

INTRODUZIONE

La presente tesi si intitola “Gli elementi di frontiera per i calcoli di neutronica in tre dimensioni.”

Infatti l’obiettivo che ci si propone è lo sviluppo di una nuova tecnica di calcolo per la determinazione del flusso neutronico in sistemi tridimensionali, quale il core di un reattore. Per raggiungere tale traguardo, si è fatto ricorso al formalismo della matrice di risposta insieme al metodo agli elementi di frontiera o BEM, Boundary Element Method.

È lecito domandarsi perché si siano adoperati la tecnica della matrice di risposta ed il metodo BEM. Per fornire una risposta a questa domanda è necessario considerare le metodologie classiche di calcolo neutronico.

Il nocciolo di un reattore di potenza moderato ad acqua leggera può essere visto come un aggregato di spezzoni di assemblies, che sono, per esempio, a sezione quadrata. Ogni assembly, a sua volta, è composta da microcelle (pins-cells) che sono ancora, per esempio a sezione quadrata (o esagonale se il nocciolo è a reticolo esagonale). Al centro di ogni cella è disposta la barretta di combustibile, che è dotata di incamicatura ed è circondata dal moderatore, che nei reattori ad acqua leggera funge anche da refrigerante.

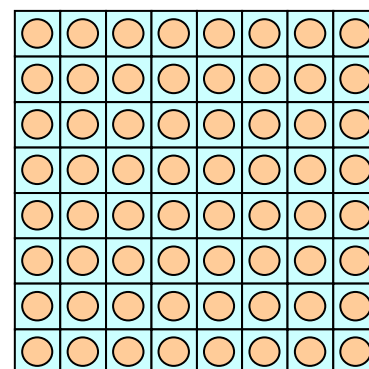
L’approccio tradizionale del calcolo neutronico del nocciolo consiste nello schematizzare la sezione trasversale del reattore a diverse quote z in un reticolo a maglie larghe (coarse-mesh), omogenee, ciascuna delle quali è macroscopicamente equivalente, in generale, ad una assembly. Questo approccio consta di varie fasi:

- 1) innanzitutto si calcolano le costanti di cella a molti gruppi energetici (per esempio 200) con calcoli di micro-cella effettuati per mezzo della teoria del trasporto;
- 2) successivamente si fa una prima omogeneizzazione: si omogeneizzano le celle e si collassano i gruppi energetici in un minor numero (ad esempio 10 o 15) e quindi si calcola il flusso neutronico di assembly, di solito anche in questo caso tramite la teoria del trasporto;
- 3) infine, in base al valore del flusso neutronico calcolato precedentemente, si fa una seconda omogeneizzazione, ossia si omogeneizza l’intera assembly, che a questo punto viene ad essere coincidente con una regione costituita da un materiale completamente omogeneo. Talora, in questa fase, la presenza della barra nelle diverse micro-celle è conservata, così da mantenere il massimo dettaglio ragionevolmente possibile, peraltro con un onere calcolativo molto considerevole.

La procedura di omogeneizzazione descritta riguarda una sezione trasversale ad una data quota z e quindi essa viene ripetuta a numerose quote z .

Schematizzato così il nocciolo del reattore, si calcola il flusso critico nell’intero core del reattore, facendo ricorso all’equazione della diffusione a più gruppi energetici (in genere due o tre).

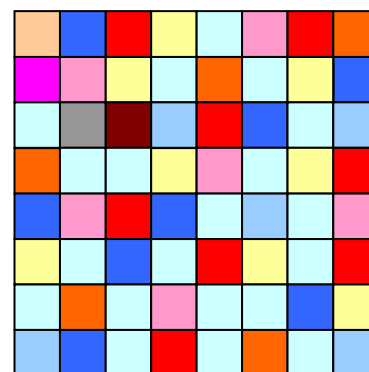
Per il calcolo del flusso neutronico nell’intero nocciolo del reattore vengono utilizzati metodi agli elementi finiti, tra i quali possono



**Calcoli di cella a 200 gruppi
in trasporto**



**Prima omogeneizzazione
a 10 gruppi per ogni cella**



**Seconda omogeneizzazione
e collassamento a 2 o 3 gruppi**

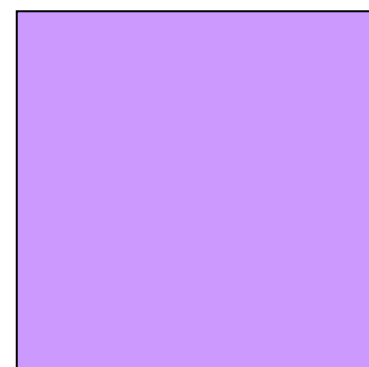


Figura 1: Procedura classica di omogeneizzazione.

essere compresi diversi metodi, detti in generale coarse-mesh, come per esempio il metodo QUABOX.

