

توسعه قابلیت پهن شدگی داپلر در حین پرواز برای کد MCNP

عجمی، منا*^(۱) - زنگیان، مهدی^(۱) - مینوچهر، عبدالحمید^(۱) - ذوالفقاری، احمدرضا^(۱)

دانشگاه شهید بهشتی، دانشکده مهندسی هسته‌ای، گروه راکتور

چکیده:

دمای محیط بر روی سطح مقطع اندرکنش‌ها با تغییر چگالی و تغییر سرعت هسته‌ها اثر می‌گذارد که در نظر گرفتن آن در محاسبات راکتور اهمیت زیادی دارد. در روش پهن شدگی داپلر حین پرواز (*On The Fly*) که توسعه آن برای کد MCNP در این مقاله مورد توجه قرار گرفته است، برای هر نقطه انرژی با توجه به نوع سطح مقطع، ضرایب بسط بر حسب دما محاسبه و در کتابخانه ذخیره می‌شود و زمان ترابرد با کمک آن‌ها، سطح مقطع‌ها تولید و استفاده می‌گردند. این روش حجم اطلاعات را کاهش و سرعت قابل قبولی دارد. در اینجا مولدی برای تولید ضرایب *OTF* و زیرروالی برای بکارگیری آن در MCNP ایجاد و صحت عملکرد آن بررسی شده است.

کلمات کلیدی: اثر دمایی داپلر، پهن شدگی داپلر حین پرواز، *OTF*، محاسبات راکتور، کد MCNP

مقدمه:

در بررسی سامانه‌های مولد انرژی همانند راکتورهای هسته‌ای به دلیل گرم شدن اجزا بررسی اثر دما بر روی سطح مقطع‌ها، که به اثر داپلر معروف است، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. مقدار سطح مقطع یک اندرکنش به هسته هدف و انرژی نسبی نوترون و هسته هدف بستگی دارد.

در هر ماده‌ای در دمای بالای صفر مطلق، هسته‌های هدف دارای حرکت حرارتی هستند. این حرکت را می‌توان در قالب یک تابع توزیع سرعت بر حسب دما بیان نمود. معمولاً از مدل گاز ماکسولین برای بیان این توزیع استفاده می‌گردد. از این رو با حرکت هسته‌های هدف نسبت به ذرات فرودی و نوترون‌ها تغییر پیدا می‌کند و به ازای ذره فرودی با سرعت مشخص توزیعی از سرعت نسبی بین آنها پدید می‌آید. این امر سبب می‌شود که احتمال انجام اندرکنش برای نوترون با انرژی ثابت با دمای محیط تغییر کند. با توجه به تابع توزیع ماکسول و بقای آهنگ اندرکنش در دستگاه‌های مختلف، می‌توان سطح مقطع اصلاح شده را با در نظر گرفتن هسته هدف به صورت ساکن در دستگاه آزمایشگاه محاسبه کرد که به پهن شدگی داپلر مشهور است. این اثر توسط رابطه زیر بیان می‌گردد [۱]:

$$\sigma(V, T_2) = \frac{1}{V} \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} [V_r \sigma(V_r, T_1)] \times \{e^{-\beta(V-V_r)^2} - e^{-\beta(V+V_r)^2}\} V_r dV_r \quad (1)$$

که در آن β به صورت زیر تعریف می‌گردد:



$$\beta = \frac{M}{2k(T_2 - T_1)} \quad (2)$$

و k ثابت بولتزمن، M جرم ذره فرودی، T_1 دمای اولیه و T_2 دمای نهایی می‌باشد. برای محاسبه این تغییرات که اصطلاحاً پهن شدگی داپلر نامیده می‌شود، روش‌های متفاوتی وجود دارد [۲]: پهن شدگی کرنل، نمونه برداری از حرکت هدف، شبه ماده،^۲ روش چند قطبی؛ چند قطبی پنجره‌ای^۳ و برازش حین پرواز^۴ روشی که در اینجا مورد استفاده قرار می‌گیرد، روش برازش حین پرواز نام دارد. در این روش از درون یابی با کمک بسط تابعی مرتبه بالا برای وابستگی دمایی سطح مقطع مربوط به ایزوتوپ مورد نظر در انرژی نوترون استفاده می‌شود. هنگامی که یک نوترون با انرژی E به ناحیه با دمای T وارد می‌شود، سطح مقطع‌ها برای ماده در این دما بلافاصله از طریق این روش بدست می‌آید. حسن اصلی این روش عدم نیاز به حفظ سطح مقطع‌ها پیش پردازش شده برای ایزوتوپ‌ها در دماهای مسئله می‌باشد و چون به ازای هر ایزوتوپ تنها یک فایل دمایی وجود دارد، در محاسبات راکتور که با طیف گسترده‌ای از دما برای اجزا روبرو هستیم حجم اطلاعات به طور چشمگیری کاهش می‌یابد. در این زمینه پژوهش‌های معدودی انجام شده است [۳-۵] که در تازه‌ترین آن‌ها در سال ۲۰۱۷ ضرایب بسط این روش برای سطح مقطع‌های مربوط به ناحیه رزنانس‌های تفکیک ناپذیر محاسبه شده است [۶]. در این مقاله با در نظر گرفتن این روش (OTF)، مولد SBU_OTF برای تولید ضرایب ارائه و زیر روالی برای بازسازی سطح مقطع‌ها در کد MCNP ایجاد شده است. صحت عملکرد این مولد با روش مقایسه مستقیم و همچنین بکارگیری برای چند مثال نمونه بررسی شده است.

روش OTF :

در این روش وابستگی دمایی یک سطح مقطع خاص در انرژی نوترون داده شده در قالب یک بسط تابعی^۵ برحسب دما بیان می‌شود. ضرایب این بسط برای هر ایزوتوپ، هر اندرکنش آن و هر نقطه شبکه‌ی انرژی^۶ بیان می‌شود. به عنوان مثال، بسط دمایی سطح مقطع جذب پرتوزا برای یک ایزوتوپ معین در یک نقطه شبکه‌ی انرژی E_g معین به صورت زیر می‌باشد:

$$\sigma_\gamma(T, E) \cong \sum_{i=1}^N \frac{a_i}{T^{i/2}} + \sum_{i=1}^N b_i T^{i/2} + c \quad (3)$$

^۱ Kernel broadening

^۲Target Motion Sampling

^۳Pseudomaterials

^۴Multipole Formalism

^۵Windowed Multipole

^۶On the fly_fit

^۷Functional Expansion

^۸Energy grid point

ضرایب بسط a_i ، b_i و c به وسیله‌ی مدل برازش^۹ وابسته به دما بر مبنای سطح مقطع‌های پهن‌شده‌ی داپلری دقیق در نقطه شبکه انرژی مورد نظر تعیین می‌گردند. برای این منظور ابتدا سطح مقطع‌های پهن شده برای دمای‌های مختلف تولید و سپس با توجه به معادله (۳) برای هر نقطه انرژی دستگاه معادلات زیر تشکیل می‌شود [۲].

