

LAPPEENRANNAN-LAHDEN TEKNILLINEN YLIOPISTO
School of Energy Systems
Energiatekniikka
BH10A0202 Energiatekniikan kandidaatintyö

HOMOGENISOITUJEN RYHMÄVAKIOIDEN LUOMINEN SYDÄNSIMULAATTORILLE

Lappeenrannassa 12.5.2021
Jerry Nissinen

TIIVISTELMÄ

Lappeenrannan-Lahden teknillinen yliopisto
School of Energy Systems
Energiatekniikka

Jerry Nissinen

Homogenisoitujen ryhmävakioiden luominen sydänsimulaattorille

Kandidaatintyö 2021

Tarkastaja: Heikki Suikkanen

Ohjaaja: Heikki Suikkanen, Ville Rintala

36 sivua, 4 taulukkoa, 9 kuvaa

Hakusanat: homogenisointi, reaktorifysiikka, ryhmävakio, vaikutusala,

Keywords: homogenization, reactor physics, group constant, cross section

Tässä kandidaatintyössä esitellään oleellisia Serpent-reaktorifysiikkaohjelmalla laskettuja homogenisoituja ryhmävakioita BEAVRS benchmark -reaktorin polttoainenipulle ja havainnollistetaan ryhmävakioiden parametrusointi homogenisoidulle absorptiovaikutusalalle. Ryhmävakioiden merkitys pyritään selventämään kuvaamalla niihin liittyvää teoriaa. Työ alkaa ytimen ja neutronin vuorovaikutusten esittelystä ja etenee loogisessa järjestyksessä ryhmävakioiden teoriaan. Suhteellisen suuri osa työstä käsittelee vaikutusaloja, sillä niillä on merkittävä rooli ryhmävakioiden muodostamisessa. Työn tuloksena demonstroidaan homogenisoidun polttoainenipun ryhmävakioiden arvoja, kun nipun olosuhteet muuttuvat. Loppupäättelmissä pohditaan haasteita, jotka liittyvät ryhmävakiokirjaston luomiseen.

SISÄLLYS

TIIVISTELMÄ

SISÄLLYSLUETTELO

SYMBOLILUETTELO

1	JOHDANTO	5
2	NEUTRONIN VUOROVAIKUTUS YTIMEN KANSSA	7
3	VAIKUTUSALAT	9
3.1	Mikroskooppinen ja makroskooppinen vaikutusala	9
3.2	Reaktioiden vaikutusalat	11
3.3	Differentiaalinen vaikutusala	13
3.4	Reaktionopeus	16
4	RYHMÄVAKIOT	18
4.1	Neutronien jatkuvuusyhtälö	18
4.2	Ryhmävakioiden homogenisointi	20
4.3	Monte Carlo -menetelmä	22
5	HOMOGENISOITUJEN RYHMÄVAKIOIDEN LUONTI JA PARAMETRISOINTI	25
5.1	Ryhmävakioiden luonti BEAVRS benchmark -reaktorille	25
5.2	Ryhmävakiolaskennan tulokset	29
5.3	Ryhmävaktion parametrisointi	31
6	YHTEENVETO JA PÄÄTELMÄT	33
	LÄHTEET	35

LIITTEET

Liite 1: Ryhmävakiolaskennassa käytetty syöte Serpent-ohjelmalle

Liite 2: Parametrisoinnissa käytetty Python-koodi

SYMBOLILUETTELO

Roomalaiset

<i>A</i>	pinta-ala, massaluku	cm ²
<i>c</i>	neutronien lukumäärä	
<i>D</i>	diffuusiovakio	cm
<i>E</i>	energia	eV
<i>f</i>	todennäköisyystiheys	
<i>I</i>	intensiteetti	cm ⁻² s ⁻¹
<i>l</i>	luonnollinen osuus	
<i>M</i>	moolimassa	gmol ⁻¹
<i>N</i>	ydintiheys, lukumäärä	cm ⁻³
<i>n</i>	neutronitiheys	eV ⁻¹ cm ⁻³ s ⁻¹
<i>Q</i>	neutronilähde	eV ⁻¹ cm ⁻³ s ⁻¹
<i>R</i>	reaktionopeus	s ⁻¹
<i>T</i>	lämpötila	K
<i>v</i>	nopeus	ms ⁻¹
<i>V</i>	tilavuus	cm ³
<i>x</i>	etäisyys	cm

Kreikkalaiset

α	törmäysparametri	
Σ	makroskooppinen vaikutusala	cm ⁻¹
σ	mikroskooppinen vaikutusala	b,cm ²
ϕ	neutronivuo	eV ⁻¹ cm ⁻² s ⁻¹
ψ	kulmaneutronivuo	eV ⁻¹ cm ⁻² s ⁻¹ sr ⁻¹
ρ	tiheys, satunnaisluku, reaktiivisuus	gcm ⁻³
$\hat{\Omega}$	avaruuskulma	sr
μ	sirontakosini	
ν	fissiossa syntyvien neutronien lukumäärä	

Alaindeksit

a	absorptio
b	boori
Bv	boorisoitu vesi
f	fissio
g	energiaryhmä
i	reaktio
j	isotooppi
s	sironta
v	vesi

1 JOHDANTO

Reaktorisydämen käyttäytymisen mallintaminen on monimutkainen tehtävä, sillä se vaatii jatkuvaa tietoa reaktorisydämessä vallitsevasta neutronijakaumasta. Mitä enemmän neutroneita esimerkiksi törmää keskimäärin polttoaineeseen, sitä enemmän polttoaineytimiä fissioituu ja sitä suurempi on reaktorin tuottama lämpöteho. Reaktorisydän on neutronin keskimääräisesti kulkeman matkan kannalta suuri geometria, joka sisältää lukuisia heterogeenisiä alueita ja epäjatkuvuuksia materiaalien välillä. Neutronin käyttäytyminen vaihtelee radikaalisti riipuen siitä, missä materiaalissa neutroni liikkuu tietyllä hetkellä: tietty materiaali sisältää sille ominaisen isotooppisekoituksen, jonka ytimiin neutronin on mahdollista osua. Neutroni voi ytimeen törmätessään esimerkiksi absorboitua ja hävitä kokonaan tai aiheuttaa fission ja ”monistua” useaksi neutroniksi. Käyttäytymistä neutronin ja tietyn ytimen välisessä kohtaamisessa voidaan arvioida niin sanottujen vaikutusalojen avulla, jotka periaatteessa kuvaavat todennäköisyyttä, että tietty reaktio tapahtuu neutronin törmätessä ytimeen. Vaikutusalat riippuvat neutronin energiasta, ytimen tyypistä ja ytimen termisestä energiasta eli materiaalin lämpötilasta. Lisäksi vaikutusaloissa esiintyy usein resonanssikäyttäytymistä tietyillä neutronin energioilla. Yleisesti vaikutusalat ovat siis hyvin monimutkaisia usean muuttujan funktioita.

Vaikeutta laskentaan aiheuttavat siis reaktorisydämen suuri koko ja heterogeenisuus, neutronin monenlaiset tavat, joilla se jatkaa (tai ei jatka) elämäänsä törmäyksen jälkeen ja vaikutusalojen monimutkaisuus. Ryhmävakiot ovat periaatteessa kertoimia, joilla laskentaan liittyviä vaikeuksia saadaan yhdistettyä ja laskentaa saatettua käytännössä toteutettavaan muotoon. Esimerkiksi sen sijaan, että yritetään selvittää energiassa ja paikassa jatkuvaa neutronijakaumaa, suoritetaan energian ja paikan diskretisointi integroimalla olennaista yhtälöä haluttujen energia- ja paikkavälien yli. Tällöin ongelma muuttuu jatkuvasta diskreetiksi. Se, kuinka hyvin diskreetin ongelman ratkaisu vastaa jatkuvaa todellista ratkaisua, riippuu siitä miten hyvin diskretoinnissa syntyneet kertoimet – ryhmävakiot – on saatu määritettyä. Suurin ongelma ryhmävakioiden määrittämisessä on, että niiden eksakti ratkaisu vaatii tietoa selvitetävänä olevasta neutronijakaumasta etukäteen. Tässä työssä ryhmävakioiden ratkaisemiseen käytetään Serpent-reaktorifysiikkaohjelmaa, jonka laskenta perustuu Monte Carlo -menetelmään. Monte Carlo -menetelmällä edellä kuvattu ongelma on mahdollista kiertää.

Ryhmävakioilla on käytännön laskennassa erittäin tärkeä rooli, sillä saadun ratkaisun tarkkuus riippuu käytetyistä ryhmävakioista. Työn loppupuoli käsittelee eräälle reaktorille laskettuja ryhmävakioita, mutta ennen sitä luodaan pohja niiden paremmalle ymmärtämiselle.

Tämän työn tavoitteena on esitellä ryhmävakioihin liittyvää teoriaa ja demonstroida ryhmävakioiden luomista laskemalla ryhmävakiot erään reaktorisydämen polttoainepulle. Ryh-

mävakioiden avulla tehtävä nodaalilaskenta jätetään tekemättä. Lisäksi työssä keskitytään lähinnä sellaisiin ryhmävakioihin, jotka liittyvät läheisesti vaikutusaloihin. Osa kertoimista, joita voitaisiin myös kutsua ryhmävakioiksi, rajataan työn käsittelyn ulkopuolelle.

2 NEUTRONIN VUOROVAIKUTUS YTIMEN KANSSA

Kun neutroni törmää ytimeen, se joko siroaa ”biljardipallomaisesti” ytimestä tai absorboituu ytimeen ja muodostaa *väliytimen*. Väliydin on ydin, jonka massaluku on absorboituneen neutronin takia kasvanut yhdellä ja joka on hetkellisessä viritystilassa, jossa ytimen energia on kasvanut: Atomin ytimen nukleonit voivat saada vain tiettyjä diskreettejä energioita, joita voidaan kuvata energiatasoina. Kun ydin on virittynyt, yksi tai useampi nukleoni on siirtynyt korkeammalle energiatasolle, jolloin koko ytimen energia on kasvanut verrattuna virittymättömän ytimen energiaan. Virittymättömässä ytimessä kaikki nukleonit ovat alimalla mahdollisella energiatasolla. (Duderstadt and Hamilton, 1976; Lamarsh and Baratta, 2001)

Virittyneen väliytimen viritystila voi purkautua usealla eri tavalla:

- 1) *Kaappausreaktiossa* väliydin emittoi gammasäteitä tai virittyneita hiukkasia (Stacey, 2007). Kaappausreaktio ”hävittää” neutronin, eli se vähentää vapaana olevien neutronien lukumäärää. Esimerkiksi ydinreaktorissa uraani-238:n muodostama väliydin voi purkaa virityksensä emittoimalla gammasäteitä. Reaktion seurauksena muodostuu uraani-239, joka lopulta hajoaa (puoliintumisaika noin 24 min) plutonium-239:ksi. Esimerkki virittyneen hiukkasen emissiosta on neutronin absorboituminen boori-10:een, jolloin boorin viritys voi joskus purkautua alfahiukkasen emissiolla.
- 2) *Epäelastisessa sironnassa* väliydin emittoi neutronin, mutta ydin jää virittyneeseen tilaan. Emittoituneen neutronin kineettinen energia on pienempi kuin absorboituneen neutronin, sillä osa energiasta on jäänyt ytimen viritystilaan liittyväksi energiaksi. Viritystila purkautuu gammasäteiden, varattujen hiukkasten tai ylimääräisten neutronien emissiolla. Jos esimerkiksi epäelastisen sironnan seurauksena on emittoitunut kaksi neutronia, puhutaan $(n, 2n)$ -reaktioista. Epäelastiseksi sironnaksi kutsutaan reaktioita, jossa emittoituu ainoastaan yksi neutroni. Reaktiota, jossa emittoituu enemmän kuin yksi neutroni, sanotaan (n, xn) -reaktioksi. (Stacey, 2007)
- 3) *Elastisessa resonanssisironnassa* väliydin emittoi neutronin ja ytimen energia palaa takaisin arvoon ennen törmäystä. Absorboituneen ja emittoituneen neutronin kineettinen energia säilyy reaktiossa. (Duderstadt and Hamilton, 1976)
- 4) *Fissiossa* väliydin jakaantuu useaan (kahteen tai useampaan) erikokoiseen isotooppiin, joita sanotaan fissiotuotteiksi. Samalla emittoituu vaihteleva määrä neutroneita ja gammasäteitä. Pääosa vapautuvasta energiasta menee fissiotuotteiden liike-energiaksi. Loput energiasta jakautuu välittömästi fissiossa syntyville neutroneille ja gammasäteille

sekä fissiotuotteiden hajoamisissa syntyville hiukkasille ja sieppausreaktioissa vapautuville gammasäteille. (Duderstadt and Hamilton, 1976; Lamarsh and Baratta, 2001)

Edellä listattuja viritystilan purkautumistapoja kutsutaan tässä työssä yleisesti *reaktioiksi*. Fissiota lukuunottamatta reaktioissa esiintyy yleensä suuntariippuvuutta, toisin sanottuna reaktiossa emittoituvat neutronit suosivat tiettyjä suuntia. Fissiossa neutronien approksimoidaan emittoituvan suunnasta riippumattomasti, toisin sanottuna isotrooppisesti (Bell and Glasstone, 1970). Lisäksi reaktioille on ominaista resonanssinomaisesti tapahtuva neutroniabsorptio, kun neutroni törmää ytimeen sopivalla kineettisellä energialla. Resonanssissa neutronin todennäköisyys absorboitua ytimeen kasvaa merkittävästi (Stacey, 2007).