In tale metodo, dopo l'omogeneizzazione, effettuata secondo la procedura sopra descritta, si approssima il flusso neutronico in ogni "nodo", cioè in genere in uno spezzone di assembly omogeneizzata, mediante uno sviluppo polinomiale di secondo grado lungo ognuna delle tre direzioni (x, y, z) . Ad esempio:

$$\phi(x, y, z) = \phi(\xi, \eta, \zeta) = \phi_{i,j,k} \left(1 + a_{x,ijl} \xi + b_{x,ijk} \xi^2 + a_{y,ijk} \eta + b_{y,ijk} \eta^2 + a_{z,ijk} \zeta + b_{z,ijk} \zeta^2 \right)$$

dove $\phi(x, y, z)$ è il flusso nel generico punto (x, y, z) appartenente al nodo ijk ; $\phi_{i,j,k}$ è il flusso nel centro del nodo ijk . (x_i, y_j, z_k) sono le coordinate di tale punto. Inoltre:

$$\xi = \frac{x - x_i}{h_{x_i}}; \quad \eta = \frac{y - y_j}{h_{y_j}}; \quad \zeta = \frac{z - z_k}{h_{z_k}}$$

essendo $h_{x_i}, h_{y_j}, h_{z_k}$ le lunghezze del nodo rispettivamente

lungo x, y e z .

Esiste una generalizzazione del metodo QUABOX, che si basa sull'approssimazione del flusso mediante uno sviluppo polinomiale di terzo grado lungo le tre direzioni (x, y, z) ed è il metodo CUBBOX. Per determinare i coefficienti di tale espansione, si impone il bilancio neutronico in ogni nodo attraverso il metodo dei residui pesati (ad esempio il metodo alla Galerkin).

Infine, per collegare un nodo a quelli adiacenti, in entrambi i metodi QUABOX e CUBBOX si impone la continuità della corrente alle interfacce dei nodi. In conclusione si ottiene una formula a sette punti, espressa in termini dei valori del flusso al centro dei nodi, del tipo:

$$O_{ijk} \phi_{i,j,k} + W_{ijk} \phi_{i-1,j,k} + E_{ijk} \phi_{i+1,j,k} + S_{ijk} \phi_{i,j-1,k} + N_{ijk} \phi_{i,j+1,k} + D_{ijk} \phi_{i,j,k-1} + U_{ijk} \phi_{i,j,k+1} = 0$$

dove $O_{ijk}, W_{ijk}, E_{ijk}, S_{ijk}, N_{ijk}, D_{ijk}, U_{ijk}$ sono coefficienti che dipendono dalle costanti fisiche del problema e dai valori dei flussi di interfaccia tra i nodi, che vengono valutati sulla base dei flussi calcolati all'iterazione precedente. La risoluzione di questa equazione permette di ricavare il flusso nel reattore.

Un'ulteriore generalizzazione è stata realizzata in modo rigoroso da Hennart, che nel caso più semplice prevede ancora uno sviluppo fino al terzo grado, come il CUBBOX, ma combina anche tra loro le tre variabili (x, y, z) , come mostra la figura 2.

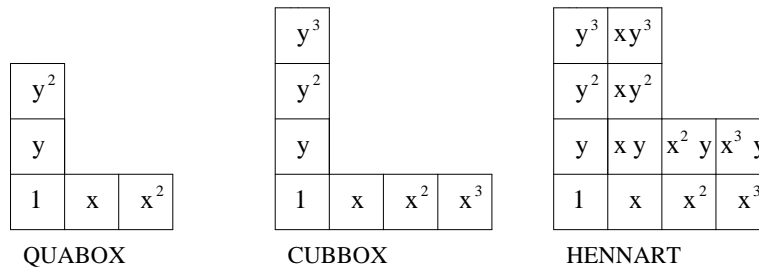


Figura 2: Ordini dei polinomi adottati dai tre metodi QUABOX, CUBBOX e HENNART in problemi bidimensionali.

Rispetto al QUABOX, i metodi CUBBOX ed HENNART consentono di aumentare la precisione, a parità del numero dei nodi, oppure di ridurre il numero dei nodi.

In alternativa ai metodi accennati ora possono essere utilizzati procedimenti iterativi, nei quali vengono risolte equazioni diffusive mono-dimensionali in ciascuna delle tre direzioni, ma facendo

entrare in gioco le fughe laterali, calcolate sulla base dei flussi nelle direzioni trasversali determinati all'iterazione precedente. Anche in questo caso, per collegare tra loro le soluzioni ricavate in ogni nodo si impongono condizioni di continuità dei flussi e delle correnti, che consentono in questo modo di determinare la soluzione nell'intero nocciolo del reattore.