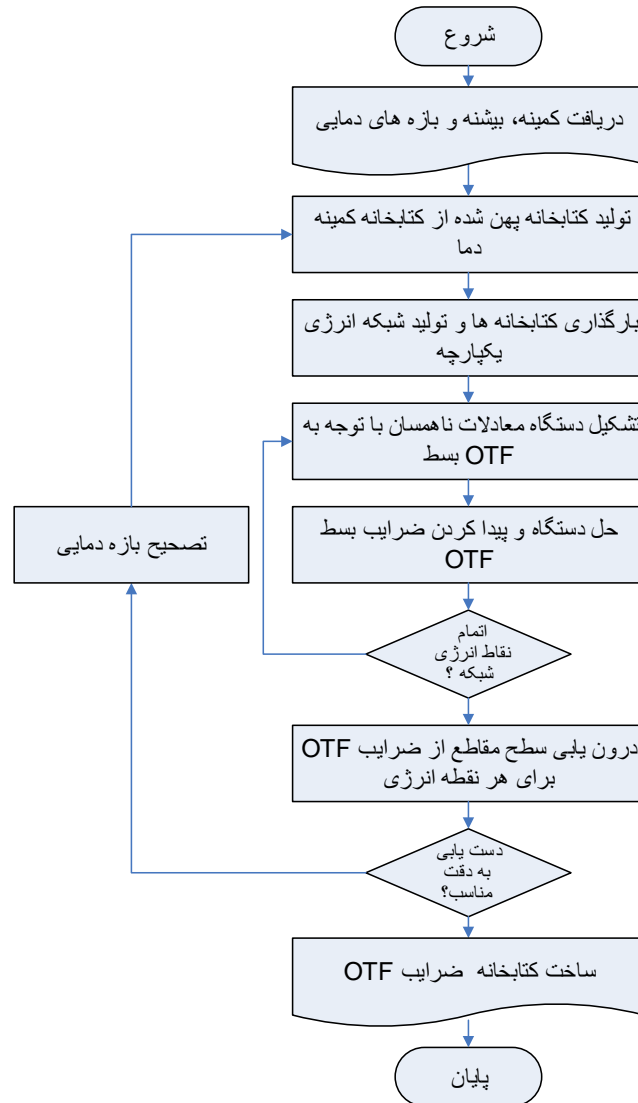
$$\begin{bmatrix} T_1^{-N/2} & T_1^{-(N-1)/2} & \dots & T_1^{(N-1)/2} & T_1^{N/2} \\ T_2^{-N/2} & T_2^{-(N-1)/2} & \dots & T_2^{(N-1)/2} & T_2^{N/2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ T_{N_T-1}^{-N/2} & T_{N_T-1}^{-(N-1)/2} & \dots & T_{N_T-1}^{(N-1)/2} & T_{N_T-1}^{N/2} \\ T_{N_T}^{-N/2} & T_{N_T}^{-(N-1)/2} & \dots & T_{N_T}^{(N-1)/2} & T_{N_T}^{N/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ c \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \vdots \\ \sigma_{N_T-1} \\ \sigma_{N_T} \end{bmatrix} \quad (4)$$

هر دستگاه برای یک نقطه انرژی تشکیل شده و هر سطر آن مربوط به یک دما می‌باشد. در این دستگاه N مرتبه بسط، ماتریس ضرایب با توجه به دما (T_i)، بردار مجهولات ضرایب OTF (a_i ، c و b_i) و بردار معلومات سطح مقطع مربوط به دماهای مختلف (σ_i) می‌باشد. از آنجائیکه تعداد بازه‌های دمایی زیاد و تعداد مجهولات محدود و بستگی به مرتبه بسط دارد، معمولاً تعداد معادلات بیشتر از مجهولات بوده و باید از روش‌های کمینه خطا استفاده شود. با حل این دستگاه می‌توان ضرایب OTF را پیدا کرد.

مولد SBU-OTF:

با توجه به روش پهن شدگی حین پرواز که در قسمت قبل توصیف شد در این قسمت مولد این ضرایب با توجه به روندنمای نشان داده شده در شکل (۱) طراحی و پیاده سازی شد.

^۹Regression Model



شکل (۱). روندنمای ساخت کتابخانه OTF

در این مولد ابتدا با دریافت کمینه و بیشینه و گام دمایی، جدول دمایی ایجاد می‌شود. سپس با توجه به این جدول سطح مقطع پهن شده داپلر با استفاده از کد $FDBACE [v]$ تولید می‌شود. در گام بعدی برای هر اندرکنش و هر نقطه انرژی آن یک دستگاه معادلات با توجه به جدول دمایی و سطح مقطع‌ها تولید شده در دماهای مختلف در آن نقطه انرژی تشکیل می‌شود. با حل این دستگاه ضرایب OTF محاسبه می‌شود. در صورتیکه سطح مقطع‌های تولید شده با ضرایب OTF در دماهای مختلف خطای مناسبی داشته باشند، این ضرایب در کتابخانه ذخیره و برای استفاده در کد مونت کارلو به کار گرفته می‌شود. در محاسبات مونت کارلو برای موادی که ضرایب OTF تعریف شده است، با توجه به دمای محیط و انرژی نوترون سطح مقطع‌های مورد نیاز در ترابرد توسط رابطه (۳) برازش شده و بکار گرفته می‌شود.

