



طراحی، توسعه و پیاده‌سازی کد محاسبات سلولی HERPAT

امید، صفرزاده؛ امیر سعید، شیرانی*؛ عبدالحمید، مینوچهر

دانشگاه شهیدبهشتی، دانشکده مهندسی هسته‌ای، گروه راکتور

چکیده

کدهای محاسبات سلولی نقش بسیار مهمی در طراحی و بررسی نوترونی قلب راکتور دارند. این کدها از پیچیده‌ترین ابزارهای محاسباتی هستند، که از مدل‌های زیادی برای تولید سطح مقاطع همگن و چگال استفاده می‌کنند. در این مقاله، کد محاسبات سلولی HERPAT ارائه گردیده است. این کد مبتنی بر روش احتمال برخورد و ماتریس پاسخ غیرهمگن است. محاسبات رزونانسی در این کد با استفاده از جدول احتمال فیزیکی صورت می‌پذیرد. این کد همچنین قابلیت در نظر گرفتن اثرات تداخل رزونانس را دارد. سطح مقاطع میکروسکوپی از کتابخانه خوانده و درون‌یابی‌های لازم انجام می‌شود.

کلید واژه: محاسبات سلولی، احتمال برخورد، جدول احتمال، تداخل رزونانسی

۱- مقدمه

بررسی نوترونی راکتورهای آب سبک شامل دو گام است. گام اول، محاسبات سلولی برای تولید جدول ثوابت گروهی مجتمع سوخت انجام می‌شود. گام دوم در بردارنده محاسبات قلب است که برای بدست آوردن ویژگی‌های نوترونی قلب صورت می‌پذیرد. عملکرد این محاسبات به دقت کدهای محاسبات سلولی و قلب راکتور بستگی دارد. از طرف دیگر، طراحی سوخت به صورت پیوسته در حال تکامل است تا هزینه چرخه سوخت کاهش یافته و بهره‌وری افزایش یابد. چنین طراحی با بهبود اقتصاد نوترونی، رفتار مکانیکی و ترموهیدرولیکی، قابل پیاده‌سازی است. این امر منجر به مسائل چالش برانگیز در زمینه کدهای هسته‌ای می‌شود. کدهای محاسبات سلولی نقش بسیار مهمی در طراحی و بررسی نوترونی قلب راکتور دارند. این کدها از پیچیده‌ترین ابزارهای محاسباتی هستند که از مدل‌های زیادی برای تولید سطح مقاطع همگن و چگال استفاده می‌کند. کدهای محاسبات سلولی دارای پیشینه قدیمی در دنیا است. توسعه این کدها برای بررسی و طراحی راکتور در میان دهه ۶۰ میلادی با معرفی کد WIMS و THERMOS آغاز گردید [۱-۲]. هدف از ارائه کد فوق، تولید ثوابت گروهی در قالب یک سیستم یکپارچه و نظام مند بود. در اوایل سال ۱۹۷۰ میلادی نسخه جدیدی از این کد برای بررسی و طراحی راکتورهای آب سبک به نام WIMS-D۲ ارائه گردید. در سال ۱۹۷۰



تا اوایل ۱۹۸۰ میلادی کدهای مختلفی برای محاسبات سلولی از قبیل CASMO و PHOENIX توسط کشورهای مختلف ارائه گردید [۳-۴]. این کدها همراه با کد TGBLA توسعه یافته در شرکت‌های جنرال الکتریک [۵] و DIT توسعه یافته در شرکت CE^۱ [۶]، یک ابزار قوی، برای محاسبات سلولی راکتورهای آب سبک در دهه ۸۰ میلادی فراهم آوردند. در دهه ۹۰ میلادی تغییرات شدیدی در ساختار برنامه‌های کدها برای بهبود دقت انجام شد که منجر به ارائه کد CASMO-۴ و توسعه کد HELIOS شد [۷-۸].

در این مقاله کد محاسبات سلولی HERPAT ارائه گردیده است. محاسبات ترابرد این کد مبتنی بر روش احتمال برخورد و ماتریس پاسخ غیرهمگن است. محاسبات رزونانسی در این کد با استفاده از جدول احتمال فیزیکی صورت می‌پذیرد. این کد همچنین قابلیت در نظر گرفتن اثرات تداخل رزونانس را دارد. سطح مقاطع میکروسکوپی از کتابخانه خوانده و درونیابی‌های لازم انجام می‌شود.