La tecnica della matrice di risposta può essere considerata una variante, peraltro assai notevole, rispetto alle metodologie appena presentate. I principi primi della matrice di risposta o Response Matrix, R-M, possono essere fatti risalire ai primordi della Fisica del reattore, ma i contributi più importanti sono abbastanza recenti (intorno alla fine degli anni '70) e sono dovuti soprattutto a Weiss e a Lindahl, che hanno studiato le proprietà della matrice di risposta ed in particolare hanno analizzato la fattibilità dal punto di vista computazionale della tecnica della R-M e la sua consistenza con altri metodi impiegati nell'analisi dei reattori e hanno inoltre verificato la convergenza di questo metodo.

La tecnica della Response Matrix, anziché imporre la condizione di continuità del flusso e della corrente alle interfacce delle assemblies o, più in generale, alle interfacce di ogni elemento, come avviene nelle metodologie classiche, impone che le semi-correnti uscenti dalle facce di un nodo corrispondano alle semi-correnti entranti nelle facce corrispondenti dei nodi adiacenti. Fino a questo momento il cambiamento rappresentato dalla Response-Matrix sembrerebbe solo formale, ma in realtà la sua portata è ben più ampia di quanto non appaia. Infatti la tecnica della Response Matrix, ossia di una matrice che individua la risposta di ogni elemento del sistema in termini di semi-corrente uscente dall'elemento ad una sollecitazione che è rappresentata dalla semi-corrente entrante nell'elemento stesso, consente di trattare l'elemento o l'assembly come "una black-box" della quale interessano solo le entrate e le uscite, ma senza precludere un'analisi separata, anche molto dettagliata, di ciò che avviene al suo interno.

Risulta utile fare due esempi.

Nel primo esempio si assume come elemento costituente il sistema l'assembly già sottoposta ad omogeneizzazione. Una volta calcolata la matrice di risposta di ognuna delle assemblies, si impone la condizione di uguaglianza tra le semi-correnti uscenti da un'assembly e le semi-correnti entranti nelle assemblies adiacenti, ottenendo un sistema lineare algebrico in termini di tali semi-correnti. La risoluzione di tale sistema permette di ottenere i valori del flusso nell'intero nocciolo (compreso il riflettore). In questo caso la "black-box" non ha una struttura interna, anche se ciò non implica che il calcolo ad essa relativo sia, come vedremo, banale.

Nel secondo esempio si suppone che le assemblies non siano state omogeneizzate e siano pertanto ancora ravvisabili in esse le pin-cells che le compongono. Allora, in questo caso, l'elemento primario è appunto la singola pin-cell della quale si tratta di determinare la matrice di risposta. Poi, ancora imponendo che le semi-correnti uscenti da una pin-cell siano le semi-correnti entranti nelle pin-cells confinanti, che fanno parte della medesima assembly, di nuovo si giunge ad un calcolo complessivo dell'assembly che consente, valutando le semi-correnti uscenti da quest'ultima in termini delle semi-correnti entranti che saranno state assegnate, di determinare la matrice di risposta dell'assembly. A questo punto non resta che accoppiare le varie assemblies come nel primo esempio e quindi, come prima, si perviene al calcolo del flusso nell'intero nocciolo.

Questo secondo, ben più ambizioso, tipo di calcolo apre la strada ad una metodologia che prescinde dalle procedure di omogeneizzazione. Una tale metodologia permetterebbe di eliminare, in particolare, il problema di "correggere" tali procedure tramite discontinuity factors nella frontiera di ogni assembly e di rendere più rigorosa e più semplice la ricostruzione del flusso fine all'interno di ogni assembly.

In questo secondo esempio, inoltre, appare chiaro il concetto di matrice di risposta come black-box che ammette ulteriori sistemi di black-boxes gerarchicamente ordinati gli uni all'interno degli altri.

Bisogna peraltro aggiungere che la matrice di risposta della singola celletta dovrebbe essere calcolata non tramite la teoria della diffusione, bensì attraverso la teoria del trasporto o almeno mediante una tecnica di trasporto di basso ordine, come la tecnica Simplified Spherical Armonics

(SP_N), che coinvolge sistemi di equazioni del tipo della diffusione e sarà uno degli obiettivi delle ricerche future.