نتایج :

صحت عملکرد این مولد با روش مقایسه مستقیم و همچنین بکارگیری برای چند مثال نمونه بررسی شده است که در ادامه به توضیح هریک از آنها پرداخته می‌شود:

مقایسه مستقیم

برای این منظور سطح مقطع‌های عناصر ^{235}U ، ^{238}U ، ^1H و ^{16}O در دمای ۶۰۰، ۹۰۰ و ۱۲۰۰ کلوین برای سطح مقطع کل با استفاده از این روش ساخته شده و خطای آن با کد مرجع مقایسه شده که نتایج آن در جدول (۱) و (۲) آمده است:

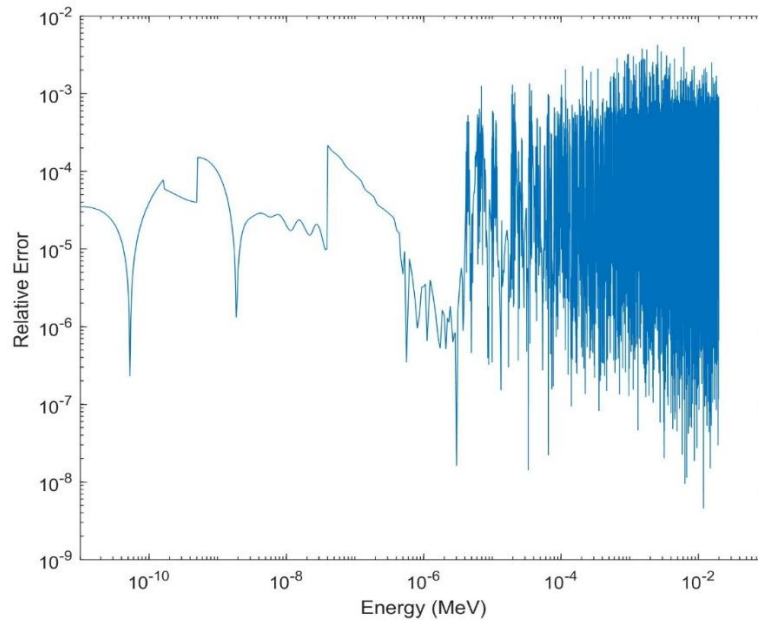
جدول شماره (۱). خطای انتگرالی و نقطه به نقطه سطح مقطع کل تولیدی از OTF ایزوتوپ‌های رزونانسی

حداکثر درصد خطای نسبی نقطه به نقطه			خطای انتگرالی بر تعداد نقاط			ایزوتوپ
۱۲۰۰	۹۰۰	۶۰۰	۱۲۰۰	۹۰۰	۶۰۰	دما (K)
۰,۱۱۲	۰,۱۰۶	۰,۱۰۲	۰,۰۰۱۷	۰,۰۰۱۵	۰,۰۰۱۲	^{235}U
۰,۱۱۳	۰,۱۰۷	۰,۱۰۴	۰,۰۰۲۱	۰,۰۰۱۸	۰,۰۰۱۵	^{238}U

جدول شماره (۲). خطای انتگرالی و نقطه به نقطه سطح مقطع کل تولیدی از OTF ایزوتوپ‌های سبک

حداکثر درصد خطای نسبی نقطه به نقطه			خطای انتگرالی بر تعداد نقاط			ایزوتوپ
۶۵۰	۶۰۰	۵۵۰	۶۵۰	۶۰۰	۵۵۰	دما (K)
۰,۱۰۸	۰,۱۰۴	۰,۱۰۱	۰,۰۰۱۳	۰,۰۰۱۱	۰,۰۰۰۹	^1H
۰,۱۱۰	۰,۱۰۶	۰,۱۰۲	۰,۰۰۱۵	۰,۰۰۱۲	۰,۰۰۰۹	^{16}O

خطای انتگرالی و نقطه به نقطه در این جداول نشان دهنده صحت عملکرد مولد OTF برای دماهای مختلف می‌باشد. توزیع خطای نقطه به نقطه برای سطح مقطع کل در دمای ۲۴۰۰ کلوین برای محدوده انرژی موثر در شکل ۲ نشان داده شده است. در تمام محدوده انرژی خطای نقطه به نقطه کمتر از یک درصد است.