Osion alussa mainittu biljardipallomainen törmäys neutronin ja ytimen välillä on myös reaktio, jota sanotaan *potentiaalisironnaksi* (Stacey, 2007). Potentiaalisironnalla ei sisällä väliytimen muodostumista ja on heikosti neutronin energiasta riippuva (Duderstadt and Hamilton, 1976). Lisäksi myös potentiaalisironnassa neutroni emittoituu suunnasta riippuvasti (Bell and Glasstone, 1970). Potentiaalisironnasta ja elastista resonanssisironnasta kutsutaan tässä työssä ”elastiseksi sironnaksi”.

3 VAIKUTUSALAT

3.1 Mikroskooppinen ja makroskooppinen vaikutusala

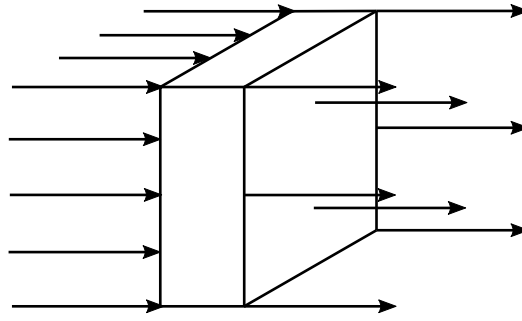
Jokaista osiossa 2 esitettyä neutronin ja ytimen välistä reaktioita karakterisoi reaktiolle ominainen *vaikutusala*, joka kuvaa todennäköisyyttä, että tietty reaktio tapahtuu. Kaikkien vaikutusalojen summa muodostaa *kokonaisvaikutusalan*, joka liittyy todennäköisyyteen, että neutroni törmää ytimeen. Todennäköisyysmerkityksen lisäksi kokonaisvaikutusalaa voidaan pitää pinta-alana, jolla neutroni ”näkee” ytimen. (Duderstadt and Hamilton, 1976)

Vaikutusalojen käyttäytyminen on kuitenkin yleisesti paljon kuvattua esimerkkiä monimutkaisempaa, sillä ne liittyvät neutronin suunnasta ja energiasta riippuviin reaktioihin. Erityisesti väliytimen muodostumisen kautta tapahtuvien reaktioiden resonanssikäyttäytyminen aiheuttaa myös niitä karakterisoiviin vaikutusaloihin resonanssikäyttäytymistä. Lisäksi vaikutusalojen monimutkaisuutta lisää se, että reaktiot tapahtuvat yleisesti hyvin laajalla energiavälillä. Esimerkiksi tyypillisessä kevytvesireaktorissa fissiossa syntyneen neutronin energia on useiden megaelektronivolttien luokkaa, mutta pääasiallisesti fissioita aiheuttavien termisten neutronien energia on reilusti alle yhden elektronivoltin.

Vaikutusalan todennäköisyys- ja pinta-alaluonnetta voidaan saattaa formaalimpaan muotoon usein käytetyn valaisevan esimerkin avulla (Lewis and Miller, 1984; Lamarsh and Baratta, 2001; Duderstadt and Hamilton, 1976): Kuvitellaan äärettömän paksu seinä, jonka *ydintiheys* on N (ytimien lukumäärä per yksikkötilavuus) ja monoenerginen neutronisäde, jonka alkuintensiteetti on I_0 (neutronien lukumäärä per yksikköaika per yksikköpinta-ala) ja joka ammutaan kohtisuorasti seinään. Olkoon neutronisädettä vastaan kohtisuora seinän pinta-ala A . Kun neutronisäde kulkee seinässä, yksittäinen neutroni näkee yksittäisen ytimen pinta-alana σ . Tätä pinta-alaa, joka liittyy yksittäisen neutronin ja ytimen väliseen vuorovaikutukseen, sanotaan *mikroskooppiseksi vaikutusalaksi*. Mikroskooppiset vaikutusalat ilmoitetaan yksikössä, jota kutsutaan *barniksi*¹. Pieni seinämän leveys dx sisältää yhteensä $ANdx$ ydintä ja kun oletetaan, että ytimet eivät varjosta toisiaan neutronisäteen kulkusuunnan suhteen, niin ytimet muodostavat yhteensä pinta-alan $AN\sigma dx$, johon neutronisäde voi osua. Suuretta $N\sigma$ sanotaan *makroskooppiseksi vaikutusalaksi* ja sitä merkitään Σ :lla. Makroskooppisen vaikutusalan yksikkö ei ole pinta-ala, vaan käänteispituus, joten pinta-alaluonne hieman hämärtyy. Sitä voidaan kuitenkin periaatteessa pitää pinta-alojen lukumääränä yksikkötilavuutta kohti. Tästä lähtien sekä makroskooppista että mikroskooppista vaikutusalaa voidaan kutsua yksinkertaisesti vaikutusalaksi.

Neutronisäteen edetessä seinässä, osa neutroneista törmää ytimiin, jolloin törmäämättömän

¹Barnin tunnus on b ja $1b = 10^{-24}\text{cm}^2$.



Kuva 1. Neutronisäteen vaimeneminen seinässä.

säteen intensiteetti pienenee. Tätä on havainnollistettu kuvassa 1. Kun säde on edennyt matkan x , intensiteetti on törmäysten seurauksena pienentynyt arvoon $I(x)$. Pisteessä x neutronisäteen osumapinta-ala on $AN\sigma dx$, joten seuraavan dx mittaisen matkan aikana yhteensä $I(x)AN\sigma dx$ neutronia on törmännyt ytimiin per yksikköaika ("per yksikköaika" ei enää mainita tästä eteenpäin, vaan sitä pidetään selvänä silloin kun se on aiheellista). Pisteessä x on ollut kaiken kaikkiaan $I(x)A$ neutronia, joten *todennäköisyys*, että neutroni törmää matkalla dx on

$$\frac{I(x)AN\sigma dx}{I(x)A} = N\sigma dx = \Sigma dx. \quad (3.1)$$

Siten todennäköisyys, että neutroni törmää per yksikköpituus, on vaikutusala Σ . Vaikutusalan todennäköisyysluonne on hyvin merkittävä. Sitä käytetään esimerkiksi usein neutroniikkalaskujen perustana olevan neutronien transport-yhtälön johtamisessa ja *keskimääräisen vapaamatkan* määrittämisessä. Keskimääräinen vapaamatka kertoo keskiarvoisen matkan, jonka neutroni kulkee ennen törmäystä. Tutkimalla, kuinka neutronisäde vaimenee seinässä, on suoraviivaista näyttää miten keskimääräinen vapaamatka riippuu vaikutusalaista.

Kuten edellä saatiin, vaikutusala Σ kertoo todennäköisyyden yksikköpituutta kohti, että etäisyydelle x selvinnyt neutroni törmää seuraavalla dx -pituisella matkalla. Koska seinän alussa on I_0A törmäämätöntä neutronia ja etäisyydelle x selvinneiden törmäämättömien neutronien lukumäärä on $I(x)A$, niin neutroni selviää etäisyydelle x todennäköisyydellä $I(x)/I_0$. Näin ollen todennäköisyys, että neutroni selviää etäisyydelle x ja törmää seuraavalla dx -pituisella matkalla, on vaikutusalan ja intensiteettisuhteen tulo. Tämä tulo määrittelee todennäköisyystiheysfunktion neutronin törmäykselle seinässä. Eksplisiittinen paikan funktio intensiteetille saadaan, kun huomataan, että matkalla dx säteen intensiteetti muuttuu neutronitörmäysten takia määrällä $dI = -I(x)AN\sigma dx$. Tästä on separoimalla mahdollista ratkaista intensiteetti $I(x) = I_0 \exp(-\Sigma x)$. Näin ollen keskimääräinen vapaamatka on

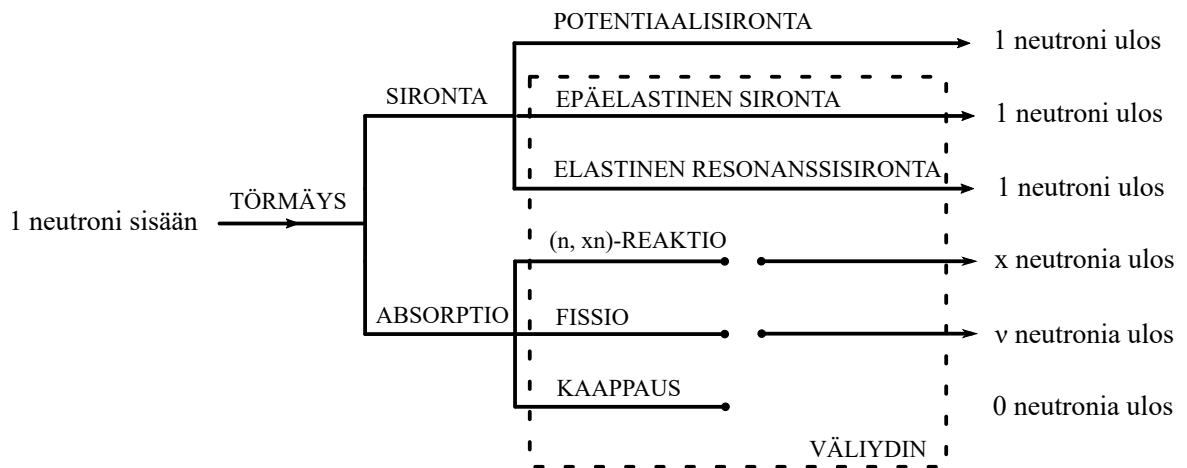
$$\langle x \rangle = \int_0^{\infty} x \Sigma \frac{I(x)}{I_0} dx = \int_0^{\infty} x \Sigma \exp(-\Sigma x) dx = \frac{1}{\Sigma}, \quad (3.2)$$

missä viimeinen yhtäsuuruus on mahdollista saada osittaisintegroinnilla. Vaikutusalan kää-

teisluku kertoo siis keskimääräisen etäisyyden, jolla neutroni törmää ytimeen. Keskimääräinen vapaamatka on tärkeä suure, sillä esimerkiksi usein laskennassa käytetty diffuusioap-proksimaatio on pätevä ainoastaan usean keskimääräisen vapaamatkan päässä systeemin reunoista, neutronilähteistä ja muista epäsäännöllisyyksistä (Duderstadt and Hamilton, 1976).

3.2 Reaktioiden vaikutusalat

Edellisessä osiossa käytetty vaikutusala liittyi neutronin ja ytimen väliseen törmäykseen. Kuten edellä mainittiin, tätä vaikutusalaa kutsutaan kokonaisvaikutusalaksi. Törmäysreaktio on kuitenkin ainoastaan alku, jonka jälkeen neutronin elämä joko jatkuu tai päättyy osiossa 2 esiteltyjen reaktioiden seurauksena. Mahdolliset vaihtoehdot, kun neutroni kohtaa ytimen, näkyvät kuvassa 2. Fissioreaktiota voidaan kohdella absorptioreaktiona, kun ajatellaan, että fission käynnistävän neutronin elämä päättyy väliytimen muodostuessa (Bell and Glasstone, 1970).



Kuva 2. Neutronin mahdolliset ”kohtalot”, kun se törmää ytimeen.

Jokainen vaikutusala on siihen liittyvien ”alivaikutusalojen” summa: sirontavaikutusala on kaikkien mahdollisten sirontareaktioiden ja absorptiovaikutusala kaikkien mahdollisten absorptioreaktioiden vaikutusalojen summa. Kokonaisvaikutusala saadaan sirontavaikutusalan ja absorptiovaikutusalan summasta. (Lewis and Miller, 1984)

Reaktion i (sironta, absorptio, fission jne.) vaikutusala Σ_i on ydintiheyden N ja mikrokooppisen vaikutusalan σ_i tulo. Yleisesti ydintiheys vaihtelee sekä ajassa että paikassa: esimerkiksi ydinreaktorissa tietyssä paikassa ydintiheys muuttuu polttoaineen palamisen seurauksena ja tietyllä hetkellä reaktori sisältää useita eri materiaaleja (jäähdyte, moderaattori, polttoaine jne.). Tämän takia on selvää, että vaikutusalat ovat yleisesti paikan, ajan ja neutronin energian funktioita, missä energiariippuvuus sisältyy mikrokooppiseen vaikutusalaan:

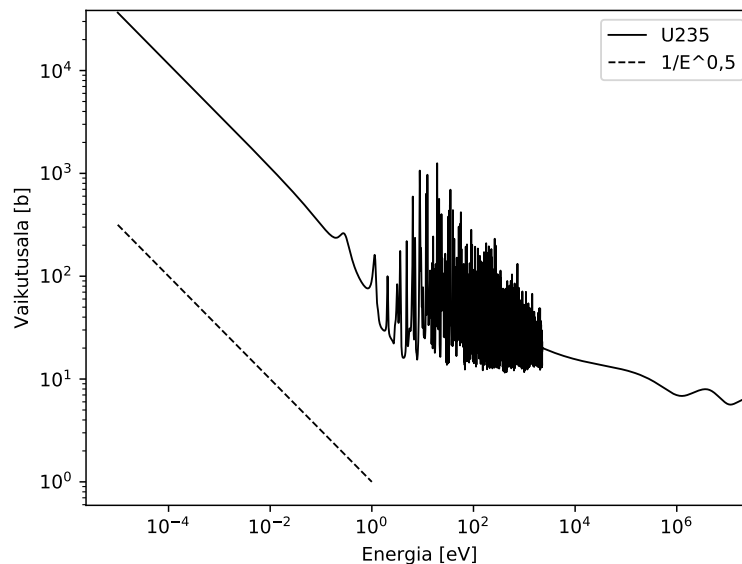
$$\Sigma_i(\vec{r}, t, E) = N(\vec{r}, t) \sigma_i(E). \quad (3.3)$$