Nella presente tesi, a causa del breve tempo a disposizione, ci si è ristretti al caso del calcolo in diffusione di una assembly già omogeneizzata. Si è già detto che questo problema, malgrado l'apparenza, è tutt'altro che semplice, e presenta, pur accettando la teoria della diffusione, almeno le difficoltà matematiche che affliggono le equazioni di tipo ellittico nei punti di frontiera a curvatura infinita (punti angolosi, spigoli, vertici). Infatti per tali equazioni, tra le quali vi è l'equazione della diffusione, si hanno delle singolarità in corrispondenza dei punti sopra indicati. Questo è un problema ben noto in matematica ed è centrale in alcuni campi applicativi, mentre viene trascurato nei metodi agli elementi finiti, dal momento che questi ultimi non effettuano calcoli dettagliati in corrispondenza dei punti angolosi della frontiera e quindi ignorano a priori questo tipo di problemi. Se tuttavia i metodi agli elementi finiti vengono implementati per calcoli dettagliati vicino a punti della frontiera in cui la curvatura è infinita, si presentano anche per essi i problemi ora accennati. A titolo di esempio, si può considerare un calcolo fatto da Maurizio Maiani, che, trattando problemi piani, ha impiegato uno sviluppo in armoniche a variabili separate (lungo x e lungo y) di ordine elevato e ha ottenuto valori negativi del flusso in corrispondenza dei punti angolosi. Il gruppo delle figure 3 si riferisce ad una delle sue applicazioni: Maiani ha considerato una regione omogenea costituita da un quadrato lungo due direzioni ed infinita lungo la terza direzione (problema piano) e ha imposto una semicorrente entrante uniforme sul lato AB. Ha quindi calcolato la semicorrente uscente da tutti i lati del dominio. Per ottenere i risultati, Maiani ha adottato due diversi metodi, il metodo BEM e lo sviluppo in armoniche sopra accennato (Reference). Entrambi i metodi, come illustra la figura 3b, forniscono in prossimità degli spigoli A e B un valore negativo della semicorrente uscente, che è un risultato non fisico, dovendo essere la semi-corrente uscente positiva in tutti i punti del contorno. Tale risultato è una conseguenza dell'impiego dell'equazione della diffusione, che cade in difetto in corrispondenza degli spigoli e dove inoltre la semicorrente entrante presenta una forte singolarità (sul lato AB la semi-corrente entrante è una costante positiva, mentre è nulla nei punti dei lati AD e BC).

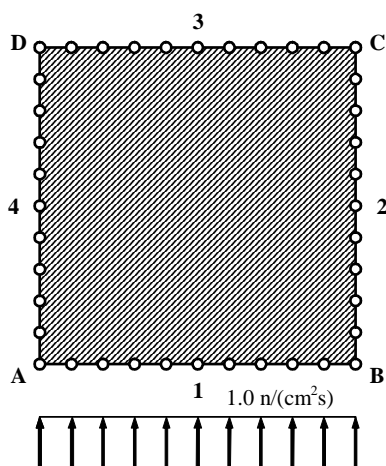


Figura 3a: Celletta omogenea di geometria quadrata.

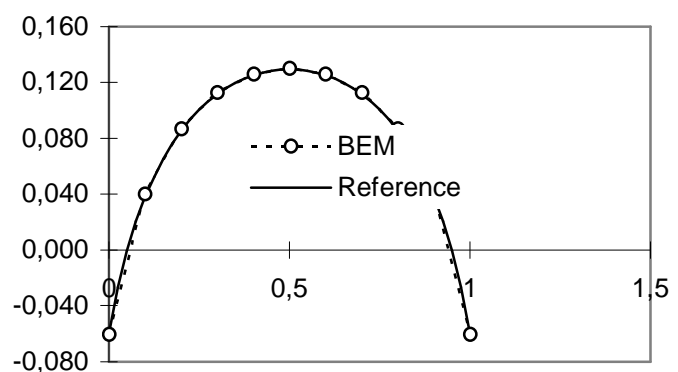


Figura 3b: Semicorrente uscente dalla faccia AB.

Diversamente dai metodi agli elementi finiti, il metodo BEM conduce di per sé ad una analisi dettagliata nei punti di frontiera e non è quindi immune dalle difficoltà inerenti a questo tipo di problemi. Tali difficoltà possono però essere superate per mezzo di un'opportuna gestione del metodo stesso.

Viene ora illustrato il metodo specifico che è stato adottato per valutare correttamente, anche soltanto nell'ambito della teoria della diffusione, la Response Matrix di una assembly a forma di parallelepipedo (nella presente tesi un semplice cubo; la maggior parte dei calcoli prevede esplicitamente, tuttavia, il caso di spezzoni di assembly di altezza arbitraria).

La Response Matrix, come già indicato, coinvolge le semi-correnti entranti ed uscenti alle frontiere dei nodi, quindi è una tecnica boundary e tale è anche il metodo BEM. In particolare, nella forma elaborata presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Nucleare e della Produzione, che esprime le equazioni integrali di frontiera in termini delle semi-correnti entranti ed uscenti, il metodo BEM è una tecnica ideale ed elegante per la determinazione della Response Matrix per una regione omogenea qualunque ed in particolare per uno spezzone di assembly omogeneizzata come quello indicato sopra.

