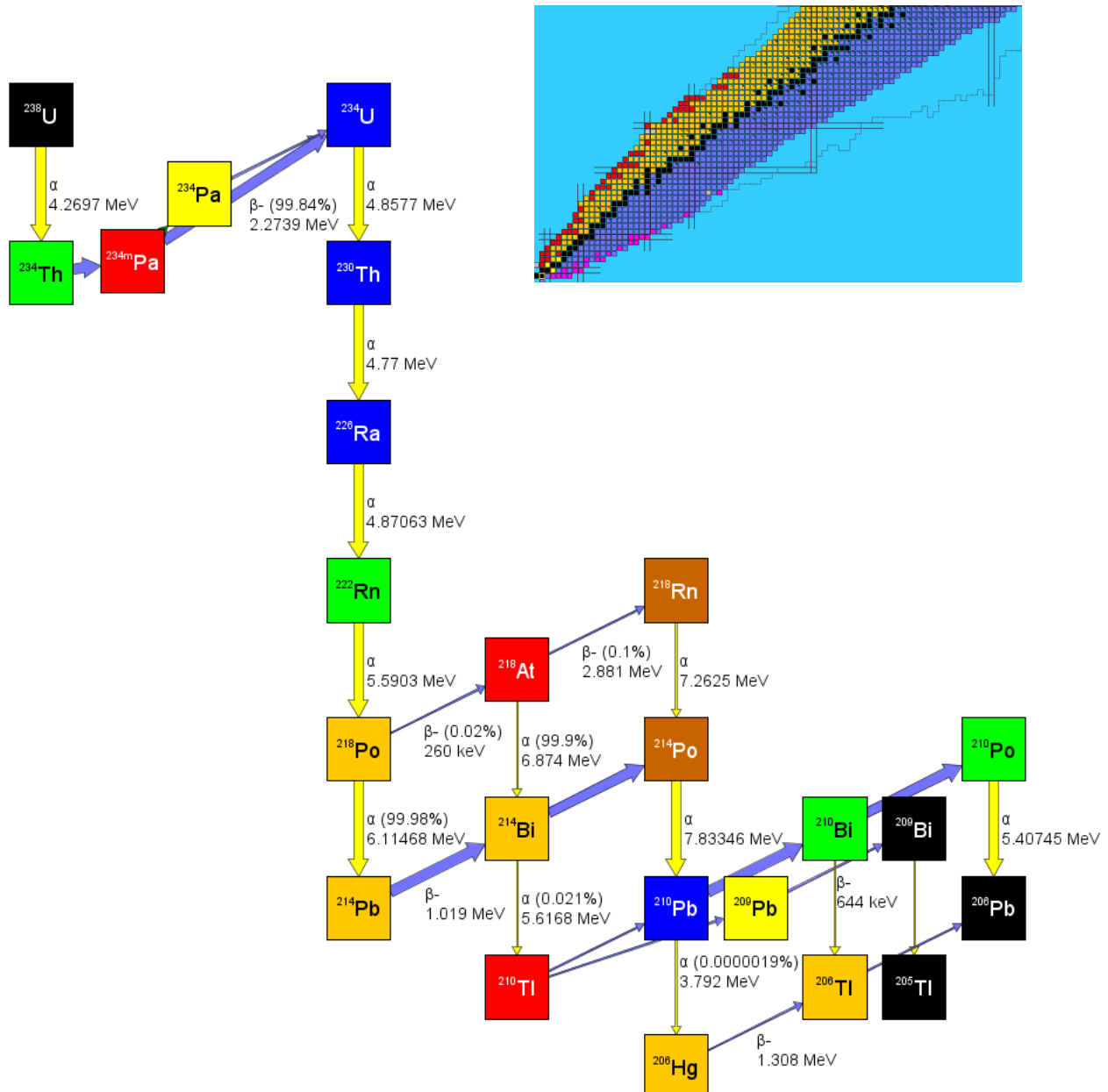


## کد جامع محاسبات مصرف سوخت (BATIS 1.0)

### BURNUP AND TRANSMUTATIONS OF ISOTOPES SOLVER



گزارش فنی نسخه ۱,۰

ویرایش ۱ - اسفند ۱۳۹۸

## فهرست مطالب

۹	۱ - چکیده
۹	۲ - کلیدواژه
۱۰	۳ - اختصارات
۱۰	۴ - مقدمه
۱۳	۵ - دامنه گزارش
۱۴	۶ - معادلات مصرف سوخت
۱۸	۷ - حل دستگاه معادلات مصرف سوخت
۱۹	۱-۷ - روش اویلر
۲۰	۲-۷ - روش رانجی-کوتا
۲۲	۳-۷ - روش سری تیلور
۲۴	۴-۷ - روش تجزیه ماتریس
۲۷	۵-۷ - روش بیت من
۳۰	۱-۵-۷ - حل تحلیلی معادله بیت من در حالت کلی تر [۵]
۳۱	۶-۷ - روش به کار رفته در کد ORIGIN2 (تلفیق روش بیت من و تیلور)
۳۳	۷-۷ - تقریب پید
۳۵	۸-۷ - روش زیرفضای کریلوف
۳۸	۹-۷ - روش تقریب چندجمله‌ای کمینه-بیشینه
۴۰	۱۰-۷ - روش تقریب گویای چبیشف
۴۳	۸ - کتابخانه مصرف سوخت
۴۴	۱-۸ - آشنایی با کتابخانه‌های مصرف سوخت ORIGIN2
۴۵	۱-۱-۸ - ساختار کتابخانه واپاشی ORIGIN2

۴۷	.....	ORIGEN2	ساختار کتابخانه سطح مقطع	۲-۱-۸
۵۳	.....	ORIGEN2	ساختار کتابخانه فوتون	۳-۱-۸
۵۵	.....	CINDER	آشنایی با کتابخانه مصرف سوخت	۲-۸
۵۸	.....		اطلاعات واپاشی و سطح مقطع	۱-۲-۸
۶۲	.....		بهره‌های محصولات شکافت	۲-۲-۸
۶۴	.....		تشکیل دستگاه معادلات	۳-۸
۶۶	.....		تبدیل توان و شار متوسط در یک بازه زمانی	۹
۶۶	.....		محاسبه شار متوسط از روی توان ثابت	۱-۹
۶۹	.....		محاسبه توان متوسط از روی شار ثابت	۲-۹
۶۹	.....		در نظر گرفتن تعادل پایدار قبل از محاسبه جملات سری تیلور	۳-۹
۷۰	.....	MCNP	کد ترابرد ذرات	۱۰
۷۳	.....	MCNP_INITIALIZE	زیربرنامه	۱-۱۰
۷۷	.....	MCNP_INITIALIZE	یک مثال از نحوه کارکرد زیربرنامه	۱-۱-۱۰
۷۹	.....	MCNP_RUN	زیربرنامه	۲-۱۰
۸۱	.....		روش‌های همبسته‌سازی محاسبات مصرف سوخت و ترابرد	۳-۱۰
۸۲	.....		روش اول پیش‌بینی و تصحیح (PC1)	۱-۳-۱۰
۸۳	.....		روش دوم پیش‌بینی و تصحیح (PC2)	۲-۳-۱۰
۸۵	.....	BATIS 1.0	روندنمای کد	۱۱
۸۸	.....		مسائل نمونه	۱۲
۸۸	.....		مسائل مصرف سوخت نقطه‌ای	۱-۱۲
۸۸	.....	$^{242}\text{Am}^*$	پرتوزایی هسته	۱-۱-۱۲
۹۰	.....	ORIGEN2	مقایسه نتایج BATIS 1.0 با کد	۲-۱-۱۲

۱۰۰ ..... ۱۲-۱-۳ - مقایسه نتایج کد BATIS 1.0 با کد CINDER

۱۰۴ ..... ۱۲-۲ - مسئله مصرف سوخت همبسته با مونت کارلو

۱۰۹ ..... ۱۲-۲-۱ - نتایج اجرای همبسته BATIS 1.0 و MCNP برای مسئله فاز I-B

۱۲۰ ..... ۱۳ - مراجع

## فهرست شکل‌ها

- شکل ۱: شماتیک یک ماتریس مصرف سوخت نوعی. ۱۷.....
- شکل ۲: مفهوم روش رانجی-کوتای مرتبه دوم [۲]. ۲۱.....
- شکل ۳: مفهوم روش رانجی-کوتای مرتبه چهارم [۲]. ۲۲.....
- شکل ۴: یک زنجیره مصرف سوخت نمونه برای هسته‌های سنگین [۴]. ۲۸.....
- شکل ۵: الگوریتم متعامدسازی آرنولدی. ۳۶.....
- شکل ۶: نمودار  $\log_{10}|e^z - \hat{r}_{16,16}(z)|$  (دقت تقریب گویای CRAM از مرتبه ۱۶ در صفحه مختلط). ۴۲.....
- شکل ۷: نمایش ساختار کتابخانه واپاشی کد ORIGEN2. ۴۷.....
- شکل ۸: نمایش ساختار کتابخانه سطح مقطع کد ORIGEN2. ۵۱.....
- شکل ۹: قسمتی از کتابخانه فوتون کد ORIGEN2. ۵۴.....
- شکل ۱۰: اطلاعات هسته  ${}^{240}_{96}\text{Cm}$  در کتابخانه CINDER. ۶۱.....
- شکل ۱۱: اطلاعات هسته  ${}^1_1\text{H}$  در کتابخانه CINDER. ۶۲.....
- شکل ۱۲: بهره شکافت دو هسته در کتابخانه CINDER. ۶۳.....
- شکل ۱۳: تغییرات شار سیستم در حالت توان ثابت در یک بازه زمانی. ۶۷.....
- شکل ۱۴: یک ورودی MCNP برای مثال. ۷۸.....
- شکل ۱۵: بخش کارت‌های داده ورودی اصلاح شده. ۷۹.....
- شکل ۱۶: الگوریتم اوپلر صریح برای همبسته‌سازی محاسبات مصرف سوخت و ترابرد. ۸۲.....
- شکل ۱۷: الگوریتم روش اول پیش‌بینی و تصحیح. ۸۳.....
- شکل ۱۸: الگوریتم روش دوم پیش‌بینی و تصحیح. ۸۴.....
- شکل ۱۹: روندنمای کد BATIS 1.0، قسمت اول. ۸۵.....
- شکل ۲۰: روندنمای کد BATIS 1.0، قسمت دوم. ۸۶.....
- شکل ۲۱: روندنمای کد BATIS 1.0، قسمت سوم. ۸۷.....

- شکل ۲۲: روندنمای کد BATIS 1.0، قسمت چهارم. ۸۸.....
- شکل ۲۳: مقایسه نتایج کد BATIS 1.0 و ORIGEN2 برای پرتوزایی کل یک گرم  $^{242}\text{Am}^*$ . ۸۹.....
- شکل ۲۴: اختلاف نسبی مقادیر اتمی به دست آمده از دو کد BATIS 1.0 و ORIGEN2 برای حالت شار ثابت. ۹۷.....
- شکل ۲۵: اختلاف نسبی مقادیر جرمی به دست آمده از دو کد BATIS 1.0 و ORIGEN2 برای حالت توان ثابت. ۹۸.....
- شکل ۲۶: طیف نوترون به کار رفته برای مسئله آزمون مقایسه کدهای BATIS 1.0 و CINDER. ۱۰۰.....
- شکل ۲۷: اختلاف نسبی مقادیر اتمی به دست آمده از دو کد BATIS 1.0 و CINDER. ۱۰۳.....
- شکل ۲۸: هندسه میله سوخت مسئله فاز I-B، مدل سازی شده با MCNP. ۱۰۸.....
- شکل ۲۹: ورودی MCNP برای مسئله اعتبارسنجی فاز I-B. ۱۰۹.....
- شکل ۳۰: مقایسه میانگین جواب‌های سایر کدها با مقادیر اندازه‌گیری در سه حالت مصرف سوخت فاز I-B... ۱۱۷.....
- شکل ۳۱: انحراف از معیار نسبی نتایج کدهای شرکت کننده در اعتبارسنجی فاز I-B. ۱۱۸.....

## فهرست جدول‌ها

- جدول شماره ۱: تعداد ارقام معنادار لازم برای محاسبه تابع نمایی اعداد مختلف. ۲۴.....
- جدول شماره ۲: ضرایب بهینه شده برای تقریب پید قطری مرتبه ۱۳ [۶]. ۳۴.....
- جدول شماره ۳: ضرایب تقریب MMPA مرتبه ۳۲ ( $c = 24/1$ ). ۳۹.....
- جدول شماره ۴: ضرایب PFD برای تقریب CRAM از مرتبه ۱۴. ۴۲.....
- جدول شماره ۵: ضرایب PFD برای تقریب CRAM از مرتبه ۱۶. ۴۳.....
- جدول شماره ۶: مشخصه واحد نیمه عمر هسته‌ها. ۴۶.....
- جدول شماره ۷: پارامترهای وارد شده در کتابخانه واپاشی ORIGEN2. ۴۶.....
- جدول شماره ۸: فایل‌های کتابخانه‌های سطح مقطع ORIGEN2 و شماره بخش‌های هر یک. ۴۸.....
- جدول شماره ۹: پارامترهای وارد شده در کتابخانه سطح مقطع ORIGEN2. ۵۱.....
- جدول شماره ۱۰: هسته‌های شکافا با بهره شکافت در کتابخانه. ۵۲.....
- جدول شماره ۱۱: گروه‌های انرژی فوتون در کتابخانه ORIGEN2. ۵۵.....
- جدول شماره ۱۲: گروه‌های انرژی نوترون در کتابخانه CINDER. ۵۷.....
- جدول شماره ۱۳: گروه‌های انرژی فوتون در کتابخانه CINDER. ۵۸.....
- جدول شماره ۱۴: هسته‌های شکافت‌دهنده دارای مجموعه بهره شکافت صریح در کتابخانه. ۶۴.....
- جدول شماره ۱۵: شماره اندرکنش‌های کاربردی در دستور FM. ۷۵.....
- جدول شماره ۱۶: بازه‌های زمانی منتخب برای مسئله واپاشی  $^{242}\text{Am}^*$ . ۸۹.....
- جدول شماره ۲۵: فهرست تبدیلات هسته‌ای که در کد ORIGEN2 صرف نظر می‌شوند (*decay* و *pwrus*). ۹۲.....
- جدول شماره ۱۸: مقادیر اولیه برای مسئله اعتبارسنجی. ۹۵.....
- جدول شماره ۱۹: بازه‌های زمانی برای اجرای مسئله اعتبارسنجی. ۹۵.....
- جدول شماره ۲۰: مقادیر اولیه برای مسئله اعتبارسنجی. ۹۸.....
- جدول شماره ۲۱: مقایسه شار متوسط محاسبه شده توسط کدهای ORIGEN2 و BATIS 1.0. ۹۹.....

- جدول شماره ۲۲: مقایسه ضریب تکثیر بی‌نهایت محاسبه شده توسط کدهای BATIS 1.0 و ORIGEN2 ..... ۱۰۰
- جدول شماره ۲۳: مقادیر بهنجار شار ۶۳ گروهی در مسئله آزمون مقایسه کدهای BATIS 1.0 و CINDER. ۱۰۱
- جدول شماره ۲۴: داده‌های فیزیکی برای مسئله اعتبارسنجی فاز I-B ..... ۱۰۶
- جدول شماره ۲۵: ترکیب و چگالی اتمی سوخت تازه. .... ۱۰۶
- جدول شماره ۲۶: ترکیب و چگالی اتمی خنک‌کننده در ابتدای دوره اول کاری. .... ۱۰۶
- جدول شماره ۲۷: اطلاعات دوره‌های کاری برای مسئله اعتبارسنجی فاز I-B ..... ۱۰۷
- جدول شماره ۲۸: توان ویژه برای سه حالت مختلف اعتبارسنجی (بر حسب kW/kgU) ..... ۱۰۷
- جدول شماره ۲۹: بازه‌های زمانی انتخاب شده برای اجرای مسئله اعتبارسنجی بر حسب روز. .... ۱۱۱
- جدول شماره ۳۰: فهرست هسته‌ها برای تالی اندرکنش در ورودی MCNP برای مسئله فاز I-B ..... ۱۱۱
- جدول شماره ۳۱: نتایج حالت A با کتابخانه ORIGEN بدون استفاده از PC، بر حسب (mg/g UO<sub>2</sub>) ..... ۱۱۲
- جدول شماره ۳۲: نتایج حالت B با کتابخانه ORIGEN بدون استفاده از PC، بر حسب (mg/g UO<sub>2</sub>) ..... ۱۱۳
- جدول شماره ۳۳: نتایج حالت C با کتابخانه ORIGEN بدون استفاده از PC، بر حسب (mg/g UO<sub>2</sub>) ..... ۱۱۴
- جدول شماره ۳۴: نتایج اجرای روش‌های PC برای حالت A با استفاده از کتابخانه ORIGEN، بر حسب ( mg/g UO<sub>2</sub>) ..... ۱۱۵
- جدول شماره ۳۵: نتایج کدهای BATIS 1.0 و MCNPX2.7 برای حالت C با کتابخانه CINDER، بر حسب (mg/g UO<sub>2</sub>) ..... ۱۱۶



## ۱- چکیده

محاسبات مصرف سوخت که به آن محاسبات فرسایش سوخت یا تهی‌سازی نیز گفته می‌شود، یکی از مهم‌ترین بخش‌های محاسبات راکتور است؛ چراکه بدون اطلاع از ترکیب مواد یک سیستم، محاسبات ترابرد و تعیین خواص نوترونی در گذر زمان نیز غیرممکن است. با توجه به اهمیت این موضوع، مرکز محاسبات پیشرفته هسته‌ای در شرکت مسنا بر آن شد تا ضمن مطالعه روش‌های مختلف حل معادلات مصرف سوخت، کدی جامع به نام BATIS بر مبنای قابلیت‌های موجود در کدهای ORIGEN2 و CINDER تولید کند. کد BATIS 1.0 ضمن پشتیبانی از کتابخانه داده با قالب یک‌گروهی ORIGEN2 یا قالب چندگروهی CINDER، قابلیت انجام محاسبات مصرف سوخت نقطه‌ای و یا همبسته با محاسبات ترابرد کد MCNP را در هر یک از حالت‌های توان ثابت، شار ثابت یا واپاشی دارد. در این گزارش ابتدا به بررسی دستگاه معادلات مصرف سوخت، شرایط و فرضیات حاکم و انواع روش‌های حل پیشنهاد شده پرداخته شده است. روش‌های اوپلر صریح و ضمنی، رانجی-کوتا مرتبه ۴، بسط سری تیلور، بیت‌من، تقریب پید، زیرفضای کريلوف، چندجمله‌ای‌های کمینه-بیشینه، روش مورد استفاده در کد ORIGEN2 و روش تقریب با چندجمله‌ای چبیشف در کد BATIS پیاده شده و توضیحات هر روش در این گزارش آمده است.

## ۲- کلیدواژه

مصرف سوخت، زنجیره واپاشی، ماتریس نمایی، خطی‌سازی زنجیره‌ها، اوپلر، بیت‌من، رانجی-کوتا، سری تیلور، زیرفضای کريلوف، تقریب پید، چندجمله‌ای کمینه-بیشینه، چندجمله‌ای چبیشف، BATIS، BURNUP، DEPLETION، MINIMAX، CRAM، ORIGEN، CINDER، MCNP.

### ۳- اختصارات

عبارت اصلی	عبارت اختصاری	توضیح
Burnup And Transmutations of Isotopes Solver	BATIS	کد جامع محاسبات مصرف سوخت
Monte Carlo N-Particle	MCNP	کد ترابرد ذرات به روش مونت کارلو
Cross Section DIRectory	XSDIR	نام فایل متنی مورد استفاده در کد MCNP برای آدرس دهی فایل های کتابخانه
Predictor-Corrector	PC	روش های عددی مبتنی بر تخمین و تصحیح
Trajectory Transition Analysis	TTA	روش بیت من مبتنی بر خطی سازی زنجیره های مصرف سوخت
Chebyshev Rational Approximation Method	CRAM	روش تقریب گویا با چند جمله ای چبیشف
MiniMax Polynomial Approximation	MMPA	روش تقریب با چند جمله ای کمینه بیشینه
		نرم ماتریس
	<sub>2</sub>	نرم ۲ بردار یا همان طول بردار
	⌊ ⌋	تابع کف (Floor) که عدد حقیقی را به سمت $-\infty$ گرد می کند.
	⌈ ⌉	تابع سقف (Ceiling) که عدد حقیقی را به سمت $+\infty$ گرد می کند.

### ۴- مقدمه

ترکیب سوخت در قلب یک راکتور در حال کار، با گذشت زمان تغییر می کند؛ از تعداد بعضی هسته ها کاسته شده و بر تعداد بعضی دیگر افزوده می شود. در دایره لغات مهندسی هسته ای، محاسبات مصرف سوخت به محاسبه تغییرات در ترکیب هسته های موجود در سیستم در اثر شکافت هسته ها، گیراندازی نوترون، واپاشی هسته ها و عوامل دیگر اطلاق می شود. محاسبات مصرف سوخت یکی از مهم ترین بخش های محاسبات راکتور است؛ چراکه بدون اطلاع از ترکیب مواد داخل قلب راکتور، محاسبات ترابرد<sup>۱</sup> و تعیین خواص نوترونی قلب نیز غیرممکن است. همین طور بدون داشتن خواص نوترونی، محاسبات مصرف سوخت را نمی توان انجام داد؛ چراکه نرخ واکنش های مختلف نوترون، نقش اساسی در تشکیل دستگاه معادلات مصرف سوخت دارد و اطلاع از آن، نیازمند حل معادله ترابرد (یا معادلات مشابه دیگر) و محاسبه شار (طیف) نوترون های سیستم است. در واقع محاسبات مصرف سوخت و محاسبات ترابرد

<sup>۱</sup> Transport calculations

باید در حالت جفت شده با یکدیگر حل شوند. همچنین در مسائل ایمنی نیروگاه، اطلاع از موجودی قلب در زمان‌های مختلف از مسائل کلیدی و بسیار مهم در ایمنی می‌باشد. علاوه بر این‌ها، برای اطلاع از مقدار پرتوزایی<sup>۱</sup> هسته‌ها هنگام خروج از قلب و مدت‌زمان نگهداری سوخت‌های مصرف شده در استخر و سایر مسائل پسمانداری نظیر طراحی حفاظ، به محاسبات مصرف سوخت نیاز است. در عمل، تخمین و پیش‌بینی دقیق عمر قلب و رفتار راکتور در طول کار، چه هنگام طراحی اولیه و چه هنگام کنترل راکتور، بخش بسیار مهم و ضروری از تحلیل قلب راکتور به شمار می‌رود که همه این موارد از کاربردهای محاسبات مصرف سوخت محسوب می‌شود.

با توجه به اهمیت محاسبات مصرف سوخت، تاکنون در دنیا کدهای زیادی برای این منظور طراحی و توسعه داده شده است که از معروف‌ترین این کدها، کد ORIGEN2 و کد CINDER را می‌توان نام برد. کد ORIGEN2 که در واقع نسخه تغییر یافته‌ای از کد اولیه ORIGEN است، یک کد یک‌گروهی بی‌بُعد است که توسط آزمایشگاه ملی اُکریج (ORNL)<sup>۲</sup> توسعه داده شده است. منظور از بی‌بُعد عدم نیاز به ورود هندسه سیستم در ورودی کد است، بلکه تنها با ورود مقادیر اولیه و شار نوترون یا توان حرارتی تولیدی، تغییرات هسته‌ها محاسبه می‌شود. داده‌های واپاشی، سطح مقطع و نشر فوتون در کد ORIGEN2 در سه فایل متنی جداگانه ذخیره می‌شوند. سطح مقطع‌های این کد بر اساس شرایط کاری راکتورهای مختلف به صورت سطح مقطع‌های یک‌گروهی که با استفاده از طیف نوعی هر راکتور متوسط‌گیری شده، تهیه شده است. بنابراین برای استفاده از کد ORIGEN2 کاربر باید در ابتدا نزدیک‌ترین کتابخانه سطح مقطع به سامانه مورد نظر خود را انتخاب و در محاسبات از آن استفاده کند. کد ORIGEN2 توانایی حل دستگاه معادلات مصرف سوخت ناهمگن را دارد که در آن هر هسته می‌تواند نرخ ورود یا خروج پیوسته از سامانه داشته باشد. همچنین کد ORIGEN2 توانایی محاسبه و چاپ مقادیر غلظت‌های هسته‌های مختلف در واحدهای اتمی و گرمی، مقدار پرتوزایی مواد مختلف بر حسب کوری، گرمای ناشی از واپاشی هسته‌های پرتوزا، مقادیر مجاز مواد پرتوزا به صورت محلول در آب یا هوا، پرتوزایی ذرات آلفا، نرخ شکافت خودبه‌خودی هسته‌ها، ضریب تکثیر بی‌نهایت، شار یا توان متوسط در طول هر بازه زمانی، کمیت مصرف سوخت (مقدار انرژی آزاد شده بر واحد جرم سوخت اولیه)، میزان نشر فوتون در ۱۸ گروه انرژی و ... را دارد.

کد CINDER که از دهه ۱۹۶۰ توسعه یافته است، یک کد محاسبات مصرف سوخت ۶۳ گروهی بی‌بُعد است. کتابخانه این کد بر خلاف کتابخانه‌های کد ORIGEN2، دارای دسته‌بندی هسته‌ها نبوده و همه اطلاعات واپاشی و سطح مقطع و فوتونی در یک فایل متنی وارد شده است. سطح مقطع‌های ۶۳ گروهی در این کد با استفاده از طیف نوعی راکتورهای حرارتی تولید شده است، بنابراین استفاده از کتابخانه پیش‌ساخته CINDER برای محاسبات

<sup>۱</sup> Activity

<sup>۲</sup> Oak Ridge National Laboratory

مصرف سوخت سامانه‌های غیرحرارتی توصیه نمی‌شود. کد CINDER برای محاسبات مصرف سوخت، نیاز به شار گروهی نوترون در ساختار ۶۳ گروهی مورد استفاده در کتابخانه خود را دارد. محاسبات مصرف سوخت در کد CINDER تنها در حالت دستگاه معادلات همگن انجام می‌شود. کد CINDER در خروجی خود اطلاعاتی نظیر مقدار هسته‌ها بر حسب فراوانی اتمی، مقدار پرتوزایی و پرتوزایی ویژه (پرتوزایی بر واحد جرم)، نرخ تولید نوترون‌های تأخیری، نرخ جذب نوترون توسط هر هسته و نرخ واپاشی، نرخ شکافت القایی و خودبه‌خودی و ... را برای هر هسته چاپ می‌کند.

همچنین کد CALIC که در قالب بسته هفدهم از محصولات مرکز محاسبات پیشرفته هسته‌ای در شهریور ۱۳۹۴ منتشر شده است، یک کد محاسبات مصرف سوخت یک گروهی بی‌بُعد بر پایه کد ORIGEN2 است که توانایی حل معادلات مصرف سوخت همگن و ناهمگن را دارد. این کد از کتابخانه‌های ORIGEN2 در محاسبات خود استفاده می‌کند.

برای محاسبات مصرف سوخت به نرخ اندرکنش میکروسکوپی  $(\sigma(E)\varphi(E))$  انواع هسته‌ها نیاز است که تابعی از سطح مقطع‌های میکروسکوپی اندرکنش مواد با نوترون است. سطح مقطع‌های میکروسکوپی نیز تابعی پیوسته از انرژی نوترون می‌باشند که این موضوع، حل مسئله مصرف سوخت را پیچیده و غیرعملی می‌کند. برای حل این مشکل، با استفاده از یک طیف نوعی راکتور موردنظر به عنوان تابع وزن، سطح مقطع‌های اندرکنش هسته‌ها را به سطح مقطع‌های یک گروهی یا چندگروهی (با تعداد گروه محدود)، میانگین‌گیری کرده و در کتابخانه‌های مصرف سوخت قرار می‌دهند. به عنوان مثال کتابخانه مصرف سوخت کد ORIGEN2 یک گروهی و کتابخانه کد CINDER ۶۳ گروهی است. از آنجایی که نمی‌توان یک طیف نوترونی انتخاب نمود که با استفاده از آن سطح مقطع یک گروهی برای سامانه‌های مختلف با دقت مناسب به دست آید، کد ORIGEN2 برای راکتورهای مختلف با توجه به طیف نوعی هر راکتور، یک کتابخانه یک گروهی مستقل ارائه کرده است. در حالت استفاده از کتابخانه مصرف سوخت چندگروهی، نیاز به طیف نوترونی با همان ساختار انرژی مورد استفاده در کتابخانه مصرف سوخت است. به عنوان مثال برای استفاده از کتابخانه CINDER، نیاز به محاسبه طیف ۶۳ گروهی نوترون است که این طیف نیز با مصرف سوخت و تغییر در ترکیب مواد و نیز تغییر در سطح قدرت و سایر شرایط کاری راکتور، دستخوش تغییر می‌شود و نیازمند محاسبه مجدد در بازه‌های زمانی مختلف است. تفاوت بین طیف نوعی استفاده شده به عنوان تابع وزن برای تولید کتابخانه مصرف سوخت با طیف واقعی، باعث بروز خطا در محاسبات می‌شود. برای کاهش خطای ناشی از متوسط‌گیری کتابخانه‌های مصرف سوخت، می‌توان سطح مقطع‌هایی را که تغییرات مقدار متوسط آن‌ها در اثر تغییرات طیف نوترون، تأثیر بیشتری بر نتیجه محاسبات می‌گذارد، با استفاده از وزن‌دهی کتابخانه سطح مقطع

پیوسته با طیف واقعی سامانه، به دست آورده و در محاسبات مصرف سوخت استفاده نمود. در این راستا، تاکنون کدهای زیادی از همبسته کردن یک کد مصرف سوخت بی‌بعد نظیر ORIGEN2 و CINDER با یک کد ترابرد به روش مونت کارلو برای محاسبات مصرف سوخت تولید شده‌اند که از جمله آن‌ها می‌توان به کدهای MCNPX، MVP-BURN، MOCUP، MONTEBURNS، EVOLCODE، MCB، BURNCAL، ALEPH، MCODE و ... اشاره کرد.

در بخش ۶ از این گزارش به معرفی معادلات حاکم بر تغییرات غلظت هسته‌ها پرداخته شده و در بخش ۷ انواع روش‌های حل دستگاه معادلات مصرف سوخت معرفی و بررسی شده است. در بخش ۸ درباره ساختار کتابخانه‌های مصرف سوخت توضیح داده شده است. محاسبات مربوط به تبدیل توان و شار یک‌گروهی در محاسبات مصرف سوخت در بخش ۹ آمده و در بخش ۱۰ به توضیح سازوکار همبسته‌سازی محاسبات مصرف سوخت با محاسبات ترابرد کد MCNP و انواع روش‌های همبسته‌سازی، پرداخته شده است. در بخش ۱۱ روندنمای کد ارائه شده است.

## ۵- دامنه گزارش

به‌طور کلی کد BATIS 1.0 دارای قابلیت‌های زیر است:

- ۱- حل معادلات مصرف سوخت به روش‌های مختلف به دلخواه کاربر (امکان بررسی و مقایسه روش‌ها)؛
- ۲- پشتیبانی از قالب کتابخانه‌های یک‌گروهی ORIGEN2؛
- ۳- پشتیبانی از قالب کتابخانه چندگروهی CINDER؛
- ۴- انجام پیش‌پردازش بر روی کتابخانه‌های مصرف سوخت و تبدیل کتابخانه متنی به کتابخانه باینری به منظور تسریع محاسبات؛
- ۵- انجام محاسبات فوتونی؛
- ۶- محاسبه پارامترهای مختلف نظیر تعداد اتم‌های هر ایزوتوپ به همراه جرم آن و کسرهای اتمی و جرمی، پرتوزایی هسته‌ها، توان حرارتی ناشی از پرتوزایی به تفکیک فوتون و ذرات بتا و آلفا، نرخ جذب کل و تولید نوترون از شکافت القایی، نرخ تولید نوترون از طریق واکنش‌های  $(\alpha, n)$  و شکافت خودبه‌خودی، ضریب تکثیر بی‌نهایت سیستم، مقدار مصرف سوخت (انرژی حاصل شده از سوخت به ازای واحد جرم سوخت اولیه) و ...

۷- توانایی همبسته شدن با کد ترابرد به روش مونت کارلوی MCNP؛

۸- امکان انتخاب روش‌های همبسته‌سازی مختلف توسط کاربر؛

۹- ورودی متنی آزاد و راحت برای استفاده کاربر؛ و

۱۰- خروجی متنی با جداول متنوع متناسب با نیاز کاربر.

## ۶- معادلات مصرف سوخت

به‌طور کلی نرخ تغییرات یک هسته را می‌توان به صورت زیر بیان کرد.

نرخ خروج هسته - نرخ ورود هسته + نرخ مصرف هسته - نرخ تولید هسته = نرخ تغییرات مقدار هر هسته

در تمام روابط مورد استفاده در این گزارش، از نرخ ورود و خروج هسته‌ها صرف‌نظر شده است؛ که البته این فرض در شرایط کاری اکثر راکتورهای امروزی، صحیح است. سازوکار تبدیلات هسته‌ها به یکدیگر در یک راکتور هسته‌ای، به یکی از روش‌های زیر انجام می‌شود:

۱- واپاشی هسته‌ها؛

۲- اندرکنش‌های نوترون با هسته‌ها؛

۳- اندرکنش‌های سایر ذرات با هسته‌ها نظیر ذرات آلفا، بتا، پروتون و فوتون‌های گاما.

اغلب در راکتورهای حرارتی از اندرکنش سایر ذرات با مواد در مقایسه با نرخ واپاشی هسته‌ها و اندرکنش‌های نوترون می‌توان صرف‌نظر کرد. بنابراین آهنگ تغییرات چگالی هسته نوعی  $i$  را با صرف‌نظر از اندرکنش سایر ذرات با هسته‌ها، می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\begin{aligned} \frac{dN_i(r,t)}{dt} = & \sum_j N_j(r,t) \int_0^\infty \gamma_{ji}(E) \sigma_{f,j}(E,t) \varphi(r,E,t) dE + \\ & \sum_l N_l(r,t) \int_0^\infty \sigma_{x,l}(E,t) \varphi(r,E,t) dE + \sum_k \lambda_{ki} N_k(r,t) - \\ & N_i(r,t) \int_0^\infty \sigma_{a,i}(E,t) \varphi(r,E,t) dE - \lambda_i N_i(r,t) \end{aligned} \quad (1-6)$$

که در رابطه بالا  $N_i$  چگالی اتمی هسته نام  $(\text{cm}^{-3})$ ،  $\gamma_{ji}$  بهره هسته  $i$  از یک شکافت هسته  $j$ ؛  $\sigma_{f,j}$  سطح مقطع میکروسکوپی شکافت هسته  $j$   $(\text{cm}^2)$ ،  $\varphi$  طیف انرژی نوترون  $(\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{MeV}^{-1})$ ،  $\sigma_{x,l}$  سطح مقطع میکروسکوپی

اندرکنش هسته  $l$  با نوترون که به تولید هسته  $i$  می‌انجامد ( $\text{cm}^2$ )،  $\lambda_{ki}$  ثابت واپاشی (نرخ تبدیل) هسته  $k$  به هسته  $i$  ( $\text{s}^{-1}$ )،  $\lambda_i$  ثابت واپاشی هسته  $i$  و  $\sigma_{a,i}$  سطح مقطع جذب هسته  $i$  است. اولین جمله سمت راست معادله (۱-۶) نشان‌دهنده تولید مستقیم هسته  $i$  از یک واکنش شکافت است. جمله دوم، نشان‌دهنده تولید هسته  $i$  از طریق گیراندازی نوترون است که اندرکنش  $\alpha$  می‌تواند هر واکنشی نظیر  $(n,\gamma)$ ،  $(n,2n)$ ،  $(n,\alpha)$  و ... باشد. سومین جمله نشان‌دهنده تولید هسته  $i$  از طریق واپاشی هسته‌های دیگر است که شامل انواع واپاشی‌ها نظیر  $\alpha$  و  $\beta$  و ... می‌شود؛ بنابراین مجموع سه جمله اول معادله بالا، آهنگ تولید هسته  $i$  را نشان می‌دهد. چهارمین و پنجمین جمله معادله (۱-۶)، به ترتیب نشان‌دهنده مصرف هسته  $i$  از طریق جذب نوترون و واپاشی است. برای استفاده از معادله (۱-۶) نیاز به محاسبه  $\varphi(r,E,t)$  است که تابعی از  $\Delta$  متغیر مستقل است. محاسبه دقیق این تابع امکان‌پذیر نیست. برای حل مشکل متغیر مکان  $r$ ، باید هندسه سیستم مورد حل را به حجم‌هایی کوچک‌تر تقسیم نمود به طوری که بتوان در هر حجم، از تغییرات مکانی شار نوترون، صرف‌نظر نمود و شار را مستقل از مکان در نظر گرفت. همچنین از راه‌حلی مشابه برای حل مشکل متغیر زمان  $t$  استفاده می‌شود. به این ترتیب، بازه زمانی مورد نظر به گونه‌ای به چندین زیربازه زمانی تقسیم می‌شود که بتوان در هر زیربازه زمانی، از تغییرات زمانی طیف و شار نوترون و همچنین تغییرات دمای مواد که منجر به تغییر در سطح مقطع نوترون می‌شود، صرف‌نظر کرد. برای حل مشکل متغیر انرژی  $E$ ، نیاز به تشکیل گروه‌های انرژی و ثوابت گروهی مختلف است. به این ترتیب که بازه انرژی کل  $(0,\infty)$  را می‌توان به تعداد  $G$  گروه انرژی افزاز کرده و جملات انتگرال نرخ اندرکنش نوترون در رابطه (۱-۶) را به صورت (۲-۶) نوشت.

$$\int_0^{\infty} \sigma_{a,i}(E)\varphi(E)dE = \sum_{g=1}^G \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_{a,i}(E)\varphi(E)dE \quad (2-6)$$

هر یک از انتگرال‌های سمت راست رابطه (۲-۶) را می‌توان به شکل (۳-۶) نوشت:

$$\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_{a,i}(E)\varphi(E)dE = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_{a,i}(E)\varphi(E)dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \varphi(E)dE} \times \int_{E_g}^{E_{g-1}} \varphi(E)dE \quad (3-6)$$

با تعریف ثوابت گروهی به شکل روابط (۴-۶) و (۵-۶)، می‌توان معادله مصرف سوخت (۱-۶) را در بازه زمانی و مکانی انتخاب شده به شکل گروهی (۷-۶) تغییر داد.

$$\varphi^g \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \varphi(E) dE \quad (4-6)$$

$$\sigma_{a,i}^g \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_{a,i}(E) \varphi(E) dE}{\varphi^g} \quad (5-6)$$

$$\int_0^{\infty} \sigma_{a,i}(E) \varphi(E) dE = \sum_{g=1}^G \sigma_{a,i}^g \varphi^g \quad (6-6)$$

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt} = & \sum_j \gamma_{ji} N_j \sum_g \sigma_{f,j}^g \varphi^g + \sum_l N_l \sum_g \sigma_{x,l}^g \varphi^g + \sum_k \lambda_{ki} N_k \\ & - \sum_g \sigma_{a,i}^g \varphi^g N_i - \lambda_i N_i \end{aligned} \quad (7-6)$$

بنابراین چنانچه سطح مقطع‌های گروهی وجود داشته باشد، با محاسبه شار گروهی، می‌توان نرخ اندرکنش‌ها را محاسبه نمود. برای محاسبه ثابت گروهی تعریف شده در (۴-۶) و (۵-۶)، به طور معمول از یک طیف میانگین و تخمینی برای سیستم مورد نظر به عنوان تابع وزن استفاده می‌شود. به عنوان مثال برای محاسبات راکتورهای حرارتی، از طیف نوعی سیستم‌های حرارتی که در ناحیه حرارتی به شکل ماکسولی و در ناحیه انرژی میانی به صورت  $1/E$  و در ناحیه سریع به صورت طیف نوترون‌های حاصل از شکافت است، استفاده می‌شود. روشن است که هرچه طیف مورد استفاده برای محاسبه ثابت گروهی در رابطه (۴-۶) به طیف واقعی سیستم نزدیک‌تر باشد و یا هرچه تعداد گروه‌های انرژی مورد استفاده برای گروهی کردن بیشتر باشد، خطای کمتری در محاسبات وارد می‌شود. به طور کل هرچه در فرضیات انجام شده در به دست آوردن معادله (۷-۶)، خطا وارد شود، در نتایج استفاده از این معادله نیز خطا وارد خواهد شد.

برای استفاده از رابطه (۷-۶) باید ابتدا طیف انرژی (شار گروهی) نوترون‌های سیستم در همان ساختار گروهی مورد استفاده برای تولید سطح مقطع‌های گروهی در رابطه (۴-۶)، به دست آمده و با استفاده از رابطه (۶-۶) نرخ اندرکنش یک گروهی به عنوان ضریب در معادله قرار گیرد. بنابراین آنچه در نهایت در معادله مصرف سوخت قرار می‌گیرد، سطح مقطع و شار یک گروهی است. معادله (۷-۶) در حالت یک گروهی به صورت معادله (۸-۶) نوشته می‌شود:

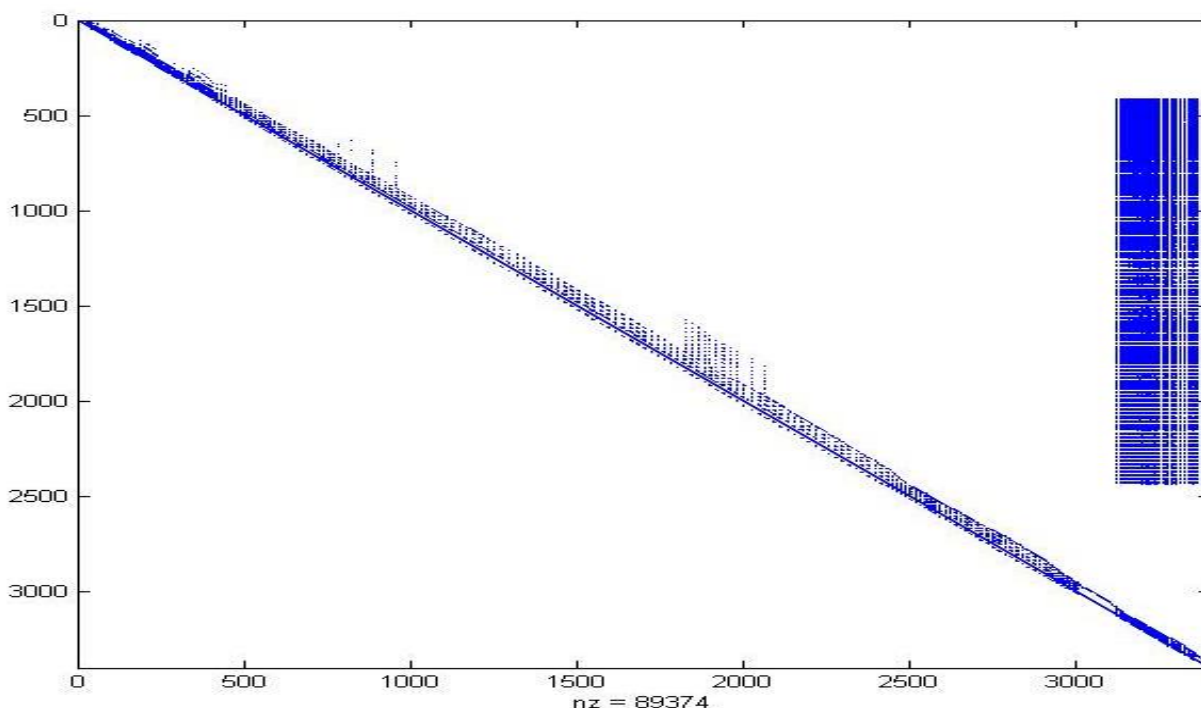
$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_j \gamma_{ji} \sigma_{f,j} N_j \varphi + \sum_l \sigma_{x,l} N_l \varphi + \sum_k \lambda_{ki} N_k - \sigma_{a,i} N_i \varphi - \lambda_i N_i \quad (8-6)$$

معادله (۸-۶) برای همه هسته‌ها نوشته شده و تشکیل یک دستگاه معادلات دیفرانسیل مرتبه اول می‌دهد که به آن دستگاه معادلات مصرف سوخت گفته می‌شود. دستگاه معادلات مصرف سوخت را می‌توان به صورت ماتریسی زیر نوشت:



$$\frac{d\vec{N}}{dt} = A\vec{N} \quad (9-6)$$

که بردار چگالی اتمی هسته‌ها و  $A$  ماتریس ضرایب موجود در (۸-۶) است که به آن ماتریس مصرف سوخت گفته می‌شود. برای حل این دستگاه معادلات به یک شرط اولیه نیاز است که همان بردار مواد اولیه است. اگر هسته‌ها در بردار  $N$  بر اساس افزایش جرم اتمی مرتب شوند، شماتیک یک ماتریس مصرف سوخت نوعی که درایه‌های غیرصفر آن با نقاط آبی‌رنگ مشخص شده‌اند، مانند شکل ۱ خواهد بود.



شکل ۱: شماتیک یک ماتریس مصرف سوخت نوعی.

درایه‌های روی قطر اصلی ماتریس مصرف سوخت همگی منفی و برابر نرخ از بین رفتن هر هسته،  $-(\lambda + \sigma_a \phi)$  است. از آنجایی که بقیه درایه‌ها در ماتریس مصرف سوخت (به غیر از قطر اصلی) نشان‌دهنده نرخ تبدیل هسته‌ها به یکدیگر می‌باشند، همگی نامنفی هستند. در ماتریس مصرف سوخت، شماره سطرها نشان‌دهنده شماره هسته دختر (هسته محصول) و شماره ستون‌ها نشان‌دهنده شماره هسته مادر (هسته اولیه) است. بنابراین درایه  $A(i, j)$  همان ضریب تبدیل هسته  $j$  به هسته  $i$  است. در هسته‌های غیرشکافا، تبدیل هسته‌ها به یکدیگر تنها از طریق جذب نوترون و یا واپاشی هسته صورت می‌گیرد که این تبدیلات منجر به تولید هسته‌ای در نزدیکی هسته مادر (از نظر عدد اتمی و عدد جرمی) می‌شود. لذا در هسته‌های سبک تنها درایه‌های مجاور قطر اصلی غیرصفر است. در واقع هسته  ${}^A_Z X$  با عدد جرمی  $A$ ، با انواع واپاشی‌ها و اندرکنش‌های نوترون، هسته دختری حداکثر ۳ یا ۴ واحد عدد جرمی زیادتیر یا کمتر از خود می‌تواند تولید کند. برای هسته‌هایی که شکافت می‌دهند، از آنجایی که محصولات

شکافت زیادی وجود دارند و اغلب هسته‌های سبک از طریق شکافت تولید می‌شوند، لذا ستون‌های مربوط به هسته‌های شکافا (چه از طریق شکافت القایی و چه از طریق شکافت خودبه‌خودی) اغلب غیرصفر است؛ یعنی بسیاری از هسته‌ها با احتمالی امکان تولید از یک هسته شکافا را دارند. همچنین هسته‌هایی نظیر هسته هیدروژن، دوتریوم و آلفا از اندرکنش بسیاری از هسته‌ها با نوترون یا واپاشی بسیاری از هسته‌ها به وجود می‌آیند، لذا سطر مربوط به هیدروژن یا ذره آلفا در ماتریس مصرف سوخت، درایه‌های غیرصفر زیادی دارد.