Tässä \vec{r} on paikkavektori ja t aika. (Duderstadt and Hamilton, 1976)

Useita aineita sisältävän materiaalin ydintiheys on yksinkertaisesti kaikkien alkuaineiden ydintiheyksien summa. Jos aineen j ydintiheys on $N_j(\vec{r})$ ja mikroskooppinen vaikutusala σ_{ij} reaktiolle i , niin kokonaisvaikutusala on (Lux and Laszlo, 1991)

$$\Sigma(\vec{r}, E) = \sum_i \sum_j N_j(\vec{r}) \sigma_{ij}(E) = \sum_i \sum_j \Sigma_{ij}(\vec{r}, E). \quad (3.4)$$

Pienillä neutronin energioilla (~ 1 eV) neutroni ei enää vuorovaikuta vapaan ytimen, vaan koko ydinaggregaatin kanssa (Duderstadt and Hamilton, 1976). Tällöin mikroskooppinen vaikutusala käyttäytyy kuten $1/\sqrt{E}$ tai toisin sanottuna $1/v$, missä v on neutronin nopeus² (Lamarsh and Baratta, 2001; Stacey, 2007). Tämä ilmiö havaitaan hyvin kuvasta 3, jossa näkyy uraani-235 kokonaisvaikutusalan kuvaaja. Kuvaajasta nähdään vaikutusalan $1/\sqrt{E}$ -käyttäytyminen pienillä energioilla. Lisäksi kuvasta nähdään energioiden 1 eV ja 2 keV välillä osiossa 2 mainittua vaikutusalan resonanssikäyttäytymistä.



Kuva 3. Uraani-235 kokonais(mikroskooppinen)vaikutusala. Kuvan datan lähde: JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020). Kuvassa näkyvä katkoviiva havainnollistaa vaikutusalan $1/\sqrt{E}$ -käyttäytymistä pienillä energioilla.

²Tarkkaan ottaen nopeuden, joka on vektori, suuruutta pitäisi kutsua *vauhdiksi*. Tässä työssä sekä nopeudesta että vauhdista käytetään samaa termiä ”nopeus”. Se, tarkoitetaanko vektorisuuretta (nopeus) vai skalaarisuuretta (vauhti), on selvää kontekstista.

Vaikutusalojen käyttäminen edellyttää siis kahta asiaa: yhtäältä on tiedettävä tarkasteltavan tilavuuden ydintiheysjakauma ja toisaalta on tiedettävä mikroskooppiset vaikutusalat oleellisille reaktioille ja isotoopeille. Jälkimmäiset on mahdollista selvittää ydindatakirjastoista kuten JEFF (Joint Evaluated Fission and Fusion File) (Plompen et al., 2020).

Ydintiheyden aikarippuvuutta ei voi jättää huomioimatta useissa sovelluksissa. Esimerkiksi ydinreaktorissa ydintiheys muuttuu jatkuvasti ajassa, kun polttoainetta palaa ja fissiotuotteita muodostuu. Reaktorin neutroniikan oikeanlainen mallintaminen vaatii siis jatkuvaa vaikutusalojen päivittämistä tai valmista tietoa vaikutusaloista eri reaktorin olosuhteissa. Menetelmää, jossa laskennassa käytetään etukäteen luotua vaikutusalaadataa, kutsutaan *parametrisoinniksi*.

3.3 Differentiaalinen vaikutusala

Ydinreaktioita tarkasteltaessa voidaan olla kiinnostuneita, miten tietyssä energiassa olevan ja tietystä suunnasta tulevan neutronin energia- ja suunta-arvot muuttuvat reaktioissa. Tätä tarkoitusta varten on hyödyllistä määritellä *differentiaalinen vaikutusala*, joka on kahden termin tulo. Ensimmäinen termi kuvaa energiariippuvaa todennäköisyyttä, että reaktio tapahtuu ja toinen termi kuvaa reaktion todennäköisyystiheyttä (Bell and Glasstone, 1970). Formaalisti:

$$\text{differentiaalinen vaikutusala} \equiv \Sigma_i(\vec{r}, E) f_i(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}'),$$

missä alaindeksi i on mielivaltainen reaktio, \vec{r} paikkavektori, $\hat{\Omega}$ neutronin suuntavektori ja E neutronin energia. Suureet $\hat{\Omega}'$ ja E' kuvaavat neutronin suuntavektoria ja energiaa reaktion jälkeen vastaavasti. Todennäköisyystiheysfunktio f_i kertoo reaktiossa i syntyvien neutronien lukumäärän yksikköavaruuskulmaa ja yksikköenergiaa kohti, kun reaktion on käynnistänyt suunnasta $\hat{\Omega}$ tullut ja energiassa E ollut neutroni. Funktio on normalisoitu siten, että kun se integroidaan kaikkien energioiden ja suuntien yli, saadaan reaktiossa syntyvien neutronien kokonaislukumäärä: sirontareaktioissa, joissa emittoituu ainoastaan yksi neutroni, jakauma on normalisoitu ykköseksi, (n, xn)-reaktiossa x:si jne. Normalisointi voidaan esittää muodossa

$$\int_0^\infty \int_{4\pi} f_i(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') d\Omega' dE' = c_i(\vec{r}, E), \quad (3.5)$$

missä $c_i(\vec{r}, E)$ on reaktiossa i emittoituneiden neutronien kokonaismäärä paikassa \vec{r} , kun reaktion on käynnistänyt energiassa E ollut neutroni. Suure $d\Omega'$ on differentiaalinen avaruuskulma suuntavektorin Ω' ympärillä. Kun reaktion i differentiaalista vaikutusalaä integroidaan kaikkien energioiden ja suuntien yli, saadaan reaktion vaikutusalan ja reaktiossa

emittoituvien neutronien tulo:

$$\int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_i(\vec{r}, E) f_i(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') d\Omega' dE' = \Sigma_i(\vec{r}, E) c_i(\vec{r}, E). \quad (3.6)$$

Kiinnitetään erityistä huomiota elastiseen sirontareaktioon ja fissioreaktioon.

Elastiselle sirontareaktiolle $f_s(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') d\hat{\Omega}' dE'$ kertoo todennäköisyyden, että suunnasta $\hat{\Omega}$ tullut ja energiassa E ollut neutroni siroaa pisteessä \vec{r} suuntavektorin $\hat{\Omega}'$ ympärillä olevaan avaruuskulmaan $d\hat{\Omega}'$ ja energian E' ympärillä olevalle energiavälille dE' . Tämä johtuu siitä, että elastiselle sironnalle funktio f_s on normalisoitu ykköseen (eli se on ”todellinen todennäköisyystiheys”). Alaindeksillä s tarkoitetaan elastista sirontaa.

Elastisessa sironnassa sirontatodennäköisyys riippuu ainoastaan suuntavektorien välisestä kosinista μ_0 . Tämä johtuu siitä, että makroskooppisessa näytteessä ytimet ovat satunnaisesti suuntautuneita (Duderstadt and Hamilton, 1976). Lisäksi neutronin energia E ennen sirontaa, energia E' sironnan jälkeen ja sirontakosini ovat riippuvaisia toisistaan. Ainoastaan kaksi suureista E , E' ja μ_0 voidaan valita vapaasti: jos neutroni siroaa kimmoisasti kosiniin μ' , niin sirontaenergioiden ja kosinin välillä pätee yhtälö (Stacey, 2007)

$$\mu' = \frac{1}{2} \left[(A+1) \sqrt{\frac{E}{E'}} - (A-1) \sqrt{\frac{E'}{E}} \right]. \quad (3.7)$$

Edellä mainittujen seikkojen takia elastisessa sironnassa

$$f_s(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') = f_s(\vec{r}, E \rightarrow E', \mu_0) = \frac{1}{2\pi} f_s(\vec{r}, E \rightarrow E') \delta(\mu_0 - \mu'), \quad (3.8)$$

missä $\delta(\mu_0 - \mu')$ on Diracin deltafunktio (Arfken, 2005). Integroimalla differentiaalista sirontavaikutusalaa kaikkien suuntien yli, deltafunktio häviää. Energian- ja liikemäärän säilymisen avulla voidaan osoittaa, että elastisessa sironnassa todennäköisyystiheys saadaan yhtälöstä (Stacey, 2007)

$$f_s(\vec{r}, E \rightarrow E') = \begin{cases} \frac{1}{(1-\alpha)E}, & \text{kun } \alpha E \leq E' \leq E \\ 0, & \text{muulloin.} \end{cases} \quad (3.9)$$

Tässä α on ytimen massaluvusta riippuva *törmäysparametri* (Lamarsh and Baratta, 2001):

$$\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1} \right)^2. \quad (3.10)$$

Yhtälö (3.9) pätee, kun neutronin sironta on isotrooppista massakeskipistekoordinaatistossa. Tämä on pätevä oletus esimerkiksi tyypillisesti ydinreaktorista löytyville neutoneille ($E \leq 10$ MeV), kun ne siroavat kevyistä ja keskiraskaista ytimistä ($A \leq 12$) (Duderstadt and Hamilton, 1976).

Fissioreaktiossa oletetaan, että neutronit emittoituvat suunnasta riippumattomasti. Tällöin fission differentiaalinen vaikutusala voidaan esittää muodossa (Bell and Glasstone, 1970)

$$\Sigma_f(\vec{r}, E) f_f(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') = \frac{1}{4\pi} \Sigma_f(\vec{r}, E) v(\vec{r}, E \rightarrow E'), \quad (3.11)$$

missä $v(\vec{r}, E \rightarrow E')$ on *fissiospektri*, joka kertoo energian E' ympärillä olevalle energiavälille dE' emittoituvien fissioneutronien keskimääräisen lukumäärän, kun fission on käynnistänyt energiassa E ollut neutroni. Fissiospektrille on ominaista, että syntyneiden neutronien energijakauma ei riipu fission käynnistäneen neutronin energiasta. Lisäksi jokaiselle fissioituvalla isotoopille voidaan tavallisesti käyttää samaa energijakaumaa (Lewis and Miller, 1984). Näin ollen fissioneutronien energijakauman kuvaamiseen tarvitaan ainoastaan yksi funktio $\chi(E)$, jolle on määritelty ykköseen normalisoitu (ts. integrointi energian suhteen nollasta äärettömään antaa ykkösen) empiirinen relaatio

$$\chi(E) = 0,453 \exp(-1,036E) \sinh(\sqrt{2,29E}). \quad (3.12)$$

Fission todennäköisyystiheys on siten

$$f_f(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') = \frac{1}{4\pi} v(E) \chi(E'), \quad (3.13)$$

missä $v(E)$ on normalisoinnista (3.5) saatava fissioneutronien keskimääräinen kokonaismäärä, kun fission on käynnistänyt energiassa E ollut neutroni. Funktio $v(E)$ kasvaa monotonisesti törmäävän neutronin energiassa ja riippuu fissioituvasta isotoopista (Lewis and Miller, 1984). Tyypillisesti (esimerkiksi uraani-235:lle) fissiossa emittoituu 2-5 neutronia.

Jos materiaalissa, jossa neutronit liikkuvat tapahtuu useita reaktioita, niin differentiaaliselle vaikutusalueelle saadaan samankaltainen summakaava kuin osiossa 3.2 on esitetty vaikutusaloille yhtälössä (3.4). Törmäyksen differentiaalinen vaikutusala (eli kokonaisdifferentiaali-

nen vaikutusala) saadaan kaikkien reaktioiden i differentiaalisten vaikutusalojen summana (Bell and Glasstone, 1970):

$$\Sigma(\vec{r}, E) f(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') = \sum_i \Sigma_i(\vec{r}, E) f_i(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}'). \quad (3.14)$$

Tämän yhtälön avulla voidaan määritellä johdonmukaisesti törmäysreaktion differentiaalisen vaikutusalan normalisaatio (Bell and Glasstone, 1970): Neutroni kulkee ennen törmäystä keskimääräisesti matkan $1/\Sigma(\vec{r}, E)$ (keskimääräinen vapaamatka) ja $\Sigma_i(\vec{r}, E)$ on reaktion i todennäköisyys per yksikköpituus. Siten $\Sigma_i(\vec{r}, E)/\Sigma(\vec{r}, E)$ kertoo reaktion i tapahtumato-
dennäköisyyden E -energisen neutronin törmäyksessä paikassa \vec{r} . Jakamalla yhtälö (3.14) vaikutusosalalla $\Sigma(\vec{r}, E)$ ja integroimalla energioiden ja suuntien yli, saadaan

$$\int_0^\infty \int_{4\pi} f(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') d\Omega' dE' = \sum_i \frac{\Sigma_i(\vec{r}, E)}{\Sigma(\vec{r}, E)} c_i(\vec{r}, E) \equiv c(\vec{r}, E). \quad (3.15)$$

Kun muistetaan termien $c_i(\vec{r}, E)$ merkitys reaktioissa i syntyvien neutronien keskiarvoise-
na lukumääränä, on selvää, että summatermi on törmäyksessä syntyneiden neutronien kes-
kiarvoinen lukumäärä (tai odotusarvo). Tätä suuretta on merkitty symbolilla $c(\vec{r}, E)$. Suure
 $c(\vec{r}, E)$ on hyödyllinen esimerkiksi silloin, kun karakterisoidaan kuinka ”hyvin” neutronit
diffundoituvat väliaineessa (Lewis and Miller, 1984). Jos esimerkiksi väliaineessa neutroni
ainoastaan siroaa tai häviää absorboitumalla (ts. fissiota tai (n, xn)-reaktioita ei huomioi-
da), niin c on ykkösen (aina varma sirona) ja nollan (aina varma absorptio) välillä. Mitä
lähempänä c on ykkööstä, sitä ”parempaa” neutronien diffuusio väliaineessa on: jos c olisi
pieni, neutroni absorboituisi vähäisillä törmäyksillä, eikä neutronijoukon diffuusio pääsisi
tällöin kehittymään. Itse asiassa systeemissä, jossa neutroni ainoastaan siroaa tai häviää, c
on todennäköisyys, jolla neutroni ei absorboidukaan törmäyksessä (Lux and Laszlo, 1991).