L'origine del metodo BEM può essere fatta risalire al 1902, quando il matematico Fredholm risolve in modo molto generale il fondamentale problema di Dirichlet. Tale problema consiste nella determinazione, in un dominio V delimitato dalla frontiera liscia A , della funzione $u(\mathbf{r})$ che soddisfa le seguenti equazioni:

$$\begin{aligned} \nabla^2 u(\mathbf{r}) &= 0 & \forall \mathbf{r} \in V \\ c.c : u(\mathbf{r}_A) &= \bar{u}(\mathbf{r}_A) & \forall \mathbf{r}_A \in A \end{aligned}$$

dove $\bar{u}(\mathbf{r}_A)$ è una funzione assegnata nota. La condizione al contorno sulla frontiera A coinvolge l'incognita $u(\mathbf{r}_A)$ ed è chiamata condizione al contorno di Dirichlet.

(Si tratta di un classico problema di elettrostatica, identificando $u(\mathbf{r})$ con il potenziale elettrostatico.)

Fredholm ha immaginato una distribuzione superficiale di dipoli disposti su A e caratterizzati da una densità di momento dipolare $\mu(\mathbf{r}_A)$, con \mathbf{r}_A appartenente ad A . Come è noto, tale distribuzione di dipoli genera un potenziale, detto potenziale di doppio strato, che ha laplaciano nullo ovunque, eccetto che nei punti in cui sono collocati i dipoli, ossia eccetto che nei punti appartenenti ad A , nei quali il potenziale presenta una discontinuità di tipo salto. In problemi tridimensionali, il potenziale di doppio strato è espresso dalle seguenti formule:

$$U(\mathbf{r}) = \int_A \mu(\mathbf{r}'_A) \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{1}{R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'_A)} \right) dA(\mathbf{r}'_A) \quad \mathbf{r} \in V, \text{ oppure } \mathbf{r} \in A$$

$$U^+(\mathbf{r}) = -2\pi\mu(\mathbf{r}) + \int_A \mu(\mathbf{r}'_A) \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{1}{R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'_A)} \right) dA(\mathbf{r}'_A)$$

dove \mathbf{r} è inizialmente interno a V e tende ad $\mathbf{r}_A \in A$ muovendosi lungo la direzione normale ad A

Inoltre $R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'_A) = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'_A|$.

Fredholm dunque assume che la funzione incognita $u(\mathbf{r})$ coincida con il potenziale di doppio strato generato dalla distribuzione di dipoli su A e, sfruttando la condizione di salto del potenziale in corrispondenza dei punti della frontiera, perviene ad una equazione integrale di frontiera espressa in termini della densità $\mu(\mathbf{r}_A)$, la cui risoluzione permette di determinare il potenziale elettrostatico in ogni punto interno, ossia l'incognita $u(\mathbf{r})$ in tutto il dominio V .

Quello appena presentato è il cosiddetto metodo indiretto che, benché fisicamente intuitivo, è spesso sostituito dal metodo diretto. Quest'ultimo, diversamente dal metodo indiretto, può essere applicato anche nel caso in cui la frontiera del dominio presenti un numero limitato di punti angolosi o spigoli. Infatti nel caso del metodo indiretto, se sono presenti degli spigoli, come sono

disposti i dipoli in corrispondenza degli spigoli? E sempre negli spigoli come è diretta la normale alla frontiera? Tali domande non riguardano solo il problema matematico, ma rispecchiano la realtà fisica. Con il metodo diretto invece tali questioni non hanno ragione di essere, perché è diversa l'impostazione.

E' stato qui preso in esame, conformemente ad una procedura risolutiva già sviluppata presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Nucleare e della Produzione dell'Università di Pisa nel caso bidimensionale, uno spezzone di assembly omogeneizzata, che abbiamo schematizzato con un cubo (figura 4) e, facendo ricorso al metodo diretto applicato alla teoria della diffusione, si è riformulata in forma integrale l'equazione stazionaria della diffusione ad un gruppo energetico, si è quindi applicata la formula di Green e si è così pervenuti ad una equazione integrale espressa in termini del flusso nei punti interni del cubo ed in termini della corrente nei punti della frontiera del dominio. Da tale equazione è stato poi possibile ricavare la corrispondente equazione integrale di frontiera, che è definita per un qualsiasi punto \mathbf{r}_A della frontiera A del cubo ed è espressa in termini dei valori del flusso e della corrente nei punti di A . Questa equazione integrale può infine essere espressa in termini delle semi-correnti entranti ed uscenti dalle facce del cubo. Considerando un generico punto $\mathbf{r}_A \in A$ essa risulta così formulata:

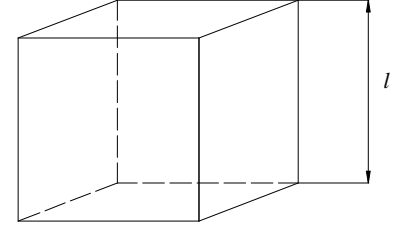


Figura 4: cubo omogeneo di lato l .

$$\frac{1}{2}c(\mathbf{r}_A)J_n^+(\mathbf{r}_A) + \int_A \tilde{J}_n^+(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}')J_n^+(\mathbf{r}')dA(\mathbf{r}') = -\frac{1}{2}c(\mathbf{r}_A)J_n^-(\mathbf{r}_A) + \int_\Gamma \tilde{J}_n^-(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}')J_n^-(\mathbf{r}')dA(\mathbf{r}') + S_g(\mathbf{r}_A) \quad (1)$$

dove:

$$J_n^+(\mathbf{r}_A) = \frac{1}{4}\phi(\mathbf{r}_A) + \frac{1}{2}J_n(\mathbf{r}_A) \quad J_n^+(\mathbf{r}_A): \text{semi-corrente uscente dal cubo in } \mathbf{r}_A$$

$$J_n^-(\mathbf{r}_A) = \frac{1}{4}\phi(\mathbf{r}_A) - \frac{1}{2}J_n(\mathbf{r}_A) \quad J_n^-(\mathbf{r}_A): \text{semi-corrente entrante nel cubo in } \mathbf{r}_A$$

essendo:

$\phi(\mathbf{r}_A)$ il flusso neutronico in \mathbf{r}_A e $J_n(\mathbf{r}_A)$ la componente lungo la normale esterna alla frontiera del vettore corrente in \mathbf{r}_A , pertanto:

$$J_n(\mathbf{r}_A) = -D \frac{\partial \phi}{\partial n}(\mathbf{r}_A).$$

Inoltre:

$$\tilde{J}_n^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A) = \frac{1}{4}\tilde{\phi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A) + \frac{1}{2}\tilde{J}_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A)$$

$$\tilde{J}_n^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A) = \frac{1}{4}\tilde{\phi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A) - \frac{1}{2}\tilde{J}_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A)$$

dove:

$$\tilde{J}_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A) = D \frac{\partial \tilde{\phi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A)}{\partial n(\mathbf{r}_A)};$$

$\tilde{\phi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A)$ è la funzione di Green in un mezzo omogeneo infinito. Ossia $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A)$ è il flusso nel punto \mathbf{r} in un mezzo omogeneo infinito generato da una sorgente unitaria e puntiforme collocata in \mathbf{r}_A . Quindi $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A)$ soddisfa l'equazione della diffusione in un mezzo infinito:

$$\nabla^2 \tilde{\phi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A) - \Sigma_a \tilde{\phi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) = 0 \quad \forall \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$$

essendo δ la delta di Dirac.

Perciò, come noto, $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A)$ è data dalla seguente espressione:

$$\tilde{\phi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A) = \frac{1}{4\pi D} \frac{e^{-\frac{R(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A)}{L}}}{R(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A)}$$

dove $R(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A) = |\mathbf{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A)|$, $\mathbf{R}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_A) = \mathbf{r} - \mathbf{r}_A$

Nell'equazione (1) $S_g(\mathbf{r}_A)$ è il termine di sorgente che tiene conto della eventuale sorgente di volume imposta, $q(\mathbf{r})$. Il termine di sorgente è in genere appunto un integrale di volume. Tuttavia esistono procedure che permettono di trasformare l'integrale di volume della sorgente in un integrale di frontiera. Tali tecniche si basano sui principi che sono anche alla base del metodo diretto e richiedono che $q(\mathbf{r})$ sia una funzione regolare (più esattamente poliarmonica, per esempio polinomiale).

Nella medesima equazione (1):

$c(\mathbf{r}_A)$ è un coefficiente che assume i seguenti valori:

$$c(\mathbf{r}_A) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{se } \mathbf{r}_A \in A \text{ e non è un punto angoloso} \\ \frac{\vartheta}{2\pi} & \text{se } \mathbf{r}_A \in A \text{ ed è un punto angoloso} \end{cases}$$

dove ϑ è l'angolo compreso tra le tangenti destra e sinistra ad A in \mathbf{r} nel caso 2D. In tre dimensioni ϑ è l'angolo solido (visto dall'interno) compreso tra le facce che concorrono nel punto (o nel segmento di contorno singolare).

