estese della subroutine di Nordheim (non più solo a due zone, ma con diverse zone di combustibile e moderatore e, ovviamente, abbandonando l'ipotesi di flusso imperturbato nel moderatore). (¹⁴)

^{(&}lt;sup>13</sup>) Come il codice GAM, parte epitermico-veloce del codice generale GGC.

 $[\]binom{14}{1}$ Di fatto si tratta di un calcolo basato sull'equazione del trasporto nella forma integrale (v. oltre) con il metodo delle probabilità di collisione nella sua forma generale.

Vi possono poi essere subroutines che provvedono a valutare in modo automatico il coefficiente di Dancoff, ecc.. Talora si esegue un calcolo anch'esso preliminare sempre tramite probabilità di collisione, che tiene conto della struttura eterogenea per la zona veloce, così da migliorare la stima della moltiplicazione in tale zona.

Ottenute tutte le sezioni omogeneizzate a *G* gruppi, i codici più comuni eseguono senz'altro il calcolo dello spettro fine, $\phi_{\infty,g}$, nel "mezzo omogeneo" così ottenuto, provvedendo a tenere conto delle fughe macroscopiche tramite un "buckling materiale" di tentativo preventivamente assegnato. Il flusso fine permette poi di ottenere le costanti a pochi gruppi.

Tale calcolo, eseguito in diffusione o con trasporto in approssimazione P_N o B_N (v. oltre), presuppone che valga il teorema di separabilità spazioenergetica, come se il "mezzo omogeneo" in studio fosse l'unica regione che costituisse il reattore. In realtà, il "mezzo omogeneo" nei reticoli moderni che coinvolgono barrette con diversi arricchimenti può essere considerato rappresentativo solo della particolare barretta (la celletta) i cui parametri sono stati inseriti in input e pertanto, se in ciascun "assembly" vi sono barrette diverse e, peggio ancora, se le "assemblies" sono state sottoposte a bruciamenti diversi e presentano ulteriori diversità nella composizione isotopica occorrerà applicare il codice molte volte.

Codici più moderni consentono di evitare la teoria asintotica, mantenendo anche a 100-200 gruppi la struttura eterogenea della cella elementare (è comunque opportuno introdurre sempre un termine di fuga $D_g B^2$ per tenere conto della perturbazione spettrale causata dalle fughe macroscopiche.

Ovviamente nel calcolo si provvede a tenere distinte le diverse zone e, ad esempio, le formule per il calcolo delle sezioni d'assorbimento a partire dagli integrali di risonanza vanno opportunamente modificate. Un calcolo trasportistico in geometria cilindrica monodimensionale (per esempio con il codice ANISN, basato su di un metodo S_N , v. oltre) provvederà a fornire lo

spettro fine con il quale collassare le sezioni d'urto, sempre tenendo separato, se lo si ritiene opportuno, il combustibile dal moderatore.

b) Calcoli di spettro termico nella cella

In linea di principio valgono le stesse considerazioni fatte per la parte epitermica-veloce. La principale differenza consiste nel fatto che la matrice di trasferimento energetico di scattering non è più triangolare, bensì piena (a causa degli up-scattering) ed è inoltre molto più complicata da calcolare, non potendosi più ricorrere al modello classico dell'urto elastico (tranne che nei casi in cui si possa accettare l'ipotesi che il moderatore sia assimilabile ad un gas perfetto monoatomico "free gas model") (¹⁵). La necessità di considerare il legame chimico (non trascurabile alle basse energie) ed il fatto che l'agitazione termica coinvolge gradi di libertà rotazionali e vibrazionali delle molecole urtate oltre che semplicemente traslazionali, nonché l'assorbimento o l'emissione di quanti di energia (fononi), rendono inoltre inevitabile un trattamento quantomeccanico dettagliato.

A parte questa difficoltà tecnica, permangono le possibilità accennate per il caso epitermico-veloce: ad esempio, il codice GATHER (parte termica del codice integrato GGC) fa riferimento, come GAM per la parte epitermica e veloce, ad un mezzo omogeneo, con le fughe tenute in conto tramite un "buckling" imposto (metodi P_N o B_N , v. oltre). Non esistendo in questo caso l'analogo della subroutine Nordheim per il calcolo dei fattori di autoschermo (ossia, dei reciproci dei fattori di svantaggio), il codice richiede che questi fattori siano assegnati in input.

Naturalmente, è possibile introdurre, per tale calcolo, qualcosa di simile alla subroutine Nordheim, magari con probabilità di collisione relative ad un maggior numero di zone, così da garantire una maggiore accuratezza nel calcolo dei flussi alle varie energie del gruppo termico. Ciò fu fatto, in effetti, nel 1962 da H.C. Honeck che eseguì calcoli di cella cilindrica a 30 "gruppetti" da 0 a 0.625 eV, la cella essendo divisa in $N \le 15$ zone (cioè fino a 15 gusci cilindrici, ripartiti arbitrariamente tra combustibile, incamiciatura e moderatore). Il calcolo era basato sull'equazione integrale del trasporto, risolta per discretizzazione con un metodo che viene a coincidere con quello delle probabilità di collisione (v. oltre), adottato ad esempio dal codice THERMOS.

Più recentemente, in luogo di metodi basati sull'equazione integrale, che ha lo svantaggio di richiedere l'assunzione dell'isotropia dello scattering nel sistema del laboratorio, sono stati usati metodi basati direttamente sulla equazione integrodifferenziale del trasporto (codice ANISN, alle ordinate discrete, v. oltre). Ciononostante, qualche reminiscenza dei metodi semplici di un tempo, tipo ABH, con opportune correzioni spettrali un po' più raffinate di quelle accennate nella prima parte di questo Capitolo, è sopravvissuta fino ad oggi, ad esempio nella parte SPECTROX del codice generale WIMS.

c) Calcoli di "assembly"

Sin qui, i calcoli relativi alle celle elementari. L'elemento di combustibile di un BWR è costituito, però, come già ricordato, da barrette con diversi arricchimenti e da barre di acqua. Quello di un PWR deve pur sempre contenere le barrette di controllo. E' necessario, inoltre, tenere conto del bruciamento ("burn-up") che differenzia ulteriormente la composizione isotopica del combustibile. Peggio ancora sono gli elementi a fascio multiplo dei reattori ad acqua pesante.

Insomma, una singola celletta omogeneizzata non può essere considerata rappresentativa dell'intero nocciolo (come accadeva nei rettori magnox-grafitegas, anche se la presenza delle barre di controllo creava qualche problema anche in quel caso, richiedendo la definizione di una "supercella di controllo").

^{(&}lt;sup>15</sup>) L'agitazione termica, anche in questo caso, complica tuttavia abbastanza l'espressione della $\Sigma_s(E' \to E)$ (v. oltre).

Per affrontare un problema così complesso, si può procedere come segue. Considerato un "assembly" di BWR, supponiamo di essere riusciti con ripetuti calcoli epitermico-veloci e termici ad ottenere per tutte le cellette che lo compongono le costanti omogeneizzate a 6 gruppi (ad esempio tre veloci, due epitermici ed uno termico) oppure a 7 gruppi (ad esempio, tre veloci, due epitermici, uno termico-alto, per tenere conto bene delle risonanze del plutonio ed uno termico basso, per gli assorbimenti $\approx 1/v$ dell'uranio). La via tradizionale a questo punto è quella di considerare l'assembly come un insieme di piccole zone quadrate omogenee (le cellette omogeneizzate) e di calcolare il flusso a 6 o 7 gruppi in tale insieme in diffusione, assumendo corrente nulla sul bordo, o eventualmente in trasporto, assumendo sul bordo una condizione di riflessione. Ottenuti i flussi in ciascuna zona quadrata (in pratica i fattori di svantaggio) si può procedere ad una seconda omogeneizzazione accompagnata, di solito, ad un collassamento a due o tre grandi gruppi, ottenendo così, finalmente le sezioni omogeneizzate finali da passare in input al codice coarse-mesh di reattore (v. Figura 9a).

Più modernamente, si cerca nella seconda omogeneizzazione di conservare memoria della eterogeneità primitiva delle cellette. Ai calcoli di cella si fanno produrre sezioni collassate, per esempio a 6-15 gruppi separatamente per il combustibile ed il moderatore; il calcolo trasportistico bidimensionale di assembly provvede poi all'ulteriore collassamento e all'omogeneizzazione finale per il coarse-mesh (v. Figura 9b).



3. L'Equazione del Trasporto

3.1 Forma integrodifferenziale

3.1.1 Derivazione

L'equazione del trasporto in forma integrodifferenziale si può ottenere considerando la variazione del numero di neutroni contenuti <u>inizialmente</u> in un volume elementare dV intorno ad \vec{r} e aventi direzione di moto in $d\Omega$ intorno ad $\vec{\Omega}$ e velocità in dv intorno a v (v. Figura 10)

La relativa equazione di bilancio viene ottenuta <u>seguendo</u> il pacchetto di neutroni inizialmente in *dV*, tenendo conto degli effetti che contribuiscono ad alterarne la popolazione e cioè degli assorbimenti, dello scattering e delle sorgenti. Per questo motivo, non compaiono nell'equazione termini legati al flusso di neutroni attraverso la frontiera del volume elementare che in questo approccio (simile a quello *Lagrangiano* della Fluidodinamica) sono nulli per definizione.

La variazione del numero di neutroni del pacchetto iniziale nell'intervallo di tempo elementare dt è data da

$$\delta n = \left[n \left(\vec{r} + v \vec{\Omega} dt, v \vec{\Omega}, t + dt \right) - n \left(\vec{r}, v \vec{\Omega}, t \right) \right] dV dv d\Omega$$



Figura 10 – Volume elementare considerato per il bilancio dei neutroni

Poiché in coordinate cartesiane è per definizione

$$\vec{r} \equiv \{x, y, z\}$$
 e $\vec{\Omega} \equiv \{\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z\}$

si ha:

$$n\left(\vec{r}+v\,\vec{\Omega}dt,v\,\vec{\Omega},t+dt\right) \approx n\left(\vec{r},v\,\vec{\Omega},t\right) + \left[\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial x}v\,\Omega_x + \frac{\partial n}{\partial y}v\,\Omega_y + \frac{\partial n}{\partial z}v\,\Omega_z\right]dt$$

e quindi

$$\delta n = \left[\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n}{\partial x}v\Omega_x + \frac{\partial n}{\partial y}v\Omega_y + \frac{\partial n}{\partial z}v\Omega_z\right] dV \, dv \, d\Omega \, dt = \\ = \left[\frac{\partial n}{\partial t} + v\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} n\left(\vec{r}, v\vec{\Omega}, t\right)\right] dV \, dv \, d\Omega \, dt$$

Tenendo conto di quanto sopra accennato circa i contributi che intervengono a modificare il numero di neutroni nel pacchetto considerato, si ha:

$$\delta n = -\begin{pmatrix} perdite \\ per \ collisione \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} apporto \ dovuto \\ alle \ collisioni \ inverse \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} apporto \ dovuto \\ alle \ sorgenti \ indipendenti \end{pmatrix}$$

Risulta, perciò:

$$\delta n = -vn(\vec{r}, v\vec{\Omega}, t) \Sigma_t(\vec{r}, v) \, dV \, dv \, d\Omega \, dt + \int_0^\infty dv' \int_{4\pi} v'n(\vec{r}, v'\vec{\Omega}', t) \Sigma_s(\vec{r}, v'\vec{\Omega}' \to v\vec{\Omega}) d\Omega' \cdot dV \, dv \, d\Omega \, dt + S(\vec{r}, v\vec{\Omega}, t) \, dV \, dv \, d\Omega \, dt$$

L'equazione integrodifferenziale del trasporto assume quindi la forma seguente:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + v\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} n\left(\vec{r}, v\vec{\Omega}, t\right) = -\Sigma_{t}\left(\vec{r}, v\right) vn\left(\vec{r}, v\vec{\Omega}, t\right) + \int_{0}^{\infty} dv' \int_{4\pi} \Sigma_{s}\left(\vec{r}, v'\vec{\Omega}' \to v\vec{\Omega}\right) v'n\left(\vec{r}, v'\vec{\Omega}', t\right) d\Omega' + S\left(\vec{r}, v\vec{\Omega}, t\right)$$
(17)

Analogamente, se invece della velocità si fa comparire l'energia come variabile indipendente e si considera il flusso angolare invece della densità angolare, si ha:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t}\phi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t) + \vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}}\phi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t) + \Sigma_{t}(\vec{r},E)\phi(\vec{r},E,\vec{\Omega},t) = \\ = \iint \Sigma_{s}(\vec{r},E' \to E,\vec{\Omega}' \to \vec{\Omega})\phi(\vec{r},E',\vec{\Omega}',t)dE'd\Omega' + S(\vec{r},E,\vec{\Omega},t)$$
(18)

Riassumendo, nella equazione precedente si riconoscono nell'ordine i seguenti termini:

- il termine che esprime la variazione temporale nella densità neutronica;
- il termine detto di "streaming", che esprime propriamente il trasporto dei neutroni dovuto al loro moto;
- il termine di perdita dovuto alle collisioni, che include sia lo "scattering" che l'assorbimento;
- il termine dovuto alle collisioni inverse ("scattering"), che apporta neutroni al gruppo caratterizzato dalla direzione e dall'energia considerate, traendoli dalle altre direzioni e dalle altre energie;
- il termine di sorgente indipendente (assegnata).

Qualora si tenga esplicitamente conto delle fissioni, la (17) diventa:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + v\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} n\left(\vec{r}, v\vec{\Omega}, t\right) = -v n\left(\vec{r}, v\vec{\Omega}, t\right) \Sigma_{t}\left(\vec{r}, v\right)$$
$$+ \int_{0}^{\infty} dv' \int_{4\pi} v' n\left(\vec{r}, v'\vec{\Omega}', t\right) \Sigma_{s}\left(\vec{r}, v'\vec{\Omega}' \to v\vec{\Omega}\right) d\Omega' + S\left(\vec{r}, v\vec{\Omega}, t\right) \qquad (19)$$
$$+ \frac{\chi(v)}{4\pi} \int_{0}^{\infty} dv' \int_{4\pi} v' n\left(\vec{r}, v'\vec{\Omega}', t\right) v \Sigma_{f}\left(\vec{r}, v'\right) d\Omega'$$

che si ottiene nell'ipotesi che la sorgente di fissione sia isotropa.

Si può notare che *l'equazione del trasporto è lineare*, per cui è possibile definire (almeno formalmente) una *funzione di Green* che ne fornisca la soluzione per un'assegnata distribuzione di sorgenti indipendenti.

3.1.2 Condizioni alle interfacce e al contorno

La soluzione dell'equazione del trasporto, che si esegue generalmente per via numerica come verrà chiarito in seguito, richiede che vengano definite appropriate condizioni iniziali, alle interfacce e al contorno. Mentre l'assegnazione delle condizioni iniziali non comporta grossi problemi (basta specificare una opportuna funzione che rappresenti il flusso angolare o la densità angolare all'istante t=0) è necessario chiarire quali siano le condizioni più opportune da imporre in prossimità di frontiere ed interfacce allo scopo di ottenere una soluzione fisicamente accettabile.

Sebbene le costanti nucleari possano variare anche considerevolmente attraverso l'interfaccia tra due regioni (ad es., di materiale diverso), si intuisce immediatamente che il numero di neutroni caratterizzati da una certa energia ed una certa direzione di moto che escono da una regione in un dato punto dell'interfaccia è uguale al numero dei neutroni con le stesse caratteristiche che in quel punto entrano nella regione adiacente. Perciò, la condizione più ovvia da imporre è che *il flusso [la densità] angolare sia continuo attraverso l'interfaccia tra due regioni di materiale diverso*. Questa condizione può venire meno solo in presenza di sorgenti superficiali di neutroni, attraverso le quali è evidentemente possibile riscontrare discontinuità nella densità e/o nella distribuzione angolare dei neutroni.

Per quanto concerne le condizioni al contorno, le più comunemente utilizzate sono le seguenti:

• superficie libera (interfaccia col vuoto)

si applica sulla frontiera ∂V di un dominio V convesso (ovvero, *non-rientrante*), tale cioè che un neutrone uscito dal dominio abbia una probabilità trascurabile di rientrare in esso; formalmente tale condizione si impone come segue:

$$\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) = 0 \qquad \text{per} \qquad \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e < 0, \ \vec{r} \in \partial V$$

in cui \vec{u}_e è la normale alla superficie ∂V in \vec{r} orientata verso l'esterno;

• flusso angolare entrante assegnato

anche questa condizione si applica sulla frontiera ∂V di un dominio V e si esprime:

$$\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) = \Psi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) \qquad \text{per } \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e < 0, \ \vec{r} \in \partial V$$

con Ψ un'assegnata funzione; si può notare che la condizione all'interfaccia con lo spazio vuoto non è altro che un caso particolare di questo più generale tipo di condizione al contorno;

• riflessione con "albedo" assegnata

in questo caso si impone che il flusso angolare entrante attraverso ∂V in una data direzione sia pari ad una frazione assegnata (che prende il nome di "albedo, $\alpha(E)$) di quello uscente nella direzione corrispondente attraverso le leggi della riflessione

$$\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) = \alpha(E)\phi(\vec{r},\vec{\Omega}',E,t) \qquad \text{per } \vec{\Omega}\cdot\vec{u}_e < 0, \ \vec{r} \in \partial V$$

essendo

,

con $\alpha(E) = 1$ si ha il caso della pura riflessione;

• riflessione diffusa (o "bianca")

in questo caso si impone che il numero di neutroni che escono da ogni elemento di superficie sia uguale a quello dei neutroni entranti e che il flusso angolare entrante sia isotropo; si ha:

$$J_{u_e}^- = J_{u_e}^+$$

$$\phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = C \qquad \text{per } \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e < 0, \, \vec{r} \in \partial V$$

con

$$J_{u_e}^{+} = \left| \vec{J}_{u_e}^{+} \cdot \vec{u}_e \right| = \int_{\vec{\Omega}' \cdot \vec{u}_e > 0} \vec{u}_e \cdot \vec{\Omega}' \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E, t) d\Omega' \qquad J_{u_e}^{-} = \vec{J}_{u_e}^{-} \cdot \vec{u}_e = \int_{\vec{\Omega}' \cdot \vec{u}_e < 0} \left| \vec{u}_e \cdot \vec{\Omega}' \right| \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E, t) d\Omega'$$

Risulta perciò:

$$\phi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) = C = \frac{1}{\pi} J_{u_e}^+ = \frac{1}{\pi} \int_{\vec{\Omega}' \cdot \vec{u}_e > 0} \vec{u}_e \cdot \vec{\Omega}' \phi(\vec{r},\vec{\Omega}',E,t) d\Omega' \qquad \text{per } \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e < 0, \ \vec{r} \in \partial V$$

• flusso variabile con periodicità spaziale

questa situazione, che si presenta ad esempio nel caso di un nocciolo infinito composto da celle elementari tutte uguali, si esprime nella forma

$$\phi\left(\vec{r},\vec{\Omega},E,t\right) = \phi\left(\vec{r}+m\vec{r}_l,\vec{\Omega},E,t\right)$$

in cui $\vec{r_i}$ è un vettore il cui modulo rappresenta la dimensione spaziale della cella ed *m* è un intero.

3.1.3 Equazione del trasporto e bilancio neutronico

Dall'equazione del trasporto, che coinvolge il flusso angolare, è facile ottenere l'equazione di bilancio dei neutroni in termini di flusso scalare che è stata il punto di partenza per la trattazione in diffusione (v. Fisica del Reattore). A tale scopo è sufficiente integrare ambo i membri della (18) su tutte le direzioni tenendo conto che l'integrazione in $d\Omega$, coinvolgendo soltanto le direzioni, può essere eseguita sotto i segni di derivazione temporale e spaziale e facendo uso dei seguenti risultati

Si ottiene, dunque

$$\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t}\phi(\vec{r},E,t) + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},E,t) + \Sigma_t(\vec{r},E)\phi(\vec{r},E,t) = \int \Sigma_s(\vec{r},E'\to E)\phi(\vec{r},E',t)dE' + S(\vec{r},E,t)$$

Che la precedente rappresenti la forma differenziale del bilancio neutronico è poi subito chiaro se si esegue l'integrazione su di un volume finito *V* facendo uso del teorema della divergenza:

$$\int_{V} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, E, t) dV + \int_{\partial V} \vec{J}(\vec{r}, E, t) \cdot \vec{n} \, dS + \int_{V} \Sigma_{t}(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E, t) dV =$$
$$= \int_{V} \int \Sigma_{s}(\vec{r}, E' \to E) \phi(\vec{r}, E', t) dE' dV + \int_{V} S(\vec{r}, E, t) dV$$

Eseguendo infine l'integrazione su tutte le energie si ha:

$$\int_{V} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) dV + \int_{\partial V} \vec{J}(\vec{r}, t) \cdot \vec{n} dS + \int_{V} \sum_{a} (\vec{r}) \phi(\vec{r}, t) dV = \int_{V} S(\vec{r}, t) dV$$

3.2 L'equazione del trasporto stazionaria monocinetica

Eliminando la dipendenza dal tempo e ponendo v = 1, la (17) diventa:

$$\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} n(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}) n(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}) n(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega' + S(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

Per quanto riguarda il termine delle collisioni inverse che compare nella precedente si può notare che, come si ricorda dalla Fisica del Reattore, la dipendenza della sezione macroscopica differenziale di scattering da $\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}$ può essere espressa in funzione del solo coseno dell'angolo ψ tra le due direzioni, dato da $\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$:

$$\Sigma_{s}\left(\vec{r},\vec{\Omega}'\rightarrow\vec{\Omega}\right)=\Sigma_{s}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}'\right)=\Sigma_{s}\left(\vec{r},\cos\psi\right)$$

Tra le ipotesi più comunemente adottate nella risoluzione dell'equazione del trasporto in relazione allo scattering si ricordano le seguenti:

• *scattering isotropo* (nel sistema del laboratorio) in questo caso si ha:

$$\Sigma_{s}\left(\vec{r},\vec{\Omega}'\rightarrow\vec{\Omega}\right)=\frac{\Sigma_{s}\left(\vec{r}\right)}{4\pi}$$

• *scattering linearmente anisotropo* (nel sistema del laboratorio) si adotta una formulazione del tipo:

$$\Sigma_{s}\left(\vec{r},\vec{\Omega}'\rightarrow\vec{\Omega}\right) = \frac{\Sigma_{s}\left(\vec{r}\right)}{4\pi}\left(1+b\,\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}'\right) = \frac{\Sigma_{s}\left(\vec{r}\right)}{4\pi}\left(1+b\cos\psi\right)$$

in cui b è una opportuna costante non nulla; integrando sulle direzioni e tenendo conto che

$$d\Omega = \operatorname{sen} \psi \, d\psi \, d\varphi$$

si ha:

$$\int_{4\pi} \Sigma_s \left(\vec{r}, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega} \right) d\Omega = \frac{\Sigma_s \left(\vec{r} \right)}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \left(1 + b \cos \psi \right) \operatorname{sen} \psi \, d\psi \quad ;$$

ponendo

 $\mu_0 = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega'} = \cos \psi \quad \Rightarrow \qquad d\mu_0 = -\sin \psi \, d\psi$

si verifica che:

$$\int_{4\pi} \Sigma_s \left(\vec{r}, \vec{\Omega'} \to \vec{\Omega} \right) d\Omega = \frac{\Sigma_s \left(\vec{r} \right)}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 \left(1 + b \,\mu_0 \right) d\mu_0 = \Sigma_s \left(\vec{r} \right)$$

 (\rightarrow)

e risulta inoltre:

$$\overline{\mu}_{0} = \frac{\int_{4\pi} \Sigma_{s} \left(\vec{r}, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega} \right) \cos \psi \, d\Omega}{\int_{4\pi} \Sigma_{s} \left(\vec{r}, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega} \right) d\Omega} = \frac{\frac{\Sigma_{s} \left(\vec{r} \right)}{4\pi} \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{\pi} \left(1 + b \, \cos \psi \right) \cos \psi \, \sin \psi \, d\psi}{\Sigma_{s} \left(\vec{r} \right)} = \frac{1}{4\pi} \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{\pi} \left(1 + b \, \cos \psi \right) \cos \psi \, \sin \psi \, d\psi = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \left(1 + b \mu_{0} \right) \mu_{0} \, d\mu_{0} = \frac{b}{3}$$

ovvero

$$b = 3\overline{\mu_0}$$

• scattering generalmente anisotropo (nel sistema del laboratorio)

la più generale forma della sezione differenziale di scattering si ottiene tramite una espansione in serie di *polinomi di Legendre*

$$\Sigma_{s}\left(\vec{r},\vec{\Omega}'\rightarrow\vec{\Omega}\right)=\Sigma_{s}\left(\vec{r},\mu_{0}\right)=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}\Sigma_{s,l}\left(\vec{r}\right)P_{l}\left(\mu_{0}\right) \quad ;$$

questi polinomi formano un insieme completo di funzioni ortogonali sull'intervallo $-1 \le \mu_0 \le 1$ e possono quindi essere adottati come base per esprimere una qualunque funzione reale a quadrato integrabile su tale intervallo; essi sono definiti dalle relazioni

$$P_0(\mu_0) = 1, \qquad P_1(\mu_0) = \mu_0 \qquad P_{l+1}(\mu_0) = \frac{2l+1}{l+1}\mu_0 P_l(\mu_0) - \frac{l}{l+1}P_{l-1}(\mu_0) \quad (l \ge 1) \quad (20)$$

risulta, perciò:

$$P_2(\mu_0) = \frac{1}{2} (3\mu_0^2 - 1), \quad P_3(\mu_0) = \frac{1}{2} (5\mu_0^3 - 3\mu_0), \qquad \dots;$$

la relazione di ortogonalità tra i polinomi di Legendre si esprime nella forma

$$\int_{-1}^{1} P_n(\mu_0) P_m(\mu_0) d\mu_0 = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm}$$

da cui si ottiene la seguente espressione per i coefficienti dello sviluppo della sezione di scattering

$$\Sigma_{s,l}(\vec{r}) = 2\pi \int_{-1}^{1} \Sigma_s(\vec{r},\mu_0) P_l(\mu_0) d\mu_0$$

come si può notare, il caso dello scattering linearmente anisotropo corrisponde a troncare lo sviluppo in polinomi di Legendre ad l = 1.