۲- کتابخانه

کد HERPAT دارای کتابخانه چند گروهی سطح مقاطع میکروسکوپی است. این کتابخانه در ۶۹ گروه و از بازه 10^{-5} eV تا ۱۰ MeV است. این کتابخانه دارای قالب WIMS-D۵ است و توسط کتابخانه داده‌های هسته‌ای ENDF۶،۸ تولید شده است. این کتابخانه شامل سطح مقاطع ایزوتوپ‌های مختلف از قبیل اکتینیدها و پاره‌های شکافت است. این داده‌ها با وابستگی دمایی و سطح مقطع زمینه ارائه شده است. کتابخانه چندگروهی HERPAT می‌تواند توسط NJOY تولید گردد [۹]. در این مقاله از روش سیگیو برای درونیابی سطح مقطع زمینه استفاده شده است [۱۰].

۳- ماتریس پاسخ-احتمال برخورد

معادله ترابرد از موازنه نوترون در یک المان حجمی بر اثر پدیده‌های گوناگون از قبیل تولید، جذب و فرار انتگرالی حاصل می‌شود. معادله انتگرالی ترابرد به صورت زیر است [۱۱]:

$$\phi(r, E, \Omega) = \phi_-(r_s, E, \Omega)e^{-\tau(r, r_s, E)} + \int_0^{R_s} dR' Q(r', E, \Omega)e^{-\tau(r, r', E)} \quad (1)$$

^۱ Combustion Engineering

که بردار مکان، Ω زاویه فضایی حرکت نوترون، E انرژی نوترون، $\phi(r, E, \Omega)$ شار وابسته به مکان، زاویه و انرژی، $\phi_-(r', E, \Omega)$ شار زاویه‌ای نوترون‌های ورودی به سیستم و $Q(r', E, \Omega)$ چشمه نوترون‌های تولیدی $\tau(r, r', E)$ مسیر نوری^۲ بین r و r' است که از رابطه زیر حاصل می‌شود:

$$\tau(r, r', E) = \int_0^{R'} dR'' \Sigma_t(r - R'' \Omega, E) \quad (۲)$$

که Σ_t سطح مقطع کل است. با استفاده از بسط هارمونیک‌های کروی شار زاویه‌ای مرزی ورودی، تقریب شار تخت و همچنین گسسته سازی هندسه، به روابط زیر می‌رسیم:

$$\mathbf{J}_{+l'm'} = \sum_{l=0}^N \sum_{m=-l}^l \Phi_{-lm} \mathbf{P}_{l'm',lm} + \mathbf{Q} \mathbf{P}_{l'm'} \quad (۳)$$

$$\Phi = \sum_{l=0}^N \sum_{m=-l}^l \Phi_{-lm} \mathbf{Y}_{lm} + \mathbf{Q} \mathbf{X} \quad (۴)$$

که l و m اندیس‌های هارمونیک‌های کروی، \mathbf{Q} بردار چشمه، Φ_{-lm} شار مرزی ورودی، $\mathbf{J}_{+l'm'}$ جریان‌های خروجی، Φ بردار شار، $\mathbf{P}_{l'm',lm}$ ماتریس پاسخ انتقال، $\mathbf{P}_{l'm'}$ ماتریس پاسخ فرار، \mathbf{X} ماتریس پاسخ برخورد، \mathbf{Y}_{lm} ماتریس پاسخ است. المان‌های این ماتریس‌ها به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$X_{i,j} = M^{-1} p_{i,j} \quad (۵)$$

$$Y_{i,slm} = M^{-1} p_{i,slm} \quad (۶)$$

$$M_{ij'} \equiv \Sigma_i \delta_{ij'} - \Sigma_{is} P_{j',i} \quad (۷)$$

$$P_{il'm',slm} = p_{il'm',slm} + \sum_{j=1}^{N_b} \Sigma_{js} Y_{j,slm} P_{il'm',j} \quad (۸)$$

$$P_{il'm',j} = p_{il'm',j} + \sum_{j'=1}^{N_b} \Sigma_{js} X_{j,j'} P_{il'm',j'} \quad (۹)$$

که $p_{i,j}$ احتمال برخورد نوترون تولیدی از ناحیه j به ناحیه i ، $p_{i,slm}$ احتمال فرود از سطح s به ناحیه i ، Σ_i سطح مقطع کل در ناحیه i ، Σ_{si} سطح مقطع پراکندگی در ناحیه i ، $\delta_{ij'}$ تابع دیراک، $p_{il'm',slm}$ احتمال انتقال و $p_{il'm',j}$ احتمال فرار است. احتمال‌ها با استفاده از روش کارلوئیک و ردیابی نوترون ارزیابی می‌شوند [۱۲]. با محاسبه ماتریس‌های پاسخ و تکرار درونی و بیرونی شار نوترونی محاسبه می‌شود.