Huomautetaan lopuksi, että yleisesti differentiaalista vaikutusalaa merkitään kuten

$$\Sigma_i(\vec{r}, E) f_i(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') \equiv \Sigma_i(\vec{r}, E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}').$$

Teorian esittelyä varten on suosittu edellistä muotoa, mutta selkeyden vuoksi jatkossa tullaan
käyttämään jälkimmäistä merkintätapaa.

3.4 Reaktionopeus

Usein ollaan kiinnostuneita siitä, millä taajuudella tietty reaktio tapahtuu (eli kuinka mon-
ta reaktiota tapahtuu per yksikköaika). *Reaktionopeus* R_i kertoo reaktion i tapahtumalu-

kumäärän yksikköaikaa kohti, ja se voidaan määritellä seuraavasti:

Neutronitiheys $n(\vec{r}, E, t)$ kertoo hetkellä t paikassa \vec{r} olevien neutronien (keskimääräisen) lukumäärän yksikköenergiaa ja yksikkötilavuutta kohti. Jos neutronin nopeus (eli kuljettujen yksikköpituuksien lukumäärä yksikköaikaa kohti) on v , niin nopeuden tulo reaktion i vaikutusalan (eli reaktion i todennäköisyyden per yksikköpituus) Σ_i kanssa antaa todennäköisyyden per yksikköaika, että neutroni kokee reaktion i . Kun tämä tulo kerrotaan neutronitiheydellä, saadaan reaktion i kokeneiden neutronien odotettu lukumäärä yksikköenergiaa, yksikkötilavuutta ja yksikköaikaa kohti. Näin ollen reaktionopeus saadaan integroimalla neutronin nopeuden, vaikutusalan ja neutronitiheyden tulo tarkasteltavan tilavuuden ja neutronin energioiden yli.

Neutronin nopeuden ja neutronitiheyden tuloa sanotaan *neutronivuoksi*, ja sitä merkitään tässä työssä $\phi(\vec{r}, E)$. Tämän perusteella reaktiolle i reaktionopeus voidaan kirjoittaa kuten

$$R_i = \int_V \int_0^\infty \phi(\vec{r}, E) \Sigma_i(\vec{r}, E) dE dV, \quad (3.16)$$

missä aikariippuvuus on jätetty merkityksettä. Tilavuus V voi olla esimerkiksi ydinreaktorin sydän tai jokin sen osa-alue. Yhtälön (3.16) tapaisten ”vuointegraalien” laskeminen on niin sanottujen Monte-Carlo laskentamenetelmien keskeinen piirre (Leppänen et al., 2007). Monte-Carlo-laskentaan palataan osiossa 4.3.

Reaktionopeuden merkitystä voidaan korostaa tarkastelemalla tilannetta, jossa kiinnostuksen kohteena on fissioreaktio. Koska fissioreaktiot ovat pääasiainen tehontuottotapa ydinreaktorissa (pieni osa tehosta tulee fissiotuotteiden radioaktiivista hajoamisista), niin fissioreaktionopeus on suoraan verrannollinen reaktorin tuottamaan tehoon. Fissioreaktionopeuden ja tehon välisen yhteyden avulla on mm. mahdollista arvioida polttoaineen päivittäistä kulumista. (Duderstadt and Hamilton, 1976; Lamarsh and Baratta, 2001)

4 RYHMÄVAKIOT

4.1 Neutronien jatkuvuusyhtälö

Reaktorifysiikkalaskennan lähtökohtana on usein niin sanottu neutronien *transportyhtälö*, jonka ajasta riippumaton muoto kuvaa neutronitasapainoa infinitesimaalisen tilavuuden sisällä. Neutronitasapaino syntyy kolmen mekanismin vaikutuksesta (Lewis and Miller, 1984):

- 1) Nettovirtaus tilavuuden pintojen läpi.
- 2) Sironnat, fissiot ja ulkoiset lähteet, jotka lisäävät tilavuudessa olevien neutronien lukumäärää.
- 3) Menetykset törmäyksissä ytimiin tilavuuden sisällä (voidaan ajatella, että jokaisessa törmäyksessä neutroni menetetään – 2. mekanismi huolehtii siitä, jos törmäystä seuraa neutroneita ei-hävittävä reaktio).

Kun käytetään jo edellä tehtyä oletusta, että elastisessa sironnassa neutronit eivät suosi mitään tiettyä atsimuuttikulmaa, niin transportyhtälöstä on kaikkien suuntien yli integroimalla mahdollista johtaa niin sanottu neutronien *jatkuvuusyhtälö* (Duderstadt and Hamilton, 1976). Transportyhtälö ja jatkuvuusyhtälö ovat siis ekvivalentit, kunhan neutronin sironta on atsimuuttikulman suhteen isotrooppinen – tämä taas edellyttää, että väliaineen ytimet ovat satunnaisesti suuntautuneita. Jatkuvuusyhtälö voidaan ajasta riippumattomassa tilanteessa kirjoittaa muodossa

$$\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, E) + \Sigma(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E) = Q(\vec{r}, E). \quad (4.1)$$

Tässä \vec{J} on *neutronivirtatiheys*, joka määritellään *kulmavuon* $\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ avulla kuten

$$\vec{J}(\vec{r}, E) = \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) \hat{\Omega} d\hat{\Omega}. \quad (4.2)$$

Kulmavuo kertoo tietyssä pisteessä suuntaan $\hat{\Omega}$ kulkevien neutronien keskimääräisen lukumäärän yksikköenergiaa, yksikköavaruuskulmaa, yksikköpinta-alaa ja yksikköaikaa kohti. Neutronivirtatiheyden pistetulo pinnan normaalivektorin kanssa kertoo pinnan läpäisevien neutronien nettolukumäärän yksikköenergiaa, yksikköpinta-alaa ja yksikköaikaa kohti.

Jos jatkuvuusyhtälön (4.1) vasemman puolen ensimmäistä termiä integroidaan tilavuuden yli ja käytetään Gaussin divergenssilauseetta (Arfken, 2005), niin nähdään, että neutronivirtati-

heyden divergenssi kuvaa neutronien virtauksen voimakkuutta tarkasteltavan tilavuuden pintojen läpi (1. mekanismi). Vasemman puolen toinen termi $\Sigma\phi$ on neutronien törmäystaajuus yksikköenergiaa ja yksikkötilavuutta kohti (3. mekanismi) ja oikean puolen termi Q on yleistetty neutronilähde, joka kuvaa taajuutta, jolla neutronit lisääntyvät yksikköenergiaa ja yksikkötilavuutta kohti (2. mekanismi). Yleistetty neutronilähde on kolmen lähteen summa (Lewis and Miller, 1984):

Taajuus, jolla neutroneita siirtyy muista energioista sirontojen takia yksikköenergiaa ja yksikkötilavuutta kohti, saadaan integraalina

$$Q_s(\vec{r}, E) = \int_0^\infty \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E) \phi(\vec{r}, E') dE'. \quad (4.3)$$

Vastaavasti taajuus, jolla neutroneita syntyy fissionien takia yksikköenergiaa ja yksikkötilavuutta kohti, on integraali

$$Q_f(\vec{r}, E) = \chi(E) \int_0^\infty \nu(\vec{r}, E') \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E') dE'. \quad (4.4)$$

Yhtälöissä (4.3) ja (4.4) esiintyvät differentiaaliset vaikutusalat on esitelty osiossa 3.3.

Mahdollista ulkoista neutronilähdettä merkataan $Q_{ex}(\vec{r}, E)$. Näin ollen yleinen neutronilähde voidaan kirjoittaa

$$Q(\vec{r}, E) = Q_s(\vec{r}, E) + Q_f(\vec{r}, E) + Q_{ex}(\vec{r}, E). \quad (4.5)$$

Pääasiallinen ero transportiyhtälön ja jatkuvuusyhtälön välillä on, että jatkuvuusyhtälö ei riipu neutronien suunnasta (muuttujana ei esiinny neutronien suuntavektoria $\hat{\Omega}$). Tämän hintana jatkuvuusyhtälössä esiintyy *kaksi* tuntematonta: neutronivuon ϕ ja neutronivirtatiheys \vec{J} , joiden välillä ei ole selkeää riippuvuutta.

Riippuvuus neutronivuon ja neutronivirtatiheyden välille on kuitenkin mahdollista saada diffuusioteorian avulla, jossa neutronivuon ja neutronivirtatiheyden välillä pätee *Fickin laki* (Bell and Glasstone, 1970)

$$\vec{J}(\vec{r}, E) = -D(\vec{r}, E) \nabla \phi(\vec{r}, E). \quad (4.6)$$

Verrannollisuuskerroin $D(\vec{r}, E)$ on niin sanottu *diffuusiovakio*.

4.2 Ryhmävakioiden homogenisointi

Jatkuvuusyhtälön (4.1) ratkaisemista varten energia-alue jaetaan diskreetteihin pisteisiin

$$E_G < E_{G-1} < \dots < E_g < E_{g-1} < \dots < E_1 < E_0,$$

jonka jälkeen jatkuvuusyhtälöä integroidaan energiavälin $E_g \leq E \leq E_{g-1}$ yli. Näin määriteltyä energiaväliä sanotaan *ryhmäksi*. Ryhmäindeksi g saa arvot $1, 2, \dots, G$ ja ryhmien määrä G on vapaasti valittavissa. Integroinnin seurauksena saadaan ryhmäkohtainen jatkuvuusyhtälö

$$\nabla \cdot \vec{J}_g(\vec{r}) + \Sigma_g(\vec{r})\phi_g(\vec{r}) = \sum_{g'=1}^G \left[\Sigma_{s,g' \rightarrow g}(\vec{r})\phi_{g'}(\vec{r}) + \frac{1}{k} \chi_g \nu_{g'} \Sigma_{f,g'}(\vec{r})\phi_{g'}(\vec{r}) \right], \quad (4.7)$$

missä on oletettu, että ulkoista neutronilähdettä ei ole ja on asetettu *kasvutekijä* k , joka tekee reaktorista stationaarisen. (Stacey, 2007)

Jos neutroneita syntyy liian vähän per fissio, niin $k < 1$, jolloin efektiivisesti fissiossa syntyvien neutronien määrä kasvaa ja saavutetaan stationaaritilanne. Reaktori on tällöin alikriittinen. Päinvastaisessa tilanteessa neutroneita syntyy liikaa stationaarisen tilanteen ylläpitämiseen. Tällöin $k > 1$ eli fissiossa syntyvien neutronien määrä efektiivisesti pienenee ja saavutetaan jälleen stationaaritilanne. Reaktori on tällöin ylikriittinen. Jos $k = 1$, syntyvien fissioneutronien määrää ei tarvitse muuttaa stationaarisuuden saavuttamiseksi ja reaktori on tällöin kriittisessä tilassa. Lisäksi kasvutekijä voidaan tulkita myös kahdessa peräkkäisessä neutronisukupolvessa olevien neutronimäärien suhteena. (Bell and Glasstone, 1970)

Kevytvesireaktoreille käytetään tyypillisesti kahta ryhmää, missä energiaraja ryhmien välillä on $0,625 \text{ eV}$ (Leppänen et al., 2007). Ensimmäistä energiaryhmää ($0,625 \text{ eV} < E < \infty$) kutsutaan tässä ”nopeaksi ryhmäksi” ja jälkimäistä energiaryhmää ($0 < E < 0,625 \text{ eV}$) ”termiseksi ryhmäksi”.

Yhtälössä (4.7) on määritelty ryhmäneutronivuo

$$\phi_g(\vec{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\vec{r}, E) dE \quad (4.8)$$

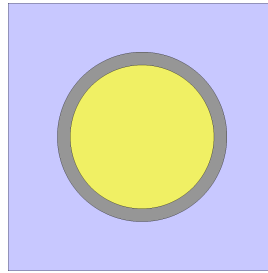
ja ryhmäneutronivirta kuten

$$\vec{J}_g(\vec{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \vec{J}(\vec{r}, E) dE. \quad (4.9)$$

Lisäksi on määritelty *ryhmävakiot*. Esimerkiksi ryhmän sisällä kokonaisvaikutusala kuvaa ryhmävakio

$$\Sigma_g(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\vec{r}, E) dE}. \quad (4.10)$$

Yhtälön (4.7) ratkaisua varten reaktorisydän jaetaan *soluihin*. Kuvassa 4 on esitetty esimerkki ylhäältä kuvatusta polttoainesolusta, jossa polttoainesauva on ympäröity vedellä.



