

EUR 358.i

COMUNITÀ EUROPEA DELL'ENERGIA ATOMICA - EURATOM

IL METODO DI GALERKIN SUL CALCOLO DEL FLUSSO TERMICO IN MEZZI ETEROGENEI NELL'APPROSSIMAZIONE DELLA DIFFUSIONE

di

Adelia DANERI e Adriana DANERI

1963



Lavoro svolto dall'Istituto di Fisica Teorica dell'Università di Milano
(Gruppo Ricerche Applicazioni Scientifiche)
nel quadro del contratto Euratom No 006-60-7 CET I

AVVERTENZA

Il presente documento è stato elaborato sotto gli auspici della Commissione della Comunità Europea dell'Energia Atomica (EURATOM).

Si precisa che la Commissione dell'EURATOM, i suoi contraenti, o qualsiasi altra persona che agisca in loro nome :

- 1° — Non garantiscono l'esattezza o la completezza delle informazioni contenute nel presente documento, nè che l'uso di qualsiasi informazione, dispositivo metodo o processo, descritti nel presente documento, non arrechino pregiudizio ai diritti sulle opere dell'ingegno e sulle invenzioni industriali.
- 2° — Non assumono alcuna responsabilità per i danni che dovessero risultare dall'uso di informazioni, dispositivi, metodi o processi divulgati con il presente documento.

Questa relazione è messa in vendita al prezzo di 30,— franchi belgi, su richiesta da indirizzare a: PRESSES ACADEMIQUES EUROPEENNES — 98, Chaussée de Charleroi, Bruxelles 6.

Il pagamento va effettuato a mezzo di versamento :

— alla BANQUE DE LA SOCIETE GENERALE (Agence Ma Campagne) — Bruxelles — conto N° 964.558,

— alla BELGIAN AMERICAN BANK AND TRUST COMPANY — New York — conto N° 121.86,

— alla LLOYDS BANK (Foreign) Ltd. — 10 Moorgate, London E.C.2,

menzionando il riferimento : « EUR 358 .i — Il metodo di Galerkin sul calcolo del flusso termico in mezzi eterogenei nell'approssimazione della diffusione ».

Per la riproduzione di questo documento ci si è serviti della miglior copia disponibile.

EUR 358.i

COMUNITÀ EUROPEA DELL'ENERGIA ATOMICA - EURATOM

IL METODO DI GALERKIN SUL CALCOLO DEL FLUSSO TERMICO IN MEZZI ETEROGENEI NELL'APPROSSIMAZIONE DELLA DIFFUSIONE

di

Adelia DANERI e Adriana DANERI

1963



Lavoro svolto dall'Istituto di Fisica Teorica dell'Università di Milano
(Gruppo Ricerche Applicazioni Scientifiche)
nel quadro del contratto Euratom No 006-60-7 CET I

IL METODO DI GALERKIN SUL CALCOLO DEL FLUSSO TERMICO
IN MEZZI ETEROGENEI NELL'APPROSSIMAZIONE DELLA DIFFUSIONE

RIASSUNTO

Il codice DESTHEC calcola il flusso termico in sistemi non omogenei con simmetria a "slab", cilindrica o sferica.

Chiamato $\varphi_j(E)$ il flusso relativo al mezzo infinito con le caratteristiche fisiche del mezzo j-esimo, si è approssimato il flusso termico in ogni punto del sistema come suggerito da Selengut mediante una combinazione lineare dei vari $\varphi_j(E)$ con coefficienti dipendenti dalla posizione.

Si è poi risolto il problema della determinazione dei coefficienti col metodo di Galerkin nell'approssimazione della diffusione.

SUMMARY

The DESTHEC Code is used to calculate the thermal flux in the diffusion approximation in one dimension non homogeneous systems with slab, cylindrical or spherical symmetry.

Calling $\varphi_j(E)$ the flux relative to the infinite medium, with the physical properties of the j-th medium, the flux in all the points of the system is approximated, as Selengut suggests, by a linear superposition of the different $\varphi_j(E)$ with spatially depending coefficients; then the coefficients are established by Galerkin's method.

1) Introduzione

Il metodo multigruppi, largamente usato per calcolare la distribuzione energetica e spaziale in molti problemi di calcolo di reattori, può non essere soddisfacente quando lo si voglia applicare al calcolo del flusso termico in un sistema costituito da mezzi con caratteristiche fisiche notevolmente diverse, come può essere il caso di due mezzi a temperature diverse o con assorbimento diverso. (Il codice SLOP calcola col metodo multigruppi il flusso termico in un sistema eterogeneo di mezzi diffondenti ma tutti alla stessa temperatura e tutti con lo stesso materiale moderante).

E' sembrato quindi utile ricorrere a rappresentazioni del flusso scelte in base a certi criteri fisici. Selengut [1], [5], Calame e Federighi [2], [3], [6], Kottwitz [4] hanno a tal fine proposto per primi di considerare il flusso termico in ogni punto di un sistema a due mezzi come combinazione dei flussi $\varphi_1(E)$, $\varphi_2(E)$ relativi a mezzi infiniti aventi le caratteristiche fisiche dei due mezzi in istudio. (In un punto del primo mezzo lontano dalla superficie di separazione dal secondo, il flusso sarà infatti molto simile a $\varphi_1(E)$ e quindi $\varphi_1(E)$ "peserà" più di $\varphi_2(E)$ nella combinazione. In un punto, dunque, prossimo alla superficie di separazione l'influenza del secondo mezzo si farà più notevole perché molti neutroni diffonderanno dal secondo mezzo con distribuzione energetica non molto diversa da quella che avevano nel secondo mezzo non avendo subito ancora molti urti nel primo).

In generale gli stessi autori dato un sistema di R regioni, approssimano i flussi nella regione ennesima come segue:

$$\Phi_n(E, \kappa) = \sum_{m=1}^R X_m(\kappa) \varphi_m(E). \quad (1)$$

Il problema è ridotto quindi al calcolo dei pesi $X_m(\kappa)$.

