

***Soluzione dell'Equazione Integrodifferenziale del Trasporto
in Geometria Cartesiana 3D con il Metodo delle Ordinate Discrete***

1. Descrizione del Metodo

Il programma è basato sulle relazioni viste a lezione a proposito dei metodi S_N .

In particolare:

- l'equazione del trasporto:

$$\text{div}[\bar{\Omega}\phi(\bar{r}, \bar{\Omega})] + \Sigma_t(\bar{r})\phi(\bar{r}, \bar{\Omega}) - q(\bar{r}, \bar{\Omega}) = 0$$

viene discretizzata spazialmente ed angularmente ottenendo le relazioni:

$$\mu_m \frac{\phi_{i+1/2, jk, m} - \phi_{i-1/2, jk, m}}{\Delta x_i} + \eta_m \frac{\phi_{i, j+1/2, k, m} - \phi_{i, j-1/2, k, m}}{\Delta y_j} + \zeta_m \frac{\phi_{ijk+1/2, m} - \phi_{ijk-1/2, m}}{\Delta z_k} + \Sigma_{t,ijk} \phi_{ijk, m} = q_{ijk, m} \quad (i = 1, \dots, I); (j = 1, \dots, J); (k = 1, \dots, K); (m = 1, \dots, N_m)$$

- la "regola del diamante" viene applicata coerentemente con il segno dei coseni direttori di ogni direzione ammissibile:

$$\begin{cases} \mu_m > 0 & \phi_{i+1/2, jk, m} = 2\phi_{ijk, m} - \phi_{i-1/2, jk, m} \\ \mu_m < 0 & \phi_{i-1/2, jk, m} = 2\phi_{ijk, m} - \phi_{i+1/2, jk, m} \\ \eta_m > 0 & \phi_{i, j+1/2, k, m} = 2\phi_{ijk, m} - \phi_{i, j-1/2, k, m} \\ \eta_m < 0 & \phi_{i, j-1/2, k, m} = 2\phi_{ijk, m} - \phi_{i, j+1/2, k, m} \\ \zeta_m > 0 & \phi_{ij, k+1/2, m} = 2\phi_{ijk, m} - \phi_{ij, k-1/2, m} \\ \zeta_m < 0 & \phi_{ij, k-1/2, m} = 2\phi_{ijk, m} - \phi_{ij, k+1/2, m} \end{cases}$$

ottenendo relazioni del tipo:

- ◆ $\mu_m > 0, \eta_m > 0, \zeta_m > 0$

$$\phi_{ijk, m} = \frac{\frac{2\mu_m}{\Delta x_i} \phi_{i-1/2, jk, m} + \frac{2\eta_m}{\Delta y_j} \phi_{i, j-1/2, k, m} + \frac{2\zeta_m}{\Delta z_k} \phi_{ijk-1/2, m} + q_{ijk, m}}{\frac{2\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{2\eta_m}{\Delta y_j} + \frac{2\zeta_m}{\Delta z_k} + \Sigma_{t,ijk}}$$

- ◆ $\mu_m < 0, \eta_m > 0, \zeta_m < 0$

$$\phi_{ijk,m} = \frac{-\frac{2\mu_m}{\Delta x_i} \phi_{i+1/2,jk,m} + \frac{2\eta_m}{\Delta y_j} \phi_{ij-1/2k,m} - \frac{2\zeta_m}{\Delta z_k} \phi_{ijk+1/2,m} + q_{ijk,m}}{-\frac{2\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{2\eta_m}{\Delta y_j} - \frac{2\zeta_m}{\Delta z_k} + \Sigma_{t,ijk}}$$

- si fa uso della tecnica di "fix-up" dello "step" per far fronte a problemi di flusso di interfaccia negativo; ad esempio se

$$\phi_{i+1/2,jk,m} < 0 \quad \text{con} \quad \mu_m > 0, \eta_m > 0, \zeta_m > 0$$

invece della regola del diamante si usa la relazione

$$\phi_{i+1/2,jk,m} = \phi_{ijk,m}$$

e si ricalcola il flusso angolare medio ottenendo

$$\phi_{ijk,m} = \frac{\frac{\mu_m}{\Delta x_i} \phi_{i-1/2,jk,m} + \frac{2\eta_m}{\Delta y_j} \phi_{ij-1/2k,m} + \frac{2\zeta_m}{\Delta z_k} \phi_{ijk-1/2,m} + q_{ijk,m}}{\frac{\mu_m}{\Delta x_i} + \frac{2\eta_m}{\Delta y_j} + \frac{2\zeta_m}{\Delta z_k} + \Sigma_{t,ijk}} = \phi_{i+1/2,jk,m}$$

- vengono adottate le quadrature a livelli simmetrici LQ_n per la definizione delle direzioni ammissibili e dei relativi pesi (al momento fino all'approssimazione S_8)

	Level	n	μ_n	w_n^h
S_4	1	1	0.3500212	0.3333333
	2	2	0.8688903	
S_6	1	1	0.2666355	0.1761263
	2	2	0.6815076	0.1572071
	3	3	0.9261808	
S_8	1	1	0.2182179	0.1209877
	2	2	0.5773503	0.0907407
	3	3	0.7867958	0.0925926
	4	4	0.9511897	
S_{12}	1	1	0.1672126	0.0707626
	2	2	0.4595476	0.0558811
	3	3	0.6280191	0.0373377
	4	4	0.7600210	0.0502819
	5	5	0.8722706	0.0258513
	6	6	0.9716377	
S_{16}	1	1	0.1389568	0.0489872
	2	2	0.3922893	0.0413296
	3	3	0.5370966	0.0212326
	4	4	0.6504264	0.0256207
	5	5	0.7467506	0.0360486
	6	6	0.8319966	0.0144589
	7	7	0.9092855	0.0344958
	8	8	0.9805009	0.0085179

(da E.E. Lewis and W.F. Miller, Jr. "Computational Methods of Neutron Transport", John Wiley and Sons, 1984)

In particolare:

- le direzioni ammissibili vengono generate nell'ottante con coseni direttori positivi in numero di $N(N+2)/8$, ottenendo quelle negli altri ottanti per rotazione intorno agli assi coordinati;
- noto dalla tabella precedente il valore di μ_1 , gli altri valori dei coseni direttori vengono ottenuti dalle relazioni:

$$\mu_i^2 = \mu_1^2 + (i-1)C \qquad C = \frac{2(1-3\mu_1^2)}{N-2}$$

- il fattore di peso di ciascuna direzione viene assegnato considerando le due tabelle precedenti; in particolare, la seconda specifica il peso per le direzioni contrassegnate da un dato valore di n nella prima tabella
- per minimizzare l'ingombro di memoria, il valore del flusso angolare per ogni direzione non viene memorizzato, assegnando il suo contributo al flusso scalare dopo aver spazzato i tre assi coordinati per una data direzione

- la formula per ottenere il flusso scalare dal flusso angolare è:

$$\phi_{ijk} = \frac{1}{8} \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \phi_{ijk,m}$$

in cui i pesi w_m sono normalizzati ad 1 su ogni ottante

- sulla base di questa formula, la densità di emissione deve essere valutata opportunamente; infatti, moltiplicando per $\Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k w_m / 8$ ambo i membri della relazione

$$\mu_m \frac{\phi_{i+1/2,jk,m} - \phi_{i-1/2,jk,m}}{\Delta x_i} + \eta_m \frac{\phi_{i,j+1/2k,m} - \phi_{i,j-1/2k,m}}{\Delta y_j} + \zeta_m \frac{\phi_{ijk+1/2,m} - \phi_{ijk-1/2,m}}{\Delta z_k} + \sum_{t,ijk} \phi_{ijk,m} = q_{ijk,m}$$

e sommando sull'indice m si ha

$$\begin{aligned} & \frac{1}{8} \left\{ \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \mu_m \phi_{i+1/2,jk,m} - \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \mu_m \phi_{i-1/2,jk,m} \right\} \Delta y_j \Delta z_k \\ & + \frac{1}{8} \left\{ \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \eta_m \phi_{ij+1/2k,m} - \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \eta_m \phi_{ij-1/2k,m} \right\} \Delta x_i \Delta z_k \\ & + \frac{1}{8} \left\{ \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \zeta_m \phi_{ijk+1/2,m} - \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \zeta_m \phi_{ijk-1/2,m} \right\} \Delta x_i \Delta y_j \\ & + \sum_{t,ijk} \frac{1}{8} \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \phi_{ijk,m} \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k = \frac{1}{8} \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m q_{ijk,m} \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \end{aligned}$$

da cui

$$\begin{aligned} & \left\{ \bar{J}_{i+1/2,jk} \cdot \bar{i} - \bar{J}_{i-1/2,jk} \cdot \bar{i} \right\} \Delta y_j \Delta z_k + \left\{ \bar{J}_{ij+1/2k} \cdot \bar{j} - \bar{J}_{ij-1/2k} \cdot \bar{j} \right\} \Delta x_i \Delta z_k \\ & + \left\{ \bar{J}_{ijk+1/2} \cdot \bar{k} - \bar{J}_{ijk-1/2} \cdot \bar{k} \right\} \Delta x_i \Delta y_j + \Sigma_{t,ijk} \phi_{ijk} \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k = q_{ijk} \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \end{aligned}$$

in cui \bar{i} , \bar{j} e \bar{k} rappresentano i versori degli assi coordinati e si è posto

$$\begin{aligned} \bar{J}_{i\pm 1/2,jk} \cdot \bar{i} &= \frac{1}{8} \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \mu_m \phi_{i\pm 1/2,jk,m} \\ \bar{J}_{ij\pm 1/2k} \cdot \bar{j} &= \frac{1}{8} \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \eta_m \phi_{ij\pm 1/2k,m} \\ \bar{J}_{ijk\pm 1/2} \cdot \bar{k} &= \frac{1}{8} \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \zeta_m \phi_{ijk\pm 1/2,m} \\ q_{ijk} &= \frac{1}{8} \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m q_{ijk,m} \end{aligned}$$

Evidentemente, l'equazione ottenuta rappresenta il bilancio neutronico sul volume del nodo.

Per quanto riguarda la densità di emissione, si nota che nel caso di sorgente indipendente e scattering isotropo si ha:

$$q_{ijk,m} = \bar{q}_{ijk} \quad \Rightarrow \quad q_{ijk} = \frac{1}{8} \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m q_{ijk,m} = \bar{q}_{ijk}$$

in cui si è fatto uso della relazione

$$\frac{1}{8} \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m = 1$$

In altre parole, nella definizione della densità di emissione è necessario ricordare che i fattori di pesatura delle direzioni ammissibili sono normalizzati ad 1 anziché ai 4π steradiani.

Nel caso di sorgenti isotrope, si ha:

$$q_{ijk} = \frac{1}{8} \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \left\{ \Sigma_s \phi_{ijk,m} + s_{ijk,m} \right\} = \Sigma_s \frac{1}{8} \sum_{m=1}^{N(N+2)} w_m \phi_{ijk,m} + s_{ijk}$$

e quindi

$$q_{ijk,m} = \Sigma_s \phi_{ijk} + s_{ijk}$$

Infine, poiché la densità di emissione contiene la sorgente di scattering si itera sui valori del flusso partendo da una stima della densità di emissione basata sulla sola sorgente indipendente:

$$q_{ijk,m}^0 = s_{ijk}$$

2. Struttura del file dei dati di ingresso

Un esempio di file dei dati di ingresso è riportato di seguito.

```

Numero strati x      Numero strati y      Numero strati z      Ordine del Metodo SN
      1                1                1                6
Spessore strati x      Numero nodi strati x (ripetere per ogni strato x)
      4.                40
Spessore strati y      Numero nodi strati y (ripetere per ogni strato y)
      4.                40
Spessore strati z      Numero nodi strati z (ripetere per ogni strato z)
      10.               40
Sigma Tot. generale   Sigma Scatt. generale   Sorgente Generale
      0.750000          0.500000              0.
Numero di regioni con proprietà diverse da quelle generali
                                4
Caratteristiche delle regioni:
  x1    x2    y1    y2    z1    z2   SigmaTot.   SigmaScatt.   Sorgente
0.5    1.5    1.5    2.5    2.    8.    0.750000    0.500000     1.
1.5    2.5    0.5    1.5    2.    8.    0.750000    0.500000     1.
2.5    3.5    1.5    2.5    2.    8.    0.750000    0.500000     1.
1.5    2.5    2.5    3.5    2.    8.    0.750000    0.500000     1.
Condizioni al contorno: valori dei flussi sulle sei facce del parallelepipedo
Faccia West  Faccia East  Faccia South  Faccia North  Faccia Bottom  Faccia Top
      0.        0.        0.        0.        0.        0.
Errore sul Flusso
      1.d-05