## ۷- حل دستگاه معادلات مصرف سوخت

حل تحلیلی دستگاه معادلات مصرف سوخت (۶-۹) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$N(t) = e^{\int_0^t A(\tau) d\tau} \times N(0) \quad (1-7)$$

یعنی برای به دست آوردن مقدار هسته‌ها در زمان‌های مختلف، باید تابع نمایی انتگرال ضرایب ماتریس مصرف سوخت نسبت به زمان محاسبه شود. ثوابت واپاشی هسته‌ها با زمان تغییر نمی‌کند؛ اما سطح مقطع‌های اندرکنش‌های نوترون با تغییر طیف انرژی نوترون‌ها، تغییر می‌کند. لحاظ کردن تغییرات سطح مقطع‌ها با زمان، حل (۱-۷) را بسیار پیچیده و ناممکن می‌کند. اگر بتوان فرض کرد که در بازه زمانی موردنظر، این تغییرات کم و قابل اغماض است، به طوری که درایه‌های ماتریس مصرف سوخت ثابت باشند، معادله (۱-۷) به صورت زیر در می‌آید:

$$\vec{N}(t) = e^{At} \vec{N}(0) \quad (2-7)$$

عبارت  $e^{At}$  ماتریس نمایی نامیده می‌شود و  $N(0)$  نیز بردار مواد اولیه در ابتدای بازه زمانی است. متأسفانه برای حالت کلی، جواب تحلیلی ماتریس نمایی نمی‌تواند به دست آید. برای نشان دادن پیچیدگی حل تحلیلی، به عنوان مثال، حل تحلیلی ماتریس نمایی  $2 \times 2$  در رابطه (۳-۷) نشان داده شده است.

$$\text{MatrixExp} \left[ \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} \frac{e^{\frac{a+d}{2}} (\alpha \cosh(\frac{\alpha}{2}) + (a-d) \sinh(\frac{\alpha}{2}))}{\alpha} & \frac{2b e^{\frac{a+d}{2}} \sinh(\frac{\alpha}{2})}{\alpha} \\ \frac{2c e^{\frac{a+d}{2}} \sinh(\frac{\alpha}{2})}{\alpha} & \frac{e^{\frac{a+d}{2}} (\alpha \cosh(\frac{\alpha}{2}) + (d-a) \sinh(\frac{\alpha}{2}))}{\alpha} \end{pmatrix} \quad (3-7)$$

که در رابطه بالا  $\alpha = \sqrt{(a-d)^2 + 4bc}$  می‌باشد. همان‌طور که از پیچیدگی ماتریس نمایی مرتبه دو پیداست،

وقتی که تعداد هسته‌ها از چندده تا چندصد باشد، جستجوی یک حل مستقیم برای ماتریس نمایی از روش تحلیلی ناممکن است؛ بنابراین در حل دستگاه معادلات مصرف سوخت، به‌ناچار استفاده از تقریب و حل عددی لازم است.

نکته بسیار مهمی که در حل معادلات مصرف سوخت باید به آن توجه کرد، سختی<sup>۱</sup> این دستگاه معادلات است؛ چراکه معمولاً طیف ماتریس<sup>۲</sup> مصرف سوخت بسیار گسسته است. یک مسئله معادلات دیفرانسیل سخت، مسئله‌ای است که در آن با تغییر کوچکی در پارامترهای حل، تغییرات بزرگی در جواب به وجود آمده و مسئله واگرا می‌شود. منظور از گسستگی طیف ماتریس، دور بودن ویژه‌مقدارهای آن از یکدیگر است. این مسئله بیشتر در درایه‌های روی قطر اصلی ماتریس مصرف سوخت نمایان می‌شود. به عنوان مثال در دستگاه معادلات مصرف سوخت، هسته‌هایی وجود دارند که نیمه‌عمر آن‌ها چند میلیون سال است و هسته‌هایی نیز وجود دارند که نیمه‌عمر آن‌ها کسر بسیار کوچکی از ثانیه است. سختی معادلات مصرف سوخت، باعث مشکلات زیادی در حل عددی این معادلات می‌شود؛ به طوری که معادلات مصرف سوخت به سادگی با هر روش و هر گام زمانی معمولی همگرا نمی‌شوند.

روش‌های عددی مختلفی برای حل دستگاه معادلات دیفرانسیل مرتبه اول مطرح شده است که رویکرد برخی از این روش‌ها تخمین ماتریس نمایی و رویکرد برخی دیگر حل دستگاه معادلات دیفرانسیل است. به طور کلی محاسبه ماتریس نمایی، در حل مسائل بسیاری رشته‌ها به کار می‌آید. در مرجع [۱]، ۱۹ روش مختلف برای محاسبه ماتریس نمایی ارائه شده است؛ ولی با توجه به ابعاد و خصوصیتی که در مسئله مصرف سوخت وجود دارد، تنها چند روش برای محاسبات مصرف سوخت قابل بررسی و اجرا می‌باشد. در ادامه بخش‌های این فصل، روش‌های مختلف عددی به ترتیب از روش‌های قدیمی‌تر و ساده‌تر تا روش‌های جدیدتر و پیچیده‌تر و البته کارآمدتر، توضیح داده می‌شود.

## ۷-۱- روش اویلر<sup>۳</sup>

روش اویلر یک روش ساده عددی بر اساس روش تفاضل محدود<sup>۴</sup> است. با تقریب مشتق زمانی رابطه (۶-۹) با استفاده از تفاضل محدود، رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\frac{d\vec{N}}{dt} \approx \frac{\vec{N}^{l+1} - \vec{N}^l}{\Delta t} = A\vec{N}^l \quad (۴-۷)$$

که  $l$  شماره گام مصرف سوخت را نشان می‌دهد. معادله (۴-۷) می‌تواند به شکل زیر نوشته شود:

<sup>۱</sup> Stiffness

<sup>۲</sup> به مجموعه ویژه‌مقدارهای یک ماتریس، طیف آن ماتریس گفته می‌شود.

<sup>۳</sup> Euler Method

<sup>۴</sup> Finite Difference

$$\vec{N}^{l+1} = (I + A \Delta t) \vec{N}^l \quad (5-7)$$

که در رابطه بالا  $I$  ماتریس واحد است. به این روش، روش صریح<sup>۱</sup> گفته می‌شود، چراکه مقدار هر هسته در انتهای هر گام زمانی تنها به مقدار آن هسته در ابتدای گام بستگی دارد، به عبارت دیگر مقدار نهایی هر هسته، مستقل از مقدار نهایی هسته‌های دیگر است. برای محاسبه مقدار هسته‌ها در این روش، تنها نیاز به یک ضرب ماتریس در بردار مقادیر اولیه است. معادله (۴-۷) را به شکل زیر نیز می‌توان نوشت:

$$\frac{d\vec{N}}{dt} \approx \frac{\vec{N}^{l+1} - \vec{N}^l}{\Delta t} = A \vec{N}^{l+1} \quad (6-7)$$

$$\vec{N}^{l+1} = (I - A \Delta t)^{-1} \vec{N}^l \quad (7-7)$$

در این حالت برای به دست آوردن بردار نهایی مواد، نیاز به حل دستگاه معادلات خطی است. به عبارت دیگر مقدار نهایی هر هسته، با مقدار نهایی هسته‌های دیگر در ارتباط است. لذا به این روش، روش ضمنی<sup>۲</sup> گفته می‌شود. همگرایی عددی روش ضمنی بهتر از روش صریح است، ولی دقت هر دو روش از مرتبه  $O(\Delta t)$  است. روش اویلر برای معادلات دیفرانسیل سخت با مشکل واگرایی مواجه می‌شود.

## ۷-۲- روش رانجی-کوتا<sup>۳</sup>

روش رانجی-کوتا یکی از روش‌های عددی پرکاربرد برای حل معادلات دیفرانسیل با شرط اولیه است. اگرچه مرتبه‌های مختلفی برای روش رانجی-کوتا وجود دارد، بیشتر از روش‌های رانجی-کوتای مرتبه ۲ و ۴ برای محاسبات عددی استفاده می‌شود. در روش رانجی-کوتای مرتبه ۲، روابط زیر استفاده می‌شوند:

$$\vec{d}_1 = \frac{d\vec{N}}{dt}(t^l, \vec{N}^l) \Delta t = A \vec{N}^l \Delta t$$

$$\vec{d}_2 = \frac{d\vec{N}}{dt}\left(t^l + \frac{\Delta t}{2}, \vec{N}^l + \frac{\vec{d}_1}{2}\right) \Delta t = A\left(\vec{N}^l + \frac{\vec{d}_1}{2}\right) \Delta t \quad (8-7)$$

$$\vec{N}^{l+1} = \vec{N}^l + \vec{d}_2$$

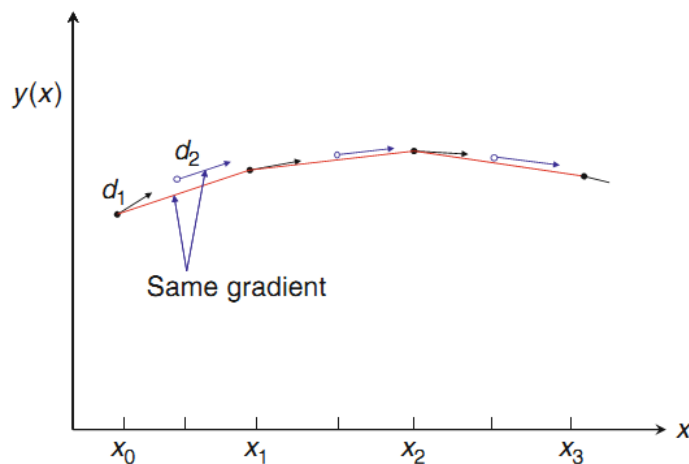
مفهوم اصلی روش رانجی-کوتای مرتبه دوم در شکل ۲ نشان داده شده است، شیب در نقطه وسط گام مصرف سوخت با  $d_2$  تخمین زده می‌شود و از آن برای به دست آوردن چگالی اتمی در گام بعد استفاده می‌شود. از آنجایی که تخمین شیب در وسط یک گام مصرف سوخت، دقت بهتری نسبت به شیب در ابتدای گام می‌دهد، دقت

<sup>۱</sup> Explicit Method

<sup>۲</sup> Implicit Method

<sup>۳</sup> Runge-Kutta

محاسبات از روش اویلر که در آن از شیب در ابتدای گام مصرف سوخت استفاده می‌کند، بیشتر است.



شکل ۲: مفهوم روش رانجی-کوتای مرتبه دوم [۲].

روش رانجی-کوتای مرتبه ۴ از معادلات (۹-۷) استفاده می‌کند:

$$\vec{d}_1 = \frac{d\vec{N}}{dt}(t^l, \vec{N}^l) = A\vec{N}^l \Delta t$$

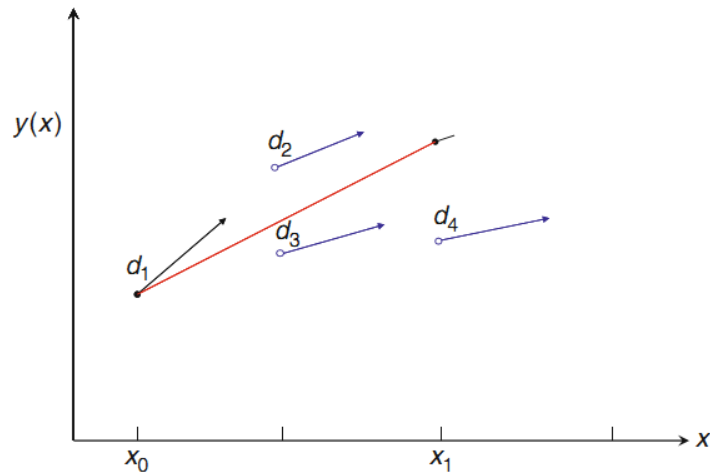
$$\vec{d}_2 = \frac{d\vec{N}}{dt}\left(t^l + \frac{\Delta t}{2}, \vec{N}^l + \frac{\vec{d}_1}{2}\right) = A\left(\vec{N}^l + \frac{\vec{d}_1}{2}\right)\Delta t$$

$$\vec{d}_3 = \frac{d\vec{N}}{dt}\left(t^l + \frac{\Delta t}{2}, \vec{N}^l + \frac{\vec{d}_2}{2}\right) = A\left(\vec{N}^l + \frac{\vec{d}_2}{2}\right)\Delta t \quad (9-7)$$

$$\vec{d}_4 = \frac{d\vec{N}}{dt}(t^l + \Delta t, \vec{N}^l + \vec{d}_3) = A(\vec{N}^l + \vec{d}_3)\Delta t$$

$$\vec{N}^{l+1} = \vec{N}^l + \frac{\vec{d}_1 + 2\vec{d}_2 + 2\vec{d}_3 + \vec{d}_4}{6}$$

اگرچه مفهوم روش رانجی-کوتای مرتبه ۴ شبیه مرتبه ۲ است، در مرتبه ۴ شیب میانگین بین گام‌های مصرف سوخت در وضعیت پیچیده‌تری تخمین زده می‌شود که در شکل ۳ نشان داده شده است. درحالی‌که پیچیدگی الگوریتم هر دو مرتبه، یکسان است، دقت روش رانجی-کوتای مرتبه ۴ بالاتر است؛ اما به هر حال، همگرایی عددی این روش وقتی دستگاه معادلات سخت بوده و نرم ماتریس ضرایب بزرگ باشد، با مشکل مواجه می‌شود.



شکل ۳: مفهوم روش رانجی-کوتای مرتبه چهارم [۲].

### ۷-۳- روش سری تیلور

ماتریس نمایی را می‌توان با بسط تیلور به صورت زیر تخمین زد:

$$e^{A\Delta t} = I + (A\Delta t) + \frac{(A\Delta t)^2}{2!} + \frac{(A\Delta t)^3}{3!} + \dots \quad (۷-۱۰)$$

جملات سری بالا تا بی‌نهایت ادامه دارد. در صورتی می‌توان یک سری نامتناهی را در جمله  $n$ ام قطع کرده و از بقیه جملات آن صرف‌نظر کرد که جملاتی که صرف‌نظر می‌شوند نزولی بوده و به سمت صفر همگرا شوند و همچنین جمله  $n+1$ ام نسبت به جمع  $n$  جمله اول قابل صرف‌نظر باشد یا به عبارت دیگر خطای نسبی ناشی از صرف‌نظر کردن از بی‌نهایت جمله نزولی، از مقدار قابل قبولی کمتر باشد. برای محاسبه بسط بالا باید به ازای هر جمله (از جمله سوم به بعد) یک ضرب ماتریس در ماتریس انجام شود که تعداد این ضرب‌ها تا همگرایی ماتریس نمایی می‌تواند خیلی زیاد باشد. عملیات ضرب ماتریس در ماتریس از مرتبه  $O(n^3)$  است و اگر مرتبه ماتریس بزرگ باشد (که در معادلات مصرف سوخت چنین است)، عملیات ضرب ماتریس در ماتریس بسیار زمان‌گیر خواهد بود. یک راه‌حل مناسب برای اجتناب از ضرب‌های ماتریس در ماتریس در سری (۷-۱۰)، ضرب بردار مواد اولیه در تک‌تک جملات سری تیلور است. ضرب ماتریس در بردار از مرتبه  $O(n^2)$  است و بسیار سریع‌تر از ضرب ماتریس در ماتریس است؛ بنابراین برای محاسبه مقدار نهایی هسته‌ها می‌توان نوشت:

$$\vec{N}(t) = e^{At} \vec{N}(0) = \left( I + (A\Delta t) + \frac{(A\Delta t)^2}{2!} + \frac{(A\Delta t)^3}{3!} + \dots \right) \vec{N}(0) \quad (11-7)$$

$$= \left( \vec{N}(0) + (A\Delta t) \left[ \vec{N}(0) \right] + \frac{(A\Delta t) \left[ (A\Delta t) \vec{N}(0) \right]}{2!} + \frac{(A\Delta t) \left[ (A\Delta t)(A\Delta t) \vec{N}(0) \right]}{3!} + \dots \right) \quad (11-7)$$

عبارات داخل کروشه همگی بردار می‌باشند. نکته مهم در محاسبه (11-7) معیار همگرایی است. برای روشن شدن موضوع، به عنوان مثال سری تیلور برای محاسبه  $e^{-100}$  در رابطه (7-12) آورده شده است.

$$\exp(-100) = 1 + (-100) + \frac{(-100)^2}{2!} + \frac{(-100)^3}{3!} + \dots \quad (12-7)$$

قدر مطلق جملات سری بالا تا جمله صدم همگی صعودی بوده و از جمله صدم به بعد، قدرمطلق جملات نزولی شده و به سمت صفر میل می‌کند. برای به دست آوردن مقدار  $e^{-100}$  باید جملات سری بالا تا رسیدن به همگرایی قابل قبول با هم جمع شوند. مقدار  $e^{-100}$  تقریباً  $4 \times 10^{-44}$  است. بزرگ‌ترین جمله سری بالا از نظر قدرمطلق تقریباً  $10^{42} \sim (-100)^{100}/100!$  است. بنابراین به منظور تخمین مقدار  $e^{-100}$  با پنج رقم معنادار، به  $42+44+5=91$  رقم معنادار برای غلبه بر خطای گرد کردن در محاسبات سری (7-12) نیاز است. تعداد ارقام معنادار در زبان‌های معمول کامپیوتری (مثل Fortran، C و C++) با متغیرهای حقیقی ۸ بایتی، ۱۶ است؛ بنابراین ۹۱ رقم معنادار در هر حالت دست‌نیافتنی است. چنین مشکلی برای محاسبه ماتریس نمایی نیز به وجود می‌آید. مرجع [۳] نشان می‌دهد که در محاسبه ماتریس نمایی، نرم ماتریس ( $|A|$ ) که با رابطه (7-13) تعیین می‌شود، تعیین‌کننده بزرگ‌ترین مقدار در جمع جملات سری تیلور است.

$$|A| = \min \left\{ \max_i \sum_j |a_{ij}|, \max_j \sum_i |a_{ij}| \right\} \quad (13-7)$$

به عبارت دیگر در بسط سری تیلور ماتریس  $A$ ، بزرگ‌ترین جمله از نظر قدرمطلق از مقدار  $(|A|\Delta t)^n/n!$  تجاوز نمی‌کند که  $n = \lceil |A|\Delta t \rceil$  است. در جدول شماره ۱ تعداد ارقام معنادار لازم برای محاسبه تابع نمایی با دقت ۵ رقم معنادار، برای حالت‌های مختلف  $X$  نشان داده شده است. با توجه به محدودیت ۱۶ رقم معنادار در حافظه‌های کامپیوتری معمول، مشخص است که  $|A|\Delta t$  نباید از ۱۴ تجاوز کند. از طرفی به طور معمول، نرم یک ماتریس مصرف سوخت از مرتبه  $10^6$  یا بسیار بالاتر است که با ضرب این مقدار در طول بازه زمانی بر حسب ثانیه، عددی به مراتب بزرگ‌تر از ۱۴ به دست می‌آید. به همین دلیل استفاده از روش سری تیلور برای بسیاری حالات معمول در محاسبات مصرف سوخت غیرممکن بوده و حاصل سری به همگرایی منجر نخواهد شد؛ مگر اینکه شرط

$$|A| \Delta t < 14 \text{ برقرار باشد.}$$

جدول شماره ۱: تعداد ارقام معنادار لازم برای محاسبه تابع نمایی اعداد مختلف.

ارقام معنادار لازم	$X^n/n!$	Exp(-x)	X
15	1.8614e+04	6.1442e-06	12
15	4.8639e+04	2.2603e-06	13
17	1.2746e+05	8.3153e-07	14
17	3.3486e+05	3.0590e-07	15

یک راه برای حل مشکل محدودیت نرم ماتریس مصرف سوخت، استفاده از روش مقیاس گذاری و مربع سازی<sup>۱</sup> است. این روش بر اساس رابطه ریاضی زیر است:

$$\exp(A) = \exp\left(m \frac{A}{m}\right) = \left[\exp\left(\frac{A}{m}\right)\right]^m \quad (۱۴-۷)$$

برای استفاده از این روش ابتدا باید ماتریس مصرف سوخت را بر یک ضریب مثل  $m$  تقسیم کرد؛ به طوری که نرم ماتریس حاصل کوچکتر از ۱۴ شود، سپس ماتریس نمایی را محاسبه کرده و با رساندن ماتریس نمایی به دست آمده به توان  $m$ ، به ماتریس نمایی جواب رسید. در این روش بهتر است  $m$  توانی از ۲ انتخاب شود تا کمترین ضرب ماتریس در ماتریس برای محاسبه ماتریس نمایی انجام شود؛ بنابراین اگر  $m=2^n$  باشد، با  $n$  عمل ضرب به شکل رابطه (۱۵-۷)، می توان ماتریس نمایی اصلی را به دست آورد.

$$A^{2^n} = \left[ A^{2^{n-1}} \right] \left[ A^{2^{n-1}} \right] = \left[ \left[ A^{2^{n-2}} \right] \left[ A^{2^{n-2}} \right] \right] \left[ \left[ A^{2^{n-2}} \right] \left[ A^{2^{n-2}} \right] \right] = \dots \quad (۱۵-۷)$$

برای استفاده از این روش ابتدا باید ماتریس نمایی با نرم کاهش یافته را به دست آورده و سپس آن را در بردار مواد اولیه ضرب کرد و از آنجایی که طبق توضیحات قسمت قبل، معمولاً در محاسبات مصرف سوخت، مرتبه ماتریس بسیار بزرگ است و به دست آوردن ماتریس نمایی به طور مستقل صرفه زمانی ندارد، استفاده از روش مقیاس گذاری و مربع سازی در بسط تیلور صرفه زمانی نخواهد داشت.

#### ۷-۴- روش تجزیه ماتریس<sup>۲</sup>

اگر بتوان ماتریس مصرف سوخت  $A$  را به دو ماتریس  $L$  و  $D$  تجزیه کرد به طوری که  $A = LDL^{-1}$  باشد، آنگاه

<sup>۱</sup> Scaling and squaring

<sup>۲</sup> Matrix Decomposition



محاسبه ماتریس نمایی به صورت رابطه (۱۶-۷) در می‌آید.

$$\begin{aligned}
 e^{A\Delta t} &= I + (LDL^{-1}\Delta t) + \frac{(LDL^{-1}\Delta t)^2}{2!} + \dots \\
 &= LL^{-1} + L(D\Delta t)L^{-1} + \frac{(LDL^{-1}LDL^{-1}\Delta t^2)}{2!} + \dots \\
 &= LL^{-1} + L(D\Delta t)L^{-1} + L\frac{(D\Delta t)^2}{2!}L^{-1} + \dots \quad (۱۶-۷) \\
 &= L(I + (D\Delta t) + \frac{(D\Delta t)^2}{2!} + \dots)L^{-1} \\
 &= L \exp(D\Delta t)L^{-1}
 \end{aligned}$$

معادله (۱۶-۷) نشان می‌دهد که ماتریس نمایی  $A$  را می‌توان با ماتریس نمایی  $D$  جابه‌جا کرد. اگر  $D$  یک ماتریس قطری باشد، ماتریس نمایی تحلیلی آن برابر مقدار تابع نمایی درایه‌های قطر اصلی خواهد بود و نیازی به محاسبات پیچیده ندارد.

$$D = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & 0 \\ & \alpha_2 & & \\ & & \dots & \\ 0 & & & \alpha_n \end{bmatrix} \Rightarrow \exp(D\Delta t) = \begin{bmatrix} \exp(\alpha_1\Delta t) & & & 0 \\ & \exp(\alpha_2\Delta t) & & \\ & & \dots & \\ 0 & & & \exp(\alpha_n\Delta t) \end{bmatrix} \quad (۱۷-۷)$$

در این روش پس از اینکه ماتریس  $A$  تجزیه شد، ماتریس نمایی با ماتریس‌های تجزیه شده  $L$  و  $D$  محاسبه می‌شود. به عملیات تجزیه ماتریس  $A$  به ماتریس قطری  $D$  و ماتریس  $L$ ، قطری‌سازی ماتریس گفته می‌شود که معادل محاسبه همه ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای ماتریس  $A$  می‌باشد. در واقع درایه‌های قطری ماتریس  $D$  همان ویژه‌مقدارها و ستون‌های ماتریس  $L$  همان ویژه‌بردارها می‌باشند. به طور کلی، محاسبه ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای یک ماتریس، زمان محاسبه زیادی نیاز دارد و برای مرتبه‌های بزرگ مثل مسائل مصرف سوخت، مصرف زمانی غیرعملی و خطای محاسباتی زیاد دارد؛ اما چنانچه معادله مصرف سوخت به صورت رابطه (۱۸-۷) تقریب زده شود، ماتریس قطری  $D$  به راحتی می‌تواند به دست آید.

$$\begin{aligned}
 \frac{dN_i}{dt} &= \sum_j \gamma_{ji} \sigma_{f,j} N_j \phi + \sigma_{c,i-1} N_{i-1} \phi + \lambda_{i-1} N_{i-1} - \sigma_{a,i} N_i \phi - \lambda_i N_i \\
 &\approx F_i + (\sigma_{c,i-1} \phi + \lambda_{i-1}) N_{i-1} - (\sigma_{a,i} \phi + \lambda_i) N_i \quad (۱۸-۷)
 \end{aligned}$$

که در رابطه بالا  $F_i$  نرخ تولید هسته  $i$  از همه واکنش‌های شکافت است. معادله (۱۸-۷) در نکات زیر با معادله مصرف سوخت (۸-۶) اختلاف دارد:

الف- در معادله مصرف سوخت (۷-۱۸) نرخ تولید هر هسته از واکنش شکافت ( $F_i$ ) ثابت فرض شده است.

ب- در معادله (۷-۱۸) تولید هر هسته تنها از یک هسته قبلی در نظر گرفته شده است.

با داخل کردن فرضیات بالا، ماتریس مصرف سوخت به صورت زیر در می‌آید:

$$\frac{d\vec{N}}{dt} = A\vec{N} + \vec{F}$$

$$A = \begin{bmatrix} -\sigma_{a,1} - \lambda_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \sigma_{c,1} + \lambda_1 & -\sigma_{a,2} - \lambda_2 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & \dots & -\sigma_{a,n-1} - \lambda_{n-1} & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \sigma_{c,n-1} + \lambda_{n-1} & -\sigma_{a,n} - \lambda_n \end{bmatrix} \quad (19-7)$$

قطری‌سازی ماتریس  $A$  در رابطه بالا راحت است. ماتریس‌های  $L$  و  $D$  به صورت زیر فرض می‌شوند:

$$L = \begin{bmatrix} l_{1,1} & l_{2,1} & \dots & \dots & l_{n,1} \\ l_{1,2} & l_{2,2} & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & l_{n-1,n-1} & \dots \\ l_{1,n} & \dots & \dots & \dots & l_{n,n} \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} \alpha_1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_2 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \alpha_{n-1} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \alpha_n \end{bmatrix} \quad (20-7)$$

رابطه  $A = LDL^{-1}$  را می‌توان به  $AL = LD$  تغییر داد. با مقایسه هر درایه ماتریس در رابطه بالا، روابط زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} (-\sigma_{a,1} - \lambda_1)l_{1,1} &= l_{1,1}\alpha_1 \\ (\sigma_{c,1} + \lambda_1)l_{1,1} + (-\sigma_{a,2} - \lambda_2)l_{1,2} &= l_{1,2}\alpha_1 \end{aligned} \quad (21-7)$$

از آنجایی که روابط بالا، بازگشتی هستند، درایه‌های ماتریس  $L$  و  $D$  به راحتی به دست می‌آید. در اینجا بردار ستونی ماتریس  $L$ ، ویژه‌بردار است، پس آن را می‌توان به طور دلخواه بهنجار کرد. حل تحلیلی (۷-۲۰) به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} \vec{N}^{l+1} &= \exp(A\Delta t) \left[ \vec{N}^l - A^{-1}\vec{F} \right] + A^{-1}\vec{F} \\ &= L \exp(D\Delta t) L^{-1} \left[ \vec{N}^l - A^{-1}\vec{F}^l \right] + A^{-1}\vec{F}^l \end{aligned} \quad (22-7)$$

وارون ماتریس  $A$  به صورت  $A^{-1} = LD^{-1}L^{-1}$  به دست می‌آید.

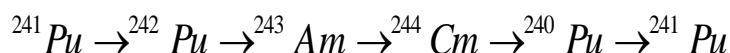
روش تجزیه ماتریس مشکلات زیر را دارد:

الف- همان طور که در (۷-۱۸) نشان داده شده، تولید یک هسته به یک شکافت و هسته قبلی محدود می‌شود؛ بنابراین یک زنجیره مصرف سوخت پیچیده که گیراندازی نوترون، واپاشی  $\alpha$  و  $\beta$  و واکنش‌های  $(n, 2n)$  و ... را در بر دارد، به طور دقیق نمی‌تواند در این روش مورد محاسبه قرار گیرد و باید برای آن تقریب‌هایی به کار رود.

ب- همه زنجیره‌های مصرف سوخت باید خطی شوند که این فرایندی زمان‌گیر است.

ج- وقتی نرخ از بین رفتن دو هسته، یکسان باشد، یک مشکل عددی (تقسیم بر صفر) ظاهر می‌شود.

د- یک زنجیره مصرف سوخت دوری<sup>۱</sup> نمی‌تواند اعمال شود. منظور از زنجیره مصرف سوخت دوری، زنجیره‌ای است که در آن، یک هسته به تولید خودش منجر می‌شود. برای مثال، زنجیره مصرف سوخت زیر



یک زنجیره دوری است.

ه- با وجود همه محاسبات زمان‌گیر و تقریب‌های به کار رفته، برای حل نهایی طبق (۷-۲۲) نیاز به حل دو دستگاه معادلات خطی به شکل (۷-۲۳) است.

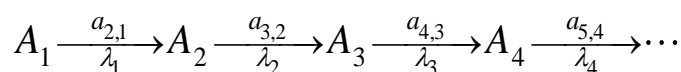
$$\vec{X} = A^{-1}\vec{F}^t$$

$$\vec{Y} = L^{-1}[\vec{N}^t - \vec{X}] \quad (7-23)$$

در کل روش تجزیه ماتریس برای اعمال روی زنجیره‌های مصرف سوخت خیلی پیچیده، به دلیل استفاده از تقریب‌های خیلی زیاد و عدم صرفه زمانی به دلیل محاسبات طولانی مناسب نیست و توصیه نمی‌شود.

## ۷-۵- روش بیت‌من<sup>۲</sup>

روش بیت‌من از یک حل تحلیلی برای معادلات دیفرانسیل مرتبه اول خطی استفاده می‌کند. در واقع اساس این روش برای یک زنجیره مصرف سوخت مستقل و خطی است. به عنوان مثال زنجیره خطی زیر که در آن هر هسته با نرخ  $\lambda_i$  در حال از بین رفتن و با نرخ  $a_{i+1,i}$  در حال تبدیل به هسته بعد از خود می‌باشد، در نظر گرفته می‌شود:



معادله دیفرانسیل حاکم بر هر هسته در زنجیره بالا به صورت زیر در می‌آید:

<sup>۱</sup> Cyclic

<sup>۲</sup> Bateman

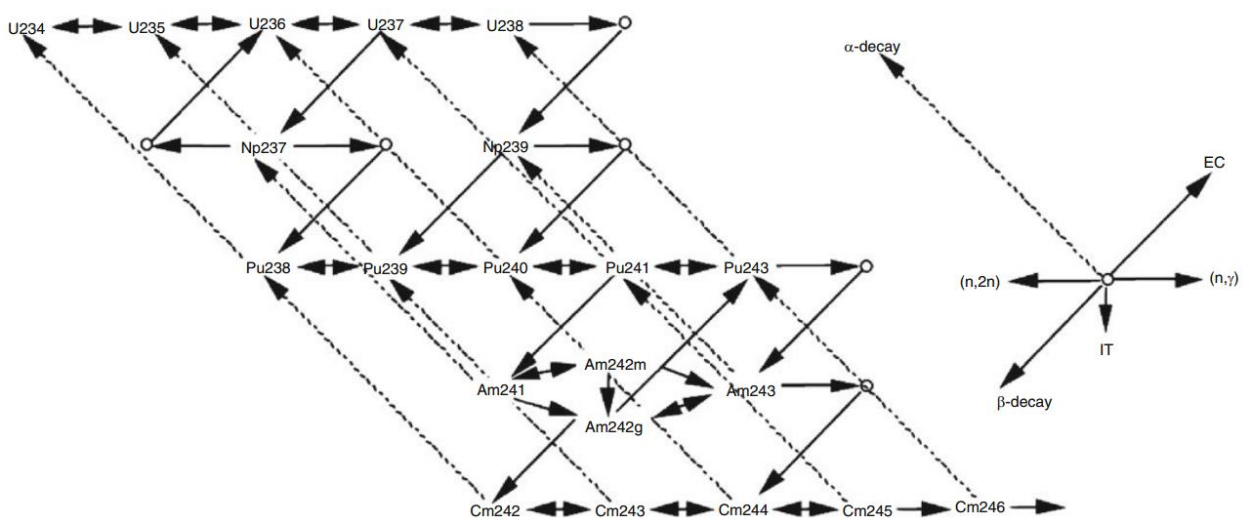
$$\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 N_1 \quad (24-7)$$

$$\frac{dN_i}{dt} = a_{i,i-1} N_{i-1} - \lambda_i N_i \quad i = 2, 3, \dots$$

حل تحلیلی دستگاه معادلات (۲۴-۷) در زیر آمده است.

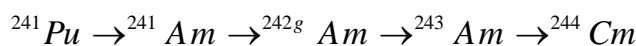
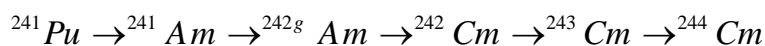
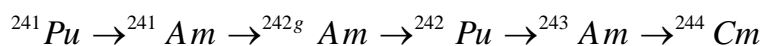
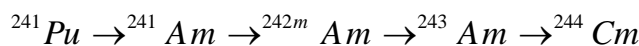
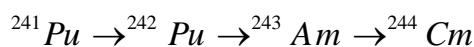
$$N_i(t + \Delta t) = N_i(t) \exp(-\lambda_i \Delta t) + \sum_{k=1}^{i-1} N_k(t) \left[ \sum_{j=k}^{i-1} \frac{\exp(-\lambda_j \Delta t) - \exp(-\lambda_i \Delta t)}{\lambda_i - \lambda_j} a_{j+1,j} \prod_{\substack{n=k \\ n \neq j}}^{i-1} \frac{a_{n+1,n}}{\lambda_n - \lambda_j} \right] \quad (25-7)$$

جمله دوم در رابطه (۲۵-۷) سهم تولید هسته نام از  $k$ امین هسته در زنجیره است؛ لذا عبارات داخل کروشه همگی مثبت می‌باشند. برای استفاده از این روش، باید فرض شود که همه زنجیره‌ها، خطی و مستقل از یکدیگر هستند. از طرفی باید دقت شود که آنچه در رابطه (۲۵-۷) مهم است، نرخ از بین رفتن و تبدیل هسته‌ها به یکدیگر است و چگونگی آن فرق نمی‌کند (چه از طریق واپاشی باشد، چه از طریق اندرکنش نوترون). به عبارت دیگر در روابط روش بیت‌من، هر جا ثابت واپاشی یا  $\lambda$  نوشته می‌شود، منظور نرخ از بین رفتن هسته است. برای استفاده از روش بیت‌من، مشابه روش تجزیه ماتریس، باید همه زنجیره‌های مصرف سوخت خطی شده و به صورت مستقل از هم در نظر گرفته شوند. همچنین اگر دو هسته با ثابت واپاشی یکسان در یک زنجیره خطی وجود داشته باشد، مخرج عبارت داخل کروشه در (۲۵-۷) صفر می‌شود. مشکل دیگر اینکه حل (۲۵-۷) زنجیره‌های دارای دور را شامل نمی‌شود که در ادامه در مورد روش برطرف کردن این مشکلات توضیحاتی ارائه می‌شود. یک زنجیره مصرف سوخت نوعی برای هسته‌های سنگین در شکل ۴ نشان داده شده است.



شکل ۴: یک زنجیره مصرف سوخت نمونه برای هسته‌های سنگین [۴].

برای مثال، در این زنجیره، تولید  $^{244}\text{Cm}$  از  $^{241}\text{Pu}$  از ۵ مسیر جداگانه ممکن است. این مسیرها در زیر نشان داده شده است.



در واقع در خطی‌سازی زنجیره، همه مسیرهای تولید  $^{244}\text{Cm}$  از  $^{241}\text{Pu}$  به طور مستقل در نظر گرفته می‌شوند. پیاده‌سازی عملیات خطی‌سازی در یک زنجیره مصرف سوخت واقعی و جزئی، عملیاتی پیچیده است و تعداد معادلات مصرف سوخت را به طور قابل توجهی افزایش می‌دهد. همچنین طول زنجیره‌های مصرف سوخت خطی شده می‌تواند بسیار طولانی شود که این نیز تأثیر زیادی در سرعت اجرای الگوریتم می‌گذارد. از طرفی در یک زنجیره خطی معمولاً تأثیر یک هسته روی هسته‌های نسل‌های بعدی با افزایش نسل کم می‌شود. بنابراین می‌توان معیاری تعریف کرد تا به کمک آن بتوان از تأثیر یک هسته روی یک نسل به بعد از آن صرف‌نظر شود. این معیار می‌تواند کوچک شدن و قابل صرف‌نظر بودن سهم تولید هسته مادر اولیه در تولید یک نسل به بعد باشد. حاصل ضرب نسبت ضریب تبدیل به ثابت واپاشی هسته‌ها در یک زنجیره خطی  $(\prod a_{n+1,n} / \lambda_n)$  می‌تواند معیار خوبی برای سهم تبدیل باشد. اگر این حاصل ضرب از مقدار قابل قبولی کمتر شد، می‌توان از ادامه نسل‌های یک زنجیره در محاسبات صرف‌نظر کرد.

یکی از مشکلات دیگر که در خطی‌سازی زنجیره‌های مصرف سوخت وجود دارد، زنجیره‌های دوری است. تجربه نشان داده که با صرف‌نظر از محاسبات زنجیره‌های دوری، خلل چندانی به دقت محاسبات وارد نمی‌شود. لذا هر جا در عملیات خطی‌سازی و در جستجوی هسته‌های دختر نسل‌های مختلف یک هسته، به خود هسته مادر اولیه برخورد شد، از ادامه آن زنجیره می‌توان صرف‌نظر نمود.

مشکل دیگری که در معادله بیت‌من وجود دارد، مساوی بودن ثابت واپاشی دو هسته در یک زنجیره است که باعث می‌شود کسر داخل کروسه در معادله (۷-۲۵)، مبهم (صفر روی صفر) شود. برای حل این مشکل نیز یک راه، پیدا کردن حل تحلیلی مربوط به حالت تساوی ثوابت واپاشی است. یک راه ساده‌تر این است که ثوابت  $\lambda$  که در مخرج کسر، مقدار یکسانی دارند مقدار کوچکی تغییر داده شوند تا کسر مربوطه از حالت مبهم صفر روی صفر خارج شده و یک مقدار تقریبی برای حد کسر مبهم به دست بیاید. به عنوان مثال در محاسبه کسر  $(e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}) / (\lambda_2 - \lambda_1)$  اگر  $\lambda_1 = \lambda_2$  باشد، می‌توان  $\lambda_2$  را به یک مقدار کوچک  $\Delta$  تغییر داد و مقدار تقریبی حد مربوطه را به دست آورد.

همین طور اگر  $k$  تا  $\lambda$  برابر در مخرج وجود داشته باشد، می توان با این تغییر،  $(k-1)$  ضریب جدید به این صورت تولید کرد:  $\lambda, \lambda+1, \lambda+2, \dots, \lambda+(k-1)$  ولی در حالت های پیچیده با ثوابت تکراری و نزدیک به هم این روش جواب خوبی نمی دهد، لذا حل تحلیلی به نوعی لازم است که در قسمت بعدی توضیحی در مورد آن می آید.

### ۷-۵-۱- حل تحلیلی معادله بیت من در حالت کلی تر [۵]

چنانچه یک زنجیره خطی شامل  $n$  هسته در نظر گرفته شود که در آن  $i$  امین ثابت واپاشی به تعداد  $m_i$  بار تکرار شده باشد (یعنی  $m_i$  تا هسته در آن زنجیره همان ثابت واپاشی را داشته باشند) و در این زنجیره به تعداد  $d$  تا ثابت واپاشی نابرابر وجود داشته باشد، به طوری که  $\sum_{i=1}^d m_i = n$ ، در این صورت حل تحلیلی کلی برای چنین زنجیره خطی به صورت زیر است:

$$N_n(t) = N_1(0) \frac{B_n}{\lambda_n} \sum_{i=1}^d \lambda_i \alpha_i e^{-\lambda_i t} \sum_{m=0}^{m_i} \frac{(\lambda_i t)^m}{m!} \Omega_{i, \mu_i - m} \quad (26-7)$$

که در رابطه بالا  $\mu_i = m_i - 1$  است و برای سادگی نمایش استفاده شده است و نیز پارامترهای  $B, \alpha$  و  $\Omega$  در زیر تعریف شده اند.

$$B_n = \prod_{j=1}^{n-1} \frac{\alpha_{j+1, j}}{\lambda_j},$$

$$\alpha_i = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^d \left( \frac{\lambda_j}{\lambda_j - \lambda_i} \right)^{m_j}, \quad (27-7)$$

$$\Omega_{i, j} = \sum_{h_1=0}^j \sum_{h_2=0}^j \dots \sum_{h_d=0}^j \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^d \binom{h_k + \mu_k}{\mu_k} \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_i - \lambda_k} \right)^{h_k} \delta \left( j, \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^d h_l \right)$$

که در رابطه بالا  $\delta$  همان تابع دلتای کرونیکر<sup>۱</sup> است که به صورت زیر تعریف می شود:

$$\delta(i, j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (28-7)$$

چنانچه در زنجیره مورد نظر هیچ ثابت واپاشی تکراری وجود نداشته باشد، به عبارتی برای همه  $i$  ها،  $m_i = 1$  باشد، جواب (۲۶-۷) به جواب (۲۵-۷) تبدیل می شود.

<sup>۱</sup> Kronecker delta

### ۷-۶- روش به کار رفته در کد ORIGEN2 (تلفیق روش بیت من و تیلور)

برای حل معضل نرم ماتریس مصرف سوخت و همچنین سختی این معادلات، کد ORIGEN2 ایده‌ای ارائه و استفاده کرده است. همان‌طور که در بخش ۷-۳ اشاره شد، محدودیت نرم ماتریس برای محاسبات، با توجه به محدودیت تعداد ارقام معنادار در حافظه یارانه، حدود ۱۴ است. کد ORIGEN2 برای اعمال این محدودیت حد  $|A|\Delta t \leq -2\ln(0.001)$  را در نظر می‌گیرد. از آنجایی که معمولاً جمع درایه‌های هر ستون در ماتریس مصرف سوخت برابر قدرمطلق درایه قطر اصلی می‌شود، با بررسی قطر اصلی ماتریس کوچک‌تر از نصف مقدار حدی  $2\ln(1000)$ ، این محدودیت می‌تواند ارضا شود. در واقع اگر قطر اصلی کوچک‌تر از ۷ باشد، معادل با این است که جمع کل درایه‌های ستون، کوچک‌تر از ۱۴ باشد. به عبارت دیگر کد ORIGEN2 با محدودیت گذاشتن روی  $\exp(-\lambda\Delta t) < 0.001$  که درایه روی قطر اصلی است، محدودیت نرم ماتریس را ارضا می‌کند. برای این کار، همه هسته‌هایی را که برای آن‌ها  $\exp(-\lambda\Delta t) > 0.001$  باشد، به عنوان هسته کوتاه‌عمر در نظر گرفته و از دستگاه معادلات جدا می‌کند. این شرط معادل با این است که هسته‌های کوتاه‌عمر، هسته‌هایی هستند که نیمه‌عمر آن‌ها از یک‌دهم بازه مصرف سوخت کوچک‌تر باشد و بقیه هسته‌ها که نیمه‌عمر آن‌ها از یک‌دهم بازه مصرف سوخت بیشتر باشد، به عنوان هسته بلندعمر تعریف می‌شوند. این معادله در زیر نشان داده شده است.