۴- جدول احتمال

^۲ Optical distance



یکی از روش خودحفاظی روش زیرگروه است که مبتنی بر نمایش سطح مقطع وابسته به انرژی به صورت چگالی احتمال است [۱۳]. گسسته‌سازی دقیق این چگالی احتمال منجر به نقاط انتگرال‌گیری می‌شود که جدول احتمال نامیده می‌شود. با استفاده از این روش می‌توان هندسه‌های پیچیده را به صورت دقیق پوشش داد. در این روش، انتگرال ریمن^۳ برحسب لتارجی با انتگرال لیبسجی^۴ جایگزین می‌شود:

$$\frac{1}{\Delta u} \int_g^{u_g} du f(\sigma(u)) = \int_0^{\max(\sigma)} d\sigma p(\sigma) f(\sigma) \quad (10)$$

چگالی احتمال $p(\sigma)$ توسط یک سری از توابع دیراک سطح مقطع میکروسکوپی و وزن‌های زیر گروه (ω_k) تقریب زده می‌شود:

$$p(\sigma) = \sum_{k=1}^K \delta(\sigma - \sigma_k) \omega_k \quad (11)$$

در این روش، رزونانس به چندین زیرگروه در یک گروه انرژی تقسیم می‌شود. مقادیر ω_k و σ_k متناظر در گروه انرژی g ، به عنوان جداول احتمال شناخته می‌شود. بنابراین، سطح مقطع موثر جذب به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\tilde{\sigma}_a = \frac{\sum_{k=1}^K \omega_k \phi_k \sigma_k}{\sum_{k=1}^K \omega_k \phi_k} \quad (12)$$

این رابطه برای مقادیر مختلف پارامتر خودحفاظی نوشته می‌شود. بنابراین، یک دستگاه معادلات خطی تشکیل می‌شود که با استفاده از روش CGNR حل می‌گردد. بنابراین داریم:

$$\sum_{k=1}^K \omega_k \sigma_k \left[\frac{1}{\sigma_k} + \phi_{k,n} \left(\frac{1}{\sigma_{a,n}} - \frac{1}{\sigma_k} \right) \right] = 1 \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (13)$$

که بایستی $N > K$ باشد. با محاسبه وزن‌ها، بایستی شار زیر گروه‌ها محاسبه و سطح مقاطع موثر بدست آید. یک ایزوتوپ رزونانسی به مسئله غیر همگن ارائه و دیگر ایزوتوپ‌های غیر رزونانسی به صورت ثابت فرض می‌گردد. پارامتر رزونانس، برای بهبود نمایش شار در انرژی‌های رزونانس استفاده شده است [۱۴]. این پارامتر در رزونانس‌های باریک ۱ و در رزونانس‌های پهن ۰ است.

^۳ Riemann^۴ Lebesgue



۵- نتایج

آزمون معروف رولانس بررسی شده است. این آزمون یک سلول سوخت با مواد و دمای مختلف است [۱۵]. این آزمون یک سلول سوخت مربعی با گام شبکه ۱/۲ سانتی متر و شعاع سوخت ۰/۴ سانتی متر و شعاع خارجی غلاف ۰/۴۵ سانتی متر است. در این آزمون تغییرات دما و مواد لحاظ گردیده است. چگالی اتمی و دمای مواد برای آزمون در سه حالت در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱: ترکیب آزمون UOX

Mixture	Isotope	Case ۱		Case ۲, and ۳	
		Atomic density ($10^{24}/\text{cm}^3$)	Temperature (K)	Atomic density ($10^{24}/\text{cm}^3$)	Temperature (K)
Fuel	U-۲۳۵	$7,0803E-04$		$7,0803E-04$	
	U-۲۳۸	$2,2604E-02$	۲۹۳	$2,2604E-02$	۲۹۳, ۹۰۰
	O-۱۶	$4,6624E-02$		$4,6624E-02$	
Clad	Zr-nat	$4,3241E-02$	۲۹۳	$4,3241E-02$	۲۹۳, ۶۰۰
Moderator	H ₂ O	$3,3494E-02$	۲۹۳	$2,3446E-02$	۲۹۳, ۵۵۰

مقادیر مرجع ضریب تکثیر بی نهایت توسط MCNP محاسبه شده است. نتایج حاصله از HERPAT در جدول ۲ به تصویر در آمده است. همچنین، از DRAGON^۴ و WIMS-D^۵ برای مقایسه ضریب تکثیر بی نهایت استفاده شده است.