```

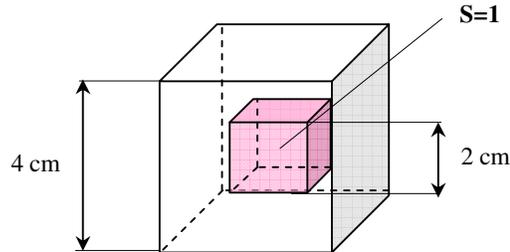
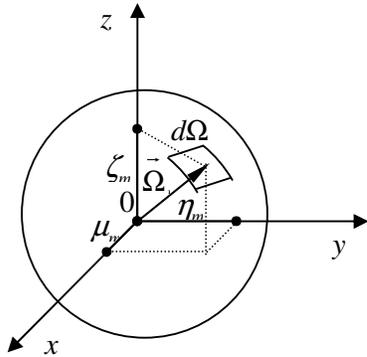
Come si nota, il programma consente di definire passi di discretizzazione diversi in diversi intervalli (strati) lungo i tre assi.

Vengono definite proprietà nucleari generali per il materiale del dominio di integrazione, ma in regioni parallelepipedo è possibile specificare valori diversi sia delle sezioni d'urto che della sorgente. In questo modo è possibile simulare una vasta gamma di distribuzioni di sorgenti e proprietà.

Come condizioni al contorno, è possibile assegnare i flussi entranti (isotropi) su ciascuna delle sei facce che delimitano il dominio di integrazione. Ponendo nulli tali flussi, si ha ovviamente la condizione di corpo isolato. Assegnando tali flussi a valore negativo si attiva l'imposizione di condizioni di riflessione pura (newtoniana).

3. Prime Applicazioni

Problema del Cubo Isolato di Materiale Assorbente con Sorgente in una Regione Interna di Forma Cubica



$\Sigma_t = 3/4$ $\Sigma_s = 2/3\Sigma_t$

- File dei dati di ingresso

```

Numero strati x      Numero strati y      Numero strati z      Ordine del Metodo SN
      1                1                1                2

Spessore strati x      Numero nodi strati x
      4.                40

Spessore strati y      Numero nodi strati y
      4.                40

Spessore strati z      Numero nodi strati z
      4.                40

Sigma Tot. generale    Sigma Scatt. generale    Sorgente Generale
      0.750000          0.500000                0.

Numero di regioni con proprietà diverse da quelle generali
      1

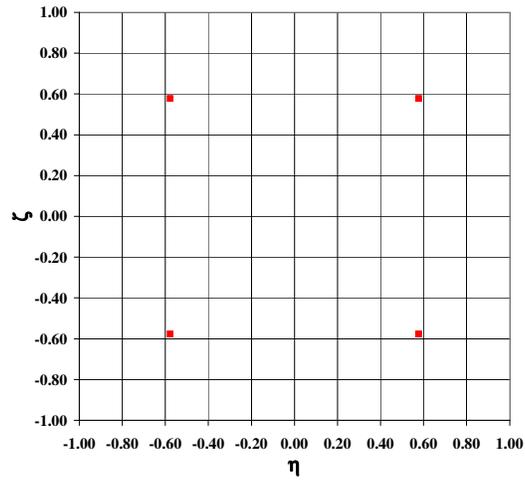
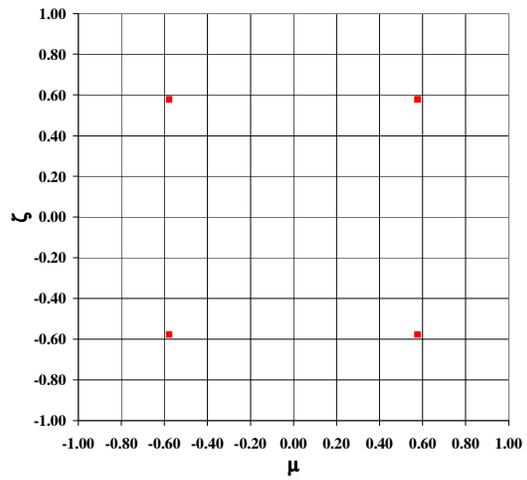
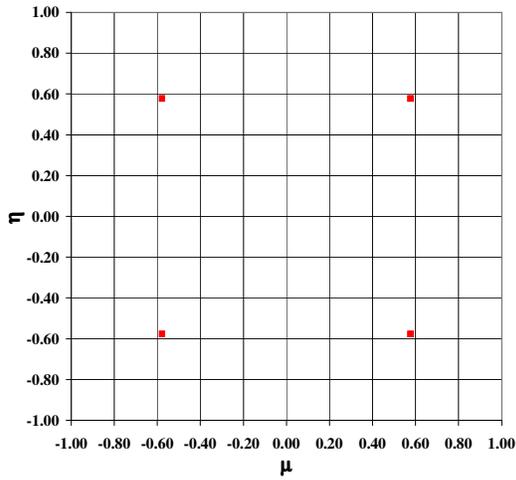
Caratteristiche delle regioni:
x1      x2      y1      y2      z1      z2      SigmaTot.      SigmaScatt.      Sorgente
1.      3.      1.      3.      1.      3.      0.750000      0.500000      1.

Condizioni al contorno: valori dei flussi sulle sei facce del parallelepipedo
Faccia West  Faccia East  Faccia South  Faccia North  Faccia Bottom  Faccia Top
      0.        0.        0.        0.        0.        0.

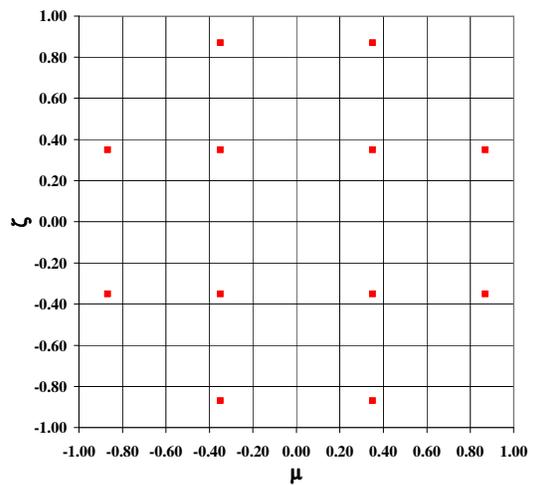
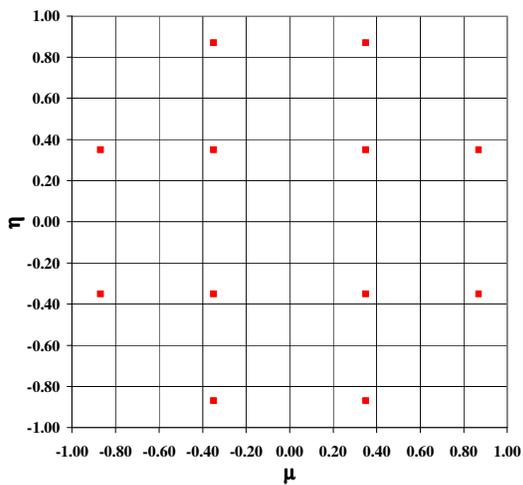
Errore sul Flusso
      1.d-05
    
```