Kuva 4. Serpent -reaktorifysiikkaohjelmalla luotu polttoainesolu.

Kun jako soluihin on tehty, ryhmävakiot integroidaan solujen tilavuuksien yli, jolloin saadaan *homogenisoidut ryhmävakiot*. Esimerkiksi, kun ryhmävakiota (4.10) integroidaan solun i tilavuuden yli, saadaan homogenisoitu ryhmävakio (Duderstadt and Hamilton, 1976)

$$\Sigma_{g,i} = \frac{\int_{V_i} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) dE dV_i}{\int_{V_i} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\vec{r}, E) dE dV_i}. \quad (4.11)$$

Tällöin solun heterogeeniset ainealueet on efektiivisesti korvattu yhdellä kuvittellisella homogeenisella aineella, jonka kokonaisvaikutusala on $\Sigma_{g,i}$. Kun homogenisoidut ryhmävakiot ovat tiedossa, voidaan yhtälö (4.7) diskretisoida kolmessa paikkaulottuvuudessa differenssiyhtälöksi ja käyttää homogenisoituja ryhmävakioita yhtälön ratkaisemiseen. Tyypillisesti ratkaistavien yhtälöiden lukumäärä on hyvin suuri. Tämän takia käytetään *nodaaliapproksimaatiota*, jossa reaktori jaetaan eri tyyppisiin soluihin tai ”noodeihin”. Differenssiyhtälö ratkaistaan yhden tyyppisessä noodissa, jolloin saatu neutronivuo on samanlainen samantyyppisissä noodeissa. (Stacey, 2007)

On syytä huomauttaa, että homogenisoitujen ryhmävakioiden käyttö vaatii tietoa ryhmän sisällä vallitsevasta neutronivuosta, jota ei tiedetä etukäteen. Niin sanotut deterministiset menetelmät käyttävät iteratiivista lähestymistapaa ryhmävakioiden ratkaisemiseen. Monte Carlo -menetelmä mahdollistaa yhtälön (4.11) oikealla puolella esiintyvien vuointegraalien laskemisen suoraan. Serpent hyödyntää tätä ominaisuutta ryhmävakioiden laskennassa (Leppänen et al., 2016).

4.3 Monte Carlo -menetelmä

Osiossa 5 tullaan laskemaan ryhmävakiot Serpent reaktorifysiikkakoodilla (Leppänen et al., 2014). Tässä työssä ei tulla syventymään Serpentin toimintaan, mutta työn eheyden kannalta on nähty hyödylliseksi esitellä esimerkin avulla Monte Carlo -laskentaa, jota Serpent käyttää ryhmävakioiden laskemiseen.

Monte Carlo -menetelmässä muodostetaan stokastinen malli, jossa tietyn satunnaismuuttujan (stokastista tapahtumaa vastaavan lukuarvon) odotusarvo vastaa fysikaalista suuretta, josta ollaan kiinnostuneita. Odotusarvo muodostetaan valitsemalla satunnaisesti satunnaismuuttujia ja laskemalla valittujen satunnaismuuttujien keskiarvo. Satunnaismuuttujien satunnainen valinta vaatii satunnaislukujen käyttöä. (Lux and Laszlo, 1991)

Havainnollistetaan yllä olevaa määritelmää kahdella yksinkertaisella esimerkillä. Olkoon stokastinen tapahtuma neutronin absorptio, satunnaismuuttuja neutronin absorptioetäisyys lähtöpisteestä ja fysikaalinen suure, josta ollaan kiinnostuneita absorptio keskimääräinen vapaamatka. Monte Carlo -menetelmä aloitetaan satunnaismuuttujien satunnaisella valinnalla. Tämä on mahdollista, kun tunnetaan satunnaismuuttujien kertymäfunktio. Tällöin jokaista kertymäfunktion arvojoukosta valittua satunnaislukua vastaa täsmälleen yksi satunnaismuuttuja. Yhtälön (3.2) perusteella neutronin absorptioetäisyyden kertymäfunktio on

$$P(x) = 1 - e^{-\Sigma_a x}. \quad (4.12)$$

Tällöin, jos valitaan satunnaisluku ρ_i , jolle $0 < \rho_i < 1$, niin tätä satunnaislukua vastaa satunnaismuuttuja

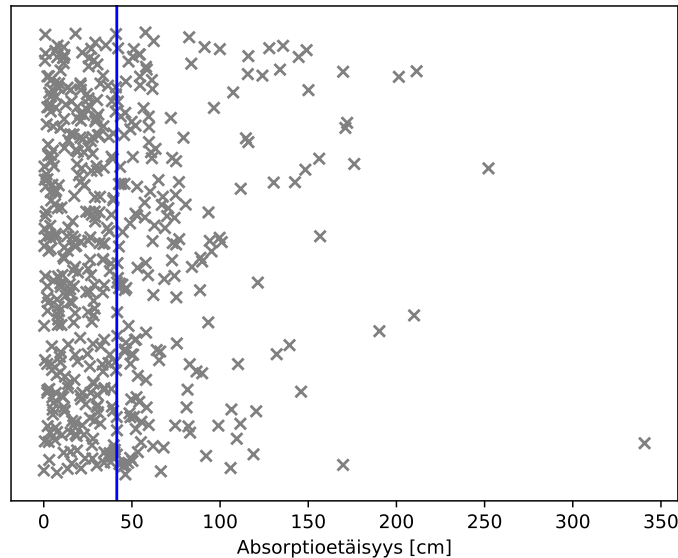
$$x_i = \frac{1}{\Sigma_a} \ln \left(\frac{1}{1 - \rho_i} \right). \quad (4.13)$$

Tällä tavalla valittujen satunnaismuuttujien odotusarvo on kiinnostuksen kohteena oleva keskimääräinen vapaamatka, joka saadaan yhtälöstä

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N x_i, \quad (4.14)$$

missä on valittu N satunnaismuuttujaa (voidaan myös sanoa, että on simuloitu N :n neutronin absorptioetäisyys). Tässä yksinkertaisessa tapauksessa keskimääräinen vapaamatka on jo yhtälön (3.2) takia tiedossa. Esimerkiksi veden absorptiovaikutusala termisille neutroneille on $0,022 \text{ cm}^{-1}$ (Duderstadt and Hamilton, 1976). Tämän tiedon avulla 10, 100 ja

1000 neutroniabsorption eräs simulointi antoi vastaavassa järjestyksessä keskimääräisen vapaamatkan arvot 28,9 cm, 48,6 cm ja 44,9 cm. Tarkka arvo saadaan absorptiovaikutusalan käänteislukuna, ja se on noin 45,5 cm. Huomataan, että satunnaismuuttujien valintamäärän kasvattaminen parantaa tarkkuutta. Tuhannen neutroniabsorption valittuja absorptioetäisyyksiä (eli satunnaisesti valittuja satunnaismuuttujia) ja Monte Carlo -menetelmällä saatua arvoa keskimääräiselle vapaamatkalle on havainnollistettu kuvassa 5.



Kuva 5. Tuhannen vasemmalta oikealle vedessä liikkuvan termisen neutronin simuloitu absorptioetäisyys. Sinisellä viivalla on merkattu keskimääräinen vapaa matka.

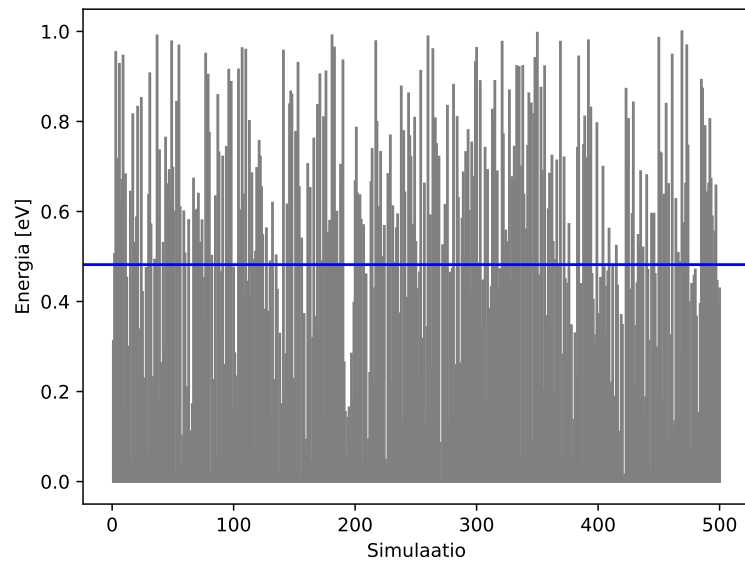
Toisena esimerkkinä voidaan käyttää elastisen sironnan todennäköisyystiheyttä (3.9). Nyt stokastinen tapahtuma on neutronin sironta, satunnaismuuttuja sironnan jälkeinen energia ja kiinnostuksen kohteena sironnan jälkeisen energian odotusarvo. Oletetaan, että neutroni siroaa vedystä, jolloin törmäysparametri (3.10) $\alpha = 0$. Valittua satunnaislukua ρ_i vastaa satunnaismuuttuja

$$E_i = E\rho_i \quad (4.15)$$

ja sirontaenergian odotusarvo saadaan yhtälöstä

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N E_i \quad (4.16)$$

Kuvassa 6 on simuloitu 500 neutronin sironta vedystä törmäysenergialla 1 eV. Keskimääräiseksi sironnan jälkeiseksi energiaksi on saatu noin 0,49 eV.



Kuva 6. Viidensadan neutronin simuloitu energia sironnan jälkeen, kun neutroni siroaa vedystä tuloenergialla 1 eV. Sininen viiva kuvaa keskimääräistä simuloitua sirontaenergiaa.

Tarkka sironnan jälkeisen energian odotusarvo voidaan laskea todennäköisyystiheyden (3.9) avulla. Tulos on $1/2E$ eli tässä tapauksessa 0,5 eV.

Nämä yksinkertaiset esimerkit paljastavat Monte Carlo -menetelmien keskeisen piirteen. Yhtälöstä (3.2) nähdään, että keskimääräinen vapaamatka lasketaan *integroimalla* todennäköisyystiheyden ja paikan tuloa. Samankaltainen tulkinta voitaisiin tehdä sironnan jälkeisen energian odotusarvosta. Näin ollen edellä tehdyt Monte Carlo -laskut ovat periaatteessa vaihtoehtoinen tapa suorittaa odotusarvon saamiseksi vaadittava integrointi. Itse asiassa *kaikki ongelmat*, jotka ratkaistaan Monte Carlo -menetelmällä, voitaisiin teoriassa ratkaista laskeamalla ongelmaan liittyvä integraali (Lux and Laszlo, 1991).

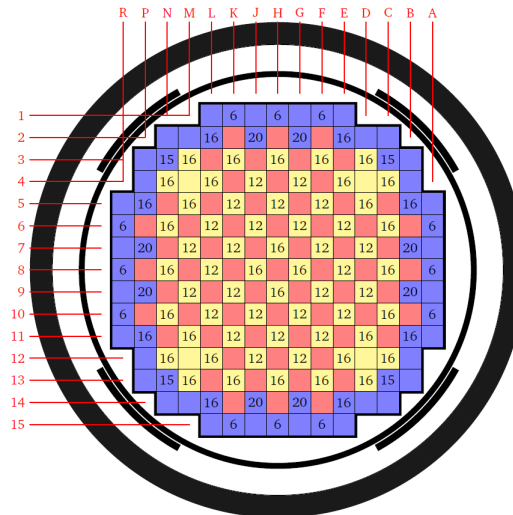
Edellä esitelty homogenisoitu ryhmävakio (4.11) on määritelty integraalien avulla. Koska Monte Carlo -menetelmä tarjoaa keinon integraalien laskemiseen, on selvää, että siitä *voisi* olla hyötyä ryhmävakioiden ja lisäksi esimerkiksi reaktionopeuden (3.16) tai muiden integraalien avulla määriteltyjen suureiden laskennassa. Se, miten laskenta käytännössä tehdään, ei kuitenkaan kuulu tämän työn laajuuteen.

Monte Carlo -menetelmällä saatuun ratkaisuun liittyy aina tietty tilastollinen epävarmuus. Tämä voidaan havaita edellä olevista esimerkeistä: simuloitut arvot keskimääräiselle absorptiomatkalle ja sironnan jälkeiselle energialle eivät täysin vastaa eksakteja arvoja. Monte Carlo laskun tarkkuutta voidaan parantaa lisäämällä simuloitujen tapahtumien määrää. Tämän hintana on kuitenkin se, että laskenta-aika kasvaa.

5 HOMOGENISOITUJEN RYHMÄVAKIOIDEN LUONTI JA PARAMETRISOINTI

5.1 Ryhmävakioiden luonti BEAVRS benchmark -reaktorille

BEAVRS (Benchmark for Evaluation And Validation of Reactor Simulations) (Horelik et al., 2013) on ”benchmark”, jossa esitellään yksityiskohtaisesti kaupallisen PWR-reaktorin tiedot geometrisista mitoista, latauskuvioista, polttoainepuista, palamista, boorikonsentraatioista, aineiden isotooppien ydintiheyksistä jne. kahdelle erilaiselle ajosyklille. Reaktorimallinnuksien ”hyvyyttä” voidaan testata vertaamalla mallinnettua reaktorikäyttäytymistä BEAVRSin mittausdataan. Tässä osiossa luodaan homogenisoidut ryhmävakiot yhdelle BEAVRS benchmarkin polttoainepuulle ensimmäisessä ajosyklissä, jossa käytetty reaktorisydämen latauskuvio näkyy kuvassa 7.