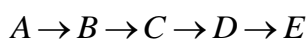
$$\exp(-\lambda\Delta t) > 0.001 \quad \text{Long\_lived nuclide}$$

$$-\lambda\Delta t > -\ln(1000) > -\ln(1024)$$

$$\begin{cases} \lambda\Delta t < 10\ln(2) \\ \lambda = \frac{\ln(2)}{T_{hl}} \end{cases} \Rightarrow \frac{\ln(2)}{T_{hl}} \Delta t < 10\ln(2) \quad (29-7)$$

$$T_{hl} > \Delta t / 10$$

در روابط بالا  $T_{hl}$  همان نیمه‌عمر هسته است. کد ORIGEN2 از ویژگی روش‌های بیت من و بسط تیلور برای غلبه بر مشکل حل عددی معادلات مصرف سوخت استفاده می‌کند. جدا کردن هسته‌های کوتاه‌عمر از دستگاه معادلات بدین صورت است که ابتدا الگوریتم روش بیت من را روی زنجیره‌های خطی برای هسته‌های کوتاه‌عمر پیاده می‌کند. در حین پیدا کردن نسل‌های مختلف یک زنجیره، اگر با هسته بلندعمری برخورد کند، زنجیره را همان‌جا قطع کرده و با استفاده از معادلات بیت من و مفهوم بالانس در زنجیره‌های مصرف سوخت، یک درایه معادل برای جایگزین هسته‌های کوتاه‌عمر حذف‌شده از زنجیره حساب می‌کند. به عنوان مثال زنجیره نوعی زیر را در نظر بگیرید:



چنانچه هسته‌های B، C و D در زنجیره بالا کوتاه‌عمر باشند، معادلات بیت من روی زنجیره  $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D$

اعمال شده و هسته‌های کوتاه‌عمر از دستگاه معادلات حذف می‌شوند، یعنی زنجیره مصرف سوخت بالا به زنجیره  $A \rightarrow E$  تبدیل می‌شود و یک نرخ تبدیل معادل برای تبدیل  $A$  به  $E$  در دستگاه معادلات هسته‌های بلندعمر محاسبه و جایگزین می‌شود. این درایه جایگزین در کد ORIGEN2 بر اساس مفهوم بالانس جرم در زنجیره محاسبه می‌شود. اگر اولین هسته در زنجیره شماره ۱ و آخرین هسته شماره  $n$  داشته باشد و در این زنجیره به جز اولین و آخرین هسته، همگی هسته‌ها کوتاه‌عمر باشند (از هسته ۲ تا هسته  $n-1$ )، نرخ تبدیل معادل هسته ۱ به هسته  $n$  پس از حذف هسته‌های کوتاه‌عمر با رابطه (۳۰-۷) محاسبه می‌شود.

$$a_{n,1} = \lambda_1 \times \left[ \prod_{k=1}^{n-1} \frac{a_{k+1,k}}{\lambda_k} \right] \times \left( 1 - \frac{B}{1 - e^{-\lambda_1 \Delta t}} \right)$$

$$B = \sum_{i=2}^{n-1} \prod_{k=1}^{i-1} \lambda_k \left[ \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\exp(-\lambda_j \Delta t) - \exp(-\lambda_i \Delta t)}{\prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^i (\lambda_k - \lambda_j)} \right] \quad (30-7)$$

پس از انجام خطی‌سازی و محاسبات زنجیره‌های هسته‌های کوتاه‌عمر، یک دستگاه معادلات برای هسته‌های بلندعمر باقی می‌ماند که نرم آن محدودیت کمتر از ۱۴ را ارضا می‌کند؛ لذا هیچ مشکل عددی و همگرایی برای حل دستگاه معادلات هسته‌های بلندعمر وجود نخواهد داشت. در ضمن سختی این دستگاه معادلات، با حذف هسته‌های کوتاه‌عمر رفع می‌شود و این دستگاه را با روش‌های معمول حل دستگاه دیفرانسیل مرتبه اول می‌توان حل نمود. به عنوان آخرین مرحله از محاسبات فرض می‌شود در پایان بازه مصرف سوخت، هسته‌های کوتاه‌عمری که مادر بلندعمر دارند، در تعادل پایدار<sup>۱</sup> با هسته مادر خود باشند، به عبارت دیگر برای چنین هسته‌هایی در انتهای بازه زمانی، نرخ تغییرات هسته صفر می‌شود:

$$\frac{dN_i}{dt} = 0 = \sum_{j=1}^n a_{i,j} N_j \quad (31-7)$$

دستگاه معادلات خطی (۳۱-۷) را می‌توان با روش تکرار به صورت زیر حل نمود.

$$N_i^{k+1} = -\frac{1}{a_{i,i}} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{i,j} N_j^k \quad (32-7)$$

از آنجایی که درایه‌های روی قطر اصلی ماتریس از نظر قدرمطلق مساوی با جمع سایر درایه‌ها می‌باشند، لذا این

<sup>۱</sup> Secular Equilibrium



الگوریتم شرط کافی برای همگرایی را دارد.

### ۷-۷- تقریب پید

تقریب پید مرتبه  $(p, q)$  برای تابع نمایی به صورت زیر ارائه می‌شود:

$$\exp(x) \cong \frac{N_{pq}(x)}{D_{pq}(x)}$$

$$N_{pq}(x) = \sum_{k=0}^p \frac{(p+q-k)! p!}{(p+q)! k! (p-k)!} x^k \quad (33-7)$$

$$D_{pq}(x) = \sum_{k=0}^q \frac{(p+q-k)! q!}{(p+q)! k! (q-k)!} (-x)^k$$

معادله (۳۳-۷) وقتی  $q=0$  باشد، همان بسط سری تیلور خواهد شد:

$$\frac{N_{p0}(x)}{D_{p0}(x)} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^p}{p!} \quad (34-7)$$

برای محاسبه ماتریس نمایی از تقریب پید، از روابط (۳۳-۷) به شکل زیر استفاده می‌شود:

$$\exp(A \Delta t) \cong \frac{N_{pq}(A \Delta t)}{D_{pq}(A \Delta t)} \quad (35-7)$$

در حالت کلی همگرایی تقریب پید از بسط سری تیلور سریع‌تر است. البته باید توجه داشت که همگرایی تقریب پید به زوج  $p$  و  $q$  انتخاب شده بسیار وابسته است. تقریب پید با مرتبه  $p=q$  که به آن تقریب پید قطری<sup>۱</sup> گفته می‌شود، به دلیل مزایای خاصی که در زمان محاسبه و پایداری عددی می‌دهد، مکرر استفاده می‌شود. مرجع [۶] با توجه به سرعت همگرایی تقریب پید و استفاده از روش مقیاس‌گذاری و مربع‌سازی، ضرایب بهینه‌ای را برای تقریب پید قطری از مرتبه ۱۳ محاسبه کرده است. ضرایب بهینه شده برای حالتی که نرم ماتریس حدود ۵/۳۷ باشد، در جدول شماره ۲ آمده است.

<sup>۱</sup> Diagonal Padé approximation

جدول شماره ۲: ضرایب بهینه شده برای تقریب پید قطری مرتبه ۱۳ [۶].

شماره ضریب	مقدار ضریب	شماره ضریب	مقدار ضریب
c(1)	64,764,752,532,480,000	c(8)	33,522,128,640
c(2)	32,382,376,266,240,000	c(9)	1,323,241,920
c(3)	7,771,770,303,897,600	c(10)	40,840,800
c(4)	1,187,353,796,428,800	c(11)	960,960
c(5)	129,060,195,264,000	c(12)	16,380
c(6)	10,559,470,521,600	c(13)	182
c(7)	670,442,572,800	c(14)	1

برای استفاده از این ضرایب، باید چندجمله‌ای‌های  $U$  و  $V$  مطابق رابطه (۳۶-۷) محاسبه شود.

$$\begin{aligned}
 U &= c(14) \times A^{13} + c(12) \times A^{11} + c(10) \times A^9 + c(8) \times A^7 + c(6) \times A^5 + c(4) \times A^3 + c(2) \times A^1 \\
 V &= c(13) \times A^{12} + c(11) \times A^{10} + c(9) \times A^8 + c(7) \times A^6 + c(5) \times A^4 + c(3) \times A^2 + c(1) \times I \\
 N_{pq} &= V + U \\
 D_{pq} &= V - U
 \end{aligned}
 \tag{۳۶-۷}$$

که  $N_{pq}$  چندجمله‌ای صورت و  $D_{pq}$  چندجمله‌ای مخرج در رابطه (۳۵-۷) است که از تقسیم این دو چندجمله‌ای، ماتریس نمایی به دست می‌آید. برای استفاده از این روش در محاسبات مصرف سوخت، از روابط (۳۷-۷) استفاده می‌شود:

$$\begin{aligned}
 \exp(A\Delta t) &\cong N_{pq}(A\Delta t) \times D_{pq}(A\Delta t)^{-1} \\
 N(t + \Delta t) &= \exp(A\Delta t) \times N(t) = N_{pq}(A\Delta t) \times D_{pq}(A\Delta t)^{-1} \times N(t) \\
 F &= D_{pq}(A\Delta t)^{-1} \times N(t) \\
 N(t + \Delta t) &= N_{pq}(A\Delta t) \times F
 \end{aligned}
 \tag{۳۷-۷}$$

در واقع برای به دست آوردن بردار مواد نهایی، ابتدا باید یک دستگاه معادلات خطی  $F = D_{pq}(A\Delta t)^{-1} \times N(t)$  حل شده و سپس ماتریس صورت ( $N_{pq}$ ) در جواب آن ( $F$ ) ضرب شود.

چنانچه  $5.37 \gg |A| \Delta t$  باشد، باید با استفاده از روش مقیاس‌گذاری و مربع‌سازی، درایه‌های ماتریس مصرف سوخت بر عددی مثل  $m$  تقسیم شود تا  $|A| \Delta t \approx 5.37$  شود. سپس برای به دست آوردن جواب نهایی، باید  $m$  مرتبه عمل حل دستگاه معادلات خطی و ضرب ماتریس در بردار انجام شود. به عنوان مثال اگر  $m=2$  باشد، برای به دست آوردن بردار مواد نهایی باید به شکلی که در زیر نشان داده شده، دو بار حل دستگاه معادلات خطی و دو بار ضرب ماتریس در بردار انجام شود:

$$\begin{aligned} \exp(A\Delta t) &= [\exp(A\Delta t / 2)]^2 = [\exp(A\Delta t / 2)] \times [\exp(A\Delta t / 2)] \\ &= [N_{pq}(A\Delta t / 2) \times D_{pq}(A\Delta t / 2)^{-1}] \times [N_{pq}(A\Delta t / 2) \times D_{pq}(A\Delta t / 2)^{-1}] \end{aligned}$$

$$N(t + \Delta t) = [N_{pq}(A\Delta t / 2) \times D_{pq}(A\Delta t / 2)^{-1}] \times [N_{pq}(A\Delta t / 2) \times D_{pq}(A\Delta t / 2)^{-1}] \times N(t) \quad (38-7)$$

$$F_1 = D_{pq}(A\Delta t / 2)^{-1} \times N(t)$$

$$F_2 = N_{pq}(A\Delta t / 2) \times F_1$$

$$F_3 = D_{pq}(A\Delta t / 2)^{-1} \times F_2$$

$$N(t + \Delta t) = N_{pq}(A\Delta t / 2) \times F_3$$

در صورتی که  $|A|\Delta t$  خیلی بزرگتر از  $5/37$  باشد (که در محاسبات مصرف سوخت معمول نیز چنین است)، استفاده از تقریب پید صرفه زمانی قابل قبولی نخواهد داشت.

### ۷-۸- روش زیرفضای کریلوف<sup>۱</sup>

با توجه به اینکه در محاسبات مصرف سوخت نیازی به محاسبه ماتریس نمایی به طور مستقل نیست و نیز با توجه به اینکه ماتریس مصرف سوخت، یک ماتریس به شدت اسپارس<sup>۲</sup> است، می توان برای حل دستگاه معادلات مصرف سوخت از روش زیرفضای کریلوف استفاده کرد. توضیحات تئوری مفصل این روش توسط مرجع [۷] داده شده است. یک خلاصه از تئوری روش زیرفضای کریلوف در اینجا ارائه می شود.

در رابطه (۷-۳۹) بسط سری تیلور برای محاسبه جواب دستگاه معادلات مصرف سوخت تا جمله  $(m-1)$ ام، نشان داده شده است:

$$\vec{N}(t + \Delta t) \cong c_0 \vec{N}(t) + c_1 (A\Delta t)^1 \vec{N}(t) + c_2 (A\Delta t)^2 \vec{N}(t) + \dots + c_{m-1} (A\Delta t)^{m-1} \vec{N}(t) \quad (39-7)$$

که در رابطه بالا  $c_k = 1/k!$  است. گروه بردارهایی که در بسط (۷-۳۹) ظاهر می شود، به عنوان زیرفضای کریلوف شناخته شده و به صورت زیر تعریف می شود:

$$K_m(A\Delta t, \vec{N}(t)) = \text{span} \{ \vec{N}(t), (A\Delta t)\vec{N}(t), (A\Delta t)^2\vec{N}(t), \dots, (A\Delta t)^{m-1}\vec{N}(t) \} \quad (40-7)$$

معادله (۷-۳۹) مثالی از یک چندجمله ای است که تقریب  $\vec{N}(t + \Delta t)$  را با زیرفضای کریلوف مرتبه  $m$ ام، برآورد می کند. در روش زیرفضای کریلوف با توجه به ماتریس  $A$ ، ضرایب  $c_k$ ، برای کمینه کردن مربع باقیمانده خطای تخمین برای  $\vec{N}(t + \Delta t)$  انتخاب می شود؛ در حالی که در روش های قبلی (مثل روش بسط تیلور) صرف نظر از ماتریس

<sup>۱</sup> Krylov subspace

<sup>۲</sup> Sparse

مصرف سوخت، از  $c_k = 1/k$  استفاده می‌شود. در واقع مزیت عمده روش زیرفضای کريلوف، در انتخاب ضرایب بسط چندجمله‌ای متناسب با ماتریس ضرایب است. روش‌های سری تیلور و رانجی-کوتا می‌توانند انواعی از روش زیرفضای کريلوف با ضرایب بسط ثابت محسوب شوند.

برای استفاده از روش کريلوف ابتدا باید یک پایه متعامد<sup>۱</sup> برای زیرفضای کريلوف ساخته شود. یکی از روش‌های متعامدسازی، الگوریتم آرنولدی<sup>۲</sup> است که در شکل ۵ نشان داده شده است. در این الگوریتم، منظور از علامت  $\| \cdot \|_2$  نرم نوع ۲ است که برای بردارها همان طول بردار می‌شود.

$$\vec{F} = (v_1, v_2, \dots, v_n)$$

$$\|\vec{F}\|_2 = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + \dots + v_n^2} \quad (41-7)$$

- 1)  $\beta = \|\vec{N}(t)\|_2$
- 2)  $\vec{v}_1 = \vec{N}(t) / \beta$
- 3) DO  $j = 1$  to  $m$
- 4)  $\vec{p} = A\vec{v}_j$
- 5) DO  $i = 1$  to  $j$
- 6)  $h_{i,j} = \vec{v}_i^T \vec{p}$
- 7)  $\vec{p} = \vec{p} - h_{i,j} \vec{v}_i$
- 8) END DO  $i$
- 9)  $h_{j+1,j} = \|\vec{p}\|_2$
- 10)  $\vec{v}_{j+1} = \vec{p} / h_{j+1,j}$
- 11) END DO  $j$

شکل ۵: الگوریتم متعامدسازی آرنولدی.

خطوط ۵ تا ۷ از الگوریتم آرنولدی، مراحل تولید یک پایه متعامد بر اساس روال متعامدسازی گرام-اشمیت<sup>۳</sup> است؛ در واقع الگوریتم آرنولدی یک بسط از الگوریتم گرام-اشمیت است. از طریق الگوریتم شکل ۵ می‌توان  $A\vec{v}_j$  را به صورت ترکیبی خطی از  $v_1, v_2, v_3, \dots, v_{j+1}$  نوشت. بنابراین:

<sup>۱</sup> Orthogonal Basis

<sup>۲</sup> Arnoldi procedure

<sup>۳</sup> Gram-Schmidt orthogonal procedure

$$AV_m = V_m H_m + h_{m+1,m} \vec{v}_{m+1} \vec{e}_m^T$$

$$V_m = [\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3, \dots, \vec{v}_m] \in R^{n \times m} \quad (42-7)$$

$$H_m \in R^{m \times m}$$

$H_m$  یک ماتریس هسنبرگ<sup>۱</sup> است (یک ماتریس بالا مثلثی همراه با یک قطر در زیر قطر اصلی) و  $e_m$  برداری است که تنها  $m$ مین درایه آن، یک بوده و بقیه درایه‌ها صفر است. با استفاده از رابطه (۴۲-۷) و با توجه به این نکته که  $V_m^T V_m = I$  و  $V_m^T \vec{v}_{m+1} = 0$  می‌توان ماتریس هسنبرگ را به صورت زیر نوشت:

$$H_m = V_m^T A V_m \quad (43-7)$$

هدف، پیدا کردن ضرایب بردارهای زیرفضای متعامد کريلوف به طوری است که مربعات باقی مانده‌ها کمینه شود. اگر بردار ضرایب مربوطه با  $y_{approx}$  نشان داده شود، هدف کمینه کردن نرم بردار زیر است:

$$\vec{N}_{approx}(t + \Delta t) = V_m \vec{y}_{approx}$$

$$\min \|V_m \vec{y}_{approx} - \vec{N}(t + \Delta t)\|_2 \quad (44-7)$$

از روش وارون ماتریس مور-پنروس<sup>۲</sup> می‌توان این ضرایب بهینه را به دست آورد.

$$\vec{y}_{approx} = (V_m^T V_m)^{-1} V_m^T \vec{N}(t + \Delta t)$$

$$= (V_m^T V_m)^{-1} V_m^T \exp(A \Delta t) \vec{N}(t) \quad (45-7)$$

$$= V_m^T \exp(A \Delta t) \vec{N}(t)$$

$$\vec{N}(t) = \beta \vec{v}_1 = \beta V_m \vec{e}_1 \quad (46-7)$$

با جایگذاری معادلات (۴۵-۷) و (۴۶-۷) در معادله (۴۴-۷)، معادله (۴۷-۷) به دست می‌آید:

$$\vec{N}_{approx}(t + \Delta t) = V_m \vec{y}_{approx} = \beta V_m (V_m^T \exp(A \Delta t) V_m) \vec{e}_1 \quad (47-7)$$

با توجه به بسط سری تیلور تابع نمایی می‌توان نوشت:

$$V_m^T \exp(A \Delta t) V_m = \exp(V_m^T A \Delta t V_m) \quad (48-7)$$

با جایگذاری (۴۳-۷) و (۴۷-۷) در رابطه بالا و نیز با توجه به اینکه  $V_m^T V_m = I$  می‌شود، رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\vec{N}_{approx}(t + \Delta t) \approx \beta V_m \exp(H_m \Delta t) \vec{e}_1 \quad (49-7)$$

که در واقع تخمینی از جواب نهایی موردنظر است. برای افزایش دقت معادله (۴۹-۷)، می‌توان مرتبه زیرفضای

<sup>۱</sup> Hessenberg

<sup>۲</sup> Moore-Penrose matrix inverse

کریلوف را افزایش داد:

$$\vec{N}_{approx}(t + \Delta t) = \beta V_{m+1} \exp(H_{m+1} \Delta t) \vec{e}_1 \quad (50-7)$$

در واقع در روش زیرفضای کریلوف، به جای محاسبه ماتریس نمایی از مرتبه بزرگ مثلاً ۲۰۰۰، ماتریس نمایی از مرتبه کوچک مثلاً ۲۰ محاسبه می‌شود. پس به هر حال، در این روش نیز به الگوریتمی برای محاسبه ماتریس نمایی نیاز است. نکته قابل توجه این که در روش زیرفضای کریلوف، نُرم ماتریس مربعی تقلیل یافته تقریباً برابر نُرم ماتریس اصلی است و مشکل بزرگی نُرم ماتریس در روش‌های قبلی همچنان باقی می‌ماند.

### ۹-۷- روش تقریب چندجمله‌ای کمینه-بیشینه

الگوریتم تقریب چندجمله‌ای کمینه-بیشینه، روشی است برای پیدا کردن یک تابع ریاضی که بیشترین خطای آن کمترین مقدار ممکن باشد. برای مثال برای تقریب تابع  $f(x)$  که روی بازه  $[a, b]$  تعریف شده است، الگوریتم تقریب کمینه-بیشینه یک تابع  $p(x)$  را به دست می‌دهد به طوری که  $\max_{a \leq x \leq b} |f(x) - p(x)|$  کمینه باشد. یکی از الگوریتم‌های کمینه-بیشینه معروف، الگوریتم رِمَز<sup>۱</sup> است. در اینجا قصد بر این است تا تابع  $e^{At}$  با تابعی مثل  $f$  تقریب زده شود. در مرجع [۸] با تعریف تابع تقریب چندجمله‌ای (۷-۵۱) و با استفاده از الگوریتم رِمَز ضرایب تقریب برای تابع (۷-۵۲) به دست آمده است.

$$f(t) = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i t^i \quad (51-7)$$

$$e^{\frac{t+1}{t-1}} \quad (52-7)$$

ضرایب  $a$  همگی اعداد حقیقی بوده و  $n$  مرتبه تقریب است.  $c \in R$  یک ثابت مثبت قراردادی است. کسر  $\frac{t+1}{t-1}$  در تابع (۷-۵۲) برای تعریف  $t$  در بازه  $[-1, 1]$  گذاشته شده است. با استفاده از الگوریتم رِمَز، ضرایب  $a$  به گونه‌ای به دست می‌آیند که بیشترین اختلاف روابط (۷-۵۱) و (۷-۵۲) در بازه  $[-1, 1]$  کمینه شود. بعد از به دست آمدن ضرایب، با تغییر متغیر می‌توان شکل این تقریب چندجمله‌ای را تغییر داد. با تغییر متغیر  $t = \frac{x+c}{x-c}$  تقریب بالا به شکل (۷-۵۳) در می‌آید:

$$e^x \approx f(x) = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i \left( \frac{x+c}{x-c} \right)^i \quad (53-7)$$

<sup>۱</sup> Remez

که در این رابطه دامنه  $x$  بازه  $(-\infty, 0]$  است. ضرایب  $a$  و خطای تقریب، هر دو به پارامتر  $c$  وابسته‌اند. به عبارتی پارامتر  $c$  نیز باید به گونه‌ای انتخاب شود تا خطای تقریب کمترین مقدار ممکن شود. در مرجع [۸] ضرایب تقریب مرتبه ۳۲ ( $n=32$ ) به ازای پارامتر  $c=24/1$  به دست آمده است که در این تقریب بیشترین خطا به  $2/22 \times 10^{-14}$  کمینه شده است. ضرایب به دست آمده در این تقریب در **جدول شماره ۳** آمده است. برای به‌کارگیری این روش در حل دستگاه معادلات مصرف سوخت (۶-۹) می‌توان به شکل زیر عمل کرد:

$$N(t) = a_0 N(0) + \sum_{i=1}^n a_i \{(At + cI)(At - cI)^{-1}\}^i N(0) \quad (54-7)$$

همان‌طور که در رابطه (۵۴-۷) مشخص است، در این روش نیاز به یک بار معکوس‌گیری از ماتریس و یک ضرب ماتریس در ماتریس وجود دارد و بقیه عملیات همگی ضرب ماتریس در بردار است. بزرگ‌ترین اشکال این روش نیز همین عملیات زمان‌گیر معکوس‌گیری از ماتریس با مرتبه بزرگ است. عملیات معکوس گرفتن از یک ماتریس، از مرتبه  $O(n^3)$  است که صرفه زمانی ندارد.

جدول شماره ۳: ضرایب تقریب MMPA مرتبه ۳۲ ( $c = 24/1$ ).

ضریب	مقدار	ضریب	مقدار
$a_0$	$3.41366034346810763441e-11$	$a_{17}$	$2.40742697969870662426e-1$
$a_1$	$-1.64648752802981232517e-9$	$a_{18}$	$-7.60967222595908615166e-2$
$a_2$	$3.80465674795813706161e-8$	$a_{19}$	$-1.58220954609283804027e-1$
$a_3$	$-5.59799382133376361074e-7$	$a_{20}$	$1.32429922343368914663e-1$
$a_4$	$5.88558416643299794299e-6$	$a_{21}$	$7.69052976527847896194e-2$
$a_5$	$-4.69954781431498324372e-5$	$a_{22}$	$-1.14189797653561609782e-1$
$a_6$	$2.95331252981155031018e-4$	$a_{23}$	$-3.06105871275143780464e-2$
$a_7$	$-1.49342612561658940208e-3$	$a_{24}$	$7.30162061991511174207e-2$
$a_8$	$6.16185418583114456893e-3$	$a_{25}$	$9.95181782801371819122e-3$
$a_9$	$-2.08884457395397287047e-2$	$a_{26}$	$-3.55155454832496982106e-2$
$a_{10}$	$5.81666843649626684195e-2$	$a_{27}$	$-2.48870477891655009776e-3$
$a_{11}$	$-1.31988170767468710376e-1$	$a_{28}$	$1.23929263457145990096e-2$
$a_{12}$	$2.39594549098354306472e-1$	$a_{29}$	$4.21590406862371374909e-4$
$a_{13}$	$-3.34580286145275369457e-1$	$a_{30}$	$-2.74111882594745761616e-3$
$a_{14}$	$3.25793940419810518947e-1$	$a_{31}$	$-3.57929539250313916141e-5$
$a_{15}$	$-1.47667478685995070947e-1$	$a_{32}$	$2.86523961626939505591e-4$
$a_{16}$	$-1.19600677614316509554e-1$		

### ۷-۱۰- روش تقریب گویای چبیشف

از آنجایی که ویژه مقادیر ماتریس مصرف سوخت، بیشتر در ناحیه‌ای نزدیک به محور منفی حقیقی محدود شده‌اند، می‌توان برای حل معادلات مصرف سوخت از روش تقریب گویای چبیشف (CRAM) استفاده کرد. ماتریس نمایی را می‌توان بر مبنای یک تابع گویا مثل  $r(z)$  محاسبه نمود به طوری که  $r(z)$  تقریب خوبی از  $e^z$  در ناحیه‌ای از صفحه اعداد مختلط  $C$  باشد. تابع  $r(z)$  به روش‌های مختلفی می‌تواند محاسبه شود. یکی از این روش‌ها فرمول انتگرال کوشی<sup>۱</sup> است. بر اساس این فرمول می‌توان ماتریس نمایی را به صورت یک انتگرال مسیر بسته<sup>۲</sup> به شکل (۷-۵۵) نوشت.

$$e^{At} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^z (zI - At)^{-1} dz \quad (7-55)$$

$\Gamma$  یک مسیر بسته است که یک بار حول طیف  $At$  گشته است.  $(zI - At)^{-1}$  می‌تواند به شکل رابطه (۷-۵۶) نوشته شود.

$$(zI - At)^{-1} = \frac{B(z)}{\det(zI - At)} \quad (7-56)$$

$$B(z) = z^{n-1}B_0 + z^{n-2}B_1 + \dots + zB_{n-2} + B_{n-1}$$

که  $B_0, B_1, \dots, B_{n-1}$  ماتریس‌هایی با درایه‌های ثابت هستند. هر درایه ماتریس جواب در (۷-۵۶) یک تابع گویای مناسب  $z$  است که مخرج آن چندجمله‌ای  $\det(zI - At)$  می‌باشد. بنابراین قطب‌های این توابع گویا، ویژه مقادیر ماتریس  $At$  است و محاسبه  $e^{At}$  لزوماً معادل با محاسبه انتگرال‌های مسیری بسته به شکل (۷-۵۷) خواهد بود.

$$(e^{At})_{kl} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^z R_{kl}(z) dz \quad (7-57)$$

که  $R = (zI - At)^{-1}$  است. از طرفی وقتی  $z \rightarrow -\infty$ ،  $R_{kl} = 0(1)$  است و نقاط تکین  $R_{kl}$  ویژه مقادیر ماتریس  $At$  اند. از آنجایی که ویژه مقادیر  $At$  محدود به ناحیه منفی محور حقیقی هستند،  $\Gamma$  می‌تواند به شکل سهمی یا هذلولی در سمت چپ صفحه مختلط بسط پیدا کند. همچنین به خاطر این که تابع زیر انتگرال به صورت نمایی کاهش پیدا می‌کند، می‌توان این انتگرال‌های مسیری بسته را با فرمول‌های انتگرال‌گیری عددی به خوبی به دست آورد. این فرمول‌های انتگرال‌گیری می‌تواند با توابع گویایی همبسته شود که قطب‌ها و باقی‌مانده‌های آن همان نقاط و

<sup>۱</sup> Cauchy integral

<sup>۲</sup> Contour integral



وزن‌های فرمول انتگرال‌گیری عددی باشد. معمولاً بهتر است از تقریب گویا به صورت تجزیه به کسرهای جزئی (PFD)<sup>۱</sup> استفاده شود. برای تابع گویای  $r_{k,k}(z) = p_k(z)/q_k(z)$  که  $p_k(z)$  و  $q_k(z)$  چندجمله‌ای از درجه  $k$  هستند، تجزیه به کسرهای جزئی به شکل زیر در می‌آید.

$$r_{k,k}(z) = \alpha_0 + \sum_{j=1}^k \frac{\alpha_j}{z - \theta_j} \quad (58-7)$$

که  $\alpha_0$  حد  $r_{k,k}$  در بی‌نهایت و  $\alpha_j$  باقیمانده در قطب  $\theta_j$  می‌باشد. از آنجایی که قطب‌های یک تابع گویا با ضرایب حقیقی تشکیل جفت‌های مزدوج مختلط می‌دهند، بنابراین عملیات محاسباتی رابطه (58-7) برای متغیر حقیقی  $x$  می‌تواند نصف شود.

$$r_{k,k}(x) = \alpha_0 + 2\operatorname{Re} \left( \sum_{j=1}^{k/2} \frac{\alpha_j}{x - \theta_j} \right) \quad (59-7)$$

بنابراین دستگاه معادلات (9-6) را با استفاده از تقریب گویا می‌توان به شکل رابطه (60-7) حل نمود.

$$N(t) = \alpha_0 N_0 + 2\operatorname{Re} \left( \sum_{j=1}^{k/2} \alpha_j (At - \theta_j I)^{-1} N_0 \right) \quad (60-7)$$

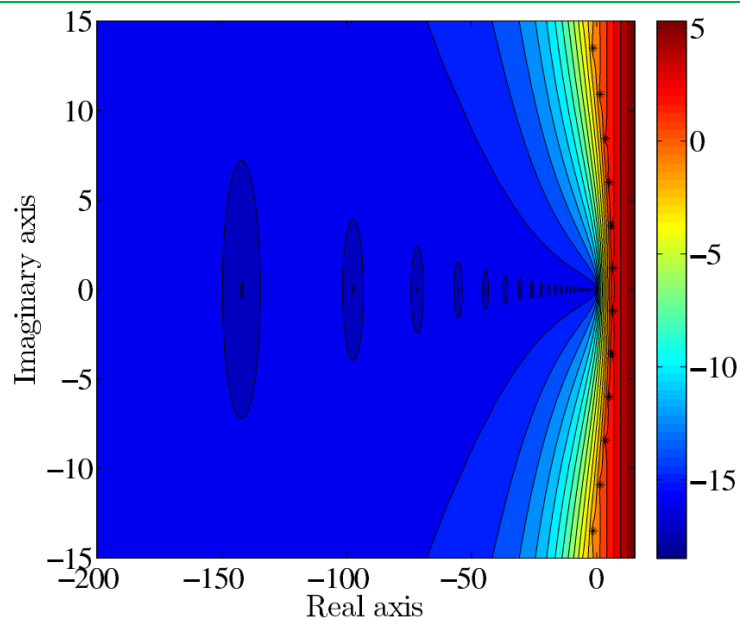
بدین ترتیب برای حل دستگاه معادلات مصرف سوخت به روش تقریب گویای چبیشف از مرتبه  $k$ ، نیاز به حل  $k/2$  دستگاه معادلات خطی اسپارس می‌باشد. همچنین دستگاه‌های معادلات خطی در رابطه (60-7) مستقل از هم بوده و می‌توانند به منظور سرعت بیشتر به صورت موازی نیز حل شوند.

در روش CRAM بهترین تقریب گویای تابع نمایی در قسمت منفی محور حقیقی ( $R_-$ ) برای  $r(z)$  انتخاب می‌شود. مجموعه توابع گویای  $r_{k,k}(z) = p_k(z)/q_k(z)$  که  $p_k(z)$  و  $q_k(z)$  چندجمله‌ای از درجه  $k$  هستند، با  $\pi_{k,k}$  نشان داده می‌شود. تقریب CRAM از مرتبه  $k$  به صورت تابع گویای یکتای  $\hat{r}_{k,k}(z) = \hat{p}_k(z)/\hat{q}_k(z)$  که شرط (61-7) را ارضا می‌کند، تعریف می‌شود.

$$\sup_{x \in R_-} |\hat{r}_{k,k}(z) - e^z| = \inf_{r_{k,k} \in \pi_{k,k}} \left\{ \sup_{x \in R_-} |r_{k,k}(z) - e^z| \right\} \quad (61-7)$$

شکل ۶ دقت تقریب CRAM مرتبه ۱۶ را در سمت چپ صفحه مختلط نشان می‌دهد.

<sup>۱</sup> Partial Fraction Decomposition



شکل ۶: نمودار  $\log_{10} |e^z - \hat{r}_{16,16}(z)|$  (دقت تقریب گویای CRAM از مرتبه ۱۶ در صفحه مختلط).

برای محاسبه ضرایب PFD در تقریب CRAM نیاز به محاسبات در دقت بالا می‌باشد. مرجع [۹] ضرایب PFD را برای مرتبه ۱۴ و ۱۶ با استفاده از الگوریتم ریمز و در محیط محاسبات پارامتری<sup>۱</sup> نرم‌افزار متلب با دقت ۲۰۰ رقم معنادار انجام داده که این ضرایب در جدول شماره ۴ و جدول شماره ۵ آمده است.

جدول شماره ۴: ضرایب PFD برای تقریب CRAM از مرتبه ۱۴.

ضرایب	بخش حقیقی	بخش موهومی
$\theta_1$	$-8.8977731864688888199e0$	$+1.6630982619902085304e1$
$\theta_2$	$-3.7032750494234480603e0$	$+1.3656371871483268171e1$
$\theta_3$	$-0.2087586382501301251e0$	$+1.0991260561901260913e1$
$\theta_4$	$+3.9933697105785685194e0$	$+6.0048316422350373178e0$
$\theta_5$	$+5.0893450605806245066e0$	$+3.5888240290270065102e0$
$\theta_6$	$+5.6231425727459771248e0$	$+1.1940690463439669766e0$
$\theta_7$	$+2.2697838292311127097e0$	$+8.4617379730402214019e0$
$\alpha_1$	$-7.1542880635890672853e-5$	$+1.4361043349541300111e-4$
$\alpha_2$	$+9.4390253107361688779e-3$	$-1.7184791958483017511e-2$
$\alpha_3$	$-3.7636003878226968717e-1$	$+3.3518347029450104214e-1$
$\alpha_4$	$-2.3498232091082701191e1$	$-5.8083591297142074004e0$
$\alpha_5$	$+4.6933274488831293047e1$	$+4.5643649768827760791e1$
$\alpha_6$	$-2.7875161940145646468e1$	$-1.0214733999056451434e2$
$\alpha_7$	$+4.8071120988325088907e0$	$-1.3209793837428723881e0$
$\alpha_0$	$+1.8321743782540412751e-14$	$+0.0000000000000000000e0$

<sup>۱</sup> Symbolic Toolbox

جدول شماره ۵: ضرایب PFD برای تقریب CRAM از مرتبه ۱۶.

بخش موهومی	بخش حقیقی	ضرایب
$+1.9277446167181652284e1$	$-1.0843917078696988026e1$	$\theta_1$
$+1.6220221473167927305e1$	$-5.2649713434426468895e0$	$\theta_2$
$+3.5874573620183222829e0$	$+5.9481522689511774808e0$	$\theta_3$
$+8.4361989858843750826e0$	$+3.5091036084149180974e0$	$\theta_4$
$+1.1941223933701386874e0$	$+6.4161776990994341923e0$	$\theta_5$
$+1.0925363484496722585e1$	$+1.4193758971856659786e0$	$\theta_6$
$+5.9968817136039422260e0$	$+4.9931747377179963991e0$	$\theta_7$
$+1.3497725698892745389e1$	$-1.4139284624888862114e0$	$\theta_8$
$-2.4220017652852287970e-5$	$-5.0901521865224915650e-7$	$\alpha_1$
$+4.3892969647380673918e-3$	$+2.1151742182466030907e-4$	$\alpha_2$
$+1.0194721704215856450e2$	$+1.1339775178483930527e2$	$\alpha_3$
$-5.7514052776421819979e0$	$+1.5059585270023467528e1$	$\alpha_4$
$-2.2459440762652096056e2$	$-6.4500878025539646595e1$	$\alpha_5$
$+1.7686588323782937906e0$	$-1.4793007113557999718e0$	$\alpha_6$
$-1.1190391094283228480e1$	$-6.2518392463207918892e1$	$\alpha_7$
$-1.574346617345546819e-1$	$+4.1023136835410021273e-2$	$\alpha_8$
$+0.000000000000000000e0$	$+2.1248537104952237488e-16$	$\alpha_0$

## ۸- کتابخانه مصرف سوخت

همان‌طور که در دستگاه معادلات (۸-۶) مشخص است، برای انجام محاسبات مصرف سوخت، باید ضرایب معادلات مصرف سوخت به عنوان معلومات مسئله وجود داشته باشد. ضرایب معادلات مصرف سوخت عبارت‌اند از:

۱- نیمه‌عمر هسته‌ها (یا ثوابت واپاشی) و نسبت شاخه‌های واپاشی  $(\lambda_{ki})$ ؛

۲- سطح‌مقطع‌های اندرکنش نوترون با مواد  $(\sigma_{x,l})$ ؛

۳- بهره محصولات شکافت از شکافت هسته‌ها  $(\gamma_{ji})$ ؛ و

۴- شار نوترون  $(\varphi)$ .

شار نوترون باید از طریق محاسبات سلولی یا قلب و یا از طریق تبدیل توان حرارتی به شار یک گروهی محاسبه شود. بقیه ضرایب موردنیاز در معادلات مصرف سوخت باید از پیش، محاسبه و در فایل‌هایی به نام کتابخانه‌های مصرف سوخت، ذخیره شوند. کتابخانه‌های مصرف سوخت از جنبه‌های گوناگون ممکن است با هم فرق کنند. یکی از این

جنبه‌ها، تعداد هسته‌های موجود در کتابخانه است. هر چه تعداد هسته‌های بیشتری در کتابخانه مصرف سوخت گنجانده شده باشد، به همان تعداد، معادلات مصرف سوخت بیشتر شده و حل آن به زمان و حافظه بیشتری نیاز خواهد داشت و در عوض محاسبات، با دقت و جزئیات بیشتری انجام خواهد شد. در بسیاری مواقع، کتابخانه‌هایی تولید می‌شوند که در آن‌ها برای کاهش حجم محاسبات و یا گاهی به علت عدم وجود داده کافی، با استفاده از تقریب‌هایی، بعضی هسته‌ها که در محاسبات نوترونی قلب نقش کمتری دارند، حذف می‌شوند. این حذف ممکن است به صورت کامل باشد؛ یعنی هسته‌ای به دلیل تأثیر کم در طیف و مشخصات سیستم قابل صرف نظر باشد و یا ممکن است به خاطر کوچک کردن حجم محاسبات و افزایش سرعت، اثر برخی هسته‌ها که حذف می‌شوند، در هسته‌های دیگر که در کتابخانه وجود دارند، لحاظ شود. جنبه دیگری که کتابخانه‌های مصرف سوخت، می‌توانند در آن با هم فرق داشته باشند، چگونگی ارائه سطح مقطع‌های نوترون است. از آنجایی که سطح مقطع‌های نوترون به صورت تابع پیوسته‌ای از انرژی می‌باشند، لذا برای استفاده در محاسبات مصرف سوخت، باید با استفاده از تقریب‌هایی به صورت گروهی درآیند. ممکن است سطح مقطع‌های نوترون به صورت یک گروهی برای سیستم‌های مختلف (مثل کتابخانه‌های ORIGEN) یا به صورت چندگروهی (مثل کتابخانه ۶۳ گروهی CINDER) ارائه شود. برای محاسبات مصرف سوخت باید طیف نوترون با همان ساختار گروهی که کتابخانه مصرف سوخت با آن تولید شده است، محاسبه شود. در کتابخانه مصرف سوخت، برای هر هسته اندرکنش‌های نوترون و نیز شاخه‌های واپاشی آن هسته آورده شده است.

## ۸-۱- آشنایی با کتابخانه‌های مصرف سوخت ORIGEN2

کد محاسبات مصرف سوخت ORIGEN2 کتابخانه‌هایی یک گروهی برای سیستم‌های مختلف تهیه کرده است. علت استفاده از کتابخانه جداگانه برای سیستم‌های مختلف، تفاوت طیف انرژی تقریبی نوترون در آن سیستم‌ها است که در گروهی کردن سطح مقطع‌ها به کار گرفته شده است. یک مزیت استفاده از کتابخانه‌های یک گروهی کد ORIGEN2 سادگی و در نتیجه سرعت بالای محاسبات است.

در کتابخانه‌های کد ORIGEN2 هر هسته با یک شناسه  $ZZZAAAM$  مشخص می‌شود که  $ZZZ$  عدد اتمی،  $AAA$  عدد جرمی و  $M$  نشان‌دهنده سطح برانگیختگی انرژی هسته است.  $M=0$  به معنای هسته در حالت پایه و  $M=1$  به معنای هسته در حالت برانگیخته است. به عنوان مثال شناسه هسته اورانیوم ۲۳۵ در حالت پایه برابر  $922350$  بوده و شناسه هسته تریتیوم در حالت برانگیخته  $10031$  است.

کد ORIGEN2 هسته‌ها را به سه دسته تقسیم می‌کند:

۱- هسته‌های سبک<sup>۱</sup>: این دسته تقریباً شامل همه هسته‌های طبیعی، همه هسته‌های تشکیل‌دهنده مواد ساختاری راکتور و نیز ناخالصی‌های سوخت و هسته‌های دختر به وجود آمده از آن‌ها می‌باشد که تقریباً ۷۲۰ هسته در این دسته جای دارد.

۲- آکتینیدها و دخترهایشان<sup>۲</sup>: این دسته شامل هسته‌های آکتینید از عنصر توریم (Th) با عدد اتمی ۹۰ تا عنصر انشتنیوم (Es) با عدد اتمی ۹۹ و نیز همه دخترهای ناشی از واپاشی آن‌ها می‌باشد که تقریباً ۱۳۰ هسته در این دسته جای دارد.

۳- محصولات شکافت<sup>۳</sup>: این دسته شامل هسته‌های محصول شکافت همراه با دخترهای آن‌ها می‌شود که تقریباً ۸۵۰ هسته در این دسته جای دارد.

هسته‌های هر دسته به‌گونه‌ای تنظیم شده‌اند که تمام هسته‌های دختر ناشی از هر هسته نیز در همان دسته وجود داشته باشد. به عبارتی هر هسته تنها قابلیت تولید از دسته خود را دارد؛ به جز محصولات شکافت که تنها از طریق شکافت می‌تواند از هسته‌های سنگین تولید شود. بنابراین ممکن است بعضی هسته‌ها هم‌زمان در دسته‌های مختلف وجود داشته باشند. برای هر یک از این سه دسته، سه نوع کتابخانه وجود دارد؛ کتابخانه واپاشی، کتابخانه سطح مقطع و کتابخانه فوتون. توضیح درباره ساختار هر یک از این کتابخانه‌ها در ادامه آمده است.

#### ۸-۱-۱- ساختار کتابخانه واپاشی ORIGEN2

از آنجایی که داده‌های مربوط به واپاشی هسته‌ها ثابت بوده و تابعیتی از انرژی ندارند، برای کد ORIGEN2 تنها یک فایل متنی حاوی داده‌های واپاشی هسته‌ها تولید شده است. در کتابخانه واپاشی، نیمه‌عمر هسته‌ها، ثوابت واپاشی هسته، مقدار گرمای قابل بازیافت از واپاشی، فراوانی طبیعی هسته و میزان غلظت مجاز هسته‌های پرتوزا در هوا و آب برای استنشاق و بلع انسان آورده شده است. ساختار کتابخانه واپاشی به شرح زیر است.

کتابخانه واپاشی شامل سه بخش برای سه دسته هسته می‌باشد که هر بخش دارای یک شماره است. در ابتدای هر بخش یک خط عنوان آورده شده که ابتدای آن شماره بخش و ادامه آن یک عبارت متنی برای عنوان آن بخش است. سپس به ترتیب افزایش عدد اتمی و عدد جرمی، هسته‌ها یکی پس از دیگری در کتابخانه وارد شده‌اند.<sup>۴</sup> برای هر هسته دو خط اختصاص داده شده است. در خط اول برای هر هسته به ترتیب شماره بخش مربوطه، شناسه هسته، شناسه واحد زمانی نیمه‌عمر، نیمه‌عمر هسته، پارامترهای  $FA$ ،  $FPEC$ ،  $FPEXC$  و  $FIT$  وارد می‌شود.

<sup>۱</sup> Activation Products

<sup>۲</sup> Actinides+daughters

<sup>۳</sup> Fission Products

<sup>۴</sup> ترتیب ورود هسته‌ها در کتابخانه‌های ORIGEN اهمیت ندارد.

شناسه واحد زمانی، یک عدد صحیح بین یک تا هشت است که بر اساس آن واحد زمانی نیمه عمر مشخص می شود. واحدهای زمانی هشت گانه در جدول شماره ۶ آمده است. به عنوان مثال اگر برای نیمه عمر هسته ای عدد ۱۰ وارد شده و عدد صحیح قبل از آن ۳ باشد، به این معنی است که نیمه عمر هسته مورد نظر ۱۰ ساعت است ولی چنانچه عدد صحیح مربوطه ۵ باشد، نیمه عمر هسته ۱۰ سال خواهد بود و یا چنانچه عدد صحیح هسته ای ۶ باشد یعنی آن هسته پایدار است و واپاشی ندارد. در خط دوم مربوط به هر هسته به ترتیب شماره بخش مربوطه، پارامترهای *FSF*، *QREC*، *ABUND*، *ARCG* و *WRCG* وارد می شود. ماهیت هر یک از این پارامترها در جدول شماره ۷ آمده است.

جدول شماره ۶: مشخصه واحد نیمه عمر هسته ها.

عدد صحیح	واحد زمانی نیمه عمر	عدد صحیح	واحد زمانی نیمه عمر
۱	ثانیه	۶	پایدار - بدون واپاشی
۲	دقیقه	۷	هزار سال
۳	ساعت	۸	میلیون سال
۴	روز	۹	میلیارد سال
۵	سال		

جدول شماره ۷: پارامترهای وارد شده در کتابخانه واپاشی ORIGEN2.

پارامتر	ماهیت
<i>FB</i>	کسر واپاشی هسته به صورت نشر ذره بتا در حالت پایه.
<i>FBX</i>	کسر واپاشی هسته به صورت نشر ذره بتا که منجر به تولید یک هسته برانگیخته با طول عمر نسبتاً طولانی شود.
<i>FPEC</i>	کسر واپاشی هسته به صورت نشر ذره پوزیترون و یا گیراندازی الکترون در حالت پایه.
<i>FPECX</i>	کسر واپاشی هسته به صورت نشر ذره پوزیترون و یا گیراندازی الکترون که منجر به تولید یک هسته برانگیخته با طول عمر نسبتاً طولانی شود.
<i>FA</i>	کسر واپاشی هسته به صورت نشر ذره آلفا.
<i>FIT</i>	کسر واپاشی یک هسته برانگیخته به حالت پایه.
<i>FSF</i>	کسر واپاشی به صورت شکافت خودبه خودی.
<i>FN</i>	کسر واپاشی به صورت نشر یک ذره بتا همراه با خروج یک نوترون.
<i>QREC</i>	انرژی میانگین قابل حصول (بدون احتساب نوترینوها) که در هر واپاشی آزاد می شود بر حسب <i>MeV</i> .
<i>ABUND</i>	فراوانی طبیعی هسته مورد نظر در میان تمام ایزوتوپ های آن عنصر
<i>ARCG</i>	راهنمای غلظت رادیواکتیو ( <i>RCG</i> ) برای استنشاق پیوسته در هوا
<i>WRCG</i>	راهنمای غلظت رادیواکتیو ( <i>RCG</i> ) برای بلعیدن پیوسته در آب

دو پارامتر  $ARCG$  و  $WRCG$  مقدار بیشینه غلظت مجاز یک هسته پرتوزا را طبق مقررات فدرال آمریکا به ترتیب در هوا و آب برای استنشاق و بلع پیوسته توسط انسان مشخص می‌کند. واحد این مقادیر کوری بر مترمکعب است. وقتی مقدار اکتیویته یک هسته بر حسب کوری بر این پارامترها تقسیم شود، حداقل حجم هوا و یا آب موردنیاز برای رقیق کردن آن غلظت از هسته را بر حسب مترمکعب به دست می‌دهد؛ به طوری که حاشیه ایمنی آن اکتیویته طبق مقررات فدرال که در راهنمای کد ORIGEN2 به آن اشاره شده است، رعایت شود. شکل ۷ که دو خط از کتابخانه واپاشی مربوط به هسته  ${}^{230}_{90}Th$  را در بخش اکتینیدها نشان می‌دهد، توضیحات بالا را روشن تر می‌کند.