3.3 Caso stazionario monocinetico in simmetria piana

3.3.1 Derivazione dell'equazione

Si assume che le caratteristiche fisiche del mezzo e la sorgente dipendano soltanto dalla coordinata spaziale *x*; per quanto riguarda la direzione, sia la densità angolare che la sorgente dipenderanno, inoltre, da $\Omega_x \equiv \mu = \cos\theta$ (v. Figura 11a). Si ha:

$$n = n(x, \Omega_x) = n(x, \mu) \qquad \vec{\Omega} \cdot \operatorname{grad}_{\vec{r}} n(x, \mu) = \mu \frac{\partial n}{\partial x} \qquad S = S(x, \Omega_x) = S(x, \mu)$$



Figura 11 – Definizione di alcuni vettori rilevanti nel caso di simmetria piana

$$\Sigma_{t} = \Sigma_{t}(x)$$
 $\Sigma_{s} = \Sigma_{s}(x, \Omega_{x}) = \Sigma_{s}(x, \mu)$

Facciamo uso di un'ipotesi che semplifica abbastanza notevolmente la teoria assumendo, in particolare, che la sorgente di scattering sia linearmente anisotropa nel sistema del laboratorio. Si ha:

$$\mu \frac{\partial n(x,\mu)}{\partial x} + \Sigma_t(x)n(x,\mu) = \frac{\Sigma_s(x)}{4\pi} \int_{4\pi} (1 + b\cos\psi)n(x,\mu')d\Omega' + S(x,\mu)$$
(21)

in cui è $\cos \psi = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}' = \mu_0$, mentre è, ovviamente, $\mu' \equiv \Omega'_x$. Con riferimento alla Figura 11b risulta:

$$\mu_{0} = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}' = \left(\vec{\Omega}_{x} + \vec{\Omega}_{\perp}\right) \cdot \left(\vec{\Omega}_{x}' + \vec{\Omega}_{\perp}'\right) = \Omega_{x}\Omega_{x}' + \left|\Omega_{\perp}\right| \left|\Omega_{\perp}'\right| \cos(\varphi - \varphi') =$$
$$= \mu \mu' + \sqrt{1 - \mu^{2}} \sqrt{1 - {\mu'}^{2}} \cos(\varphi - \varphi')$$

Perciò, integrando ambo i membri della (21) su $0 \le \varphi \le 2\pi$ e facendo uso delle definizioni:

$$\widetilde{n}(x,\mu) = \int_0^{2\pi} n(x,\mu) d\varphi = 2\pi n(x,\mu) \qquad \qquad \widetilde{S}(x,\mu) = \int_0^{2\pi} S(x,\mu) d\varphi = 2\pi S(x,\mu)$$

si ottiene

$$\mu \frac{\partial \widetilde{n}}{\partial x} + \Sigma_t(x) \widetilde{n}(x,\mu) = \frac{\Sigma_s(x)}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{4\pi} (1+b\,\mu_0) n(x,\mu') d\Omega' + \widetilde{S}(x,\mu)$$

e quindi

$$\mu \frac{\partial \widetilde{n}}{\partial x} + \Sigma_{t}(x) \widetilde{n}(x,\mu) = \frac{\Sigma_{s}(x)}{2} \int_{4\pi} (1+b\,\mu\mu') n(x,\mu') d\Omega' + \widetilde{S}(x,\mu)$$
(22)

in cui si è fatto uso della relazione

$$\int_{0}^{2\pi} (1+b\mu_0) d\phi = \int_{0}^{2\pi} \left[1+b\mu\mu' + b\sqrt{1-\mu^2} \sqrt{1-\mu'^2} \cos(\phi-\phi') \right] d\phi = 2\pi (1+b\mu\mu')$$

(il termine in $\varphi - \varphi'$ perciò scompare). Tenendo conto che $d\Omega' = d\mu' d\varphi'$ si ha poi

$$\int_{4\pi} (1+b\,\mu\mu') n(x,\mu') d\Omega' = \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^1 (1+b\,\mu\mu') n(x,\mu') d\mu' = \int_{-1}^1 (1+b\,\mu\mu') \widetilde{n}(x,\mu') d\mu'$$

per cui, la (22) diventa:

$$\mu \frac{\partial \widetilde{n}}{\partial x} + \Sigma_t(x)\widetilde{n}(x,\mu) = \frac{\Sigma_s(x)}{2} \int_{-1}^1 (1 + b\mu\mu')\widetilde{n}(x,\mu')d\mu' + \widetilde{S}(x,\mu)$$

e infine, abolendo la tilde

$$\mu \frac{\partial n}{\partial x} + \Sigma_t(x) n(x,\mu) = \frac{\Sigma_s(x)}{2} \int_{-1}^1 (1+b\,\mu\mu') n(x,\mu') d\mu' + S(x,\mu)$$
(23)

3.3.2 Sviluppo in armoniche sferiche

Anche la densità angolare dei neutroni può essere espressa nella forma di una serie di polinomi di Legendre con coefficienti dipendenti dalla coordinata spaziale:

$$n(x,\mu) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} n_k(x) P_k(\mu)$$

con

$$n_k(x) = \int_{-1}^{1} n(x,\mu) P_k(\mu) d\mu$$

Si nota, in particolare, che

$$n_0(x) = \int_{-1}^1 n(x,\mu) P_0(\mu) d\mu = \int_{-1}^1 n(x,\mu) d\mu = \rho(x)$$
$$n_1(x) = \int_{-1}^1 n(x,\mu) P_1(\mu) d\mu = \int_{-1}^1 n(x,\mu) \mu d\mu = \int_{-1}^1 n(x,\bar{\Omega}) \Omega_x d\mu = J_x(x) = J(x)$$

Anche la sorgente, in generale anisotropa, viene sviluppata in serie di polinomi di Legendre

$$S(x,\mu) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} s_k(x) P_k(\mu) \qquad s_k(x) = \int_{-1}^{1} S(x,\mu) P_k(\mu) d\mu$$

Sostituendo queste espressioni nella (23), si ottiene:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} \frac{dn_k}{dx} \mu P_k(\mu) + \sum_{t} (x) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} n_k(x) P_k(\mu) =$$

$$= \frac{\sum_{s} (x)}{2} \int_{-1}^{1} (1+b\mu\mu') \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} n_k(x) P_k(\mu') d\mu' + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} s_k(x) P_k(\mu)$$
(24)

Per procedere, consideriamo separatamente i due membri di questa equazione. Facendo uso della formula di ricorrenza per i polinomi di Legendre scritta nella forma:

$$(2k+1)\mu P_k(\mu) = (k+1) P_{k+1}(\mu) + k P_{k-1}(\mu)$$

59

il primo addendo a primo membro della (24) diventa

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} \frac{dn_k}{dx} \mu P_k(\mu) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{dn_k}{dx} [(k+1)P_{k+1}(\mu) + kP_{k-1}(\mu)]$$

Passando a considerare il secondo membro, ricordando la forma assunta dai polinomi di Legendre di ordine 0 ed 1 e facendo uso della proprietà di ortogonalità si ha

$$\int_{-1}^{1} (1+b\mu\mu') \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} n_k(x) P_k(\mu') d\mu' = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} n_k(x) \int_{-1}^{1} [P_0(\mu') + b\mu P_1(\mu')] P_k(\mu') d\mu' =$$
$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} n_k(x) \left[\frac{2}{2k+1} \delta_{0k} + b\mu \frac{2}{2k+1} \delta_{1k} \right] = n_0(x) + b\mu n_1(x) = n_0(x) P_0(\mu) + bn_1(x) P_1(\mu)$$

La (24) può quindi essere riscritta nella forma:

$$\frac{1}{2}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{dn_{k}}{dx}[(k+1)P_{k+1}(\mu)+kP_{k-1}(\mu)]+\sum_{k=0}^{\infty}\frac{2k+1}{2}n_{k}(x)P_{k}(\mu)=$$

$$=\frac{\sum_{s}(x)}{2}[n_{0}(x)P_{0}(\mu)+bn_{1}(x)P_{1}(\mu)]+\sum_{k=0}^{\infty}\frac{2k+1}{2}s_{k}(x)P_{k}(\mu)$$
(25)

A questo punto, moltiplicando ambo i membri della (25) per $P_i(\mu)$ ed integrando su $-1 \le \mu \le 1$, si trova:

$$\frac{l}{2l+1}\frac{dn_{l-1}}{dx} + \frac{l+1}{2l+1}\frac{dn_{l+1}}{dx} + \Sigma_{t}(x)n_{l}(x) = \Sigma_{s}(x)\left[n_{0}(x)\delta_{0l} + \frac{b}{3}n_{1}(x)\delta_{1l}\right] + s_{l}$$

$$(l = 0, 1, ...) \qquad (26)$$

Le (26) costituiscono un sistema di infinite equazioni differenziali ordinarie equivalente all'equazione del trasporto monocinetica (23). L'unica ipotesi introdotta nella loro derivazione riguarda la dipendenza della sezione d'urto differenziale di scattering da $\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$. L'uso dei polinomi di Legendre in vece delle più generali armoniche sferiche è stato possibile a causa della simmetria che si ha in geometria piana intorno all'asse *x*; infatti, le armoniche sferiche si riconducono ai polinomi di Legendre nei casi di simmetria assiale.

3.3.3 Le approssimazioni P_N: il caso particolare della P₁

a) Equazioni P_N e relative condizioni al contorno

La soluzione delle (26) può essere ottenuta praticamente soltanto limitando superiormente il numero di armoniche da considerare nello sviluppo della densità angolare. In particolare, se si tronca lo sviluppo all'N+1-esimo termine si ottiene *l'approssimazione* P_N .

Per quanto riguarda le N+1 condizioni al contorno più appropriate da applicare con le approssimazioni P_N , sorge una difficoltà nel caso in cui il mezzo sia affacciato al vuoto. In tal caso, infatti, il flusso angolare presenta una netta discontinuità passando da $\mu < 0$ a $\mu > 0$, dovendo risultare nullo in uno dei due casi e non nullo nell'altro (questo argomento verrà nuovamente discusso al Par. 4.6). E' ovvio che uno sviluppo in polinomi di Legendre troncato ad un ordine relativamente basso non possa rendere conto adeguatamente di questa discontinuità nel flusso angolare.

Sono state proposte, perciò, alcune ricette che, sebbene non risolvano completamente il problema, permettono di approssimare in qualche modo la vera condizione al contorno. La prima ricetta, nota con il nome di "*condizioni al contorno di Marshak*", consiste nello scegliere un *N dispari* ed imporre (si fa riferimento al caso di uno slab isolato con $0 \le x \le a$):

$$\int_{0}^{1} P_{i}(\mu)\phi(0,\mu)d\mu = \int_{-1}^{0} P_{i}(\mu)\phi(a,\mu)d\mu = 0 \qquad (i = 1,3,5,...,N) \qquad N \ dispari \ (^{16})$$

Questa scelta ha il vantaggio di includere la classica condizione di annullamento della corrente entrante, che si ottiene dalla precedente ponendo i = 1

$$\int_0^1 \mu \phi(0,\mu) d\mu = \int_{-1}^0 \mu \phi(a,\mu) d\mu = 0$$

Una seconda ricetta è quella che va sotto il nome di "*condizioni al contorno di Mark*" che consiste nell'imporre che sia

$\phi(0,\mu_i^+)=0$	$\mu_i^+ > 0 \ (i = 1, 2, 3,, (N+1)/2)$	N dispari
$\phi(a,\mu_i^-)=0$	$\mu_i^- < 0 \ (i = 1, 2, 3,, (N+1)/2)$	N dispari

^{(&}lt;sup>16</sup>) Per maggiore generalità, in queste relazioni si fa uso del flusso anziché della densità.

in cui con μ_i^+ e μ_i^- si sono indicate le radici rispettivamente positive e negative dell'equazione

$$P_{N+1}(\mu) = 0$$

E' stato dimostrato che le condizioni di Mark corrispondono a sostituire lo spazio vuoto all'esterno dello strato con un mezzo puramente assorbente, dal quale, perciò, nessun neutrone può rientrare nello strato.

Nel caso della riflessione pura, invece, non si presenta alcun problema. Infatti, le condizioni

$$\phi(0,\mu) = \phi(0,-\mu)$$
 $(0 < \mu < 1)$ e $\phi(a,\mu) = \phi(a,-\mu)$ $(-1 < \mu < 0)$

si traducono immediatamente nel richiedere che

$$\phi_i(0) = \phi_i(a) = 0 \qquad i \ dispari$$

Queste relazioni esprimono in termini di coefficienti dei polinomi di Legendre la condizione che il flusso angolare agli estremi dello strato sia una funzione pari di μ .

b) Approssimatione P_1

Un caso particolare di rilevante interesse è quello dell'approssimazione P_1 . Per essa si ha:

$$n(x,\mu) \cong \sum_{k=0}^{1} \frac{2k+1}{2} n_k(x) P_k(\mu) = \frac{1}{2} n_0(x) + \frac{3}{2} n_1(x) \mu$$

Le relative equazioni differenziali sono le seguenti:

$$(l = 0) \qquad \qquad \frac{dn_1}{dx} + \sum_t (x)n_0(x) = \sum_s (x)n_0(x) + s_0(x)$$

$$(l=1) \qquad \qquad \frac{1}{3}\frac{dn_0}{dx} + \frac{2}{3}\frac{dn_2}{dx} + \Sigma_t(x)n_1(x) = \frac{b}{3}\Sigma_s(x)n_1(x) + s_1(x)$$

Ponendo $n_2(x) = 0$, come deve essere per ottenere l'approssimazione P₁, ed assumendo che la sorgente indipendente sia isotropa ($s_1(x) = 0$) dalla seconda equazione si ottiene:

$$n_1(x) = -\frac{1}{3\left(\Sigma_t - \overline{\mu} \Sigma_s\right)} \frac{d n_0}{d x}$$

la quale, ricordando che $n_0(x) = \rho(x)$ e $n_1(x) = J(x)$, esprime la legge di Fick della diffusione:

$$J(x) = -D\frac{d\rho}{dx} \qquad D(x) = \frac{1}{3\left(\Sigma_t - \overline{\mu}\Sigma_s\right)} \approx \frac{1}{3\Sigma_s\left(1 - \overline{\mu}\right)}$$
(27)

Introducendo questo risultato nella equazione ottenuta per l = 0, che ha il ruolo di una equazione di continuità, si ottiene infine:

$$\frac{d}{dx}\left(D(x)\frac{d\rho}{dx}\right) - \Sigma_a(x)\rho(x) + s_0(x) = 0$$

Perciò, nelle ipotesi fatte, l'approssimazione P_1 coincide con l'equazione della diffusione con la *correzione trasportistica* per il coefficiente di diffusione data dalla seconda delle (27).

3.4 Forma integrale

3.4.1 Derivazione

L'equazione del trasporto in forma integrale (o equazione di Peierls) può essere ottenuta sia sulla base della forma integrodifferenziale che direttamente da considerazioni legate al bilancio dei neutroni.

Nel caso presente si adotterà il primo dei due procedimenti, restringendoci per semplicità al caso stazionario, che è di maggiore interesse per le applicazioni, sebbene la trattazione del caso transitorio possa essere eseguita in modo analogo senza eccessiva complicazione (v. Bell & Glasstone, 1979, Par. 1.2).

L'equazione integrodifferenziale del trasporto nel caso stazionario può essere scritta nella forma:

 $v\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} n(\vec{r}, v\vec{\Omega}) + v\Sigma_t(\vec{r}, v)n(\vec{r}, v\vec{\Omega}) =$

$$= \iint v' \Sigma_s \left(\vec{r}, v' \vec{\Omega}' \to v \vec{\Omega} \right) n \left(\vec{r}, v' \vec{\Omega}' \right) dv' d\Omega' + S \left(\vec{r}, v \vec{\Omega} \right)$$
(28)

Questa equazione può essere riscritta facendo comparire la densità di emissione

$$q(\vec{r}, v\vec{\Omega}) = \iint v' \Sigma_{s}(\vec{r}, v'\vec{\Omega}' \to v\vec{\Omega}) n(\vec{r}, v'\vec{\Omega}') dv' d\Omega' + S(\vec{r}, v\vec{\Omega})$$

ed esprimendo il primo addendo a primo membro della (28) come una derivata della densità angolare lungo la direzione di moto dei neutroni, cioè

$$\left. - v \frac{d}{d s} n \left(\vec{r} - s \vec{\Omega}, v \vec{\Omega} \right) \right|_{s=0} = v \vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} n \left(\vec{r}, v \vec{\Omega} \right)$$

Si ha allora:

$$-v\frac{d}{ds}n(\vec{r}-s\vec{\Omega},v\vec{\Omega})\Big|_{s=0}+v\Sigma_t(\vec{r},v)n(\vec{r},v\vec{\Omega})=q(\vec{r},v\vec{\Omega})$$

Si può ora notare che in ogni punto della traiettoria percorsa dai neutroni in direzione $\overline{\Omega}$ attraverso \vec{r} (v. Figura 12a) vale una equazione del tipo (28); perciò, considerata la generica posizione individuata dall'ascissa *s*, si può scrivere

$$-\nu \frac{d}{ds} n\left(\vec{r} - s\vec{\Omega}, \nu \vec{\Omega}\right) + \nu \Sigma_{t}\left(\vec{r} - s\vec{\Omega}, \nu\right) n\left(\vec{r} - s\vec{\Omega}, \nu \vec{\Omega}\right) = q\left(\vec{r} - s\vec{\Omega}, \nu \vec{\Omega}\right)$$

Si nota quindi che la precedente, una volta fissate la posizione \vec{r} e la direzione



dell'equazione integrale

 $\vec{\Omega}$, risulta un'equazione differenziale del primo ordine a derivate ordinarie che può essere integrata tra $\vec{r} - s_0 \vec{\Omega}$ e il generico punto $\vec{r} - s \vec{\Omega}$ tramite il procedimento elementare della separazione delle variabili:

$$\frac{d}{ds}n\left(\vec{r}-s\vec{\Omega},v\vec{\Omega}\right) = \Sigma_t\left(\vec{r}-s\vec{\Omega},v\right)n\left(\vec{r}-s\vec{\Omega},v\vec{\Omega}\right) - \frac{1}{v}q\left(\vec{r}-s\vec{\Omega},v\vec{\Omega}\right)$$

che fornisce come soluzione $(^{17})$

$$n\left(\vec{r}-s\vec{\Omega},v\vec{\Omega}\right) = n\left(\vec{r}-s_{0}\vec{\Omega},v\vec{\Omega}\right)e^{-\int_{s}^{s_{0}}\Sigma_{t}\left(\vec{r}-s'\vec{\Omega},v\right)ds'} + \int_{s}^{s_{0}}e^{-\int_{s}^{s'}\Sigma_{t}\left(\vec{r}-s''\vec{\Omega},v\right)ds''}\frac{1}{v}q\left(\vec{r}-s'\vec{\Omega},v\vec{\Omega}\right)ds'$$

Dal momento che lo scopo è qui valutare la densità angolare in \vec{r} , cioè per s = 0, dalla precedente si ottiene

$$n(\vec{r},v\vec{\Omega}) = n(\vec{r}-s_0\vec{\Omega},v\vec{\Omega})e^{-\int_0^{s_0}\Sigma_t(\vec{r}-s'\vec{\Omega},v)ds'} + \int_0^{s_0}e^{-\int_0^{s'}\Sigma_t(\vec{r}-s'\vec{\Omega},v)ds''}\frac{1}{v}q(\vec{r}-s'\vec{\Omega},v\vec{\Omega})ds'$$

Questa equazione può essere interpretata osservando che la densità angolare in \vec{r} viene ottenuta come somma di due contributi:

(¹⁷) Adottando una notazione compatta, si ha:

$$\frac{dn}{ds} = \Sigma_t(s) n(s) - \frac{q(s)}{v}$$

Si cerca una soluzione del tipo

$$n(s) = N(s) e^{\int \Sigma_t(s') ds'}$$

ottenendo

$$\frac{dN}{ds} = -\frac{q(s)}{v}e^{-\int \Sigma_t(s')\,ds'} \qquad \Rightarrow \qquad N(s) = -\int \frac{q(s')}{v}e^{-\int \Sigma_t(s'')\,ds''}\,ds' + C$$

La soluzione particolare cercata per la densità angolare è dunque (si ponga $C = n(s_0)$):

$$n(s) = n(s_0)e^{\int_{s_0}^s \Sigma_t(s')ds'} - e^{\int_{s_0}^s \Sigma_t(s')ds'} \int_{s_0}^s \frac{q(s')}{v}e^{-\int_{s_0}^{s'} \Sigma_t(s'')ds''}ds'$$
$$= n(s_0)e^{\int_{s_0}^s \Sigma_t(s')ds'} - \int_{s_0}^s \frac{q(s')}{v}e^{-\int_{s_0}^{s'} \Sigma_t(s'')ds''} + \int_{s_0}^s \Sigma_t(s'')ds''}ds'$$

da cui si ha infine la forma che risulta più conveniente ai nostri scopi

$$n(s) = n(s_0)e^{-\int_{s}^{s_0}\Sigma_t(s')ds'} + \int_{s}^{s_0}e^{-\int_{s}^{s'}\Sigma_t(s'')ds''}\frac{q(s')}{v}ds''$$

65

- quello dovuto ai neutroni che nel punto $\vec{r} s_0 \vec{\Omega}$ hanno velocità v e direzione di moto $\vec{\Omega}$, moltiplicato per la probabilità non subire collisione (di qualunque tipo) tra $\vec{r} - s_0 \vec{\Omega}$ ed \vec{r} ;
- la somma dei contributi elementari dovuti alla densità di emissione q nei punti $\vec{r} s' \vec{\Omega}$, con $s' \in [0, s_0]$, anch'essi opportunamente moltiplicati per la probabilità di non subire collisioni prima di giungere in \vec{r} .

3.4.2 Caso del corpo isolato

Se si sceglie il punto s_0 sulla frontiera del dominio *V*, come mostrato in Figura 12b, e si impone che

$$n(\vec{r}, v\vec{\Omega}) = 0$$
 per $\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e < 0, \ \vec{r} \in \partial V$

come compete ad un corpo isolato, si ha

$$n\left(\vec{r}-s_{o}\vec{\Omega},v\vec{\Omega}\right)=0$$

per cui si ottiene

$$n\left(\vec{r}, v\vec{\Omega}\right) = \int_{0}^{s_{0}\left(\vec{r}, \vec{\Omega}\right)} e^{-\int_{0}^{s'} \Sigma_{t}\left(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, v\right)ds''} \frac{1}{v} q\left(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, v\vec{\Omega}\right)ds'$$
(29)

in cui si è evidenziata la dipendenza di s_0 da \vec{r} ed $\vec{\Omega}$, in relazione alla particolare geometria del dominio *V*.

La (29) può essere già considerata come una forma integrale dell'equazione integrodifferenziale del trasporto. Non si tratta però ancora di una "vera" equazione integrale in $n(\vec{r}, v\vec{\Omega})$ perché l'integrale è solo monodimensionale (vi è poi, implicitamente, l'integrazione su dv' nella definizione di q) e perciò non copre tutte le variabili della funzione incognita $n(\vec{r}, v\vec{\Omega})$, come ci si aspetterebbe.
Assumiamo allora che <u>lo scattering sia isotropo nel sistema del laboratorio</u> e che <u>le sorgenti indipendenti siano isotrope</u>, e cioè che

$$\Sigma_{s}(\vec{r}, v'\vec{\Omega}' \to v\vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi}\Sigma_{s}(\vec{r}, v' \to v) \qquad \text{e} \qquad S(\vec{r}, v\vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi}S(\vec{r}, v)$$

Anche la densità di emissione risulta perciò isotropa

$$q\left(\vec{r},v\vec{\Omega}\right) \equiv q\left(\vec{r},v\right)$$

Allora, dalla (29), integrando ambo i membri sull'intero angolo solido, si ha:

$$\rho(\vec{r},v) = \int_{4\pi} n(\vec{r},v\vec{\Omega}) d\Omega = \int_{4\pi} d\Omega \int_0^{s_0(\vec{r},\vec{\Omega})} e^{-\int_0^{s'} \Sigma_r(\vec{r}-s''\vec{\Omega},v) ds''} \frac{1}{v} q(\vec{r}-s'\vec{\Omega},v) ds'$$
(30)

A questo punto è conveniente trasformare l'equazione ottenuta facendo uso di alcune utili definizioni. Si pone (v. Figura 13):

$$\vec{r}' = \vec{r} - s' \vec{\Omega} \implies s' = |\vec{r} - \vec{r}'|$$
 e $dV' = s'^2 d\Omega ds'$

e si riconosce che:

$$\vec{\Omega} = \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{s'} = \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \qquad \qquad d\Omega ds' = \frac{dV'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2}$$

In sostanza, si tratta di un passaggio da coordinate polari sferiche a coordinate cartesiane generali, definite senza precisare il riferimento stante la forma vettoriale intrinseca. Si pone inoltre:



Figure 13 – Definizione del volume di integrazione intorno ad \vec{r}'

$$\tau(\vec{r},\vec{r}',v) \equiv \int_0^{s'} \Sigma_t \left(\vec{r}-s''\vec{\Omega},v\right) ds''$$

in cui τ viene detto *cammino ottico*; è interessante notare che il cammino ottico rappresenta il numero di cammini liberi medi (per qualunque tipo di collisione) coperti dalla distanza di integrazione, come appare facilmente considerando il caso omogeneo in cui risulta:

$$\tau(\vec{r}, \vec{r}', v) = \Sigma_t(v) s' = \Sigma_t(v) |\vec{r} - \vec{r}'|$$

L'esponenziale $e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',v)}$ rappresenta perciò la probabilità che un neutrone emesso in \vec{r}' con velocità v (in direzione di \vec{r}) ha di giungere in \vec{r} senza collidere durante il tragitto.

Facendo uso di queste definizioni dalla (30) si ha:

$$\rho(\vec{r},v) = \int_{V} e^{-\tau(\vec{r},\vec{r'},v)} \frac{1}{v} q(\vec{r'},v) \frac{dV'}{|\vec{r}-\vec{r'}|^2}$$

e, ricordando la definizione della densità di emissione e l'ipotesi di isotropia già adottata, si ottiene infine:

$$\rho(\vec{r},v) = \int_{V} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',v)}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^2} \left[\frac{1}{v} S(\vec{r}',v) + \int_{0}^{\infty} \frac{v'}{v} \Sigma_{s}(\vec{r}',v' \to v) \rho(\vec{r}',v') dv' \right] dV'$$
(31)

Nel caso monoenergetico $(v = 1, \Sigma_s(\vec{r}, v' \rightarrow v) \equiv \Sigma_s(\vec{r}))$ si ha:

$$\rho(\vec{r}) = \int_{V} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}')}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^{2}} \left[S(\vec{r}') + \Sigma_{s}(\vec{r}')\rho(\vec{r}') \right] dV'$$
(32)

La formule ottenute coinvolgono un integrale di volume sul dominio *V* (ed, eventualmente, uno sulle velocità) ed esprimono la densità di neutroni nel generico punto \vec{r} come risultato dei contributi della densità di emissione nei volumi elementari dV' in cui si può pensare suddiviso il dominio; come si nota, i contributi vengono pesati in ragione della probabilità di non collidere durante il tragitto e del fattore $1/(4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2)$ (attenuazione geometrica). La (31) e la (32) sono equazioni integrali nel pieno significato del termine.



Figure 14 – Suddivisione del volume V in volumi di controllo

3.4.3 Soluzione numerica per il corpo isolato

L'interpretazione immediata fornita alla fine del paragrafo precedente per le espressioni della densità neutronica ottenute sulla base dell'equazione integrale suggerisce un algoritmo intuitivo per la soluzione approssimata di un problema di trasporto in condizioni stazionarie per un corpo isolato.

Il dominio di integrazione V viene suddiviso in un numero N_V di volumi di controllo (v. Figura 14) nei quali si assume che la densità neutronica e le sorgenti siano uniformi. A ciascun volume viene assegnata una densità neutronica rappresentativa del valore medio reale

$$\rho_i \equiv \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \rho(\vec{r}) dV \cong \rho(\vec{r}) \qquad \vec{r} \in V_i, \ (i = 1, ..., N_V)$$

Utilizzando la (32) per esprimere la densità neutronica, dalla relazione precedente si ha

$$\rho_{i} = \frac{1}{V_{i}} \int_{V_{i}} dV \int_{V} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}')}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^{2}} \left[S(\vec{r}') + \Sigma_{s}(\vec{r}') \rho(\vec{r}') \right] dV' \qquad (i = 1, ..., N_{V})$$

Grazie alla suddivisione del volume V in volumi di controllo, è quindi possibile esprimere anche l'integrale sull'intero volume come somma di integrali sui volumi di controllo

$$\rho_{i} = \frac{1}{V_{i}} \int_{V_{i}} dV \sum_{j=1}^{N_{v}} \int_{V_{j}} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}')}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^{2}} \Big[S_{j} + \Sigma_{sj} \rho_{j} \Big] dV' \quad (i = 1, ..., N_{v})$$

Infine, ponendo

$$A_{i,j} \equiv \frac{1}{V_i} \int_{V_i} dV \int_{V_j} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}')}}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} dV' \ (i, j = 1, ..., N_V)$$

si ottiene un sistema lineare nelle densità nodali

$$\rho_i = \sum_{j=1}^{N_V} A_{i,j} \Sigma_{sj} \rho_j + q_i \qquad (i = 1, \dots, N_V)$$

con

$$q_i = \sum_{j=1}^{N_V} A_{i,j} S_j$$
 (*i* = 1,...,*N_V*)

Il sistema può essere risolto, ad esempio, tramite i metodi (diretti o iterativi) studiati nella prima parte del corso.