Calame e Federighi [3] si sono serviti del metodo variazionale di Kantorovich [7] che fa uso delle soluzioni delle equazioni per i mezzi infiniti e delle loro aggiunte pervenendo alla messa a punto del codice Swakraum. Punti non del tutto chiari nella esposizione teorica di tale codice e l'impossibilità nostra di usarlo, ci hanno condotto ad adottare un altro metodo e precisamente quello di Galerkin [7], che non implica, come è noto, le soluzioni delle equazioni aggiunte col notevole vantaggio pratico di ridurre considerevolmente il tempo di macchina. Inoltre si è ritenuto interessante applicare il metodo di Galerkin (abituamente per operatori differenziali in condizioni di notevole regolarità), ad operatori integro-differenziali con coefficienti discontinui per provarne almeno sperimentalmente, la validità.

Dato un operatore L (differenziale) in due variabili, la soluzione dell'equazione: $L(u) = 0$, (2)
soddisfacente a certe condizioni al contorno omogenee, si cerca [7], secondo Galerkin, nella forma approssimata:

$$\bar{u}(x, y) = \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i(x, y), \quad (3)$$

ove $\varphi_i(x, y)$ ($i = 1, 2, \dots, n$) è un sistema di funzioni (linearmente indipendenti) che soddisfano le stesse condizioni al contorno cui deve soddisfare la $u(x, y)$ ed i coefficienti c_i vanno calcolati opportunamente.

Considerate le φ_i come le prime n funzioni di un sistema completo $\{\varphi_i\}$ ($i = 1, 2, \dots, n, \dots$), avremo che se \bar{u} fosse la soluzione esatta del problema $L(u) = 0$, $L(\bar{u})$ dovrebbe essere identicamente nullo e quindi essere ortogonale a tutte le φ_i ($i = 1, 2, \dots, n, \dots$).

Siccome si hanno n coefficienti indeterminati possiamo soddisfare soltanto ad n condizioni di ortogonalità, corrispondenti ad un sistema lineare di n equazioni nelle n incognite c_i :

$$\iint L(\bar{u}(x, y)) \varphi_i(x, y) dx dy = \iint L\left(\sum_{j=1}^n c_j \varphi_j\right) \varphi_i dx dy = 0 \quad (4)$$

(i = 1, 2, n).

Noi applicheremo al nostro caso il metodo di Galerkin con la seguente variante. Cercheremo infatti la soluzione del nostro problema nella forma:

$$\bar{u}(x, y) = \sum_{i=1}^n X_i(x) \varphi_i(y), \quad (5)$$

dove le $\varphi_i(y)$ sono funzioni date, mentre le $X_i(x)$ vanno determinate opportunamente.

Con considerazioni analoghe alle precedenti giungiamo alle equazioni (differenziali):

$$\int L(\bar{u}(x, y)) \varphi_i dy = 0, \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (6)$$

determinanti le $X_i(x)$.

- - - - -

Si desidera ringraziare il Prof. S. Albertoni per il costante interessamento e coordinazione del lavoro, il Dr. I. Galligani per gli utili suggerimenti e discussioni e la Dr. C. Tamagnini che ha gentilmente descritto e fornito la subroutine "Thesis" relativa al calcolo del flusso termico in un mezzo infinito.

- - - - -

2) Ipotesi fisiche e metodo di soluzione.

Il codice DESTHEC da noi messo a punto (IBM-7090) calcola il flusso termico in funzione dello spazio e dell'energia in un sistema di mezzi eterogenei in geometria a slab oppure cilindrica o sferica, nell'approssimazione della diffusione.

L'equazione da risolvere è la seguente:

$$\begin{aligned}
 -D(E, \kappa) \nabla^2 \Phi(E, \kappa) + (\Sigma_s(E, \kappa) + \Sigma_a(E, \kappa)) \Phi(E, \kappa) = \\
 = \int_0^\infty \Sigma_s(E' \rightarrow E, \kappa) \Phi(E', \kappa) dE' + S(E, \kappa). \quad (7)
 \end{aligned}$$

Le funzioni $D(E, \kappa)$, $\Sigma_s(E, \kappa)$, $\Sigma_a(E, \kappa)$, $\Sigma(E' \rightarrow E, \kappa)$ sono indipendenti da x negli intervalli $a_j < x < a_{j+1}$ ($a_0 = 0 < a_1 < \dots < a_j < \dots < a_R$) ed il flusso $\Phi(E, \kappa)$ (o la sua derivata) deve soddisfare alle condizioni di annullamento in a_0 e a_R . Inoltre devono essere soddisfatte le condizioni di continuità del flusso e della corrente nei punti di interfaccia a_j ($j = 1, 2, \dots, R - 1$). Si fa l'ipotesi che in ogni regione ci sia un elemento con massa notevolmente inferiore agli altri, che chiameremo elementi pesanti. Attribuiremo l'indice 1 all'elemento leggero ed i numeri successivi agli elementi pesanti. Con tale ipotesi potremo scrivere:

$$\Sigma_{s,i}(E' \rightarrow E) = \delta(E' - E) \Sigma_{s,i}(E'), \quad i = 2, \dots;$$

per cui:

$$\begin{aligned}
 \int dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \kappa) \Phi(E', \kappa) = \sum_{i=2}^{n_r} \int \Sigma_{s,i}(E') \delta(E' - E) \Phi(E', \kappa) dE' + \int \Sigma_{s,1}(E' \rightarrow E, \kappa) \Phi(E', \kappa) dE' \\
 = \sum_{i=2}^{n_r} \Sigma_{s,i} \Phi(E, \kappa) + \int \Sigma_{s,1}(E' \rightarrow E, \kappa) \Phi(E', \kappa) dE', \quad (8)
 \end{aligned}$$

ove n_r è il numero di elementi nella regione r .