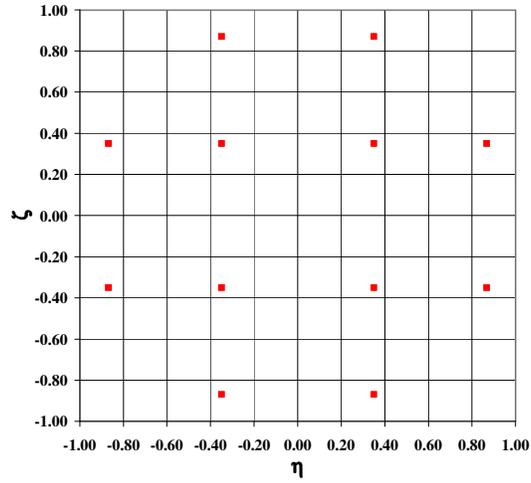
- Distribuzione delle ordinate discrete nelle diverse approssimazioni

Approssimazione S_2

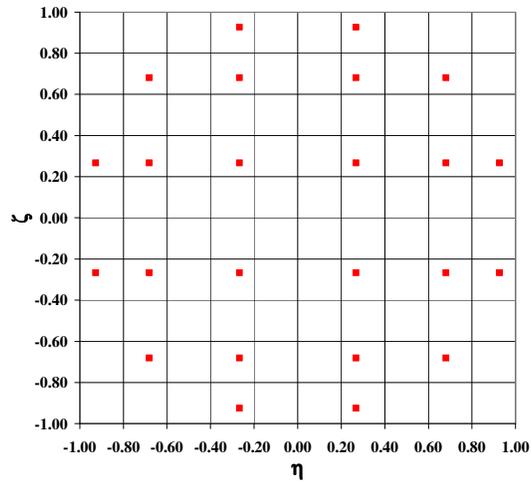
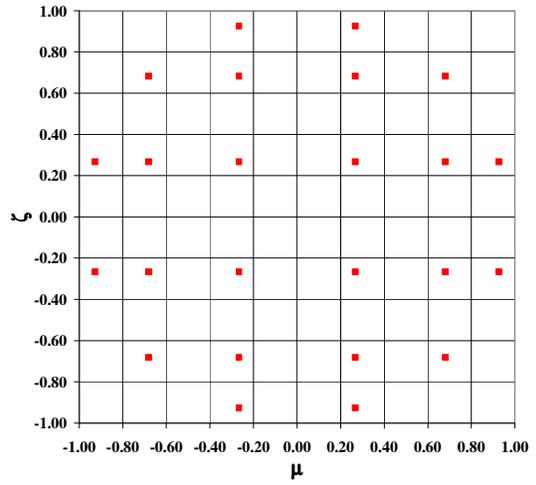
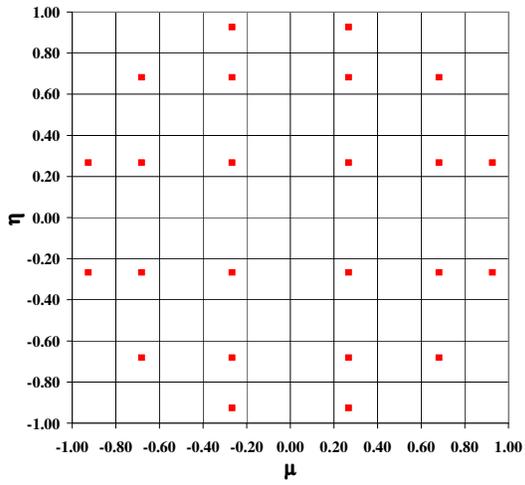


Approssimazione S_4

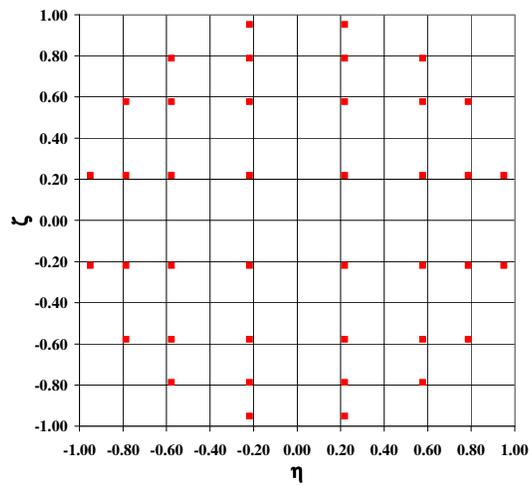
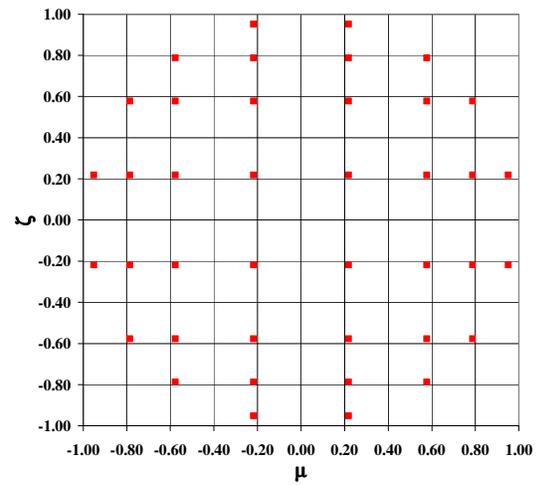
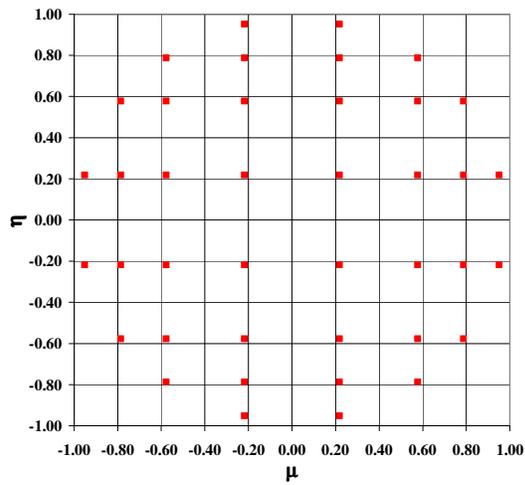