E' interessante notare che le costanti $A_{i,j}$ sono legate alla probabilità di prima collisione in V_i di neutroni emessi in V_j . Infatti, per definizione si ha:

$$P_{j \to i}^{(0)} = \int_{V_i} \sum_{V_i} dV \int_{V_j} \frac{e^{-\tau(\vec{r}, \vec{r}')}}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} \frac{1}{V_j} dV' = \sum_{ti} \frac{V_i}{V_j} \frac{1}{V_i} \int_{V_i} dV \int_{V_j} \frac{e^{-\tau(\vec{r}, \vec{r}')}}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} dV' = \sum_{ti} \frac{V_i}{V_j} A_{i,j}$$

Perciò la soluzione approssimata del problema stazionario di trasporto mediante l'equazione integrale richiede, in definitiva, il calcolo delle probabilità di collisione $P_{i\to j}^{(0)}$.

4. Il Metodo delle Armoniche Sferiche

4.1 Una teoria più rigorosa per il caso piano

Nel caso stazionario l'equazione del trasporto dipendente dalla velocità risulta

$$v\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} n(\vec{r}, v\vec{\Omega}) + v\Sigma_t(\vec{r}, v)n(\vec{r}, v\vec{\Omega}) = \iint v'\Sigma_s(\vec{r}, v'\vec{\Omega}' \to v\vec{\Omega})n(\vec{r}, v'\vec{\Omega}')dv'd\Omega' + S(\vec{r}, v\vec{\Omega})$$

E' più conveniente ai nostri scopi utilizzare il flusso angolare anziché la densità

$$\phi\left(\vec{r}, v\vec{\Omega}\right) = v n\left(\vec{r}, v\vec{\Omega}\right)$$

ottenendo

$$\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} \phi(\vec{r}, v\vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, v)\phi(\vec{r}, v\vec{\Omega}) = \iint \Sigma_s(\vec{r}, v'\vec{\Omega}' \to v\vec{\Omega})\phi(\vec{r}, v'\vec{\Omega}')dv'd\Omega' + S(\vec{r}, v\vec{\Omega})$$

Osservato che $\Sigma_s(\vec{r}, \nu'\vec{\Omega}' \rightarrow \nu\vec{\Omega})$ dipende da \vec{r} , ν , ν' e, per le direzioni, solo da $\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}' = \mu_0$ e introducendo come variabile indipendente l'energia al posto della velocità, l'equazione precedente può essere scritta nella forma

$$\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \iint \Sigma_s(\vec{r}, E' \to E, \mu_0) \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') dE' d\Omega' + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$$

Nei problemi piano-paralleli (coordinata normale x) il flusso angolare non dipende da y e z, ma solo da x, e, per quel che riguarda la direzione $\vec{\Omega}$, solo dall'angolo che questa forma con l'asse x o, se si preferisce, dal suo coseno $\mu = \Omega_x$.

L'equazione del trasporto diviene

$$\mu \frac{\partial \phi(x, E, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t(x, E) \phi(x, E, \mu) = \iint \Sigma_s(x, E' \to E, \mu_0) \phi(x, E', \mu') dE' d\Omega' + S(x, E, \mu)$$
(33)

La sezione macroscopica di scattering viene quindi sviluppata in polinomi di Legendre secondo la relazione

$$\Sigma_{s}(x, E' \to E, \mu_{0}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{sl}(x, E' \to E) P_{l}(\mu_{0})$$

in cui è, evidentemente:

$$\Sigma_{sl}(x, E' \to E) = 2\pi \int_{-1}^{1} \Sigma_s(x, E' \to E, \mu_0) P_l(\mu_0) d\mu_0$$

71

Questa volta non ci si fermerà al caso dello scattering linearmente anisotropo, ma vedremo tra poco che le difficoltà aggiuntive saranno tutto sommato modeste.

Sostituendo nella (33) e tenendo conto che $d\Omega' = d\mu' d\varphi'$ si ha:

$$\mu \frac{\partial \phi(x, E, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t(x, E)\phi(x, E, \mu) =$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \int dE' \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^1 \Sigma_{sl}(x, E' \to E) P_l(\mu_0) \phi(x, E', \mu') d\mu' + S(x, E, \mu)$$

Facendo uso del teorema di addizione dei polinomi di Legendre

$$P_{l}(\mu_{0}) = P_{l}(\mu)P_{l}(\mu') + 2\sum_{m=1}^{l} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_{l}^{m}(\mu)P_{l}^{m}(\mu')\cos[m(\varphi-\varphi')]$$
⁽¹⁸⁾

(¹⁸) La notazione $P_l^m(\mu)$ identifica le *funzioni associate di Legendre*, che sono definite sulla base dei polinomi di Legendre tramite la relazione

$$P_l^m(\mu) = (-1)^m (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^m P_l(\mu)}{d\mu^m} \qquad (m = 0, 1, ..., l)$$

Come i polinomi di Legendre, cui si riducono per m = 0 $(P_l^0(\mu) = P_l(\mu))$, anche queste funzioni verificano una condizione di ortogonalità

$$\int_{-1}^{1} P_{l}^{m}(\mu) P_{l'}^{m}(\mu) d\mu = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'}$$

e possono essere ottenute tramite relazioni di ricorrenza, quale ad esempio

$$\mu P_l^m(\mu) = \frac{1}{2l+1} \left[(l-m+1) P_{l+1}^m(\mu) + (l+m) P_{l-1}^m(\mu) \right]$$

Tenendo conto che $\mu = \cos \theta$, le prime funzioni associate di Legendre assumono la forma

$$P_1^{1}(\mu) = -(1-\mu^2)^{1/2} = -\operatorname{sen}\theta \qquad P_2^{1}(\mu) = -3(1-\mu^2)^{1/2}\mu = -3\operatorname{sen}\theta\cos\theta P_2^{2}(\mu) = 3(1-\mu^2) = 3\operatorname{sen}^2\theta$$

Le *armoniche sferiche*, nella loro forma più generale, costituiscono una base ortonormale di funzioni che può, quindi, essere utilizzata per esprimere in forma di serie una qualunque altra funzione sufficientemente regolare di $\theta \in \varphi$. Esse hanno la forma

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \quad \text{ed `e} \quad Y_{l,-m}(\theta,\phi) = (-1)^m Y_{l,m}^*(\theta,\phi)$$

in cui $Y_{lm}^*(\theta, \phi)$ rappresenta il complesso coniugato di $Y_{lm}(\theta, \phi)$. Si noti <u>che per funzioni non</u> <u>dipendenti da</u> ϕ (cioè per m = 0), <u>le armoniche sferiche si riducono ai polinomi di Legendre</u>. Data una qualunque funzione $f(\theta, \phi)$, si ha

$$f(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} f_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) \qquad \qquad f_{lm} = \int_{0}^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} f(\theta, \phi) Y_{lm}^{*}(\theta, \phi) d(\cos \theta)$$

in cui si è fatto uso della condizione di ortogonalità

$$\int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{l'm'}^{*}(\theta, \varphi) d(\cos \theta) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

e tenendo conto che

$$\int_{0}^{2\pi} 2\sum_{m=1}^{l} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_{l}^{m}(\mu) P_{l}^{m}(\mu') \cos[m(\varphi - \varphi')] d\varphi' = 0$$

si ottiene

$$\mu \frac{\partial \phi(x, E, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t(x, E)\phi(x, E, \mu) =$$

= $\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \int dE' \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^1 \Sigma_{sl}(x, E' \to E) P_l(\mu) P_l(\mu')\phi(x, E', \mu')d\mu' + S(x, E, \mu)$

ovvero

$$\mu \frac{\partial \phi(x, E, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t}(x, E)\phi(x, E, \mu) =$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_{l}(\mu) \int \Sigma_{sl}(x, E' \to E) dE' \int_{-1}^{1} P_{l}(\mu')\phi(x, E', \mu') d\mu' + S(x, E, \mu) \qquad (34)$$

A questo punto, si introducono gli sviluppi del flusso angolare e della sorgente indipendente in termini di polinomi di Legendre per i quali si sceglie la forma

$$\phi(x, E, \mu) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{4\pi} \phi_m(x, E) P_m(\mu) \qquad \text{con} \qquad \phi_m(x, E) = 2\pi \int_{-1}^{1} \phi(x, E, \mu) P_m(\mu) d\mu$$
$$S(x, E, \mu) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{4\pi} S_m(x, E) P_m(\mu) \qquad \text{con} \qquad S_m(x, E) = 2\pi \int_{-1}^{1} S(x, E, \mu) P_m(\mu) d\mu$$

Tenendo conto della definizione dei coefficienti dello sviluppo del flusso angolare, dalla (34) si ha:

$$\mu \frac{\partial \phi(x, E, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t}(x, E)\phi(x, E, \mu) =$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} P_{l}(\mu) \int \Sigma_{sl}(x, E' \to E) \phi_{l}(x, E') dE' + S(x, E, \mu) \quad (35)$$

Se lo scattering è linearmente anisotropo nel sistema del laboratorio

$$\Sigma_{sl}(x, E' \to E) = 0 \qquad l \ge 2$$

si ottiene

$$\mu \frac{\partial \phi(x, E, \mu)}{\partial x} + \Sigma_{t}(x, E)\phi(x, E, \mu) =$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int \Sigma_{s0}(x, E' \to E)\phi_{0}(x, E')dE' + \frac{3}{4\pi}\mu \int \Sigma_{s1}(x, E' \to E)\phi_{1}(x, E')dE' + S(x, E, \mu)$$

Invece, se lo scattering è isotropo nel sistema del laboratorio

$$\mu \frac{\partial \phi(x, E, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t(x, E)\phi(x, E, \mu) = \frac{1}{4\pi} \int \Sigma_{s0}(x, E' \to E)\phi_0(x, E')dE' + S(x, E, \mu)$$

E' necessario qui ricordare che

$$\phi_0(x, E) = 2\pi \int_{-1}^1 \phi(x, E, \mu) d\mu = \int_{4\pi} \phi(x, E, \vec{\Omega}) d\Omega = \phi(x, E) = flusso \, scalare$$
$$\phi_1(x, E) = 2\pi \int_{-1}^1 \mu \phi(x, E, \mu) \, d\mu = \int_{4\pi} \Omega_x \phi(x, E, \vec{\Omega}) d\Omega = J_x = corrente$$

4.2 Equazioni P_N per il caso piano con dipendenza dall'energia

Sostituendo gli sviluppi del flusso angolare e della sorgente indipendente nella (35) ed adottando lo stesso indice *n* per tutte le sommatorie si ha

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} \left[\frac{\partial \phi_n(x,E)}{\partial x} \mu P_n(\mu) + \Sigma_t(x,E) \phi_n(x,E) P_n(\mu) \right]$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} P_n(\mu) \int \Sigma_{sn}(x,E' \to E) \phi_n(x,E') dE' + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} S_n(x,E) P_n(\mu)$$

Grazie alla formula di ricorrenza dei polinomi di Legendre

$$(2n+1)\mu P_n(\mu) = (n+1)P_{n+1}(\mu) + nP_{n-1}(\mu)$$

si ottiene

$$\frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{\partial \phi_n(x,E)}{\partial x} \Big[(n+1)P_{n+1}(\mu) + nP_{n-1}(\mu) \Big] + (2n+1)\Sigma_t(x,E)\phi_n(x,E)P_n(\mu) \right\}$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} P_n(\mu) \int \Sigma_{sn}(x,E' \to E) \phi_n(x,E') dE' + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} S_n(x,E)P_n(\mu)$$

Perciò, moltiplicando ambo i membri per $P_l(\mu)$, integrando su $-1 \le \mu \le 1$ e facendo uso della condizione di ortogonalità

$$\int_{-1}^{1} P_{l}(\mu) P_{n}(\mu) d\mu = \frac{2}{2l+1} \delta_{ln}$$

si ottiene

$$\frac{l}{2l+1}\frac{\partial\phi_{l-1}(x,E)}{\partial x} + \frac{l+1}{2l+1}\frac{\partial\phi_{l+1}(x,E)}{\partial x} + \Sigma_{t}(x,E)\phi_{l}(x,E)$$
$$= \int \Sigma_{sl}(x,E'\to E)\phi_{l}(x,E')dE' + S_{l}(x,E) \qquad (l=0,1,...) \quad (36)$$

che rappresenta un sistema di infinite equazioni integrodifferenziali nelle incognite $\phi_l(x, E)$.

L'approssimazione P_N consiste nel troncare lo sviluppo del flusso angolare al termine (N+1)-esimo

$$\phi(x, E, \mu) = \sum_{n=0}^{N} \frac{2n+1}{4\pi} \phi_n(x, E) P_n(\mu) \qquad \text{e} \qquad \phi_n \equiv 0, \quad \forall n > N$$

ottenendo un sistema di N + 1 equazioni (l = 0, 1, ..., N).

<u>Osservazione</u>: Il troncamento dello sviluppo del flusso angolare ai primi N+1 termini implica agli effetti del calcolo il troncamento ai primi N+1 termini dello sviluppo della sezione macroscopica di scattering. Naturalmente, non vale il viceversa, potendosi espandere il flusso angolare ad un qualunque ordine di approssimazione anche con scattering isotropo nel sistema del laboratorio.

Esempio: l'approssimazione P₁ con sorgente isotropa.

Si ha:

$$S(x, E, \mu) = \frac{1}{4\pi} S_0(x, E)$$
 con $S_0(x, E) = 2\pi \int_{-1}^{1} S(x, E, \mu) d\mu$

Per N = 1 risulta $\phi_2 = \phi_3 = ... = 0$ e dalle (36) si ottiene

$$(l=0) \qquad \qquad \frac{\partial \phi_1(x,E)}{\partial x} + \Sigma_t(x,E)\phi_0(x,E) = \int \Sigma_{s0}(x,E' \to E)\phi_0(x,E')dE' + S_0(x,E)$$
(37)

$$(l=1) \qquad \qquad \frac{1}{3} \frac{\partial \phi_0(x,E)}{\partial x} + \Sigma_t(x,E) \phi_1(x,E) = \int \Sigma_{s1}(x,E' \to E) \phi_1(x,E') dE'$$

E' utile adottare l'approssimazione

$$\int \Sigma_{s1}(x, E' \to E) \phi_1(x, E') dE' \cong \int \Sigma_{s1}(x, E \to E') \phi_1(x, E) dE'$$

che può essere giustificata assumendo che l'*IN-SCATTERING* da energie E' > Edovuto alla corrente $J(x, E') = \phi_1(x, E')$ sia approssimativamente uguale all'*OUT*- *SCATTERING* dall'energia E verso energie inferiori. Ciò può essere espresso scrivendo:

$$\int_0^\infty \Sigma_{s1}(x, E' \to E) \phi_1(x, E') dE'$$

$$\cong \int_E^\infty \Sigma_{s1}(x, E' \to E) \phi_1(x, E') dE' = "IN - SCATTERING" da E' > E ad E$$

$$\cong "OUT - SCATTERING" da E ad E' < E = \int_0^E \Sigma_{s1}(x, E \to E') \phi_1(x, E) dE'$$

$$\cong \int_0^\infty \Sigma_{s1}(x, E \to E') \phi_1(x, E) dE'$$

in cui si è assunto trascurabile il contributo dell'up-scattering (cioè, dello scattering che porta i neutroni ad energie superiori a quella iniziale). E' comunque possibile dare una giustificazione più rigorosa di questa approssimazione (v. Bell & Glasstone, 1979).

Facendo quindi uso di questa approssimazione, il secondo membro della seconda delle (37) può essere trasformato come segue:

$$\int \Sigma_{s1}(x, E' \to E) \phi_1(x, E') dE' \cong \int \Sigma_{s1}(x, E \to E') \phi_1(x, E) dE'$$
$$= \phi_1(x, E) \int \Sigma_{s1}(x, E \to E') dE' = \frac{\int \Sigma_{s1}(x, E \to E') dE'}{\int \Sigma_{s0}(x, E \to E') dE'} \int \Sigma_{s0}(x, E \to E') dE' \phi_1(x, E)$$
$$= \frac{\int \int_{-1}^{1} \Sigma_s(x, E \to E', \mu_0) \mu_0 d\mu_0 dE'}{\int \int_{-1}^{1} \Sigma_s(x, E \to E', \mu_0) d\mu_0 dE'} \phi_1(x, E) \Sigma_s(x, E) = \overline{\mu}_0(x, E) \Sigma_s(x, E) \phi_1(x, E)$$

in cui $\overline{\mu}_0$ (o $\overline{\mu}$, in breve) è il coseno medio dell'angolo di scattering nel sistema del laboratorio che, nel caso di un solo nuclide, è dato da $\overline{\mu} = 2/3A$. Facendo uso di questo risultato approssimato nella seconda delle (37) e rimpiazzando ϕ_0 con ϕ e ϕ_1 con *J* si ha

$$J(x,E) = -\frac{1}{3[\Sigma_t(x,E) - \overline{\mu}(x,E)\Sigma_s(x,E)]} \frac{\partial \phi(x,E)}{\partial x} \qquad \begin{pmatrix} legge \ di \ Fick \\ con \ "correzione \ di \ trasporto" \end{pmatrix}$$

Sostituendo quindi nella prima delle (37) si ottiene infine:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{1}{3[\Sigma_t(x,E) - \overline{\mu}(x,E)\Sigma_s(x,E)]} \frac{\partial \phi(x,E)}{\partial x} \right\} - \Sigma_t(x,E)\phi(x,E) + \int \Sigma_{s0}(x,E')\phi(x,E')dE' + S_0(x,E) = 0$$

4.3 Discretizzazione rispetto all'energia

La soluzione delle equazioni (37) può essere ottenuta, come nel caso delle equazioni della diffusione, discretizzando rispetto all'energia. Si ottiene:

$$\frac{d\phi_{1,g}(x)}{dx} + \Sigma_{t,g}(x)\phi_{0,g}(x) = \sum_{g' < g} \Sigma_{s0,g' \to g}(x)\phi_{0,g'}(x) + S_{0,g}(x)$$
$$\frac{1}{3}\frac{d\phi_{0,g}(x)}{dx} + \Sigma_{t,g}(x)\phi_{1,g}(x) = \sum_{g' < g} \Sigma_{s1,g' \to g}(x)\phi_{1,g'}(x) \qquad (g = 1,...,G)$$

Si ottiene un sistema di 2G equazioni differenziali lineari ordinarie risolubili per sostituzione a partire dalle prime due.

Sulla base del *flusso fine* $\{\phi_{0,g}\}_{1}^{G}$ e della *corrente fine* $\{\phi_{1,g}\}_{1}^{G}$ così ottenuti si calcolano le sezioni e i coefficienti di diffusione a grandi gruppi dipendenti da x. E' lo stesso tipo di calcolo per il collassamento delle sezioni visto al Par. 2.3.2, qui svolto con un procedimento più raffinato, che mantiene la dipendenza spaziale rispetto ad x, evitando cioè l'assunzione del flusso asintotico e permettendo quindi di considerare i flussi transitori. Ad esempio, nel caso che si richiedano le costanti a due soli gruppi, veloce (con indice I) e termico (con indice II), si ha:

$$D^{I}(x) = \frac{\left|J^{I}(x)\right|}{\left|\frac{d}{dx}\phi^{I}(x)\right|} = \frac{\left|\sum_{g=1}^{G'}\phi_{1,g}(x)\right|}{\left|\frac{d}{dx}\sum_{g=1}^{G'}\phi_{0,g}(x)\right|} \qquad D^{II}(x) = \frac{\left|J^{II}(x)\right|}{\left|\frac{d}{dx}\phi^{II}(x)\right|} = \frac{\left|\sum_{g=G'+1}^{G}\phi_{1,g}(x)\right|}{\left|\frac{d}{dx}\sum_{g=G'+1}^{G}\phi_{0,g}(x)\right|}$$
$$\Sigma_{t}^{I}(x) = \frac{\sum_{g=1}^{G'}\Sigma_{t,g}(x)\phi_{0,g}(x)}{\sum_{g=1}^{G'}\phi_{0,g}(x)} \qquad \Sigma_{t}^{II}(x) = \frac{\sum_{g=G'+1}^{G}\Sigma_{t,g}(x)\phi_{0,g}(x)}{\sum_{g=G'+1}^{G}\phi_{0,g}(x)}$$
$$\Sigma_{s}^{I\to II}(x) = \sum_{g=G'+1}^{G}\sum_{g=G'+1}^{G'}\Sigma_{s,g'\to g}(x)\phi_{0,g'}(x) = \sum_{g=G'+1}^{G}\sum_{g=G'+1}^{$$

in cui valori tipici per i numeri di gruppi fini sono G = 100 e $G^{T} = 40$.

La dipendenza dalla variabile spaziale *x* viene risolta, al solito, discretizzando l'intervallo di integrazione. Perciò, le derivate spaziali che compaiono nelle formule precedenti devono essere intese come opportuni rapporti incrementali.

4.4 Dipendenza spaziale asintotica: le approssimazioni B_N

Nel caso di regioni omogenee, tuttavia, è possibile adottare un procedimento diverso dalla discretizzazione spaziale basato su di una semplice approssimazione asintotica.

Si osserva dapprima che, ai fini dei calcoli spettrali, una dipendenza spaziale del flusso *di tipo esponenziale* (per mezzi non moltiplicanti) o *di tipo sinusoidale* (per mezzi moltiplicanti) può rappresentare ragionevolmente le fughe (in geometria piana e non considerando la perturbazione spettrale vicino alle interfacce con le altre regioni). Perciò, per un mezzo moltiplicante si sceglie un andamento esponenziale immaginario, che risulta più comodo nei calcoli avendo cura di considerare solo la parte reale, sia per il flusso che per la sorgente (considerata isotropa):

$$\phi(x,\mu,E) = \phi(\mu,E)e^{-iBx} \qquad S(x,\mu,E) = \frac{1}{4\pi}S_0(E)e^{-iBx}$$

Conseguentemente, per i coefficienti di Legendre si ha

$$\varphi_n(x,E) = \varphi_n(E)e^{-iBx}$$

Con queste definizioni, dalla (35) (dividendo ambo i membri per il fattore comune e^{-iBx}) si ottiene

$$[-iB\mu + \Sigma_{t}(E)]\phi(\mu, E) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} P_{n}(\mu) \int \Sigma_{sn}(E' \to E)\phi_{n}(E')dE' + \frac{1}{4\pi}S_{0}(E)$$
(38)

A questo punto si può procedere in due modi diversi.

1. Si può sostituire lo sviluppo del flusso in termini di polinomi di Legendre a primo membro della (38) tramite la relazione

$$\varphi(\mu, E) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} \varphi_n(E) P_n(\mu)$$

Utilizzando, come al solito, al posto di $\mu P_n(\mu)$ l'espressione equivalente data dalla relazione $\frac{n+1}{2n+1}P_{n+1}(\mu) + \frac{n}{2n+1}P_{n-1}(\mu)$, moltiplicando ambo i membri per $P_i(\mu)$ ed integrando su $-1 \le \mu \le 1$ si ottengono <u>le equazioni P_N in forma</u> <u>asintotica</u> con esponenziale immaginario:

$$-iB\left[\frac{l}{2l+1}\varphi_{l-1}(E) + \frac{l+1}{2l+1}\varphi_{l+1}(E)\right] + \Sigma_{t}(E)\varphi_{l}(E) = \int \Sigma_{sl}(E' \to E)\varphi_{l}(E')dE' + \delta_{0l}S_{0}(E) \quad (39)$$

$$(l = 0, 1, ..., N)$$

Prima di inserire lo sviluppo in polinomi di Legendre a primo membro della (38) e di moltiplicare scalarmente per P_l(μ), si dividono ambo i membri per Σ_l(E)-iBμ. Abbiamo così:

$$\varphi(\mu, E) = \frac{1}{\Sigma_t(E) - iB\mu} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} P_n(\mu) \int \Sigma_{sn}(E' \to E) \varphi_n(E') dE' + \frac{1}{4\pi} \frac{S_0(E)}{\Sigma_t(E) - iB\mu}$$
(40)

e, finalmente, moltiplicando scalarmente per $P_l(\mu)$

$$\int_{-1}^{1} \varphi(\mu, E) P_{l}(\mu) d\mu = \frac{\varphi_{l}(E)}{2\pi} =$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} \int_{-1}^{1} \frac{P_{n}(\mu)P_{l}(\mu)}{\Sigma_{t}(E) - iB\mu} d\mu \int \Sigma_{sn}(E' \to E) \varphi_{n}(E') dE' + \frac{S_{0}(E)}{4\pi} \int_{-1}^{1} \frac{P_{l}(\mu)}{\Sigma_{t}(E) - iB\mu} d\mu$$

da cui, moltiplicando per $2\pi \Sigma_t(E)$ ad ambo i membri

$$\Sigma_{t}(E)\varphi_{l}(E) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^{1} \frac{P_{n}(\mu)P_{l}(\mu)}{1-i\frac{B}{\Sigma_{t}(E)}\mu} d\mu \int \Sigma_{sn}(E' \to E)\varphi_{n}(E')dE' + \frac{S_{0}(E)}{2} \int_{-1}^{1} \frac{P_{l}(\mu)P_{0}(\mu)}{1-i\frac{B}{\Sigma_{t}(E)}\mu} d\mu$$

Introducendo i coefficienti

$$A_{l,n}(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \frac{P_{l}(\mu)P_{n}(\mu)}{1 - iz\mu} d\mu$$

si ha

$$\Sigma_{t}(E)\varphi_{l}(E) = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)A_{l,n}\left(\frac{B}{\Sigma_{t}(E)}\right) \int \Sigma_{sn}(E' \to E)\varphi_{n}(E')dE' + A_{l,0}\left(\frac{B}{\Sigma_{t}(E)}\right)S_{0}(E)$$
(41)

Le funzioni $A_{l,n}$ verificano una condizione di ricorrenza che ne permette il calcolo

$$\frac{1}{iz}(2n+1)A_{l,n}(z) - (n+1)A_{l,n+1}(z) - lA_{l,n-1}(z) = \frac{\delta_{l,n}}{iz}$$

ed è

$$A_{n,l} = A_{l,n} \quad \mathbf{e} \qquad A_{0,0}(z) = \frac{1}{z} \operatorname{arctg} z \approx 1 - \frac{z^2}{3} + \frac{z^4}{5} - \frac{z^6}{7} + \dots \ per \ z \approx 0$$
$$A_{0,1}(z) = A_{1,0}(z) = \frac{1}{iz} [A_{0,0}(z) - 1] \qquad A_{1,1}(z) = \frac{1}{iz} A_{0,1}(z)$$

L'<u>approssimazione B_N</u> così ottenuta consiste nel troncare il sistema di infinite equazioni integrali accoppiate costituito dalle (41) ad l = N cioè, al solito, alle prime N+1 equazioni. Ma ciò avviene automaticamente, se si pone $\Sigma_{sn}(E' \rightarrow E) = 0$ per n > N. Le equazioni B_N, grazie alla loro stessa struttura, convergono più rapidamente delle corrispondenti P_N. E' possibile, infatti, notare che nel caso di scattering isotropo si ottiene una espressione esatta per φ_0 e anche le componenti di ordine superiore possono essere ottenute esattamente. Perciò, è lecito supporre che anche per scattering anisotropo le equazioni B_N convergano molto rapidamente.

Pertanto, per N = 0 (approximazione B₀) per l = 0 si ha l'equazione

$$\Sigma_{t}(E)\varphi_{0}(E) = A_{0,0}\left(\frac{B}{\Sigma_{t}(E)}\right) \left[\int \Sigma_{s0}(E' \to E)\varphi_{0}(E')dE' + S_{0}(E)\right]$$
(42)

e quest'unica equazione sarebbe esatta; per avere oltre al flusso scalare φ_0 anche quello angolare basta ricorrere alla (40) che in questo caso fornisce

$$\varphi(\mu, E) = \frac{1}{\Sigma_t(E) - iB\mu} \left[\frac{1}{4\pi} \int \Sigma_{s0}(E' \to E) \varphi_0(E') dE' + \frac{S_0(E)}{4\pi} \right]$$
(43)

In alternativa è possibile ricavare tutti i momenti successivi $\varphi_1(E)$ dalle (41) il cui secondo membro coinvolge sempre le sole funzioni φ_0 e S_0 .