Posta la (8) nella (7), e tenendo presente che: $\Sigma_s(E, \kappa) = \sum_{i=1}^{n_r} \Sigma_{s,i}$, si ottiene:

$$\begin{cases}
 \Sigma_s(E, \kappa) = \Sigma_{s,1}(E, \kappa), \\
 \Sigma_s(E' \rightarrow E, \kappa) = \Sigma_{s,1}(E' \rightarrow E, \kappa).
 \end{cases} \quad (9)$$

Per ricavare dalla (7) il flusso termico introduciamo un'energia E_c sufficientemente alta da poter ritenere valido il modello del rallentamento per $E \geq E_c$. (Con tale assunzione è praticamente impossibile che dei neutroni, aventi energia inferiore a E_c , passino per urti a energie superiori). Potremo perciò, con buona approssimazione assumere:

$$\Sigma_s(\bar{E}, \mathbf{x}) = \int_0^{\bar{E}_c} \Sigma_s(E \rightarrow E', \mathbf{x}) dE'. \quad (10)$$

Scrivendo la (7) nella forma:

$$-D(E, \mathbf{x}) \nabla^2 \Phi(E, \mathbf{x}) + (\Sigma_s(E, \mathbf{x}) + \Sigma_a(E, \mathbf{x})) \Phi(E, \mathbf{x}) = \int_0^{\bar{E}_c} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mathbf{x}) \Phi(E', \mathbf{x}) dE' + \int_{E_c}^{\infty} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mathbf{x}) \Phi(E', \mathbf{x}) dE' + S(E, \mathbf{x}); \quad (11)$$

potremo supporre di conoscere la $\Phi(E', \mathbf{x})$ per $E' > E_c$ (teoria del rallentamento) e faremo l'ipotesi che non vi sia alcuna sorgente esterna nell'intervallo $(0, E_c)$ ritenendo eguale a:

$$\int_{E_c}^{\infty} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mathbf{x}) \Phi(E', \mathbf{x}) dE' \quad (12)$$

l'unica sorgente $S(E, \mathbf{x})$ di neutroni. L'equazione di definizione del flusso termico è allora la seguente

$$-D(E, \mathbf{x}) \nabla^2 \Phi(E, \mathbf{x}) + (\Sigma_s(E, \mathbf{x}) + \Sigma_a(E, \mathbf{x})) \Phi(E, \mathbf{x}) = \int_0^{\bar{E}_c} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mathbf{x}) \Phi(E', \mathbf{x}) dE' + S(E, \mathbf{x}), \quad (13)$$

con $S(E, \mathbf{x})$ definito dalla (12).

Circa il calcolo della $S(E, \mathbf{x})$ considereremo il flusso epitermico in ogni regione come un prodotto del tipo:

$$\bar{\Phi}_E(E) \Phi_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) \quad (14)$$

con $\bar{\Phi}_E(E) = A / (\Sigma_s E)$ (ricavato dalla teoria del rallentamento).

Dalla (12) segue allora che si può esprimere la sorgente come un prodotto di un termine dipendente da E per un termine dipendente da x :

$$S(E, x) = \bar{S}(E) \bar{S}(x), \quad (15)$$

con

$$\int_0^{E_c} \bar{S}(E) dE = 1. \quad (16)$$

3) Calcolo del flusso termico in un mezzo infinito.

Come abbiamo già detto dobbiamo innanzitutto cercare le soluzioni che si avrebbero se ciascuna regione fosse infinita. Dobbiamo per ogni regione risolvere l'equazione:

$$\left(\bar{\Sigma}_s(E) + \Sigma_a(E) \right) \bar{\Phi}(E) = \int_0^{E_c} \Sigma_s(E' \rightarrow E) \bar{\Phi}(E') dE' + S(E), \quad (17)$$

derivabile dalle (12) e (13) nel caso di $\bar{\Phi}$ indipendente da x .

All'uopo abbiamo usato come subroutine di calcolo il codice "Thesis" [8] che fornisce la distribuzione neutronica in un mezzo infinito. Riteniamo opportuno riportare qualche cenno riguardante la teoria di tale codice [8]. Il codice "Thesis", risolve in effetti la:

$$\left[V(v) + \gamma(v) \right] N(v) = \int_0^{v^*} f(v' \rightarrow v) N(v') dv' + S(v), \quad (18)$$

o cui si perviene dalla (17) con le sostituzioni:

$$\frac{1}{2} v^{*2} = E_c,$$

$$\bar{\Phi}(E) = N(v), \quad (19)$$

$$\gamma(v) = \Sigma_a v, \quad (20)$$

$$V(v) = \bar{\Sigma}_s v, \quad (21)$$

$$\frac{G(v' \rightarrow v)}{v v'} = \sum_s (E' \rightarrow E), \quad (22)$$

$$\frac{S(v)}{v} = S(E). \quad (23)$$

Il kernel di scattering che compare nella (18) è calcolato [9] per il caso di moderatore gassoso monoatomico di massa m , mediante l'ipotesi dell'urto elastico, supponendo che il gas abbia una distribuzione maxwelliana corrispondente alla temperatura T che può variare solo da una regione all'altra.