مشخصه واحد	شماره بخش کتابخانه	شناسه هسته	زمانی نیمه عمر	نیمه عمر	FBX	FPEC	FPECX	FA	FIT
	2	902300	1	2.430E 12	0.0	0.0	0.0	1.000E 00	0.0
	2			5.000E-13	0.0	4.774E 00	0.0	8.000E-14	2.000E-06
					FSF	FN	QREC	ABUND	ARCG
									WRCG

شکل ۷: نمایش ساختار کتابخانه واپاشی کد ORIGEN2.

در اینجا عدد واحد زمانی ۱ داده شده که طبق جدول شماره ۶ معادل ثانیه است؛ بنابراین نیمه عمر هسته  ${}^{230}_{90}Th$  برابر  $2.430E12$  ثانیه که تقریباً معادل  $77,055$  سال می‌شود، داده شده است. کل واپاشی این هسته از طریق نشر ذره آلفا است؛ اما مقدار بسیار ناچیزی معادل  $5E-13$  از هر واپاشی این هسته به شکافت خودبه خودی می‌انجامد. به علت ناچیز بودن کسر شکافت خودبه خودی، مقدار جمع کسر واپاشی‌ها اندکی از یک بزرگ تر می‌شود که این مقدار به خاطر خطای گرد کردن اعداد است. گرمای آزاد شده در هر واپاشی این هسته برابر  $4/744$  MeV است. این هسته به صورت طبیعی وجود ندارد (فراوانی طبیعی صفر وارد شده است) و مقدار مجاز آن در هوا و آب به ترتیب  $8E-14$  و  $2E-6$  کوری بر مترمکعب است.

### ۸-۱-۲- ساختار کتابخانه سطح مقطع ORIGEN2

همان طور که پیش تر توضیح داده شد، از آنجایی که کتابخانه‌های سطح مقطع کد ORIGEN2 یک گروهی می‌باشند، در کد ORIGEN2 برای سیستم‌های مختلف با توجه به طیف انرژی متوسط نوترون‌ها در آن سیستم، یک کتابخانه سطح مقطع یک گروهی تهیه شده است. کاربر باید ابتدا با توجه به سیستم موردنظر خود برای محاسبات مصرف سوخت، کتابخانه سطح مقطع مناسب را انتخاب کند. کتابخانه‌های سطح مقطع نیز مانند کتابخانه واپاشی، هر یک در سه بخش برای هسته‌های سبک، اکتینیدها و محصولات شکافت ارائه شده که هر یک از این بخش‌ها در هر کتابخانه سطح مقطع دارای شماره مختص به خود می‌باشد. انواع کتابخانه‌های سطح مقطع تهیه شده برای کد ORIGEN2

همراه با شماره‌های بخش‌های سه‌گانه هر کتابخانه در جدول شماره ۸ آورده شده است.

جدول شماره ۸: فایل‌های کتابخانه‌های سطح مقطع ORIGEN2 و شماره بخش‌های هر یک.

توصیف سیستم	شماره بخش‌ها			نام فایل کتابخانه
	203	202	201	
0.0253-eV cross section library				THERMAL.LIB
<b>LWRs - PWR</b>				
<sup>235</sup> U enriched UO <sub>2</sub> , with a burnup of 33 MWd/kg	206	205	204	PWRU.LIB
<sup>235</sup> U enriched UO <sub>2</sub> in a self-generated Pu recycle reactor	209	208	207	PWRPUU.LIB
Pu-enriched UO <sub>2</sub> in a self-generated Pu recycle reactor	212	211	210	PWRPUPU.LIB
ThO <sub>2</sub> -enriched with denatured <sup>233</sup> U	215	214	213	PWRDU3TH.LIB
Pu-enriched UO <sub>2</sub>	218	217	216	PWRPUTH.LIB
<sup>235</sup> U enriched UO <sub>2</sub> , with a burnup of 50 MWd/kg	221	220	219	PWRU50.LIB
ThO <sub>2</sub> -enriched with makeup, denatured <sup>235</sup> U	224	223	222	PWRD5D35.LIB
ThO <sub>2</sub> -enriched with recycled, denatured <sup>233</sup> U	227	226	225	PWRD5D33.LIB
3.2 w/o <sup>235</sup> U fuel,3-cycle PWR to achieve 33MWd/kg	603	602	601	PWRUS.LIB
4.2 w/o <sup>235</sup> U fuel, 3-cycle PWR to achieve 50 MWd/kg	606	605	604	PWRUE.LIB
<b>LWRs - BWR</b>				
<sup>235</sup> U enriched UO <sub>2</sub>	253	252	251	BWRU.LIB
<sup>235</sup> U enriched UO <sub>2</sub> in a self-generated Pu recycle reactor	256	255	254	BWRPUU.LIB
Pu-enriched fuel in a self-generated Pu recycle reactor	259	258	257	BWRPUPU.LIB
3.0 w/o <sup>235</sup> U fuel, 4-cycle BWR to achieve 27.5 MWd/kg axial varying moderator density considered	653	652	651	BWRUS.LIB
3.0 w/o <sup>235</sup> U fuel, 4-cycle BWR to achieve 27.5 MWd/kg, constant axial moderator density	656	655	654	BWRUS0.LIB
3.4 w/o <sup>235</sup> U fuel, 4-cycle BWR to achieve 40 MWd/kg	659	658	657	BWRUE.LIB
<b>CANDUs</b>				
CANDU, natural uranium	403	402	401	CANDUNAU.LIB
CANDU, slightly enriched uranium	406	405	404	CANDUSEU.LIB



ادامه جدول شماره ۸: فایل‌های کتابخانه‌های سطح مقطع ORIGEN2 و شماره بخش‌های هر یک.

توصیف سیستم	شماره بخش‌ها			نام فایل کتابخانه
<b>LMFBRs</b>				
LMFBR: Early oxide, LWR-Pu/U/U/U:				
Core	303	302	301	EMOPUUUC.LIB
Axial blanket	306	305	304	EMOPUUUA.LIB
Radial blanket	309	308	307	EMOPUUUR.LIB
LMFBR: Advanced oxide, LWR-Pu/U/U/U				
Core	313	312	311	AMOPUUUC.LIB
Axial blanket	316	315	314	AMOPUUUA.LIB
Radial blanket	319	318	317	AMOPUUUR.LIB
LMFBR: Advanced oxide, recycle-Pu/U/U/U				
Core	323	322	321	AMORUUUC.LIB
Axial blanket	326	325	324	AMORUUUA.LIB
Radial blanket	329	328	327	AMORUUUR.LIB
LMFBR: Advanced oxide, LWR-Pu/U/U/Th				
Core	333	332	331	AMOPUUTC.LIB
Axial blanket	336	335	334	AMOPUUTA.LIB
Radial blanket	339	338	337	AMOPUUTR.LIB
LMFBR: Advanced oxide, LWR-Pu/Th/Th/Th				
Core	343	342	341	AMOPTTTC.LIB
Axial blanket	346	345	344	AMOPTTTA.LIB
Radial blanket	349	348	347	AMOPTTTR.LIB
LMFBR: Advanced oxide, recycle <sup>233</sup> U/Th/Th/Th				
Core	353	352	351	AMO0TTTC.LIB
Axial blanket	356	355	354	AMO0TTTA.LIB
Radial blanket	359	358	357	AMO0TTTR.LIB
LMFBR: Advanced oxide, 14% denatured <sup>233</sup> U/Th/Th/Th				
Core	363	362	361	AMO1TTTC.LIB
Axial blanket	366	365	364	AMO1TTTA.LIB
Radial blanket	369	368	367	AMO1TTTR.LIB
LMFBR: Advanced oxide, 44% denatured <sup>233</sup> U/Th/Th/Th				
Core	373	372	371	AMO2TTTC.LIB
Axial blanket	376	375	374	AMO2TTTA.LIB
Radial blanket	379	378	377	AMO2TTTR.LIB
LMFBR: Fast Flux Test Facility (FFTF) Pu/U	383	382	381	FFTFCLIB

ادامه جدول شماره ۸: فایل‌های کتابخانه‌های سطح مقطع ORIGEN2 و شماره بخش‌های هر یک.

توصیف سیستم	شماره بخش‌ها			نام فایل کتابخانه
Clinch River Breeder Reactor (CRBR):				
Core	503	502	501	CRBRC.LIB
Axial blanket	506	505	504	CRBRA.LIB
Radial blanket	509	508	507	CRBRR.LIB
Internal blanket	512	511	510	CRBRI.LIB

همه کتابخانه‌های سطح مقطع دارای یک ساختار واحد برای ذخیره اطلاعات اندرکنش‌های نوترون می‌باشند که در ادامه به توضیح این ساختار پرداخته می‌شود.

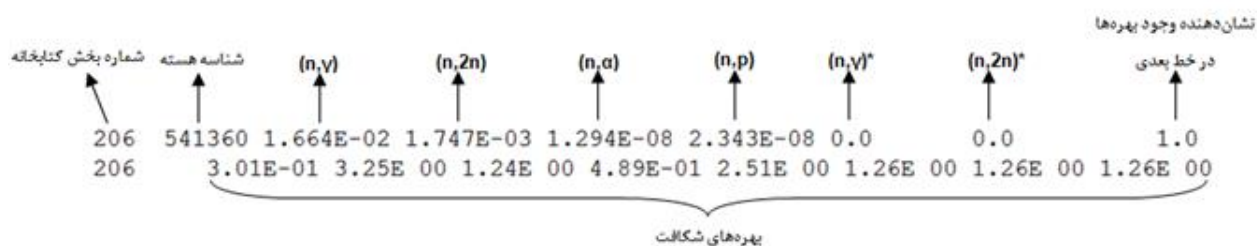
کتابخانه سطح مقطع نیز مانند کتابخانه واپاشی دارای سه بخش است که ابتدای هر بخش با یک خط عنوان شروع می‌شود. ابتدای خط عنوان شماره آن بخش و ادامه آن یک عبارت متنی که همان عنوان است، وارد می‌شود. در کتابخانه سطح مقطع برای هر هسته در دسته‌های هسته‌های سبک و آکتینیدها یک خط و در دسته هسته‌های محصول شکافت می‌تواند دو خط داده وارد شود. در خط اول برای هر هسته به ترتیب شماره بخش مربوطه، شناسه هسته، پارامترهای  $SNG$ ،  $SN2N$ ،  $SN3N$  یا  $SNA$ ،  $SNF$  یا  $SNP$ ،  $SNGX$ ،  $SN2NX$  و  $YYN$  وارد می‌شود. ماهیت این پارامترها در جدول شماره ۹ آمده است.

در بخش هسته‌های آکتینید پارامتر سوم به معنی سطح مقطع اندرکنش  $(n,3n)$  و پارامتر چهارم به معنی سطح مقطع شکافت است؛ در حالی که در دو بخش دیگر، پارامتر سوم به معنی سطح مقطع اندرکنش  $(n,\alpha)$  و پارامتر چهارم به معنی سطح مقطع اندرکنش  $(n,p)$  است. در بخش هسته‌های محصول شکافت چنانچه برای هسته‌ای پارامتر  $YYN$  مثبت (+۱) باشد، اطلاعات بهره شکافت برای آن هسته در خط بعدی وارد می‌شود. ابتدای خط دوم شماره بخش مربوطه و به دنبال آن بهره تولید هسته از شکافت هشت هسته شکافا بر حسب درصد وارد می‌شود. این هسته‌های شکافا به ترتیب در جدول شماره ۱۰ وارد شده‌اند. به عنوان مثال بهره شکافت یک هسته محصول شکافت از شکافت اورانیوم ۲۳۵ به این معنی است که از هر صد شکافت هسته اورانیوم ۲۳۵ چند تا از آن هسته تولید می‌شود. با توجه به این فرض که هر هسته شکافا در اثر شکافت به دو محصول شکافت تبدیل می‌شود، جمع بهره‌های مربوط به هر یک از این هشت هسته ۲۰۰ می‌شود. شکل ۸ که دو خط از کتابخانه سطح مقطع مربوط به بخش هسته‌های محصول شکافت را نشان می‌دهد، توضیحات بالا را روشن تر می‌کند. در این قسمت از کتابخانه که مربوط به هسته  $^{136}_{54}Xe$  است، سطح مقطع‌های  $(n,\gamma)$ ،  $(n,2n)$ ،  $(n,\alpha)$  و  $(n,p)$  به ترتیب برابر  $1.664E-02$ ،  $1.747E-03$ ،  $1.294E-08$ ،  $2.343E-08$  بارن وارد شده است. سطح مقطع دو اندرکنش  $(n,\gamma)$  و  $(n,2n)$  در حالت برانگیخته صفر است. آخرین پارامتر +۱ وارد شده که به معنی این است که در خط بعدی بهره‌های شکافت این هسته وارد می‌شود. اعداد خط

دوم احتمال تولید هسته  $^{136}_{54}\text{Xe}$  از هر شکافت هسته‌های  $^{249}\text{Cf}$  و  $^{245}\text{Cm}$ ،  $^{241}\text{Pu}$ ،  $^{239}\text{Pu}$ ،  $^{238}\text{U}$ ،  $^{235}\text{U}$ ،  $^{233}\text{U}$ ،  $^{232}\text{Th}$  بر حسب درصد است که به ترتیب برابر است با ۰/۰۳۰۱، ۳/۲۵، ۱/۲۴، ۰/۴۸۹، ۲/۵۱، ۱/۲۶، ۱/۲۶ و ۱/۲۶.

جدول شماره ۹: پارامترهای وارد شده در کتابخانه سطح مقطع ORIGEN2.

پارامتر	ماهیت
SNG	سطح مقطع اندرکنش $(n, \gamma)$ .
SN2N	سطح مقطع اندرکنش $(n, 2n)$ .
SN3N	سطح مقطع اندرکنش $(n, 3n)$ این اندرکنش فقط برای آکتینیدها وارد می‌شود.
SNA	سطح مقطع اندرکنش $(n, \alpha)$ این اندرکنش برای هسته‌های غیر آکتینید وارد می‌شود.
SNF	سطح مقطع شکافت، فقط برای آکتینیدها وارد می‌شود.
SNP	سطح مقطع اندرکنش $(n, p)$ ، برای هسته‌های غیر آکتینید وارد می‌شود.
SNGX	سطح مقطع اندرکنش $(n, \gamma)$ که هسته محصول در حالت برانگیخته با طول عمر نسبتاً طولانی تشکیل می‌شود.
SN2NX	سطح مقطع اندرکنش $(n, 2n)$ که هسته محصول در حالت برانگیخته با طول عمر نسبتاً طولانی تشکیل می‌شود.
YYN	پارامتری که تعیین می‌کند برای هسته اطلاعات بهره شکافت در خط بعدی وارد می‌شود یا خیر. اگر ۱ باشد هسته بهره شکافت دارد و اگر -۱ باشد ندارد.



شکل ۸: نمایش ساختار کتابخانه سطح مقطع ORIGEN2.

جدول شماره ۱۰: هسته‌های شکافا با بهره شکافت در کتابخانه.

شماره بهره شکافت	هسته شکافا
۱	$^{232}\text{Th}$
۲	$^{233}\text{U}$
۳	$^{235}\text{U}$
۴	$^{238}\text{U}$
۵	$^{239}\text{Pu}$
۶	$^{241}\text{Pu}$
۷	$^{245}\text{Cm}$
۸	$^{249}\text{Cf}$

#### ۸-۱-۲-۱- توضیحی درباره بهره‌های شکافت

همان‌طور که از توضیحات بخش قبلی مشخص است، در کتابخانه ORIGEN2 تنها بهره‌های شکافت برای هشت هسته شکافا لحاظ شده است و برای بقیه هسته‌هایی که شکافت می‌دهند، بهره محصول شکافتی وجود ندارد. این فرض به دو دلیل عمده به وجود آمده است: یکی این که بهره‌های محصولات شکافت بسیاری از آکتینیدها در زمان تولید کتابخانه موجود نبوده است و دیگر این که در نظر گرفتن بهره محصولات شکافت برای همه هسته‌های شکافا باعث مصرف مقدار بسیار زیاد حافظه می‌شود که با توجه به امکانات زمان انتشار کتابخانه، تأمین چنین حافظه‌ای بعید بوده است. از طرفی دقت این فرض که از محصولات شکافت سایر هسته‌های شکافا صرف‌نظر شود، در راکتورهای حرارتی خیلی خوب است (در حدود چند دهم درصد خطا)، چراکه در سیستم‌های حرارتی، عمده محصولات شکافت از شکافت همین هشت هسته شکافا تولید می‌شوند [۱۰]. اما در راکتورهای سریع (LMFBR) چنین فرضی دقت مناسبی ندارد؛ چراکه در این راکتورها کسر قابل توجهی از شکافت‌ها توسط هسته‌هایی انجام می‌شود که بهره شکافت آن‌ها در کتابخانه ORIGEN2 موجود نیست. برای جبران چنین نقیصی، کد ORIGEN2 از یک تقریب تجربی به شرح زیر استفاده می‌کند.

- ۱- مجموع نرخ شکافت همه هسته‌های شکافای بدون بهره شکافت را به دست می‌آورد.
- ۲- از میان این هسته‌ها (بدون بهره شکافت)، هسته با بیشترین نرخ شکافت را پیدا می‌کند.
- ۳- از میان هشت هسته آکتینید که برای آن‌ها بهره محصول شکافت در کتابخانه وارد می‌شود، نزدیک‌ترین هسته از نظر عدد اتمی و عدد جرمی به هسته به دست آمده در مرحله ۲ را پیدا می‌کند.
- ۴- مطابق رابطه (۸-۱)، یک ضریب محاسبه کرده و آن را در همه بهره‌های شکافت هسته به دست آمده در

مرحله ۳ ضرب می‌کند تا با این تقریب، تولید محصولات شکافت از شکافت سایر هسته‌های شکاف را به نوعی در محاسبات وارد کند.

$$\text{Correction Factor} = \frac{S + FR_i}{FR_i} \quad (1-8)$$

که  $S$  مجموع نرخ شکافت همه هسته‌های شکاف بدون بهره شکافت (مرحله ۱) و  $FR_i$  نرخ شکافت هسته به دست آمده در مرحله ۳ است.

### ۸-۱-۳- ساختار کتابخانه فوتون ORIGEN2

کتابخانه داده‌های فوتونی کد ORIGEN2 به صورت تعداد فوتون به ازای هر واپاشی در ۱۸ گروه انرژی برای هسته‌های مختلف تهیه شده است. مرزهای این ۱۸ گروه انرژی در جدول شماره ۱۱ آمده است. انواع فوتون‌هایی که در کتابخانه فوتون ORIGEN2 لحاظ شده‌اند عبارت‌اند از پرتوهای گاما، پرتوهای ایکس، فوتون‌های ناشی از تبدیل هسته‌ها، پرتوهای گامای ناشی از اندرکنش  $(\alpha, n)$ ، پرتوهای گامای آنی و ناشی از محصولات شکافت خودبه-خودی و تابش‌های ترمزی<sup>۱</sup>. پرتوهای گامای آنی ناشی از شکافت القائی و نیز گیراندازی نوترون در این کتابخانه لحاظ نشده‌اند. این داده‌ها از فایل‌های داده‌های ارزیابی شده ساختار هسته‌ای<sup>۲</sup> (ENSDF) گرفته شده‌اند. از آنجایی که داده‌های ENSDF بر اساس اندازه‌گیری به دست آمده‌اند، پرتوهای گامای آنی ناشی از شکافت و گیراندازی نوترون در آن وارد نشده است. بنابراین طیف فوتون محاسبه شده با استفاده از این کتابخانه پس از زمان اندکی از شکافت تخمین درستی نخواهد بود. از طرف دیگر از آنجایی که شدت تابش‌های ترمزی، بسیار به محیطی که در آن ذرات بتا کند می‌شوند، بستگی دارد، کتابخانه فوتونی مورد استفاده نیز بسته به محیط کندکننده ذرات بتا می‌تواند متفاوت باشد. کد ORIGEN2 سه کتابخانه مختلف برای محاسبات فوتونی تهیه کرده که در یکی تابش‌های ترمزی لحاظ نشده و در کتابخانه دیگر این تابش‌ها با توجه به محیط غالب آب لحاظ شده و در دیگری این تابش‌ها با توجه به محیط غالب اکسید اورانیوم لحاظ شده است که سومی بیشترین کاربرد را دارد.

کتابخانه فوتون کد ORIGEN2 یک فایل متنی است که همانند کتابخانه‌های واپاشی و سطح مقطع، داده‌ها در سه بخش جداگانه برای هسته‌های سبک، آکتینیدها و دخترهایشان و محصولات شکافت وارد می‌شود. اولین خط هر یک از این سه بخش در کتابخانه با یک خط عنوان شروع می‌شود. در خط عنوان ابتدا شماره بخش کتابخانه که یک شماره سه‌رقمی است و سپس یک رشته متنی که همان عنوان است وارد می‌شود. در بقیه خطوط ساختار کتابخانه

<sup>۱</sup> Bremsstrahlung

<sup>۲</sup> Evaluated Nuclear Structure Data file

به این صورت است که ابتدا شماره بخش و سپس شناسه هسته وارد شده و بعد از آن زوج‌های یک عدد صحیح و یک عدد حقیقی وارد می‌شوند که عدد صحیح، شماره گروه فوتونی بر اساس جدول شماره ۱۱ بین ۱ تا ۱۸ بوده و عدد حقیقی شدت فوتون‌های نشر شده در آن گروه بر حسب تعداد فوتون بر هر واپاشی می‌باشد. در هر خط حداکثر برای پنج گروه انرژی، شدت فوتون می‌تواند وارد شود، بنابراین چنانچه گروه‌های فوتون، بیشتر از این تعداد باشند بقیه در خطوط بعدی وارد می‌شوند. این روند تا زمانی که به جای شماره گروه یک عدد منفی (-۱) وارد شود یا داده‌ها برای همه ۱۸ گروه انرژی وارد شود، ادامه دارد. به عنوان مثال در شکل ۹ قسمتی از کتابخانه فوتون کد ORIGEN2 برای هسته‌های  ${}^6_2\text{He}$ ،  ${}^8_3\text{Li}$  و  ${}^8_4\text{Be}$  نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل مشخص است به ازای هر واپاشی هسته  ${}^6_2\text{He}$ ،  $8.54\text{E}-2$  فوتون در اولین گروه انرژی،  $1.92\text{E}-2$  فوتون در دومین گروه انرژی و همین‌طور تا  $2.83\text{E}-6$  فوتون در پانزدهمین گروه انرژی ساطع می‌شود. عدد -۱ به معنی اتمام گروه‌های انرژی است. پس از اتمام اطلاعات فوتونی هسته‌های یک بخش، در انتهای هر بخش به جای شماره بخش ۱- وارد شده و در خط بعدی اطلاعات هسته‌های بخش بعدی در صورت وجود به همین منوال وارد می‌شود. چنانچه شدت فوتون در هر گروه انرژی در فعالیت هسته موردنظر ضرب شود، شدت فوتون در آن گروه انرژی بر واحد زمان به دست خواهد آمد.

101	20060	1	8.54E-02	2	1.92E-02	3	1.30E-02	4	1.98E-02	5	1.30E-02
		6	9.12E-03	7	1.42E-02	8	7.79E-03	9	5.28E-03	10	2.35E-03
		11	1.42E-03	12	5.09E-04	13	1.03E-04	14	2.52E-05	15	2.83E-06
		-1									
101	30080	1	3.73E-01	2	8.76E-02	3	6.11E-02	4	9.68E-02	5	6.70E-02
		6	4.96E-02	7	8.53E-02	8	5.53E-02	9	4.64E-02	10	2.72E-02
		11	2.43E-02	12	1.71E-02	13	7.26E-03	14	4.96E-03	15	1.01E-02
		16	5.29E-03	17	1.38E-03	18	2.82E-04	-1			
101	40080	7	8.38E-09	10	3.34E-09	11	1.90E-09	12	9.52E-10	13	4.77E-10
		14	2.39E-10	15	1.76E-10	16	5.24E-11	17	3.40E-12	18	2.15E-13
		-1									

شکل ۹: قسمتی از کتابخانه فوتون کد ORIGEN2.

جدول شماره ۱۱: گروه‌های انرژی فوتون در کتابخانه ORIGIN2.

شماره گروه	انرژی بر حسب MeV		
	حد پائین	حد بالا	میانگین انرژی
1	0.00E+00	2.00E-02	1.00E-02
2	2.00E-02	3.00E-02	2.50E-02
3	3.00E-02	4.50E-02	3.75E-02
4	4.50E-02	7.00E-02	5.75E-02
5	7.00E-02	1.00E-01	8.50E-02
6	1.00E-01	1.50E-01	1.25E-01
7	1.50E-01	3.00E-01	2.25E-01
8	3.00E-01	4.50E-01	3.75E-01
9	4.50E-01	7.00E-01	5.75E-01
10	7.00E-01	1.00E+00	8.50E-01
11	1.00E+00	1.50E+00	1.25E+00
12	1.50E+00	2.00E+00	1.75E+00
13	2.00E+00	2.50E+00	2.25E+00
14	2.50E+00	3.00E+00	2.75E+00
15	3.00E+00	4.00E+00	3.50E+00
16	4.00E+00	6.00E+00	5.00E+00
17	6.00E+00	8.00E+00	7.00E+00
18	8.00E+00	1.10E+01	9.50E+00

### ۸-۲- آشنایی با کتابخانه مصرف سوخت CINDER

کتابخانه CINDER شامل دو فایل متنی به نام‌های *cinder.dat* و *cindergl.dat* است که حاوی همه اطلاعات مربوط به واپاشی و سطح مقطع‌های چندگروهی هسته‌ها بوده و در فایل دوم یک سری اطلاعات پایه شامل جرم اتمی، نام آزمایشگاه مربوطه برای انجام ارزیابی هسته‌ای، انواع واپاشی‌های هسته و ... برای هسته‌های پرتوزا در آن وارد شده است. از آنجا که اطلاعات موجود در کتابخانه *cinder.dat* برای محاسبات مصرف سوخت کفایت می‌کند، لذا در اینجا تنها به بررسی کتابخانه *cinder.dat* پرداخته می‌شود و از این به بعد هر جا در این گزارش از کتابخانه مصرف سوخت CINDER نام برده شود، منظور فایل *cinder.dat* خواهد بود. نسخه کتابخانه مورد استفاده در این گزارش مربوط به سال ۲۰۰۰ میلادی است. اولین تفاوت کتابخانه CINDER با کتابخانه ORIGIN2 در این است که در کتابخانه CINDER، همه اطلاعات واپاشی و سطح مقطع و داده‌های فوتونی در یک فایل متنی وارد شده است. تفاوت دیگر این دو کتابخانه این است که در کتابخانه CINDER داده‌های سطح مقطع در ساختار ۶۳ گروهی و

داده‌های فوتونی در ساختار ۲۵ گروهی تهیه شده است؛ در حالی که در کتابخانه ORIGEN2 سطح مقطع‌ها یک‌گروهی و داده‌های فوتونی در ساختار ۱۸ گروهی تهیه شده است. طیف مورد استفاده برای گروهی‌سازی سطح مقطع‌ها در کتابخانه CINDER، طیف نوعی سیستم‌های حرارتی است؛ به همین دلیل تنها برای سیستم‌های با طیف حرارتی می‌توان از این کتابخانه استفاده کرد. همچنین بر خلاف کتابخانه‌های ORIGEN2 که در آن تعداد و نوع اندرکنش‌های نوترون و مسیره‌های واپاشی هسته‌ها ثابت و غیر قابل تغییر است، در کتابخانه CINDER، این محدودیت وجود ندارد.

این کتابخانه اطلاعات مربوط به ۳۴۰۰ هسته را در خود گنجانده است. سطح مقطع‌های نوترون در ۶۳ گروه انرژی وارد شده‌اند. مرزهای این گروه‌های انرژی در **جدول شماره ۱۲** آورده شده است. ۲۳ گروه اول ناحیه حرارتی، از گروه ۲۴ تا گروه ۵۷ ناحیه سریع و از گروه ۵۸ تا گروه ۶۳ ناحیه انرژی بالا نامیده می‌شود. همچنین فوتون‌های ناشی از واپاشی هر هسته به تفکیک ۲۵ گروه انرژی در این کتابخانه وارد شده‌اند. مرزهای این ۲۵ گروه انرژی در **جدول شماره ۱۳** آمده است. انرژی گروه‌های فوتون نیز به صورت صعودی بوده و اولین گروه انرژی کمترین انرژی را دارد.

در کتابخانه CINDER هر هسته با یک شناسه هفت‌رقمی (AAZZZM) مشخص می‌شود که AAA عدد جرمی، ZZZ عدد اتمی و M نشانه سطح برانگیختگی هسته است. M برای هسته‌های در حالت پایدار صفر و برای هسته‌های برانگیخته در سطح اول انرژی ۱ و برای هسته‌های برانگیخته در سطح دوم انرژی ۲ می‌باشد. به عنوان مثال شناسه هسته اورانیوم ۲۳۵ در حالت پایدار در این کتابخانه ۲۳۵۰۹۲۰ است، در حالی که در کتابخانه‌های ORIGEN2 شناسه این هسته ۹۲۲۳۵۰ است.

اولین خط کتابخانه CINDER، خط عنوان و توضیح است که در آن تاریخ انتشار کتابخانه، تعداد هسته‌های موجود در آن و همچنین کتابخانه ENDF مرجع برای تولید سطح مقطع‌های گروهی آورده شده است. کتابخانه مورد استفاده در اکتبر سال ۲۰۰۰ میلادی انتشار یافته و شامل ۳۴۰۰ هسته است و برای تولید آن از کتابخانه ENDF/VI استفاده شده است. در خط دوم کتابخانه تعداد هسته‌های موجود، تعداد گروه‌های نوترون، تعداد گروه‌های پروتون و تعداد گروه‌های فوتون وارد می‌شود. از آنجایی که در کتابخانه حاضر اندرکنش‌های پروتون لحاظ نشده است، بنابراین تعداد گروه‌های پروتون صفر آمده است. سپس یک خط عنوان وارد شده و بعد از آن در خطوط بعدی مرزهای انرژی نوترون وارد می‌شود. بعد از آن مرزهای انرژی گروه‌های فوتون وارد می‌شود. سپس اطلاعات مربوط به هر هسته به ترتیبی که توضیح داده خواهد شد، وارد می‌شود.



جدول شماره ۱۲: گروه‌های انرژی نوترون در کتابخانه CINDER.

انرژی بر حسب MeV			شماره گروه	انرژی بر حسب MeV			شماره گروه
انرژی میانگین	حد بالا	حد پایین		انرژی میانگین	حد بالا	حد پایین	
1.63E-03	2.04E-03	1.23E-03	33	2.51E-09	5.00E-09	1.00E-11	1
2.22E-03	2.40E-03	2.04E-03	34	7.50E-09	1.00E-08	5.00E-09	2
2.62E-03	2.84E-03	2.40E-03	35	1.25E-08	1.50E-08	1.00E-08	3
3.10E-03	3.36E-03	2.84E-03	36	1.75E-08	2.00E-08	1.50E-08	4
4.44E-03	5.53E-03	3.36E-03	37	2.25E-08	2.50E-08	2.00E-08	5
7.33E-03	9.12E-03	5.53E-03	38	2.75E-08	3.00E-08	2.50E-08	6
1.21E-02	1.50E-02	9.12E-03	39	3.25E-08	3.50E-08	3.00E-08	7
1.75E-02	1.99E-02	1.50E-02	40	3.85E-08	4.20E-08	3.50E-08	8
2.27E-02	2.55E-02	1.99E-02	41	4.60E-08	5.00E-08	4.20E-08	9
3.32E-02	4.09E-02	2.55E-02	42	5.40E-08	5.80E-08	5.00E-08	10
5.41E-02	6.74E-02	4.09E-02	43	6.25E-08	6.70E-08	5.80E-08	11
8.93E-02	1.11E-01	6.74E-02	44	7.35E-08	8.00E-08	6.70E-08	12
1.47E-01	1.83E-01	1.11E-01	45	9.00E-08	1.00E-07	8.00E-08	13
2.43E-01	3.02E-01	1.83E-01	46	1.26E-07	1.52E-07	1.00E-07	14
3.45E-01	3.89E-01	3.02E-01	47	2.02E-07	2.51E-07	1.52E-07	15
4.43E-01	4.98E-01	3.89E-01	48	3.33E-07	4.14E-07	2.51E-07	16
5.69E-01	6.39E-01	4.98E-01	49	5.49E-07	6.83E-07	4.14E-07	17
7.30E-01	8.21E-01	6.39E-01	50	9.04E-07	1.13E-06	6.83E-07	18
9.64E-01	1.11E+00	8.21E-01	51	1.49E-06	1.86E-06	1.13E-06	19
1.23E+00	1.35E+00	1.11E+00	52	2.46E-06	3.06E-06	1.86E-06	20
1.55E+00	1.74E+00	1.35E+00	53	4.05E-06	5.04E-06	3.06E-06	21
1.98E+00	2.23E+00	1.74E+00	54	6.68E-06	8.32E-06	5.04E-06	22
2.55E+00	2.87E+00	2.23E+00	55	1.10E-05	1.37E-05	8.32E-06	23
3.27E+00	3.68E+00	2.87E+00	56	1.82E-05	2.26E-05	1.37E-05	24
4.32E+00	4.97E+00	3.68E+00	57	2.99E-05	3.73E-05	2.26E-05	25
5.52E+00	6.07E+00	4.97E+00	58	4.94E-05	6.14E-05	3.73E-05	26
8.03E+00	1.00E+01	6.07E+00	59	8.14E-05	1.01E-04	6.14E-05	27
1.25E+01	1.49E+01	1.00E+01	60	1.34E-04	1.67E-04	1.01E-04	28
1.59E+01	1.69E+01	1.49E+01	61	2.21E-04	2.75E-04	1.67E-04	29
1.85E+01	2.00E+01	1.69E+01	62	3.65E-04	4.54E-04	2.75E-04	30
2.25E+01	2.50E+01	2.00E+01	63	6.01E-04	7.49E-04	4.54E-04	31
				9.91E-04	1.23E-03	7.49E-04	32

جدول شماره ۱۳: گروه‌های انرژی فوتون در کتابخانه CINDER.

انرژی بر حسب MeV			شماره گروه
انرژی میانگین	حد بالا	حد پایین	
5.00E-03	1.00E-02	0.00E+00	1
2.00E-02	3.00E-02	1.00E-02	2
4.50E-02	6.00E-02	3.00E-02	3
8.00E-02	1.00E-01	6.00E-02	4
1.50E-01	2.00E-01	1.00E-01	5
2.50E-01	3.00E-01	2.00E-01	6
4.00E-01	5.00E-01	3.00E-01	7
5.13E-01	5.25E-01	5.00E-01	8
6.38E-01	7.50E-01	5.25E-01	9
8.75E-01	1.00E+00	7.50E-01	10
1.17E+00	1.33E+00	1.00E+00	11
1.50E+00	1.66E+00	1.33E+00	12
1.83E+00	2.00E+00	1.66E+00	13
2.25E+00	2.50E+00	2.00E+00	14
2.75E+00	3.00E+00	2.50E+00	15
3.50E+00	4.00E+00	3.00E+00	16
4.50E+00	5.00E+00	4.00E+00	17
5.50E+00	6.00E+00	5.00E+00	18
6.50E+00	7.00E+00	6.00E+00	19
7.50E+00	8.00E+00	7.00E+00	20
8.50E+00	9.00E+00	8.00E+00	21
9.50E+00	1.00E+01	9.00E+00	22
1.10E+01	1.20E+01	1.00E+01	23
1.45E+01	1.70E+01	1.20E+01	24
2.35E+01	3.00E+01	1.70E+01	25

### ۸-۲-۱- اطلاعات واپاشی و سطح مقطع

در کتابخانه CINDER هسته‌ها به ترتیب بزرگی شناسه‌شان از کوچک به بزرگ مرتب شده‌اند و هر یک شماره‌ای دارند که آن شماره از ۱ (برای  $^1_1H$ ) تا ۳۴۰۰ (برای  $^{260}_{103}Lr$ ) می‌باشد. قبل از شماره هر هسته یک کاراکتر # وارد می‌شود؛ به عبارت دیگر هر جا کاراکتر # آمد عدد بعد از آن نشان‌دهنده شماره هسته خواهد بود. اطلاعات هسته‌های

مختلف با ۲۳ کاراکتر \_ که به صورت یک خط ( \_\_\_\_\_ ) دیده می‌شود از هم جدا می‌شود؛ به عبارت دیگر در هر جای کتابخانه، این خط دیده شد به این معنی است که اطلاعات مربوط به یک هسته تمام و اطلاعات هسته بعدی شروع می‌شود. در اولین خط مربوط به هر هسته، شماره هسته، شناسه هسته، نماد هسته و نیمه عمر هسته بر حسب ثانیه وارد می‌شود. برای هسته‌های پایدار نیمه عمر  $9.9999E+99$  وارد می‌شود. چنانچه هسته پرتوزا باشد (واپاشی داشته باشد)، در خط دوم، به ترتیب انرژی متوسط ذرات بتای ساطع شده ( $E_b$ )، انرژی متوسط گاما ( $E_g$ )، انرژی متوسط ذرات آلفای ساطع شده ( $E_a$ )، کسر واپاشی شکافت خودبه‌خودی هسته ( $SFBF$ )، شماره مجموعه بهره شکافت خودبه‌خودی ( $isfyset$ ) و کسر نوترون تأخیری ( $pn$ ) وارد می‌شود. واحد مقادیر انرژی بر حسب MeV است. چنانچه کسر واپاشی از طریق شکافت خودبه‌خودی هسته صفر باشد، شماره مجموعه بهره شکافت آن نیز صفر خواهد بود. در خط سوم تعداد واپاشی‌های هسته بدون احتساب شکافت خودبه‌خودی وارد می‌شود و به همین تعداد، خط بعد از خط سوم وارد می‌شود که در هر خط شماره واپاشی، کسر واپاشی، شماره و شناسه هسته دختر تولیدی وارد می‌شود. بعد از خطوط واپاشی‌های مختلف هسته، خطی وارد می‌شود که میزان سمی بودن هسته پرتوزا را به ترتیب در هوا و آب بر حسب کوری بر مترمکعب بیان می‌کند. سپس یک خط عنوان آمده و بعد از آن طیف فوتون‌های گامای نشر شده از هسته در ۲۵ گروه انرژی موجود در **جدول شماره ۱۳** وارد می‌شود. اگر هسته موردنظر پرتوزا نباشد یا به عبارت دیگر در خط اول اطلاعات هسته، عبارت  $H-L= 9.9999E+99$  به معنی پایداری هسته وارد شده باشد، خطوط توضیح داده شده در این پاراگراف برای آن هسته وارد نخواهد شد.

در ادامه اطلاعات مربوط به هر هسته در کتابخانه، خطی وارد می‌شود که ابتدای آن سه عدد صحیح وارد شده که هر یک از این سه عدد، شماره مجموعه بهره شکافت است. عدد اول شماره مجموعه بهره شکافت در ناحیه حرارتی، عدد دوم شماره مجموعه بهره شکافت در ناحیه سریع و عدد سوم شماره مجموعه بهره شکافت در ناحیه انرژی بالا می‌باشد. چنانچه یکی از این سه عدد غیرصفر باشد، به این معنی است که هسته موردنظر دارای سطح مقطع شکافت است؛ بنابراین در ۷ خط بعدی سطح مقطع‌های ۶۳ گروهی شکافت وارد می‌شود. سپس در خط بعدی تعداد سطح مقطع‌های غیرشکافت هسته موردنظر وارد می‌شود. در خطوط بعدی به تعداد اندرکنش‌های هسته ابتدا شماره هسته دختر سپس شناسه هسته دختر و در ۷ خط بعدی سطح مقطع‌های ۶۳ گروهی اندرکنش وارد می‌شود.

به عنوان مثال قسمتی از اطلاعات مربوط به هسته  $^{240}_{96}Cm$  در کتابخانه CINDER در **شکل ۱۰** نشان داده شده است. شماره اختصاص یافته به این هسته در کتابخانه، ۳۲۵۹ و شناسه هسته نیز ۲۴۰۰۹۶۰ است. همان‌طور که در اولین خط مشخص شده، نیمه عمر این هسته ۲/۳۳۲۸ میلیون ثانیه (معادل ۲۷ روز) است. از آنجایی که هسته

پرتوزا است، بنابراین در خطوط بعدی اطلاعات مربوط به واپاشی هسته وارد می‌شود. در خط دوم انرژی ذرات بتا و پرتو گاما صفر وارد شده و به این معنی است که این هسته در اثر واپاشی، ذره بتا یا پرتو گاما از خود نشر نمی‌دهد. انرژی ذرات آلفا  $6/3504$  مگا الکترون-ولت و کسر واپاشی خودبه‌خودی آن  $0/001$  است (یک‌هزارم واپاشی‌های این هسته از طریق شکافت خودبه‌خودی است). بهره محصولات شکافت خودبه‌خودی این هسته در مجموعه ۵۵ است. در خط بعدی مشخص شده که این هسته یک مسیر واپاشی به غیر از شکافت خودبه‌خودی دارد که کسر این واپاشی و هسته دختر این واپاشی در خط بعدی وارد شده است.  $99/9\%$  از واپاشی‌های این هسته از طریق واپاشی آلفا منجر به تولید هسته  $2360940$  می‌شود. در خط بعدی میزان خطر پرتوزایی این هسته در هوا و آب وارد شده است. در خطوط بعدی طیف انرژی ۲۵ گروهی پرتوهای گامای ساطع‌شده از هسته، وارد شده است. از آنجایی که در اثر واپاشی این هسته هیچ پرتوی گامایی تولید نمی‌شود، همگی مقادیر صفر می‌باشند. در ابتدای خط بعد عبارت  $27,27,27$  آمده است که به این معنی است که این هسته چه در ناحیه حرارتی چه در ناحیه سریع و چه در ناحیه انرژی بالا شکافت دهد، برای بهره محصولات شکافت از مجموعه ۲۷ باید استفاده شود. غیرصفر بودن این سه عدد به این معنی است که این هسته شکافت می‌دهد و بنابراین در ۷ خط بعدی سطح مقطع‌های ۶۳ گروهی شکافت این هسته وارد می‌شود. در خط بعدی مشخص شده که این هسته ۱۷ محصول اندرکنش با نوترون دارد، بنابراین در خطوط بعدی ۱۷ بار شماره و شناسه هسته دختر تولیدشده از اندرکنش نوترون و بعد از آن سطح مقطع‌های ۶۳ گروهی نوترون وارد می‌شود. در شکل ۱۰ تنها دو اندرکنش اول نشان داده شده که هسته محصول اول هیدروژن ( $10010$ ) و هسته محصول دوم دوتریوم ( $20010$ ) است.

	#3259: 2400960 Cm240 H-L= 2.3328E+06 DKref:j . Eb= 0.0000E+00, Eg= 0.0000E+00, Ea= 6.3504E+00, SFBF= 1.0000E-03, isfyset=55, pn= 0.0000E+00 1 non-SF decay paths: 1: 9.9900E-01 to #3227: 2360940 q:j air= 9.0000E-13 water= 1.0000E-06 EGYrefs:j ,j ,Cv.
طیف گاما	25-group gamma spectra from ee multiplied by 0.0000E+00 to agree w/ Eg= 0.0000E+00
سطح مقطع شکافت	27,27,27 =(n,f) yield sets. If > 0, 63-gp fisn CX follows.(B <sub>l</sub> ), REF: eaf 6.3023E+01 3.8405E+01 2.9871E+01 2.5260E+01 2.2273E+01 2.0330E+01 1.9045E+01 1.7827E+01 1.6630E+01 1.5618E+01 1.4751E+01 1.3851E+01 1.2808E+01 1.1324E+01 9.5211E+00 7.8402E+00 6.3970E+00 5.2594E+00 4.3092E+00 3.5488E+00 2.9363E+00 2.4057E+00 1.9712E+00 1.6394E+00 1.3446E+00 1.1075E+00 8.9570E-01 7.3804E-01 6.0745E-01 5.0050E-01 4.1396E-01 3.5091E-01 3.3411E-01 3.3411E-01 3.3411E-01 3.3411E-01 3.3411E-01 3.3411E-01 3.3411E-01 3.3411E-01 3.3411E-01 3.3411E-01 3.3412E-01 3.3411E-01 3.3411E-01 3.3412E-01 3.3409E-01 3.3479E-01 3.3407E-01 3.3377E-01 7.7947E-01 2.0001E+00 1.9998E+00 2.0000E+00 2.0002E+00 2.0000E+00 2.0000E+00 2.0000E+00 2.0002E+00 1.9998E+00 2.0003E+00 2.0000E+00 2.0000E+00
سطح مقطع اولین اندرکنش	17 reaction products. If > 0, 63-group reaction cross sections follow: # 1: 10010 produced by the following C-X (c ) REF: eaf th ecn 0.0000E+00 9.6360E-06 6.9876E-06 3.7854E-05 3.8549E-03 7.5081E-03 7.0687E-02 1.4415E-01
سطح مقطع دومین اندرکنش	# 2: 20010 produced by the following C-X (c ) REF: eaf th ecn 0.0000E+00 6.9203E-06 4.8275E-04

شکل ۱۰: اطلاعات هسته  $^{240}_{96}\text{Cm}$  در کتابخانه CINDER.