Per N = 1 (approssimazione B₁) si trova, con qualche calcolo, il sistema di equazioni

$$\Sigma_{t}(E)\varphi_{0}(E) - iB\varphi_{1}(E) = \int \Sigma_{s0}(E' \to E)\varphi_{0}(E')dE' + S_{0}(E)$$

$$g\left(\frac{B}{\Sigma_{t}(E)}\right)\Sigma_{t}(E)\varphi_{1}(E) - \frac{iB}{3}\varphi_{0}(E) = \int \Sigma_{s1}(E' \to E)\varphi_{1}(E')dE'$$

$$(44)$$

dove

80

$$g(z) = \frac{z^2}{3} \frac{A_{0,0}(z)}{1 - A_{0,0}(z)} \qquad (\approx 1 - \frac{z^2}{3} \text{ per } z \approx 0)$$

<u>Osservazione 1</u>. E' facile verificare che per $z \to 0$, cioè $g(z) \to 1$ le equazioni (44) tendono a quelle dell'approssimazione P₁ nella forma "trasformata alla Fourier" (39) che abbiamo chiamato "asintotica". Ma per z qualunque, le B₁ manifestano la loro superiorità: se lo scattering fosse linearmente anisotropo, cioè Σ_{s0} , $\Sigma_{s1} \neq 0$, $\Sigma_{sn} = 0$ per $n \ge 2$, il sistema (44) sarebbe esatto, cioè fornirebbe valori esatti di φ_0 e φ_1 da cui si potrebbe ricostruire tramite la (40) il flusso angolare esatto.

<u>Osservazione 2</u>. Il flusso φ_0 fornito dalla (42) è reale. Nella (43) poiché il fattore entro parentesi quadre è reale, basta prendere la parte reale di $(\Sigma_t - iB\mu)^{-1}$ che risulta $\Sigma_t / (\Sigma_t^2 + B^2 \mu^2)$. Nelle equazioni (44) si impone che φ_0 sia reale e, posto $\varphi_1 = iJ$, ci si accorge che il sistema scritto nelle incognite $\varphi \equiv \varphi_0$ e *J*, è reale.

Nella risoluzione numerica si opera come già visto per le equazioni P_N , discretizzando a molti gruppi e calcolando poi le costanti a pochi gruppi. Ad esempio:

$$D^{I} = \left| \frac{J^{I}}{B\phi^{I}} \right| = \left| \frac{\sum_{g=1}^{G^{I}} J_{g}}{B\sum_{g=1}^{G^{I}} \phi_{g}} \right|$$

eccetera.

<u>Osservazione 3.</u> L'approssimazione B_N , sebbene più raffinata delle P_N per quel che concerne il trattamento energetico, richiede successivamente il teorema di separabilità e si inquadra ancora, di conseguenza in uno schema di flusso asintotico. Le equazioni P_N sebbene anch'esse ridotte a maggior semplicità nel caso asintotico, non esigono tale approssimazione. Resta ovviamente il problema della loro effettiva soluzione rispetto alla variabile spaziale *x*. La cosa interessante è che ciò possa realizzarsi senza troppa fatica. Ciò sarà dimostrato nel paragrafo seguente.

4.5 Riduzione delle equazioni P_N a sistemi di tipo diffusivo

Le equazioni ottenute tramite le approssimazioni P_N possono essere ridotte a sistemi di equazioni di tipo diffusivo a più gruppi.

A titolo di esempio, ciò può essere mostrato nel caso dell'approssimazione P_3 con scattering e sorgente indipendente isotropi.

In queste ipotesi, le equazioni P₃ assumono la forma:

$$\frac{dn_1}{dx} + \Sigma_a n_0 = s_0$$

$$\frac{1}{3}\frac{dn_0}{dx} + \frac{2}{3}\frac{dn_2}{dx} + \Sigma_t n_1 = 0$$

$$\frac{2}{5}\frac{dn_1}{dx} + \frac{3}{5}\frac{dn_3}{dx} + \Sigma_t n_2 = 0$$

$$\frac{3}{7}\frac{dn_2}{dx} + \Sigma_t n_3 = 0$$

Ponendo $f_1 = n_0 + 2n_2$ e $f_2 = n_2$ si ottiene

$$\frac{dn_1}{dx} + \Sigma_a f_1 = s_0 + 2\Sigma_a f_2$$

$$\frac{1}{3} \frac{df_1}{dx} + \Sigma_t n_1 = 0$$

$$\frac{2}{5} \frac{dn_1}{dx} + \frac{3}{5} \frac{dn_3}{dx} + \Sigma_t f_2 = 0$$

$$\frac{3}{7} \frac{df_2}{dx} + \Sigma_t n_3 = 0$$

Dalla seconda e la quarta delle precedenti relazioni si ha:

$$n_1 = -\frac{1}{3\Sigma_t} \frac{df_1}{dx} \qquad \qquad n_3 = -\frac{3}{7\Sigma_t} \frac{df_2}{dx}$$

Eliminando $\frac{dn_1}{dx}$ nella terza equazione, facendo uso della prima e utilizzando le due precedenti relazioni si ha:

$$-\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{3\Sigma_t}\frac{df_1}{dx}\right) + \Sigma_a f_1 - 2\Sigma_a f_2 = s_0$$

$$-\frac{d}{dx}\left(\frac{3}{7\Sigma_t}\frac{df_2}{dx}\right) + \frac{1}{3}\left(5\Sigma_t + 4\Sigma_a\right)f_2 - \frac{2}{3}\Sigma_a f_1 = -\frac{2}{3}s_0$$

Perciò, ponendo:

$$D_{1} = \frac{1}{3\Sigma_{t}} \qquad D_{2} = \frac{3}{7\Sigma_{t}} \qquad \Sigma_{r1} = \Sigma_{a} \qquad \Sigma_{r2} = \frac{1}{3} \left(5\Sigma_{t} + 4\Sigma_{a} \right)$$
$$\Sigma_{s,2 \to 1} = 2\Sigma_{a} \qquad \Sigma_{s,1 \to 2} = \frac{2}{3}\Sigma_{a}$$

si giunge al sistema

$$\frac{d}{dx}\left(D_1\frac{df_1}{dx}\right) - \sum_{r_1}f_1 + \sum_{s,2\to 1}f_2 + s_0 = 0$$
$$\frac{d}{dx}\left(D_2\frac{df_2}{dx}\right) - \sum_{r_2}f_2 + \sum_{s,1\to 2}f_1 - \frac{2}{3}s_0 = 0$$

Poiché il sistema ottenuto è "a due gruppi" con "up-scattering" (o con "fissioni") la sua soluzione deve necessariamente essere di tipo iterativo (iterazioni "esterne" più, eventualmente, iterazioni "interne"). Perciò, definita una stima iniziale di $f_2 = f_2^{(0)}$, si risolve la prima equazione ottenendo $f_1 = f_1^{(0)}$ che viene introdotta nella seconda equazione risolvendo per $f_2 = f_2^{(1)}$ e così via.

Il procedimento visto per il caso N = 3 può essere generalizzato per N > 3. Si conclude, perciò, che gli algoritmi introdotti per le equazioni della diffusione a più gruppi possono (in generale) essere utilizzati anche per risolvere il sistema delle equazioni delle armoniche sferiche.

4.6 Cenno alle approssimazioni DP_N

Come già notato al Par. 3.4.3, lo sviluppo del flusso angolare in polinomi di Legendre si manifesta inadeguato a trattare in maniera appropriata la discontinuità esistente ad una interfaccia piana per $\mu = 0$.

La situazione è schematicamente descritta in Figura 15, in cui si nota che i neutroni che contribuiscono al flusso angolare all'interfaccia per $\mu > 0$ provengono interamente dalla regione di sinistra mentre quelli che contribuiscono al flusso angolare per $\mu < 0$ provengono interamente dalla



Figura 15 – Flusso angolare ad una interfaccia piana

regione di destra. Ciò comporta che, essendo in generale le due regioni diverse sia per composizione che per distribuzione di sorgenti, il flusso angolare potrà essere soggetto ad una discontinuità per $\mu = 0$. Sulla base di un ragionamento analogo, è invece possibile dimostrare che per una interfaccia curva ciò non accade.

La presenza di questa discontinuità è ancora più evidente se si fa riferimento ad una interfaccia con il vuoto (condizione al contorno di superficie libera). In tal caso, infatti, è necessario imporre (si assuma che il vuoto costituisca la regione di destra):

$$\phi(x_s,\mu)=0\qquad \qquad \mu<0$$

Allo scopo di evitare questa difficoltà, J.J. Yvon ha proposto di utilizzare due diverse espansioni del flusso angolare negli intervalli $-1 \le \mu \le 0$ e $0 \le \mu \le 1$. Considerando per semplicità il caso monocinetico, si pone:

$$\phi(x,\mu) = \sum_{n=0}^{N} (2n+1) \left[\phi_n^+(x) P_n^+(2\mu-1) + \phi_n^-(x) P_n^-(2\mu+1) \right]$$

in cui

$$P_n^+(2\mu-1) = \begin{cases} P_n(2\mu-1) & \mu \ge 0\\ 0 & \mu < 0 \end{cases} \qquad P_n^-(2\mu+1) = \begin{cases} P_n(2\mu+1) & \mu < 0\\ 0 & \mu \ge 0 \end{cases}$$

Sostituendo questa espansione nell'equazione stazionaria del trasporto monocinetica in geometria piana con scattering generalmente anisotropo (per semplicità si assume nulla la sorgente indipendente)

$$\mu \frac{\partial \phi(x,\mu)}{\partial x} + \Sigma_t(x)\phi(x,\mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \Sigma_{sl}(x) P_l(\mu) \int_{-1}^{1} \phi(x,\mu') P_l(\mu') d\mu$$

e moltiplicando ambo i membri per $P_m^+(2\mu-1)$ o $P_m^-(2\mu+1)$ e integrando su $-1 \le \mu \le 1$ si ha:

$$\frac{m}{2m+1}\frac{d\phi_{m-1}^{\pm}(x)}{dx} + \frac{m+1}{2m+1}\frac{d\phi_{m+1}^{\pm}(x)}{dx} \pm \frac{d\phi_{m}^{\pm}(x)}{dx} + 2\Sigma_{t}(x)\phi_{m}^{\pm}(x)$$
$$= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)p_{lm}^{\pm}\Sigma_{sl}(x)\sum_{n=0}^{N} (2n+1)\left[p_{ln}^{+}\phi_{n}^{+}(x) + p_{ln}^{-}\phi_{n}^{-}(x)\right]$$
(45)

in cui ± identifica il segno + o - a seconda che l'equazione sia stata ottenuta moltiplicando per $P_m^+(2\mu-1)$ o $P_m^-(2\mu+1)$ e si è posto

$$p_{lm}^{+} = \int_{-1}^{1} P_{l}(\mu) P_{m}^{+}(2\mu - 1) d\mu \qquad \qquad p_{lm}^{-} = \int_{-1}^{1} P_{l}(\mu) P_{m}^{-}(2\mu + 1) d\mu$$

Troncando lo sviluppo del flusso angolare all'(N+1)-esimo termine e considerando solo le prime N+1 equazioni (45) si ha l'approssimazione doppia-P_N o DP_{N.}

In molti casi di interesse quest'approssimazione è molto migliore della corrispondente P_N . In particolare, ponendo

$$\phi_n^+(0) = 0$$
 e $\phi_n^-(a) = 0$ $(n = 0, 1, ...)$

è possibile soddisfare in modo appropriato le condizioni al contorno per l'interfaccia col vuoto agli estremi di uno strato (in x = 0 ed x = a).

Il metodo DP_N richiede perciò che in ogni punto del sistema sia possibile individuare una direzione (un verso) che punti verso l'esterno e una direzione (verso) opposta che si dirige verso l'interno. Ciò è possibile solo per i problemi monodimensionali. E' vero, peraltro, che anche il metodo P_N (ma questa volta solo per motivi di complicazione "tecnica" delle equazioni risultanti) può essere esteso a più dimensioni con molta difficoltà, sebbene recentemente siano stati compiuti notevoli progressi.

5. L'Equazione Integrale

5.1 Problemi monodimensionali e bidimensionali per corpo isolato

5.1.1 Caso 1D

Si considera uno strato isolato compreso nell'intervallo $0 \le x \le a$ con scattering e sorgente indipendente isotropi. In coordinate cartesiane, l'equazione del trasporto in forma integrale dipendente dall'energia

$$\phi(\vec{r},E) = \int_{V} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',E)}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^2} \bigg[\int_0^\infty \Sigma_{s0}(\vec{r}',E'\to E) \phi(\vec{r}',E') dE' + S_0(\vec{r}',E) \bigg] dV'$$

diventa

$$\phi(x,E) = \int_{V} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',E)}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^2} \left[\int_0^\infty \Sigma_{s0}(x',E'\to E) \phi(x',E') dE' + S_0(x',E) \right] dx' dy' dz'$$

ovvero

$$\phi(x,E) = \int_0^a dx' \left[\int_0^\infty \Sigma_{s0}(x',E'\to E) \phi(x',E') dE' + S_0(x',E) \right] \int_{-\infty}^\infty dy' \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',E)}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^2} dz'$$

A questo punto è conveniente cambiare variabili di integrazione in modo da trarre vantaggio dalle caratteristiche monodimensionali del problema.

Senza ledere la generalità si può scegliere il sistema di riferimento in modo che risulti $\vec{r} = \{x, 0, 0\}$, mentre è, in generale, $\vec{r}' = \{x', y', z'\}$ (v. Figura 16). Si introducono quindi le coordinate polari nel piano y'z', con raggio vettore p, dato da

$$p = \sqrt{y'^2 + z'^2}$$

ed anomalia φ . Si ha quindi

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',E)}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^2} dz' = \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{\infty} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',E)}}{4\pi [(x-x')^2 + p^2]} p \, dp$$

Conviene quindi sostituire a p la variabile t definita come:

$$t \equiv \frac{1}{|\cos\theta|} = \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{|x - x'|} = \frac{\sqrt{(x - x')^2 + p^2}}{|x - x'|}$$
(1 \le t < \infty)

da cui si ottiene



Figura 16 – Sistema di riferimento per il caso monodimensionale

$$dt = \frac{1}{|x - x'|} \frac{p \, dp}{\sqrt{(x - x')^2 + p^2}} \implies \frac{dt}{t} = \frac{p \, dp}{(x - x')^2 + p^2} = \frac{p \, dp}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2}$$

e infine

$$p\,dp\,d\varphi = |\vec{r} - \vec{r}\,'|^2 \,\frac{dt}{t} d\varphi$$

Risulta perciò:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',E)}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^2} dz' = \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{\infty} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',E)}}{4\pi [(x-x')^2 + p^2]} p dp = \frac{1}{2} \int_{1}^{\infty} e^{-\tau(x,x',E)t} \frac{dt}{t}$$

in cui si è fatto uso della relazione

$$\tau(\vec{r},\vec{r}',E) = \frac{\tau(x,x',E)}{|\cos\theta|} = \tau(x,x',E)t \quad (^{19})$$

Infine, definendo gli esponenziali-integrali

$$E_n(z) = \int_1^\infty e^{-zt} \frac{dt}{t^n}$$

si ha

$$\phi(x,E) = \frac{1}{2} \int_0^a E_1[\tau(x,x',E)] \left[\int_0^\infty \Sigma_{s0}(x',E' \to E) \phi(x',E') dE' + S_0(x',E) \right] dx'$$

Nel caso monocinetico, si ottiene:

 $^(^{19})$ In sostanza, ricordando la definizione del cammino ottico, si riconosce che il fatto che la traiettoria dei neutroni sia inclinata rispetto all'asse x non fa che aumentare di un fattore $1/|\cos \theta|$ il numero di liberi cammini medi coinvolti nel tragitto e quindi la probabilità di subire collisione.

$$\phi(x) = \frac{1}{2} \int_0^a E_1[\tau(x, x')] [\Sigma_{s0}(x')\phi(x') + S_0(x')] dx'$$

Se lo strato [0,a] è di materiale omogeneo, allora risulta $\tau(x,x') = \Sigma_t |x-x'|$ e quindi

$$\phi(x) = \frac{1}{2} \int_0^a E_1 [\Sigma_t | x - x' |] [\Sigma_{s0}(x')\phi(x') + S_0(x')] dx'$$

E scegliendo il libero cammino medio come unità di lunghezza (cioè, sostituendo alla coordinata *x* la coordinata $\tau = \Sigma_t x$) si ha

$$\phi(\tau) = \frac{1}{2\Sigma_{\iota}} \int_0^{\Sigma_{\iota} a} E_1 (|\tau - \tau'|) [\Sigma_{s0}(\tau')\phi(\tau') + S_0(\tau')] d\tau'$$

<u>Osservazione.</u> A questa relazione si può giungere anche nel caso di mezzo non omogeneo. Ponendo

$$x \to \tau(x) = \int_0^x \Sigma_t(x'') dx'' \qquad d\tau = \Sigma_t(x) dx$$

ed esprimendo il flusso in funzione di τ invece che in funzione di x, si ha

$$\phi(\tau) = \frac{1}{2} \int_0^{\tau_a} E_1 (|\tau - \tau'|) [c(\tau')\phi(\tau') + s_0(\tau')] d\tau'$$

in cui è

$$c = \frac{\Sigma_{s0}}{\Sigma_t}$$
 e $s_0 = \frac{S_0}{\Sigma_t}$

che coincide con la relazione ottenuta nel caso del mezzo omogeneo quando si sostituisca a $\Sigma_t a$ la forma più generale $\tau_a = \int_0^a \Sigma_t(x) dx$.

5.1.2 Caso 2D

Si considera un cilindro infinito ed isolato (cioè, circondato dal vuoto) indicato con V che ha come intersezione sul piano z=0 la superficie A_0 (non necessariamente circolare). Si assume inoltre che <u>lo scattering e la sorgente</u> <u>indipendente siano isotropi</u>. Se le costanti del problema dipendono solo da x ed y, l'equazione del trasporto in forma integrale dipendente dall'energia diventa

$$\phi(x, y, E) = \int_{V} \frac{e^{-\tau(\vec{r}, \vec{r}', E)}}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} \left[\int_{0}^{\infty} \Sigma_{s0}(x', y', E' \to E) \phi(x', y', E') dE' + S_{0}(x', y', E) \right] dx' dy' dz'$$

89

ovvero

$$\phi(x, y, E) = \int_{A_0} dx' dy' \left[\int_0^\infty \Sigma_{s0}(x', y', E' \to E) \phi(x', y', E') dE' + S_0(x', y', E) \right] \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{-\tau(\vec{r}, \vec{r}', E)}}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} dz'$$

Anche per il caso bidimensionale un'opportuna scelta del sistema di riferimento permette di semplificare la trattazione (v. Figura 17). Si pone, in particolare:

$$\vec{r} = \vec{r}_0 \equiv \{x, y, 0\}$$
 e $\vec{r}' \equiv \{x', y', z'\}$

e risulta

$$R_{0} = \sqrt{(x - x')^{2} + (y - y')^{2}} \qquad \qquad R(R_{0}, z') = \sqrt{R_{0}^{2} + {z'}^{2}} = \frac{R_{0}}{\cos \theta}$$

da cui

$$z' = R_0 tg\theta \implies dz' = \frac{R_0 d\theta}{\cos^2 \theta}$$

Nel caso particolare del mezzo omogeneo è $\Sigma_t = cost$. e quindi

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',E)}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^2} dz' = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\Sigma_t \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + z'^2}}}{4\pi [(x-x')^2 + (y-y')^2 + z'^2]} dz' = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\Sigma_t R(R_0,z')}}{4\pi R^2(R_0,z')} dz'$$
$$= \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{e^{-\Sigma_t R_0/\cos\theta}}{4\pi (R_0/\cos\theta)^2} \frac{R_0 d\theta}{\cos^2 \theta} = \frac{2}{4\pi R_0} \int_{0}^{\pi/2} e^{-\Sigma_t R_0/\cos\theta} d\theta = \frac{1}{2\pi R_0} Ki_1(\Sigma_t R_0)$$







in cui si è fatto uso della definizione delle funzioni di Bickley-Naylor:

$$Ki_{n}(x) = \int_{0}^{\pi/2} e^{-x/\cos\theta} (\cos\theta)^{n-1} d\theta = \int_{1}^{\infty} e^{-xt} \frac{dt}{t^{n} \sqrt{t^{2} - 1}} \qquad (n = 1, 2, 3, ...)$$
⁽²⁰⁾

Nel caso generale in cui il mezzo non sia omogeneo si ha, comunque:

$$\tau(\vec{r},\vec{r}',E) = \frac{\tau(\vec{r}_0,\vec{r}_0',E)}{\cos\theta}$$

per cui procedendo in modo analogo, si ottiene:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',E)}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^2} dz' = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\pi/2} \frac{e^{-\tau(\vec{r}_0,\vec{r}_0',E)/\cos\theta}}{\left(|\vec{r}_0-\vec{r}_0|/\cos\theta\right)^2} \frac{|\vec{r}_0-\vec{r}_0|/d\theta}{\cos^2\theta}$$
$$= \frac{1}{2\pi |\vec{r}_0-\vec{r}_0|} \int_{0}^{\pi/2} e^{-\tau(\vec{r}_0,\vec{r}_0',E)/\cos\theta} d\theta = \frac{1}{2\pi |\vec{r}_0-\vec{r}_0|} Ki_1[\tau(\vec{r}_0,\vec{r}_0',E)]$$

Si conclude, perciò,

$$\phi(\vec{r}_{0}, E) = \int_{A_{0}} \frac{Ki_{1}[\tau(\vec{r}_{0}, \vec{r}_{0}', E)]}{2\pi |\vec{r}_{0} - \vec{r}_{0}|} \Big[\int_{0}^{\infty} \Sigma_{s0}(\vec{r}_{0}', E' \to E) \phi(\vec{r}_{0}', E') dE' + S_{0}(\vec{r}_{0}', E) \Big] dA_{0}'$$

In particolare, nel caso monocinetico si ottiene:

$$\phi(\vec{r}_0) = \int_{A_0} \frac{Ki_1[\tau(\vec{r}_0, \vec{r}_0')]}{2\pi |\vec{r}_0 - \vec{r}_0'|} [\Sigma_{s0}(\vec{r}_0')\phi(\vec{r}_0') + S_0(\vec{r}_0')] dA_0'$$

E, ancora, se il mezzo è anche omogeneo:

$$\phi(\vec{r}_0) = \int_{A_0} \frac{Ki_1[\Sigma_t | \vec{r}_0 - \vec{r}_0']}{2\pi | \vec{r}_0 - \vec{r}_0' |} [\Sigma_{s0} \phi(\vec{r}_0') + S_0(\vec{r}_0')] dA_0'$$

$$Ki_{n}(x) = \int_{x}^{\infty} Ki_{n-1}(x') dx' \qquad (n = 1, 2, ...)$$

Infatti, $K_0(x) = \int_1^\infty e^{-xt} \frac{dt}{\sqrt{t^2 - 1}}$ e basta effettuare l'integrazione su x.

^{(&}lt;sup>20</sup>) Definendo $Ki_0(x) = K_0(x)$, con K_0 funzione di Bessel modificata di ordine 0 e seconda specie, si può dimostrare che:

Le funzioni di Bickley-Naylor sono state tabulate e ne esistono espressioni approssimate (aventi la forma di prodotti di polinomi per esponenziali) che sono state programmate in modo efficiente.

5.2 Lo spettro termico nella cella

5.2.1 Il problema della omogenizzazione delle costanti termiche

Allo scopo di ottenere valori accurati delle costanti termiche nella cella, cilindricizzata secondo l'approssimazione di Wigner-Seitz, occorre ottenere un accurato andamento spazio-energetico del flusso.

A tale scopo, è necessario tenere conto che:

- non c'è separabilità spazio-energetica del flusso; i metodi elementari a un gruppo termico, compreso ABH, risultano perciò troppo semplificati per fornire un andamento sufficientemente accurato;
- la cella ha generalmente piccole dimensioni, per cui una teoria approssimata, come la diffusione, non è applicabile se non con una perdita di accuratezza oggi inaccettabile.

Una soluzione adeguata di questo problema può quindi venire solo dall'applicazione di una teoria rigorosa come quella del trasporto, con trattazione completa delle variabili spaziali ed energetiche. La forma integrale, ad esempio, si mostra particolarmente utile a tale scopo. Una semplificazione importante del problema nel nostro caso risulta dal fatto che nel caso dei neutroni termici lo scattering può essere considerato isotropo nel sistema del laboratorio.

Rispetto ai problemi considerati in precedenza (un sistema diffondente circondato dal vuoto) c'è ora, però, un problema in più: sulla frontiera della cella non si può applicare la condizione di flusso angolare entrante nullo; anzi tale flusso assume ora un ruolo importante nel bilancio sulla cella stessa.

5.2.2 Equazione integrale del trasporto con flusso entrante non nullo

Si fa l'ipotesi che sia <u>lo scattering che la sorgente indipendente siano isotropi</u> nel sistema del laboratorio:

$$\Sigma_{s}(\vec{r}, v'\vec{\Omega}' \to v\vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi}\Sigma_{s}(\vec{r}, v' \to v) \qquad S(\vec{r}, v\vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi}S_{0}(\vec{r}, v)$$

Dall'equazione stazionaria del trasporto, si ha perciò

Si definisce quindi la densità di emissione come:

$$q(\vec{r},v) = \iint \frac{1}{4\pi} \Sigma_s(\vec{r},v' \to v) \phi(\vec{r},v'\vec{\Omega}') dv' d\Omega' + \frac{1}{4\pi} S_0(\vec{r},v)$$

Come già visto al Cap. 3, si integra a ritroso lungo la direzione del moto dei neutroni e si ha (v. Figura 18):

$$\phi(\vec{r},v\vec{\Omega}) = \int_0^{s_0(\vec{r},\vec{\Omega})} e^{-\int_0^{s_{\Sigma_t}(\vec{r}-s'\vec{\Omega},v)ds'} q(\vec{r}-s\vec{\Omega},v)ds} q(\vec{r}-s\vec{\Omega},v)ds + e^{-\int_0^{s_0(\vec{r},\vec{\Omega})} \Sigma_t(\vec{r}-s'\vec{\Omega},v)ds'} \phi(\vec{r}-s_0\vec{\Omega},v\vec{\Omega})$$

Introducendo il cammino ottico

$$\tau(\vec{r},\vec{r}-s\vec{\Omega},v) = \int_0^s \Sigma_t(\vec{r}-s'\vec{\Omega},v) ds'$$

si ottiene quindi

$$\phi\left(\vec{r}, v\vec{\Omega}\right) = \int_{0}^{s_{0}\left(\vec{r}, \vec{\Omega}\right)} e^{-\tau\left(\vec{r}, \vec{r}-s\vec{\Omega}, v\right)} q\left(\vec{r}-s\vec{\Omega}, v\right) ds + e^{-\tau\left(\vec{r}, \vec{r}-s_{0}\vec{\Omega}, v\right)} \phi\left(\vec{r}-s_{0}\vec{\Omega}, v\vec{\Omega}\right)$$
(46)

Si integra quindi ad ambo i membri su $d\Omega$. Poiché si ha per definizione

$$\int_{4\pi} \phi(\vec{r}, v\vec{\Omega}) d\Omega \equiv \phi(\vec{r}, v)$$

risulta

$$\phi(\vec{r},v) = \int_{4\pi} d\Omega \int_{0}^{s_0(\vec{r},\vec{\Omega})} e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}-s\vec{\Omega},v)} q(\vec{r}-s\vec{\Omega},v) ds + \int_{4\pi} d\Omega e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}-s_0\vec{\Omega},v)} \phi(\vec{r}-s_0\vec{\Omega},v)$$
(47)

Col cambiamento di variabili (v. Figura 18)



Figura 18 – Definizioni rilevanti per l'equazione integrale

$$\vec{r}' = \vec{r} - s\vec{\Omega}$$
 $dV' = s^2 ds d\Omega = \left|\vec{r} - \vec{r}'\right|^2 ds d\Omega \implies ds d\Omega = \frac{dV'}{\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|^2}$

in cui \vec{r}' definisce il generico punto interno al volume *V*, il primo addendo a secondo membro della (47) diventa

$$\int_{V} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',v)}}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|^{2}} q(\vec{r}',v) dV'$$

D'altra parte, con il cambiamento di variabili

$$\vec{r}_s = \vec{r} - s_0 \vec{\Omega}$$
 $dS = \frac{\left|\vec{r} - \vec{r}_s\right|^2 d\Omega}{\left|\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e\right|} \Rightarrow d\Omega = \frac{\left|\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e\right|}{\left|\vec{r} - \vec{r}_s\right|^2} dS$

in cui \vec{r}_s rappresenta il generico punto sulla frontiera $S \equiv \partial V$, il secondo addendo a secondo membro della (47) diventa

$$\int_{S} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}_{s},v)}}{\left|\vec{r}-\vec{r}_{s}\right|^{2}} \left|\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_{e}\right| \phi\left(\vec{r}_{s},v\vec{\Omega}\right) dS$$

Infine, ricordando l'espressione della densità di emissione, si ottiene

$$\phi(\vec{r},v) = \int_{V} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',v)}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^{2}} \left[\int \Sigma_{s}(\vec{r}',v' \to v) \phi(\vec{r}',v') dv' + S_{0}(\vec{r}',v) \right] dV' + \int_{S} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}_{s},v)}}{|\vec{r}-\vec{r}_{s}|^{2}} \left| \frac{\vec{r}-\vec{r}_{s}}{|\vec{r}-\vec{r}_{s}|} \cdot \vec{u}_{e} \right| \phi\left(\vec{r}_{s},v\frac{\vec{r}-\vec{r}_{s}}{|\vec{r}-\vec{r}_{s}|}\right) dS$$
(48)

in cui si è fatto uso della relazione

$$\vec{\Omega} = \frac{\vec{r} - \vec{r}_s}{\left|\vec{r} - \vec{r}_s\right|}$$

Se il flusso angolare entrante attraverso la superficie esterna è nullo, come accade per una condizione al contorno di superficie libera (interfaccia col vuoto) allora si ritrova l'equazione integrale del trasporto classica (v. Cap. 3).