Si suppone inoltre di poter rappresentare la sezione d'urto di scattering dell'elemento leggero con [9]

$$\bar{\sigma}_s(v_2) = \sum_{i=1}^4 \bar{\sigma}_i e^{-\alpha_i v_2^2} \quad (24)$$

Ne segue che:

$$G(v' \rightarrow v) = N_1 \sum_{i=1}^4 \bar{\sigma}_i G(v' \rightarrow v, \alpha_i),$$

ove N_1 è la densità dell'elemento leggero e

$$\begin{aligned} G(v' \rightarrow v; \alpha_i) &= \frac{(m+1)^2}{h m} \frac{\tau_i^3}{\lambda_i} \frac{v}{v'} \left\{ \exp[-\alpha_i \tau_i^2 v'^2] \cdot \right. \\ &\cdot \left[\operatorname{erf}(\beta \vartheta_i v - \beta \zeta_i v') \pm \operatorname{erf}(\beta \vartheta_i v + \beta \zeta_i v') \right] + \\ &+ \exp[\beta^2 (v'^2 - \lambda_i v^2)] \left[\operatorname{erf}(\beta \vartheta_i v' - \beta \zeta_i v) + \right. \\ &\left. \left. \mp \operatorname{erf}(\beta \vartheta_i v' + \beta \zeta_i v) \right] \right\}, \quad (25) \end{aligned}$$

dove il segno superiore si riferisce al caso $v < v'$ e il segno inferiore al caso $v > v'$ e

$$\tau_i^2 = \frac{m \beta^2}{m \beta^2 + \alpha_i},$$

$$\vartheta_i = \frac{m+1}{2 \tau_i \sqrt{m}},$$

$$\zeta_i = \tau_i \sqrt{m} - \vartheta_i ,$$

$$\lambda_i = 1 + m(1 - \tau_i^2) ,$$

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du ,$$

$$\beta^2 = \frac{1}{2kT} .$$

Come per la (10) si ottiene:

$$V(v) = \int_0^{v^*} G(v \rightarrow v') dv' . \quad (26)$$

Per il calcolo di S (v)

$$S(v) = \int_{v^*}^{\infty} G(v' \rightarrow v) N(v') dv' , \quad (12')$$

si suppone che per $v > v^*$ sia:

$$N(v) = \frac{A}{\sum_s v^2} , \quad (27)$$

mentre per nucleo di scattering $G(v \rightarrow v')$ si prende quello che deriva dalla teoria del rallentamento:

$$G(v' \rightarrow v) = \begin{cases} \frac{2v \sum_s}{(1-\alpha) v'} , & \text{per } v < v' < v/\alpha \\ 0 & \text{altrimenti,} \end{cases} \quad (28)$$

ove α

$$\alpha = \frac{m-1}{m+1} . \quad (29)$$

Per determinare il valore di A [8] nella (27) si pone la (12) nella (18) e si integra su v da 0 a v^* giungendo a:

$$S(v) = \begin{cases} 2v \int_0^{v^*} \gamma(\bar{v}) N(\bar{v}) d\bar{v} \cdot \left(\frac{1}{v^{m-2}} - \frac{v^2}{v^2} \right) / [\xi (1-\alpha^2)], \\ 0 \end{cases} \quad \text{altrimenti,} \quad (30)$$

ove è :

$$\xi = 1 - \frac{(m-1)^2}{2m} \ln \frac{m+1}{m-1}.$$

La (18) diventa per la (30) un'equazione omogenea nella $N(v)$, che si risolve numericamente discretizzando l'integrale; si ottiene così un sistema lineare omogeneo che si risolve col metodo di Seidel. Dalla (30), tenendo presente la (23) si ricava $S(E)$ (vedi (15))

$$\bar{S}(E) = \frac{S(E)}{\int_0^{E_c} S(E) dE}$$

Per quanto abbiamo detto, il codice dovrebbe trattare solo elementi gassosi monoatomici, senonchè nel "Thesis" è data anche la possibilità di trattare moderatori gassosi non monoatomici e liquidi attraverso l'introduzione di convenienti masse effettive [10], [11]. (Siccome nelle regioni al di sotto di un elettron - volt il neutrone non urta con un singolo atomo, bensì con tutta la molecola di cui possono essere eccitati gli stati rotazionali e vibrazionali, si dovrà dare all'elemento scatterante una massa equivalente che tiene conto di questi fatti).

Nella (25) occorrerà pertanto porre la massa equivalente, mentre nella (30) compare la massa effettiva dell'elemento più leggero: ciò dipende dal fatto che il termine di sorgente è legato agli urti che il neutrone fa in zona epitermica in cui l'energia di legame dell'elemento leggero col resto della molecola è trascurabile rispetto all'energia cinetica del neutrone incidente.

4) Soluzione del Problema Dipendente dallo Spazio

Abbiamo così trovato per ogni regione $a_{j-1} < x < a_j$ il flusso termico $\bar{\Phi}_j(E)$, a meno di un fattore moltiplicativo inessenziale, che si avrebbe in un mezzo omogeneo infinito con le caratteristiche fisiche della regione j -esima.

Posto

$$\bar{\Phi}_{N_j}(E) = \frac{\bar{\Phi}_j(E)}{\int_0^{\bar{E}_c} \bar{\Phi}_j(E) dE}, \quad (31)$$

cerchiamo col metodo di Galerkin una soluzione della (13) della forma:

$$\bar{\Phi}(E, x) = \sum_{j=1}^R X_j(x) \bar{\Phi}_{N_j}(E). \quad (32)$$

Abbiamo usato la normalizzazione (31) perché allora da (32) otteniamo che il flusso termico totale in ogni punto dello spazio è dato da:

$$\bar{\Phi}(x) = \int_0^{\bar{E}_c} \bar{\Phi}(E, x) dE = \sum_{j=1}^R X_j(x). \quad (33)$$