به عنوان نمونه‌ای دیگر، در شکل ۱۱ اطلاعات مربوط به هسته هیدروژن در کتابخانه مصرف سوخت نشان داده شده است. در خط اول شماره هسته (۱) و شناسه (۱۰۰۱۰) و نماد ( $^1_1\text{H}$ ) و نیمه‌عمر آن ( $9.9999\text{E}+99$ ) وارد شده است. از مقدار نیمه‌عمر مشخص می‌شود که این هسته پایدار است و واپاشی ندارد؛ بنابراین اطلاعات واپاشی برای این هسته وارد نشده و از خط بعدی اطلاعات سطح مقطع وارد می‌شود. در خط دوم که مربوط به شماره مجموعه‌های بهره شکافت در سه ناحیه انرژی است، هر سه عدد صفر وارد شده که به این معنی است که این هسته شکافت ندارد، بنابراین سطح مقطع شکافت نیز برای این هسته وارد نخواهد شد. در خط بعدی مشخص شده که از اندرکنش نوترون با این هسته، یک هسته محصول تولید می‌شود و در خط بعدی هسته محصول این اندرکنش، هسته شماره ۲ ( $^{200}_{10}\text{Cm}$ ) وارد شده و در ۷ خط بعدی سطح مقطع ۶۳ گروهی این اندرکنش وارد شده است.

```
# 1: 10010 H 1 H-L= 9.9999E+99 DKref:m .
0, 0, 0 =(n,f) yield sets. If > 0, 63-gp fisn CX follows.( ), REF:
1 reaction products. If > 0, 63-group reaction cross sections follow:
# 2: 20010 produced by the following C-X (g ) REF: mix h endf5
9.9636E-01 6.0716E-01 4.7225E-01 3.9936E-01 3.5213E-01 3.1855E-01 2.9303E-01 2.6929E-01 2.4639E-01 2.2739E-01
2.1138E-01 1.9505E-01 1.7648E-01 1.5082E-01 1.2085E-01 9.4278E-02 7.2688E-02 5.6593E-02 4.3866E-02 3.4225E-02
2.6864E-02 2.0819E-02 1.6141E-02 1.2746E-02 9.8972E-03 7.7044E-03 5.8887E-03 4.5945E-03 3.5777E-03 2.7898E-03
2.1860E-03 1.7463E-03 1.3234E-03 1.1322E-03 1.0401E-03 9.5470E-04 7.9521E-04 6.0336E-04 4.5390E-04 3.6053E-04
2.9966E-04 2.3634E-04 1.7124E-04 1.1968E-04 8.1937E-05 5.6405E-05 4.4870E-05 3.9885E-05 3.7180E-05 3.5407E-05
3.4598E-05 3.4437E-05 3.4331E-05 3.4312E-05 3.4947E-05 3.5810E-05 3.6275E-05 3.6095E-05 3.4816E-05 2.9713E-05
2.8915E-05 2.6769E-05 2.6040E-05
```

شکل ۱۱: اطلاعات هسته  $^1_0\text{H}$  در کتابخانه CINDER.

### ۸-۲-۲- بهره‌های محصولات شکافت

اطلاعات محصولات شکافت در کتابخانه CINDER در ۶۰ مجموعه بهره شکافت برای ۱۳۲۵ محصول شکافت وارد شده است. بر اساس این کتابخانه هر شکافت در یکی از این سه بازه انرژی رخ می‌دهد: ناحیه حرارتی، ناحیه سریع و ناحیه انرژی بالا. بسته به این که یک هسته شکافت خودبه‌خودی داشته باشد یا شکافت القایی و در صورت شکافت القایی در کدام ناحیه انرژی شکافت دهد، می‌تواند بهره محصولات شکافت متفاوتی داشته باشد. در [جدول شماره ۱۴](#) هسته‌هایی که برای آن‌ها مجموعه بهره شکافت در کتابخانه CINDER وارد شده است به همراه مقدار گرمای قابل حصول از شکافت هر هسته آمده است. در انتهای نام هر هسته یکی از حروف t به معنی حرارتی، f به معنی سریع، h به معنی انرژی بالا و یا s به معنی شکافت خودبه‌خودی آمده است. به عنوان مثال دوازدهمین، سیزدهمین و چهاردهمین مجموعه بهره شکافت متعلق به بهره‌های شکافت هسته  $^{235}_{92}\text{U}$  است که به ترتیب در ناحیه حرارتی، سریع و انرژی بالا شکافت دهد. برای بقیه هسته‌هایی که شکافت می‌دهند و مجموعه بهره شکافت صریح در کتابخانه ندارند، از یکی از ۶۰ مجموعه بهره شکافت [جدول شماره ۱۴](#) که نزدیک‌ترین مقدار را به بهره‌های شکافت هسته موردنظر داشته باشد، استفاده می‌شود.

پس از اتمام اطلاعات واپاشی و سطح مقطع برای ۳۴۰۰ هسته، بهره‌های محصولات شکافت وارد می‌شود. بعد از اتمام اطلاعات مربوط به آخرین هسته، دو خط عنوان آمده و بعد از آن [جدول شماره ۱۴](#) به صورت چهارستونی چاپ می‌شود؛ با این تفاوت که مقدار گرمای آزاد شده از هر شکافت به صورت جداگانه بعد از اتمام نماد هسته‌های دارای بهره چاپ می‌شود. بعد از این خطوط و پس از یک خط عنوان، محصولات شکافت به ترتیبی که توضیح داده می‌شود وارد می‌شوند. برای هر محصول شکافت ابتدا یک شماره ترتیبی از ۱ تا ۱۳۲۵ اختصاص داده شده است. بعد از شماره ترتیبی، شناسه محصول شکافت آمده و در ۱۰ خط بعدی، در هر خط ۶ عدد وارد شده که این اعداد همان بهره این محصول شکافت در ۶۰ مجموعه بهره شکافت می‌باشد. ترتیب ورود محصولات شکافت بر اساس بزرگی

شناسه آن‌ها به صورت صعودی است؛ به طوری که اولین محصول شکافت ۶۶۰۲۲۰ و آخرین محصول شکافت ۱۷۲۰۷۲۰ است. برای مثال در شکل ۱۲ اطلاعات بهره شکافت دو محصول شکافت  $^{81}_{36}Kr$  و  $^{81}_{36}Kr^*$  (منظور از ستاره، هسته برانگیخته در تراز اول انرژی است) نشان داده شده است. به عنوان مثال با توجه به جدول شماره ۱۴ بهره‌های شکافت  $^{235}_{92}U$  در ناحیه حرارتی، سریع و انرژی بالا به ترتیب در مجموعه‌های ۱۲ و ۱۳ و ۱۴ است. بنابراین دوازدهمین، سیزدهمین و چهاردهمین عدد وارد شده برای هر هسته محصول شکافت، به ترتیب برابر بهره آن هسته از یک شکافت  $^{235}_{92}U$  در ناحیه حرارتی، سریع و انرژی بالا می‌باشد. بنابراین با توجه به شکل ۱۲ این بهره‌ها برای هسته  $^{81}_{36}Kr$  به ترتیب برابر است با  $9.42933E-12$ ،  $5.50995E-12$ ،  $3.69958E-09$ . این بهره‌ها احتمال تولید از هر شکافت را نشان می‌دهند و برخلاف کتابخانه ORIGEN2 بر حسب درصد نیستند. بنابراین جمع بهره‌ها در هر مجموعه برابر دو می‌شود. پس از اتمام بهره محصولات شکافت با نوترون، بهره محصولات شکافت با فوتون<sup>۱</sup> وارد می‌شود و روال آن همان روال بهره محصولات شکافت نوترونی است. این بهره‌ها برای استفاده در کد MCNP وارد شده‌اند و فعلاً در محاسبات مصرف سوخت کد BATIS 1.0، شکافت فوتونی لحاظ نمی‌شود.

181	810360					
7.99001E-09	1.28001E-09	6.81985E-14	6.97000E-11	1.71000E-09	2.11029E-07	
7.04982E-10	1.77000E-09	3.06000E-08	9.77001E-10	2.20000E-08	9.42933E-12	
5.50995E-12	3.69958E-09	2.18011E-11	8.42000E-10	9.12010E-13	0.00000E+00	
1.11001E-13	1.40001E-10	9.19000E-12	1.49000E-10	1.18033E-09	3.25000E-12	
5.74000E-10	2.05997E-09	4.43992E-10	1.84000E-08	4.70000E-11	6.13000E-11	
8.27827E-09	2.81000E-11	8.30000E-12	6.49000E-13	3.12000E-12	4.83000E-11	
2.03000E-10	1.08000E-09	3.14000E-08	1.45000E-10	2.35000E-10	2.36000E-08	
3.38000E-09	7.92000E-09	7.70002E-10	1.59000E-09	1.11000E-10	5.36001E-11	
6.01000E-11	4.67000E-11	1.12000E-12	4.14919E-08	1.30002E-09	3.50088E-11	
4.90988E-12	3.56019E-09	6.71000E-13	2.95007E-09	4.00001E-11	1.23007E-09	
182	810361					
1.19000E-09	1.91001E-10	0.00000E+00	5.24000E-12	2.33000E-10	3.15044E-08	
1.04997E-10	2.42000E-10	2.30000E-09	1.33000E-10	1.66000E-09	1.40990E-12	
7.51993E-13	2.77968E-10	2.97015E-12	6.34000E-11	1.24001E-13	0.00000E+00	
1.51001E-14	1.05000E-11	1.37000E-12	2.03000E-11	8.85249E-11	4.44000E-13	
7.82000E-11	3.07996E-10	6.05989E-11	1.39000E-09	7.02000E-12	8.36000E-12	
6.22870E-10	4.19000E-12	1.13000E-12	9.70000E-14	4.26000E-13	7.21000E-12	
3.03001E-11	1.48000E-10	2.36000E-09	2.16000E-11	3.21000E-11	3.22000E-09	
5.05000E-10	1.08000E-09	1.15000E-10	2.38000E-10	1.66000E-11	8.01001E-12	
4.53000E-12	6.98000E-12	1.67000E-13	6.18879E-09	1.94002E-10	5.23132E-12	
7.33982E-13	5.32028E-10	1.00000E-13	4.41011E-10	5.98001E-12	1.83011E-10	

شکل ۱۲: بهره شکافت دو هسته در کتابخانه CINDER.

<sup>۱</sup> Photo fission

جدول شماره ۱۴: هسته‌های شکافت‌دهنده دارای مجموعه بهره شکافت صریح در کتابخانه.

No	Nuclide	Q-Value (MeV)	No	Nuclide	Q-Value (MeV)	No	Nuclide	Q-Value (MeV)
1	90-TH-227t	183.29	21	93-NP-237t	203.99	41	95-AM-243f	217.41
2	90-TH-229t	187.43	22	93-NP-237f	204.99	42	96-CM-242f	215.34
3	90-TH-232f	194.64	23	93-NP-237h	231.99	43	96-CM-243t	216.41
4	90-TH-232h	216.75	24	93-NP-238f	207.06	44	96-CM-243f	217.41
5	91-PA-231f	192.57	25	94-PU-238f	207.06	45	96-CM-244s	216.41
6	92- U-232t	193.64	26	94-PU-239t	211.41	46	96-CM-244f	219.48
7	92- U-233t	200.29	27	94-PU-239f	212.26	47	96-CM-245t	220.55
8	92- U-233f	200.91	28	94-PU-239h	237.67	48	96-CM-246s	220.55
9	92- U-233h	225.06	29	94-PU-240t	210.2	49	96-CM-246f	223.62
10	92- U-234f	198.78	30	94-PU-240f	211.2	50	96-CM-248s	224.69
11	92- U-234h	225.78	31	94-PU-240h	238.2	51	96-CM-248f	227.76
12	92- U-235t	202.61	32	94-PU-241t	213.41	52	98-CF-249t	228.83
13	92- U-235f	203.41	33	94-PU-241f	214.38	53	98-CF-250s	228.83
14	92- U-235h	228.47	34	94-PU-242t	214.34	54	98-CF-251t	232.98
15	92- U-236f	202.92	35	94-PU-242f	215.34	55	98-CF-252s	232.98
16	92- U-236h	229.92	36	94-PU-242h	242.34	56	99-ES-253s	235.05
17	92- U-237f	204.99	37	95-AM-241t	213.59	57	99-ES-254t	239.19
18	92- U-238s	203.99	38	95-AM-241f	213.27	58	100-FM-254s	237.12
19	92- U-238f	207.06	39	95-AM-241h	240.27	59	100-FM-255t	241.26
20	92- U-238h	229.77	40	95-AM-42mt	214.88	60	100-FM-256s	241.26

### ۸-۳- تشکیل دستگاه معادلات

ضرایب دستگاه معادلات مصرف سوخت باید از کتابخانه مصرف سوخت خوانده شده و در درایه صحیح در ماتریس مصرف سوخت جای گیرد. چنانچه مشخصات n هسته در کتابخانه مصرف سوخت گنجانده شده باشد، یک دستگاه معادلات دیفرانسیل مرتبه اول n تایی تشکیل خواهد شد که در آن ضرایب مجهولات، نرخ تبدیل هسته‌ها به یکدیگر



است. ماتریس مصرف سوخت، به شدت اسپارس است؛ یا به عبارت دیگر بیشتر درایه‌های آن صفر است. به همین دلیل ذخیره یک ماتریس دوبعدی کامل، چه از نظر حافظه مصرفی و چه از نظر زمان عملیاتی، مقرون به صرفه نیست. به عنوان مثال تعداد هسته‌های موجود در کتابخانه ORIGEN2 حدود ۱۳۳۰ هسته است؛ یعنی دستگاه معادلات مصرف سوخت  $1330 \times 1330$  است که از این میان حدود ۱۰۰۰۰ درایه غیرصفر وجود دارد که حدود ۰/۵٪ از کل درایه‌های ماتریس ضرایب را شامل می‌شود.

راه‌های زیادی برای اسپارس کردن یک ماتریس وجود دارد. در واقع اسپارس کردن، یک عملیات قراردادی برای تسهیل محاسبات و نحوه ذخیره‌سازی ماتریس است و هیچ روشی، به عنوان بهترین روش برای اسپارس کردن ماتریس وجود ندارد؛ بلکه این ماهیت مسئله مورد حل است که تعیین می‌کند بهتر است از چه روشی برای اسپارس کردن ماتریس استفاده شود. با توجه به نحوه خواندن اطلاعات و داده‌ها از کتابخانه و تشکیل ماتریس مصرف سوخت و همچنین الگوریتم‌های محاسباتی، یک روش کارآمد برای اسپارس کردن در کد BATIS 1.0 پیاده شده است.

تشکیل دستگاه معادلات مصرف سوخت به این صورت است که ابتدا باید هسته‌های موجود در کتابخانه خوانده و شماره‌گذاری شوند. سپس برای هر هسته، بر حسب نوع واپاشی یا اندرکنش، مطابق روابط (۲-۸) و (۳-۸)، هسته دختر تعیین شده و شماره آن پیدا شود و در نهایت نرخ تبدیل مربوطه در درایه درست قرار داده شود.

$$\begin{aligned} {}^A_Z X + {}^1_0 n &\xrightarrow{(n,\gamma)} {}^{A+1}_Z Y \\ {}^A_Z X + {}^1_0 n &\xrightarrow{(n,2n)} {}^{A-1}_Z Y + 2 {}^1_0 n \\ {}^A_Z X + {}^1_0 n &\xrightarrow{(n,3n)} {}^{A-2}_Z Y + 3 {}^1_0 n \\ {}^A_Z X + {}^1_0 n &\xrightarrow{(n,\alpha)} {}^{A-3}_{Z-2} Y + {}^4_2 \alpha \\ {}^A_Z X + {}^1_0 n &\xrightarrow{(n,p)} {}^A_{Z-1} Y + {}^1_1 p \end{aligned} \quad (2-8)$$

$$\begin{aligned} {}^A_Z X &\xrightarrow{\alpha} {}^{A-4}_{Z-2} Y + {}^4_2 \alpha \\ {}^A_Z X &\xrightarrow{\beta} {}^A_{Z+1} Y + {}^0_{-1} \beta \\ {}^A_Z X &\xrightarrow{\text{positron}/e_{\text{-capture}}} {}^A_{Z-1} Y + {}^0_{+1} \beta \end{aligned} \quad (3-8)$$

در کد BATIS 1.0 به منظور اجتناب از تکرار عملیات تشکیل دستگاه معادلات، زیربرنامه‌هایی برای انجام عملیات تشکیل دستگاه و پیش‌پردازش و آماده‌سازی داده‌ها و ذخیره‌سازی آن‌ها در فایل‌های باینری برای استفاده در محاسبات مصرف سوخت نوشته شده است. مزیت مهم فایل‌های باینری سرعت بالای خواندن داده‌ها از آن و در

بیشتر موارد حجم بسیار کم آن‌ها است. این زیربرنامه‌ها کتابخانه‌های متنی مصرف سوخت را یک بار خوانده و هسته‌ها و نرخ تبدیلات را مرتب کرده و دستگاه معادلات را تشکیل داده و نتیجه را به همراه سایر داده‌های مورد نیاز برای محاسبات مصرف سوخت در یک فایل باینری ذخیره می‌کنند. با استفاده از فایل‌های پردازش شده باینری، دیگر نیازی به مرتب کردن و جستجوی هسته‌های دختر نیست و ماتریس ضرایب تشکیل شده از فایل باینری خوانده می‌شود.

## ۹- تبدیل توان و شار متوسط در یک بازه زمانی

برای استفاده از کتابخانه‌های یک گروهی ORIGEN2، تنها داشتن شار یک گروهی نوترون سیستم کافی است. این در حالی است که در بسیاری موارد، توان حرارتی تولیدی در سیستم معلوم و شار نوترون مجهول است. به طور کلی محاسبات مصرف سوخت با استفاده از کتابخانه‌های یک گروهی ORIGEN2 در یکی از سه حالت زیر ممکن است انجام شود:

۱- توان حرارتی تولیدی در سیستم در طول یک بازه زمانی ثابت در نظر گرفته شود؛

۲- شار یک گروهی نوترون در سیستم در طول یک بازه زمانی ثابت در نظر گرفته شود؛

۳- هسته‌های موجود در سیستم در حال واپاشی بوده و شار نوترونی صفر باشد.

کد مصرف سوخت باید این قابلیت را داشته باشد که از روی توان حرارتی معلوم، شار یک گروهی نوترون‌های سیستم و در حالت شار معلوم، توان حرارتی تولیدی را محاسبه کند. توضیحات مربوط به چگونگی انجام محاسبات تبدیل شار و توان در قسمت‌های ۹-۱ تا ۹-۳ آمده است.

### ۹-۱- محاسبه شار متوسط از روی توان ثابت

معلومات مسئله در حالت توان ثابت در طول یک بازه عبارت‌اند از:

۱- ترکیب اولیه هسته‌های موجود در سیستم؛

۲- توان حرارتی ثابت؛ و

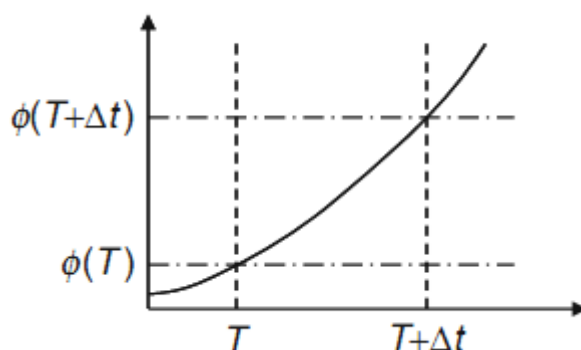
۳- طول بازه زمانی.

چنانچه فرض شود که کل توان تولیدی از یک سیستم در اثر گرمای قابل بازیافت از شکافت هسته‌ها تولید می‌شود و از گرمای حاصل از واپاشی و سایر اندرکنش‌های نوترون با هسته صرف نظر شود، توان تولید شده از یک سیستم

در حال شکافت، از طریق رابطه (۹-۱) به دست می‌آید.

$$P(t) = \varphi(t) \sum_i N_i(t) \sigma_{f,i} R_i \quad (۹-۱)$$

که در این رابطه  $\varphi$  شار یک گروهی نوترون‌های سیستم،  $N_i$  تعداد هسته‌های شکافای آم،  $\sigma_{f,i}$  سطح مقطع میکروسکوپی شکافت هسته  $i$  و  $R_i$  گرمای قابل حصول از هر شکافت هسته  $i$  است. با توجه به اینکه مقدار هسته‌های شکافا در طول زمان تغییر می‌کند، در طول یک بازه زمانی، تنها می‌توان یکی از شار یا توان سیستم را ثابت در نظر گرفت و دیگری تابعی از زمان خواهد بود. از آنجایی که با مصرف سوخت، غلظت هسته‌های شکافا کم می‌شود؛ به طور معمول در حالت توان ثابت و با فرض اینکه غلظت هسته‌های سیستم به حالت پایدار خود رسیده باشد، شار سیستم در طول بازه زمانی افزایش می‌یابد.<sup>۱</sup> شکل ۱۳ تغییرات نوعی شار سیستم در حالت توان ثابت در طول یک بازه زمانی را نشان می‌دهد.



شکل ۱۳: تغییرات شار سیستم در حالت توان ثابت در یک بازه زمانی.

حال با فرض ثابت بودن در طول بازه، شار متغیر با زمان به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$\varphi(t) = \frac{P}{\sum_i N_i(t) \sigma_{f,i} R_i} \quad (۹-۲)$$

با تعریف  $S(t) \equiv \sum_i N_i(t) \sigma_{f,i} R_i$ ، بسط تیلور تابع شار حول صفر به شکل زیر درمی‌آید:

$$\varphi(t) = P \left[ S(0)^{-1} - t \frac{S'(0)}{S(0)^2} + \frac{t^2}{2} \frac{2S'(0)^2 - S(0)S''(0)}{S(0)^3} + \dots \right] \quad (۹-۳)$$

از آنجایی که نرخ تبدیل هسته‌های شکافا، اغلب نسبت به بازه‌های زمانی مورد استفاده در محاسبات مصرف سوخت، خیلی کند است، می‌توان با تقریب خوبی از جملات مشتق سوم به بعد غلظت‌های هسته‌های شکافا صرف نظر نمود.

<sup>۱</sup> مگر حالتی که راکتیویته مثبت ناشی از تولید هسته‌های شکافا مثل پلوتونیوم بر راکتیویته منفی ناشی از مصرف هسته‌های شکافا مثل اورانیوم و تولید محصولات شکافت غلبه کند.

برای محاسبه یک شار میانگین در طول بازه زمانی، انتگرال تابع (۳-۹) روی کل بازه زمانی تقسیم بر طول بازه زمانی (T) می‌شود:

$$\bar{\varphi} = \frac{\int_0^T \varphi(t) dt}{\int_0^T dt} = \varphi(0) \left[ 1 - \frac{T}{2} \frac{S'(0)}{S(0)} + \frac{T^2}{6} \left( \frac{2S'(0)^2 - S(0)S''(0)}{S(0)^2} \right) \right] \quad (۴-۹)$$

از رابطه (۴-۹) می‌توان برای تخمین شار متوسط در طول یک بازه زمانی که در آن توان سیستم ثابت است، با استفاده از شرایط ابتدای بازه استفاده کرد.

چنانچه طول بازه زمانی انتخاب شده برای انجام محاسبات مصرف سوخت به اندازه‌ای بزرگ باشد که برای تخمین تغییرات هسته‌های شکافا در طول بازه، جمع سه جمله اول سری تیلور در رابطه (۳-۹) کافی نباشد، رابطه (۴-۹) تخمین خوبی از شار متوسط در بازه زمانی ارائه نخواهد داد. برای حل این مشکل احتمالی، کد BATIS 1.0 در به کار بستن رابطه (۴-۹)، ابتدا مقدار داخل کروشه را که در واقع همان نسبت شار متوسط در طول بازه به شار در ابتدای بازه است، محاسبه می‌کند و اگر قدرمطلق اختلاف این مقدار از ۱ بیشتر از ۰/۲ باشد، بازه زمانی را به تعدادی زیربازه زمانی تقسیم کرده و محاسبات را ادامه می‌دهد. معیار انتخاب تعداد زیربازه‌ها در این حالت در رابطه (۵-۹) آمده است.

$$\lambda \equiv \left[ 1 - \frac{T}{2} \frac{S'(0)}{S(0)} + \frac{T^2}{6} \left( \frac{2S'(0)^2 - S(0)S''(0)}{S(0)^2} \right) \right]$$

IF  $(|\lambda - 1| > 0.2)$  THEN

$$NSTEPS = \left\lceil \frac{|\lambda - 1|}{0.2} \right\rceil + 1$$

END

به عنوان مثال اگر بازه انتخابی توسط کاربر، ۱۰۰ روز باشد و مقدار  $\lambda$  برابر ۱/۵ به دست آید، کد BATIS 1.0 بازه زمانی ۱۰۰ روز را به ۴ بازه با طول ۲۵ روز می‌شکند ( $\lceil |1.5 - 1| / 0.2 \rceil + 1 = 4$ ). کد ORIGEN2 این معیار را دارد؛ ولی بازه زمانی را به صورت خودکار نمی‌شکند و تنها به چاپ یک پیام هشدار در فایل خروجی ۱۵ که مربوط به اطلاعات اشکالیابی اجرا است، اکتفا می‌کند و محاسبات را با همان بازه زمانی بزرگ ادامه می‌دهد.

### ۹-۲- محاسبه توان متوسط از روی شار ثابت

مشابه توضیحات بخش قبل، از رابطه (۹-۱)، بسط تیلور تابع توان سیستم حول صفر به شکل زیر به دست می‌آید:

$$P(t) = \varphi \left[ S(0) + S'(0) \times t + S''(0) \times \frac{t^2}{2} + \dots \right] \quad (۹-۶)$$

با فرض قابل صرف نظر بودن جملات چهارم به بعد سری تیلور (۹-۶)، برای محاسبه توان تولیدی میانگین در طول بازه زمانی، از تابع بالا روی کل بازه زمانی انتگرال گرفته و تقسیم بر طول بازه زمانی (T) می‌شود:

$$\bar{P} = \frac{\int_0^T P(t) dt}{\int_0^T dt} = P_0 \left[ 1 + \frac{S'(0)}{S(0)} \times \frac{T}{2} + \frac{S''(0)}{S(0)} \times \frac{T^2}{6} \right] \quad (۹-۷)$$

شار ثابت ورودی توسط کاربر برای انجام محاسبات مصرف سوخت کافی است و محاسبه توان متوسط در طول بازه زمانی، تنها جهت اطلاع کاربر در خروجی کد انجام می‌شود و در معادلات مصرف سوخت وارد نمی‌شود. از این رو در محاسبات تبدیل شار ثابت به توان متوسط در طول بازه، اگر قدرمطلق اختلاف مقدار داخل کروسه در رابطه (۹-۷) با ۱ بیشتر از ۰/۲ شود، کد BATIS 1.0 بازه زمانی را به زیربازه‌های کوچک‌تر نمی‌شکند؛ بلکه تنها یک پیغام هشدار درباره خطای قابل توجه در مقدار توان متوسط محاسبه شده در بازه مورد نظر، به کاربر نمایش می‌دهد.

### ۹-۳- در نظر گرفتن تعادل پایدار<sup>۱</sup> قبل از محاسبه جملات سری تیلور

همان‌طور که در دو بخش قبل توضیح داده شد، برای محاسبه توان یا شار متوسط در یک بازه زمانی، به محاسبه تنها سه جمله اول سری تیلور (تا مشتق دوم تابع) در روابط (۹-۴) و (۹-۷) بسنده می‌شود. از آنجایی که ممکن است به علت وجود برخی هسته‌های کوتاه‌عمر در بین هسته‌های شکاف، تغییرات تابع  $S(t)$  در بازه زمانی مدنظر، تند بوده و محاسبه مشتقات اول و دوم برای میانگین‌گیری، کافی نباشد، کد ORIGEN2 قبل از محاسبه مشتقات اول و دوم تابع  $S(t)$ ، برای همه هسته‌های کوتاه‌عمر شکاف، شرایط تعادل پایدار را در نظر می‌گیرد. تعادل پایدار به حالتی گفته می‌شود که در زنجیره واپاشی، ثابت واپاشی هسته دختر بسیار بزرگ‌تر از ثابت واپاشی هسته مادر باشد. در این صورت با تقریب خوبی می‌توان از تغییرات غلظت هسته دختر در طی زمان صرف نظر کرد و مشتق تغییرات را برابر صفر در نظر گرفت.

<sup>۱</sup> Secular Equilibrium

همان طور که در بخش ۶-۷ توضیح داده شده است، در کد ORIGEN2 و همین طور در کد BATIS 1.0، معیار کوتاه عمری برای یک هسته این است که نیمه عمر هسته از یک دهم بازه زمانی کوچک تر باشد. کد ORIGEN2 برای اعمال شرط تعادل پایدار برای هسته های شکافای کوتاه عمر، مشتق تغییرات هسته کوتاه عمر را نسبت به زمان مساوی صفر قرار می دهد و به این ترتیب یک دستگاه معادلات خطی تشکیل می شود که با حل آن به روش تکرار سایدل، مطابق (۸-۹)، غلظت های تعادلی هسته های کوتاه عمر به دست می آید.

$$\frac{dN_i}{dt} = 0 \quad i = 1, 2, \dots \text{FOR ALL FISSIONABLE SHORT-LIVED NUCLIDES}$$

Seidel Method

DO

$$N_i^{n+1} = \frac{\sum_{j \neq i} A_{i,j} N_j^n}{A_{i,i}} \quad (8-9)$$

$$IF \text{ Max} \left( \frac{|N_i^{n+1} - N_i^n|}{N_i^{n+1}} \right) < Tol \quad EXIT$$

END DO

که  $N_i$  غلظت هسته شکافای کوتاه عمر  $i$ ام،  $A_{i,j}$  درایه های ماتریس مصرف سوخت و  $Tol$  معیار خطای قابل قبول برای رسیدن به همگرایی است. پس از تغییر غلظت هسته های شکافای کوتاه عمر به مقدار تعادلی به دست آمده از رابطه (۸-۹)، محاسبه مشتقات اول و دوم تابع  $S(t)$  انجام می شود.

## ۱۰- کد ترابرد ذرات MCNP

به طور کلی کدهای حل معادله ترابرد، به دو دسته کدهای مبتنی بر حل قطعی<sup>۱</sup> و حل تصادفی<sup>۲</sup> تقسیم می شوند. در کدهای مبتنی بر حل قطعی، سعی بر این است که با فرضیات ساده کننده و روش های عددی موجود، معادله ترابرد<sup>۳</sup> یا پخش<sup>۴</sup> حل شود. بسته به فرضیات استفاده شده برای ساده سازی و روش های حل به کار رفته، انواع کدهای حل معادله ترابرد یا پخش به روش قطعی وجود دارد. مزیت این کدها در سرعت بالای محاسبات آنها و عیب آنها در ساده سازی ها و فرضیات به کار رفته است. در روش های تصادفی به جای حل تحلیلی معادلات ترابرد، سعی می شود که رفتار واقعی نوترون در سیستم، شبیه سازی شود. به عنوان مثال، نوع اندرکنشی که نوترون با مواد می دهد، مسافتی که نوترون پس از یک پراکندگی طی می کند، تعداد نوترون هایی که پس از یک شکافت تولید می شوند و

<sup>۱</sup> Deterministic

<sup>۲</sup> Stochastic

<sup>۳</sup> Transport

<sup>۴</sup> Diffusion

غیره، همگی با اعداد تصادفی تعیین می‌شوند. برای این منظور، ذراتی که تولید می‌شوند تا جایی که جذب شوند یا از سیستم به طور کامل خارج شوند، دنبال می‌شوند و تعداد ذرات در موقعیت‌های مکانی مختلف ثبت می‌شود. به این روش، مونت کارلو<sup>۱</sup> گفته می‌شود. ترابرد ذرات به این روش محدودیت خاصی بر سیستم اعمال نمی‌کند و می‌توان همه پارامترها را به همان صورتی که در واقعیت وجود دارند، شبیه‌سازی نمود. از مهم‌ترین نقاط قوت حل به روش مونت کارلو، شبیه‌سازی دقیق هندسه‌های پیچیده است. در کدهای تحلیلی، بسیاری از هندسه‌های پیچیده را باید با تقریب‌هایی به هندسه‌های ساده‌تر تبدیل نمود؛ ولی در روش مونت کارلو چنین محدودیتی وجود ندارد. عیب روش مونت کارلو، سرعت پایین آن نسبت به کدهای یقینی است؛ چراکه برای به دست آوردن جواب قابل قبول باید تعداد ذرات زیادی در سیستم دنبال شوند. امروزه با توجه به پیشرفت‌های روزافزون در صنعت کامپیوتر، از جمله افزایش سرعت پردازنده‌ها، افزایش تعداد پردازنده‌ها روی سیستم‌های کامپیوتری و امکان اجرای موازی روی چندین پردازنده و افزایش ظرفیت حافظه‌های کامپیوتری، عیب‌های روش مونت کارلو کم‌رنگ‌تر شده و تمایل به استفاده از روش مونت کارلو به دلیل نقاط قوت آن بیشتر شده است.

یکی از کدهای معروف و پرکاربرد و معتبر در زمینه ترابرد ذرات به روش مونت کارلو، کد MCNP است که توسط آزمایشگاه ملی لس‌آلاموس (LANL)<sup>۲</sup> در آمریکا، نسخه‌های مختلفی از آن تا به حال منتشر شده است. کد ترابرد ذرات MCNP، یک کد چندمنظوره برای ترابرد ذرات نوترون، گاما و الکترون (به صورت تکی یا ترکیبی از آن‌ها) با طیف انرژی پیوسته یا گروهی در هندسه‌های پیچیده است. این کد داده‌های ورودی خود را از طریق یک فایل متنی که توسط کاربر تهیه می‌شود، می‌گیرد. در فایل ورودی، اطلاعات مشخصات هندسه سیستم، مشخصات مواد و ترکیب ایزوتوپی، مشخصات چشمه، نوع خروجی‌های موردنظر و ... وجود دارد. MCNP از کتابخانه‌های داده‌های اتمی با طیف انرژی پیوسته استفاده می‌کند. این داده‌ها با قالبی به نام ACE<sup>۳</sup> ذخیره شده‌اند که توسط کدهای پردازش داده نظیر NJOY قابل تولید است. جداول داده مورد استفاده در این کد برحسب کتابخانه اولیه، نوع ذره فرودی، ایزوتوپ و دما طبقه‌بندی شده و به هر یک از آن‌ها یک شناسه اختصاص داده می‌شود. مسیر رسیدن به هر یک از این جداول داده در یک فایل متنی به نام *xsdir* مشخص شده است.

شبیه‌سازی هندسه سیستم در MCNP با استفاده از اشتراک و اجتماع سطوح مختلف انجام می‌شود؛ به این صورت که کاربر در یک قسمت مجزا از ورودی، با دستوراتی مشخص، سطوح موردنیاز خود را تعریف می‌کند. این سطوح می‌تواند صفحه تخت، کره، استوانه، مخروط و ... باشد. سپس در قسمتی دیگر از ورودی از طریق اشتراک و اجتماع

<sup>۱</sup> Monte Carlo

<sup>۲</sup> Los Alamos National Laboratory

<sup>۳</sup> A Compact ENDF

نیم‌فضاهای ایجاد شده توسط این صفحات، فضاهایی به نام سلول ایجاد می‌کند که آن سلول می‌تواند حاوی ماده‌ای مشخص با چگالی مشخص باشد.

هدف از استفاده از کد MCNP در محاسبات مصرف سوخت، به‌روزرسانی شار (طیف) نوترون و سطح مقطع‌های یک‌گروهی بعضی هسته‌های مهم در بازه‌های زمانی مختلف است. برای عملیات همبسته‌سازی محاسبات مصرف سوخت BATIS 1.0 با محاسبات ترابرد MCNP، نیاز به توسعه ماژول‌هایی با ویژگی‌های زیر است:

۱- بتواند ورودی کد MCNP را خوانده و تفسیر کند؛

۲- تغییرات لازم برای محاسبات همبسته نوترونی- مصرف سوخت را در ورودی اعمال کند؛

۳- کد MCNP را اجرا کرده و اطلاعات موردنیاز برای محاسبات مصرف سوخت را از خروجی کد MCNP استخراج کند؛

۴- با اطلاعات به دست آمده از خروجی MCNP، محاسبات مصرف سوخت را انجام داده و تغییرات غلظت هسته‌ها را به دست آورد؛

۵- غلظت‌های جدید مواد را در ورودی MCNP وارد کند.

۶- مراحل ۳ تا ۵ را برای بازه‌های زمانی مختلف تکرار کند.

برای افزودن قابلیت همبسته‌سازی کد مونت‌کارلوی MCNP با ماژول محاسبات مصرف سوخت، سه زیربرنامه به نام‌های *MCNP\_INITIALIZE*، *MCNP\_RUN* و *MCNP\_MODIFY* طراحی و نوشته شده است. زیربرنامه *MCNP\_INITIALIZE* برای هر مسئله تنها یک بار اجرا شده و وظیفه آن آماده‌سازی ورودی کد MCNP برای اجرا در محاسبات مصرف سوخت و تفسیر داده‌های ورودی است (مراحل ۱ و ۲). زیربرنامه *MCNP\_RUN* وظیفه اجرای برنامه MCNP و سپس خواندن فایل خروجی آن و استخراج داده‌های مورد نیاز و استفاده از نتایج موجود در فایل خروجی MCNP را به عهده دارد (مراحل ۳ و ۴). این زیربرنامه برای هر بازه زمانی حداقل یک بار فراخوانی می‌شود. منظور از حداقل یک بار فراخوانی، این است که بسته به الگوریتم‌های مختلف همبسته‌سازی، ممکن است برای هر بازه زمانی نیاز به محاسبات ترابرد دوباره یا بیشتر باشد. زیربرنامه *MCNP\_MODIFY* وظیفه به‌روزرسانی ترکیب هسته‌های مواد تعریف شده در MCNP را بر عهده دارد و پس از هر بار اجرای محاسبات مصرف سوخت BATIS 1.0 و قبل از فراخوانی زیربرنامه *MCNP\_RUN*، این زیربرنامه اجرا می‌شود (مرحله ۵). همچنین وظیفه ارتباط محاسبات مصرف سوخت و محاسبات مونت‌کارلو در متن اصلی برنامه BATIS 1.0 انجام می‌شود (مرحله



۶). جزئیات عملیات زیربرنامه‌های *MCNP\_INITIALIZE* و *MCNP\_RUN* در ادامه آمده است.

### ۱-۱۰- زیربرنامه *MCNP\_INITIALIZE*

وظیفه این زیربرنامه خواندن ورودی *MCNP* و تفسیر داده‌های آن و اعمال تغییرات لازم بر روی آن است. زیربرنامه *MCNP\_INITIALIZE* پس از فراخوانی، ابتدا فایل ورودی *MCNP* را به برنامه اجرایی *MCNP* داده و آن را با پارامترهای *I* و *PRINT* اجرا می‌کند. کد *MCNP* با پارامتر *I* به پردازش ورودی و بررسی درستی دستورات می‌پردازد و پارامتر *PRINT* نیز برای چاپ همه جداول ممکن در فایل خروجی *MCNP* است. بنابراین در این مرحله کد *MCNP* به ترابرد مسئله پرداخته و تنها درستی دستورات فایل ورودی را بررسی می‌کند. چنانچه *MCNP* خطای اساسی از ورودی کاربر پیدا کند، این موضوع با یک پیغام خطا به اطلاع کاربر می‌رسد و ادامه روند برنامه قطع می‌شود. در صورت اجرای موفق *MCNP*، زیربرنامه *MCNP\_INITIALIZE* فایل خروجی ایجاد شده توسط *MCNP* را باز کرده و ابتدا کسرهای اتمی و کسرهای جرمی بهنجار هسته‌های تشکیل‌دهنده برای هر یک از مواد مصرف‌شدنی<sup>۱</sup> را از جدول شماره ۴۰ خوانده و در بردار مواد اولیه ذخیره می‌کند. سپس شماره سلول‌هایی را که مواد مصرف‌شدنی در آن قرار دارند به همراه چگالی اتمی و حجم سلول‌ها را از جدول شماره ۶۰ خوانده و در متغیرهای مربوطه ذخیره می‌کند. در جدول شماره ۶۰ در خروجی *MCNP*، اطلاعات سلول‌های تعریف شده در ورودی *MCNP* از جمله شماره هر سلول، شماره ماده سلول، چگالی اتمی و چگالی جرمی ماده سلول، حجم و جرم سلول و پارامتر اهمیت نوترون در آن سلول چاپ می‌شود. نکته حائز اهمیت این که در ورودی *MCNP* تهیه شده برای کد *BATIS 1.0*، نباید از یک ماده با چگالی‌های مختلف در چند سلول استفاده شده باشد؛ چراکه در کد *BATIS 1.0* یک ماده به کار رفته در چند سلول به صورت همگن در نظر گرفته می‌شود. برای محاسبات مصرف سوخت یک ماده با چگالی‌های مختلف در چند سلول، کاربر باید از شماره ماده‌های متفاوت استفاده کند.

بعد از این مرحله، زیربرنامه *MCNP\_INITIALIZE* یک فایل ورودی جدید *MCNP* (که از این به بعد، به آن ورودی اصلاح شده گفته می‌شود) ایجاد کرده و اطلاعات موجود در بخش تعریف سلول‌ها و بخش تعریف صفحات از ورودی اصلی *MCNP* را در آن کپی می‌کند. در این مرحله تمامی خطوط توضیحی حذف شده و در ورودی اصلاح شده وارد نمی‌شوند. همچنین شماره خط سلول‌هایی که حاوی ماده مصرف‌شدنی است، در آرایه‌ای ذخیره می‌شود تا در دفعات بعد با تغییر ترکیب هسته‌های هر ماده، چگالی اتمی جدید در ورودی *MCNP* تصحیح شود. پس از اتمام پردازش و کپی بخش تعریف سلول‌ها و بخش تعریف صفحات از ورودی *MCNP*، زیربرنامه *MCNP\_INITIALIZE*

<sup>۱</sup> منظور از مواد مصرف‌شدنی، موادی از ورودی *MCNP* است که برای آن‌ها محاسبات مصرف سوخت انجام می‌شود.

در ابتدای بخش داده‌های ورودی اصلاح شده تغییراتی به شرح زیر اعمال می‌کند.

از آنجایی که خروجی تالی‌های MCNP به‌نحیج شده است، یعنی خروجی چاپ شده برابر تعداد تالی شمارش شده تقسیم بر تعداد ذرات اولیه چشمه است، باید مقدار تالی محاسبه شده توسط MCNP برای شار، در یک ضریب تبدیل ضرب شود تا مقدار شار واقعی سیستم محاسبه شود. این ضریب بر اساس مراجع [۱۱، ۱۲] از رابطه (۱-۱۰) محاسبه می‌شود:

$$FM = \frac{P \times \overline{V_{tot}}}{\overline{Q_{tot}} \times K_{eff}} \quad (1-10)$$

که در این رابطه  $P$  توان کل سیستم،  $\overline{V_{tot}}$  متوسط تعداد نوترون خروجی از شکافت در کل سیستم،  $\overline{Q_{tot}}$  متوسط انرژی آزاد شده از هر شکافت در کل سیستم و  $K_{eff}$  ضریب تکثیر مؤثر سیستم است.

$$\varphi_{total} = \varphi_{mcnp} \times FM \quad (2-10)$$

برای محاسبه متوسط نوترون‌های خروجی و متوسط گرمای حاصل از شکافت کل سیستم باید از تالی‌های MCNP استفاده شود. MCNP این امکان را دارد که یک تالی مورد نظر را در مقادیری خاص ضرب کرده و در خروجی چاپ کند. به عنوان مثال برای محاسبه نرخ یک اندرکنش نوعی در یک سلول، یعنی  $R_i = N \sigma_i \varphi$ ، باید شار به دست آمده از تالی ۴ را در چگالی اتمی و در سطح مقطع میکروسکوپی سلول ضرب نمود. برای این منظور، زیربرنامه `MCNP_INITIALIZE` برای هر ماده مصرف‌شدنی، یک تالی نوع ۴ و یک ضریب تالی FM به صورت زیر در ورودی اصلاح شده اضافه می‌کند:

$$\begin{aligned} &F4:N (C1 C2 C3 ...) \\ &FM4: (-1 m -6 -7) (-1 m -6 -8) (-1 m -6) \end{aligned} \quad (3-10)$$

که در رابطه بالا  $C1$  و  $C2$  و ... شماره سلول‌هایی است که در آن ماده مصرف‌شدنی شماره  $m$  به کار رفته است. منظور از هریک از پرانتزها در خط دوم رابطه (۳-۱۰) و آنچه MCNP محاسبه می‌کند در زیر آمده است.

$$\begin{aligned} (-1 m -6 -7) &= \int N_m \sigma_{f,m}(E) v_m(E) \varphi(E) dE \\ (-1 m -6 -8) &= \int N_m \sigma_{f,m}(E) Q_m(E) \varphi(E) dE \\ (-1 m -6) &= \int N_m \sigma_{f,m}(E) \varphi(E) dE \end{aligned} \quad (4-10)$$

پرانتز اول نشان‌دهنده انتگرال حاصل ضرب نرخ ماکروسکوپی شکافت در تعداد نوترون‌های حاصل از شکافت در تمام

بازه انرژی، پرنانتر دوم نشان دهنده انتگرال حاصل ضرب نرخ ماکروسکوپی شکافت در گرمای حاصل از شکافت در تمام بازه انرژی و پرنانتر سوم نشان دهنده انتگرال نرخ ماکروسکوپی شکافت در تمام بازه انرژی است. برای محاسبه مقدار  $\overline{V_{tot}}$  و  $\overline{Q_{tot}}$  باید انتگرال‌های صورت و مخرج روابط (۵-۱۰) و (۶-۱۰) محاسبه شود. برای این منظور، از روابط (۷-۱۰) و (۸-۱۰) استفاده می‌شود.

$$\overline{V_{tot}} = \frac{\int \int N_m \sigma_{f,m}(E) v_m(E) \phi(E) dE dV}{\int \int N_m \sigma_{f,m}(E) \phi(E) dE dV} \quad (5-10)$$

$$\overline{Q_{tot}} = \frac{\int \int N_m \sigma_{f,m}(E) Q_m(E) \phi(E) dE dV}{\int \int N_m \sigma_{f,m}(E) \phi(E) dE dV} \quad (6-10)$$

$$\overline{V_{tot}} = \frac{\sum_m \int N_m \sigma_{f,m}(E) v_m(E) \phi(E) dE \times V_m}{\sum_m \int N_m \sigma_{f,m}(E) \phi(E) dE \times V_m} \quad (7-10)$$

$$\overline{Q_{tot}} = \frac{\sum_m \int N_m \sigma_{f,m}(E) Q_m(E) \phi(E) dE \times V_m}{\sum_m \int N_m \sigma_{f,m}(E) \phi(E) dE \times V_m} \quad (8-10)$$

که در اینجا اندیس  $m$  نشان دهنده مواد مختلف است و  $V_m$  حجم سلول‌های حاوی ماده  $m$  را نشان می‌دهد.

چنانچه کاربر بخواهد برای محاسبه برخی سطح مقطع‌ها برای یک یا چند هسته، از کتابخانه سطح مقطع پیوسته MCNP به جای داده‌های کتابخانه مصرف سوخت استفاده کند، در ادامه فایل ورودی اصلاح شده، تالی‌های نوع ۴ برای سلول‌های حاوی هر ماده مصرف‌شدنی به همراه کارت FM برای شماره اندرکنش‌های موردنظر کاربر برای هسته یا هسته‌های مشخص شده، قرار داده می‌شود. برای هر هسته‌ای که کاربر محاسبه سطح مقطع آن را درخواست داده است، ماده‌ای تعریف می‌شود که تنها شامل هسته مورد نظر است. کاربر می‌تواند برای هر هسته، از بین شماره‌های مربوط به اندرکنش‌های موجود در **جدول شماره ۱۵** استفاده کند. در صورت وجود هرگونه ابهام در توضیحات این بخش، به مثال ارائه شده در انتهای این بخش مراجعه شود.