Se invece risulta $\phi(\vec{r}_s, v\vec{\Omega}) \neq 0$ per $\vec{\Omega}$ entrante, pur rappresentando la (48) un passo considerevole della teoria, occorre ancora fare qualche ipotesi circa la sua distribuzione angolare. Ad esempio, nel caso di una cella cilindricizzata alla Wigner-Seitz è possibile ipotizzare che il flusso alla frontiera sia isotropo

$$\phi\!\left(\vec{r}_{s}, v\vec{\Omega}\right) = \frac{1}{4\pi} \phi\!\left(\vec{r}_{s}, v\right)$$

La semicorrente entrante corrispondente è allora

$$J^{-}(\vec{r}_{s},v) = \int_{\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_{e}<0} \phi(\vec{r}_{s},v\vec{\Omega}) |\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_{e}| d\Omega = \int_{\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_{e}<0} \frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r}_{s},v) |\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_{e}| d\Omega = \frac{1}{4} \phi(\vec{r}_{s},v)$$

Come discusso al Cap. 3, se vi è perfetta *riflessione diffusa*, la semicorrente uscente è uguale a quella entrante

$$J^+\left(\vec{r}_s,v\right) = J^-\left(\vec{r}_s,v\right)$$

Ciò significa che il flusso angolare riflesso si mantiene isotropo per tutte le direzioni entranti, cosa che si esprime dicendo che "la parete è bianca".

Si deve sottolineare che l'ipotesi di riflessione diffusa permette di migliorare considerevolmente l'accuratezza delle predizioni ottenibili con l'approssimazione di Wigner-Seitz, rispetto all'ipotesi di riflessione pura. Come mostrato in Figura 19, infatti, in una cella quadrata anche neutroni riflessi con un angolo molto piccolo dalla parete esterna possono entrare nella regione assorbente; ciò non accade in una cella cilindricizzata se si assume la pura riflessione, dando luogo ad una sovrastima del flusso nella regione esterna della cella. Assumere riflessione diffusa permette perciò di migliorare le cose.

Perciò, con riflessione diffusa alla frontiera si ha

$$\phi\left(\vec{r}_{s}, v \tilde{\Omega}\right) = \frac{1}{4\pi} \phi\left(\vec{r}_{s}, v\right) = \frac{1}{4\pi} 4 J^{-}\left(\vec{r}_{s}, v\right)$$

e dalla (48) si ottiene



Figura 19 – Riflessione al bordo di una cella quadrata e di una cilindricizzata con condizioni al contorno diverse

$$\phi(\vec{r},v) = \int_{V} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',v)}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^{2}} \Big[\int \Sigma_{s}(\vec{r}',v' \to v) \phi(\vec{r}',v') dv' + S_{0}(\vec{r}',v) \Big] dV' + \int_{S} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}_{s},v)}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}_{s}|^{2}} \left| \frac{\vec{r}-\vec{r}_{s}}{|\vec{r}-\vec{r}_{s}|} \cdot \vec{u}_{e} \right| 4J^{-}(r_{s},v) dS$$
(49)

Questa equazione fornisce il flusso in funzione della densità di emissione all'interno del volume della cella (dovuta scattering e sorgenti indipendenti) e della semicorrente entrante attraverso la superficie esterna. Perciò si ha una sola equazione con due incognite: il flusso nei punti interni alla cella e la semicorrente entrante.

Si deve però riconoscere che, nell'ipotesi di riflessione diffusa al bordo della cella, la semicorrente entrante, essendo uguale alla semicorrente uscente, è anch'essa a sua volta funzione della distribuzione del flusso e delle sorgenti all'interno della cella. E' possibile perciò, scrivere un'ulteriore equazione che coinvolga la semicorrente entrante la quale permetta di chiudere il problema.

A tale scopo, riconosciuto che

$$J^{-}(\vec{r}_{s},v) = J^{+}(\vec{r}_{s},v) = \int_{\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_{e}>0} \phi(\vec{r}_{s},v\vec{\Omega})\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_{e}d\Omega$$
(50)

si esprime $\phi(\vec{r}_s, v\vec{\Omega})$, con $\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e > 0$, tramite la (46) ottenendo

$$\phi(\vec{r}_{s}, \nu\vec{\Omega}) = \int_{0}^{s_{0}(\vec{r}_{s}, \vec{\Omega})} \frac{1}{4\pi} e^{-\tau(\vec{r}_{s}, \vec{r}_{s} - s\vec{\Omega}, \nu)} \left[\int \Sigma_{s}(\vec{r}_{s} - s\vec{\Omega}, \nu' \to \nu) \phi(\vec{r}_{s} - s\vec{\Omega}, \nu') d\nu' + S_{0}(\vec{r}_{s} - s\vec{\Omega}, \nu) \right] ds + e^{-\tau(\vec{r}_{s}, \vec{r}_{s} - s_{0}\vec{\Omega}, \nu)} \phi(\vec{r}_{s} - s_{0}\vec{\Omega}, \nu\vec{\Omega})$$
(51)

Poiché $\vec{r}_s - s_0 \vec{\Omega}$ che compare nell'ultimo addendo a secondo membro è anch'esso un punto di frontiera si ha:

$$\phi(\vec{r}_{s} - s_{0}\vec{\Omega}, v\vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi}\phi(\vec{r}_{s} - s_{0}\vec{\Omega}, v) = \frac{1}{4\pi}4J^{-}(\vec{r}_{s} - s_{0}\vec{\Omega}, v)$$
(52)

dove si è ancora sfruttata l'ipotesi di isotropia del flusso angolare alla frontiera.

Tenendo conto delle (51) e (52), la (50) diventa perciò:



Figura 20 – Definizioni per il cambiamento di variabili

$$J^{-}(\vec{r}_{s},v) =$$

$$= \int_{\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_{e}>0} \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_{e} d\Omega \left\{ \int_{0}^{s_{0}(\vec{r}_{s},\vec{\Omega})} \frac{1}{4\pi} e^{-\tau(\vec{r}_{s},\vec{r}_{s}-s\vec{\Omega},v)} \left[\int \Sigma_{s}(\vec{r}_{s}-s\vec{\Omega},v'\to v) \phi(\vec{r}_{s}-s\vec{\Omega},v') dv' + S_{0}(\vec{r}_{s}-s\vec{\Omega},v) \right] ds$$

$$+ \frac{1}{4\pi} e^{-\tau(\vec{r}_{s},\vec{r}_{s}-s_{0}\vec{\Omega},v)} 4J^{-}(\vec{r}_{s}-s_{0}\vec{\Omega},v) \left\}$$
(53)

Si opera quindi un'ultima trasformazione di questa equazione tramite il cambiamento di variabili (v. Figura 20)

$$\vec{r}_{s}' = \vec{r}_{s} - s_{0}\vec{\Omega} \qquad dS' = \frac{\left|\vec{r}_{s} - \vec{r}_{s}\right|^{2}}{\left|\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_{e}\right|} d\Omega \qquad \Rightarrow \qquad d\Omega = \frac{\left|\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_{e}\right|}{\left|\vec{r}_{s} - \vec{r}_{s}\right|^{2}} dS'$$
$$\vec{r}' = \vec{r}_{s} - s\vec{\Omega} \qquad dV' = \left|\vec{r}_{s} - \vec{r}'\right|^{2} ds d\Omega \qquad \Rightarrow \qquad ds d\Omega = \frac{dV'}{\left|\vec{r}_{s} - \vec{r}'\right|^{2}}$$

e si ottiene

$$J^{-}(\vec{r}_{s},v) = \int_{V} \frac{e^{-\tau(\vec{r}_{s},\vec{r}',v)}}{4\pi |\vec{r}_{s} - r'|^{2}} (\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_{e}) [\int \Sigma_{s}(\vec{r}',v' \to v) \phi(\vec{r}',v') dv' + S_{0}(\vec{r}',v)] dV' + \int_{S} \frac{e^{-\tau(\vec{r}_{s},\vec{r}_{s}',v)}}{4\pi |\vec{r}_{s} - \vec{r}_{s}|^{2}} (\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_{e}) \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_{e}' | 4J^{-}(\vec{r}_{s}',v) dS'$$
(54)

97

Il sistema di equazioni (49) e (54) determina il flusso scalare $\phi(\vec{r},v)$ nei punti interni e la semicorrente entrante $J^{-}(\vec{r}_{s},v)$ nei punti di frontiera. Queste grandezze sono sufficienti a risolvere completamente il problema.

5.2.3 Problemi bidimensionali

In questo caso la sorgente e il flusso scalare, nonché la corrente, dipendono da x e da y e non da z. Sempre nell'ipotesi di <u>scattering isotropo</u> il nucleo

$$\frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}',v)}}{4\pi |\vec{r}-\vec{r}'|^2}$$

integrato su z (sorgente filiforme, non più puntiforme) si trasforma nel seguente:

$$\frac{Ki_1[\tau(\vec{r}_0,\vec{r}_0',v)]}{2\pi|\vec{r}_0-\vec{r}_0'|^2}$$

in cui $\vec{r_0}$ ed $\vec{r_0}'$ sono le proiezioni di \vec{r} ed \vec{r}' rispettivamente sul piano *xy* (v. Figura 17 e anche Figura 21 che presenta la stessa situazione con maggiore generalità).



Figura 21 – Definizione di grandezze rilevanti per il caso bidimensionale 98

Quando l'integrazione su z coinvolge angoli (attraverso $\vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e$), vengono chiamate in causa le funzioni di Bickley-Naylor di ordine superiore e, in particolare, Ki_2 e Ki_3 , invece di Ki_1 .

Tralasciando i dettagli del calcolo, nel caso bidimensionale gli integrali di volume e di superficie coinvolti nelle (49) e (54) si trasformano rispettivamente in integrali di superficie e di linea che coinvolgono kernel contenenti le funzioni di Bickley-Naylor. Indicando con A_0 l'area su cui vengono eseguiti tali integrali di superficie (cioè, il dominio bidimensionale di integrazione) ed $L_0 = \partial A_0$ la curva chiusa su cui vengono eseguiti gli integrali di linea, le (49) e (54) diventano

$$\begin{split} \varphi(\vec{r}_{0},v) &= \int_{A_{0}} \frac{Ki_{1}[\tau(\vec{r}_{0},\vec{r}_{0}',v)]}{2\pi|\vec{r}_{0}-\vec{r}_{0}'|} \Big[\int_{0}^{\infty} \Sigma_{s}(\vec{r}_{0}',v'\to v) \varphi(\vec{r}_{0}',v') dv' + S_{0}(\vec{r}_{0}',v) \Big] dA_{0}' \\ &+ \int_{L_{0}} \frac{Ki_{2}[\tau(\vec{r}_{0},\vec{r}_{L}',v)]}{2\pi|\vec{r}_{0}-\vec{r}_{L}'|} \Big(\frac{\vec{r}_{0}-\vec{r}_{L}'}{|\vec{r}_{0}-\vec{r}_{L}'|} \cdot \vec{u}_{L}' \Big) 4J^{-}(\vec{r}_{L}',v) dL_{0}' \\ J^{-}(\vec{r}_{L},v) &= \int_{A_{0}} \frac{Ki_{2}[\tau(\vec{r}_{L},\vec{r}_{0}',v)]}{2\pi|\vec{r}_{L}-\vec{r}_{0}'|} \Big(\frac{\vec{r}_{L}-\vec{r}_{0}'}{|\vec{r}_{L}-\vec{r}_{0}'|} \cdot \vec{u}_{L} \Big) \Big[\int_{0}^{\infty} \Sigma_{s}(\vec{r}_{0}',v'\to v) \varphi(\vec{r}_{0}',v') dv' + S_{0}(\vec{r}_{0}',v) \Big] dA_{0}' \\ &+ \int_{L_{0}} \frac{Ki_{3}[\tau(\vec{r}_{L},\vec{r}_{L}',v)]}{2\pi|\vec{r}_{L}-\vec{r}_{L}'|} \Big(\frac{\vec{r}_{L}-\vec{r}_{L}'}{|\vec{r}_{L}-\vec{r}_{L}'|} \cdot \vec{u}_{L} \Big) \Big(\frac{\vec{r}_{L}'-\vec{r}_{L}}{|\vec{r}_{L}-\vec{r}_{L}'|} \cdot \vec{u}_{L} \Big) \Big(4J^{-}(\vec{r}_{L}',v) dL_{0}' \Big) \Big] dA_{0}' \\ &+ \int_{L_{0}} \frac{Ki_{3}[\tau(\vec{r}_{L},\vec{r}_{L}',v)]}{2\pi|\vec{r}_{L}-\vec{r}_{L}'|} \Big(\frac{\vec{r}_{L}-\vec{r}_{L}'}{|\vec{r}_{L}-\vec{r}_{L}'|} \cdot \vec{u}_{L} \Big) \Big(\frac{\vec{r}_{L}'-\vec{r}_{L}}{|\vec{r}_{L}-\vec{r}_{L}'|} \cdot \vec{u}_{L} \Big) \Big(4J^{-}(\vec{r}_{L}',v) dL_{0}' \Big) \Big(\frac{\vec{r}_{L}',v} \Big) \Big(\frac{$$

5.2.4 Le probabilità di collisione

Nel caso monocinetico ($\phi = \rho$, scegliendo v = 1) e con frontiera affacciata al vuoto sappiamo (v. Cap. 3 e anche Fisica del Reattore) che, suddiviso il dominio in regioni di caratteristiche fisiche costanti V_i , il flusso medio approssimato ϕ_i è soluzione del sistema lineare

$$\phi_i = \sum_{j} A_{i,j} \left(\Sigma_{s,j} \phi_j + S_j \right)$$

dove

$$A_{i,j} = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \int_{V_j} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}')}}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} dV dV'$$

o anche, introducendo le probabilità di collisione

$$P_{j \to i} = \frac{V_i}{V_j} \sum_{ii} A_{i,j} = \frac{\sum_{ii}}{V_j} \int_{V_j} \int_{V_j} \frac{e^{-\tau(\vec{r},\vec{r}')}}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} dV dV'$$

del sistema

$$V_i \Sigma_{ii} \phi_i = \sum_j V_j P_{j \to i} \left(\Sigma_{sj} \phi_j + S_j \right)$$

Considerando più gruppi energetici si ha

$$V_i \Sigma_{ti}^g \phi_i^g = \sum_j V_j P_{j \to i}^g \left(\sum_{g'} \Sigma_{sj}^{g' \to g} \phi_j^{g'} + S_j^g \right)$$

Nel caso di cilindro infinito ed isolato a sezione circolare, flusso e corrente dipendono solo da r. Anche nel caso di frontiera riflettente (bianca) è possibile uno schema di calcolo simile, che consente di evitare le l'approssimazione delle due equazioni integrali generali (49) e (54).

Definendo

$$P_{j \to S}^{g} = 1 - \sum_{i} P_{j \to i}^{g} = \begin{pmatrix} \text{probabilità che un neutrone del gruppo} \\ \text{energetico } g - esimo \text{ prodotto in } V_{j} \\ \text{raggiunga la frontiera S al primo volo} \end{pmatrix}$$

$$P_{S \to i}^{g} = \frac{4V_{i}\Sigma_{ii}}{S} P_{i \to S}^{g} = \begin{pmatrix} \text{probabilità che un neutrone del gruppo} \\ \text{energetico } g - esimo \text{ riflesso da S} \\ \text{collida in } V_{i} \text{ al primo volo} \end{pmatrix} (^{21})$$

$$P_{S \to S}^{g} = 1 - \sum_{i} P_{S \to i}^{g} = \begin{pmatrix} \text{probabilità che un neutrone del gruppo} \\ \text{energetico } g - esimo \text{ riflesso da S} \\ \text{energetico } g - esimo \text{ riflesso da S} \\ \text{raggiunga nuovamente S al primo volo} \end{pmatrix}$$

si pone quindi

$$\widetilde{P}_{j \to i}^g = P_{j \to i}^g + P_{j \to S}^g P_{S \to i}^g + P_{j \to S}^g P_{S \to S}^g P_{S \to i}^g + P_{j \to S}^g \left(P_{S \to S}^g\right)^2 P_{S \to i}^g + \dots$$

che si legge:

$$\begin{pmatrix} probabilità totale che un neutrone del gruppo \\ energetico g - esimo emesso in V_j \\ collida al primo volo in V_i \end{pmatrix} =$$

^{(&}lt;sup>21</sup>) Accettiamo questa formula senza dimostrazione. Essa è in sostanza una generalizzazione della (7) del metodo ABH.

	(probabilità che un neutrone del gruppo)		(probabilità che un neutrone del gruppo)	
=	energetico g – esimo emesso in V_j	+	energetico g – esimo emesso in V_j collida	
	$igl(collida \ direttamente \ al \ primo \ volo \ in \ V_i igr)$		al primo volo in V_i dopo una riflessione in S)	

 $+ \begin{pmatrix} \text{probabilità che un neutrone del gruppo} \\ \text{energetico } g - esimo emesso in V_j \text{ collida} \\ \text{al primo volo in } V_i \text{ dopo due riflessioni in } S \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \text{probabilità che un neutrone del gruppo} \\ \text{energetico } g - esimo emesso in V_j \text{ collida} \\ \text{al primo volo in } V_i \text{ dopo tre riflessioni in } S \end{pmatrix} + \dots$

Risulta quindi

$$\widetilde{P}_{j \to i}^{g} = P_{j \to i}^{g} + \frac{P_{j \to S}^{g} P_{S \to i}^{g}}{1 - P_{S \to S}^{g}}$$

e il sistema risolutivo in forma di probabilità di collisione per una cella con riflessione diffusa alla frontiera assume la forma

$$V_i \Sigma_{ti}^{g} \phi_i^{g} = \sum_{j} V_j \widetilde{P}_{j \to i}^{g} \left(\sum_{g'} \Sigma_{sj}^{g' \to g} \phi_j^{g'} + S_j^{g} \right)$$

La determinazione delle $\tilde{P}_{j\to i}^{g}$ (e prima ancora delle $P_{j\to i}^{g}$) è in linea di principio molto onerosa, per cui sono state studiate tecniche appropriate allo scopo di semplificarne il calcolo.
6. Il Metodo delle Ordinate Discrete

6.1 Generalità

Il metodo delle ordinate discrete è basato sulla risoluzione di una forma discretizzata sia nella coordinata spaziale che in quella angolare dell'equazione integrodifferenziale.

Questo metodo è diventato la tecnica principale per la risoluzione dell'equazione integrodifferenziale del trasporto, perché permette, in linea di principio, di ottenerne facilmente una soluzione con qualunque grado di approssimazione, compatibilmente con le risorse di calcolo disponibili. I primi algoritmi riconducibili al metodo delle ordinate discrete vennero usati in passato per calcoli di trasporto nelle atmosfere stellari; la tecnica venne poi estesa, principalmente ad opera di B. Carlson, al campo dell'energia nucleare.

La notevole efficienza computazionale di questi metodi, indicati come metodi S_N , li fa spesso preferire agli altri, specialmente quando sia necessario minimizzare l'ingombro di memoria.

6.2 Il caso monodimensionale in coordinate cartesiane

6.2.1 Equazioni discretizzate

Dall'equazione integrodifferenziale stazionaria del trasporto

$$\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}}\phi(\vec{r}, v\vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, v)\phi(\vec{r}, v\vec{\Omega}) = \int \Sigma_s(\vec{r}, v'\vec{\Omega}' \to v\vec{\Omega})\phi(\vec{r}, v'\vec{\Omega}')dv'd\Omega' + S(\vec{r}, v\vec{\Omega})$$

si ottiene dapprima il <u>caso monocinetico</u> (ad un solo gruppo) <u>con scattering</u> <u>isotropo</u>

$$\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} \phi(\vec{r},\vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r})\phi(\vec{r},\vec{\Omega}) = \frac{\Sigma_s(\vec{r})}{4\pi} \int \phi(\vec{r},\vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + S(\vec{r},\vec{\Omega})$$

e quindi si considera il caso particolare di geometria piana

$$\mu \frac{\partial \phi(x,\mu)}{\partial x} + \Sigma_t(x)\phi(x,\mu) = \frac{\Sigma_s(x)}{2} \int_{-1}^1 \phi(x,\mu')d\mu' + S(x,\mu)$$
(55)

Allo scopo di risolvere questa equazione si definiscono *M* direzioni discrete ed altrettanti coefficienti di peso

$$\mu_1, \mu_2, ..., \mu_M$$
 $w_1, w_2, ..., w_M$

In particolare, tramite i coefficienti di peso w_m è possibile calcolare in via approssimata l'integrale a secondo membro della (55), cioè:

$$\int_{-1}^{1} \phi(x,\mu') d\mu' \approx \sum_{m=1}^{M} w_m \phi(x,\mu_m)$$

Con questa discretizzazione della coordinata angolare la (55) si trasforma nelle seguenti

$$\mu_m \frac{\partial \phi(x,\mu_m)}{\partial x} + \Sigma_t(x)\phi(x,\mu_m) = \frac{\Sigma_s(x)}{2} \sum_{n=1}^M w_n \phi(x,\mu_n) + S(x,\mu_m) \quad (m=1,...,M)$$
(56)

La scelta dei coefficienti di pesatura w_m e, quindi, delle formule di quadratura viene generalmente fatta con riferimento ad <u>un numero pari di</u> <u>ordinate discrete</u> μ_m <u>simmetriche rispetto a</u> $\mu = 0$. Si ha cioè:

$$\mu_m > 0$$
 $\mu_{M+1-m} = -\mu_m$ $w_{M+1-m} = w_m$ $\left(m = 1, 2, ..., \frac{M}{2}\right)$ (57)

1

La ragione della scelta di valori simmetrici rispetto a $\mu = 0$ con uguale peso è dettata dal fatto che a particelle provenienti da destra o da sinistra si deve assegnare la stessa importanza. Il fatto che il numero di direzioni sia pari permette poi di evitare che esista un valore di *m* per cui $\mu_m = 0$; ciò porrebbe problemi sia perché in questo caso il termine derivativo nella (56) verrebbe a mancare, costringendo a trattare questa direzione in modo diverso dalle altre, sia perché nell'imporre le condizioni al contorno (come già osservato al Cap. 4) la direzione $\mu = 0$ è sede di discontinuità.

Il vantaggio della scelta di un numero pari di ordinate discrete appare con particolare evidenza quando si impongono le condizioni al contorno. Con riferimento alla Figura 22, nel caso di riflessione pura ad x = 0 si ha:

$$\phi(0,\mu_m) = \phi(0,\mu_{M+1-m}) \qquad \qquad \left(m = 1,2,\ldots,\frac{M}{2}\right)$$

Imponendo invece la condizione di superficie libera (interfaccia con il vuoto) in x = a si ha

$$\phi(a,\mu_m)=0\qquad \qquad \left(m=\frac{M}{2}+1,\ldots,M\right)$$





Nonostante queste limitazioni, vi è comunque una considerevole libertà nella determinazione delle *direzioni ammissibili*. Una scelta molto frequente è quella dello schema di Wick-Chandrasekhar in cui si assegnano i μ_m in modo che siano uguali agli *M* zeri del polinomio di Legendre di ordine *M*:

$$P_M(\mu_m) = 0 \qquad (m = 1, 2, \dots, M)$$

Si richiede inoltre che

$$w_m > 0 \qquad \qquad \left(m = 1, 2, \dots, M\right)$$

e che la pesatura sia tale da dare una quadratura esatta su $-1 \le \mu \le 1$ di tutti i polinomi di ordine fino ad M-1; si ha perciò:

$$\sum_{m=1}^{M} w_m \mu_m^n = \int_{-1}^{1} \mu^n d\mu = \begin{cases} \frac{2}{n+1}, & n pari\\ 0 & n dispari \end{cases}$$
 $(n = 0, 1, 2, ..., M - 1)$ (58)

E' necessario notare che la (58) con *n* dispari è identicamente soddisfatta per ogni scelta dei μ_m e dei w_m che soddisfi alle (57). Perciò è possibile determinare gli *M* parametri indipendenti μ_m e w_m (m = 1,...,M/2) in modo da integrare esattamente tutti i polinomi di ordine 0,2,...,2M-2 (e anche quelli di ordine 2M-1, visto che questo numero è dispari). Quindi, risulta anche:

$$\sum_{m=1}^{M} w_m P_k(\mu_m) P_l(\mu_m) = \int_{-1}^{1} P_k(\mu) P_l(\mu) d\mu = \frac{2\delta_{kl}}{2k+1} \qquad (k,l=0,1,\ldots,M-1)$$

Con questi vincoli, i μ_m e w_m sono forniti dai *parametri di quadratura di Gauss-Legendre* che vengono riportati nella Tabella 2 per M = 2,4,6. Si può dimostrare che, con questa scelta, il metodo risulta equivalente a quello delle armoniche sferiche, P_N , con N = M - 1 cioè:

$$S_M \equiv P_{M-1}$$

La soluzione numerica delle (56) viene eseguita ponendole innanzitutto nella forma

$$\mu_m \frac{\partial \phi(x,\mu_m)}{\partial x} + \Sigma_t(x)\phi(x,\mu_m) = q(x,\mu_m) \qquad (m = 1, ..., M)$$
(59)

e iterando sulla sorgente di scattering secondo lo schema

$$\mu_{m} \frac{\partial \phi^{[t+1]}(x,\mu_{m})}{\partial x} + \Sigma_{t}(x)\phi^{[t+1]}(x,\mu_{m}) = q^{[t]}(x,\mu_{m}) \qquad (m = 1, ..., M)$$
$$q^{[t+1]}(x,\mu_{m}) = \frac{\Sigma_{s}(x)}{2} \sum_{n=1}^{M} w_{n}\phi^{[t+1]}(x,\mu_{n}) + S(x,\mu_{m})$$

E' ovviamente necessaria anche una discretizzazione spaziale. A tale scopo l'intervallo $0 \le x \le a$ viene suddiviso in *I* segmenti nei quali si assume che le proprietà del materiale siano costanti (v. Figura 23). Si definiscono,

N = 2	$w_1 = w_2 = 1.000$	$\mu_1 = -\mu_2 = 0.57735$
N = 4	$w_2 = w_3 = 0.65215$	$\mu_2 = -\mu_3 = 0.33998$
	$w_1 = w_4 = 0.34785$	$\mu_1 = -\mu_4 = 0.86114$
N = 6	$w_3 = w_4 = 0.46791$	$\mu_3 = -\mu_4 = 0.23862$
	$w_2 = w_5 = 0.36076$	$\mu_2 = -\mu_5 = 0.66121$
	$w_1 = w_6 = 0.17132$	$\mu_1 = -\mu_6 = 0.93247$

Tabella 2 – Parametri di quadratura di Gauss-Legendre (da Bell & Glasstone, 1979)



Figura 23 – Discretizzazione spaziale per il metodo delle ordinate discrete nel caso piano

perciò, valori medi del flusso angolare, della densità di emissione e delle sezioni d'urto in ogni segmento e le (59) vengono tradotte nella forma discretizzata:

$$\mu_m \frac{\phi(x_{i+1/2}, \mu_m) - \phi(x_{i-1/2}, \mu_m)}{\Delta x_i} + \Sigma_t(x_i)\phi(x_i, \mu_m) = q(x_i, \mu_m)$$

che, adottando una notazione più compatta, diventa

$$\mu_{m} \frac{\phi_{i+1/2,m} - \phi_{i-1/2,m}}{\Delta x_{i}} + \Sigma_{ii} \phi_{i,m} = q_{i,m} \qquad (i = 1, \dots, I) \qquad (m = 1, \dots, M)$$
(60)

6.2.2 Algoritmo risolutivo

Per ogni direzione μ_m , le precedenti, rappresentano un sistema di *I* equazioni nelle *I* incognite costituite dai valori del flusso angolare nel centro di ciascun segmento, $\phi_{i,m}$. Poiché nelle equazioni compaiono anche i flussi di interfaccia è necessario disporre di ulteriori informazioni per poter sviluppare il calcolo.