Per ottenere le equazioni cui soddisfano le $X_i(x)$ sostituiamo la (32) nella (13), moltiplichiamo per $\bar{\Phi}_j$ ($j = 1, 2, \dots, R$) ed integriamo su E da 0 a E_c ; otteniamo così il sistema:

$$\sum_{i=1}^R \left(-D_{ji}(x) \nabla^2 X_i(x) + A_{ji}(x) X_i(x) \right) = S_j(x), \quad (34)$$

ove è:

$$D_{ji}(x) = \int_0^{E_c} \bar{\Phi}_j(E) D(E, x) \bar{\Phi}_{N_j}(E) dE; \quad (35)$$

$$A_{ji}(x) = \int_0^{E_c} \bar{\Phi}_j(E) \left\{ \left[\bar{\Sigma}_s(E, x) + \bar{\Sigma}_a(E, x) \right] \bar{\Phi}_{N_i}(E) - \int_0^{E_c} \bar{\Sigma}_s(E' \rightarrow E, x) \bar{\Phi}_{N_i}(E') dE' \right\} dE; \quad (36)$$

$$S_j(x) = \int_0^{E_c} \bar{\Phi}_j(E) \bar{S}(E) dE \cdot \bar{S}(x). \quad (37)$$

Le $D_{ji}(x)$, $A_{ji}(x)$, $S_j(x)$ sono funzioni a gradino di x . Si noti che abbiamo calcolato gli elementi di matrice moltiplicando per $\bar{\Phi}_j(E)$ anziché $\bar{\Phi}_{N_j}(E)$ per non avere numeri con esponente troppo piccolo che potessero uscire dall'intervallo consentito nella 7090.

Uciamo ora le condizioni al contorno e alle interfacce per le $X_i(x)$. Se nell'origine deve valere la condizione di annullamento del flusso e della derivata, dalla (32) si ottiene:

$$X_j(0) = 0 \quad (38)$$

e rispettivamente:

$$\frac{d X_j(0)}{d x} = 0; \quad (39)$$

analogamente nell'altro estremo a_R . Alle interfacce a_s ($s = 1, 2, 3, \dots, R - 1$) devono valere le relazioni:

$$\bar{\Phi}(E, a_s -) = \bar{\Phi}(E, a_s +), \quad (40)$$

$$D(E, a_3^-) \left[\frac{\partial \Phi(E, x)}{\partial x} \right]_{x=a_3^-} = D(E, a_3^+) \left[\frac{\partial \Phi(E, x)}{\partial x} \right]_{x=a_3^+} \quad (41)$$

La (40) sarà soddisfatta se imponiamo

$$X_j(a_3^-) = X_j(a_3^+) \quad (42)$$

Sostituendo in (41) la (32) e moltiplicando per $\bar{\phi}_i(E)$ ($i=1,2,\dots,R$) ed integrando da 0 a E_c otteniamo:

$$\sum_{j=1}^R D_{ij}(a_3^-) \left[\frac{dX_j(x)}{dx} \right]_{x=a_3^-} = \sum_{j=1}^R D_{ij}(a_3^+) \left[\frac{dX_j(x)}{dx} \right]_{x=a_3^+} \quad (43)$$

5) Soluzione numerica del problema dipendente dallo spazio.

a) - Il sistema (34) si può scrivere nella forma:

$$-\Phi(x) \frac{d}{dx} \left(x^P \frac{d\underline{X}}{dx} \right) + \Omega(x) x^P \underline{X} = x^P \underline{S}(x) \quad (44)$$

dove:

$$P = \begin{cases} 0 & \text{in geometria a "slab";} \\ 1 & \text{in geometria cilindrica;} \\ 2 & \text{in geometria sferica;} \end{cases} \quad (45)$$

$\underline{X}(x)$ e $\underline{S}(x)$ sono vettori a R componenti ($R =$ numero di regioni);
 $\Phi(x)$ e $\Omega(x)$ sono matrici quadrate di ordine R costanti negli intervalli (regioni) $a_{j-1} < x < a_j$ con $a_0 = 0 < a_1 < \dots < a_j < \dots < a_R$.
 $\underline{X}(x)$ deve soddisfare le seguenti condizioni al contorno ed alle interfacce:

$$\underline{X}(0) = \underline{0} \quad (46)$$

oppure

$$\frac{d\underline{X}(0)}{dx} = \underline{0} \quad (47)$$

$$\underline{X}(a_R) = \underline{0}, \quad (48)$$

oppure

$$\frac{d\underline{X}(a_R)}{dx} = \underline{0}; \quad (49)$$

$$\underline{X}(a_{j-}) = \underline{X}(a_{j+}), \quad (50)$$

$$\mathcal{D}(a_{j-}) \frac{d\underline{X}(a_{j-})}{dx} = \mathcal{D}(a_{j+}) \frac{d\underline{X}(a_{j+})}{dx}. \quad (51)$$

b) - Discretizzazione mediante differenze finite.

Per risolvere numericamente il sistema (44) discretizziamo l'intervallo $(0, a_R)$.

Siano x_j , con $0 \leq x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_N \leq a_R$, i punti dove vogliamo ottenere una soluzione approssimata del sistema (44);

sarà: $x_1 > 0$ se vale la (46), $x_1 = 0$ se vale la (47);

$x_N < a_R$ se vale la (48), $x_N = a_R$ se vale la (49).

Calcoliamo dapprima le equazioni alle differenze finite nei punti x_2, x_3, \dots, x_{N-1} .

A tale scopo fissato un generico punto x_n chiamiamo x_n^- il punto medio dell'intervallo (x_{n-1}, x_n) e x_n^+ il punto medio dell'intervallo (x_n, x_{n+1}) ed integriamo il sistema (44) su (x_n^-, x_n^+) :

$$\begin{aligned} -\mathcal{D}_{n-1} \int_{x_n^-}^{x_n} \frac{d}{dx} \left(x^P \frac{d\underline{X}}{dx} \right) dx - \mathcal{D}_n \int_{x_n}^{x_n^+} \frac{d}{dx} \left(x^P \frac{d\underline{X}}{dx} \right) dx + \\ + \mathcal{Q}_{n-1} \int_{x_n^-}^{x_n} x^P \underline{X} dx + \mathcal{Q}_n \int_{x_n}^{x_n^+} x^P \underline{X} dx = \int_{x_n^-}^{x_n^+} x^P \underline{S} dx; \end{aligned} \quad (52)$$