L'equazione (1), coinvolgendo solo i punti della frontiera del cubo ed essendo appunto espressa molto naturalmente in termini delle semi-correnti entranti ed uscenti dal cubo, mostra come il metodo BEM sia adeguato al formalismo generale della matrice di risposta. Essa affronta inoltre un problema tridimensionale in un modo che, facendo appello a funzioni incognite definite solo sulla frontiera, conduce ad un problema di dimensionalità inferiore, ossia ad un problema bidimensionale.

Dunque non resta che risolvere la (1). A tal fine, si è innanzitutto applicato il metodo di collocazione, che consiste nel suddividere le facce della frontiera in un certo numero di elementi, detti elementi della frontiera. Al centro di ogni elemento è stato posto un nodo e per discretizzare l'equazione (1), si è imposto il suo soddisfacimento nei nodi. Inoltre si sono assunte costanti all'interno di ogni elemento le semicorrenti entranti ed uscenti. In questo modo l'equazione (1) è stata ricondotta ad un sistema di 150 equazioni lineari, che può essere posto in forma matriciale:

$$\mathbf{J}^+ = R\mathbf{J}^- + \mathbf{S} \quad (2)$$

dove $\mathbf{S} = M^{-1}\hat{\mathbf{S}}$ e $R = M^{-1}N$. R è la matrice di risposta o Response Matrix (R-M) della regione omogenea considerata.

La matrice di risposta R consente di determinare la risposta del sistema (ossia il dominio omogeneo) alle sollecitazioni esterne. La risposta del sistema è individuata dalle semi-correnti uscenti dalla regione attraverso la frontiera (\mathbf{J}^+), mentre le sollecitazioni esterne sono rappresentate dalla sorgente esterna e dalle semi-correnti entranti nel dominio omogeneo (rispettivamente \mathbf{S} e \mathbf{J}^-).

La (3) risulta estremamente semplice ed intuitiva, ma la determinazione della Response Matrix R non è in genere agevole. Infatti essa richiede la conoscenza delle matrici M ed N , ossia dei coefficienti M_{ik} ed N_{ik} , che dipendono dalla funzione di trasferimento $\tilde{J}_n^\pm(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k)$ nei nodi della frontiera. Il calcolo di tali coefficienti risulta abbastanza laborioso, se si vogliono sfruttare le simmetrie di cui gode la geometria cubica.

Il metodo di collocazione presenta alcuni problemi, tutti riconducibili alla singolarità della funzione di Green ed alla singolarità ancora più forte della sua derivata rispetto alla normale esterna alla frontiera. Infatti quando i nodi \mathbf{r}_i ed \mathbf{r}_k coincidono, allora $R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k) = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k| = 0$ e quindi la funzione di Green diverge. Pertanto è necessario elaborare “ricette” ad hoc per calcolare gli elementi M_{ii} ed N_{ii} . Inoltre, per aumentare la precisione dei risultati forniti dal metodo di collocazione, si sono aumentati gli elementi su ogni facciai (e di conseguenza dei nodi), definendone $25 \times 25 = 625$ su ogni faccia invece dei 25 considerati nell’esempio che viene presentato nel capitolo 4 della presente tesi. Ebbene, calcolando la funzione di trasferimento $\tilde{J}_n^\pm(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k)$, si sono ottenuti valori non plausibili e tale risultato è dovuto alla singolarità in corrispondenza degli spigoli della funzione di Green e della sua derivata rispetto alla normale esterna alla frontiera. Infatti tale problema si è per esempio manifestato nel calcolo di $\tilde{J}_n^\pm(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k)$ in cui \mathbf{r}_i ed \mathbf{r}_k appartengono a due facce aventi in comune uno spigolo e sono tra loro vicini ($R(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k) = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k| \rightarrow 0$).

Nonostante i problemi a cui si è qui accennato, l’applicazione del metodo di collocazione è stata molto importante, perché ha permesso di ottenere due risultati fondamentali. Innanzitutto il metodo di collocazione applicato alla teoria elaborata, avendo consentito di portare a conclusione tutta la procedura di calcolo e avendo fornito risultati finali corretti, ha dato una dimostrazione della validità della teoria sviluppata e di un suo possibile impiego pratico. Inoltre l’esecuzione completa di tutto il procedimento di calcolo ha permesso di individuare e di testare tutte le caratteristiche della procedura, come per esempio le formule di corrispondenza dei valori di $\tilde{J}_n^\pm(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k)$ e la circolarità dei blocchi delle matrici M ed N . Questi risultati non sono fini a se stessi, ma si sono rivelati molto utili anche per lo sviluppo dell’altra tecnica che è stata qui adottata: la tecnica dei momenti. Infatti per superare le problematiche che caratterizzano il metodo di collocazione, si è adottato il metodo dei momenti che consiste nell’esprimere tutte le grandezze del problema in termini di una base completa di funzioni ortonormali. Dunque si sono rappresentate ogni semi-corrente entrante ed ogni semi-corrente uscente da una qualsiasi faccia mediante uno sviluppo in polinomi di Legendre normalizzati e definiti su ogni faccia. Allo stesso modo si è sviluppata in polinomi di Legendre la funzione di trasferimento $\tilde{J}_n^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Anche qui, come già nel caso del metodo di collocazione, si è sfruttata la simmetria del problema e ci si è quindi ricondotti al calcolo di soli alcuni momenti, mentre gli altri sono stati ricavati mediante formule di corrispondenza, la cui determinazione è stata ancora più complessa rispetto al caso del metodo di collocazione.