Una prima informazione, viene fornita dal calcolo di un nodo adiacente (che si suppone di aver già svolto) o da una condizione al contorno che, in genere, fornirà il valore del flusso angolare in uno degli estremi. Allo scopo di eliminare l'incognita residua si adotta inoltre la cosiddetta *regola del diamante* (la cui denominazione risulterà chiara in seguito), che consiste nell'imporre che il flusso centrale in un segmento approssimi la media aritmetica dei flussi di interfaccia:

$$\phi_{i,m} = \frac{\phi_{i+1/2,m} + \phi_{i-1/2,m}}{2}$$

L'algoritmo risolutivo fa un uso diverso di questa regola a seconda che si abbia $\mu_m > 0$ o $\mu_m < 0$.

In particolare si ha:

• $\mu_m > 0$

in questo caso <u>il calcolo procede da "sinistra verso destra"</u>, cioè calcolando il flusso angolare per valori crescenti di *x*, a partire da $\phi_{1/2,m}$ che si suppone noto sulla base di una condizione al contorno o assegnato come valore di tentativo; è interessante notare che <u>questo è anche il verso</u> <u>di propagazione dei neutroni</u> (infatti, $\mu_m = \cos \theta_m > 0$); si pone perciò:

$$\phi_{i+1/2,m} = 2\phi_{i,m} - \phi_{i-1/2,m}$$

che introdotta nella (60) permette di ottenere il flusso centrale nella forma

$$\phi_{i,m} = \frac{\phi_{i-1/2,m} + \frac{\Delta x}{2\mu_m} q_{i,m}}{1 + \frac{\Delta x}{2\mu_m} \Sigma_{ii}} \qquad ; \tag{61}$$

noto il flusso centrale, è quindi possibile calcolare il flusso di interfaccia $\phi_{i+1/2,m} = 2\phi_{i,m} - \phi_{i-1/2,m}$ che servirà per il calcolo nel nodo successivo;

• $\mu_m < 0$

al contrario di quanto visto per $\mu_m > 0$, <u>il calcolo procede da "destra verso</u> <u>sinistra"</u>, cioè calcolando il flusso angolare per valori decrescenti di x, a partire da $\phi_{1+1/2,m}$ che si suppone noto sulla base di una condizione al contorno o assegnato come valore di tentativo; è interessante notare che, anche in questo caso, <u>questo è anche il verso di propagazione dei neutroni</u> (ora, infatti, $\mu_m = \cos \theta_m < 0$); si pone perciò:

$$\phi_{i-1/2,m} = 2\phi_{i,m} - \phi_{i+1/2,m}$$

che introdotta nella (60) permette di ottenere il flusso centrale nella forma

$$\phi_{i,m} = \frac{\phi_{i+1/2,m} + \frac{\Delta x}{2|\mu_m|} q_{i,m}}{1 + \frac{\Delta x}{2|\mu_m|} \Sigma_{ii}}$$
(62)

noto il flusso centrale, è quindi possibile calcolare il flusso di interfaccia $\phi_{i-1/2,m} = 2\phi_{i,m} - \phi_{i+1/2,m}$ che servirà per il calcolo nel nodo successivo.

L'ordine di accuratezza dell'approssimazione ottenuta con la regola del diamante può essere analizzato considerando il caso particolare di densità di emissione nulla e sezione d'urto totale costante. In tal caso si ha:

$$\mu_m \frac{d \phi(x, \mu_m)}{d x} + \Sigma_t \phi(x, \mu_m) = 0$$

la cui soluzione esatta è

$$\phi(x,\mu_m) = \phi(x',\mu_m) e^{-\Sigma_t(x-x')/\mu_m}$$

In particolare, ponendo $x' = x_{i-1/2}$ e $x = x_{i+1/2}$ si ha

$$\phi_{i+1/2,m} = \phi_{i-1/2,m} e^{-h} \tag{63}$$

in cui è

$$h = \frac{\sum_{t} \Delta x}{\mu_{m}}$$

Dalla (61), invece, facendo uso della regola del diamante, si ottiene

$$\phi_{i+1/2,m} = \phi_{i-1/2,m} \frac{1 - h/2}{1 + h/2} \tag{64}$$

Confrontando la (63) con la (64) si riconosce che

$$e^{-h} = \frac{1-h/2}{1+h/2} + O(h^3)$$
 (²²)

per cui si conclude che lo schema numerico è accurato fino al secondo ordine. Ciò è diretta conseguenza dell'adozione di una differenza centrale

 ${}^{(22)} \text{ Si ha: } e^{-h} = 1 - h + \frac{h^2}{2} - \frac{h^3}{6} + \dots \text{ mentre risulta}$ $\frac{1 - h/2}{1 + h/2} = \left(1 - \frac{h}{2}\right) \cdot \left(1 + \frac{h}{2}\right)^{-1} = \left(1 - \frac{h}{2}\right) \cdot \left(1 - \frac{h}{2} + \frac{h^2}{4} + \dots\right) = 1 - h + \frac{h^2}{2} - \frac{h^3}{8} + \dots$

109

nell'approssimare la derivata spaziale.

Nonostante l'elevata accuratezza del metodo, considerando la (64) si nota che se h > 2 si può avere che $\phi_{i+1/2} < 0$ anche se $\phi_{i-1/2} > 0$. Si tratta di un problema tipico durante l'avanzamento del calcolo tramite questo algoritmo, che si manifesta quando le relazioni

$$\begin{split} \phi_{i+1/2,m} &= 2\phi_{i,m} - \phi_{i-1/2,m} & \mu_m > 0 \\ \phi_{i-1/2,m} &= 2\phi_{i,m} - \phi_{i+1/2,m} & \mu_m < 0 \end{split}$$

forniscono valori negativi del flusso di interfaccia. Ovviamente, il problema può essere risolto adottando una suddivisione spaziale più fitta in modo da ottenere h < 2. Ciò non è però sempre conveniente, specialmente quando siano presenti zone fortemente assorbitrici, cosa che costringerebbe ad adottare valori troppo piccoli di Δx .

In tal caso, è possibile correggere ("aggiustare") il flusso tramite semplici ricette che vanno sotto il nome di "<u>fix-up</u>" ("aggiustamento", appunto). Le ricette più frequentemente applicate sono le seguenti:

- <u>1^a RICETTA</u> ("step method"): nel caso μ_m > 0 quando si abbia φ_{i+1/2,m} = 2φ_{i,m} φ_{i-1/2,m} < 0, si pone φ_{i+1/2,m} = φ_{i,m} e si calcola nuovamente φ_{i,m} sulla base della (60); viceversa, se μ_m < 0 e si ha φ_{i-1/2,m} = 2φ_{i,m} φ_{i+1/2,m} < 0, si pone φ_{i-1/2,m} = φ_{i,m} e si calcola nuovamente φ_{i,m} sulla base della (60);
- <u>2^a RICETTA</u> ("set offending flux to zero and recompute"): nel caso μ_m > 0 quando si abbia φ_{i+1/2,m} = 2φ_{i,m} φ_{i-1/2,m} < 0, si pone φ_{i+1/2,m} = 0 e si calcola nuovamente φ_{i,m} sulla base della (60); viceversa, se μ_m < 0 e si ha φ_{i-1/2,m} = 2φ_{i,m} φ_{i+1/2,m} < 0, si pone φ_{i-1/2,m} = 0 e si calcola nuovamente φ_{i,m} sulla base della (60).

Purtroppo, però, l'applicazione di queste ricette riduce l'accuratezza del metodo dal secondo ordine al primo, mentre il controllo sul segno del flusso di interfaccia comporta un peggioramento dell'efficienza computazionale. Se, contrariamente a quanto assunto fino a questo punto, lo scattering è anisotropo nel sistema del laboratorio fino all'ordine L, utilizzando l'espansione in polinomi di Legendre si ha

$$\mu \frac{\partial \phi(x,\mu)}{\partial x} + \Sigma_t(x)\phi(x,\mu) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \Sigma_{sl}(x) P_l(\mu)\phi_l(x) + S(x,\mu)$$

con

$$\phi_l(x) = \int_{-1}^1 P_l(\mu')\phi(x,\mu')d\mu'$$

(si confronti con la (35)). La forma ad ordinate discrete di queste equazioni risulta

$$\mu_m \frac{\partial \phi(x, \mu_m)}{\partial x} + \Sigma_t(x)\phi(x, \mu_m) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \Sigma_{sl}(x) P_l(\mu_m)\phi_l(x) + S(x, \mu_m) \qquad (m = 1, \dots, M)$$
$$\phi_l(x) = \sum_{n=0}^M w_n P_l(\mu_n)\phi(x, \mu_n)$$

Sulla base di questa equazione è quindi possibile sviluppare un algoritmo risolutivo per mezzo di considerazioni del tutto simili a quelle svolte nel caso di scattering isotropo.

6.3 Il caso monodimensionale in coordinate sferiche

6.3.1 Forma dell'equazione del trasporto

In Figura 24 è illustrata una sfortunata peculiarità delle geometrie curvilinee, che consiste nel fatto che, a differenza di quanto accade in geometria cartesiana, la coordinata angolare che identifica la direzione è soggetta a variazione durante il moto dei neutroni. Come vedremo, a causa di questo fenomeno, che prende il nome di *redistribuzione angolare*, il termine di trasporto (o "streaming") dell'equazione integrodifferenziale coinvolge derivate della coordinata angolare.

Per ottenere la forma del termine di "streaming" in coordinate sferiche è necessario innanzitutto ricordare che esso rappresenta una derivata totale eseguita lungo la direzione del moto dei neutroni

$$\bar{\Omega} \cdot grad_{\bar{r}}\phi = \frac{d\phi}{ds}$$



Figura 24 - Coordinate curvilinee e moto dei neutroni

come si verifica ponendo

$$\vec{r} = \vec{r}(s) = \vec{r}_0 + \vec{\Omega}s \equiv \{x(s), y(s), z(s)\}$$

con

$$x(s) = x_0 + \Omega_x s$$
 $y(s) = y_0 + \Omega_y s$ $z(s) = z_0 + \Omega_z s$

In geometria sferica, si scelgono come coordinate il raggio e il coseno dell'angolo formato dal raggio vettore con la direzione del moto

$$r \equiv \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \qquad \qquad \mu \equiv \cos \theta = \vec{\Omega} \cdot \frac{\vec{r}}{r}$$

Facendo uso di queste coordinate si può scrivere quindi

$$\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}}\phi = \frac{d\phi}{ds} = \frac{\partial\phi}{\partial r}\frac{dr}{ds} + \frac{\partial\phi}{\partial\mu}\frac{d\mu}{ds}$$

e il problema è quindi ricondotto alla valutazione delle derivate di $r \in \mu$ rispetto ad s.

Per quanto riguarda la derivata di r si ha

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

Poiché, tenendo conto delle precedenti definizioni, si ha

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}$$
 $\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r}$ $\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r}$

$$\frac{dx}{ds} = \Omega_x \qquad \frac{dy}{ds} = \Omega_y \qquad \frac{dz}{ds} = \Omega_z$$

risulta

$$\frac{dr}{ds} = \frac{x}{r}\Omega_x + \frac{y}{r}\Omega_y + \frac{z}{r}\Omega_z = \vec{\Omega} \cdot \frac{\vec{r}}{r} = \mu$$

Analogamente per la derivata di μ si ha:

$$\frac{d\mu}{ds} = \frac{d}{ds} \left(\vec{\Omega} \cdot \vec{r} \right) = \frac{\vec{\Omega}}{r} \cdot \left\{ \frac{dx}{ds} \vec{i} + \frac{dy}{ds} \vec{j} + \frac{dz}{ds} \vec{k} \right\} - \frac{\vec{\Omega} \cdot \vec{r}}{r^2} \left(\frac{\partial r}{\partial x} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial r}{\partial y} \frac{dy}{ds} + \frac{\partial r}{\partial z} \frac{dz}{ds} \right)$$
$$= \frac{\vec{\Omega}}{r} \cdot \left\{ \Omega_x \vec{i} + \Omega_y \vec{j} + \Omega_z \vec{k} \right\} - \frac{\vec{\Omega} \cdot \vec{r}}{r^2} \left(\frac{x}{r} \Omega_x + \frac{y}{r} \Omega_y + \frac{z}{r} \Omega_z \right)$$
$$= \frac{1}{r} - \frac{\left(\vec{\Omega} \cdot \vec{r} \right)^2}{r^3} = \frac{1}{r} \left[1 - \left(\frac{\vec{\Omega} \cdot \vec{r}}{r} \right)^2 \right] = \frac{1 - \mu^2}{r}$$

L'equazione del trasporto in coordinate sferiche per il caso monocinetico con densità di emissione isotropa risulta quindi:

$$\mu \frac{\partial \phi(r,\mu)}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial \phi(r,\mu)}{\partial \mu} + \Sigma_t(r)\phi(r,\mu) = \frac{\Sigma_s(r)}{2} \int_{-1}^1 \phi(r,\mu')d\mu' + S(r,\mu)$$

In vista della discretizzazione spaziale ed angolare, è conveniente porre il termine di "streaming" in *forma conservativa*, cioè in forma che, una volta integrata su di un volume finito, permetta agevolmente di ottenere l'esatta conservazione dei neutroni. In geometria sferica, i volumi di controllo su cui si deve integrare sono gusci sferici; integrando perciò il termine di "streaming" sul generico guscio compreso tra le superfici sferiche aventi raggio r_1 ed r_2 e su tutte le direzioni si ha:

$$\iint \vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} \phi d\Omega dV = \int_{r_1}^{r_2} 4\pi r^2 dr \int_{-1}^{1} 2\pi \vec{\nabla} \cdot (\vec{\Omega}\phi) d\mu$$
$$= \int_{r_1}^{r_2} 4\pi r^2 \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(r) dr = 4\pi r_2^2 J(r_2) - 4\pi r_1^2 J(r_1)$$

Perciò, si fa in modo che il termine di "streaming" sia espresso in modo da ottenere facilmente questo risultato, una volta moltiplicato per $4\pi r^2$ ed integrato sul guscio in considerazione. Utilizzando la forma:

e

$$\frac{\mu}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\phi) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \mu}\left[\left(1-\mu^2\right)\phi\right] \equiv \mu\frac{\partial\phi}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r}\frac{\partial\phi}{\partial \mu}$$

si ha

$$\int_{r_{1}}^{r_{2}} 4\pi r^{2} dr \int_{-1}^{1} 2\pi \left\{ \frac{\mu}{r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} (r^{2} \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \mu} [(1 - \mu^{2})\phi] \right\} d\mu$$
$$= \int_{r_{1}}^{r_{2}} 4\pi \frac{\partial}{\partial r} (r^{2} J) dr + \int_{r_{1}}^{r_{2}} 8\pi^{2} r dr \int_{-1}^{1} \frac{\partial}{\partial \mu} [(1 - \mu^{2})\phi] d\mu = 4\pi [r_{2}^{2} J(r_{2}) - r_{1}^{2} J(r_{1})] + 0$$

La forma conservativa dell'equazione del trasporto in coordinate sferiche è quindi:

$$\frac{\mu}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\phi) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \mu}\left[\left(1-\mu^2\right)\phi\right] + \Sigma_t(r)\phi(r,\mu) = \frac{\Sigma_s(r)}{2}\int_{-1}^1\phi(r,\mu')d\mu' + S(r,\mu)$$

Infine, introducendo la densità di emissione

$$q(r,\mu) = \frac{\sum_{s}(r)}{2} \int_{-1}^{1} \phi(r,\mu') d\mu' + S(r,\mu)$$

si ottiene

$$\frac{\mu}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\phi) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\mu}[(1-\mu^2)\phi] + \Sigma_t(r)\phi(r,\mu) = q(r,\mu)$$
(65)

6.3.2 Equazioni discretizzate

Come nel caso piano, anche in geometria monodimensionale sferica non si ha variazione del flusso angolare in funzione dell'angolo φ . La discretizzazione angolare riguarda perciò solo la variabile μ . La discretizzazione spaziale viene invece eseguita in modo analogo a quanto visto per il caso piano.

Ne risulta il dominio di integrazione rettangolare di Figura 25, la quale mostra anche una losanga (il "diamante") che unisce punti a cui viene assegnata particolare importanza nella definizione dell'algoritmo risolutivo.

Integrando la (65) su tale dominio rettangolare e in $d\varphi$ sull'intervallo $0 < \varphi < 2\pi$, si ha:

$$\int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}} d\mu \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \left\{ \frac{\mu}{r^2} \frac{\partial (r^2 \phi)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial [(1-\mu^2)\phi]}{\partial \mu} + \Sigma_t \phi - q \right\} 4\pi r^2 dr = 0$$

da cui si ottiene



Figura 25 – Discretizzazione spaziale ed angolare in geometria sferica

$$2\pi \int_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}} \mu \Big[4\pi r_{i+1/2}^2 \phi \Big(r_{i+1/2}, \mu \Big) - 4\pi r_{i-1/2}^2 \phi \Big(r_{i-1/2}, \mu \Big) \Big] d\mu$$

+ $8\pi^2 \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \Big[\Big(1 - \mu_{m+1/2}^2 \Big) \phi \Big(r, \mu_{m+1/2} \Big) - \Big(1 - \mu_{m-1/2}^2 \Big) \phi \Big(r, \mu_{m-1/2} \Big) \Big] r dr$
+ $2\pi \int_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}} d\mu \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} (\Sigma_i \phi - q) 4\pi r^2 dr = 0$

Come anticipato al paragrafo precedente, l'uso della forma conservativa dell'equazione del trasporto ha permesso un'agevole integrazione dell'equazione.

I tre termini integrali così ottenuti vengono quindi approssimati. Per il primo termine si ha:

$$2\pi \int_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}} \mu \Big[4\pi r_{i+1/2}^2 \phi \Big(r_{i+1/2}, \mu \Big) - 4\pi r_{i-1/2}^2 \phi \Big(r_{i-1/2}, \mu \Big) \Big] d\mu \cong 4\pi w_m \, \mu_m \Big(A_{i+1/2} \phi_{i+1/2,m} - A_{i-1/2} \phi_{i-1/2,m} \Big)$$

in cui si è posto

$$w_m = \frac{1}{2} \left(\mu_{m+1/2} - \mu_{m-1/2} \right) \qquad \mu_m = \frac{1}{2} \left(\mu_{m+1/2} + \mu_{m-1/2} \right) \qquad A_{i\pm 1/2} = 4\pi r_{i\pm 1/2}^2$$

e $\phi_{i\pm 1/2,m}$ rappresenta il valore medio del flusso angolare sull'elemento tesserale $d\Omega_m = 4\pi w_m$ vigente sulle superfici sferiche aventi raggio $r_{i-1/2}$ o $r_{i+1/2}$:

$$\phi_{i\pm 1/2,m} = \frac{1}{4\pi w_m} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}} \phi(r_{i\pm 1/2},\mu) d\mu$$

Il secondo termine viene invece approssimato nella forma:

$$8\pi^{2}\int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \left[\left(1 - \mu_{m+1/2}^{2}\right)\phi\left(r, \mu_{m+1/2}\right) - \left(1 - \mu_{m-1/2}^{2}\right)\phi\left(r, \mu_{m-1/2}\right) \right] r \, dr \cong 4\pi \left(a_{m+1/2}\phi_{i,m+1/2} - a_{m-1/2}\phi_{i,m-1/2}\right)$$
115

in cui $\phi_{i,m\pm 1/2}$ rappresenta il valore medio del flusso angolare sul volume V_i del guscio sferico delimitato dalle superfici sferiche di raggio $r_{i-1/2}$ e $r_{i+1/2}$, in corrispondenza dell'uno e dell'altro estremo dell'intervallo angolare

$$\phi_{i,m\pm 1/2} = \frac{1}{V_i} \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \phi(r,\mu_{m\pm 1/2}) 4\pi r^2 dr \qquad V_i = \frac{4}{3} \pi \left(r_{i+1/2}^3 - r_{i-1/2}^3\right)$$

mentre le costanti $a_{m-1/2}$ e $a_{m+1/2}$ sono i *coefficienti di derivazione angolare*, il cui valore verrà precisato nel seguito.

Il terzo integrale, infine, viene approssimato come segue:

$$2\pi \int_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}} d\mu \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} (\Sigma_{t} \phi - q) 4\pi r^{2} dr \cong 4\pi w_{m} V_{i} (\Sigma_{ti} \phi_{im} - q_{im})$$

in cui ϕ_{im} e q_{im} rappresentano i valori medi del flusso angolare e della densità di emissione sull'elemento tesserale $d\Omega_m$ e sul volume V_i del guscio sferico

$$\phi_{im} = \frac{1}{4\pi w_m V_i} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}} d\mu \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} \phi(r,\mu) 4\pi r^2 dr$$
$$q_{im} = \frac{1}{4\pi w_m V_i} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\mu_{m-1/2}}^{\mu_{m+1/2}} d\mu \int_{r_{i-1/2}}^{r_{i+1/2}} q(r,\mu) 4\pi r^2 dr$$

Con queste approssimazioni, l'equazione del trasporto discretizzata in geometria monodimensionale sferica assume la forma:

$$\mu_m \left(A_{i+1/2} \phi_{i+1/2,m} - A_{i-1/2} \phi_{i-1/2,m} \right) + \frac{1}{w_m} \left(a_{m+1/2} \phi_{i,m+1/2} - a_{m-1/2} \phi_{i,m-1/2} \right) + V_i \left(\Sigma_{ii} \phi_{im} - q_{im} \right) = 0 \quad (66)$$

Una prima indicazione al fine di determinare i coefficienti di derivazione angolare, si ottiene considerando il caso di <u>flusso uniforme</u> (cioè, spazialmente costante) <u>ed isotropo</u>. In questo caso, risulta

$$\phi_{i+1/2,m} = \phi_{i-1/2,m} = \phi_{i,m}$$

e nell'equazione discretizzata del trasporto il termine di "streaming" (cioè la somma dei due primi termini) deve annullarsi così da fornire

$$\Sigma_{ti}\phi_{im} = q_{im}$$

Tenendo conto di queste considerazioni, dalla (66) si ha:

$$\mu_m w_m \Big(A_{i+1/2} - A_{i-1/2} \Big) = a_{m-1/2} - a_{m+1/2}$$
(67)

Inoltre, nel caso generale (cioè flusso non uniforme e non isotropo) il termine dipendente dalla derivata angolare deve annullarsi una volta integrato su tutte le direzioni (come si è visto, ad esempio, derivando la forma conservativa dell'equazione del trasporto); perciò, dovendo essere

$$\sum_{m=1}^{M} \left(a_{m+1/2} \phi_{i,m+1/2} - a_{m-1/2} \phi_{i,m-1/2} \right) = a_{M+1/2} \phi_{i,M+1/2} - a_{1/2} \phi_{i,1/2} = 0$$

per l'arbitrarietà di $\phi_{i,1/2}$ e $\phi_{i,M+1/2}$ deve risultare

$$a_{1/2} = a_{M+1/2} = 0$$

Ciò esprime che i passaggi di neutroni da un intervallo direzionale all'altro si devono compensare fra loro così da non dar luogo a produzione o perdita netta. Allora, ponendo $a_{1/2} = 0$ la (67) permette di ottenere gli a_m per ricorrenza.

6.3.3 Algoritmo risolutivo

Le direzioni vengono scelte in modo che

$$-1 = \mu_{1/2} < \mu_1 < \mu_{3/2} < \dots < \mu_{M/2} < \mu_{M/2+1/2} = 0 < \mu_{M/2+1} < \dots < \mu_{M-1/2} < \mu_M < \mu_{M+1/2} = 1$$

in cui $\mu_{1/2} = -1$ è detta *direzione di partenza*, poiché dovendo risolvere un problema con la condizione al contorno di superficie libera (cioè, affacciata al vuoto) essa è la direzione con la quale si inizia il calcolo.

In tal caso, infatti, le condizioni al contorno assumono la forma:

$$\phi_{I+1/2,m} = 0$$
 $(m = 1, 2, ..., M/2)$ (68)

che esprime la condizione di superficie libera per $r = r_{I+1/2}$, poiché pone uguale a zero il flusso angolare relativo a direzioni con μ negativo (cioè, "entranti").

Al centro della sfera si deve imporre che il flusso angolare verifichi condizioni di simmetria che vengono generalmente espresse imponendo

$$\phi_{1/2,M+1-m} = \phi_{1/2,m} \qquad (m = 1, 2, ..., M/2) \tag{69}$$

Come si vedrà, l'applicazione della precedente sarà possibile perché prima di procedere con il calcolo del flusso angolare per una direzione caratterizzata da $\mu > 0$ sarà già stato eseguito il calcolo fino al centro della sfera per la corrispondente direzione con $\mu < 0$.

Si parte, perciò, con la direzione $\mu_{1/2} = -1$, discretizzando l'equazione del trasporto il cui termine di "streaming" non contiene il termine responsabile della dispersione angolare, essendo $1 - \mu^2 = 0$. La (66) allora assume la forma:

$$-\frac{\phi_{i+1/2,1/2} - \phi_{i-1/2,1/2}}{r_{i+1/2} - r_{i-1/2}} + \Sigma_{ii}\phi_{i,1/2} = q_{i,1/2}$$

in cui, al solito, si adotta la regola del "diamante" nella forma

$$\phi_{i-1/2,1/2} = 2\phi_{i,1/2} - \phi_{i+1/2,1/2}$$

in modo da avanzare il calcolo nel verso degli *r* decrescenti a partire dalle condizioni al contorno sulla superficie libera.