$$\begin{aligned} -\mathcal{D}_{n-1} \frac{(x_n - h_{n-1}/2)^P}{h_{n-1}} \underline{X}_{n-1} + \left(\mathcal{D}_{n-1} \frac{(x_n - h_{n-1}/2)^P}{h_{n-1}} + \mathcal{D}_n \frac{(x_n + h_n/2)^P}{h_n} \right) \underline{X}_n + \\ + \mathcal{Q}_{n-1} \frac{x_n^{P+1} - (x_n - h_{n-1}/2)^{P+1}}{P+1} + \mathcal{Q}_n \frac{(x_n + h_n/2)^{P+1} - x_n^{P+1}}{P+1} \underline{X}_n + \\ - \mathcal{D}_n \frac{(x_n + h_n/2)^P}{h_n} \underline{X}_{n+1} = \underline{S}_{n-1} \frac{x_n^{P+1} - (x_n - h_{n-1}/2)^{P+1}}{P+1} + \\ + \underline{S}_n \frac{(x_n + h_n/2)^{P+1} - x_n^{P+1}}{P+1}, \end{aligned} \quad (53)$$

ove è:

$$\mathcal{P}_n = \mathcal{P}(x_n); \quad \mathcal{Q}_n = \mathcal{Q}(x_n); \quad \underline{S}_n = \underline{S}(x_n); \quad \underline{X}_n = \underline{X}(x_n);$$

$$h_n = x_{n+1} - x_n$$

Le equazioni relative al punto x_1 , nel caso in cui valga la (46), si ricavano dalla (53) ponendo in essa $n = 1$ e $\underline{X}_0 = \underline{0}$.

Nel caso in cui valga la (47) si ottengono le equazioni per il punto $x_1 = 0$ dalla (44) scritta nel modo seguente:

$$-\mathcal{P}(x) \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{P}{x} \frac{d}{dx} \right) \underline{X} + \mathcal{Q}(x) \underline{X} = \underline{S}; \quad (55)$$

essendo

$$\underline{X}(x) = \underline{X}(0) + x \frac{d}{dx} \underline{X}(0) + \frac{x^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} \underline{X}(0) + O(x^3)$$

per la (47) otteniamo, a meno di infinitesimi di ordine superiore:

$$\underline{X}(x) = \underline{X}(0) + \frac{x^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} \underline{X}(0), \quad (56)$$

da cui derivando rispetto a x e passando al limite

$$\frac{d^2}{dx^2} \underline{X}(0) = \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \underline{X}(0),$$

che posta nella (55) dà:

$$-\mathcal{P}_1 (1+P) \left(\frac{d^2}{dx^2} \underline{X} \right)_{x=0^+} \mathcal{Q}_1 \underline{X}_1 = \underline{S}_1,$$

da cui per la (56)

$$-\mathcal{P}_1 \frac{2(1+P)}{h_1} (\underline{X}_2 - \underline{X}_1) + \mathcal{Q}_1 h_1 \underline{X}_1 = \underline{S}_1 h_1. \quad (57)$$

Le equazioni relative al punto x_N si ricavano dalla (53) nel caso in cui vale la (48) ponendo $X_{N+1} = 0$. Se invece vale la (49), dalla (44) integrando da x_{N-1}^+ a x_N :

$$\begin{aligned} \oint_{N-1} \left(x_N - h_{N-1}/2\right)^P \frac{X_N - X_{N-1}}{h_{N-1}} + Q_{N-1} \frac{x_N^{P+1} - (x_N - h_{N-1}/2)^{P+1}}{P+1} X_N &= \\ &= \int_{N-1} \frac{x_N^{P+1} - (x_N - h_{N-1}/2)^{P+1}}{P+1}. \end{aligned} \quad (58)$$

c) Soluzione del sistema lineare derivante dalla discretizzazione.

Il sistema di equazioni differenziali (44) è così approssimato da un sistema di equazioni lineari non omogeneo del tipo:

$$\begin{aligned} M_1 X_1 + Q_{b1} X_2 &= K_1; \\ L_i X_{i-1} + M_i X_i + Q_{bi} X_{i+1} &= K_i, \quad i = 2, 3, \dots, N-1; \\ L_N X_{N-1} + M_N X_N &= K_N, \end{aligned} \quad (59)$$

dove M_j, Q_{bj}, L_j sono matrici quadrate di ordine R , con $Q_{bj} = L_{j+1}$ tranne per $j = 1$ se vale la (47).

Il sistema (59), data la sua forma tridiagonale a blocchi di ordine R , si risolve esattamente col metodo di sostituzione; posto:

$$\begin{cases} \alpha_1 = M_1, \\ \alpha_i = M_i - L_i \alpha_{i-1}^{-1} Q_{bi-1}; \quad (i = 2, 3, \dots, N); \end{cases} \quad (60)$$

$$\begin{cases} \beta_1 = M_1^{-1} K_1, \\ \beta_i = \alpha_i^{-1} (K_i - L_i \beta_{i-1}), \quad (i = 2, 3, \dots, N). \end{cases} \quad (61)$$

Si ottiene immediatamente

$$\begin{aligned} X_i &= \beta_i - \alpha_i^{-1} Q_{bi} X_{i+1}, \quad (i = 1, 2, \dots, N-1), \\ X_N &= \beta_N. \end{aligned} \quad (62)$$

6) Dati di input

I formati sono di due tipi: uno per le variabili in virgola fissa, e 2 per le variabili in virgola mobile:

1 F~~O~~R~~M~~A~~T~~ (12 I 6)

2 F~~O~~R~~M~~A~~T~~ (5 E 14.8)

I dati sono raggruppati in blocchi nel modo seguente:

blocco a) - Numero di regioni (≤ 5) e gruppi energetici (≤ 40) con formato 1;

blocco b) - Estremo superiore dell'intervallo termico in eV (≤ 3 eV.), precisione richiesta nell'iterazione per il calcolo dei flussi nei mezzi infiniti (es. 10^3), con formato 2.