جدول شماره ۱۵: شماره اندرکنش‌های کاربردی در دستور FM.

شماره	اندرکنش	شماره	اندرکنش
۱۶	(n,2n)	۱۰۴	(n,d*)
۱۷	(n,3n)	۱۰۵	(n,t**)

(n, <sup>3</sup> He)	۱۰۶	شکافت	-۶
(n,α)	۱۰۷	(n,γ)	۱۰۲
متوسط نوترون حاصل از شکافت	-۷	سطح مقطع (n,p)	۱۰۳
گرمای قابل بازیافت از شکافت	-۸		

\* deuterium

\*\* tritium

در حالت استفاده از کتابخانه ۶۳ گروهی CINDER برای محاسبات مصرف سوخت، نیاز به محاسبه شار ۶۳ گروهی نوترون در بازه‌بندی انرژی مورد استفاده در کتابخانه CINDER وجود دارد. برای این منظور از یک دستور تالی ۴ به همراه دستور E که مربوط به بازه‌بندی انرژی خروجی تالی مورد نظر است، استفاده می‌شود. ساختار دستور تالی که زیربرنامه MCNP\_INITIALIZE در ورودی اصلاح شده MCNP اضافه می‌کند، به شکل زیر است.

$$F4:N \quad \underbrace{(C_{1,m1} \ C_{2,m1} \ \dots) (C_{1,m2} \ C_{2,m2} \ \dots) (C_{1,m3} \ C_{2,m3} \ \dots) \ \dots}_{\text{for all defined materials}} \quad (9-10)$$

$$E4 \quad E_1 \ E_2 \ E_3 \ \dots \ E_{64}$$

که در اینجا  $C_{1,m1}$  و  $C_{2,m1}$  و ... شماره سلول‌هایی است که در آن‌ها ماده اول ( $m_1$ ) استفاده شده و  $C_{1,m2}$  و  $C_{2,m2}$  و ... شماره سلول‌هایی است که در آن‌ها ماده دوم ( $m_2$ ) استفاده شده و همین‌طور تا آخر. به عبارتی برای هر ماده مصرف‌شدنی، یک پرانتز حاوی شماره سلول‌هایی که آن ماده در آن‌ها استفاده شده است، وارد می‌شود.  $E_1$  تا  $E_{64}$  نیز مرزهای گروه‌های انرژی کتابخانه CINDER است که به ترتیب از کمترین تا بیشترین بر حسب MeV وارد می‌شود.

سپس در صورت وجود هسته‌هایی که سطح مقطع آن‌ها با تالی محاسبه می‌شود، برای هر هسته یک دستور تعریف ماده شامل هسته با کسر اتمی ۱ اضافه می‌شود. در ادامه، کارت‌های بخش داده‌ها در ورودی اصلی MCNP به ورودی اصلاح شده کپی می‌شود. اگر در بخش کارت‌های داده در ورودی اصلی MCNP، کارت BURN یا کارت PRINT وجود داشته باشد، از ورودی حذف می‌شود. کارت BURN مربوط به قابلیت محاسبات مصرف سوخت است که از نسخه MCNPX به آن اضافه شده است. در صورت وجود کارت BURN محاسبات MCNP برای بازه‌های زمانی مختلفی که در کارت BURN مشخص شده، ادامه خواهد یافت که در اینجا مطلوب نیست. همچنین کارت PRINT نیز در صورت وجود، برای خلاصه بودن خروجی ایجاد شده توسط MCNP از ورودی برداشته می‌شود.

کد MCNP برای انجام ترابرد ذره، باید برای ایزوتوپ‌های به کار رفته در تعریف مواد در ورودی MCNP، اطلاعات سطح مقطع‌های پیوسته را داشته باشد و اگر MCNP این کتابخانه‌ها را پیدا نکند، اجرا نخواهد شد. به همین دلیل

زیربرنامه `MCNP_INITIALIZE` فایل `xmdir`<sup>۱</sup> را باز کرده و همه هسته‌هایی را که اطلاعات کتابخانه پیوسته آن‌ها با پسوند مورد نیاز برای هر ماده در فایل `xmdir` موجود باشد، در آرایه‌ای ذخیره می‌کند. در متن اصلی برنامه BATIS 1.0 هنگام جای‌گذاری ترکیب جدید مواد در ورودی MCNP، اگر هسته‌ای آدرس کتابخانه پیوسته آن در `xmdir` نباشد، آن هسته در ورودی MCNP وارد نخواهد شد. کاربر باید به وجود کتابخانه با پسوند مورد نیاز برای هسته‌های مهم در ترابرد توجه کند، چراکه ممکن است هسته‌ای مهم و مؤثر بر طیف سیستم تولید شود و به علت عدم وجود کتابخانه پیوسته آن، از اثر آن در محاسبات طیف صرف‌نظر شده و خطای قابل توجهی وارد محاسبات شود.

از طرف دیگر، اگر در ورودی MCNP، هر نوع دستور مربوط به تالی نوع ۴ و یا کارت‌های مرتبط با تالی ۴ وجود داشته باشد، زیربرنامه `MCNP_INITIALIZE` شماره تالی را از ادامه آخرین تالی نوع ۴ که خود به ورودی اضافه کرده است، تغییر داده و سپس در ورودی اصلاح شده قرار می‌دهد. برای روشن‌تر شدن موضوع به ذکر یک مثال از طرز کار زیربرنامه `MCNP_INITIALIZE` پرداخته می‌شود.

#### ۱-۱-۱۰- یک مثال از نحوه کارکرد زیربرنامه `MCNP_INITIALIZE`

به عنوان مثال ورودی MCNP در شکل ۱۴ که شامل ۳۸ خط است، در نظر گرفته می‌شود. خط اول، خط عنوان است و جنبه اجرایی ندارد. از خط دوم تا خط هشتم، کارت‌های تعریف سلول‌ها، از خط نهم تا پانزدهم، کارت‌های تعریف سطوح و از خط هفدهم تا سی‌وهشتم، کارت‌های داده وارد شده است. همچنین فرضیات زیر توسط کاربر برای انجام محاسبات در نظر گرفته شده است:

۱- از کتابخانه مصرف سوخت CINDER استفاده شود.

۲- برای همه مواد تعریف شده، محاسبات مصرف سوخت انجام شود.

۳- برای هسته‌های  $^{235}\text{U}$ ،  $^{238}\text{U}$ ،  $^{239}\text{Pu}$  و  $^{241}\text{Pu}$ ، سطح مقطع‌های شکافت و جذب پرتوزا از کتابخانه‌های پیوسته MCNP به دست آید. برای هسته  $^{235}\text{U}$  از کتابخانه با پسوند 60C، برای هسته‌های  $^{238}\text{U}$  و  $^{241}\text{Pu}$  از کتابخانه با پسوند 70C و برای هسته  $^{239}\text{Pu}$  از اولین کتابخانه موجود در `XSDIR` استفاده شود.

از ورودی MCNP مشخص است که هندسه سیستم شامل ۵ سلول است که در سلول‌های ۱ و ۳ ماده شماره ۱۰۱ و در سلول ۴ و ۵ به ترتیب ماده شماره ۱۰۲ و ۱۰۳ قرار دارد. بخش کارت‌های داده فایل ورودی تغییر یافته MCNP

<sup>۱</sup> `xmdir` فایل متنی است که محل ذخیره اطلاعات کتابخانه هر ایزوتوپ در آن وجود دارد و MCNP برای پیدا کردن کتابخانه‌های هر هسته به این فایل نیاز دارد.

توسط زیربرنامه *MCNP\_INITIALIZE* در شکل ۱۵ نشان داده شده است. از آنجا که کاربر قصد محاسبه سطح مقطع برای چهار هسته را از طریق تالی دارد، چهار ماده به شماره‌های ۱۰۰۰۱ تا ۱۰۰۰۴ برای این چهار هسته تعریف شده است. اولین تالی با شماره ۱۴ برای ماده ۱۰۱ که در سلول‌های ۱ و ۳ وجود دارد، گذاشته شده است. در دستور FM14 بعد از قرار دادن ضرایب مربوط به محاسبه شار متوسط، تعداد نوترون حاصل از شکافت و گرمای حاصل از شکافت، اندرکنش‌های موردنظر برای ۴ هسته انتخابی کاربر، تالی گرفته شده‌اند. تالی شماره ۲۴ برای ماده ۱۰۲ که در سلول ۴ وجود دارد و تالی ۳۴ نیز برای ماده ۱۰۳ که در سلول ۵ وجود دارد، به همین ترتیب قرار داده شده است. از آنجایی که محاسبات با استفاده از کتابخانه ۶۳ گروهی CINDER انجام می‌شود، تالی شماره ۴۴ با بازبندی ساختار انرژی مورد استفاده در کتابخانه CINDER برای سلول‌های شامل هر سه ماده قرار داده شده است. چنانچه در ورودی کاربر، تالی از نوع ۴ وجود می‌داشت، برنامه *MCNP\_INITIALIZE* شماره تالی‌ها را به ۵۴ و ۶۴ و ... تغییر می‌داد. کارت‌های BURN و PRINT نیز از ورودی حذف شده‌اند.

```

1 PWR UO2 adjusted pin cell calculation
2 c cells
3 1 101 -9.996476 -4 -1 $fuel
4 2 0 4 -3 -1 $gap
5 3 101 -9.996476 3 -5 -1 $fuel
6 4 102 -6.44 5 -2 -1 $clad
7 5 103 -0.7569 2 -1 $water
8 6 0 1
9
10 c surfaces
11 *1 rpp -.7793 .7793 -.7793 .7793 0 347.2
12 2 cz 0.5590
13 3 cz 0.4930
14 4 cz 0.47815
15 5 cz 0.51
16
17 c data cards
18 kcode 2000 1 5 70
19 ksrc 0 0 173.6
20 imp:n 1 1 1 1 1 0
21 vol 249.3778689807 15.73049385312 7.36564465 75.733715622269 502.587952456 0
22 burn power 0.04266 mat 101 omit 101 4 6012 6013 6014 8016
23 time 1.7 20 35 40 45 55 65 70 80
24 matmod 2 4 1 -103 2 5010 3.913690e-6 5011 1.5888e-5
25 7 1 -103 2 5010 4.197463e-6 5011 1.7040e-5
26 print 40 50
27 m101
28 92238 2.17104E-2
29 92236 3.16265E-6
30 92235 6.89220E-4
31 92234 6.15165E-6
32 6012 9.13357E-6
33 7014 1.04072E-5
34 8016 4.48178E-2
35 m102 40090 -49.0926 40091 -10.8251 40092 -17.8204 40094 -17.3218 40096 -2.8501 &
36 50112 -0.0145 26054 -0.0275 26056 -0.4477 26057 -0.0105 26058 -0.0143 $clad
37 m103 1001 5.06153E-2 8016 2.53076e-2 5010 2.75612e-6 5011 1.11890e-5
38 mt103 lwtr
    
```

شکل ۱۴: یک ورودی MCNP برای مثال.

```

14
15 F14:N ( 1 3)
16 FM14: (1) (-1 101 -6 -7) (-1 101 -6 -8) (-1 101 -6) &
17 (1 10001 102) (1 10001 -6) &
18 (1 10002 102) (1 10002 -6) &
19 (1 10003 102) (1 10003 -6) &
20 (1 10004 102) (1 10004 -6)
21 F24:N ( 4)
22 FM24: (1) (-1 102 -6 -7) (-1 102 -6 -8) (-1 102 -6)
23 F34:N ( 5)
24 FM34: (1) (-1 103 -6 -7) (-1 103 -6 -8) (-1 103 -6)
25 F44:N ( 1 3) ( 4) ( 5)
26 E44 1.00000E-11 5.00000E-09 1.00000E-08 1.50000E-08 2.00000E-08 &
27 2.50000E-08 3.00000E-08 3.50000E-08 4.20000E-08 5.00000E-08 &
28 5.80000E-08 6.70000E-08 8.00000E-08 1.00000E-07 1.52000E-07 &
29 2.51000E-07 4.14000E-07 6.83000E-07 1.12500E-06 1.85500E-06 &
30 3.05900E-06 5.04300E-06 8.31500E-06 1.37100E-05 2.26000E-05 &
31 3.72700E-05 6.14400E-05 1.01300E-04 1.67000E-04 2.75400E-04 &
32 4.54000E-04 7.48500E-04 1.23400E-03 2.03500E-03 2.40400E-03 &
33 2.84000E-03 3.35500E-03 5.53100E-03 9.11900E-03 1.50300E-02 &
34 1.98900E-02 2.55400E-02 4.08700E-02 6.73800E-02 1.11100E-01 &
35 1.83200E-01 3.02000E-01 3.88700E-01 4.97900E-01 6.39279E-01 &
36 8.20850E-01 1.10803E+00 1.35335E+00 1.73774E+00 2.23130E+00 &
37 2.86505E+00 3.67879E+00 4.96585E+00 6.06500E+00 1.00000E+01 &
38 1.49182E+01 1.69046E+01 2.00000E+01 2.50000E+01
39 M10001 92235.60C 1.
40 M10002 92238.70C 1.
41 M10003 94239 1.
42 M10004 94241.70C 1.
43 kcode 2000 1 5 70
44 ksarc 0 0 173.6
45 imp:n 1 1 1 1 1 0
46 vol 249.3778689807 15.73049385312 7.36564465 75.733715622269 502.587952456 0
47 50112 -0.0145 26054 -0.0275 26056 -0.4477 26057 -0.0105 26058 -0.0143
48 mt103 lwtr
49 M101 &
50 92238 3.2285E-01 92236 4.7031E-05 92235 1.0249E-02 &
51 92234 9.1479E-05 6012 1.3582E-04 7014 1.5476E-04 &
52 8016 6.6647E-01
53 M102 &
54 40090 5.0454E-01 40091 1.1003E-01 40092 1.7916E-01 &
55 40094 1.7043E-01 40096 2.7458E-02 50112 1.1972E-04 &
56 26054 4.7107E-04 26056 7.3954E-03 26057 1.7040E-04 &
57 26058 2.2807E-04
58 M103 &
59 1001 6.6654E-01 8016 3.3327E-01 5010 3.6295E-05 &
60 5011 1.4735E-04

```

شکل ۱۵: بخش کارت‌های داده ورودی اصلاح شده.

## ۱۰-۲- زیربرنامه MCNP\_RUN

زیربرنامه *MCNP\_RUN* بعد از هر بار فراخوانی، ابتدا برنامه اجرایی *MCNP* را با پارامتر *R* فراخوانی می‌کند. پس از اتمام اجرای *MCNP*، زیربرنامه *MCNP\_RUN* فایل خروجی را باز کرده و اطلاعات مورد نیازی را که برای حصول آن‌ها، تالی‌های توضیح داده شده در بخش پیش در ورودی اضافه شدند، خوانده و در حافظه ذخیره می‌کند. به عبارتی برای هر ماده مصرف‌شدنی مقادیر متوسط  $v$  و  $Q$  و شار را از خروجی خوانده و در نهایت مقدار متوسط  $v$  و

$Q$  برای کل سیستم را مطابق روابط (۷-۱۰) و (۸-۱۰) محاسبه کرده و با استفاده از آن‌ها و توان سیستم، ضریب تبدیل شار را مطابق رابطه (۱-۱۰) محاسبه کرده و بنا بر رابطه (۲-۱۰) شار واقعی سیستم را به دست می‌آورد. در حالت محاسبات شار ثابت نیز، همین روال برای محاسبه توان سیستم انجام می‌شود. نکته مهمی که باید در مورد محاسبه گرمای متوسط سیستم در نظر گرفت این است که MCNP برای محاسبه انتگرال گرمای حاصل از شکافت، انرژی آزاد شده آنی پس از شکافت<sup>۱</sup> را محاسبه می‌کند؛ در حالی که برای به دست آوردن کل انرژی آزاد شده پس از شکافت باید طبق مرجع [۱۲] مقدار خروجی MCNP در ضریب ۱/۱۱۱ ضرب شود. در واقع این ضریب تخمینی از انرژی آزاد شده با تأخیر از شکافت و تابش‌های گامای پس از شکافت است که از طریق تقسیم مقدار  $200\text{ MeV}$  بر انرژی آزاد شده آنی  $^{235}\text{U}$  به دست آمده است.

چنانچه از دستور KCODE در ورودی MCNP استفاده شده باشد (محاسبات بحرانی)، مقدار ضریب تکثیر سیستم محاسبه و در خروجی MCNP چاپ می‌شود. چنانچه کاربر از کد MCNP در حالت چشمه ثابت استفاده کرده باشد، آنگاه می‌توان از جدول خلاصه مسئله<sup>۲</sup> در خروجی MCNP، مقدار ضریب تکثیر را به دست آورد. در جدول خلاصه برنامه، پارامتری به نام تکثیر خالص<sup>۳</sup> در سیستم چاپ می‌شود. اگر مقدار این پارامتر در متغیری به نام  $fmult$  ذخیره شده باشد، آنگاه مطابق مرجع [۱۱] ضریب تکثیر مؤثر سیستم از رابطه (۱۰-۱۰) به دست می‌آید.

$$K_{eff} = \frac{(fmult - 1)}{(fmult - \frac{1}{V_{tot}})} \quad (10-10)$$

که  $V_{tot}$  همان متوسط نوترون‌های حاصل از شکافت در کل سیستم است که پیش‌تر از طریق رابطه (۷-۱۰) محاسبه شده است. البته در اینجا لازم به ذکر است که مطابق مرجع [۱۱] می‌توان مقدار  $V_{tot}$  را از طریق دیگری نیز محاسبه نمود. در حالت محاسبات بحرانی از رابطه (۱۱-۱۰) و در حالت چشمه ثابت از رابطه (۱۲-۱۰) مقدار متوسط تعداد نوترون تولیدی از هر شکافت در کل سیستم به دست می‌آید.

$$\overline{V_{tot}} = K_{eff} \times \frac{src}{floss} \quad (11-10)$$

$$\overline{V_{tot}} = \frac{fsrc}{floss} \quad (12-10)$$

که در اینجا  $src$ ، وزن نوترون‌های چشمه است که مقدار تقریبی آن ۱ است.  $floss$ ، وزن نوترون‌هایی که شکافت داده‌اند و  $fsrc$  وزن نوترون‌های چشمه در اثر شکافت است. این پارامترها در جدول خلاصه برنامه در خروجی MCNP چاپ می‌شود. با بررسی حالت‌های مختلف تعداد ذرات اولیه دنبال شده در MCNP که بیانگر دقت محاسبات است،

<sup>۱</sup> Prompt recoverable energy per fission

<sup>۲</sup> Problem Summary

<sup>۳</sup> Net Multiplication



مشاهده شد که نتیجه محاسبه  $V_{tot}$  از طریق تالی گذاری و رابطه (۷-۱۰) نتیجه دقیق تری نسبت به روابط (۱۰-۱۱) و (۱۲-۱۰) دارد، هر چند که این اختلاف زیاد نیست.

چنانچه به درخواست کاربر، برای اندرکنش‌هایی از بعضی هسته‌ها، در ورودی MCNP تالی قرار گرفته باشد، زیربرنامه MCNP-RUN نرخ اندرکنش‌های مورد نظر را از خروجی خوانده و در متغیرهای مربوطه ذخیره می‌کند. اگر از کتابخانه CINDER استفاده شده باشد، طیف ۶۳ گروهی سیستم نیز از خروجی MCNP خوانده شده و در متغیر مربوطه ذخیره می‌شود. لازم به ذکر است که کد MCNP به همراه مقادیر بهنجار هر یک از تالی‌های خروجی، یک خطای نسبی<sup>۱</sup> چاپ می‌کند که این خطای نسبی از تقسیم انحراف معیار بر مقدار میانگین کمیت به دست می‌آید.

$$R = \frac{S_{\bar{x}}}{\bar{x}} \quad (13-10)$$

مطابق مرجع [۱۳] چنانچه مقدار خطای نسبی کمتر از ۰/۱ باشد، به طور معمول، جواب تالی قابل اعتماد است و اگر بین ۰/۱ تا ۰/۲ باشد، جواب، مورد تردید بوده و برای حالت‌های بزرگ‌تر از ۰/۵، مقدار خروجی تالی بی‌معنی و اشتباه خواهد بود. زیربرنامه MCNP-RUN به همراه هر یک از مقادیر تالی‌های خروجی MCNP، مقدار خطای نسبی را نیز می‌خواند و اگر خطای نسبی یک تالی بزرگ‌تر یا مساوی ۰/۱ باشد، مقدار خروجی تالی را در محاسبات وارد نخواهد کرد. اگر تالی موردنظر، یکی از تالی‌های رابطه (۳-۱۰) باشد، اجرای برنامه BATIS 1.0 به همراه یک پیغام خطا متوقف خواهد شد و اگر تالی موردنظر یکی از تالی‌های محاسبه نرخ اندرکنش هسته‌های انتخابی کاربر باشد، برای نرخ اندرکنش موردنظر از کتابخانه مصرف سوخت استفاده می‌شود.

### ۱۰-۳- روش‌های همبسته‌سازی محاسبات مصرف سوخت و ترابرد

همان‌طور که در بخش ۶ در این گزارش اشاره شده است، یکی از فرضیات اعمال شده برای رسیدن به معادله مصرف سوخت (۸-۶) صرف‌نظر کردن از تغییرات شار نوترون در طول گام زمانی است. همچنین با توجه به توضیحات بخش ۹-۱ به طور معمول در محاسبات مصرف سوخت، توان حرارتی سیستم معلوم و در طول بازه زمانی ثابت در نظر گرفته می‌شود و شار نوترون رفتاری مشابه شکل ۱۳ از خود نشان می‌دهد. برای صحت فرض انجام شده در معادله (۸-۶)، بازه زمانی مورد حل را به زیربازه‌هایی زمانی تقسیم می‌کنند؛ به گونه‌ای که بتوان از تغییرات شار نوترون در هر زیربازه زمانی صرف‌نظر کرد و مقدار شار نوترون در ابتدای بازه را در کل بازه زمانی ثابت در نظر گرفت. بنابراین یک روش ساده برای همبسته کردن محاسبات ترابرد و مصرف سوخت این است که در ابتدای هر بازه زمانی، محاسبات ترابرد انجام شده و شار (طیف) نوترون به همراه سطح‌مقطع‌های به‌روز در محاسبات مصرف سوخت

<sup>۱</sup> Relative Error

استفاده شود و مقادیر جدید هسته‌ها در انتهای بازه زمانی به کد ترا برد داده شود. الگوریتم این روش همبسته‌سازی که به روش اوایلر صریح<sup>۱</sup> مشهور است، در شکل ۱۶ نشان داده شده است. در این الگوریتم، I تعداد گام‌های محاسبات مصرف سوخت و  $N_i$  بردار غلظت هسته‌ها در انتهای بازه  $\Delta t$  است. منظور از  $\varphi(N_i)$  انجام محاسبات نرخ اندرکنش میکروسکوپی مواد (که در اینجا با MCNP انجام می‌شود) با در نظر گرفتن بردار  $N_i$  به عنوان مقدار هسته‌ها است. منظور از  $e^{A(\varphi_i)(T_{i+1}-T_i)}$  انجام محاسبات مصرف سوخت با فرض شار ثابت  $\varphi_i$  برای گام زمانی  $T_i$  تا  $T_{i+1}$  است.

```

INPUT: N0
DO i=0, ..., I-1           !LOOP OVER TIME STEPS
  φi ← φ(Ni)             !TRANSPORT CALCUALTIONS
  Ni+1 ← eA(φi)(Ti+1-Ti) × Ni   !BURNUP CALCULATIONS
END DO
    
```

شکل ۱۶: الگوریتم اوایلر صریح برای همبسته‌سازی محاسبات مصرف سوخت و ترا برد.

به طور معمول بیشترین زمان پردازش در محاسبات مصرف سوخت، مربوط به محاسبه سطح مقطع مؤثر یک گروهی و شار نوترون است. در بسیاری مواقع برای اینکه فرض ثابت بودن شار (طیف) نوترون در طول یک بازه برقرار باشد، باید بازه زمانی را به تعداد زیادی گام‌های زمانی کوچک‌تر تبدیل کرد که این امر زمان اجرای محاسبات مصرف سوخت را به شدت افزایش می‌دهد. یکی از راه‌های مناسب برای رفع این مشکل، استفاده از روش‌های پیش‌بینی و تصحیح<sup>۲</sup> است. روش‌های پیش‌بینی و تصحیح، محاسبات مصرف سوخت را با یک نرخ اندرکنش متوسط‌گیری شده روی بازه زمانی انجام می‌دهند. به طور معمول این نرخ اندرکنش متوسط‌گیری شده، از طریق یک ارزیابی اولیه از نرخ اندرکنش در انتهای بازه زمانی به دست می‌آید. در روش‌های پیش‌بینی و تصحیح، برای هر بازه زمانی مصرف سوخت، حداقل یک مرتبه محاسبات ترا برد تکرار می‌شود، ولی در عوض با استفاده از این روش‌ها، می‌توان طول بازه زمانی را بیش از دو برابر حالت قبل انتخاب نمود که این در مجموع باعث افزایش سرعت محاسبات می‌شود. در اینجا به معرفی و پیاده‌سازی دو روش مرسوم پیش‌بینی و تصحیح پرداخته شده است.

### ۱۰-۳-۱- روش اول پیش‌بینی و تصحیح (PC1)

روال انجام محاسبات در این روش به شرح زیر است:

۱- محاسبه نرخ میکروسکوپی<sup>۳</sup> اندرکنش‌ها با استفاده از مقادیر هسته‌ها در ابتدای بازه زمانی؛

<sup>۱</sup> Explicit Euler

<sup>۲</sup> Predictor-Corrector (PC)

<sup>۳</sup> به حاصل ضرب شار نوترون در سطح مقطع میکروسکوپی یک اندرکنش، نرخ میکروسکوپی اندرکنش گفته می‌شود ( $\rho\sigma$ ).

- ۲- حل معادلات مصرف سوخت تا نصف بازه زمانی و محاسبه مقدار هسته‌ها در نیم‌بازه با فرض ثابت بودن نرخ میکروسکوپی اندرکنش‌های به دست آمده در مرحله ۱ برای نصف بازه؛
- ۳- محاسبه نرخ میکروسکوپی اندرکنش‌ها با استفاده از مقادیر به دست آمده هسته‌ها در مرحله ۲؛ و
- ۴- حل معادلات مصرف سوخت برای کل بازه زمانی و محاسبه مقدار هسته‌ها در انتهای بازه با فرض ثابت بودن نرخ میکروسکوپی اندرکنش‌های به دست آمده در مرحله ۳ برای کل بازه.

الگوریتم اجرایی این روش در شکل ۱۷ آمده است. محاسبات مصرف سوخت در کد MCNPX با استفاده از این روش پیش‌بینی و تصحیح انجام می‌شود.

```

INPUT: N0
DO i=0, ..., I-1           !LOOP OVER TIME STEPS
    !PREDICTOR STEP
    φi ← φ.(Ni)           !TRANSPORT CALCUALTIONS
    Ni+1/2P ← eA(φi).(Ti+1-Ti)/2 × Ni !BURNUP CALCULATIONS UPTO HALF STEP
    !CORRECTOR STEP
    φi+1/2P ← φ.(Ni+1/2P) !TRANSPORT CALCUALTIONS
    Ni+1C ← eA(φi+1/2P).(Ti+1-Ti) × Ni !BURNUP CALCULATIONS
END DO
    
```

شکل ۱۷: الگوریتم روش اول پیش‌بینی و تصحیح.

#### ۱۰-۳-۲- روش دوم پیش‌بینی و تصحیح (PC2)

روال انجام محاسبات در این روش به شرح زیر است:

- ۱- محاسبه نرخ میکروسکوپی اندرکنش‌ها با استفاده از مقادیر هسته‌ها در ابتدای بازه زمانی؛
- ۲- حل معادلات مصرف سوخت برای کل بازه زمانی و محاسبه مقدار هسته‌ها در انتهای بازه با فرض ثابت بودن نرخ میکروسکوپی اندرکنش‌های به دست آمده در مرحله ۱ برای کل بازه؛
- ۳- محاسبه نرخ میکروسکوپی اندرکنش‌ها با استفاده از مقادیر به دست آمده هسته‌ها در مرحله ۲؛
- ۴- حل معادلات مصرف سوخت برای کل بازه زمانی و محاسبه مقدار هسته‌ها در انتهای بازه با فرض ثابت بودن نرخ میکروسکوپی اندرکنش‌های به دست آمده در مرحله ۳ برای کل بازه؛ و
- ۵- محاسبه میانگین مقادیر به دست آمده در مراحل ۲ و ۴.

الگوریتم اجرایی این روش نیز در شکل ۱۸ آمده است.

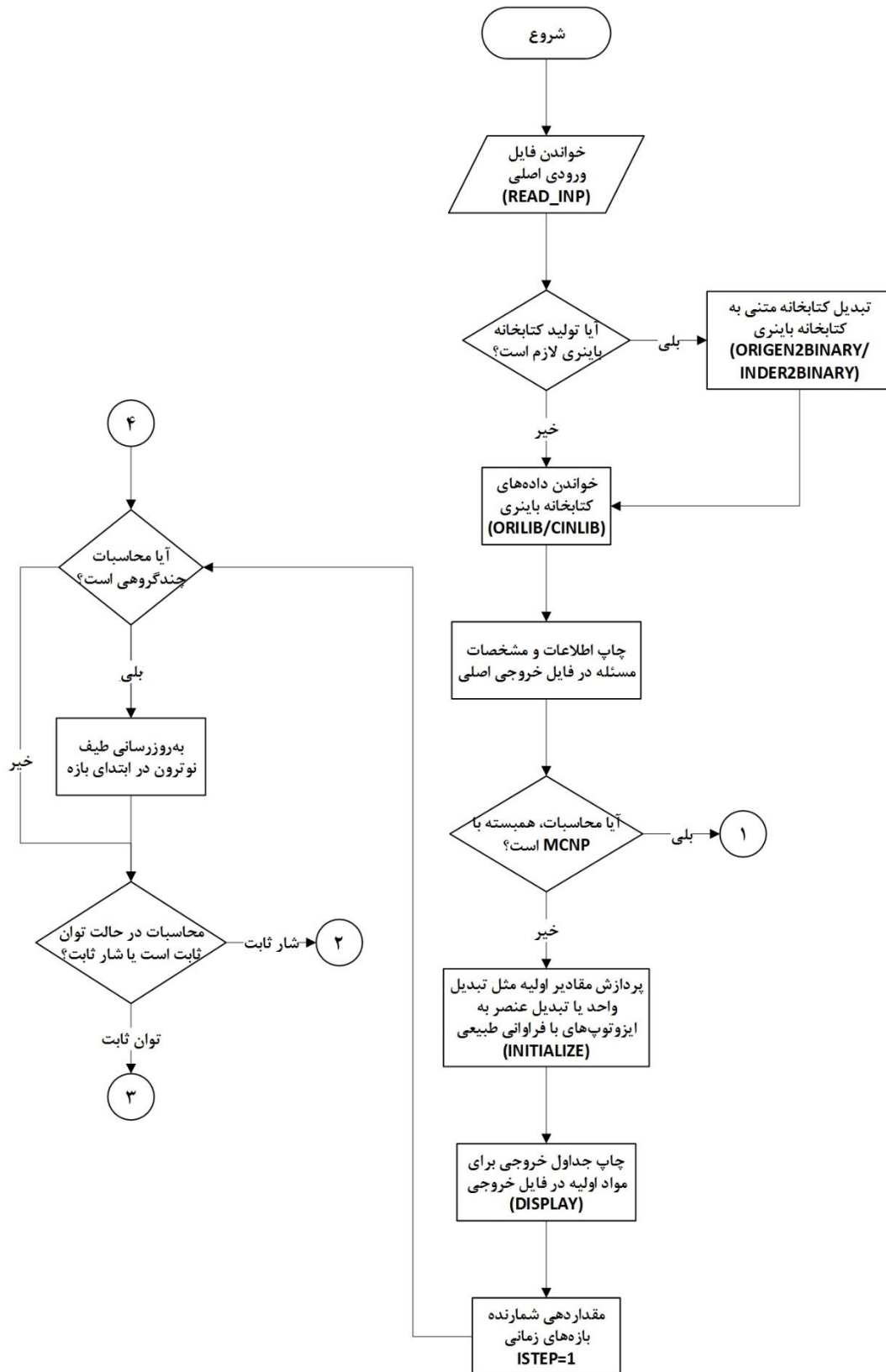
```

INPUT: N0
DO i=0, ..., I-1           !LOOP OVER TIME STEPS
    !PREDICTOR STEP
    φi ← φ(Ni)           !TRANSPORT CALCUALTIONS
    Ni+1P ← eA(φi).(Ti+1-Ti) × Ni   !BURNUP CALCULATIONS
    !CORRECTOR STEP
    φi+1P ← φ(Ni+1P)       !TRANSPORT CALCUALTIONS
    Ni+1C ← eA(φi+1P).(Ti+1-Ti) × Ni   !BURNUP CALCULATIONS
    Ni+1 ← (Ni+1P + Ni+1C) / 2       !CORRECTED EOS COMPOSITION
END DO
    
```

شکل ۱۸: الگوریتم روش دوم پیش‌بینی و تصحیح.

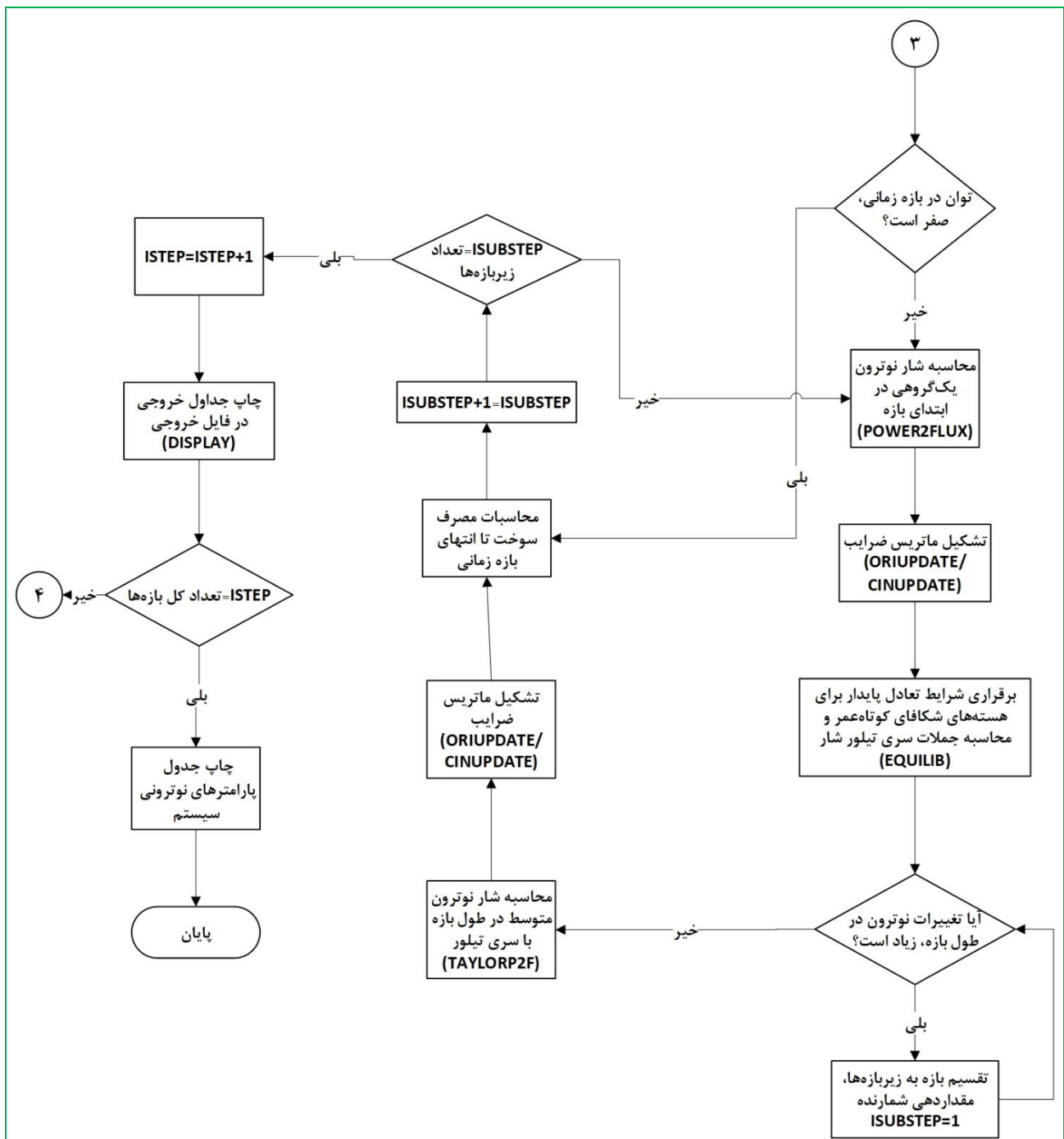
## ۱۱- روندنمای کد BATIS 1.0

روندنمای انجام محاسبات در کد BATIS 1.0 در شکل ۱۹ تا شکل ۲۲ نشان داده شده است.

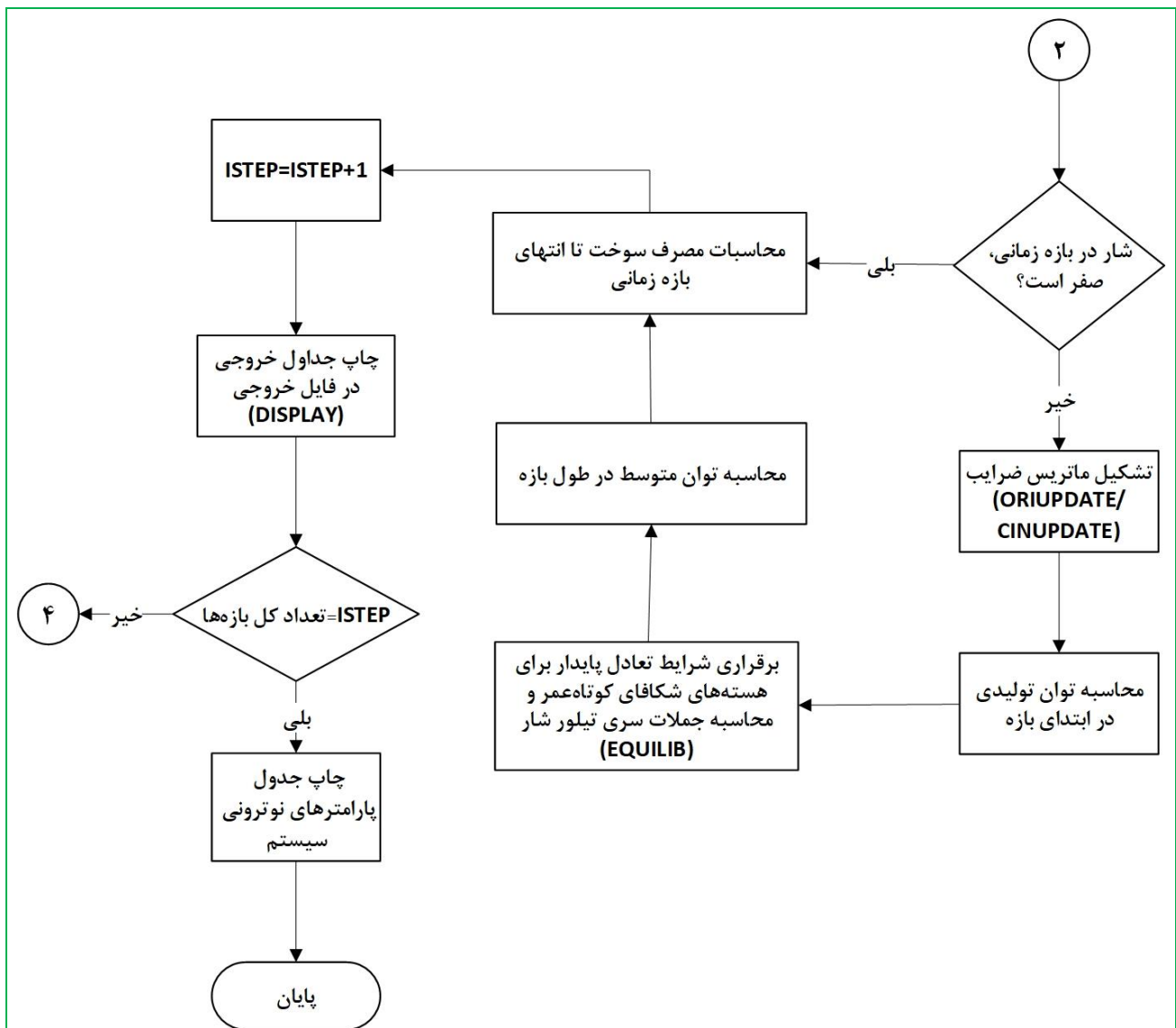


شکل ۱۹: روندنمای کد BATIS 1.0، قسمت اول.





شکل ۲۱: روندنمای کد BATIS 1.0، قسمت سوم.



شکل ۲۲: روندنمای کد BATIS 1.0، قسمت چهارم.

## ۱۲- مسائل نمونه

### ۱۲-۱- مسائل مصرف سوخت نقطه‌ای

#### ۱۲-۱-۱- پرتوزایی هسته $^{242}\text{Am}^*$

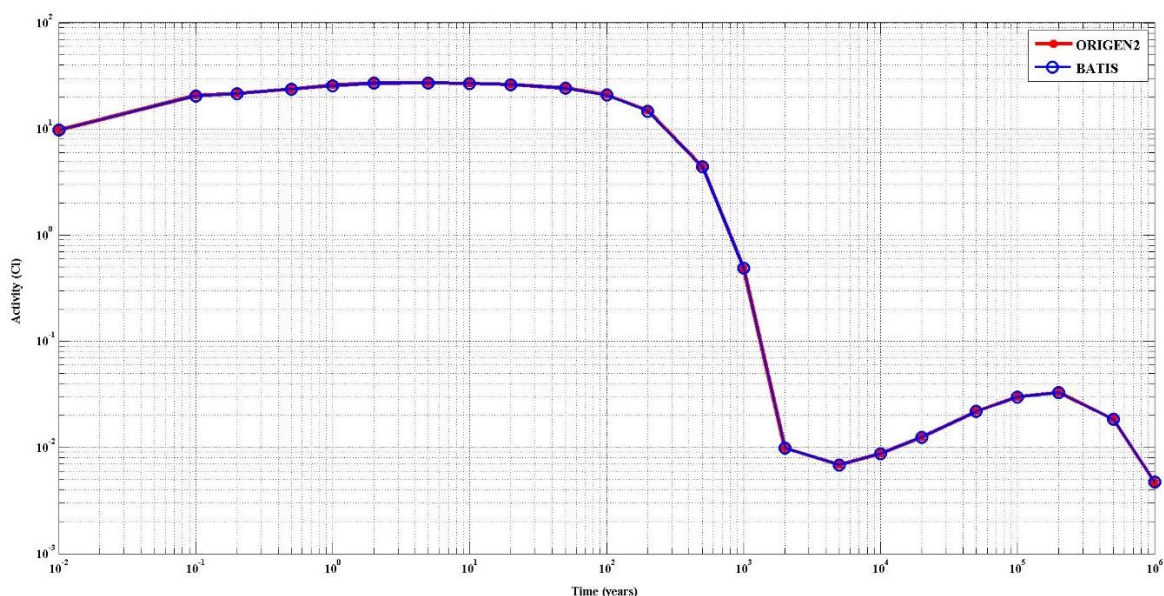
مسئله پرتوزایی هسته  $^{242}\text{Am}^*$  از جهت افت‌وخیز پرتوزایی کل در گذر زمان، می‌تواند مسئله جالبی برای راستی‌آزمایی باشد. هدف در این مسئله، محاسبه پرتوزایی کل یک گرم از هسته  $^{242}\text{Am}^*$  در گذر زمان تا ۱ میلیون سال است. بازه‌های زمانی انتخاب شده برای حل این مسئله در **جدول شماره ۱۶** آورده شده است. نتیجه اجرای کدهای BATIS 1.0 و ORIGEN2 برای پرتوزایی کل در انتهای هر بازه زمانی در **شکل ۲۳** مقایسه شده است. میانگین اختلاف نسبی نتایج پرتوزایی کل کد BATIS با نتایج کد ORIGEN2 ۰/۰۹٪ و بیشترین اختلاف ۰/۲۳٪



٪ است که نشان از همخوانی خوب نتایج دو کد دارد. در هر دو کد از کتابخانه واپاشی *decay.lib* استفاده شده است. این مسئله با استفاده از کتابخانه CINDER نیز اجرا شد و با مقایسه جوابها، اختلاف حدود ۷٪ بین نتایج حاصل از کتابخانه ORIGEN2 و نتایج حاصل از کتابخانه CINDER مشاهده شد. با بررسی دو کتابخانه مشخص شد که اختلاف ۷٪ در نتایج پرتوزایی دو کتابخانه، ناشی از اختلاف نیمه عمر هسته  $^{242}\text{Am}^*$  و بعضی هسته‌های دیگر است. به عنوان مثال نیمه عمر هسته  $^{242}\text{Am}^*$  در کتابخانه *decay.lib* برابر  $4.797\text{E}9$  ثانیه معادل ۱۵۲/۱ سال وارد شده است؛ در حالی که در کتابخانه *cinder.dat* این مقدار برابر  $4.4495\text{E}9$  ثانیه معادل ۱۴۱/۱ سال وارد شده است. بررسی داده‌های به روز ENDF-VIII.0 مشخص شد که مقدار نیمه عمر کتابخانه CINDER برای هسته  $^{242}\text{Am}^*$  درست‌تر است.

جدول شماره ۱۶: بازه‌های زمانی منتخب برای مسئله واپاشی  $^{242}\text{Am}^*$ .

شماره بازه	انتهای بازه (سال)	شماره بازه	انتهای بازه (سال)	شماره بازه	انتهای بازه (سال)
۱	۰/۱	۹	۵۰	۱۷	۲۰,۰۰۰
۲	۰/۲	۱۰	۱۰۰	۱۸	۵۰,۰۰۰
۳	۰/۵	۱۱	۲۰۰	۱۹	۱۰۰,۰۰۰
۴	۱	۱۲	۵۰۰	۲۰	۲۰۰,۰۰۰
۵	۲	۱۳	۱,۰۰۰	۲۱	۵۰۰,۰۰۰
۶	۵	۱۴	۲,۰۰۰	۲۲	۱۰۰۰,۰۰۰
۷	۱۰	۱۵	۵,۰۰۰		
۸	۲۰	۱۶	۱۰,۰۰۰		



شکل ۲۳: مقایسه نتایج کد BATIS 1.0 و ORIGEN2 برای پرتوزایی کل یک گرم  $^{242}\text{Am}^*$ .