Si procede quindi al calcolo con $1 \le m \le M/2$ (cioè, per tutte le direzioni con $\mu < 0$) adottando insieme alla (66) la regola del "diamante" nella duplice forma, spaziale e angolare:

$$\phi_{im} \cong rac{\phi_{i-1/2,m} + \phi_{i+1/2,m}}{2} \cong rac{\phi_{i,m-1/2} + \phi_{i,m+1/2}}{2}$$

che chiama in causa i quattro punti ai vertici della losanga di Figura 25. Dal momento che si procede per *r* decrescente e μ crescente, la regola del diamante viene posta nelle due forme:

$$\phi_{i-1/2,m} = 2\phi_{im} - \phi_{i+1/2,m}$$
 $\phi_{i,m+1/2} = 2\phi_{im} - \phi_{i,m-1/2}$

che introdotte nella (66) permettono di eliminare i valori del flusso angolare ancora incogniti fornendo

$$\phi_{im} = \frac{-\mu_m \left(A_{i-1/2} + A_{i+1/2}\right) \phi_{i+1/2,m} + \frac{1}{w_m} \left(a_{m-1/2} + a_{m+1/2}\right) \phi_{i,m-1/2} + V_i q_{im}}{-\mu_m \left(A_{i-1/2} + A_{i+1/2}\right) + \frac{1}{w_m} \left(a_{m-1/2} + a_{m+1/2}\right) + V_i \Sigma_{ii}}$$
(70)

in cui si è fatto uso della (67). Dopo aver calcolato i valori del flusso angolare per tutte le direzioni con $\mu < 0$, si fa uso della (70) per assegnare il flusso angolare nel centro della sfera per le direzioni con $\mu > 0$. Si procede quindi per *r* e μ crescenti, facendo uso della regola del "diamante" nelle due forme

$$\phi_{i+1/2,m} = 2\phi_{im} - \phi_{i-1/2,m}$$
 $\phi_{i,m+1/2} = 2\phi_{im} - \phi_{i,m-1/2}$

che, combinate con la (66) permettono di ottenere una formula analoga alla (70) per l'avanzamento del calcolo. La Figura 26 riassume sinteticamente i passi dello schema di calcolo descritto.

Anche nel caso sferico, così come in quello piano, è possibile incontrare i problemi, precedentemente discussi, che richiedono l'utilizzazione di tecniche di "fix-up". Inoltre, rispetto alla geometria piana, in alcuni casi è stato osservato (Lewis & Miller, 1984) un comportamento della soluzione in prossimità dell'origine non giustificabile dal punto di vista fisico, che è stato attribuito all'andamento non uniforme dell'errore di troncamento in funzione di r.

La condizione (69) al centro della sfera è stata anch'essa considerata criticabile e si preferisce talora la relazione:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \mu} \right|_{r \to 0} = 0$$

che si discretizza imponendo che il flusso angolare al centro sia uguale in tutte le direzioni.



Figure 26 – Schema di avanzamento del calcolo in geometria sferica per un metodo S_8 con 10 nodi radiali

6.4 Il caso multidimensionale in coordinate cartesiane

6.4.1 Equazioni discretizzate

Nei casi multidimensionali è conveniente scrivere l'equazione integrodifferenziale stazionaria e monocinetica del trasporto nella forma

$$div\left[\vec{\Omega}\phi\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right)\right] + \Sigma_{t}\left(\vec{r}\right)\phi\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) - q\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) = 0$$
(71)

in cui si è nuovamente fatto uso della relazione (v. Cap. 3): $\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = div [\vec{\Omega} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega})]$. Considerato il volume elementare mostrato in Figura 27 intorno al punto $\vec{r}_{ijk} = \{x_i, y_j, z_k\}$ si ha:

$$V_{ijk} = \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \qquad \qquad A_{i-1/2, jk} = A_{i+1/2, jk} = \Delta y_j \Delta z_k = \frac{V_{ijk}}{\Delta x_i}$$
(72)

$$A_{i,j-1/2,k} = A_{i,j+1/2,k} = \Delta x_i \Delta z_k = \frac{V_{ijk}}{\Delta y_j} \qquad A_{ij,k-1/2} = A_{ij,k+1/2} = \Delta x_i \Delta y_j = \frac{V_{ijk}}{\Delta z_k}$$
(73)
(*i* = 1,...,*I*); (*j* = 1,...,*J*); (*k* = 1,...,*K*)

e, considerata la generica *direzione ammissibile* $\vec{\Omega}_m$, ad essa viene assegnato *l'elemento tesserale* di area $\Delta\Omega_m = 4\pi w_m$. Si definiscono, quindi, i valori medi del flusso sull'elemento tesserale e sul volume V_{ijk}

 $\phi_{ijk,m} = \frac{1}{4\pi w_m V_{ijk}} \int_{4\pi w_m} d\Omega \int_{V_{ijk}} \phi \, dV$



Figura 27 – Sistema di riferimento e volume elementare per le ordinate discrete nel caso multidimensionale

o sulle sue facce laterali

$$\phi_{i\pm 1/2, jk,m} = \frac{1}{4\pi w_m} \int_{A_{i\pm 1/2, jk}} \int_{A_{\pi w_m}} d\Omega \int_{A_{i\pm 1/2, jk}} \phi dA$$
$$\phi_{i, j\pm 1/2, k,m} = \frac{1}{4\pi w_m} \int_{A_{i, j\pm 1/2, k}} \int_{A_{\pi w_m}} d\Omega \int_{A_{i, j\pm 1/2, k}} \phi dA$$
$$\phi_{ij, k\pm 1/2, m} = \frac{1}{4\pi w_m} \int_{A_{ij, k\pm 1/2}} \int_{A_{\pi w_m}} d\Omega \int_{A_{ij, k\pm 1/2}} \phi dA$$

Integrando la (71) sull'elemento tesserale e su V_{ijk} si ha:

$$\int_{4\pi w_m} d\Omega \int_{V_{ijk}} \left\{ div \left[\vec{\Omega} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \right] + \Sigma_t(\vec{r}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) - q(\vec{r}, \vec{\Omega}) \right\} dV = 0$$
(74)

Il primo termine di questa equazione può essere approssimato come segue:

$$\int_{4\pi w_m} d\Omega \int_{V_{ijk}} div \Big[\vec{\Omega} \phi \Big(\vec{r}, \vec{\Omega} \Big) \Big] dV \cong \int_{4\pi w_m} d\Omega \int_{V_{ijk}} div \Big[\vec{\Omega}_m \phi \Big(\vec{r}, \vec{\Omega}_m \Big) \Big] dV = \int_{4\pi w_m} d\Omega \int_{\partial V_{ijk}} (\vec{\Omega}_m \cdot \vec{u}_e) \phi \Big(\vec{r}, \vec{\Omega}_m \Big) dA$$

Ponendo (v. Figura 27)

$$\vec{\Omega}_m \equiv \left\{ \mu_m, \eta_m, \zeta_m \right\}$$

si ha ancora

$$\int_{4\pi w_m} d\Omega \int_{\partial V_{ijk}} \left(\vec{\Omega}_m \cdot \vec{u}_e \right) \phi\left(\vec{r}, \vec{\Omega}_m \right) dA \cong 4\pi w_m \left\{ \mu_m \left(A_{i+1/2, jk} \phi_{i+1/2 jk, m} - A_{i-1/2, jk} \phi_{i-1/2 jk, m} \right) + \eta_m \left(A_{i, j+1/2, k} \phi_{ij+1/2 k, m} - A_{i, j-1/2, k} \phi_{ij-1/2 k, m} \right) + \zeta_m \left(A_{ij, k+1/2} \phi_{ijk+1/2, m} - A_{ij, k-1/2} \phi_{ijk-1/2, m} \right) \right\}$$

Tenendo conto delle (72) e (73), si ottiene

$$\int_{4\pi w_m} d\Omega \int_{\partial V_{ijk}} \left(\vec{\Omega}_m \cdot \vec{u}_e \right) \phi\left(\vec{r}, \vec{\Omega}_m \right) dA \cong 4\pi w_m V_{ijk} \left\{ \mu_m \frac{\phi_{i+1/2\,jk,m} - \phi_{i-1/2\,jk,m}}{\Delta x_i} + \eta_m \frac{\phi_{i,j+1/2\,k,m} - \phi_{i,j-1/2\,k,m}}{\Delta y_j} + \zeta_m \frac{\phi_{ijk+1/2,m} - \phi_{ijk-1/2,m}}{\Delta z_k} \right\}$$
(23)

Si pone inoltre:

 $^(^{23})$ Questa formula avrebbe potuto anche ottenersi direttamente dall'integrale di volume originario, senza bisogno di chiamare in causa il teorema della divergenza, approssimando il termine $div(\vec{\Omega}_m \phi)$ con l'espressione tra parentesi graffe.

$$\int_{4\pi w_m} d\Omega \int_{V_{ijk}} \left\{ \Sigma_t(\vec{r}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) - q(\vec{r}, \vec{\Omega}) \right\} dV \cong 4\pi w_m V_{ijk} \left(\Sigma_{t, ijk} \phi_{ijk, m} - q_{ijk, m} \right)$$

in cui è

$$q_{ijk,m} = \frac{1}{4\pi w_m V_{ijk}} \int_{4\pi w_m} d\Omega \int_{V_{ijk}} q(\vec{r}, \vec{\Omega}) dV$$

Si ha infine:

$$\mu_{m} \frac{\phi_{i+1/2\,jk,m} - \phi_{i-1/2\,jk,m}}{\Delta x_{i}} + \eta_{m} \frac{\phi_{i,j+1/2\,k,m} - \phi_{i,j-1/2\,k,m}}{\Delta y_{j}} + \zeta_{m} \frac{\phi_{ijk+1/2,m} - \phi_{ijk-1/2,m}}{\Delta z_{k}} + \Sigma_{t,ijk} \phi_{ijk,m} = q_{ijk,m}$$

$$(i = 1, \dots, I); \quad (j = 1, \dots, J); \quad (k = 1, \dots, K); \quad (m = 1, \dots, N_{m}) \quad (75)$$

che rappresenta la forma ad ordinate discrete dell'equazione del trasporto nel caso multidimensionale.

6.4.2 Algoritmo risolutivo e scelta delle direzioni ammissibili

In modo analogo a quanto visto nei casi monodimensionali, l'algoritmo utilizzato per risolvere questo sistema di equazioni tiene conto del verso di propagazione dei neutroni e, quindi, del segno dei coseni direttori μ_m , η_m e ζ_m di $\overline{\Omega}_m$. In particolare, in ciascuna delle tre direzioni si adotta la regola del diamante con le seguenti convenzioni:

$$\begin{cases} \mu_m > 0 & \phi_{i+1/2, jk} = 2 \phi_{ijk} - \phi_{i-1/2, jk} \\ \mu_m < 0 & \phi_{i-1/2, jk} = 2 \phi_{ijk} - \phi_{i+1/2, jk} \\ \eta_m > 0 & \phi_{i, j+1/2, k} = 2 \phi_{ijk} - \phi_{i, j-1/2, k} \\ \eta_m < 0 & \phi_{i, j-1/2, k} = 2 \phi_{ijk} - \phi_{i, j+1/2, k} \\ \zeta_m > 0 & \phi_{ij, k+1/2} = 2 \phi_{ijk} - \phi_{ij, k-1/2} \\ \zeta_m < 0 & \phi_{ij, k-1/2} = 2 \phi_{ijk} - \phi_{ij, k-1/2} \\ \end{cases}$$

Quindi, sostituendo le relazioni appropriate nella (75), si procede in direzione crescente o decrescente per ciascuna coordinata a seconda che il rispettivo coseno direttore sia maggiore o minore di zero. A titolo di esempio vengono riportate di seguito le relazioni che vengono ottenute in due casi particolari:

• $\mu_m > 0, \ \eta_m > 0, \ \zeta_m > 0$

$$\phi_{ijk,m} = \frac{\frac{2\mu_m}{\Delta x_i}\phi_{i-1/2\,jk,m} + \frac{2\eta_m}{\Delta y_j}\phi_{ij-1/2k,m} + \frac{2\varsigma_m}{\Delta z_k}\phi_{ijk-1/2,m} + q_{ijk,m}}{\frac{2\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{2\eta_m}{\Delta y_j} + \frac{2\varsigma_m}{\Delta z_k} + \Sigma_{t,ijk}}$$

•
$$\mu_m < 0, \eta_m > 0, \zeta_m < 0$$

$$\phi_{ijk,m} = \frac{\frac{2\mu_m}{\Delta x_i}\phi_{i+1/2jk,m} + \frac{2\eta_m}{\Delta y_j}\phi_{ij-1/2k,m} + \frac{2\varsigma_m}{\Delta z_k}\phi_{ijk+1/2,m} + q_{ijk,m}}{\frac{2\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{2\eta_m}{\Delta y_j} + \frac{2\varsigma_m}{\Delta z_k} + \Sigma_{t,ijk}}$$

La scelta delle direzioni ammissibili più appropriate può essere fatta con un certo grado di discrezionalità, sebbene si richieda in genere che vengano rispettati alcuni criteri fondamentali.

Un primo criterio consiste nell'imporre che se si è scelta una direzione ammissibile $\vec{\Omega}_m = \{\mu_m, \eta_m, \zeta_m\}$ tale che risulti (ovviamente)

$$\mu_m^2 + \eta_m^2 + \zeta_m^2 = 1 \tag{76}$$

anche le direzioni $\{-\mu_m, \eta_m, \zeta_m\}$, $\{\mu_m, -\eta_m, \zeta_m\}$ e $\{\mu_m, \eta_m, -\zeta_m\}$ devono essere direzioni ammissibili. Ciò permette, infatti, di imporre in maniera semplice e diretta condizioni di riflessione su piani paralleli ai tre piani coordinati.

Se si opera una tale scelta, è possibile considerare le direzioni incluse in un solo ottante (quello con coseni direttori tutti positivi), poiché le direzioni che interessano gli altri sette ottanti possono essere ottenute semplicemente cambiando di segno ai relativi coseni direttori.

Una scelta particolarmente interessante è quella che consiste nell'imporre che le direzioni ammissibili siano invarianti alle rotazioni di 90° rispetto a qualunque asse coordinato, in modo da riservare un uguale trattamento a ciascuno di essi. Questo tipo di parametri di quadratura ("level symmetric quadratures") è caratterizzato dall'avere un solo grado di libertà nella scelta delle direzioni ammissibili. Ciò discende dal fatto che i coseni direttori per una qualunque direzione devono essere scelti all'interno di un insieme di *M* valori che verificano le relazioni

$$-1 < -t_{M/2} < \dots < -t_1 < 0 < t_1 < \dots < t_{M/2} < 1$$

Tenendo conto della (76), se si sceglie di assegnare (v. Lewis & Miller, 1984)

$$\mu_m = t_i \qquad \eta_m = t_j \qquad \zeta_m = t_k$$

deve risultare

$$t_i^2 + t_j^2 + t_k^2 = 1 \tag{77}$$

Se poi si fa una scelta ulteriore assumendo $\mu_m = t_i$ e $\eta_m = t_{j+1}$, affinché sia soddisfatta la condizione di normalizzazione dovrà essere $\zeta_m = t_{k-1}$

$$t_i^2 + t_{j+1}^2 + t_{k-1}^2 = 1$$
(78)

Sottraendo membro a membro la (77) e la (78) si ha:

$$t_{j+1}^2 - t_j^2 = t_k^2 - t_{k-1}^2$$

Per l'arbitrarietà di $j \in k$ nella relazione precedente, si ha:

$$t_i^2 = t_{i-1}^2 + C \implies t_i^2 = t_1^2 + (i-1)C$$

e dovendo essere

$$t_1^2 + t_1^2 + t_{M/2}^2 = 1$$

si ottiene

$$C = \frac{2(1 - 3t_1^2)}{M - 2}$$

Dal momento che quadrature di questo genere coinvolgono per ogni asse $\frac{M}{2}$ valori positivi e $\frac{M}{2}$ valori negativi per ciascun coseno direttore, esse sono denominate "quadrature S_M ". Il numero totale di direzioni ammissibili per ottante risulta M(M+2)/8 e in totale su tutta la sfera esse sono M(M+2).

Per quanto riguarda i coefficienti di pesatura, si adotta generalmente una normalizzazione a livello di ottante

$$\sum_{m=1}^{M(M+2)/8} w_m^I = 1$$

in cui w_m^I indica il coefficiente di peso di una generica direzione ammissibile relativa al primo ottante. Conseguentemente, il flusso scalare in nel punto \vec{r}_{ijk} viene ottenuto dal flusso angolare tramite la formula

$$\phi_{ijk} = \frac{1}{8} \sum_{m=1}^{M(M+2)} w_m \phi_{ijk,m}$$

All'interno di ogni singolo ottante, si impone, inoltre, che direzioni ammissibili ottenute permutando i coseni direttori abbiano lo stesso peso.

Pur tenendo conto di queste limitazioni, è possibile adottare scelte diverse per definire i coefficienti di peso. Ad esempio è possibile richiedere che il maggior numero possibile di polinomi di Legendre nelle tre direzioni sia integrato esattamente; in questo caso si ottengono le quadrature denominate LQ_n (v. Tabella 3 e Figura 28). Altrimenti, si può preferire l'assegnazione di una frazione di area della sfera unitaria ad ogni direzione da utilizzare come peso.

Livello	т	μ_{m}	W _m
S ₂	1	$1/\sqrt{3}$	1
S_4	1	0.3500212	0.3333333
	2	0.8688903	
S ₆	1	0.2666355	0.1761263
	2	0.6815076	0.1572071
	3	0.9261808	
S_8	1	0.2182179	0.1209877
	2	0.5773503	0.0907407
	3	0.7867958	0.0925926
	4	0.9511897	

Tabella 3 – Parametri LQ_n per la quadratura S_N



 $\label{eq:spectral_spectral_spectral} Figure \ 28-Indicazione\ qualitativa\ delle\ direzioni\ ammissibili\ S_N\\ nell'ottante\ con\ coseni\ direttori\ positivi$

Le considerazioni precedenti relative al caso tridimensionale possono essere facilmente applicate anche a sistemi <u>bidimensionali</u>. In questo caso, un metodo S_M coinvolgerà un totale di (M+2)M/2 direzioni ammissibili nei quattro quadranti. La discretizzazione spaziale ed angolare verrà eseguita in modo analogo, adottando la regola del diamante nella forma più opportuna in ragione della direzione di propagazione dei neutroni, definita dal segno dei due coseni direttori.

6.5 Metodi accelerativi per le ordinate discrete

6.5.1 Generalità

In questo capitolo, si è assunto che la densità di emissione, q, fosse assegnata, come se si trattasse di una sorgente indipendente. Per problemi puramente assorbitivi questo corrisponde alla situazione reale, ma nella maggior parte dei

casi di pratico interesse la presenza dello scattering introduce una variabilità della densità di emissione in funzione della distribuzione del flusso che complica il raggiungimento della soluzione.

Il problema viene risolto, come già detto, iterando sulla sorgente di scattering, a partire da una stima iniziale, fino a quando un opportuno criterio di convergenza assicuri che la precisione voluta è stata raggiunta. La convergenza non sempre è rapida; in particolare, la presenza di regioni otticamente spesse e una notevole importanza dello scattering all'interno di uno stesso gruppo energetico rallentano fortemente la convergenza.

E' quindi necessario applicare opportune tecniche per accelerare la convergenza, due delle quali sono descritte nel seguito.

6.5.2 "Coarse mesh-rebalance"

Questa tecnica è basata sul fatto che una distribuzione del flusso angolare che abbia raggiunto la convergenza deve necessariamente rispettare il bilancio neutronico. Ciò non è vero, in generale, per la distribuzione ad una generica iterazione, visto che essa è stata determinata per mezzo di una stima della sorgente di scattering ottenuta dal flusso dell'iterazione precedente, che può essere anche molto diverso da quello finale.

Si intuisce, quindi, che modificando il valore del flusso angolare ottenuto ad una data iterazione in modo da forzarlo a soddisfare la condizione di bilancio almeno su regioni relativamente estese, si introduce generalmente un miglioramento nella velocità di convergenza.

Allo scopo di illustrare l'implementazione pratica di questa tecnica, ricordiamo che, come mostrato al Cap. 3, l'equazione integrodifferenziale del trasporto integrata su tutte le direzioni fornisce l'equazione di continuità dei neutroni. Si ha, infatti:

$$\int_{4\pi} \vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\Omega + \int_{4\pi} \Sigma_t(\vec{r}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\Omega = \int_{4\pi} d\Omega \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega' + \int_{4\pi} S(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\Omega$$

da cui

$$div \int_{4\pi} \vec{\Omega} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\Omega + \Sigma_t(\vec{r}) \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\Omega = \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega' \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') d\Omega + \int_{4\pi} S(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\Omega$$

e ancora

$$div \, \vec{J}(\vec{r}) + \Sigma_t(\vec{r})\phi(\vec{r}) = \Sigma_s(\vec{r})\phi(\vec{r}) + S(\vec{r})$$

ovvero

$$div \,\vec{J}(\vec{r}) + \Sigma_r(\vec{r})\phi(\vec{r}) = S(\vec{r})$$

avendo posto $\Sigma_r(\vec{r}) = \Sigma_t(\vec{r}) - \Sigma_s(\vec{r})$.

Il dominio di integrazione, già suddiviso in un numero relativamente grande di nodi, secondo le esigenze del metodo S_N considerato, viene ripartito in N_m regioni di maggiore dimensioni ("coarse meshes") ottenute raggruppando le regioni più fini, come mostrato in Figura 26. Si impone quindi che il bilancio neutronico sia soddisfatto in ciascuna regione V_m

$$\int_{V_m} div \, \vec{J}(\vec{r}) dV + \int_{V_m} \sum_r (\vec{r}) \phi(\vec{r}) dV = \int_{V_m} S(\vec{r}) dV$$

da cui si ottiene

$$\sum_{m'} \int_{\Gamma_{mm'}} \vec{J}(\vec{r}) \cdot \vec{u}_e d\Gamma + \int_{V_m} \Sigma_r(\vec{r}) \phi(\vec{r}) dV = \int_{V_m} S(\vec{r}) dV$$

Come si vedrà tra poco, risulta conveniente suddividere la corrente a



Figura 29 - Regioni grossolane per il "coarse-mesh rebalance"

ciascuna interfaccia con le regioni adiacenti nel contributo entrante e in quello uscente. Perciò

$$\sum_{m'} \int_{\Gamma_{mm'}} J_{+}(\vec{r}) d\Gamma - \sum_{m'} \int_{\Gamma_{mm'}} J_{-}(\vec{r}) d\Gamma + \int_{V_{m}} \Sigma_{r}(\vec{r}) \phi(\vec{r}) dV = \int_{V_{m}} S(\vec{r}) dV$$
(79)

Ora si suppone che il flusso scalare e le correnti che compaiono in questa relazione siano ottenuti dal flusso angolare calcolato alla *l*-esima iterazione per mezzo del metodo S_N , indicato con $\tilde{\phi}^{\prime}(\vec{r},\vec{\Omega})$, moltiplicato per un coefficiente di aggiustamento (incognito), diverso per ogni regione, che avrà lo scopo di far tornare le cose dal punto di vista del bilancio neutronico. Si pone cioè:

$$\begin{split} \phi^{l+1}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) &= f_m \widetilde{\phi}^{l}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) & \vec{r} \in V_m \\ \phi^{l+1}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) &= f_m \widetilde{\phi}^{l}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) & \vec{r} \in \Gamma_{mm'}, \ \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e > 0 \\ \phi^{l+1}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) &= f_{m'} \widetilde{\phi}^{l}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) & \vec{r} \in \Gamma_{mm'}, \ \vec{\Omega} \cdot \vec{u}_e < 0 \end{split}$$

in cui si comprende che, allo scopo di calcolare la corrente alle interfacce, è stato necessario distinguere il flusso angolare in relazione alla direzione di provenienza dei neutroni, visto che i coefficienti di aggiustamento per il flusso nelle varie "regioni grossolane" sono diversi.

Ponendo perciò:

$$\begin{split} \phi(\vec{r}) &= \int_{4\pi} \phi^{l+1}(\vec{r},\vec{\Omega}) d\Omega = f_m \int_{4\pi} \widetilde{\phi}^l(\vec{r},\vec{\Omega}) d\Omega = f_m \widetilde{\phi}^l(\vec{r}) \\ J_-(\vec{r}) &= \int_{\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_e<0} \phi^{l+1}(\vec{r},\vec{\Omega}) |\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_e| d\Omega = f_{m'} \int_{\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_e<0} \widetilde{\phi}^l(\vec{r},\vec{\Omega}) |\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_e| d\Omega = f_{m'} \widetilde{J}_-^l(\vec{r}) \\ J_+(\vec{r}) &= \int_{\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_e>0} \phi^{l+1}(\vec{r},\vec{\Omega}) |\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_e| d\Omega = f_m \int_{\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_e>0} \widetilde{\phi}^l(\vec{r},\vec{\Omega}) |\vec{\Omega}\cdot\vec{u}_e| d\Omega = f_m \widetilde{J}_+^l(\vec{r}) \\ \vec{r} \in \Gamma_{mm'} \end{split}$$

e sostituendo nella (79) si ottiene:

$$\left(\sum_{m'}\int_{\Gamma_{mm'}}\widetilde{J}_{+}^{l}(\vec{r})d\Gamma + \int_{V_{m}}\Sigma_{r}(\vec{r})\widetilde{\phi}^{l}(\vec{r})dV\right)f_{m} - \sum_{m'}\left(\int_{\Gamma_{mm'}}\widetilde{J}_{-}^{l}(\vec{r})d\Gamma\right)f_{m'} = \int_{V_{m}}S(\vec{r})dV$$

da cui, ponendo

129

si ottiene

$$a_{mm}f_m - \sum_{m' \neq m} a_{mm'}f_{m'} = b_m$$
 (m = 1,2,...,N_m)

che rappresenta un sistema lineare con matrice sparsa nelle incognite f_m . La sua soluzione permette perciò di ottenere la nuova approssimazione del flusso angolare da utilizzare come dato iniziale per il ciclo di iterazioni successivo sulla sorgente di scattering.

6.5.3 Accelerazione sintetica in diffusione (DSA)

In questa tecnica (DSA = Diffusion Synthetic Acceleration) si fa uso di una approssimazione di basso ordine dell'operatore del trasporto in modo da ottenere un miglioramento della convergenza.

Restringendoci per semplicità al caso di scattering e sorgente indipendente isotropi, l'equazione del trasporto assume la forma

$$\vec{\Omega} \cdot grad_{\vec{r}} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) - \frac{\Sigma_s(\vec{r})}{4\pi} \int_{4\pi}^{\pi} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\Omega' = \frac{S_0(\vec{r})}{4\pi}$$

e utilizzando la notazione operatoriale

$$H_0 \cdot = \vec{\Omega} \cdot \operatorname{grad}_{\vec{r}} \cdot + \Sigma_t(\vec{r}) \cdot \qquad \qquad H_1 \cdot = \frac{\Sigma_s(\vec{r})}{4\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \qquad \qquad H \cdot = H_0 \cdot - H_1 \cdot$$

si ha

$$H\phi\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) = H_0\phi\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) - H_1\phi\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) = \frac{S_0(\vec{r})}{4\pi}$$

Integrando ambo i membri di questa relazione su tutte le direzioni, si ottiene

$$\int_{4\pi} d\Omega \, H\phi\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) = S_0\left(\vec{r}\right)$$

Si introduce quindi l'operatore del trasporto di basso ordine nella forma dell'operatore della diffusione

$$H_a \cdot = -div D(\vec{r}) grad_{\vec{r}} \cdot + \Sigma_r(\vec{r}) \cdot$$

e si scrive l'operatore del trasporto come somma dell'operatore di basso livello più un operatore differenza:

$$\int_{4\pi} d\Omega \Big[H_a + \big(H - H_a \big) \Big] \phi \Big(\vec{r}, \vec{\Omega} \Big) = S_0 \big(\vec{r} \big)$$

Poiché l'operatore della diffusione opera direttamente sul flusso scalare, si può adottare la notazione

$$\int_{4\pi} d\Omega H_a \phi\left(\vec{r}, \vec{\Omega}\right) = H_a \phi\left(\vec{r}\right)$$

ottenendo

$$H_a\phi(\vec{r}) = S_0(\vec{r}) - \int_{4\pi} d\Omega (H - H_a)\phi(\vec{r},\vec{\Omega})$$

Ciò suggerisce di utilizzare lo schema iterativo

$$H_a \phi^{l+1}(\vec{r}) = S_0(\vec{r}) - \int_{4\pi} d\Omega (H - H_a) \widetilde{\phi}^l(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

ovvero

$$H_{a}\left[\phi^{\prime+1}\left(\vec{r}\right)-\widetilde{\phi}^{\prime}\left(\vec{r}\right)\right] = S_{0}\left(\vec{r}\right)-\int_{4\pi}H\widetilde{\phi}^{\prime}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right)d\Omega$$
(80)

in cui $\tilde{\phi}^{l}(\vec{r},\vec{\Omega})$ è il flusso angolare ottenuto tramite l'operatore del trasporto, facendo uso del flusso scalare determinato alla *l*-esima iterazione per valutare il termine di scattering, cioè:

$$H_{0}\tilde{\phi}^{\prime}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) = H_{1}\phi^{\prime}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) + \frac{S_{0}\left(\vec{r}\right)}{4\pi}$$
(81)

Notando quindi che

$$H\widetilde{\phi}^{l}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) = H_{0}\widetilde{\phi}^{l}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) - H_{1}\widetilde{\phi}^{l}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right)$$

e facendo uso della (81) si ottiene

$$H\widetilde{\phi}^{l}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) = H_{1}\phi^{l}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) + \frac{S_{0}\left(\vec{r}\right)}{4\pi} - H_{1}\widetilde{\phi}^{l}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) = H_{1}\left[\phi^{l}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) - \widetilde{\phi}^{l}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right)\right] + \frac{S_{0}\left(\vec{r}\right)}{4\pi}$$

che, sostituita nella (80) fornisce

$$H_{a}\left[\phi^{l+1}(\vec{r}) - \tilde{\phi}^{l}(\vec{r})\right] = S_{0}(\vec{r}) - \int_{4\pi} \left\{ H_{1}\left[\phi^{l}(\vec{r},\vec{\Omega}) - \tilde{\phi}^{l}(\vec{r},\vec{\Omega})\right] + \frac{S_{0}(\vec{r})}{4\pi} \right\} d\Omega$$
$$H_{a}\left[\phi^{l+1}(\vec{r}) - \tilde{\phi}^{l}(\vec{r})\right] = \int_{4\pi} H_{1}\left[\tilde{\phi}^{l}(\vec{r},\vec{\Omega}) - \phi^{l}(\vec{r},\vec{\Omega})\right] d\Omega$$

e, ricordando la definizone di H_a ed H_1 , si ha infine

$$(div D(\vec{r})grad_{\vec{r}} - \Sigma_{r}(\vec{r})) \left[\phi^{l+1}(\vec{r}) - \widetilde{\phi}^{l}(\vec{r}) \right] = \Sigma_{s}(\vec{r}) \left[\widetilde{\phi}^{l}(\vec{r}) - \phi^{l}(\vec{r}) \right]$$

Si vede perciò che, noti $\phi^{i}(\vec{r})$ e $\tilde{\phi}^{i}(\vec{r})$, questa relazione permette di aggiornare il termine di scattering dell'equazione del trasporto applicando l'operatore del trasporto di basso livello, cioè risolvendo l'equazione della diffusione.