شکل شماره (۲). توزیع خطای نقطه به نقطه سطح مقطع کل (OTF) اورانیوم ۲۳۵ در دمای ۲۴۰۰

پیاده سازی برای چند مثال نمونه

در این قسمت با استفاده از ضرایب تولید شده توسط مولد OTF و زیر روال توسعه شده در کد MCNP دو مسئله نمونه، سیستم بحرانی سریع و حرارتی، در دمای مربوطه شبیه سازی شده و نتایج با محاسبات توسط سطح مقطع‌های مستقیماً تولید شده بوسیله کد NJOY در همان دما مقایسه شده است. مسئله نمونه اول راکتور گودیوا [۸] می‌باشد. این راکتور یک راکتور پالسی بدون حفاظ است که در آزمایشگاه لس آلاموس برای پرتودهی نمونه‌ها از طریق گسیل نوترون و پرتوهای گاما مورد استفاده قرار می‌گیرد. سوخت این راکتور اورانیوم ۲۳۵ فلزی با غنای بالا به قطر حدود ۳۰ سانتیمتر است که در بالای یک برج فلزی به ارتفاع ۲ متر قرار دارد. نتیجه شبیه سازی این سیستم در جدول شماره ۳ آورده شده است.

جدول شماره (۳). ضریب تکثیر موثر سیستم گودیوا محاسبه شده با سطح مقطع‌های OTF، مستقیم و تجربی

پارامتر	روش OTF	کد MCNP	روش تجربی
ضریب تکثیر موثر	1.00001 ± 0.00009	1.00009 ± 0.00009	1.00000 ± 0.001

مسئله نمونه دوم یک سیستم حرارتی که در آن محلول نیترات اورانیل حاوی $U-235$ درون یک پوسته آلومینیومی حلقوی و بدون بازتابنده قرار دارد [۹]. شعاع داخلی پوسته $34/595$ سانتیمتر و ضخامت آن $0/32$ سانتیمتر است. نتایج حاصل از این شبیه سازی در جدول شماره ۴ نشان داده شده است.

جدول شماره (۴). ضریب تکثیر موثر سیستم گودیوا محاسبه شده با سطح مقطع‌های OTF، مستقیم و تجربی

پارامتر	روش OTF	کد MCNP	روش تجربی
ضریب تکثیر موثر	1.00022 ± 0.00013	1.00014 ± 0.00012	1.00000 ± 0.00330

بحث و نتیجه گیری :

در این پژوهش مولدی برای تولید ضرایب OTF به منظور در نظر گرفتن اثر داپلر بر روی سطح مقطع‌ها ارائه شد. ضرایب تولید شده توسط این مولد به وسیله زیر روالی در کد MCNP استفاده و سطح مقطع‌ها در دمای مورد نظر برازش می‌شود. حسن اصلی این روش در مقایسه با سایر روش‌های موجود اختصاص حافظه کمتر و سرعت مناسب برای برازش سطح مقطع در دمای مورد نظر است. مقایسه مستقیم نتایج و همچنین شبیه سازی برای دو سیستم حرارتی و سریع نشان دهنده اعتبار این مولد و زیرروال برازش آن است. در کارهای آتی توسعه این زیر روال برای ناحیه رزونانس تفکیک ناپذیر و پراکندگی حرارتی در نظر گرفته شده است.

مراجع :

1. Duderstadt, J. J., & Hamilton, L. J., (1976). Nuclear reactor analysis (Vol. 1): Wiley New York.
2. Martin, W., (2013). Implementation of On-the-Fly Doppler Broadening in MCNP. M&C, Sun Valley, Idaho, May 5-9.
3. Yesilyurt G., Martin W.R., Brown F.B., (2009). On-the-fly Doppler Broadening for Monte Carlo codes. ANS M&C, Saratoga Springs, New York.
4. Martin, W., Yesilyurt, G., Brown, F. B., (2011). On-the-Fly Doppler Broadening for Monte Carlo Codes, *Nuclear science and engineering*, 171, 239–257.
5. Pavlou, A.T., Ji, W., (2014). On-the-fly sampling of temperature-dependent thermal neutron scattering data for Monte Carlo simulations. *Annals of nuclear energy* 71, 411–426.
6. Walsh, J. A., Forget, B., Smith, K. S., Brown, F. B., (2018). On-the-fly Doppler broadening of unresolved resonance region cross sections, *Progress in nuclear energy* 101, 444–460.
7. Zangian, M., Minuchehr, A., Zolfaghari, A., (2013). FDBACE code for fast Doppler broadening ACE format based on parallel processing, *Annals of Nuclear Energy*, 62, 170–177.
8. Mosteller, R. D., (2010). An expanded criticality validation suite for MCNP, LA-UR-10-06230.
9. Frankle, S. C., (1999). A suite of criticality benchmarks for validating nuclear data, LA- 3594.