Kuva 7. BEAVRS benchmarkin ensimmäisen ajosyklän latauskuvio (Horelik et al., 2013).

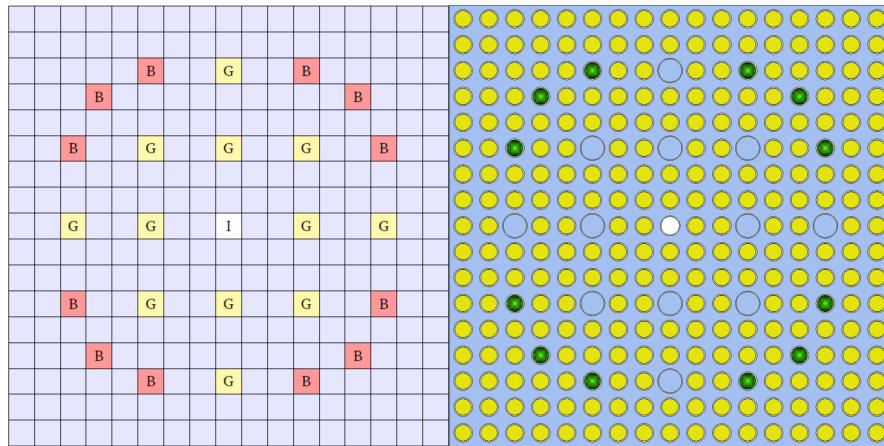
Kuvassa 7 näkyvä väri viittaa U-235 rikastusasteeseen (sininen 3,1 w-%, keltainen 2,4 w-%, punainen 1,6 w-%) ja nipun sisällä oleva numero viittaa nipussa olevien palavaa myrkyä (borosilikaattilasi) sisältävien sauvojen lukumäärään. Nodaalidiffuusiolaskua varten jokaisen erityyppisen polttoainepun ryhmävakiot täytyisi määrittää. Tässä työssä ei kuitenkaan suoriteta nodaalilaskentaa ja koska muiden nippujen ryhmävakioiden määrittäminen onnistuu samalla periaateella kaikille nipuille, niin on valittu homogenisoitavaksi ainoastaan yksi 12 myrkkysauvaa sisältävä polttoainepippu.

BEAVRS benchmark-reaktori toimii 25 MW lämpötehoilla. Tällöin lämpöteho on niin pieni, että reaktorin sanotaan toimivan nollateholla kuumassa tilassa (engl. hot zero power). Nollatehoista reaktorisydäntä voidaan karakterisoida yhdellä lämpötilalla (do Prado Souza and Mesquita, 2011), toisin sanottuna reaktorisydäntä käsitellään isotermisenä. BEAVRS bench-

markissa reaktorin jäädytteen sisääntulolämpötila on noin 566 K, jota käytetään koko reaktorisydämen lämpötilana ryhmävakioiden laskennassa.

Ryhmävakiot lasketaan useassa erillisessä reaktoritilassa (”reaktoritilalla” tarkoitetaan tässä suurejoukkoa, jolla karakterisoidaan reaktorisydäntä tietyllä hetkellä). Jos esimerkiksi käytetään viittä eri palamapistettä, viittä eri jäädytteen boorikonsentraatiota ja jokaisessa palamapisteessä viittä eri polttoaineen lämpötilaa, suoritetaan $5 \cdot 5 \cdot 5 = 125$ ryhmävakiolaskua ja ryhmävakiot saadaan 125 erilaisessa reaktoritilassa. Ryhmävakiot kootaan *ryhmävakiokirjastoon*, jota nodaalidiffuusioratkaisija käyttää laskennassa. Lisäksi ryhmävakiot *parametrisoidaan*, jolloin nodaaliratkaisija voi suorittaa laskennan tiloissa, joita ei olla käytetty ryhmävakioiden luonnissa.

Kuvassa 8 on esitetty BEAVRSin 12 palavaa myrkkysauvaa sisältävä polttoainenippu ja vastaava Serpentillä mallinnettu nippu, jolle luodaan homogenisoidut ryhmävakiot.



Kuva 8. Vasemmalla BEAVRS benchmarkin (Horelik et al., 2013) ja oikealla vastaava Serpentillä mallinnettu polttoainenippu.

Kuvan 8 Serpentillä piirretyssä nipussa keltainen väri vastaa uraanioksidia (2,4 w-% U235), sininen boorisoitua vettä (jäädyte), harmaa Zircaloy-4, vihreä borosilikaattilasiasia (palava myrky) ja valkoinen ilmaa. Uraanioksidin ja Zircaloy-4 välissä on lisäksi heliumia, mutta tätä on mahdoton nähdä kuvasta. Nipun ja sauvojen mitat sekä ainekoostumukset ovat esitelty yksityiskohtaisesti BEAVRS benchmarkissa (Horelik et al., 2013).

Ryhmävakiolaskenta Serpentillä jaetaan kahteen osaan. Niin sanotussa ”historialaskussa” reaktoritilaan liittyvät suuret kuten polttoaineen lämpötila pidetään vakiona ja ryhmävakiot lasketaan jokaisessa valitussa palamapisteessä. Kun historialasku on suoritettu, aloitetaan niin sanottu ”haaralasku”, jossa laskenta käynnistetään uudelleen jokaisessa palamapisteessä muuttamalla reaktoritilaan liittyviä suureita ennalta valitulla tavalla. (Leppänen, 2014)

Ryhmävakiolaskentaa varten on siis valittava reaktoritilat, joissa ryhmävakiot halutaan. Tämä

suoritetaan valitsemalla historialaskuja varten reaktorisuureet, jotka muuttuvat hitaasti tai jotka säilyvät vakioina. Lisäksi haaralaskuja varten on valittava suureet, jotka muuttuvat hetkellisesti jokaisessa palamapisteessä. Mitä enemmän valintoja tehdään, sitä pidempään laskenta kestää. Tässä työssä on käytetty seuraavia valintoja: Laskenta suoritetaan kahdessa palamapisteessä 0 ja 0,04 MWd/kgU. Historialaskuissa kaikkien komponenttien lämpötila on vakio 566 K ja jäähdytteen boorikonsentraatiolle käytetään kahta historiallista arvoa 975 ppm ja 801 ppm. Haaralaskua varten jokaisessa palamapisteessä reaktorin (eli jäähdytteen ja polttoaineen) lämpötilaa lasketaan ja nostetaan 10 K samaan aikaan (eli polttoaineen lämpötilan muutossuunta on aina sama kuin jäähdytteen)

Esitetään perustelut käytetyille valinnoille. Koska nodaalilaskenta jätetään tekemättä ja ei olla erityisen kiinnostuneita reaktorin pidemmän aikavälin käyttäytymisestä, ei ole nähty tarpeelliseksi suorittaa laskentaa useassa palamapisteessä: kahden palamapisteen käyttäminen on periaatteessa aivan samanlainen lasku kuin useamman palamapisteen käyttö, mutta säästää huomattavasti laskenta-aikaa. Laskenta on tarpeen vaatiessa suoraviivaista yleistää useampaan palamapisteeseen. Käytetty vakiolämpötila historialaskussa perustellaan nollatehoisen BEAVRS reaktorin isotermisyydellä. Boorikonsentraatioiden ja palamien valinnassa on käytetty BEAVRS benchmarkin mittausdataa, jonka mukaan reaktori toimii kriittisesti, kun palamia 0 ja 0,04 MWd/kgU vastaavat jäähdytteen boorikonsentraatiot ovat vastaavassa järjestyksessä 975 ppm ja 801 ppm. Haaralaskentaa varten käytetyn lämpötilamuutoksen motivaationa on BEAVRS benchmarkissa esitetty reaktiivisuuden lämpötilakerroin³, joka on mitattu laskemalla ja nostamalla reaktorin lämpötilaa viidellä kelvinillä. Huomioidaan, että jäähdytteen lämpötilan muutoksessa myös sen tiheys muuttuu. BEAVRS reaktorin toimintapaine on noin 155 bar. Painetta ja lämpötiloja vastaavat veden tiheydet on saatu lähteestä (Lemmon, 1998). Boorisoidun veden tiheys joudutaan laskemaan.

Kaikki laskentaan vaadittava data paitsi jäähdytteen isotooppikoostumus ja tiheys on valmiiksi saatavilla. Esitellään lyhyesti, kuinka jäähdytteenä toimivan boorisoidun veden isotooppikoostumus on laskettu. Jäähdytteessä olevan boorin konsentraatio on ilmoitettu yksikössä ppm, joka tarkoittaa milligrammaa booria boorisoidun veden kilogrammaa kohti (boorikonsentraatiot ilmoitetaan tavallisesti tällä tavalla (Byers et al., 2010)). Jos siis boorin konsentraatio on 975 ppm, niin sen osuus w_B boorisoidun veden painosta on 0,000975. Tällöin boorin tiheys ρ_B on $w_B \rho_{Bv}$, missä ρ_{Bv} on boorisoidun veden tiheys. Toisaalta boorisoidun veden tiheys on boorin tiheyden ja veden tiheyden ρ_v summa. Laskennassa oletetaan, että boorin lisääminen veteen ei muuta veden tiheyttä. Näin ollen boorisoidun veden tiheys voidaan laskea yhtälöstä

³Reaktiivisuuden lämpötilakerroin kertoo kuinka paljon *reaktiivisuus* muuttuu per muuttunut lämpötilayksikkö. Reaktiivisuus kertoo kuinka kaukana reaktori on kriittisestä tilasta ja se määritellään kasvutekijän avulla kuten $\rho = (k - 1) / k$. (Stacey, 2007)

$$\rho_{Bv} = \frac{\rho_v}{1 - w_B} \quad (5.1)$$

Kun boorisoidun veden tiheys on laskettu, voidaan boorin paino-osuuden avulla laskea boorin tiheys, jonka jälkeen boorin ydintiheys saadaan yhtälöstä

$$N_B = \frac{\rho_B N_A}{M_B}, \quad (5.2)$$

missä N_A on Avogadron luku ja M_B boorin moolimassa. Veden ydintiheys lasketaan samalla tavalla. Ydintiheyksien laskenta vaatii tietoa alkuaineiden H, O ja B moolimassoista. Kyseiset suureet on laskettu yhtälöllä

$$M_i = \left(\sum_j \frac{l_{ij}}{M_{ij}} \right)^{-1}, \quad (5.3)$$

missä l_{ij} on alkuaineen i isotoopin j luonnollinen osuus. Veden moolimassa on $M_v = 2M_H + M_O$. Kun veden ja boorin ydintiheydet on laskettu, jokaisen isotoopin ydintiheys saadaan kertomalla asianmukaista ydintiheyttä isotoopin luonnollisella osuudella. Lopuksi määritetään jokaisen isotoopin ydintiheyden suhde boorisoidun veden ydintiheyteen (kokonaisydintiheyteen). Isotooppien luonnolliset osuudet ja moolimassat on katsottu lähteestä (Horelik et al., 2013). Taulukossa 1 esitetään esimerkiksi ydintiheyksien suhteet kaikille jäähdytyessä esiinnyville isotoopeille boorikonsentraatiolla 975 ppm. Boorisoidun veden tiheydeksi saatiin $0,7415 \text{ g/cm}^3$. Serpent tarvitsee laskentaan sekä jäähdytyksen tiheyttä että ydintiheyksien suhteita.

Taulukko 1. Boorisoidun veden isotooppien ydinteyksien suhde kokonaisydintiheyteen 975 ppm boorikonsentraatiolla 155 bar paineessa ja 566 K lämpötilassa.

isotooppi	ydintiheyssuhde
O16	0,33258143
O17	0,00012635
O18	0,00066644
H1	0,66664549
H2	0,00010384
B10	0,00010760
B11	0,00043530

Jäähdytyteeseen lisätyn boorin tehtävänä on säädellä reaktorisydämen reaktiivisuutta yhdessä säätösauvojen kanssa (Lamarsh and Baratta, 2001). Kun reaktorin palama kasvaa, boorikonsentraatiota vähennetään, jolloin kompensoidaan polttoaineen palamisesta aiheutunutta reaktiivisuushäviötä. Säätelystä vastaa boorin isotooppi B10, jonka mikroskooppinen absorptio-

vaikutusala termisille neutroneille on 3837 b (vedelle kyseinen arvo on 0,66 b) (Duderstadt and Hamilton, 1976).

5.2 Ryhmävakiolaskennan tulokset

Taulukoissa 2 ja 3 esitetään joitakin oleellisia nopean ja termisen energiaryhmän ryhmävakioita⁴ homogenisoidulle polttoainepulle, kun reaktorin palama on nolla (yhteensä yhdelle palamapisteelle tietyssä lämpötilassa saatiin Serpentin avulla 167 erilaista ryhmävakiota). Lisäksi taulukossa 4 esitetään kasvutekijä, kasvutekijän keskihajonta ja viivästyneiden neutronien osuus jokaisessa laskentapistessä. Ryhmävakioiden laskennassa käytetty Serpent-koodi 975 ppm boorikonsentraatiolle on näkyvillä liitteissä. Tilan säästämiseksi ainoastaan pääajotiedosto on liitetty mukaan.