6.6 "Ray effects"

Un problema che si presenta applicando metodi S_N di ordine non troppo elevato è la presenza di oscillazioni non fisiche nel flusso scalare ottenuto dal calcolo. L'ampiezza di queste oscillazioni si riduce aumentando l'ordine dello schema e, corrispondentemente, la loro frequenza aumenta.

La ragione di questo increscioso comportamento dei metodi S_N è diretta conseguenza della caratteristica che maggiormente li contraddistingue e cioè della discretizzazione della variabile angolare. Infatti, poiché il flusso scalare viene calcolato come somma pesata del flusso angolare ottenuto per un numero limitato di direzioni ammissibili, può accadere che a causa della particolare configurazione geometrica e delle caratteristiche nucleari di un dato problema non si riesca a rendere conto in modo appropriato del reale andamento del flusso scalare in funzione delle coordinate spaziali.

In Figura 30 viene illustrato il caso di una sorgente di neutroni (la zona centrale) circondata da un mezzo che si assume caratterizzato da una sezione d'urto macroscopica di scattering molto inferiore a quella totale ($\Sigma_s \ll \Sigma_t$). Imponendo una condizione al contorno di superficie libera sul bordo esterno, il problema è tipicamente monodimensionale e ci si attende che sulle circonferenze concentriche con la sorgente (come quella tratteggiata) il flusso scalare sia costante.

Ciononostante, applicando metodi alle ordinate discrete di tipo bidimensionale, ci si troverebbe di fronte ad un apparente assurdo. Nel caso S_2 , infatti, si osserverebbero oscillazioni considerevoli del flusso scalare lungo la circonferenza tratteggiata dovute al fatto che non sempre le poche direzioni



Figura 30 – Tipica situazione in cui possono insorgere "ray effects" ammissibili intercettano la sorgente. E' bene tenere presente, infatti, che per le ipotesi fatte sulle sezioni d'urto del mezzo che circonda la sorgente, i neutroni che raggiungono la circonferenza tratteggiata sono principalmente neutroni "di primo volo", cioè che non hanno ancora subito collisione; ciò spiega perché in questo problema la posizione delle direzioni ammissibili rispetto alla sorgente sia tanto rilevante. Spostandosi dal punto *A* al punto *B* si osserverebbe quindi un aumento considerevole nel flusso scalare; ulteriori spostamenti porterebbero ad una diminuzione del flusso, quindi ad un aumento e così via ciclicamente.

Un modo ovvio di mitigare il problema è quello di aumentare l'ordine del metodo. Si intuisce dalla figura che nel caso S_4 la situazione migliora, sebbene sia chiaro che saranno comunque presenti oscillazioni nel flusso scalare, ma con ampiezza inferiore e frequenza più elevata rispetto al caso S_2 .

Un altro modo di ridurre l'entità delle oscillazioni dovute ai "ray effects" è quello di modificare la discretizzazione angolare, sostituendo alla scelta di direzioni ammissibili discrete (che rappresenta una sorta di "collocazione angolare") medie di vario genere su intervalli angolari. Questi metodi sono efficaci soprattutto ai bassi ordini, ma non risolvono completamente il problema. Da questo punto di vista, il metodo delle armoniche sferiche si mostra superiore ai metodi S_N perché evita l'insorgere di oscillazioni.

7. Soluzione Analitica per Trasporto con Sorgente Localizzata

a) Definizione del problema e relativa equazione del trasporto

Consideriamo il caso di una sorgente piana in un mezzo infinito ed omogeneo.

Poniamo

$$c = \frac{\sum_{s}}{\sum_{t}}$$

e assumiamo come unità di lunghezza il libero cammino medio totale $l_t = 1/\Sigma_t$. Si ponga, inoltre, la sorgente in x = 0 e la si normalizzi in modo da ottenere una emissione di 1 n/s, cosa che fornisce

$$S(x,\mu) = \frac{1}{2}\delta(x)$$

Infatti, si verifica che:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-1}^{1} S(x) d\mu = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx \int_{-1}^{1} \frac{1}{2} d\mu = 1$$

Il flusso $\phi(x,\mu)$ è retto dall'equazione integrodifferenziale monocinetica, che, nell'approssimazione di scattering isotropo, è:

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} + \phi(x,\mu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^{1} \phi(x,\mu') d\mu' + \frac{1}{2} \delta(x)$$
(82)

Poiché

$$\int_{-1}^{1} \phi(x,\mu') d\mu' = \phi_0(x) = flusso \ scalare$$

la (82) può anche essere scritta nella forma

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} + \phi(x, \mu) = \frac{c}{2} \phi_0(x) + \frac{1}{2} \delta(x)$$

b) Tecnica risolutiva

Si esegue, quindi, la trasformata di Fourier di ambo i membri della precedente. Ponendo

$$\widetilde{\phi}(B,\mu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iBx} \phi(x,\mu) dx$$
$$\widetilde{\phi}_0(B) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iBx} \phi_0(x) dx$$

135

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{iBx}dx\int_{-1}^{1}\phi(x,\mu)d\mu=\int_{-1}^{1}d\mu\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{iBx}\phi(x,\mu)dx=\int_{-1}^{1}\widetilde{\phi}(B,\mu)d\mu$$

e ricordando il teorema di derivazione, si ha:

$$\left(\frac{\partial \phi(x,\mu)}{\partial x}\right) = -iB\widetilde{\phi}(B,\mu) \qquad ;$$

si ottiene perciò

$$-iB\mu\widetilde{\phi}(B,\mu) + \widetilde{\phi}(B,\mu) = \frac{c}{2}\widetilde{\phi}_0(B) + \frac{1}{2\sqrt{2\pi}}$$
(83)

•

in cui si è fatto uso del risultato

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{iBx}\delta(x)dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Dalla (83), si ricava

$$\widetilde{\phi}(B,\mu) = \frac{1}{1-iB\mu} \left[\frac{c}{2} \widetilde{\phi}_0(B) + \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \right]$$

Integrando ambo i membri di questa relazione su $-1 \le \mu \le 1$ e tenendo conto che

$$\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{1}{1-iB\mu}d\mu = \frac{1}{2iB}\ln\frac{1+iB}{1-iB} = \frac{1}{B}\operatorname{arctg} B = K(B)$$
⁽²⁴⁾

risulta

$$\widetilde{\phi}_0(B) = K(B) \left[c \widetilde{\phi}_0(B) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right]$$

da cui

(²⁴) Si verifica che

$$B = \tan \alpha = \frac{\sec \alpha}{\cos \alpha} = \frac{1}{i} \frac{e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}}{e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}} = \frac{1}{i} \frac{e^{2i\alpha} - 1}{e^{2i\alpha} + 1} \quad \text{con} \qquad \alpha = \frac{1}{2i} \ln \frac{1 + iB}{1 - iB}$$

Infatti:

$$e^{2i\alpha} = e^{\ln\frac{1+iB}{1-iB}} = \frac{1+iB}{1-iB}$$

e quindi

$$\tan \alpha = \frac{1}{i} \frac{e^{2i\alpha} - 1}{e^{2i\alpha} + 1} = \frac{1}{i} \frac{1 + iB - 1 + iB}{1 + iB + 1 - iB} = \frac{1}{i} \frac{2iB}{2} = B \qquad \Rightarrow \qquad \alpha = \frac{1}{2i} \ln \frac{1 + iB}{1 - iB} = \operatorname{arctg} B$$



Figura 31 – Piano complesso

$$\widetilde{\phi}_0(B) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{K(B)}{1 - cK(B)}$$
(84)

E' ora necessario antitrasformare:

$$\phi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iBx} \widetilde{\phi}_0(B) dB = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} dB$$

L'applicazione del teorema dei residui all'ultimo integrale richiede una certa cautela.

c) Un'opportuna digressione

Sia z = x + iy un numero complesso. In forma polare, risulta (v. Figura 31):

 $z = \rho e^{i\vartheta}$

dove

$$\rho = |z|$$
 $\vartheta = \arg z$

Tutti i ϑ tali che $\vartheta = \vartheta_0 + 2k\pi$ ($k = 0, \pm 1, \pm 2, ...$) portano allo stesso z. Di conseguenza

$$\ln z = \ln \rho + i(\vartheta_0 + 2k\pi)$$

è una funzione ad infiniti valori. In particolare, $\rho = 0$ è il "punto di diramazione" dove tutte le rappresentazioni equivalenti di $z = \rho e^{i\vartheta}$ vengono a coincidere indipendentemente da *k*. La possiamo ridurre ad un sol valore scegliendo, ad esempio, k = 0 e obbligando ϑ_0 a variare tra $-\pi \in \pi$; si pratica, cioè, un "taglio"



Figura 32 – "Tagli" nel piano complesso

nel piano complesso che va dall'origine fino a $-\infty$, cioè lungo il semiasse reale negativo (v. Figura 32a). Allora, si ha semplicemente

$$\ln z = \ln \rho + i\vartheta_0 \qquad (0 < \rho < \infty, -\pi < \vartheta_0 < \pi)$$

(d'ora in poi ϑ_0 sarà chiamato semplicemente ϑ). In questo modo, il logaritmo risulta una funzione ad un sol valore e per $\vartheta \equiv \vartheta_0 = 0$, cioè per valori reali e positivi di *z*, coincide con il valore aritmetico $\ln \rho$.
Così facendo, si perde però la "continuità ovunque" della funzione originaria; infatti, al bordo del taglio (che è ora invalicabile) $\ln z$ prende valori distinti:

$$\ln z = \ln \rho \pm i\pi = \ln |x| \pm i\pi \qquad \left(z = x + iy, \ x < 0, \ y \to 0^{\pm}\right)$$

Nel caso di $\ln(1+iz)$ basta porre $\varsigma = 1+iz$ cioè $z = (\varsigma - 1)/i = i(1-\varsigma)$. Il punto di diramazione $\varsigma = 0$ corrisponde, in termini di z, a z = i e il taglio può essere fatto da i ad $i\infty$, lungo il semiasse immaginario al di sopra dell'asse reale (v. Figura 32b). Sui bordi destro e sinistro del taglio (chiamati S^+ ed S^-) la funzione prende i valori $\ln|\varsigma| \pm i\pi$ che, essendo z = x + iy, con $x \to 0^{\pm}$ e y > 1, equivale a $\ln|1+iz| \pm i\pi = \ln|1+i(0^{\pm}+iy)| \pm i\pi = \ln|1-y| \pm i\pi = \ln(y-1) \pm i\pi$.

Analogamente si ragiona per $\ln(1-iz)$: qui il taglio va da -i a $-i\infty$ (v. Figura 32c). Per rendere univoca la funzione

$$\operatorname{arctg} z = \frac{1}{2i} \ln \frac{1+iz}{1-iz} = \frac{1}{2i} \left[\ln(1+iz) - \ln(1-iz) \right]$$

è quindi chiaro che occorrono entrambi i tagli (v. Figura 32d).

Considerato, ad esempio, il taglio superiore, si ha, come abbiamo visto

$$su \ S^{+} \equiv (x = 0^{+}, 1 < y < \infty): \qquad \ln(1 + iz) = \ln(y - 1) + i\pi$$
$$su \ S^{-} \equiv (x = 0^{-}, 1 < y < \infty): \qquad \ln(1 + iz) = \ln(y - 1) - i\pi$$

Invece $\ln(1-iz)$ è continua sui bordi, nel senso che il suo valore è sempre lo stesso; non importa, infatti, se *z* giunge sul taglio provenendo da destra oppure da sinistra (così come $\ln z$ è continua attraverso il semiasse reale positivo).

Ponendo, quindi, $B = \xi + i\eta$ in luogo di z = x + iy vediamo subito che per $K(B) = \operatorname{arctg} B/B$, si ha

$$su \ S^{+} \equiv \left(x = 0^{+}, 1 < y < \infty\right): \qquad K^{+}(\eta) \equiv \lim_{\substack{\xi \to 0^{+} \\ (\eta > 1)}} K(\xi + i\eta) = -\frac{1}{2\eta} \left(\ln \frac{\eta - 1}{\eta + 1} + i\pi\right)$$
$$su \ S^{-} \equiv \left(x = 0^{-}, 1 < y < \infty\right): \qquad K^{-}(\eta) \equiv \lim_{\substack{\xi \to 0^{-} \\ (\eta > 1)}} K(\xi + i\eta) = -\frac{1}{2\eta} \left(\ln \frac{\eta - 1}{\eta + 1} - i\pi\right)$$

I valori di K(B) differiscono perciò di $-i\pi/\eta$ sui bordi del taglio, passando da S^+ ad S^- . Nel piano tagliato, anche la funzione

$$\frac{K(B)}{1 - cK(B)}$$

è, in tal modo, resa univoca. Il salto tra S^+ ed S^- è

$$\frac{K^{+}(\eta)}{1-cK^{+}(\eta)} - \frac{K^{-}(\eta)}{1-cK^{-}(\eta)} = -i\frac{(\pi/\eta)}{\left(1+\frac{c}{2\eta}\ln\frac{\eta-1}{\eta+1}\right)^{2} + \left(\frac{c\pi}{2\eta}\right)^{2}}$$

d) Poli della antitrasformata

Essi si trovano in corrispondenza degli zeri del denominatore della (84), ovvero delle radici dell'equazione

$$1 - cK(B) = 0 \tag{85}$$

che può essere anche scritta

$$\frac{c}{B}\operatorname{arctg} B = \frac{c}{2iB}\ln\frac{1+iB}{1-iB} = 1$$
(86)

Si afferma che *per c* < 1 *esiste nel piano tagliato un'unica coppia di radici complesse coniugate*

$$B = \pm i \eta_0 \qquad \qquad \text{con} \qquad 0 < \eta_0 < 1$$

<u>Dim.</u> Consideriamo dapprima l'intervallo $0 < \eta < 1$ dell'asse immaginario. La (86) equivale a

$$e^{-\frac{2}{c}\eta} = \frac{1-\eta}{1+\eta}$$
(87)

Il grafico dei due membri di questa relazione (v. Figura 33) mostra che in (0,1) vi è uno ed un sol valore di η , diciamo η_0 , che soddisfa la (87) e quindi la (86).

Considerando ora l'intervallo $-1 < \eta < 0$, e sostituendo $-\eta$ ad η , la (86) diventa

$$e^{\frac{2}{c}\eta} = \frac{1+\eta}{1-\eta}$$

che è equivalente alla (87). Ne segue che in (-1,0) esiste ancora una ed una sola radice, $-\eta_0$.

Si verifica poi subito, ricordando che

$$\operatorname{arctg} B = B - \frac{B^3}{3} + \dots$$

140



Figura 33 – Andamento di I e II membro dell'equazione (87)

che B = 0 non è radice della (86) per c < 1. Non resta che dimostrare che in tutto il resto del piano tagliato, cioè nei due semipiani $\text{Re}(B) = \xi > 0$ e $\text{Re}(B) = \xi < 0$ <u>non</u> vi sono altre radici.

Sia $B = \xi + i\eta$, $\xi \neq 0$. La (85), ricordando come è stata ottenuta la funzione K(B), può scriversi:

$$1 = cK(B) = \frac{c}{2} \int_{-1}^{1} \frac{d\mu}{1 - iB\mu}$$

Uguagliando le parti reale ed immaginaria dei due membri, si ha:

$$1 = \frac{c}{2} \int_{-1}^{1} \frac{1 + \eta \mu}{\left(1 + \eta \mu\right)^{2} + \xi^{2} \mu^{2}} d\mu$$
(88)

$$0 = \frac{c\xi}{2} \int_{-1}^{1} \frac{\mu d\mu}{(1+\eta\mu)^{2} + \xi^{2}\mu^{2}} = \frac{c\xi}{2} \int_{-1}^{1} \frac{\left[1 + \left(\xi^{2} + \eta^{2}\right)\mu^{2}\right]\mu d\mu}{\left[1 + \left(\xi^{2} + \eta^{2}\right)\mu^{2}\right]^{2} - 4\eta^{2}\mu^{2}} - c\xi \int_{-1}^{1} \frac{\eta\mu^{2}d\mu}{\left[1 + \left(\xi^{2} + \eta^{2}\right)\mu^{2}\right]^{2} - 4\eta^{2}\mu^{2}}$$
(89)

Nella (89) il primo integrale dell'ultimo membro è nullo, perché la funzione integranda è dispari; il secondo, la cui funzione integranda è pari e non negativa (in particolare, il denominatore vale 1 per $\mu = 0$ ed è > $[1+\eta^2\mu^2]^2 - 4\eta^2\mu^2 = [1-\eta^2\mu^2]^2 \ge 0$ per $\mu \ne 0$) è nullo solo se $\eta = 0$. Quindi la (89) può essere soddisfatta solo ponendo $\eta = 0$, ma in tal caso non potrà essere soddisfatta la (88) perché

$$\frac{c}{2} \int_{-1}^{1} \frac{d\mu}{1 + \xi^{2} \mu^{2}} < \frac{c}{2} \int_{-1}^{1} d\mu < 1 \qquad Q.E.D.$$

e) Calcolo del valore del flusso

Calcoliamo anche il residuo dell'antitrasformata (moltiplicata per $e^{-iBx}/\sqrt{2\pi}$) nel polo $i\eta_0$.

Si ha:

$$Residuo = \lim_{B \to i\eta_0} (B - i\eta_0) \frac{\frac{1}{2\pi} K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx}$$

Sviluppando il denominatore $1 - cK(B) = 1 - (c/B) \operatorname{arctg} B$ intorno a $B = i\eta_0$ e osservando che $K(i\eta_0) = 1/c$ per la (85), risulta

$$Residuo = \frac{1}{2\pi} \frac{e^{\eta_0 x}}{\frac{c}{i\eta_0} \left(1 - \frac{c}{1 - \eta_0^2}\right)}$$

Riprendiamo la formula di inversione:

$$\phi_0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} dB \qquad x < 0$$

Considerato il circuito $\Gamma = ABCDEA$ (v. Figura 34) che si svolge nel semipiano (tagliato) superiore, poiché all'interno di esso la funzione integranda $(1/2\pi)K(B)e^{-iBx}/(1-cK(B))$, con *B* in generale complesso, ha come unica singolarità il polo in $i\eta_0$, si avrà



Figura 34 - Circuito di integrazione

142

$$\int_{\Gamma} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} d\Gamma = \int_{AB} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} d\Gamma + \int_{BC} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} d\Gamma + \int_{CD} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} d\Gamma + \int_{DE} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} d\Gamma + \int_{EA} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} d\Gamma = 2\pi i \times Residuo$$

Ma per x < 0 gli integrali sugli archi *BC* ed *EA* tendono a zero (la funzione trasformata è $O(|B|^{-1})$ e ciò è più che sufficiente). Perciò, essendo ovviamente

$$\int_{AB} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} d\Gamma = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} dB$$

,

raccogliendo i contributi che restano si ricava

$$\begin{split} \phi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} dB = 2\pi i \times Residuo \\ &\quad -\int_{CD} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} d\Gamma - \int_{DE} \frac{1}{2\pi} \frac{K(B)}{1 - cK(B)} e^{-iBx} d\Gamma \\ &= \frac{e^{\eta_0 x}}{\frac{c}{\eta_0} \left(\frac{c}{1 - \eta_0^2} - 1\right)} - i \int_{-\infty}^{1} \frac{1}{2\pi} \frac{K^+(i\eta)}{1 - cK^+(i\eta)} e^{\eta x} d\eta - i \int_{1}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{K^-(i\eta)}{1 - cK^-(i\eta)} e^{\eta x} d\eta \\ &= \frac{e^{\eta_0 x}}{\frac{c}{\eta_0} \left(\frac{c}{1 - \eta_0^2} - 1\right)} + \int_{1}^{\infty} \frac{1}{2\eta \left[\left(1 + \frac{c}{2\eta} \ln \frac{\eta - 1}{\eta + 1}\right)^2 + \left(\frac{c\pi}{2\eta}\right)^2 \right]} e^{\eta x} d\eta \end{split}$$

Un risultato analogo si ha per x > 0 (il circuito Γ va ora tracciato nel semipiano inferiore), salvo mutare x in -x.

Passando, poi, dalle *x* espresse in unità di libero cammino medio, l_t , alle x in cm, e ponendo $\eta_0 = l_t/L$, cioè $L = l_t/\eta_0$, si ottiene:

$$\phi(x) = \frac{l_t \left(L - l_t^2 \right)}{c L \left[(c-1) L^2 + l_t^2 \right]} e^{-|x|/L} + \frac{1}{2} \int_1^\infty \frac{1}{\left(1 + \frac{c}{2\eta} \ln \frac{\eta - 1}{\eta + 1} \right)^2 + \left(\frac{c\pi}{2\eta} \right)^2} e^{-\frac{\eta}{l_t} |x|} \frac{d\eta}{\eta}$$
(90)

f) Commenti

Poiché $\eta_0 < 1$, risulta $L < l_t$. Inoltre, l'equazione (86), ponendo senz'altro $B = i\eta$ con $0 < \eta < 1$ può scriversi

$$1 = \frac{c}{2\eta} \ln \frac{1+\eta}{1-\eta} \tag{91}$$

ed ammette, come sappiamo, la soluzione $\eta = \eta_0$. Per η piccolo lo sviluppo di Taylor del logaritmo dà

$$1 = c \left(1 + \frac{\eta^2}{3} + \frac{\eta^4}{5} + \dots \right)$$

e trascurando i termini di ordine superiore a η^2 , si ha

$$\eta_0^2 = 3\frac{1-c}{c}$$

(valida per $c \rightarrow 1$ perché solo allora $\eta = \eta_0$ è piccolo).

Segue

$$L^{2} = \frac{l_{t}^{2}}{\eta_{0}^{2}} = \frac{1/\Sigma_{t}^{2}}{3\frac{\Sigma_{t}}{\Sigma_{s}}\left(1 - \frac{\Sigma_{s}}{\Sigma_{t}}\right)} = \frac{\Sigma_{s}/(3\Sigma_{t}^{2})}{\Sigma_{a}} = \frac{D_{diff}}{\Sigma_{a}}$$
(92)

dove D_{diff} esprime il coefficiente di diffusione così come è fornito dalla deduzione elementare della legge di Fick. L^2 appare perciò come <u>l'area di diffusione</u>.

In generale, specialmente per $c \ll 1$, la lunghezza di diffusione $L = \sqrt{L^2}$ non potrà essere data dalla formula approssimata (92), ma dalla (91), cioè

$$1 = \frac{cL}{2l_t} \ln \frac{L+l_t}{L-l_t}$$

da risolversi rispetto ad *L* per via grafica o numerica (sono disponibili grafici e tabulazioni).

La (10) ci mostra che $\phi(x)$ è dato da due contributi

$$\phi(x) = \phi_{asintotico}(x) + \phi_{transitorio}(x)$$

dove $\phi_{asintotico}(x)$ è dominante per $|x| \to \infty$ ed è caratterizzato dall'andamento esponenziale $\exp(-|x|/L)$: esso è quindi <u>soluzione dell'equazione della diffusione</u> con un *L* appropriato, ma che per mezzi poco assorbenti ($c = \Sigma_s / \Sigma_t \to 1$) tende al valore classico $\Sigma_s / (3\Sigma_a \Sigma_t^2)$. D'altra parte, $\phi_{transitorio}(x)$ è di natura <u>trasportistica</u>; infatti, esso decade rapidamente dopo pochi liberi cammini medi essendo 144 $O(\exp(-|x|/L))$, ma nell'origine $(x \to 0)$, come è facile verificare, tende logaritmicamente all'infinito. Quest'ultimo effetto è dovuto ai neutroni che arrivano direttamente in volo libero dalla sorgente.

g) Estensione al caso tridimensionale

Facciamo uso della formula di passaggio tra funzioni di Green di piano e di punto (v. Fisica del Reattore). Esse valgono sia nel caso della diffusione che in quello del trasporto in quanto si tratta di relazioni che coinvolgono le funzioni di influenza, indipendentemente dalla teoria sulla base della quale sono state ottenute.

Si ha:

$$G_p(R) = -\frac{1}{2\pi R} \frac{dG_{pl}(R)}{dR}$$

Per sorgente puntiforme, posta nell'origine si ha

$$\phi(r) = \frac{2l_t \left(L - l_t^2\right)}{cL^2 \left[cL^2 - L^2 + l_t^2\right]} \frac{e^{-r/L}}{4\pi r} + \frac{1}{l_t} \int_1^\infty \frac{1}{\left(1 + \frac{c}{2\eta} \ln \frac{\eta - 1}{\eta + 1}\right)^2 + \left(\frac{c\pi}{2\eta}\right)^2} \frac{e^{-\frac{\eta}{l_t}r}}{4\pi r} d\eta$$

dove l'ultimo integrale si comporta come

$$\frac{1}{l_t} \int_{1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\eta}{l_t}r}}{4\pi r} d\eta = \frac{e^{-\frac{r}{l_t}}}{4\pi r^2}$$

(è facile verificarlo nel caso $c \rightarrow 0$) e mostra la singolarità $1/r^2$ dei neutroni in volo diretto dalla sorgente puntiforme nell'origine.

Bibliografia

G. I. Bell e S. Glasstone

"Nuclear Reactor Theory"

R.E. Krieger Publishing Co. Inc., Malabar Florida, USA, 2nd Ed., 1979

J.R. Lamarsh

"Introduction to Nuclear Reactor Theory"

Addison Wesley, 1966

E.E. Lewis e W.F. Miller

"Computational Methods of Neutron Transport"

Wiley-Interscience Publication, John Wiley and Sons, New York, 1984

B. Montagnini

"Appunti del Corso di Fisica dei Reattori a Fissione"

DCMN, Pisa