I blocchi indicati con c), d), ^{d')}e), contengono i dati con le caratteristiche fisiche delle singole regioni e vanno quindi ripetuti tante volte quante sono le regioni. (Ad eccezione del blocco e) che va posto solo la prima volta):

blocco c) - 9 dati uguali ciascuno a 0 o a 1, che chiameremo $\gamma_a(I)$, il cui significato sarà precisato più avanti, numero (≤ 20) di assorbitori con sezione d'urto $\sigma_a \neq \frac{k}{v}$, numero (≤ 20) di assorbitori con sezione d'urto $\sigma_a = \frac{k}{v}$ (il primo dei quali deve essere il moderatore), codici degli assorbitori del primo tipo, con formato 1;

blocco d) - massa legata del moderatore, massa libera del moderatore, ξ , coefficienti Saint John - Brown: $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4; \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ ($\sigma_{mod}(v) = \sum_{j=1}^4 \sigma_j e^{-\alpha_j v^{1/p_j}}$), densità degli assorbitori del tipo $\sigma_a = \frac{k}{v}$ espressa in numero di atomi presenti per $\text{cm}^3 \cdot 10^{-24}$, densità degli assorbitori del tipo $\sigma_a = \frac{k}{v}$ con le stesse unità di misura, corrispondenti sezioni di assorbimento ad energia termica in barns, temperatura del mezzo in gradi Celsius, con formato 2.

blocco d') - Esiste solo se il numero degli assorbitori di tipo $\sigma_a = \frac{k}{v}$ è maggiore di 1.

In questo caso esso contiene le σ_3 (in barns) di tali elementi, a partire dal secondo, nell'ordine in cui si presentano.

blocco e) - blocco con tabulazione della funzione $\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du$ e tabulazione delle sezioni d'urto d'assorbimento del tipo $\sigma_a \neq k/v$.

Oltre questi blocchi abbiamo:

blocco f) - numero che caratterizza la geometria: $P = \begin{cases} 0 & \text{geometria a slab,} \\ 1 & \text{geom. cilindrica,} \\ 2 & \text{geom. sferica;} \end{cases}$

- numero che caratterizza la condizione nel punto $x = 0$:

$$Q = \begin{cases} 0 & \text{per } \Phi(0) = 0, \\ 1 & \text{per } \frac{d\Phi(0)}{dx} = 0; \end{cases}$$

- numero che caratterizza la condizione nel punto $x = b$:

$$S = \begin{cases} 0 & \text{per } \Phi(b) = 0, \\ 1 & \text{per } \frac{d\Phi(b)}{dx} = 0; \end{cases}$$

- numero di punti contenuti nel reticolo spaziale (≤ 150), con formato 1;

blocco g) - matrice N_{IK} ($I=1,2,3, K=1, 2, 3, \dots, R$) ordinata per colonne, di cui parleremo piú avanti, con formato 1.

blocco h) - Sorgente di neutroni data come numero di neutroni per cm^3 che entrano nell'intervallo termico, nel punto x nell'unit  di tempo: S_1, S_2, \dots, S_N . ($N =$ numero punti del reticolo) con formato 2.

blocco i) - Vettore dei passi del reticolo h_j ($j = 1, \dots, 3, R$) ($R =$ numero regioni), con formato 2.

Significato degli $M_a(I)$

Nel programma la subroutine "Thesis"   chiamata tante volte quanto   il numero delle regioni.

Siccome ci sono dei calcoli che non occorre ripetere ogni volta, sono state introdotte delle variabili $\mathcal{J}_a(I)$ che possono assumere i valori zero o uno dipendentemente dai quali la macchina esegue o, meno i calcoli corrispondenti. Il significato degli $\mathcal{J}_a(I)$ è il seguente:

Se $\mathcal{J}_a(1) = 1$ (o 0) la macchina calcola (o non calcola) i punti $v(I)$ in cui divide l'intervallo delle velocità $(0, v^*)$ espressi in cm/sec.

Se $\mathcal{J}_a(2) = 1$ (o 0) la macchina legge (o non legge) le sezioni d'urto.

Se $\mathcal{J}_a(9) = 1$ (o 0) la macchina legge (o non legge) la funzione errore.

Se $\mathcal{J}_a(1) + \mathcal{J}_a(4) + \mathcal{J}_a(7) = 1$ (o 0) la macchina calcola (o non calcola) il termine di assorbimento $\gamma(v)$.

Se $\mathcal{J}_a(1) + \mathcal{J}_a(6) + \mathcal{J}_a(8) = 1$ (o 0) la macchina calcola (o non calcola) i $V(v(I))/N_1$ e i $G(v(I) \rightarrow v(\mathcal{J}))/N_1$

Se $\mathcal{J}_a(1) + \mathcal{J}_a(6) + \mathcal{J}_a(7) + \mathcal{J}_a(8) = 1$ (o 0) la macchina moltiplica (o non moltiplica) per N_1 i $V(v(I))/N_1$ ed i $G(v(I) \rightarrow v(\mathcal{J}))/N_1$

Matrice N_{IK} e passi del reticolo

In ogni regione si possono dare tre passi diversi:

h_1, h_2, h_3 , per la prima regione,

h_4, h_5, h_6 , per la seconda regione,

.....,

$h_{3(j-1)+1}$, $h_{3(j-1)+2}$, $h_{3(j-1)+3}$ per la j -esima regione, e così via.