Approssimazione S_6



Approssimazione S_8

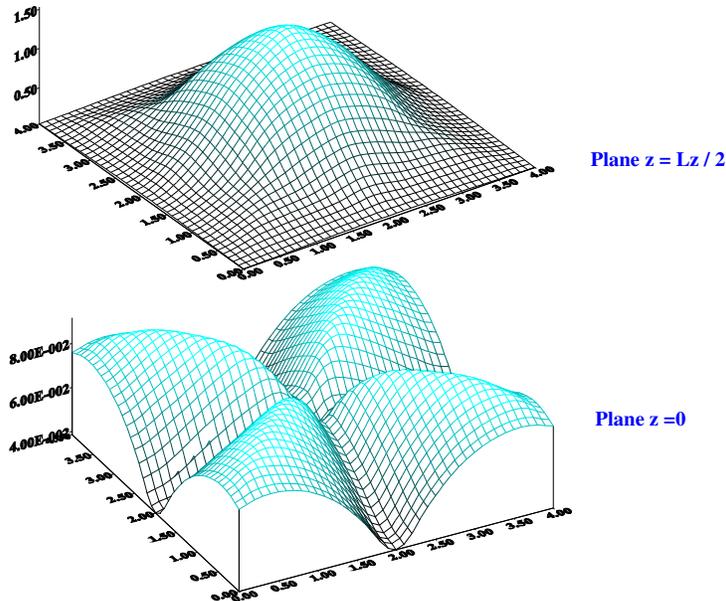


- Si nota che:
 - al crescere dell'ordine dell'approssimazione la sfera di raggio unitario si popola di direzioni ammissibili in misura sempre maggiore;
 - le direzioni ammissibili sono le stesse per rotazioni di $\pm 90^\circ$ rispetto ad ogni asse coordinato

Risultati:

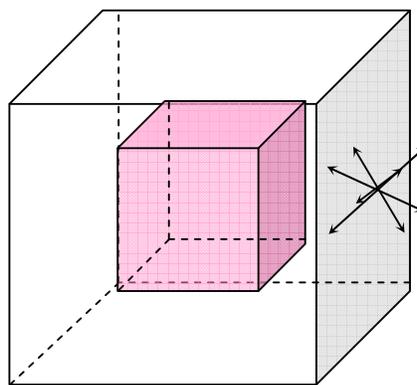
Cubic Source Problem

Grid: 40x40x40 with S2 Approximation



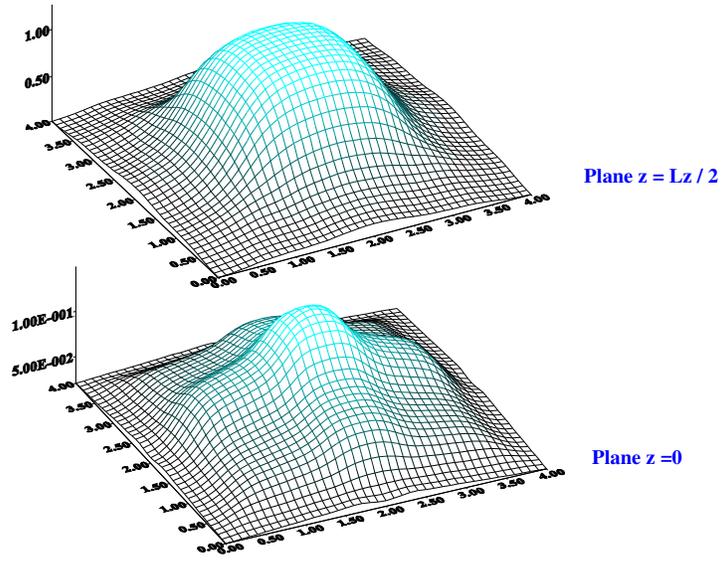
La spiegazione del comportamento osservato sulle facce laterali risulta evidente considerando che le direzioni ammissibili sono in numero troppo esiguo per fornire una rappresentazione sufficientemente dettagliata del flusso neutronico.

Ad esempio, nella posizione considerata in figura le 8 direzioni non intercettano la sorgente dando luogo ad un minimo nel flusso scalare.

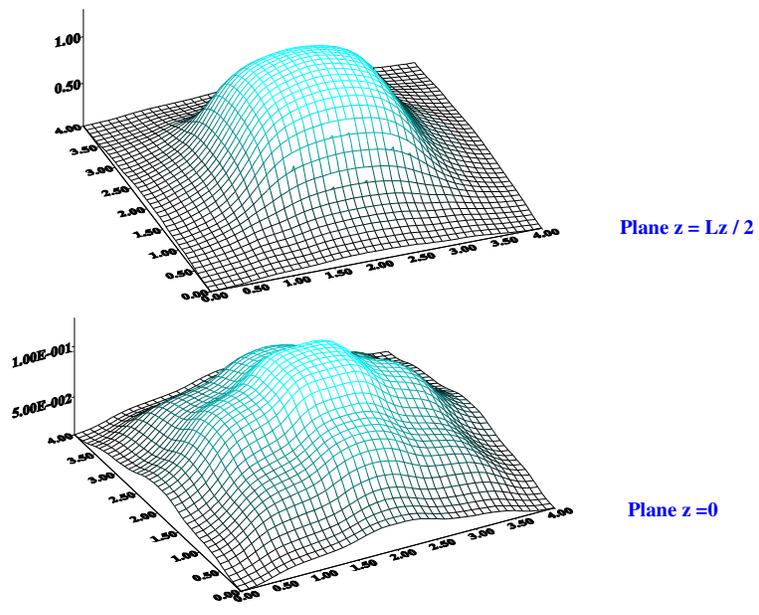


Ciò accade con perfetta simmetria per ogni superficie laterale e quindi, in particolare per quella corrispondente a $z = 0$, sulla quale si osserva un andamento del tutto anomalo del flusso scalare.