Taulukko 2. Nopean energiaryhmän joitakin oleellisia ryhmävakioita homogenisoidulle polttoainepulle, kun palama on nolla.

Boorikonsentraatio [ppm]	975			801		
Polttoaineen lämpötila [K]	556	566	576	556	566	576
Absorptiovaikutusala [1/cm]	0,009038	0,009025	0,008993	0,009033	0,008979	0,008951
Fissiovaikutusala [1/cm]	0,002089	0,002082	0,002079	0,002090	0,002085	0,002077
Kaappausvaikutusala [1/cm]	0,006948	0,006942	0,006914	0,006942	0,006894	0,006874
Kokonaisvaikutusala [1/cm]	0,564430	0,554773	0,544077	0,564727	0,554781	0,544028
Diffuusiovakio [cm]	1,492140	1,507580	1,526540	1,491190	1,509100	1,526810
Käänteisnopeus [s/cm]	6E-08	6E-08	6E-08	6E-08	6E-08	6E-08
Neutroneita per fissio	2,574490	2,574050	2,574160	2,574520	2,573840	2,573540

Taulukko 3. Termisen energiaryhmän joitakin oleellisia ryhmävakioita homogenisoidulle polttoainepulle, kun palama on nolla.

Boorikonsentraatio [ppm]	975			801		
Polttoaineen lämpötila [K]	556	566	576	556	566	576
Absorptiovaikutusala [1/cm]	0,084740	0,083830	0,082734	0,083138	0,082107	0,081241
Fissiovaikutusala [1/cm]	0,041777	0,041514	0,041112	0,041990	0,041561	0,041277
Kaappausvaikutusala [1/cm]	0,042963	0,042316	0,041622	0,041148	0,040546	0,039964
Kokonaisvaikutusala [1/cm]	1,433610	1,398150	1,360500	1,434590	1,399340	1,360820
Diffuusiovakio [cm]	0,351745	0,360268	0,369644	0,351458	0,359743	0,369655
Käänteisnopeus [s/cm]	0,000002	0,000002	0,000002	0,000002	0,000002	0,000002
Neutroneita per fissio	2,436200	2,436200	2,436200	2,436200	2,436200	2,436200

Taulukko 4. Kaksiryhmälaskun kasvutekijä, kasvutekijän keskihajonta ja viivästyneiden neutronien osuus jokaisessa laskentapistessä, kun palama on nolla.

Boorikonsentraatio [ppm]	975			801		
Polttoaineen lämpötila [K]	556	566	576	556	566	576
Kasvutekijä	1,004910	1,007400	1,005410	1,027950	1,027200	1,024200
Keskihajonta	0,00050	0,00096	0,00074	0,00066	0,00078	0,00121
Viivästyneiden osuus	0,007142	0,007037	0,006911	0,007190	0,007204	0,007059

⁴Termillä ”ryhmävakio” tarkoitetaan tässä yhteydessä kaikkea Serpentin antamaa .coe-tiedostosta löytyvää tietoa. Ei siis pelkästään yhtälön (4.11) mukaisesti määriteltyä dataa.

Taulukosta 4 on nähtävillä odottamatonta käyttäytymistä kasvutekijässä boorikonsentraatiolla 975 ppm. PWR-reaktorien kasvutekijän voidaan odottaa pienenevän, kun lämpötila kasvaa. Odotus perustuu *Doppler-ilmioon*, jossa vaikutusalojen resonanssipeakit tylppenevät ja resonanssialue laajenee lämpötilan kasvaessa. Doppler-ilmion takia kaappausreaktionopeus kasvaa, jolloin vähemmän neutroneita pääsee aiheuttamaan fissioita ja kasvutekijä pienenee.

Syy odottamattomalle käyttäytymiselle voi olla riittämätön Monte Carlo -laskennassa käytettyjen simuloitujen neutronihistorioiden ja neutronisukupolvien lukumäärä. Kuten osiossa 4.3 huomattiin, simuloitujen tapahtumien lukumäärä vaikuttaa laskennan tarkkuuteen ja mitä enemmän tapahtumia simuloidaan, sitä parempi on laskennan tarkkuus. Taulukoissa 2, 3 ja 4 näkyvä data on saatu simuloimalla jokaisessa laskentapisteessä 100 sykliä (neutronisukupolvea) ja käyttämällä jokaisessa syklissä 10000 neutronia. Tarkkuutta voitaisiin parantaa lisäämällä laskentasykliä lukumäärää tai käyttämällä enemmän neutroneita jokaisessa syklissä. Tarkkuuden parantamisen hintana on laskenta-ajan kasvu. Taulukosta 4 on kuitenkin havaittavissa, että odottamaton käytös säilyy, vaikka Monte Carlo -laskusta seuraava tilastollinen epävarmuus otetaan huomioon. Toinen vaihtoehto odottamattomalle kasvutekijän käytökselle voi olla virhe käytetyssä Serpent-syötössä.

Taulukossa 4 näkyvä ”viivästyneiden osuus” tarkoittaa neutronien osuutta, jotka eivät synny fissioissa, vaan fissiotuotteiden beetahajoamisten seurauksena. Viivästyneillä neutroneilla on tärkeä rooli reaktorin kontrolloinnissa. Jos reaktiivisuuden arvo ylittää viivästyneiden neutronien osuuden, reaktori on ylikriittisessä tilassa pelkästään fissiossa syntyvillä neutroneilla. Tällöin reaktorin neutronipopulaatio kasvaa hyvin nopeasti ajassa. (Lamarsh and Baratta, 2001)

Taulukoissa 2 ja 3 näkyvien ryhmävakioiden suuruusluokka vaikuttaa kasvutekijän odottamattomasta käyttäytymisestä huolimatta järkevältä. Boorikonsentraation pienentäminen näkyy selvästi kasvutekijän suurenemisena. Lisäksi boorikonsentraation kasvattaminen kasvattaa absorptiovaikutusaloja. Nopeiden neutronien nopeus on kaikissa laskentapisteissä noin 167 000 m/s ja termisten neutronien nopeus noin 5000 m/s. Lisäksi havaitaan, että nopean ryhmän vaikutusalat ovat selkeästi pienempiä kuin termisen ryhmän vaikutusalat.

Lopuksi on syytä huomauttaa, että ryhmävakiot on laskettu homogenisoidulle polttoainesauvalle, joka sijaitsee *äärettömässä hilassa*. Toisin sanottuna ryhmävakioiden laskennassa oletetaan kuvan 8 mukaisen polttoainenipun olevan äärettömän korkea ja toistuvan äärettömästi jokaiseen suuntaan. Todellisuudessa nippu on äärellisen korkuinen ja se on ympäröity äärellisen korkuisilla erityyppisillä polttoainenipuilla (valittu nippu sijaitsee aina siten, että se on ympäröity polttoainenipuilla – se ei siis sijaitse reaktorisydämen reunassa).

5.3 Ryhmävakioiden parametrizointi

Tässä osiossa parametrizoidaan esimerkiksi edellä saatu termisen energiaryhmän homogeenisoitu absorptiovaikutusala boorikonsentraatiolla 975 ppm. Parametrizointi seuraa lähteestä (Valtavirta and Rintala, 2020) saatuja ohjeita.

Kun reaktorin polttoaineen lämpötilassa T tapahtuu muutos, myös ryhmävakio muuttuu. Tämä muutos voidaan kirjoittaa muodossa

$$\Delta\Sigma_a = \Sigma_a(T + \Delta T) - \Sigma_a(T). \quad (5.4)$$

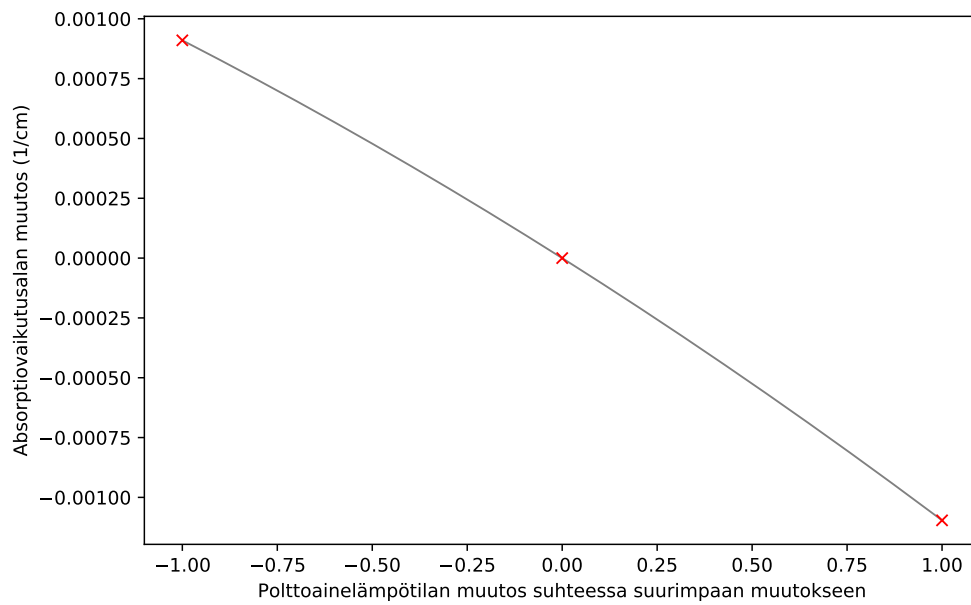
Tarkoituksena on etsiä polynomi P , joka approksimoi muutosta $\Delta\Sigma_a$ kaikilla muutoksilla ΔT . Polynomi etsitään vaatimalla, että se approksimoi täydellisesti tunnetut muutokset ryhmävakioiden osalta. Eli, jos polynomi kirjoitetaan

$$P(\Delta T) = c_1\Delta T + c_2\Delta T^2 \quad (5.5)$$

ja tunnetut haaralaskujen avulla saadut muutokset ryhmävakioiden osalta ovat $\Delta\Sigma_{a,1}$ ja $\Delta\Sigma_{a,2}$, niin polynomi saadaan määriteltä ratkaisemalla vakiot c_i matriisiyhtälöstä

$$\begin{pmatrix} \Delta T_1 & \Delta T_1^2 \\ \Delta T_2 & \Delta T_2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta\Sigma_{a,1} \\ \Delta\Sigma_{a,2} \end{pmatrix}, \quad (5.6)$$

missä ΔT_1 ja ΔT_2 ovat muutoksia $\Delta\Sigma_{a,1}$ ja $\Delta\Sigma_{a,2}$ vastaavat muutokset polttoaineen lämpötilassa. Yhtälö (5.6) on mahdollista ratkaista numeerisesti ja tässä se ratkaistaan Pythonin Numpy-paketin pienimmän neliösumman menetelmää käyttämällä. Ratkaisussa käytetty Python-koodi on näkyvillä liitteissä. Absorptiovaikutusalan parametrizoidun polynomin kuvaaja näkyy kuvassa 9.



Kuva 9. Absorptiovaikutusalan muutos polttoaineen suhteellisen lämpötilamuutoksen funktiona. Punaiset ristit vastaavat tunnettuja arvoja.

Parametrisoinnissa polynomin muuttujaa ΔT on jaettu itseisarvoltaan suurimmalla tunnetulla muutoksella, jolloin on mahdollista ratkaista vaikutusalan muutos suhteellisen polttoaineen lämpötilamuutoksen funktiona. Kuvaajaa voidaan käyttää nopeaan absorptiovaikutusalan määrittämiseen. Jos esimerkiksi lämpötila kasvaisi 5 K eli suhteellinen muutos olisi 0,5, niin saataisiin absorptiovaikutusalan muutokseksi nominaaltilasta noin -0,0005 1/cm.

6 YHTEENVETO JA PÄÄTELMÄT

Työssä selvitettiin ryhmävakioiden liittyvää teoriaa ja laskettiin Serpent-reaktorifysiikkaohjelmalla BEAVRS benchmark-reaktorin 12 myrkkysauvaa sisältävän polttoainepun ryhmävakiot, kun säätösauvat ovat ulkona nipusta. Tuloksena esitettiin joitakin oleellisia ja tämän työn teoriaan liittyviä ryhmävakioita ja näytettiin esimerkki absorptioyhmävakion parametrisoinnista. Kuten edellä mainittiin, Serpent antoi tietyille palamalle ja tietyille reaktoritilalle yhteensä 167 ryhmävakiota ja tässä työssä esitettiin niistä vain pieni osa. Nodaalidiffuusio-koodeja varten Serpentin antama ryhmävakiodata pitää koota diffuusio-koodin vaatimaan muotoon ryhmävakiokirjastoksi. On korostettava, että nodaalidiffuusio-koodi vaatii paljon enemmän ryhmävakioita kuin tässä työssä on esitetty. Mainittakoon merkittävistä ryhmävakioista niin sanottu *epäjatkuvuustekijä*, jonka avulla yhtälön (4.7) homogenisoidun muodon ratkaisu antaa samat tärkeät suureet (esimerkiksi reaktionopeudet) kuin mitä saataisiin todellisen ratkaisun avulla ilman homogenisointia (Stacey, 2007). Epäjatkuvuustekijä periaatteessa kertoo kuinka paljon homogenisoitu neutronivuo on epäjatkua diskretoidun solun reunalla. Homogenisoitu neutronivuo on siis epätodellinen, mutta sen palkkana homogenisointi säilyttää tärkeiden suureiden arvot. Lisäksi on jätetty huomioimatta muita tärkeitä ryhmävakioita. Keskeisiä näistä ovat esimerkiksi erilaiset sirontoihin liittyvät tai neutronivuodon huomioon ottavat ryhmävakiot.