## ۱۲-۱-۲- مقایسه نتایج BATIS 1.0 با کد ORIGEN2

در این مرحله از راستی‌آزمایی کد BATIS 1.0، به بررسی محاسبات مصرف سوخت یک راکتور PWR نوعی در سه دوره کاری پرداخته می‌شود. از آنجاکه در این مرحله، هدف، اطمینان از پیاده‌سازی درست الگوریتم‌ها و روال اجرایی کد BATIS 1.0 است، باید ورودی‌های دو کد به گونه‌ای تهیه شوند که کمترین اختلاف در شرایط ورودی آن‌ها ایجاد شود. این موارد اختلاف در ادامه بررسی شده‌اند.

### ۱۲-۱-۲-۱- تفاوت‌های موجود بین رویکرد کدهای BATIS 1.0 و ORIGEN2

یکی از موارد اختلاف در کدهای ORIGEN2 و BATIS 1.0، نحوه تبدیل مقادیر جرمی و اتمی به یکدیگر است. در کد ORIGEN2 از عدد اتمی هر هسته به عنوان جرم اتمی آن برای تبدیل واحدهای اتمی و جرمی به یکدیگر استفاده می‌شود؛ در حالی که در کد BATIS 1.0، از پایگاه داده‌ای حاوی جرم‌های اتمی هسته‌ها، برگرفته از فایل *xmdir* کد MCNP، استفاده می‌شود. همچنین کد BATIS 1.0 از عدد آووگادرو با دقت ۸ رقم معنادار استفاده می‌کند که این دقت در کد ORIGEN2 پایین‌تر است. به همین دلیل مقدار کمی خطای ناشی از تبدیل واحد اتمی و جرمی به یکدیگر در مقادیر این دو کد وارد می‌شود. چنانچه کاربر مقادیر اولیه را بر حسب گرم وارد کرده باشد، از آنجایی که برای محاسبات مصرف سوخت، مقادیر اتمی هسته‌ها در معادلات وارد می‌شود، کد مصرف سوخت ابتدا مقادیر جرمی را به اتمی تبدیل کرده و سپس محاسبات مصرف سوخت را انجام می‌دهد. در پایان مقادیر اتمی حاصل را به مقادیر جرمی تبدیل کرده و در خروجی چاپ می‌کند. در زمان اعتبارسنجی دو کد باید به اختلاف ناشی از تبدیل واحد مقادیر ورودی و خروجی، دقت شود.

کد ORIGEN2 برای تبدیل یک عنصر به ایزوتوپ‌های مختلف آن با احتساب فراوانی طبیعی، از داده‌های فراوانی طبیعی موجود در کتابخانه واپاشی *decay.lib* استفاده می‌کند؛ در حالی که کد BATIS 1.0 از پایگاه داده‌ای که از منابع به‌روز کسب شده [۱۴]، استفاده می‌کند. اختلاف پایگاه داده می‌تواند در تقسیم مقدار اولیه یک عنصر به ایزوتوپ‌های طبیعی آن اختلاف ایجاد کند؛ بنابراین بهتر است برای مقایسه نتایج دو کد از وارد کردن عنصر به صورت فراوانی طبیعی اجتناب شود و مقادیر تک‌تک ایزوتوپ‌ها به صورت مجزا وارد شود.

برای محاسبات مصرف سوخت، شار نوترون در معادلات مصرف سوخت وارد می‌شود، بنابراین چنانچه در ورودی کد مصرف سوخت، توان سیستم وارد شده باشد، کد مصرف سوخت باید ابتدا یک شار متوسط در طول بازه زمانی به دست آورده و با استفاده از آن محاسبات مصرف سوخت را انجام دهد. در این مرحله برای اجتناب از وارد شدن خطای ناشی از محاسبه شار متوسط در طول بازه، از محاسبات شار ثابت برای مقایسه اولیه نتایج دو کد استفاده

می‌شود.

یکی از قابلیت‌های کد ORIGEN2، وجود پایگاه‌های داده سطح‌مقطع‌های متغیر با زمان برای تغییر سطح‌مقطع برخی هسته‌های مهم در طول محاسبات مصرف سوخت است. این کد برای سیستم‌های راکتوری مختلف، یک پایگاه داده فراهم کرده است که با استفاده از آن بعضی سطح‌مقطع‌های<sup>۱</sup> هسته‌های مهم<sup>۲</sup> را که تغییرات طیف بر مقدار سطح‌مقطع یک گروهی آن تأثیر قابل توجهی می‌گذارد، متناسب با زمان تغییر می‌دهد. هم‌اکنون این امکان در نسخه BATIS 1.0 وجود ندارد و برای همه زمان‌ها در محاسبات مصرف سوخت، از سطح‌مقطع یک گروهی موجود در کتابخانه مصرف سوخت استفاده می‌شود. برای مقایسه نتایج دو کد باید قابلیت به‌روزرسانی سطح‌مقطع‌های متغیر با زمان را در کد ORIGEN2 غیرفعال کرد. برای این کار باید دوازدهمین پارامتر دستور LIB در ورودی کد ORIGEN2 صفر انتخاب شود.

یکی از نکات مهم که در زمان مقایسه نتایج دو کد BATIS 1.0 و ORIGEN2 باید به آن توجه شود، دسته‌بندی هسته‌ها در کد ORIGEN2 است. همان‌طور که در بخش ۸-۱ توضیح داده شده است، در کد ORIGEN2 هسته‌ها به سه دسته تقسیم می‌شوند؛ به طوری که هر هسته در هر دسته تنها می‌تواند از یکی از هسته‌های همان دسته تولید شود (به‌استثنای محصولات شکافت). بنابراین در کد ORIGEN2 از تولید هر هسته از هسته‌ای که در دسته دیگری قرار گرفته است، صرف‌نظر می‌شود. به عنوان مثال اگر در کد ORIGEN2 در مقادیر اولیه، هیچ هسته سبکی وجود نداشته باشد، با انجام محاسبات مصرف سوخت هرگز هسته سبکی تولید نخواهد شد. این در حالی است که در واقعیت این اتفاق نمی‌افتد و همه هسته‌ها، به صورت زنجیروار به یکدیگر مرتبط هستند. کد BATIS 1.0 تبدیلات همه هسته‌ها به یکدیگر را مطابق با داده‌های کتابخانه مصرف سوخت در نظر می‌گیرد. فهرست تبدیلات هسته‌ای (انواع واپاشی و اندرکنش نوترون) که در کد ORIGEN2 به دلیل یکسان نبودن دسته هسته مادر و دختر در کتابخانه‌های *decay.lib* و *pwrus.lib* از محاسبه آن‌ها صرف‌نظر می‌شود، در **جدول شماره ۱۷** آمده است. به عنوان مثال در اثر تابش نوترونی به هسته‌های آکتینید در قلب راکتور، مقدار زیادی محصول شکافت تولید می‌شود که بسیاری از آن‌ها دارای سطح‌مقطع واکنش‌های  $(n, \alpha)$  و  $(n, p)$  هستند. در نتیجه مقدار قابل توجهی هسته‌های هیدروژن و هلیوم به شکل گاز تولید می‌شوند، ولی مطابق **جدول شماره ۱۷** تولید این دو هسته از محصولات شکافت در کد ORIGEN2 نادیده گرفته می‌شود. از طرف دیگر در کتابخانه‌های کد ORIGEN2، حدود ۳۰۰ هسته در دسته‌های مختلف تکرار شده‌اند. بنابراین برای مقایسه نتیجه هر هسته در کد BATIS 1.0، باید مقادیر آن هسته در هر سه دسته کد ORIGEN2 (در صورت وجود) با هم جمع شده و با مقدار خروجی BATIS 1.0 مقایسه شود.

<sup>۱</sup> بیشتر شکافت و جذب پرتوزا را شامل می‌شود.

<sup>۲</sup> حداکثر ۲۰ هسته.

جدول شماره ۱۷: فهرست تبدیلات هسته‌ای که در کد ORIGEN2 صرف نظر می‌شوند (decay و pwrus).

شماره	شناسه هسته مادر	شناسه هسته دختر	دسته هسته مادر	نوع تبدیل
۱	30060, 360800, 360820, 360830, 360840, 360860, 400900, 400910, 400920, 400940, 400960, 410930, 420950, 420960, 420970, 420980, 421000, 471070, 471090, 481130, 501140, 501150, 501160, 501170, 501180, 501190, 541280, 541290, 541300, 541310, 541320, 541340, 541360, 591410, 601430, 601450, 601460, 601480, 601500, 621510, 621520, 631510, 631530, 631540, 631550, 651590, 671650	10010	محصولات شکافت	اندرکنش
۲	10030, 30070	10040	محصولات شکافت	نوترون
۳	10030	20030	محصولات شکافت	واپاشی
۴	30060, 30070, 40090, 300660, 300670, 300680, 360800, 360820, 360830, 360840, 360860, 400900, 400910, 400920, 400930, 400940, 400960, 410930, 420950, 420960, 420970, 420980, 421000, 471070, 471090, 501140, 501150, 501160, 501170, 501180, 501190, 501200, 501220, 501240, 541280, 541290, 541300, 541310, 541320, 541340, 541360, 591410, 601430, 601450, 601460, 601480, 601500, 611470, 621470, 621490, 621510, 621520, 631510, 631520, 631530, 631540, 631550, 641520, 641550, 641570, 661600, 661610, 661630, 671650, 681660, 681670, 681680, 691690, 701680, 701700, 701710, 701720	20040	محصولات شکافت	نوترون
۵	581420, 601440, 621460, 621470, 621480, 621490, 641520	20040	محصولات شکافت	واپاشی
۶	30060, 40090	20060	محصولات شکافت	نوترون
۷	30070	30080	محصولات شکافت	نوترون
۸	40090	40080	محصولات شکافت	نوترون
۹	40100	40110	محصولات شکافت	نوترون
۱۰	40100	50100	محصولات شکافت	واپاشی
۱۱	60140	60150	محصولات شکافت	نوترون

شماره	شناسه هسته مادر	شناسه هسته دختر	دسته هسته مادر	نوع تبدیل
۱۲	60140	70140	محصولات شکافت	واپاشی
۱۳	280580	280570	هسته‌های سبک	نوترون
۱۴	300660	280630	محصولات شکافت	نوترون
۱۵	300670	280640	محصولات شکافت	نوترون
۱۶	300680	280650	محصولات شکافت	نوترون
۱۷	310710	310721	محصولات شکافت	نوترون
۱۸	360840	350840	هسته‌های سبک	نوترون
۱۹	360860	350860	هسته‌های سبک	نوترون
۲۰	380910	390911	هسته‌های سبک	واپاشی
۲۱	390900	390911	هسته‌های سبک	نوترون
۲۲	410930	410941	هسته‌های سبک	نوترون
۲۳	410940	420940	محصولات شکافت	واپاشی
۲۴	410941	420940	محصولات شکافت	واپاشی
۲۵	420990	430991	هسته‌های سبک	واپاشی
۲۶	430980	440980	محصولات شکافت	واپاشی
۲۷	441030	451031	هسته‌های سبک	واپاشی
۲۸	481130	471130	هسته‌های سبک	نوترون
۲۹	481120	481131	هسته‌های سبک	نوترون
۳۰	481150	491151	هسته‌های سبک	واپاشی
۳۱	481151	491151	هسته‌های سبک	واپاشی
۳۲	491170	491181	هسته‌های سبک	نوترون
۳۳	491171	491181	هسته‌های سبک	نوترون
۳۴	481210	491211	هسته‌های سبک	واپاشی
۳۵	501250	501260	هسته‌های سبک	نوترون
۳۶	511260	511270	هسته‌های سبک	نوترون
۳۷	541360	521330	هسته‌های سبک	نوترون
۳۸	541340	531340	هسته‌های سبک	نوترون
۳۹	541360	531360	هسته‌های سبک	نوترون

شماره	شناسه هسته مادر	شناسه هسته دختر	دسته هسته مادر	نوع تبدیل
۴۰	551340	551351	هسته‌های سبک	نوترون
۴۱	551341	551351	هسته‌های سبک	نوترون
۴۲	571380	581380	محصولات شکافت	واپاشی
۴۳	601500	581470	هسته‌های سبک	نوترون
۴۴	591410	591400	هسته‌های سبک	نوترون
۴۵	581440	591441	هسته‌های سبک	واپاشی
۴۶	601460	591460	هسته‌های سبک	نوترون
۴۷	601480	591480	هسته‌های سبک	نوترون
۴۸	601500	591500	هسته‌های سبک	نوترون
۴۹	611470	611460	هسته‌های سبک	نوترون
۵۰	631510	631500	هسته‌های سبک	نوترون
۵۱	631560	631570	هسته‌های سبک	نوترون
۵۲	641520	641510	هسته‌های سبک	نوترون
۵۳	641520	641510	محصولات شکافت	نوترون
۵۴	641620	651621	هسته‌های سبک	واپاشی
۵۵	701680	681650	محصولات شکافت	نوترون
۵۶	701720	701730	محصولات شکافت	نوترون
۵۷	761920	761931	هسته‌های سبک	نوترون
۵۸	832110	812070	هسته‌های سبک	واپاشی
۵۹	832140	812100	آکتینیدها	واپاشی
۶۰	842180	852180	آکتینیدها	واپاشی
۶۱	872230	852190	آکتینیدها	واپاشی
۶۲	862200	862210	آکتینیدها	نوترون
۶۳	862220	862230	آکتینیدها	نوترون
۶۴	882260	882270	آکتینیدها	نوترون
۶۵	882280	882290	آکتینیدها	نوترون
۶۶	902340	902350	آکتینیدها	نوترون
۶۷	912310	912300	آکتینیدها	نوترون

شماره	شناسه هسته مادر	شناسه هسته دختر	دسته هسته مادر	نوع تبدیل
۶۸	942360	942350	آکتینیدها	نوترون
۶۹	962430	972430	آکتینیدها	واپاشی
۷۰	972490	972470	آکتینیدها	نوترون
۷۱	972490	972480	آکتینیدها	نوترون
۷۲	982490	982480	آکتینیدها	نوترون
۷۳	982500	982480	آکتینیدها	نوترون

۱۲-۱-۲-۲- مسئله نمونه PWR

در این مرحله برای اعتبارسنجی و مقایسه نتایج کدهای BATIS 1.0 و ORIGEN2، یکی از مسائل نمونه کد ORIGEN2 برای انجام محاسبات مصرف سوخت یک راکتور PWR نوعی انتخاب شده است. در این مسئله، محاسبات مصرف سوخت برای مقدار یک تن اورانیوم اولیه به صورت سوخت  $UO_2$  با غنای ۳/۲٪ که در یک راکتور PWR به مدت سه دوره کاری با شار ثابت حضور دارد، انجام می‌شود. مقادیر اولیه هسته‌ها در **جدول شماره ۱۸** و بازه‌های زمانی انتخاب شده به همراه شار نوترون در هر بازه در **جدول شماره ۱۹** وجود دارد.

جدول شماره ۱۸: مقادیر اولیه برای مسئله اعتبارسنجی.

مقدار (مول)	هسته	مقدار (مول)	هسته
۴۰۶۶	U238	۱/۲۳۹	U234
۸۴۰۳	O 16	۱۳۶/۲	U235

جدول شماره ۱۹: بازه‌های زمانی برای اجرای مسئله اعتبارسنجی.

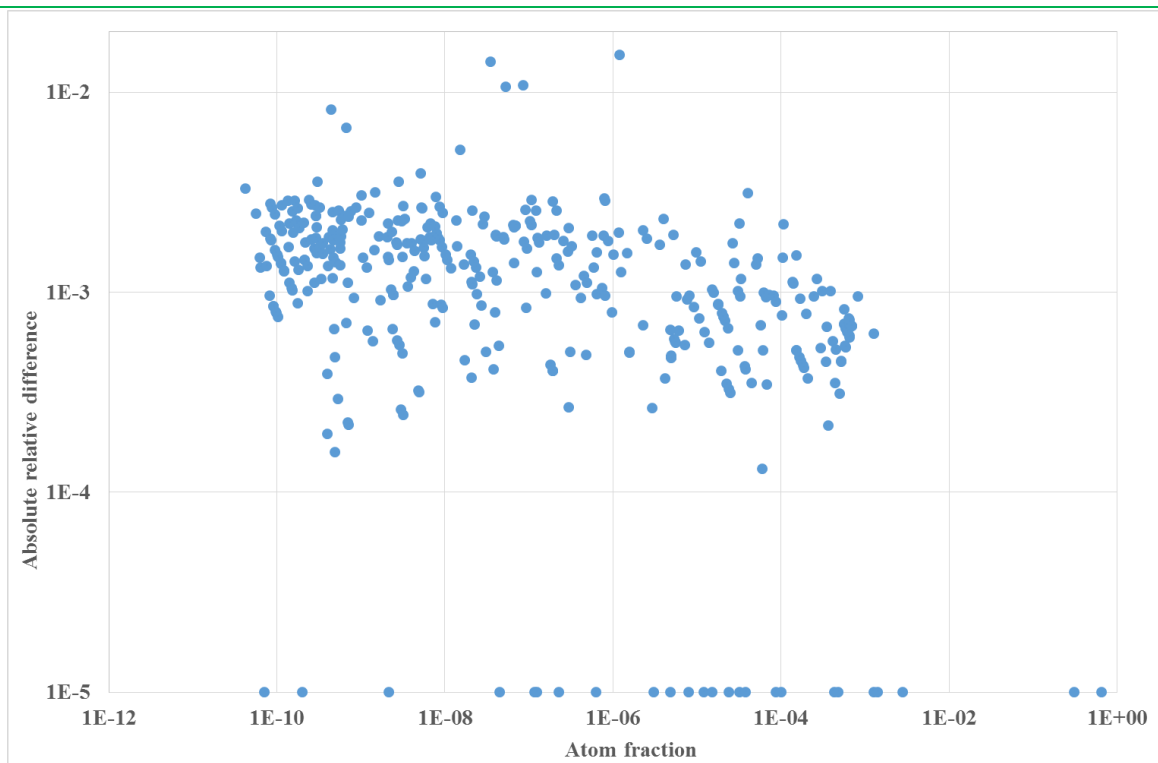
شماره بازه	انتهای بازه (روز)	شار یک‌گروهی نوترون ( $1/cm^2/s$ )
1	66.7	3E14
2	133.3	3E14
3	293.3	3E14
4	399.3	0
5	506	3E14
6	639.3	3E14
7	692.7	3E14
8	798.7	0
9	878.7	3E14
10	1012	3E14
11	1092	3E14

کد BATIS 1.0 با تلفیق روش‌های بیت‌من و سری تیلور (روش به کار رفته در کد ORIGEN) اجرا شده است. مقادیر نهایی (پس از ۱۰۹۲ روز تابش در راکتور) به دست آمده از دو کد ORIGEN2 و BATIS 1.0 برای ۴۱۰ هسته که سهم بیشتری داشته‌اند، مقایسه شده و اختلاف نسبی<sup>۱</sup> نتایج دو کد در شکل ۲۴ نشان داده شده است. بیشترین اختلاف نسبی ۱/۵٪ و متوسط اختلاف نسبی این هسته‌ها، ۰/۱۴٪ است. برای هسته‌های آکتینید که بیشترین سهم حضور در سوخت را دارند، اختلاف نسبی تقریباً صفر است. این اختلاف اندک، نشان از همخوانی خوب و قابل قبول نتایج دو کد پس از یازده بازه زمانی محاسبات مصرف سوخت دارد. علت این اختلاف‌های کوچک بین نتایج می‌تواند ناشی از استفاده از متغیرهای حافظه متفاوت در دو کد (REAL\*4 و REAL\*8)، تفاوت در الگوریتم دو کد و بیشتر از همه فرض انجام شده در دسته‌بندی هسته‌ها باشد. به عنوان مثال نتیجه خروجی BATIS 1.0 در انتهای روز ۱۰۹۲ برای هسته  ${}^3\text{He}$  برابر  $2.081\text{E}-4$  است؛ درحالی‌که این مقدار در کد ORIGEN2 برابر  $7.554\text{E}-16$  است. این اختلاف بسیار بزرگ در مقادیر به دست آمده برای این هسته ناشی از صرف نظر کردن کد ORIGEN2 از تولید هسته  ${}^3\text{He}$  ناشی از واپاشی هسته  ${}^3\text{H}$  در دسته محصولات شکافت است (رجوع شود به ردیف ۳ در جدول شماره ۱۷). اگر اطلاعات هسته  ${}^3\text{He}$  در دسته هسته‌های سبک کتابخانه‌های واپاشی و سطح مقطع کد ORIGEN2 به دسته محصولات شکافت نیز کپی شود، آن‌گاه پس از اجرای کد ORIGEN2 تولید هسته  ${}^3\text{He}$  از هسته محصول شکافت  ${}^3\text{H}$  نیز در نظر گرفته خواهد شد و مقدار خروجی کد ORIGEN2 برای هسته  ${}^3\text{He}$  در دسته محصولات شکافت برابر  $2.081\text{E}-4$  می‌شود؛ یعنی اختلاف دو کد از بین می‌رود. برای هسته هیدروژن نیز به دلیل آنچه که در ردیف ۱ جدول شماره ۱۷ به آن اشاره شده است، اختلاف زیادی بین نتایج مشاهده می‌شود که بنا بر توضیحات داده شده، نتیجه کد BATIS 1.0 درست است.

به عنوان مثالی دیگر از عامل اختلاف نتایج، واپاشی هسته  ${}^8\text{Be}$  را می‌توان در نظر گرفت. این هسته با واپاشی آلفای خود به دو هسته آلفا تقسیم می‌شود. کد ORIGEN2 هر واپاشی هسته  ${}^8\text{Be}$  را نظیر تولید یک هسته آلفا در محاسبات وارد می‌کند که اشتباه است. با تغییر در متن کد BATIS 1.0 و تغییر تولید یک ذره آلفا به ازای هر واپاشی هسته برلیوم به جای دوتا، نتیجه دو کد BATIS 1.0 و ORIGEN2 برای مقدار هسته آلفا یکسان می‌شود.

مقدار مرجع است. Y و BATIS خروجی کد X است که 1-X/Y در همه قسمت‌های این گزارش، منظور از اختلاف نسبی،<sup>۱</sup>





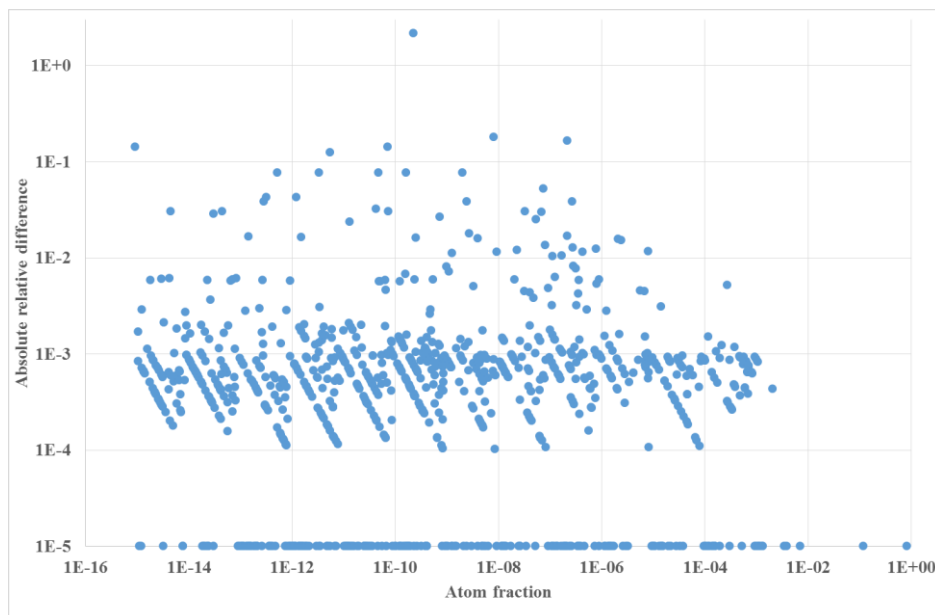
شکل ۲۴: اختلاف نسبی مقادیر اتمی به دست آمده از دو کد ORIGEN2 و BATIS 1.0 برای حالت شار ثابت.

پس از اطمینان از درستی الگوریتم پیاده شده، در مرحله بعدی، مقادیر اولیه ورودی بر حسب گرم و همراه با ناخالصی‌های سوخت به هر دو کد داده شده و در حالت توان ثابت، کدها اجرا می‌شوند. مقادیر اولیه در این حالت در **جدول شماره ۲۰** آمده است. در این جدول، منظور از عناصر بدون عدد جرمی، همه ایزوتوپ‌های طبیعی آن عنصر است. در این مرحله از محاسبات، از بازه‌های زمانی موجود در **جدول شماره ۱۹** استفاده می‌شود؛ با این تفاوت که به جای شار نوترون برابر  $3E14$ ، توان ثابت  $۳۷/۵$  مگاوات در نظر گرفته می‌شود.

کد BATIS 1.0 با استفاده از تلفیق روش‌های بیت‌من و سری تیلور (روش به کار رفته در کد ORIGEN) و بدون لحاظ گرمای واپاشی در محاسبات تبدیل توان و شار (برای قابل قیاس بودن با نتایج کد ORIGEN2) اجرا شده است. مقادیر نهایی (پس از ۱۰۹۲ روز تابش در راکتور) به دست آمده از دو کد ORIGEN2 و BATIS 1.0 برای ۹۴۷ هسته که سهم بیشتری داشته‌اند، مقایسه شده و اختلاف نسبی نتایج دو کد در **شکل ۲۵** نشان داده شده است. بیشترین اختلاف نسبی برابر ۲۱۵٪ مربوط به  $^3\text{He}$  است و متوسط اختلاف نسبی همه هسته‌ها، ۰/۵٪ است. برای هسته‌های آکتینید که بیشترین سهم حضور در سوخت را دارند، بیشترین اختلاف نسبی ۰/۲٪ است. همچنین با صرف نظر از هسته  $^3\text{He}$  و ایزوتوپ‌های هیدروژن که بنا بر توضیحات قسمت قبل، اختلاف زیادی از خود نشان می‌دهند، متوسط خطا برای بقیه هسته‌ها (۹۴۳ هسته)، ۰/۲۴٪ است. این اختلاف اندک، نشان از همخوانی خوب و قابل قبول نتایج دو کد دارد.

جدول شماره ۲۰: مقادیر اولیه برای مسئله اعتبارسنجی.

مقدار (گرم)	هسته	مقدار (گرم)	هسته
عناصر اصلی سوخت			
۹۶۷,۷۱۰	U238	۲۹۰	U234
۱۳۴,۴۵۴	O	۳۲,۰۰۰	U235
ناخالصی‌های سوخت			
۱	B	۱	Li
۲۵	N	۸۹/۴	C
۱۵	Na	۱۰/۷	F
۱۶/۷	Al	۲	Mg
۳۵	P	۱۲/۱	Si
۲	Ca	۵/۳	Cl
۳	V	۱	Ti
۱/۷	Mn	۴	Cr
۱	Co	۱۸	Fe
۱	Cu	۲۴	Ni
۱۰	Mo	۴۰/۳	Zn
۲۵	Cd	۰/۱	Ag
۴	Sn	۲	In
۲	W	۲/۵	Gd
۰/۴	Bi	۱	Pb



شکل ۲۵: اختلاف نسبی مقادیر جرمی به دست آمده از دو کد BATIS 1.0 و ORIGEN2 برای حالت توان ثابت.

نکته‌ای که باید به آن توجه داشت، اثر بروز اختلاف در یک هسته روی هسته‌های مجاور است. به عبارتی از آنجایی که هسته‌های مختلف زنجیروار به هم مرتبط می‌باشند، بروز خطا در محاسبه مقدار یک هسته، در مقادیر سایر هسته‌ها و به‌خصوص در هسته‌های مجاور که بی‌واسطه از هسته مورد نظر تولید می‌شوند، اثر می‌گذارد. در شکل ۲۵ مشاهده می‌شود که هر جا اختلاف یک هسته بزرگ است، این اختلاف با مقداری کمتر به هسته‌های مجاور نیز سرایت می‌کند. به عنوان مثال برای هسته  $^{113}\text{Cd}^*$ ، اختلاف نسبی ۱۶/۴۲٪ ظاهر شده که ناشی از ردیف ۲۹ در جدول شماره ۱۷ است. این اختلاف بر روی هسته‌های مجاور  $^{113}\text{Cd}^*$  اثر گذاشته و اختلاف مقادیر آن هسته‌ها نیز بالا رفته است.

کدهای مصرف سوخت برای انجام محاسبات، نیاز به شار نوترون در طول یک بازه زمانی دارند. در محاسبات با توان ثابت در طول یک بازه، ابتدا یک شار متوسط در طول بازه زمانی محاسبه شده و با فرض ثابت بودن شار نوترون، محاسبات مصرف سوخت در طول بازه انجام می‌شود؛ بنابراین دقت محاسبات مصرف سوخت در حالت توان ثابت، از دقت محاسبه شار متوسط تأثیر می‌پذیرد. با توجه به اهمیت این موضوع، شار متوسط در طول هر یک از بازه‌های زمانی در جدول شماره ۲۱ مقایسه شده است. داده‌های این جدول، نشان از همخوانی خوب دو کد BATIS 1.0 و ORIGEN2 در محاسبه شار متوسط دارد. همچنین مقادیر ضریب تکثیر بی‌نهایت محاسبه شده در انتهای بازه‌های زمانی مختلف در جدول شماره ۲۲ آمده است.

جدول شماره ۲۱: مقایسه شار متوسط محاسبه شده توسط کدهای BATIS 1.0 و ORIGEN2.

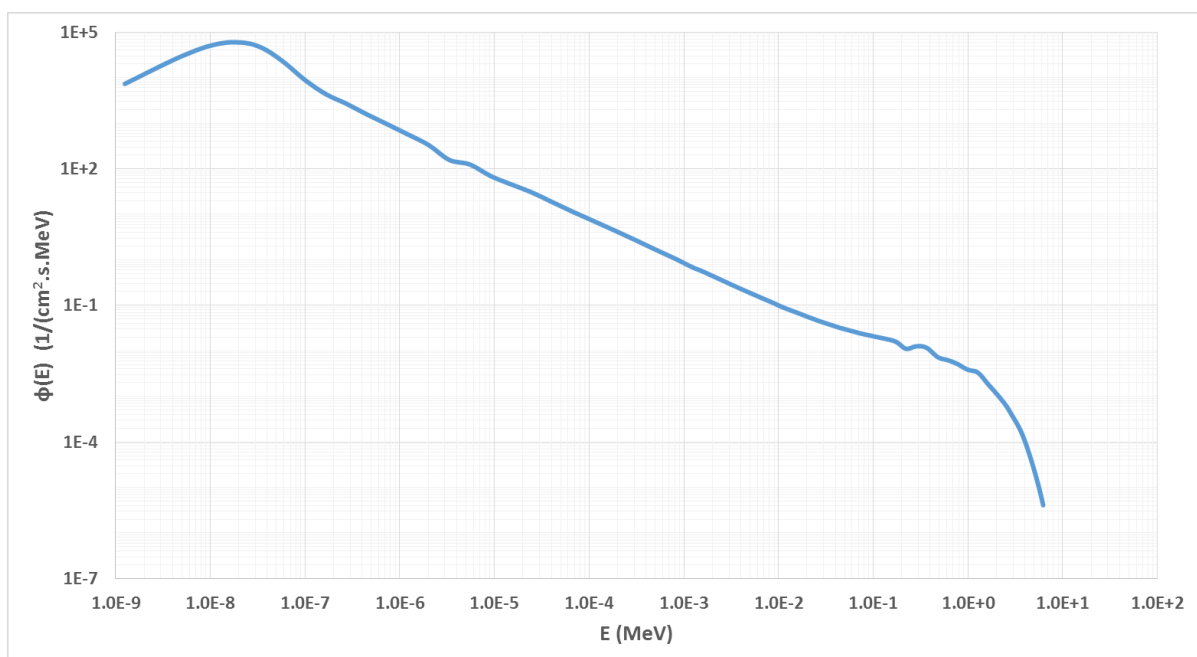
شماره بازه	شار ORIGEN2 ( $1/\text{cm}^2/\text{s}$ )	شار BATIS 1.0 ( $1/\text{cm}^2/\text{s}$ )	اختلاف نسبی %
1	2.80E+14	2.80E+14	0.00
2	2.81E+14	2.81E+14	0.00
3	2.87E+14	2.87E+14	0.00
5	2.97E+14	2.97E+14	0.00
6	3.13E+14	3.13E+14	0.00
7	3.25E+14	3.25E+14	0.00
9	3.33E+14	3.33E+14	0.00
10	3.50E+14	3.50E+14	0.00
11	3.67E+14	3.67E+14	0.00

جدول شماره ۲۲: مقایسه ضریب تکثیر بی نهایت محاسبه شده توسط کدهای ORIGEN2 و BATIS 1.0.

شماره بازه	ضریب تکثیر ORIGEN2	ضریب تکثیر BATIS 1.0	اختلاف نسبی %
1	1.32987	1.32989	-0.0015
2	1.29987	1.29988	-0.0008
3	1.22064	1.22063	0.0008
4	1.24922	1.24921	0.0008
5	1.17191	1.17192	-0.0009
6	1.11743	1.11743	0.0000
7	1.09710	1.09708	0.0018
8	1.12074	1.12073	0.0009
9	1.06799	1.06798	0.0009
10	1.02380	1.02376	0.0039
11	0.99834	0.99827	0.0070

### ۱۲-۱-۳ - مقایسه نتایج کد BATIS 1.0 با کد CINDER

در اینجا برای مقایسه نتایج کد BATIS 1.0 با کد CINDER از مسئله راکتور PWR با سه دوره کاری که در بخش قبل معرفی شد، استفاده می شود. از آنجا که سطح مقطع های اندرکنش نوترون در کتابخانه CINDER، ۶۳ گروهی است، لذا یک شار ۶۳ گروهی حرارتی نوعی برای محاسبات دو کد انتخاب شده است. طیف نوترون انتخاب شده در شکل ۲۶ و مقادیر عددی شار گروهی بهنجار در جدول شماره ۲۳ آمده است.



شکل ۲۶: طیف نوترون به کار رفته برای مسئله آزمون مقایسه کدهای BATIS 1.0 و CINDER.

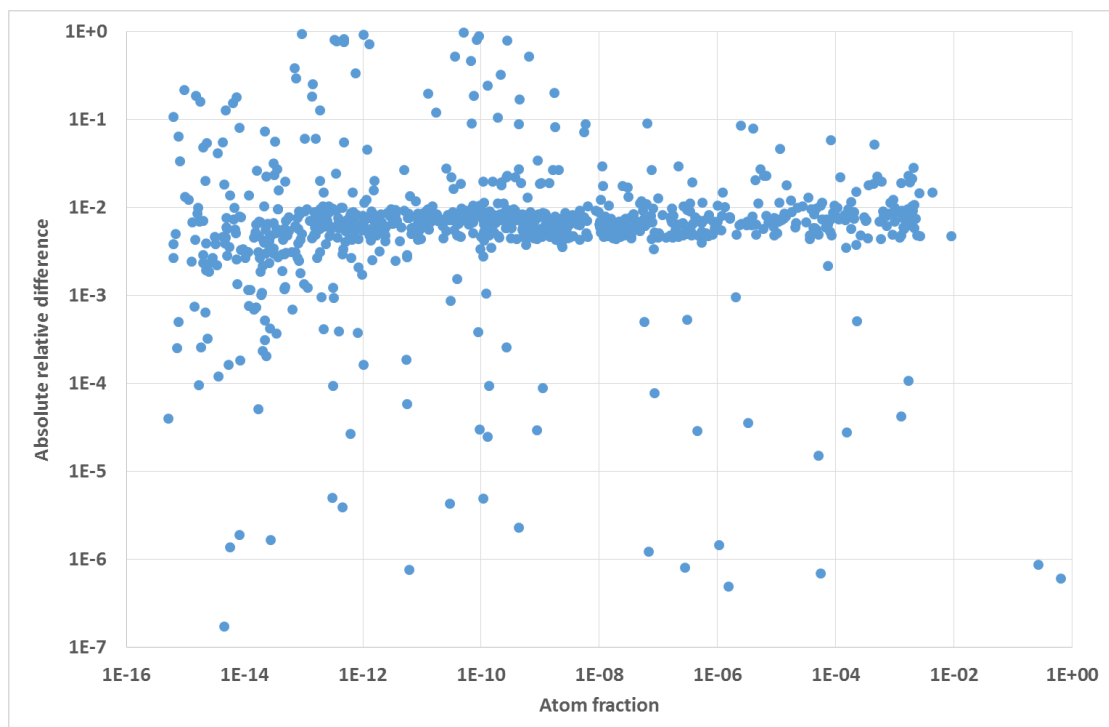
جدول شماره ۲۳: مقادیر بهنجار شار ۶۳ گروهی در مسئله آزمون مقایسه کدهای BATIS 1.0 و CINDER.

شماره گروه انرژی	حد پایین انرژی	حد بالای انرژی	شار گروهی بهنجار
1	1.00E-11	5.00E-09	7.136168E-04
2	5.00E-09	1.00E-08	2.209795E-03
3	1.00E-08	1.50E-08	3.511155E-03
4	1.50E-08	2.00E-08	4.540481E-03
5	2.00E-08	2.50E-08	5.227958E-03
6	2.50E-08	3.00E-08	5.652771E-03
7	3.00E-08	3.50E-08	5.855320E-03
8	3.50E-08	4.20E-08	8.174922E-03
9	4.20E-08	5.00E-08	9.142965E-03
10	5.00E-08	5.80E-08	8.608793E-03
11	5.80E-08	6.70E-08	8.759546E-03
12	6.70E-08	8.00E-08	1.094854E-02
13	8.00E-08	1.00E-07	1.309565E-02
14	1.00E-07	1.52E-07	2.036056E-02
15	1.52E-07	2.51E-07	1.693359E-02
16	2.51E-07	4.14E-07	1.381978E-02
17	4.14E-07	6.83E-07	1.403392E-02
18	6.83E-07	1.13E-06	1.339873E-02
19	1.13E-06	1.86E-06	1.342252E-02
20	1.86E-06	3.06E-06	1.325723E-02
21	3.06E-06	5.04E-06	1.280215E-02
22	5.04E-06	8.32E-06	9.984293E-03
23	8.32E-06	1.37E-05	1.305491E-02
24	1.37E-05	2.26E-05	1.205859E-02
25	2.26E-05	3.73E-05	1.302657E-02
26	3.73E-05	6.14E-05	1.435226E-02
27	6.14E-05	1.01E-04	1.442891E-02
28	1.01E-04	1.67E-04	1.458376E-02
29	1.67E-04	2.75E-04	1.515537E-02
30	2.75E-04	4.54E-04	1.562760E-02
31	4.54E-04	7.49E-04	1.595443E-02
32	7.49E-04	1.23E-03	1.605794E-02
33	1.23E-03	2.04E-03	1.639455E-02

شماره گروه انرژی	حد پایین انرژی	حد بالای انرژی	شار گروهی بهنجار
34	2.04E-03	2.40E-03	5.481232E-03
35	2.40E-03	2.84E-03	5.504024E-03
36	2.84E-03	3.36E-03	5.685574E-03
37	3.36E-03	5.53E-03	1.708325E-02
38	5.53E-03	9.12E-03	1.742824E-02
39	9.12E-03	1.50E-02	1.824076E-02
40	1.50E-02	1.99E-02	1.075672E-02
41	1.99E-02	2.55E-02	9.787587E-03
42	2.55E-02	4.09E-02	1.972902E-02
43	4.09E-02	6.74E-02	2.317264E-02
44	6.74E-02	1.11E-01	2.727565E-02
45	1.11E-01	1.83E-01	3.397763E-02
46	1.83E-01	3.02E-01	4.462523E-02
47	3.02E-01	3.89E-01	2.698910E-02
48	3.89E-01	4.98E-01	2.367288E-02
49	4.98E-01	6.39E-01	3.479227E-02
50	6.39E-01	8.21E-01	4.166841E-02
51	8.21E-01	1.11E+00	4.059235E-02
52	1.11E+00	1.35E+00	2.986508E-02
53	1.35E+00	1.74E+00	3.874723E-02
54	1.74E+00	2.23E+00	3.721769E-02
55	2.23E+00	2.87E+00	4.116466E-02
56	2.87E+00	3.68E+00	2.931069E-02
57	3.68E+00	4.97E+00	2.390897E-02
58	4.97E+00	6.07E+00	1.003558E-02
59	6.07E+00	1.00E+01	7.740817E-03
60	1.00E+01	1.49E+01	3.923637E-04
61	1.49E+01	1.69E+01	5.159603E-06
62	1.69E+01	2.00E+01	0.000000E+00
63	2.00E+01	2.50E+01	0.000000E+00

در حال حاضر کد CINDER، به طور مستقل در دسترس تهیه‌کننده این گزارش نبوده است و فایل اجرایی مورد استفاده برای اعتبارسنجی کد BATIS 1.0، از استخراج کدهای مربوط به محاسبات CINDER از متن کد MCNPX و کامپایل آن ساخته شده است. در کد CINDER بر خلاف کد BATIS 1.0، کاربر باید در ورودی کد تعیین کند

که بیشتر واکنش‌های شکافت در چه ناحیه انرژی (حرارتی، سریع یا انرژی بالا) رخ می‌دهد تا بر اساس آن، از بهره محصولات شکافت استفاده کند. این در حالی است که کد BATIS 1.0 برای هر هسته شکافا، به محاسبه نرخ شکافت در سه ناحیه انرژی پرداخته و ناحیه‌ای که بیشترین نرخ شکافت را می‌دهد، برای محصولات شکافت آن هسته شکافا انتخاب می‌کند. در این اجرا برای مقایسه بهتر نتایج دو کد، متن کد BATIS 1.0 به گونه‌ای تغییر داده شد تا برای همه هسته‌های دارای شکافت، از مجموعه بهره شکافت در ناحیه حرارتی استفاده شود. همچنین در کد CINDER پارامتر  $nfe$  که مربوط به انتخاب ناحیه انرژی مجموعه بهره شکافت است، برابر ۱ به معنی ناحیه حرارتی قرار داده شد. از آنجا که در روش TTA، دقت نتایج به اندازه بازه‌های زمانی حساس است، در ورودی هر دو کد BATIS 1.0 و CINDER بازه‌های زمانی موجود در **جدول شماره ۱۹** به بازه‌های ۵ روز برای زمان‌های تابش‌دهی تقسیم شدند. اختلاف نسبی نتایج اجرای دو کد BATIS 1.0 و CINDER برای مسئله PWR، در انتهای روز ۱۰۹۲ در **شکل ۲۷** نشان داده شده است. اختلافات مشاهده شده بین دو کد برای بیشتر هسته‌ها ناچیز است. میانگین اختلاف نسبی مشاهده شده بین نتایج دو کد BATIS 1.0 و CINDER برای بیش از ۹۰۰ هسته که سهم عمده‌تری در انتهای روز ۱۰۹۲ داشته‌اند، ۲/۴٪ است. میانگین اختلاف نسبی برای هسته‌های با کسر اتمی بزرگ‌تر از  $10^{-6}$ ، کمتر از ۱٪ است. این اختلاف اندک نشان از همخوانی خوب نتایج دو کد BATIS 1.0 و CINDER دارد.



شکل ۲۷: اختلاف نسبی مقادیر اتمی به دست آمده از دو کد BATIS 1.0 و CINDER.

## ۱۲-۲- مسئله مصرف سوخت همبسته با مونث کارلو

آژانس انرژی هسته‌ای (NEA)<sup>۱</sup> که یکی از زیرمجموعه‌های سازمان همکاری و توسعه اقتصادی (OECD)<sup>۲</sup> است، مأموریت دارد تا به کشورهای عضو این سازمان در زمینه محافظت و توسعه علمی، تکنولوژیکی و پایه‌های قانونی مورد نیاز برای استفاده صلح‌آمیز، ایمن و بی‌خطر برای محیط و مقرون‌به‌صرفه از انرژی هسته‌ای کمک کند. در این آژانس، کارگروهی به نام گروه متخصص ایمنی بحرانیت اعتبار مصرف سوخت<sup>۳</sup> بر روی توانایی محاسبه و تخمین غلظت هسته‌ها و راکتیویته کار می‌کند. یکی از اهداف این گروه، بررسی اعتبار محاسبات مصرف سوخت برای موارد ایمنی بحرانیت در نقل و انتقال، ذخیره‌سازی و پسمانداری انواع مختلف سوخت‌های هسته‌ای از جمله اکسیدهای اورانیوم (UOX) و اکسیدهای مخلوط (MOX) برای راکتورهای PWR، BWR و VVER می‌باشد. برای دست یافتن به این مقصود، این گروه به منظور ارزیابی توانایی کدهای موجود، جهت برآورد دقیق راکتیویته و موجودی درون قلب راکتور، اعتبارسنجی‌ها و مقایسه‌هایی هدفمند را در سطح بین‌المللی انجام می‌دهد که این اعتبارسنجی‌ها هم شامل مقایسه کدهای مختلف با یکدیگر و هم شامل مقایسه داده‌ها با مقادیر اندازه‌گیری تجربی می‌شود [۱۵].

در این گزارش از مسئله آزمون فاز I-B، به منظور ارزیابی و اعتبارسنجی کد BATIS 1.0 استفاده شده است. هدف از انجام مسئله اعتبارسنجی محاسباتی فاز I-B، مقایسه نتایج غلظت هسته‌های مختلف در یک میله سوخت ساده از راکتور PWR حاصل از محاسبات همه شرکت‌کننده‌ها در این اعتبارسنجی، با استفاده از کدها و کتابخانه‌های مختلف می‌باشد. مسئله اعتبارسنجی فاز I-B شامل یک میله سوخت ساده است که در قلب راکتور PWR با مجتمع‌های سوخت مربعی ۱۴×۱۴ با سوخت UO<sub>2</sub> حضور دارد. مشخصات میله سوخت در جدول شماره ۲۴ آمده است. اندازه‌گیری‌های عیارسنجی شیمیایی غلظت هسته‌ها در نمونه‌های سوخت مصرف شده، به عنوان معیاری برای محک کدهای محاسباتی برای تخمین ترکیب سوخت مصرف شده است. بسیاری از این اندازه‌گیری‌های عیارسنجی در مرکز مشخصات مواد<sup>۴</sup> وابسته به PNL<sup>۵</sup> در آمریکا انجام شده است. یکی از مجموعه اندازه‌گیری‌های انجام شده توسط این مرکز مربوط به نمونه‌های میله سوخت تکی است که از مکان‌های مختلفی از قلب یک راکتور PWR به دست آمده و نتایج آن برای بسیاری از هسته‌های آکتینید و محصول شکافت موجود است. این نتایج اندازه‌گیری خاص، مبنای مسئله اعتبارسنجی فاز I-B قرار گرفته است؛ اما از آنجایی که هدف از محاسبات اعتبارسنجی، تعیین درجه همخوانی بین کدها و کتابخانه‌های داده مختلف است، مشخصات این مسئله به گونه‌ای ساده شده است که نماینده تقریبی ترکیب سوخت در حین مصرف سوخت باشد. این ساده‌سازی به مقایسه‌ای واضح‌تر و سازگارتر بین

<sup>1</sup> Nuclear Energy Agency

<sup>2</sup> Organization for Economic Cooperation and Development

<sup>3</sup> Expert Group on Burn-Up Credit Criticality Safety

<sup>4</sup> Materials Characterization Center (MCC)

<sup>5</sup> Pacific Northwest Laboratories



نتایج کدهای مختلف منجر می‌شود. به عنوان مثال، ابعاد سوخت وارد شده در **جدول شماره ۲۴** همان مقادیر واقعی هستند؛ ولی فاصله بین سلول‌های سوخت به گونه‌ای قرار داده شده است که نسبت سوخت به کندکننده با مقدار مجتمع سوخت واقعی در حالت دوبعدی همخوانی داشته باشد.