Cubic Source Problem
Grid: 40x40x40 with S4 Approximation

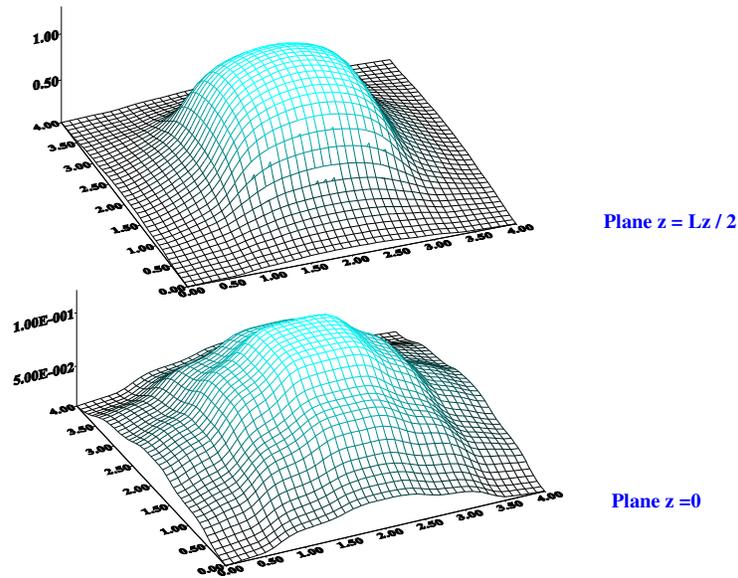


Cubic Source Problem
Grid: 40x40x40 with S6 Approximation



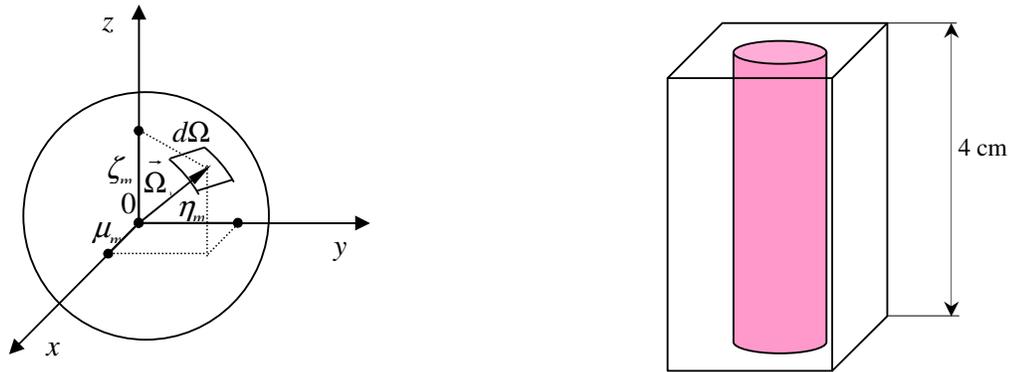
Cubic Source Problem

Grid: 40x40x40 with S8 Approximation



- Il "ray effect" è particolarmente chiaro nel caso dell'approssimazione S2 che fornisce un andamento del tutto irrealistico del flusso scalare sul piano $z = 0$, da porre in relazione con la distribuzione delle sole 8 direzioni ammissibili
- Con l'aumentare del numero di direzioni ammissibili il problema viene mitigato, ma continuano ad essere presenti andamenti ondulatori nella distribuzione del flusso scalare da porre in relazione con l'effetto raggio

Cella quadrata con barretta cilindrica



Il calcolo è stato eseguito in approssimazione S8 facendo uso del seguente file di ingresso, in cui il valore negativo di y_2 indica il valore del raggio della barra avente l'asse passante per il punto (x_1, y_1) .

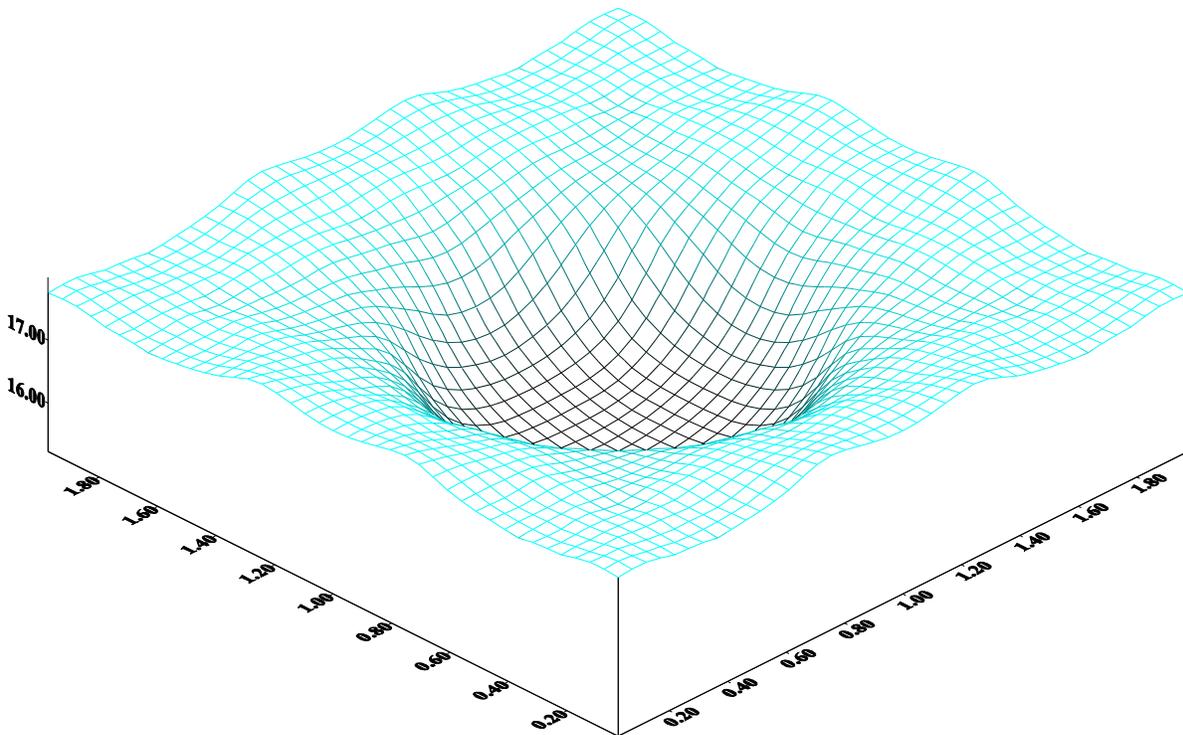
```

Numero strati x      Numero strati y      Numero strati z      Ordine del Metodo SN
      1                1                1                8
Spessore strati x    Numero nodi strati x
      2.                40
Spessore strati y    Numero nodi strati y
      2.                40
Spessore strati z    Numero nodi strati z
      4.                40
Sigma Tot. generale  Sigma Scatt. generale  Sorgente Generale
      0.50000          0.500000          1.
Numero di regioni con proprietà diverse da quelle generali
      1
Caratteristiche delle regioni:
  x1   x2   y1   y2   z1   z2  SigmaTot.  SigmaScatt.  Sorgente
  1.  -0.5  1.   0.   0.   4.  0.750000  0.500000   0.
Condizioni al contorno: valori dei flussi sulle sei facce del parallelepipedo
Faccia West  Faccia East  Faccia South  Faccia North  Faccia Bottom  Faccia Top
      -1.      -1.      -1.      -1.      -1.      -1.
Errore sul Flusso
1.d-05
    
```