Pelkästään tämän työn perusteella voidaan päätellä, että kattavan ryhmävakiokirjaston luominen ei ole kevyt tehtävä. Reaktorisydämen polttoainepun on mallinnettava useissa eri tilanteissa (ovatko esimerkiksi säätösauvat ulkona vai ei) ja useilla eri heterogeenisyyksillä ja materiaalikoostumuksilla (esimerkiksi eri rikastusasteiset polttoainesauvat ja erilaiset sauvakuviot). Jotta ryhmävakiodata saadaan luotua riittävän monessa reaktoritilassa ja riittävän monessa palamassa kaikille nipputyypeille, tarvitaan paljon laskenta-aikaa. Kun ryhmävakiodata on lopulta saatu laskettua, tuloksena saadaan hyvin suuri määrä dataa. Pelkästään tässä työssä, jossa homogenisointia tehtiin vain yksi nippu, kahdessa palamassa, kahdella boorikonsentraatiolla ja kolmella eri lämpötilalla, saatiin yhteensä yli 2000 riviä ryhmävakiodataa.

Seuraavassa vaiheessa halutut ryhmävakiot on parametrisoitava. Tämä edellyttää parametrisoitavien polynomien muotojen valintaa ja polynomikertoimien määrittämistä. Viimeisenä on pystyttävä arvioimaan kuinka hyvin ryhmävakioiden luominen on onnistunut. Tätä varten luotua ryhmävakiokirjastoa on testattava esimerkiksi nodaalidiffuusio-koodilla. Jos ryhmävakiokirjaston avulla saatu mallinnus on vääränlainen tai odotuksista poikkeava, on selvittävää mistä virhe johtuu. Onko virhe esimerkiksi pinnallinen ja seurausta vaikkapa vääränlaisesta materiaalimääritelmästä vai onko virhe syvällisempi ja seurausta esimerkiksi jostain käytetystä approksimaatiosta. Voi myös olla, että käytetty koodi on perustavanlaatuisesti riittä-

mätön mallintamaan jotakin reaktorin käyttäytymistä olipa ryhmävakiokirjasto miten hyvä tahansa.

Tätä työtä voitaisiin jatkaa luomalla kaikkien BEAVRS benchmark-reaktorin erityyppisten polttoaineriippujen ryhmävakiot, kokoamalla ne ryhmävakiokirjastoksi nodaalidiffusioratkaisijalle, jonka jälkeen reaktorin käyttäytymistä voitaisiin testata. Ryhmävakiokirjaston kokoamista tämän työn yhteydessä ei ole nähty tarpeelliseksi, koska päätavoitteena oli ainoastaan demonstroida ryhmävakioiden luomista.

LÄHTEET

- Arfken, G. B. (2005), *Mathematical methods for physicists*, 6th edn, Elsevier, Boston.
- Bell, G. I. and Glasstone, S. (1970), Nuclear reactor theory, Technical report, US Atomic Energy Commission, Washington, DC (United States).
- Byers, W., Brown, W., Kellerman, B., Shearer, K. and Fink, D. (2010), ‘Summary of tests to determine the physical properties of buffered and un-buffered boric acid solutions’.
- do Prado Souza, R. M. G. and Mesquita, A. Z. (2011), ‘Measurements of the isothermal, power and temperature reactivity coefficients of the IPR-R1 TRIGA reactor’, *Progress in Nuclear Energy* **53**(8), 1126–1131.
- Duderstadt, J. J. and Hamilton, L. J. (1976), *Nuclear Reactor Analysis*, John Wiley and Sons.
- Horelik, N., Herman, B., Forget, B. and Smith, K. (2013), Benchmark for evaluation and validation of reactor simulations (BEAVRS), v1. 0.1, in ‘Proc. Int. Conf. Mathematics and Computational Methods Applied to Nuc. Sci. & Eng’, pp. 5–9.
- Lamarsh, J. R. and Baratta, A. J. (2001), *Introduction to nuclear engineering*, Vol. 3, Prentice hall Upper Saddle River, NJ.
- Lemmon, E. W. (1998), ‘Thermophysical properties of fluid systems’, *NIST chemistry Web-Book*.
- Leppänen, J. (2014), Methodology for spatial homogenization in serpent 2, in ‘Memo’.
- Leppänen, J., Pusa, M. and Fridman, E. (2016), ‘Overview of methodology for spatial homogenization in the serpent 2 monte carlo code’, *Annals of Nuclear Energy* **96**, 126–136.
- Leppänen, J., Pusa, M., Viitanen, T., Valtavirta, V. and Kaltiaisenaho, T. (2014), ‘The serpent monte carlo code: Status, development and applications in 2013’, *Annals of Nuclear Energy* **82**, 142–150.
- Leppänen, J. et al. (2007), *Development of a new Monte Carlo reactor physics code*, VTT Technical Research Centre of Finland.
- Lewis, E. E. and Miller, W. F. (1984), *Computational methods of neutron transport*, John Wiley and Sons.
- Lux, I. and Laszlo, K. (1991), *Monte Carlo particle transport methods*, CRC press.
- Plompen, A., Cabellos, O., De Saint Jean, C. et al. (2020), ‘The joint evaluated fission and fusion nuclear data library, JEFF-3.3’, *Eur. Phys. J. A* **56**, 181.

Stacey, W. M. (2007), *Nuclear Reactor Physics*, Vol. 2, Wiley Online Library.

Valtavirta, V. and Rintala, A. (2020), Specifications for the generic polynomial group constant model of Ants, Technical report, VTT Technical Research Centre of Finland.

Liite 1: Ryhmävakiolaskennassa käytetty syöte Serpent-ohjelmalle

```
% vaikutusalakirjastot
set acelib "/shared/nukedata/sss_jeff311_jeff31_OK.xsdata"
set declib "/shared/nukedata/jeff31/sss_jeff31.dec"
set nfylib "/shared/nukedata/jeff31/sss_jeff31.nfy"

% Järjestyksessä: jäädyttimen data, sauvojen pinta-alat,
% materiaalidata, käytetyt haarat ja
% standardienergiaryhmät (2 makroa, 70 mikroa)
include "boori_975ppm"
include "tilavuudet"
include "materiaalit"
include "haarat"
include "energiaryhmat"

%---GEOMETRIAT

% Polttoainesauva
% numero kertoo säteen (cm), johon asti sauva täytetään numeroa
% edeltävällä materiaalilla
pin FF
polttoaine 0.39218
helium 0.40005
Zircaloy4 0.45720
jaahdytin

% Reikä säätösauvoille (tyhjä)
pin GG
jaahdytin 0.56134
Zircaloy4 0.60198
jaahdytin

% palavaa myrkkyä sisältä sauva
pin BB
palava_myrkky 0.39218
helium 0.40005
Zircaloy4 0.45720
```


ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww ww

```
% Asetetaan symmetria
% 3 = symmetria-akseli z
% 2 = symmetrioiden välillä heijastusreunaehto
% symmetria alkaa 270 asteesta ja jatkuu 90 astetta
set usym pahila 3 2 0.0 0.0 270 90
```

```
% Asetetaan nippu pintojen sisälle
% nippuväli 21.50364
% sqc = neliöpinta
% 0.0 0.0 keskipiste
% 10.75182 on etäisyys keskipisteestä reunalle
surf s1 sqc 0.0 0.0 10.75182
```

```
% solu c1 täytetään nipulla ja sen reunoina on s1
cell c1 0 fill pahila -s1
```

```
% solu c2 täytetään "ulkopuolella"
cell s2 0 outside s1
```

```
%---TIEDOT PALAMALASKUA VARTEN
% plamapisteet (MWd/kgU)
dep butot 0.04
```

```
% Jokainen polttoainesolu käsitellään erillisinä
div polttoaine sep 1
```

```
% Jokainen palava myrkkysauva erillisinä ja
% jaetaan 10 pinta-alaltaan yhtä suureen renkaaseen
div palava_myrkky sep 1 subr 10 0.0 0.39218
```

```
% Palamaoutputtiin halutaan U235, PU239 ja B10
set inventory
922350
942390
050100
```

```
% predictor corrector palamalaskuun
set pcc leli 10 10

% Energiaverkon määritelmä
set egrid 5e-5 1e-9 15.0

%---AJOA VARTEN MUUT TIEDOT

% lämpöteho 25 MW
% nippuja 193
% aktiivisen polttoaineen pituus 365.76 cm
% -> nipun lineaarinen teho 35.415 kW/cm
set power 35.415

% heijastusreunaehto (nippu sijaitsee äärettömästi
% joka suuntaan toistuvassa hilassa)
set bc 2

% neutronipopulaatio
set pop 10000 100 20

% Kuvaaja xy 1280 x 1280 pikseliä
plot 3 1280 1280

% universe (0) jossa ryhmävakiot luodaan
set gcu 0

% Energiaryhmat
set nfg 2makro
set micro 70mikro

% ksenon 135 konsentraatio
set xenon 1
```


Liite 2: Parametrisoinnissa käytetty Python-koodi

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

# Erittain yksinkertainen esimerkki ryhmävakioiden parametriseinnista

HVLKM = 2 # Hetkellisten variaatioiden lukumaara

# Nominaalitila ja kaksi variaatiota.
# TFU = polttoaineen lampotila (K)
# GC = termisen ryhmän homogenisoitu absorptiovaikutusala (1/cm)

NOMINAALITILA = {
    "TFU" : 566,
    "GC" : 0.083830
}

VARIAATIO1 = {
    "TFU" : 556,
    "GC" : 0.084740
}

VARIAATIO2 = {
    "TFU" : 576,
    "GC" : 0.082734
}

def maarita_muutokset():

    # Lasketaan muutokset
    muutos1 = VARIAATIO1["TFU"] - NOMINAALITILA["TFU"]
    muutos2 = VARIAATIO2["TFU"] - NOMINAALITILA["TFU"]

    # Muutetaan muutokset suhteellisiksi muutoksiksi
    muutos1 = muutos1/np.max(np.abs([muutos1, muutos2]))
    muutos2 = muutos2/np.max(np.abs([muutos1, muutos2]))
```

```

    # Muutoksia on helpompi kasitella Numpy-arrayssa
    muutokset = np.array([muutos1, muutos2])

    return muutokset

def komponentti(sarake, muutos):
    # Muutosmatriisin komponentit

    if sarake == 0:
        return muutos
    else:
        return muutos**2

def maarita_muutosmatriisi(muutokset):

    # A-matriisi yhtalossa  $Ac = k$ . Matriisin koko sama
    # kuin hetkellisten variaatioiden lukumaara
    muutosmatriisi = np.zeros((HVLKM, HVLKM))

    for i, muutos in enumerate(muutokset):
        for j in range(HVLKM):
            muutosmatriisi[i, j] = komponentti(j, muutos)

    return muutosmatriisi

def maarita_virhevektori():

    # k-vektori yhtalossa  $Ac = k$ . Vektorin
    # koko sama kuin hetkellisten variaatioiden lukumaara.
    virhevektori = np.zeros((HVLKM,1))

    virhe1 = VARIAATIO1["GC"] - NOMINAALITILA["GC"]
    virhe2 = VARIAATIO2["GC"] - NOMINAALITILA["GC"]
    virheet = [virhe1, virhe2]

    for i in range(len(virhevektori)):

```

```

        virhevektori[i] = virheet[i]

    return virhevektori

def maarita_polynomikertoimet(muutosmatriisi, virhevektori):

    # c-vektori yhtalossa  $Ac = k$ . Vektorin
    # koko sama kuin hetkellisten variaatioiden lukumaara.
    cvek = np.zeros((HVLKM,1))

    # kertoimet polynomille lasketaan Numpyn np.linalg.lstsq avulla
    # ts. ratkaistaan matriisiyhtalo  $Ac = k$ 
    cvek = np.linalg.lstsq(muutosmatriisi, virhevektori, rcond=None)[0]

    return cvek

def polynomi(x, pol_kertoimet):
    summa = 0
    eksp = 1
    for kerroin in pol_kertoimet:
        summa += kerroin*x**eksp
        eksp += 1
    return summa

def piirra_kuvaaja(pol_kertoimet, muutokset, virhevektori):
    vali = np.linspace(-1, 1, 200)
    param_kayra = [polynomi(x, pol_kertoimet) for x in vali]

    plt.plot(vali, param_kayra, color="gray", linewidth=1)
    plt.plot([muutokset[0], muutokset[1], 0], [virhevektori[0],\
    virhevektori[1], 0], "x", color="red")
    plt.xlabel("Polttoainelämpötilan muutos suhteessa suurimpaan"\
    " muutokseen")
    plt.ylabel("Absorptiovaikutusalan muutos (1/cm)")
    # plt.savefig('param.png', dpi=1200)
    plt.show()

muutokset = maarita_muutokset()

```

```
muutosmatriisi = maarita_muutosmatriisi(muutokset)
```

```
virhevektori = maarita_virhevektori()
```

```
pol_kertoimet = maarita_polynomikertoimet(muutosmatriisi, virhevektori)
```

```
piirra_kuvaaja(pol_kertoimet, muutokset, virhevektori)
```