La matrice N_{IK} ($I = 1, 2, 3, K = 1, \dots, R$) dà invece il numero dei punti che vanno presi con ciascun passo nel modo seguente:

se a_{j-1} è il primo estremo della regione j -esima, si prendono

N_{1j} con passo h_{3j-2} :

$$a_{j-1} + h_{3j-2}, a_{j-1} + 2h_{3j-2}, \dots, a_{j-1} + N_{1j} h_{3j-2},$$

poi $N_{2j} - N_{1j}$ punti con passo h_{3j-1} :

$$a_{j-1} + N_{1j} h_{3j-2} + h_{3j-1}, \dots, a_{j-1} + N_{1j} h_{3j-2} + (N_{2j} - N_{1j}) h_{3j-1},$$

poi $N_{3j} - N_{2j}$ punti con passo h_{3j} :

$$a_{j-1} + N_{1j} h_{3j-2} + (N_{2j} - N_{1j}) h_{3j-1} + h_{3j}, \dots,$$

$$a_{j-1} + N_{1j} h_{3j-2} + (N_{2j} - N_{1j}) h_{3j-1} + (N_{3j} - N_{2j}) h_{3j} = a_j$$

dove a_j è il secondo estremo della regione j -esima, tranne per il caso in cui la regione in considerazione sia l'ultima e si abbia la condizione (48) per cui

$$a_{j-1} + N_{1j} h_{3j-2} + (N_{2j} - N_{1j}) h_{3j-1} + (N_{3j} - N_{2j}) h_{3j} = a_R - h_{3j}.$$

Se la regione j -esima è la prima e se si ha la condizione al contorno (48) i punti con passo h , vanno presi in questo modo:

$$0, h_1, 2h_1, \dots, (N_{1j} - 1)h_1.$$

7) "Output" del programma.

Vengono stampati il numero delle regioni, l'energia E_c in elettron-volt, poi per ogni regione le caratteristiche fisiche del moderatore, cioè densità espressa in numero di atomi per $cm^3 \cdot 10^{-24}$, massa legata e massa libera, ξ , coefficienti Brown - Saint John ζ_i (chiamati

SIGMS) e α_i (chiamati ALFA); la temperatura; i codici degli assorbitori di tipo $\sigma_a \neq \frac{k}{v}$ con le loro densità; poi la densità degli assorbitori di tipo $\frac{k}{v}$, le corrispondenti sezioni di assorbimento ad energia termica in barns e le sezioni di scattering di tali elementi, eccettuato il primo.

Vengono inoltre stampate le caratteristiche geometriche, cioè le variabili P, Q, S, la matrice N_{IK} ed i passi del reticolo h_j ed il termine $S(x)$ nei punti del reticolo; i punti v_j (espressi in cm/sec.) secondo cui è stato discretizzato l'intervallo delle velocità e le densità asintotiche $N_j(v_i)$, ($i = 1, 2, \dots, n =$ numero gruppi energetici, $j = 1, 2, \dots, R$), il flusso termico spaziale $\bar{\phi}(x)$ nei punti del reticolo espresso in $\text{cm}^{-2} \text{sec}^{-1}$, infine la densità neutronica $N(v, x)$ in ogni punto del reticolo per tutte le velocità v_i .

8) Esempio

Abbiamo allegato un "listing" relativo al caso di due regioni che costituiscono una cella in geometria a slab per cui abbiamo imposto le condizioni di annullamento della corrente ai due estremi. Le regioni si estendono rispettivamente da 0 a 10 cm e da 10 a 14 cm. Esse contengono i seguenti elementi:

Isotopi	Regione 1		Regione 2	
	<u>D e n s i t à a t o m i c h e</u>			
H	0.02804	x 10 ²⁴	0.06692	x 10 ²⁴
O	0.01402	x "	0.03346	" "
Zr	0.02267	" "	-----	
Al	0.002944	" "	-----	
U ²³⁵	0.0003972	" "	-----	
U ²³⁸	0.0000244	" "	-----	

Abbiamo inoltre posto $S(x) = 1$ nella prima regione e $S(x) = 2$ nella seconda regione.

Nella fig. 1 sono elencati alcuni andamenti di $N(v,x)$ in funzione della velocità (x è fisso), mentre nella fig. 2 è ricavata la dipendenza spaziale del flusso integrato.

Come si vede dai risultati, l'andamento qualitativo ci sembra assai ragionevole: da alcuni confronti preliminari abbiamo rilevato però un certo scostamento dai risultati di un altro codice (SLOP [12]), da noi assunto come termine di riferimento. Noi pensiamo che ciò sia dovuto alla diversa approssimazione usata dai due codici, e pertanto siamo già passati all'estensione del nostro metodo in doppia P_1 (adottata dallo SLOP), onde poter stabilire su basi più precise un confronto tra il nostro metodo ed i metodi usati da altri codici (multigruppi nello SLOP).

B I B L I O G R A F I A

- [1] - D.S. Selengut, HW - 56919, (1958)
 - [2] - G.P. Calame e F.D. Federighi, KAPL - M - GPC - 2 - (1959)
 - [3] - F.D. Federighi e G.P. Calame, Trans. Am. Nuclear Soc. 3, 62 (1960)
 - [4] - D.A. Kottwitz, Nuc. Sc. and Eng. 7, 345 (1960)
 - [5] - D.S. Selengut, Nuc. Sc. and Eng. 9, 94 (1961)
 - [6] - G.P. Calame e F.D. Federighi, Nuc. Sc. and Eng. 10, 190 (1961)
 - [7] - L.V. Kantorovich e V.I. Krylov, "Approximate Methods of Higher Analysis", International Publish, Groningen, Netherlands, 1958.
 - [8] - Ricci e C. Tamagnini, "Giornate dell'Energia Nucleare", Ottobre 1961
 - [9] - E.R. Cohen, Proc. Second Inter. Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy, 5, 405, Geneva (1955)
 - [10] - R. G. Sachs e E. Teller, Phys, Rev. 60, 18 (1941)
 - [11] - H.D. Brown and D.S. St. John (non pubblicato)
 - [12] - H. Bohl, E. Gelbard, P. Buerger, G. Culpepper, WAPD - TM - 188
-