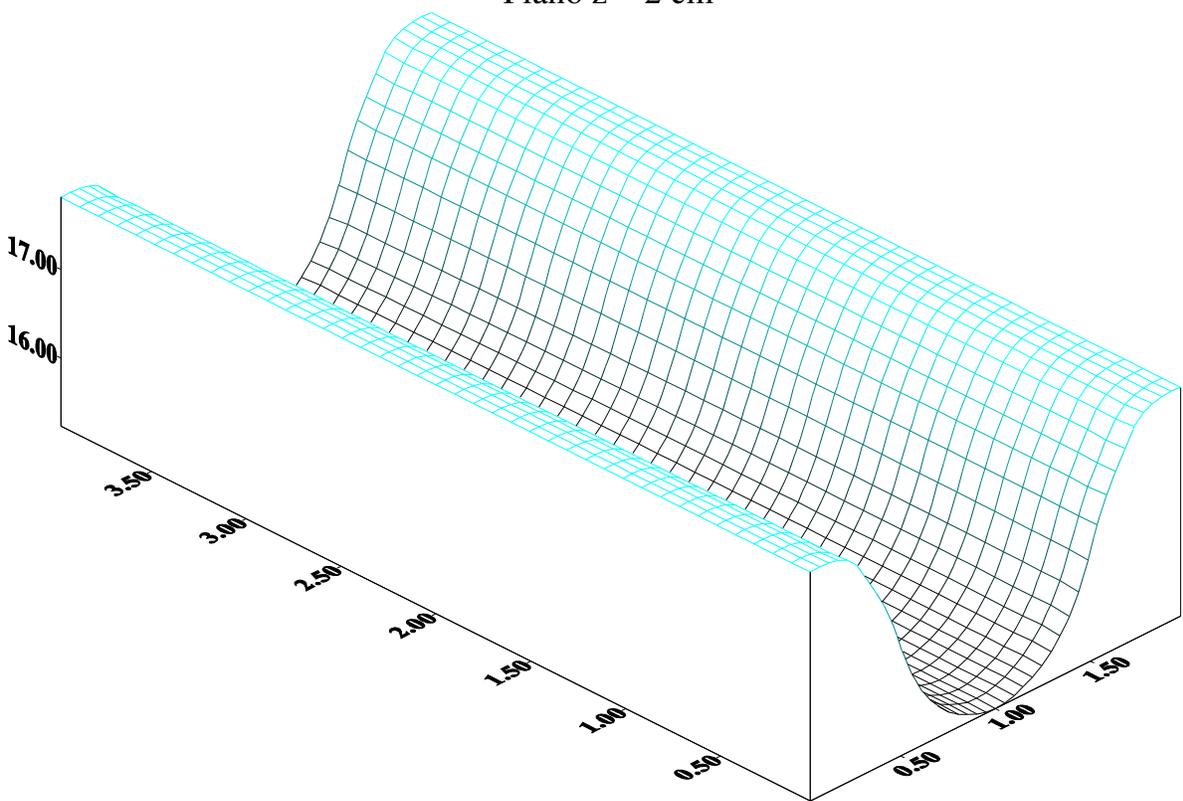
I valori delle sezioni d'urto sono puramente parametrici.

I risultati mostrano un classico andamento spaziale del flusso, comprendente una marcata depressione nella barretta di combustibile sul piano $z = L_z/2$. Sono visibili oscillazioni del flusso nel moderatore da attribuirsi ai "ray effects".

E' interessante notare come lungo un piano assiale il flusso mostri di essere perfettamente indipendente dalla coordinata z , provando l'efficacia della scelta delle condizioni di riflessione sulle due interfacce a z costante nel trasformare il problema da 3D a 2D.

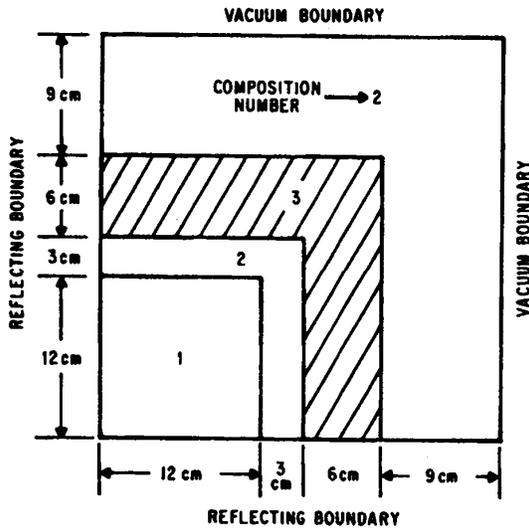


Piano $z = 2$ cm



Piano $y = 0$

Benchmark Problem acqua-ferro
(v. H. Khalil, *Nucl. Sci. Eng.*, 90, pp.263-280, 1985)



COMPOSITION	Σ_1 (cm^{-1})	C	SOURCE STRENGTH ($\text{cm}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$)
1 (WATER)	3.33	0.994	1.0
2 (WATER)	3.33	0.994	0.0
3 (IRON)	1.33	0.831	0.0

Fig. 2. Geometry and material properties for the iron-water benchmark problem.