In conclusione nel calcolo dei momenti della funzione di trasferimento $\tilde{J}_n^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ si sono ottenuti buoni risultati, con almeno sei cifre decimali esatte, anche in casi in cui il programma Mathematica

non fornisce alcun risultato o impiega tempi proibitivi. Inoltre anche i tempi di calcolo sono ridotti e ciò è stato possibile grazie al ricorso a formule ricorsive appositamente costruite. E' infatti a tali formule che spetta il merito di aver ridotto considerevolmente la gravosità del calcolo stesso. Anzi si stima di ridurre ulteriormente i tempi di calcolo di un fattore dieci, sempre avvalendoci delle formule ricorsive e delle correlazioni tra i vari integrali. Bisogna inoltre osservare che si è fatto ricorso alla risoluzione numerica solo per tre gruppi di integrali monodimensionali.

Infine si è sviluppato in polinomi di Legendre normalizzati la sorgente esterna assegnata.

Si è così ricavato tutto ciò che è necessario per l'implementazione del metodo dei momenti.

Pertanto si è considerata nuovamente l'equazione integrale di contorno (1), in cui si sono introdotti gli sviluppi delle varie grandezze in termini dei polinomi di Legendre normalizzati. Successivamente si è moltiplicata scalarmente l'equazione ottenuta per i polinomi di Legendre normalizzati $P_{n_1}(x_s)$ e $P_{n_2}(y_s)$, dove n_1 ed n_2 sono valori interi positivi e x_s, y_s sono le coordinate dei punti della generica faccia s della frontiera. Sfruttando l'ortonormalità di tali polinomi, ci si è ricondotti ad un sistema lineare costituito da infinite equazioni algebriche.

Non essendo possibile risolvere tutte le infinite equazioni, si è interrotto lo sviluppo in polinomi di Legendre al quarto ordine, espansione che costituisce una eccellente approssimazione delle grandezze reali nel caso di un' assembly di reattore. Uno sviluppo fino al quarto ordine potrebbe sembrare addirittura eccessivo, ma alla base di questa scelta vi è stato il desiderio di verificare se fosse possibile spingersi fino ad un tale ordine senza implicare un eccessivo peso di calcolo numerico e si è constatato che ciò è effettivamente possibile. Inoltre bisogna osservare che in alcuni problemi di benchmark, in cui sono impiegati metodi diversi da quello qui presentato, sono stati considerati sviluppi appunto fino al quarto ordine. Si noti infine che se la semicorrente uscente da ogni faccia del cubo fosse esprimibile mediante due polinomi ciascuno di quarto grado, allora il flusso nei punti interni fornito dalla soluzione dell'equazione integrale di frontiera sarebbe quello esatto, a meno dell'approssimazione di calcolo. Il sistema può essere riscritto in forma matriciale, per cui risulta:

$$\mathbf{J}^+ = R\mathbf{J}^- + \mathbf{J}_q \quad (3)$$

essendo $R = M^{-1}N$ dove M ed N sono due matrici costituite rispettivamente dagli elementi $\tilde{J}_{n,ss',l_1l_2,l_1'l_2}^+$ e $\tilde{J}_{n,ss',l_1l_2,l_1'l_2}^-$; i vettori \mathbf{J}^+ , \mathbf{J}^- e $\mathbf{J}_q = M^{-1}\hat{\mathbf{J}}_q$ sono dati dai momenti di Legendre rispettivamente delle semi-correnti entranti, delle semi-correnti uscenti e del termine di sorgente. Per determinare l'inversa di M , M^{-1} , si può far uso della circolarità di un blocco che costituisce la matrice M . La determinazione della Response Matrix R con il metodo dei momenti purtroppo non è stata qui completata, per mancanza di tempo.

In conclusione la presente tesi può essere considerata come un feasibility study relativo all'assembly o mattone fondamentale, che, seppure ad un solo gruppo energetico, rappresenta il cuore del metodo.