جدول ۲: نتایج آزمون UOX

Case	MCNP K-inf	Relative error (mk)			
		HERPAT	DRAGON ^۴ :SHI	WIMS-D ^۵	DRAGON ^۴ :USS
۱	$1,38994 \pm 0,0006$	۰,۲۰	۴,۹۹	۶,۹۹	۵۵,۳۸
۲	$1,33827 \pm 0,0006$	۱,۱۸	۵,۳۶	۹,۰۸	۶۳,۲۸
۳	$1,30678 \pm 0,0006$	۰,۴۵	۳,۴۳	۷,۲۹	۸۲,۳۳

۶- بحث و نتیجه گیری

کدهای محاسبات سلولی نقش بسیار مهمی در طراحی، بررسی نوترونی و بهبود اقتصاد نوترونی قلب راکتور دارند. در این مقاله، کد محاسبات سلولی HERPAT ارائه گردیده است. محاسبات ترابرد این کد مبتنی بر روش احتمال برخورد و ماتریس پاسخ غیرهمگن و محاسبات رزونانسی مبتنی بر جدول احتمال فیزیکی است. این



کد در دوبعد و هندسه X-Y پیاده‌سازی و قابلیت مدل‌سازی دقیق مجتمع سوخت را دارد. از دیگر ویژگی این کد در نظر گرفتن اثرات تداخل رزونانس و خواندن داده‌های سطح مقاطع میکروسکوپی از کتابخانه و انجام درون‌یابی‌های لازم است.

۷- مراجع

- [۱] Honeck, H.C., A Thermalization Transport Theory Code for Reactor Lattice Calculations, BNL-۵۸۲۶, ۱۹۶۱.
- [۲] ASKEW, J.R., FAYERS, F.J., KEMSHELL, P.B., A General Description of the Code WIMS, J. British Nucl. Energy Soc. ۵ (۴), ۵۶۴, ۱۹۶۶.
- [۳] Stamm'ler R.J.J., PHOENIX – User's guide. ABB-Atom AB Report UR ۹۲-۰۵۴, Rev. ۵, ۱۹۹۲.
- [۴] Ahlin, A., Edenius, M., CASMO – a fast transport theory assembly depletion code for LWR analysis. Trans Am Nucl Soc ۲۶, ۶۰۴, ۱۹۷۷.
- [۵] Yamamoto M. et al., Development and validation of TGBLA lattice physics methods. In: Proceedings of the topical meeting on reactor physics and shielding, Chicago, ۱۹۸۴.
- [۶] Jonsson, A., Loretz R.A., Historical and recent developments, applications, and performance of the DIT assembly lattice code. In: Proceedings of the international topical meeting on advances in mathematics, computations, and reactor physics, Pittsburgh, ۱۹۹۱.
- [۷] Knott, D., Forssen, B.H, Edenius, M., CASMO-۴ – a fuel assembly burnup program, methodology. STUDSVIK/SOA-۹۲/۲, Studsvik of America, ۱۹۹۵.
- [۸] Casal, J.J., Stamm'ler, R.J.J., Villarino, E., Ferri A., HELIOS: geometric capabilities of a new fuel assembly program. In: Proceedings of the international topical meeting on advances in mathematics, computations, and reactor physics, Pittsburgh, ۱۹۹۱.
- [۹] Macfarlane, R.E., and Muir, D.W., NJOY۹۹,۰ Code System for Producing Pointwise and Multigroup Neutron and Photon Cross Sections from ENDF-B Data. PSR-۴۸۰۰NJOY۹۹,۰, Los Alamos National Laboratory, ۲۰۰۰.
- [۱۰] Segev, M., Interpolation of resonance integrals. Nucl. Sci. Eng. ۱۷, ۱۱۳, ۱۹۸۱.
- [۱۱] Lewis, E.E., and Miller Jr., W.F., Computational Methods of Neutron Transport, IL, USA: American Nuclear Society, ۱۹۹۳.
- [۱۲] Carlvik, I., Collision probabilities for finite cylinders and cuboids. Nucl. Sci. Eng., ۱۵۰-۱۵۱, ۱۹۶۷.
- [۱۳] Nikolaev, M.N., Comments on the probability table method. Nucl. Sci. Eng. ۶۱, ۲۸۶, ۱۹۷۶.
- [۱۴] Aldous, A.C., Numerical Studies of the Hydrogen Equivalent of Some Structural Materials in Their Effect on U-۲۳۸ Resonance Capture. AEEW-M ۸۶۰, UKAEA, ۱۹۶۹.
- [۱۵] Rowlands, J., Benslimane-Boulard, A., Cathalau, S., Giffard, F. X., Jacqmin, R., Rimpault, G., Bernnat, W., Mattes, M., Coste, M., Fernex, F., Van der Gucht, C., de Leege, P. F., Dean, C. J., Smith, N., Finck, P., Hogenbirk, A., Trkov, A., LWR Pin Cell Benchmark Intercomparisons, NEA/OECD JEFF Report ۱۵, ۱۹۹۹.