TABLE IV

Results of the Iron-Water Benchmark Problem*

Number of X-Y mesh cells, $I \times J$	6 x 6	10 x 10	20 x 20
Maximum τ_u	20.0	10.0	5.0
Minimum τ_u	4.0	4.0	2.0
Number of synthetic iterations	4	4	4
Computing time for diffusion iterations (s)	0.18	0.39	1.73
Computing time for transport sweeps (s)	0.06	0.14	0.51
Total solution time (s)	0.24	0.53	2.24
Average flux by composition ^a ($\text{cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$)			
1	4.0060+1 ^b	4.0652+1	4.0900+1
2	1.5896+0	1.5259+0	1.4164+0
3	2.3885-1	2.1782-1	2.2744-1

*Directional approximation = S_4 .

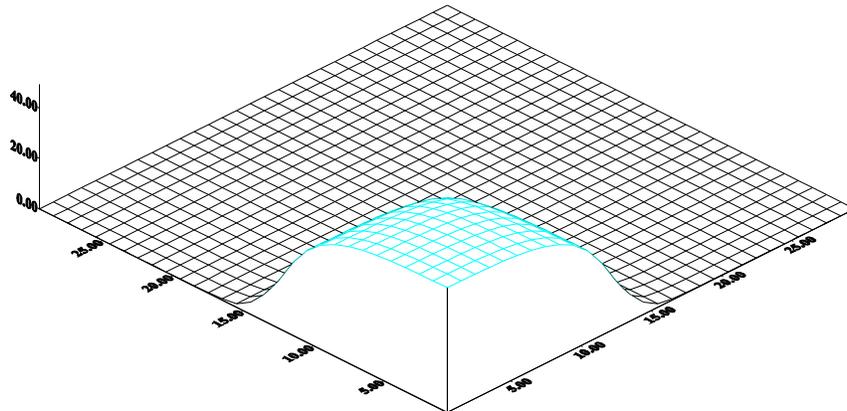
^aSee Fig. 2.

^bRead as 4.0060×10^1 .

Il problema viene simulato in versione 3D con condizioni di riflessione sulle facce ortogonali all'asse z. Il file dei dati di ingresso è il seguente:

```

Numero strati x          Numero strati y          Numero strati z          Ordine del Metodo SN
      1                      1                      1                          8
Spessore strati x        Numero nodi strati x
      30.                      30
Spessore strati y        Numero nodi strati y
      30.                      30
Spessore strati z        Numero nodi strati z
      10.                      10
Sigma Tot. generale     Sigma Scatt. generale     Sorgente Generale
      3.33                      3.31                      0.
Numero di regioni con proprietà diverse da quelle generali
      3
Caratteristiche delle regioni:
x1      x2      y1      y2      z1      z2      SigmaTot.      SigmaScatt.      Sorgente
0.      12.     0.      12.     0.      10.     3.33           3.31             1.
15.     21.     0.      21.     0.      10.     1.33           1.105            0.
0.      21.     15.     21.     0.      10.     1.33           1.105            0.
Condizioni al contorno: valori dei flussi sulle sei facce del parallelepipedo
Faccia West  Faccia East  Faccia South  Faccia North  Faccia Bottom  Faccia Top
      -40.           0.           -40.           0.           -40.           -40.
Errore sul Flusso
1.d-05
    
```



Si può verificare che il valore medio del flusso nella regione 1 è $4.09e01$, in accordo con i dati della tabella.

4. Attività proposte

- Esaminare il programma FORTRAN cercando di individuare le seguenti fasi del calcolo:
 - assegnazione delle direzioni ammissibili e dei relativi pesi;
 - soluzione dell'equazione del trasporto in accordo con il segno dei coseni direttori;
 - aggiornamento della densità di emissione.

- Eseguire nuovi casi di calcolo:

a) Benchmark Problem IAEA EIR-2 (v. H. Khalil, *Nucl. Sci. Eng.*, 90, pp.263-280, 1985)

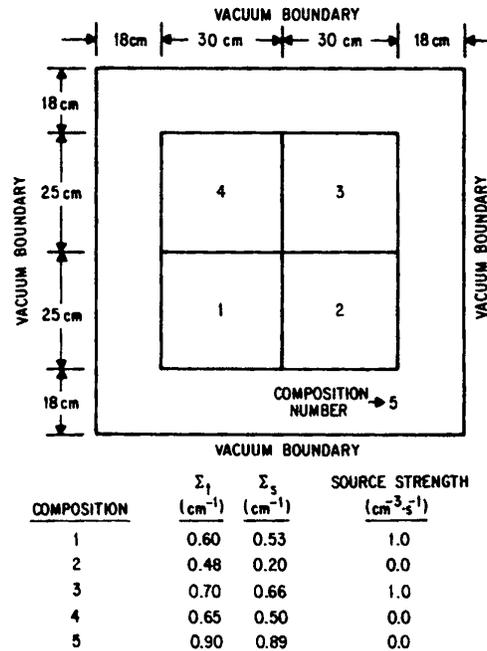


Fig. 1. Geometry and material properties for the IAEA EIR-2 benchmark problem.

TABLE III
Comparison of SYNAPSE and TWODANT Results for the IAEA EIR-2 Problem*

	SYNAPSE	TWODANT	TWODANT (Reference)
Number of X - Y mesh cells, $I \times J$	36×30	54×46	144×120
Number of synthetic iterations	5	10	6
Solution time ^a (s)	13	~31	~127
Average flux by composition ^b ($\text{cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$)			
1	$1.1956+1^c$	$1.1958+1$	$1.1960+1$
2	$5.4050-1$	$5.4038-1$	$5.3968-1$
3	$1.9193+1$	$1.9200+1$	$1.9202+1$
4	$8.3562-1$	$8.3358-1$	$8.3364-1$
5	$1.5285+0$	$1.5291+0$	$1.5263+0$

*Directional approximation = S_g .

^aSolution times do not include the "overhead" associated with input processing and output editing.

^bSee Fig. 1.

^cRead as 1.1956×10^1 .

- b) Parallelepipedo con flusso entrante imposto su una o più facce laterali
- c) Sorgenti di diversa intensità in regioni diverse del dominio parallelepipedo
- d) Analisi parametriche dei casi già calcolati, variando l'intensità delle sorgenti e le proprietà dei materiali
- e) Confronto tra i risultati ottenibili con le diverse approssimazioni per la discretizzazione angolare