میله سوخت موردنظر برای اعتبارسنجی از سه مکان مختلف راکتور بوده و به دنبال آن مقدار مصرف سوخت در هر حالت متفاوت است. این سه حالت با A و B و C نام‌گذاری می‌شود. میله سوخت در هر یک از حالت‌ها، ۴ دوره کاری کامل در راکتور حضور دارد. ترکیب اتمی اولیه میله در هر یک از حالت‌ها در **جدول شماره ۲۵**، ترکیب اتمی خنک‌کننده در ابتدای دوره اول کاری در **جدول شماره ۲۶**، اطلاعات ۴ دوره کاری راکتور از نظر تعداد روز کار و خاموشی و غلظت بوران در ابتدای هر دوره در **جدول شماره ۲۷** و توان ویژه تولیدی توسط میله سوخت در هر یک از حالت‌ها و دوره‌های کاری راکتور در **جدول شماره ۲۸** آمده است.

جدول شماره ۲۴: داده‌های فیزیکی برای مسئله اعتبارسنجی فاز I-B.

پارامتر	داده
نوع قرص سوخت	UO <sub>2</sub>
چگالی سوخت	۱۰/۰۴۵ g/cm <sup>3</sup>
فاصله مرکز تا مرکز میله‌ها	۱/۵۵۸۶ cm
قطر بیرونی میله	۱/۱۱۸ cm
قطر داخلی میله	۰/۹۸۶ cm
قطر قرص سوخت	۰/۹۵۶۳ cm
طول مؤثر میله	۳۴۷/۲ cm
دمای مؤثر سوخت	۸۴۱ K
دمای غلاف	۶۲۰ K
جنس غلاف	Zircaloy-2 (97.91 wt% Zr, 1.59 wt % Sn, 0.5 wt % Fe)
دمای آب	۵۵۸ K
چگالی آب	۰/۷۵۶۹ g/cm <sup>3</sup>

جدول شماره ۲۵: ترکیب و چگالی اتمی سوخت تازه.

هسته	چگالی اتمی (atoms/b-cm)
<sup>234</sup> U	$6.15165 \times 10^{-6}$
<sup>235</sup> U	$6.89220 \times 10^{-4}$
<sup>236</sup> U	$3.16265 \times 10^{-6}$
<sup>238</sup> U	$2.17104 \times 10^{-2}$
<sup>12</sup> C	$9.13357 \times 10^{-6}$
<sup>14</sup> N	$1.04072 \times 10^{-5}$
<sup>16</sup> O	$4.48178 \times 10^{-2}$

جدول شماره ۲۶: ترکیب و چگالی اتمی خنک‌کننده در ابتدای دوره اول کاری.

هسته	چگالی اتمی (atoms/b-cm)
<sup>1</sup> H	$5.06153 \times 10^{-2}$
<sup>16</sup> O	$2.53076 \times 10^{-2}$
<sup>10</sup> B	$2.75612 \times 10^{-6}$
<sup>11</sup> B	$1.11890 \times 10^{-5}$

جدول شماره ۲۷: اطلاعات دوره‌های کاری برای مسئله اعتبارسنجی فاز I-B.

دوره کاری	زمان کارکرد (روز)	زمان خاموشی (روز)	غلظت بوران در ابتدای دوره (ppm)	غلظت بوران در ابتدای دوره نسبت به دوره اول (%)
۱	۳۰۶/۰	۷۱/۰	۳۳۱/۰	۱۰۰/۰
۲	۳۸۱/۷	۸۳/۱	۴۶۹/۷	۱۴۱/۹
۳	۴۶۶/۰	۸۵/۰	۵۰۴/۱	۱۵۲/۳
۴	۴۶۱/۱	۱۸۷۰/۰	۴۹۲/۵	۱۴۸/۸

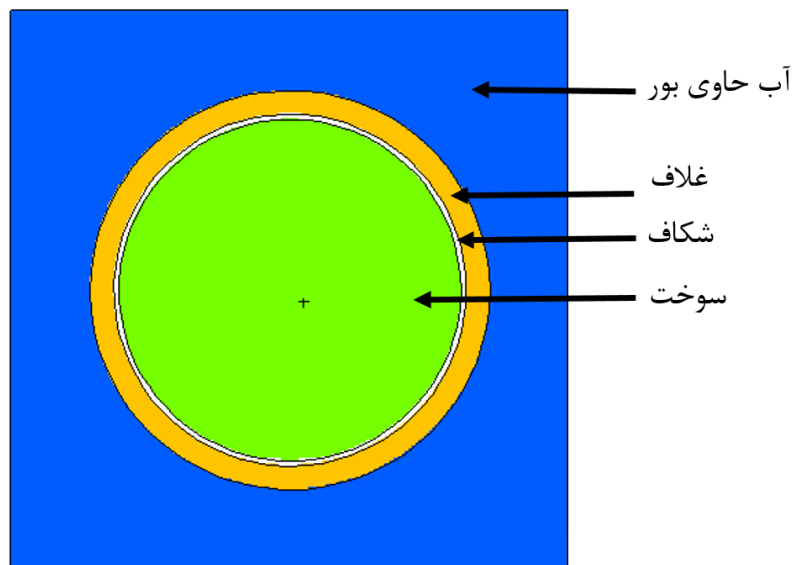
جدول شماره ۲۸: توان ویژه برای سه حالت مختلف اعتبارسنجی (بر حسب kW/kgU).

دوره کاری	حالت A ۲۷/۳۵ GWd/MTU	حالت B ۲۷/۱۲ GWd/MTU	حالت C ۴۴/۳۴ GWd/MTU
۱	۱۷/۲۴	۲۴/۷۲	۳۱/۱۲
۲	۱۹/۴۳	۲۶/۷۶	۳۲/۵۱
۳	۱۷/۰۴	۲۲/۸۴	۲۶/۲۰
۴	۱۴/۵۷	۱۸/۸۷	۲۲/۱۲

برای انجام محاسبات مصرف سوخت همبسته با محاسبات مونتاژ کارلو با استفاده از کد BATIS 1.0، کاربر ابتدا باید هندسه سیستم و سایر پارامترهای مدنظر را با دستورات MCNP شبیه‌سازی کند. ورودی MCNP تهیه شده مطابق با پارامترهای جدول شماره ۲۴، در شکل ۲۹ نشان داده شده است. در این ورودی در بخش تعریف صفحات، ۶ صفحه تخت و ۳ صفحه استوانه‌ای با شماره‌های ۱ تا ۹ تعریف شده است. از آنجا که فرض بر قرار گرفتن میله سوخت در آرایه‌ای بی‌نهایت از میله‌های سوخت است، صفحات سمت چپ و راست (در راستای X) و بالا و پایین (در راستای Y)، با شرط مرزی بازتابنده کامل تعریف شده‌اند. ترکیب سوخت، ترکیب غلاف و ترکیب خنک‌کننده نیز به ترتیب با مواد به شماره‌های ۱۰۱، ۱۰۲ و ۱۰۳ تعریف شده است. در بخش تعریف سلول‌ها، ۵ سلول به شماره‌های ۱ تا ۵ تعریف شده است. سلول شماره ۱ حاوی ماده سوخت (ماده ۱۰۱)، سلول شماره ۲ فضای خالی بین سوخت و غلاف، سلول شماره ۳ حاوی ماده غلاف (ماده ۱۰۲)، سلول شماره ۴ حاوی ماده خنک‌کننده (ماده ۱۰۳) و سلول شماره ۵ نیز سایر فضا می‌باشد. حجم هریک از سلول‌ها، محاسبه شده و از طریق دستور VOL در بخش کارت‌های داده ورودی (خط ۲۶) وارد شده است. دماهای معادل سلول‌ها بر حسب MeV از طریق دستور TMP1 وارد شده است. هندسه شبیه‌سازی شده از طریق ورودی MCNP از نمای بالای میله سوخت، در شکل ۲۸ نمایش داده شده است.

اطلاعات توان میله سوخت در این اعتبارسنجی بر حسب  $\text{kW/kgU}$  داده شده است. بر اساس مقدار اولیه اورانیوم مطابق جدول شماره ۲۵ و تبدیل واحد اتمی به واحد جرمی، مقدار جرم اورانیوم اولیه در میله سوخت،  $۲۲۰۸/۲$  گرم به دست می‌آید؛ بنابراین با ضرب توان‌های ویژه داده شده در جدول شماره ۲۸ در مقدار  $۲/۲۰۸۲$  کیلوگرم اورانیوم در هر میله، توان میله سوخت در دوره‌های کاری مختلف بر حسب کیلووات به دست می‌آید.

برای مقایسه نتایج BATIS 1.0، مسئله فاز I-B برای هر سه حالت A و B و C و برای هر حالت یک بار با استفاده از کتابخانه ORIGEN2 و یک بار با استفاده از کتابخانه CINDER در حالت همبسته با کد MCNP2.7 اجرا شده است. همچنین برای بررسی درستی عملکرد روش‌های پیش‌بینی و تصحیح، کد BATIS 1.0 با استفاده از این دو روش برای حالت A، اجرا شده است. همچنین برای اجرای MCNP، با استفاده از کد MAKXSف و کتابخانه‌های پیش‌ساخته با پسوند 70C، 71C و 72C، کتابخانه‌های موجود در سه ماده و همچنین هسته‌های مهمی که امکان تولید آن‌ها در طول مصرف سوخت وجود دارد، ساخته شده است.



شکل ۲۸: هندسه میله سوخت مسئله فاز I-B، مدل‌سازی شده با MCNP.

```

1 PWR UO2 adjusted pin cell calculation, TEST FOR BC307
2 c cells
3 1 101 6.724627498E-02 -9 5 -6 $fuel
4 2 0 9 -8 5 -6 $gap
5 3 102 -6.56 8 -7 5 -6 $clad
6 4 103 7.593684512E-02 7 5 -6 1 -2 3 -4 $water
7 5 0 #1 #2 #3 #4
8
9 c surfaces
10 *1 px -.7793
11 *2 px .7793
12 *3 py -.7793
13 *4 py .7793
14 5 pz -173.6
15 6 pz 173.6
16 7 cz 0.5590
17 8 cz 0.4930
18 9 cz 0.47815
19
20 c data cards
21 kcode 2000 1 5 70
22 ksrc 0 0 0
23 imp:n 1 1 1 1 0
24 thtme 0
25 tmp1 7.246897e-008 0 5.34254e-008 4.808286e-008 0
26 vol 249.377868980691 15.7304938531154 75.733715622269 502.587952455924 0
27 m101
28 92238 2.17104E-2
29 92236 3.16265E-6
30 92235 6.89220E-4
31 92234 6.15165E-6
32 6012 9.13357E-6
33 7014 1.04072E-5
34 8016 4.48178E-2
35 m102 40090 -49.0926 40091 -10.8251 40092 -17.8204 40094 -17.3218 40096 -2.8501 &
36 50112 -0.0145 26054 -0.0275 26056 -0.4477 26057 -0.0105 26058 -0.0143 $clad
37 m103 1001 5.06153E-2 8016 2.53076e-2 5010 2.75612e-6 5011 1.11890e-5
38 mt103 lwtr

```

شکل ۲۹: ورودی MCNP برای مسئله اعتبارسنجی فاز I-B.

## ۱۲-۲-۱- نتایج اجرای همبسته BATIS 1.0 و MCNP برای مسئله فاز I-B

در این اعتبارسنجی ۱۶ سازمان مختلف از سراسر دنیا شرکت نموده‌اند که از این ۱۶ سازمان ۲۱ مجموعه جواب به کارگروه برگزارکننده اعتبارسنجی ارسال شده و در گزارش نهایی اعتبارسنجی [۱۶] آمده است. بعضی سازمان‌ها از پایگاه‌های داده مختلف و یا روش حل مختلف استفاده کرده و چند جواب ارسال کرده‌اند. یکی از سازمان‌های شرکت‌کننده در این اعتبارسنجی، سازمان ORNL در آمریکا است که سه مجموعه جواب ارسال کرده است. یکی از این سه جواب، حاصل مدل‌سازی مسئله اعتبارسنجی با استفاده از داده‌ها و مشخصات واقعی مجتمع سوخت به جای ساده‌سازی‌های مسئله اعتبارسنجی برای یک میله سوخت است. برای نشان دادن تفاوت بین مدل‌سازی بر اساس ساده‌سازی‌های مسئله اعتبارسنجی برای یک میله سوخت و مدل‌سازی بر اساس شرایط واقعی برای مجتمع سوخت، مجموعه جواب‌های سازمان ORNL که با استفاده از مشخصات واقعی مجتمع سوخت به دست آمده است، با نام ORNL-Assm در جداول این بخش نمایش داده شده است.

نکته دیگر این که برای سنجش همخوانی نتایج گروه‌های شرکت‌کننده در اعتبارسنجی، از انحراف معیار نسبی که مطابق رابطه (۱-۱۲) بر حسب درصد، محاسبه می‌شود، استفاده شده است.

$$STD(\%) = \frac{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{(n-1)}}}{\bar{x}} \times 100 \quad (1-12)$$

که n تعداد داده‌ها،  $x_i$  مقدار هر داده و  $\bar{x}$  مقدار میانگین است. در این اعتبارسنجی از انحراف معیار نسبی کمتر از ۱۰٪، به همخوانی مناسب نتایج تعبیر می‌شود. در تمام جداول خروجی در این بخش، هرکجا از STD استفاده شده است، منظور انحراف معیار نسبی است. نکته دیگر این که مقدار خروجی همه نتایج در گزارش اعتبارسنجی فاز I-B، بر حسب mg/g UO<sub>2</sub> آمده است. از آنجایی که جرم دی‌اکسید اورانیوم اولیه حدود ۲۵۰۵ گرم است، مقدار نهایی همه هسته‌ها بر حسب میلی‌گرم تقسیم بر این مقدار شده و در جداول این بخش نمایش داده می‌شود. همچنین برای محاسبه اختلاف نسبی نتایج BATIS 1.0 با مقدار اندازه‌گیری در جداول این بخش، از رابطه  $(1-C/E)*100$  استفاده شده است که در آن C مقدار حاصل از BATIS 1.0 و E مقدار اندازه‌گیری است.

بازه‌های زمانی انتخاب شده برای اجرای حالت‌های مختلف فاز IB در جدول شماره ۲۹ آمده است. همچنین در همه اجراهای انجام شده با کد BATIS 1.0، برای هسته‌های موجود در جدول شماره ۳۰، تالی اندرکنش‌های شکافت،  $(n,2n)$ ،  $(n,g)$  و  $(n,p)$  توسط دستور TALLY گذاشته شده است. نتایج حاصل از اجرای BATIS 1.0 در حالت همبسته با MCNP برای سه حالت A (مصرف سوخت ۲۷/۳۵ MWd/MTH)، B (مصرف سوخت ۳۷/۱۲ MWd/MTH) و C (مصرف سوخت ۴۴/۳۴ MWd/MTH) با استفاده از کتابخانه ORIGEN2 و بدون استفاده از روش پیش‌بینی و تصحیح به ترتیب در جدول شماره ۳۱ و جدول شماره ۳۲ و جدول شماره ۳۳ آمده است. برای بررسی درستی پیاده‌سازی روش‌های پیش‌بینی و تصحیح، نتایج حاصل از اجرای مسئله با استفاده از روش‌های پیش‌بینی و تصحیح در جدول شماره ۳۴ آمده است. با بررسی داده‌های موجود در این جداول، مشاهده می‌شود که انحراف معیار نسبی برای بیشتر هسته‌ها با در نظر گرفتن نتایج BATIS 1.0 کاهش یافته است که نشان از همخوانی نتایج BATIS 1.0 با نتایج سایر کدهای شرکت‌کننده در اعتبارسنجی دارد. همچنین نتایج اجرای کد BATIS 1.0 با استفاده از کتابخانه ۶۳ گروهی CINDER در حالت همبسته با MCNP به همراه نتایج اجرای مسئله مصرف سوخت با کد MCNPX2.7 در جدول شماره ۳۵ آمده است. محاسبات مصرف سوخت در کد MCNP نیز با همان شرایط کد BATIS 1.0 اجرا شده است. باید به این نکته توجه داشت که در کد MCNP، خود کد با الگوریتمی که دارد، تعیین می‌کند که برای چه هسته‌ها و اندرکنش‌هایی از کتابخانه پیوسته استفاده کند، ولی در کد BATIS 1.0 این گزینه‌ها توسط کاربر تعیین می‌شود.

با مقایسه داده‌های موجود در جداول صفحات ۱۱۲ تا ۱۱۶ در این گزارش، مشاهده می‌شود که نتایج کد BATIS 1.0 برای بیشتر هسته‌ها از همخوانی خوبی با داده‌های اندازه‌گیری و نتایج سایر کدها برخوردار است. اختلاف نسبی جواب BATIS 1.0 با داده‌های اندازه‌گیری برای چند هسته بیش از ۱۰٪ است که با توجه به شکل ۳۰ که در آن اختلاف نسبی میانگین سایر کدها با مقدار اندازه‌گیری رسم شده است، می‌توان مشاهده کرد که در نتایج سایر کدها نیز این اختلاف به چشم می‌خورد. همچنین از مقایسه داده‌های جدول شماره ۳۵ مشخص است که نتایج حاصل از BATIS 1.0 با استفاده از کتابخانه CINDER برای بیشتر هسته‌ها از همخوانی بهتری با داده‌های اندازه‌گیری و نتایج سایر کدها نسبت به نتایج کد MCNPX2.7 برخوردار است.

جدول شماره ۲۹: بازه‌های زمانی انتخاب شده برای اجرای مسئله اعتبارسنجی بر حسب روز.

مدت خاموشی	بازه‌های زمانی منتخب (از راست به چپ)	طول دوره	دوره کاری
۷۱/۰	۶۰، ۶۰، ۶۰، ۶۰، ۶۰، ۶۰	۳۰۶/۰	۱
۸۳/۱	۸۰، ۸۰، ۸۰، ۸۰، ۵۵، ۶/۷	۳۸۱/۷	۲
۶۱/۰	۸۰، ۸۰، ۸۰، ۸۰، ۸۰، ۶۰، ۶	۴۶۶/۰	۳
۱۸۷۰/۰	۸۰، ۸۰، ۸۰، ۸۰، ۸۰، ۵۵، ۶/۱	۴۶۱/۱	۴

جدول شماره ۳۰: فهرست هسته‌ها برای تالی اندرکنش در ورودی MCNP برای مسئله فاز I-B.

962440	902340	942440	932380	922320
962450	912310	882230	932390	922330
962460	912320	882240	942360	922340
962470	912330	882260	942370	922350
962480	952410	892270	942380	922360
972490	952421	902270	942390	922370
982490	952420	902280	942400	922380
982500	952430	902290	942410	932350
982510	962420	902300	942420	932360
982520	962430	902320	942430	932370

جدول شماره ۳۱: نتایج حالت A با کتابخانه ORIGEN بدون استفاده از PC، بر حسب (mg/g UO<sub>2</sub>).

STD (BATIS) (%)	خطای نسبی با اندازه گیری (%)	BATIS 1.0	(%) STD	میانگین جوابها	ORNL-Assm	اندازه گیری	هسته
5.06	0.44	1.593E-01	5.19	1.590E-01	1.612E-01	1.600E-01	<sup>234</sup> U
2.95	5.60	7.996E+00	2.98	8.191E+00	8.010E+00	8.470E+00	<sup>235</sup> U
2.84	-1.88	3.199E+00	2.91	3.224E+00	3.235E+00	3.140E+00	<sup>236</sup> U
0.12	0.51	8.382E+02	0.12	8.375E+02	8.372E+02	8.425E+02	<sup>238</sup> U
15.43	17.21	8.378E-02	15.68	9.027E-02	9.789E-02	1.012E-01	<sup>238</sup> Pu
5.21	6.59	3.983E+00	5.17	4.230E+00	4.289E+00	4.264E+00	<sup>239</sup> Pu
3.98	4.94	1.634E+00	3.95	1.710E+00	1.616E+00	1.719E+00	<sup>240</sup> Pu
6.43	7.37	6.310E-01	6.45	6.697E-01	7.095E-01	6.812E-01	<sup>241</sup> Pu
8.48	3.33	2.790E-01	8.69	2.761E-01	2.769E-01	2.886E-01	<sup>242</sup> Pu
4.79	-	2.194E-01	4.22	2.426E-01	2.503E-01	-	<sup>241</sup> Am
11.40	-	3.621E-02	11.31	4.101E-02	4.626E-02	-	<sup>243</sup> Am
8.60	0.07	2.678E-01	8.61	2.912E-01	3.157E-01	2.680E-01	<sup>237</sup> Np
1.15	-	5.619E-01	1.17	5.666E-01	5.711E-01	-	<sup>95</sup> Mo
5.07	-	5.779E-01	5.17	5.985E-01	5.874E-01	-	<sup>99</sup> Tc
1.01	-	5.610E-01	1.03	5.637E-01	5.657E-01	-	<sup>101</sup> Ru
4.45	-	3.450E-01	4.57	3.493E-01	3.503E-01	-	<sup>103</sup> Rh
10.78	-	5.142E-02	11.03	5.396E-02	6.060E-02	-	<sup>109</sup> Ag
4.74	0.55	8.453E-01	4.87	8.415E-01	8.602E-01	8.500E-01	<sup>133</sup> Cs
2.86	-10.61	3.982E-01	2.81	3.849E-01	3.959E-01	3.600E-01	<sup>135</sup> Cs
2.68	-1.89	6.246E-01	2.76	6.232E-01	6.208E-01	6.130E-01	<sup>143</sup> Nd
1.00	0.31	5.084E-01	1.02	5.066E-01	5.131E-01	5.100E-01	<sup>145</sup> Nd
6.31	-	1.633E-01	6.03	1.806E-01	1.859E-01	-	<sup>147</sup> Sm
13.76	24.31	2.195E-03	14.14	2.054E-03	2.171E-03	2.900E-03	<sup>149</sup> Sm
5.15	4.69	1.973E-01	5.30	1.953E-01	2.028E-01	2.070E-01	<sup>150</sup> Sm
21.73	-	1.103E-02	22.41	9.742E-03	1.013E-02	-	<sup>151</sup> Sm
7.06	-12.67	9.802E-02	7.20	9.394E-02	9.721E-02	8.700E-02	<sup>152</sup> Sm
7.70	0.24	7.881E-02	7.90	7.655E-02	7.443E-02	7.900E-02	<sup>153</sup> Eu
32.48	-	3.724E-03	33.45	3.879E-03	4.524E-03	-	<sup>155</sup> Gd



جدول شماره ۳۲: نتایج حالت B با کتابخانه ORIGEN بدون استفاده از PC، بر حسب (mg/g UO<sub>2</sub>).

STD (BATIS) (%)	خطای نسبی با اندازه گیری (%)	BATIS 1.0	STD (%)	میانگین جوابها	ORNL-Assm	اندازه گیری	هسته
6.91	2.43	1.366E-01	7.08	1.363E-01	1.395E-01	1.400E-01	<sup>234</sup> U
6.00	10.95	4.604E+00	6.01	4.879E+00	4.731E+00	5.170E+00	<sup>235</sup> U
2.66	-2.32	3.612E+00	2.72	3.633E+00	3.630E+00	3.530E+00	<sup>236</sup> U
0.17	0.18	8.312E+02	0.17	8.304E+02	8.298E+02	8.327E+02	<sup>238</sup> U
14.63	16.01	1.590E-01	14.80	1.746E-01	1.881E-01	1.893E-01	<sup>238</sup> Pu
6.11	7.46	4.032E+00	6.08	4.314E+00	4.424E+00	4.357E+00	<sup>239</sup> Pu
4.23	5.40	2.118E+00	4.27	2.189E+00	2.069E+00	2.239E+00	<sup>240</sup> Pu
6.05	8.99	8.216E-01	5.97	8.859E-01	9.345E-01	9.028E-01	<sup>241</sup> Pu
8.08	1.84	5.655E-01	8.28	5.593E-01	5.551E-01	5.761E-01	<sup>242</sup> Pu
5.10	-	2.777E-01	4.35	3.119E-01	3.221E-01	-	<sup>241</sup> Am
11.24	-	9.277E-02	10.41	1.137E-01	1.271E-01	-	<sup>243</sup> Am
8.79	-8.74	3.871E-01	8.86	4.182E-01	4.574E-01	3.560E-01	<sup>237</sup> Np
1.27	-	7.271E-01	1.30	7.333E-01	7.383E-01	-	<sup>95</sup> Mo
3.51	-	7.531E-01	3.56	7.745E-01	7.620E-01	-	<sup>99</sup> Tc
1.02	-	7.577E-01	1.05	7.612E-01	7.635E-01	-	<sup>101</sup> Ru
5.05	-	4.321E-01	5.15	4.436E-01	4.442E-01	-	<sup>103</sup> Rh
10.38	-	7.863E-02	10.61	8.237E-02	9.197E-02	-	<sup>109</sup> Ag
4.76	0.46	1.085E+00	4.90	1.085E+00	1.110E+00	1.090E+00	<sup>133</sup> Cs
3.63	-9.85	4.394E-01	3.24	4.148E-01	4.317E-01	4.000E-01	<sup>135</sup> Cs
3.83	-2.71	7.354E-01	3.93	7.292E-01	7.237E-01	7.160E-01	<sup>143</sup> Nd
1.22	0.67	6.486E-01	1.25	6.455E-01	6.548E-01	6.530E-01	<sup>145</sup> Nd
8.39	-	1.747E-01	7.95	2.010E-01	2.079E-01	-	<sup>147</sup> Sm
14.63	20.20	2.394E-03	15.01	2.208E-03	2.375E-03	3.000E-03	<sup>149</sup> Sm
6.87	-2.36	2.774E-01	7.07	2.738E-01	2.838E-01	2.710E-01	<sup>150</sup> Sm
21.15	-	1.268E-02	21.72	1.092E-02	1.149E-02	-	<sup>151</sup> Sm
8.81	-20.48	1.253E-01	9.01	1.195E-01	1.258E-01	1.040E-01	<sup>152</sup> Sm
8.06	-10.92	1.209E-01	8.19	1.139E-01	1.095E-01	1.090E-01	<sup>153</sup> Eu
32.26	-	6.561E-03	33.28	6.676E-03	7.852E-03	-	<sup>155</sup> Gd

جدول شماره ۳۳: نتایج حالت C با کتابخانه ORIGEN بدون استفاده از PC، بر حسب (mg/g UO<sub>2</sub>).

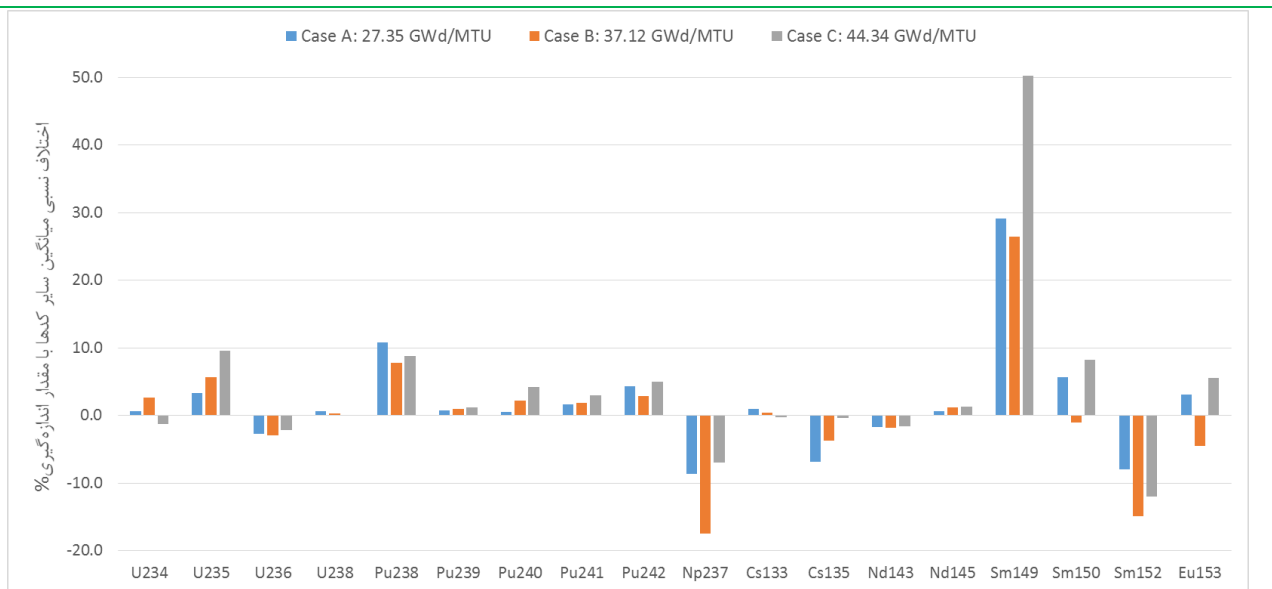
STD (BATIS) (%)	خطای نسبی با اندازه گیری (%)	BATIS 1.0	STD (%)	میانگین جوابها	ORNL-Assm	اندازه گیری	هسته
8.77	-1.33	1.216E-01	8.99	1.215E-01	1.256E-01	1.200E-01	<sup>234</sup> U
8.18	17.60	2.917E+00	8.12	3.201E+00	3.208E+00	3.540E+00	<sup>235</sup> U
2.54	-1.76	3.755E+00	2.60	3.769E+00	3.752E+00	3.690E+00	<sup>236</sup> U
0.20	-0.07	8.255E+02	0.21	8.247E+02	8.236E+02	8.249E+02	<sup>238</sup> U
13.76	18.12	2.201E-01	13.86	2.452E-01	2.692E-01	2.688E-01	<sup>238</sup> Pu
7.12	7.92	4.012E+00	7.12	4.303E+00	4.570E+00	4.357E+00	<sup>239</sup> Pu
5.16	6.13	2.387E+00	5.27	2.437E+00	2.328E+00	2.543E+00	<sup>240</sup> Pu
6.93	10.64	9.115E-01	6.86	9.892E-01	1.067E+00	1.020E+00	<sup>241</sup> Pu
8.19	3.17	8.135E-01	8.39	7.986E-01	7.857E-01	8.401E-01	<sup>242</sup> Pu
5.95	-	3.010E-01	5.29	3.403E-01	3.611E-01	-	<sup>241</sup> Am
11.82	-	1.477E-01	10.40	1.918E-01	2.154E-01	-	<sup>243</sup> Am
9.32	0.83	4.641E-01	9.42	5.005E-01	5.585E-01	4.680E-01	<sup>237</sup> Np
1.79	-	8.386E-01	1.85	8.440E-01	8.502E-01	-	<sup>95</sup> Mo
4.13	-	8.710E-01	4.21	8.958E-01	8.773E-01	-	<sup>99</sup> Tc
1.70	-	9.006E-01	1.76	9.021E-01	9.061E-01	-	<sup>101</sup> Ru
5.33	-	4.812E-01	5.41	4.989E-01	5.012E-01	-	<sup>103</sup> Rh
9.99	-	9.900E-02	10.21	1.036E-01	1.147E-01	-	<sup>109</sup> Ag
5.44	0.08	1.239E+00	5.60	1.244E+00	1.273E+00	1.240E+00	<sup>133</sup> Cs
4.76	-7.60	4.627E-01	4.40	4.318E-01	4.605E-01	4.300E-01	<sup>135</sup> Cs
4.39	-3.08	7.865E-01	4.51	7.748E-01	7.763E-01	7.630E-01	<sup>143</sup> Nd
1.43	0.62	7.394E-01	1.46	7.339E-01	7.464E-01	7.440E-01	<sup>145</sup> Nd
9.68	-	1.750E-01	9.12	2.070E-01	2.139E-01	-	<sup>147</sup> Sm
15.21	45.77	2.549E-03	15.61	2.336E-03	2.601E-03	4.700E-03	<sup>149</sup> Sm
8.27	6.87	3.362E-01	8.50	3.311E-01	3.450E-01	3.610E-01	<sup>150</sup> Sm
21.79	-	1.387E-02	22.31	1.171E-02	1.287E-02	-	<sup>151</sup> Sm
9.46	-17.77	1.425E-01	9.69	1.355E-01	1.443E-01	1.210E-01	<sup>152</sup> Sm
8.49	-2.84	1.522E-01	8.53	1.397E-01	1.344E-01	1.480E-01	<sup>153</sup> Eu
31.88	-	9.076E-03	32.97	8.849E-03	1.074E-02	-	<sup>155</sup> Gd

جدول شماره ۳۴: نتایج اجرای روش‌های PC برای حالت A با کتابخانه ORIGEN، بر حسب (mg/g UO<sub>2</sub>).

STD (PC2) %	خطای نسبی با اندازه‌گیری (%)	BATIS 1.0 (PC2)	STD (PC1) %	خطای نسبی با اندازه‌گیری (%)	BATIS 1.0 (PC1)	هسته
5.06	0.88	1.586E-01	5.06	0.75	1.588E-01	<sup>234</sup> U
3.07	7.63	7.824E+00	3.00	6.58	7.913E+00	<sup>235</sup> U
2.84	-2.71	3.225E+00	2.84	-2.26	3.211E+00	<sup>236</sup> U
0.12	0.53	8.380E+02	0.12	0.52	8.381E+02	<sup>238</sup> U
15.40	16.23	8.478E-02	15.41	16.69	8.431E-02	<sup>238</sup> Pu
5.22	6.87	3.971E+00	5.21	6.73	3.977E+00	<sup>239</sup> Pu
3.87	1.86	1.687E+00	3.91	3.37	1.661E+00	<sup>240</sup> Pu
6.43	7.28	6.316E-01	6.43	7.46	6.304E-01	<sup>241</sup> Pu
8.49	1.98	2.829E-01	8.48	2.70	2.808E-01	<sup>242</sup> Pu
4.82	-	2.189E-01	4.82	-	2.189E-01	<sup>241</sup> Am
11.34	-	3.651E-02	11.34	-	3.655E-02	<sup>243</sup> Am
8.56	-0.71	2.699E-01	8.57	-0.52	2.694E-01	<sup>237</sup> Np
1.13	-	5.685E-01	1.13	-	5.652E-01	<sup>95</sup> Mo
5.02	-	5.848E-01	5.04	-	5.813E-01	<sup>99</sup> Tc
1.02	-	5.682E-01	1.00	-	5.645E-01	<sup>101</sup> Ru
4.44	-	3.490E-01	4.44	-	3.470E-01	<sup>103</sup> Rh
10.74	-	5.226E-02	10.76	-	5.184E-02	<sup>109</sup> Ag
4.75	-0.60	8.551E-01	4.74	-0.01	8.501E-01	<sup>133</sup> Cs
2.99	-11.33	4.008E-01	2.92	-10.97	3.995E-01	<sup>135</sup> Cs
2.69	-2.87	6.306E-01	2.69	-2.38	6.276E-01	<sup>143</sup> Nd
1.05	-0.82	5.142E-01	1.01	-0.24	5.112E-01	<sup>145</sup> Nd
6.26	-	1.644E-01	6.28	-	1.639E-01	<sup>147</sup> Sm
13.78	23.76	2.211E-03	13.77	24.07	2.202E-03	<sup>149</sup> Sm
5.18	3.33	2.001E-01	5.16	4.06	1.986E-01	<sup>150</sup> Sm
21.75	-	1.112E-02	21.74	-	1.108E-02	<sup>151</sup> Sm
7.10	-13.98	9.916E-02	7.07	-13.32	9.859E-02	<sup>152</sup> Sm
7.74	-1.42	8.012E-02	7.71	-0.56	7.944E-02	<sup>153</sup> Eu
32.43	-	3.799E-03	32.46	-	3.760E-03	<sup>155</sup> Gd

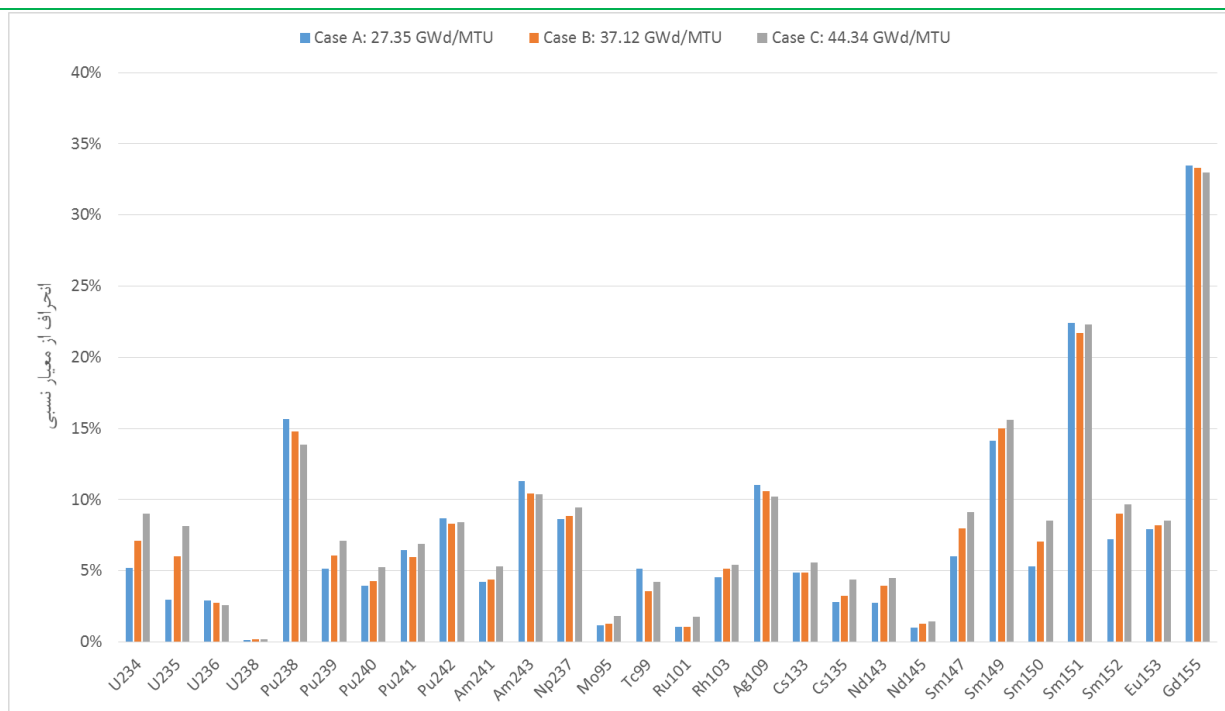
جدول شماره ۳۵: نتایج کدهای BATIS1.0 (cinder) و MCNPX2.7 برای حالت C، بر حسب (mg/g UO<sub>2</sub>).

STD (%) (MCNP)	خطای نسبی با اندازه‌گیری (%)	MCNPX2.7	STD (%) (BATIS)	خطای نسبی با اندازه‌گیری (%)	BATIS 1.0	هسته
9.41	14.00	1.032E-01	9.24	11.75	1.059E-01	<sup>234</sup> U
8.65	23.62	2.704E+00	8.05	14.94	3.011E+00	<sup>235</sup> U
2.54	2.41	3.779E+00	2.54	1.98	3.763E+00	<sup>236</sup> U
0.20	0.02	8.247E+02	0.20	0.04	8.252E+02	<sup>238</sup> U
13.72	17.19	2.226E-01	13.62	14.10	2.309E-01	<sup>238</sup> Pu
7.51	13.84	3.754E+00	7.07	6.75	4.063E+00	<sup>239</sup> Pu
5.25	8.85	2.318E+00	5.16	6.02	2.390E+00	<sup>240</sup> Pu
7.17	14.22	8.750E-01	6.86	9.33	9.248E-01	<sup>241</sup> Pu
8.23	0.45	8.363E-01	8.19	2.68	8.176E-01	<sup>242</sup> Pu
-	-	-	5.60	-	3.109E-01	<sup>241</sup> Am
-	-	-	10.18	-	1.800E-01	<sup>243</sup> Am
9.28	0.04	4.678E-01	9.29	0.26	4.668E-01	<sup>237</sup> Np
1.96	-	8.179E-01	1.82	-	8.312E-01	<sup>95</sup> Mo
4.48	-	8.319E-01	4.06	-	9.035E-01	<sup>99</sup> Tc
2.08	-	8.578E-01	1.79	-	9.226E-01	<sup>101</sup> Ru
5.72	-	4.515E-01	5.28	-	4.877E-01	<sup>103</sup> Rh
10.80	-	8.590E-02	10.03	-	9.772E-02	<sup>109</sup> Ag
5.48	2.26	1.212E+00	5.44	0.73	1.249E+00	<sup>133</sup> Cs
5.49	9.72	3.882E-01	4.25	2.86	4.177E-01	<sup>135</sup> Cs
5.37	11.95	6.718E-01	4.52	3.13	7.391E-01	<sup>143</sup> Nd
1.91	6.80	6.934E-01	1.42	1.17	7.353E-01	<sup>145</sup> Nd
9.65	-	1.757E-01	8.91	-	2.194E-01	<sup>147</sup> Sm
17.55	67.57	1.524E-03	15.26	53.34	2.193E-03	<sup>149</sup> Sm
9.18	23.52	2.761E-01	8.27	6.37	3.380E-01	<sup>150</sup> Sm
24.32	-	7.078E-03	22.35	-	9.463E-03	<sup>151</sup> Sm
10.55	10.08	1.088E-01	9.50	6.53	1.289E-01	<sup>152</sup> Sm
8.96	18.92	1.200E-01	8.35	0.68	1.470E-01	<sup>153</sup> Eu
34.82	-	4.726E-03	35.46	-	4.206E-03	<sup>155</sup> Gd



شکل ۳۰: مقایسه میانگین جواب‌های سایر کدها با مقادیر اندازه‌گیری در سه حالت مصرف سوخت فاز I-B.

انحراف از معیار نسبی جواب‌های کدهای شرکت‌کننده در آزمون اعتبارسنجی فاز I-B برای هسته‌های مختلف در شکل ۳۱ رسم شده است. همان‌طور که پیش‌تر نیز توضیح داده شد، در گزارش اعتبارسنجی فاز I-B، انحراف معیار نسبی بزرگ‌تر از ۱۰٪ به عنوان همخوانی ضعیف بین نتایج شرکت‌کنندگان تلقی می‌شود. با این توصیف با توجه به انحراف معیارهای نسبی در سه حالت A، B و C، مشاهده می‌شود که مجموعه جواب‌های شرکت‌کنندگان در این اعتبارسنجی برای هسته‌های  $^{238}\text{Pu}$ ،  $^{243}\text{Am}$ ،  $^{109}\text{Ag}$ ،  $^{149}\text{Sm}$ ،  $^{151}\text{Sm}$  و  $^{155}\text{Gd}$  از همخوانی خوبی برخوردار نیست. با توجه به توضیحات ارائه شده در گزارش این اعتبارسنجی [۱۶]، دلیل همخوانی ضعیف بین نتایج برای بیشتر این هسته‌ها، اختلاف سطح مقطع‌های موجود در پایگاه‌های داده مورد استفاده توسط هر شرکت‌کننده است. به عنوان مثال، علت ناهمخوانی برای هسته  $^{238}\text{Pu}$ ، عدم وجود هسته‌های Cm در کتابخانه مورد استفاده توسط چند شرکت‌کننده است و از آنجا که قسمت مهمی از تولید  $^{238}\text{Pu}$  از طریق واپاشی آلفای  $^{242}\text{Cm}$  است، این کمبود در کتابخانه، در نتیجه  $^{238}\text{Pu}$  نمود بیشتری یافته است.



شکل ۳۱: انحراف از معیار نسبی نتایج کدهای شرکت کننده در اعتبارسنجی فاز I-B.

به طور کلی دلایل مختلفی می تواند باعث بروز خطا در محاسبات مصرف سوخت شود که سعی می شود در اینجا به دلایل عمده اشاره شود. مهم ترین عامل بروز اختلاف در نتیجه محاسبات شرکت کنندگان مختلف، اختلاف در سطح مقطع های مورد استفاده و فرضیات ساده کننده برای تولید سطح مقطع ها است. همان طور که پیش تر نیز در این گزارش توضیح داده شد، سطح مقطع های میکروسکوپی که برای محاسبه نرخ اندرکنش ها و تبدیلات هسته ای در محاسبات مصرف سوخت مورد استفاده قرار می گیرند، تابع پیوسته ای از انرژی نوترون بوده و برای استفاده در محاسبات مصرف سوخت به ناچار باید به صورت گروهی تبدیل شوند. برای تبدیل کتابخانه های پیوسته به کتابخانه با تعداد گروه محدود، از طیف نوعی راکتور مورد نظر استفاده می شود که این خود یک تقریب است. کتابخانه های مختلف مصرف سوخت از طیف های نوعی مختلف، داده های سطح مقطع خام متفاوت و تقریب ها و فرضیات مختلفی برای تولید کتابخانه استفاده می کنند که باعث بروز اختلاف در نتایج محاسبات مصرف سوخت می شود.

عامل دوم ایجاد خطا در این محاسبات، فرایند انجام شده برای تولید کتابخانه های مورد استفاده در MCNP است. اگر کتابخانه MCNP دارای خطا باشد، این خطا در کل محاسبات همبسته مصرف سوخت-مونت کارلو منتشر شده و در همه نتایج اثر می گذارد.

یکی از دلایل اختلاف نتایج کد BATIS 1.0 با مقدار اندازه گیری، وجود اختلاف ها بین مدل ارائه شده در مسئله اعتبارسنجی و ترکیب واقعی میله سوخت در طول کار راکتور است. مقادیر اندازه گیری ارائه شده در مسئله اعتبارسنجی، برای یک قرص سوخت خاص که در یک میله سوخت خاص در یک مجتمع سوخت قرار دارد، انجام

گرفته است؛ در حالی که کدهای محاسبات مصرف سوخت نظیر BATIS 1.0 به طور معمول، در محاسبات فرسایش سوخت، یک تخمین میانگین برای رفتار متوسط مجتمع سوخت به دست می‌آورند. مقداری از اختلاف موجود بین مقادیر اندازه‌گیری شده با نتایج شبیه‌سازی واقعی مجتمع سوخت توسط ORNL-Assm (که داده‌های آن در همه جداول خروجی این گزارش آمده است)، به همین دلیل است.

دلیل دیگر برای اختلاف بین نتایج کدهای محاسبات فرسایش سوخت با مقادیر اندازه‌گیری، این حقیقت است که شرایط توازن نوترون یا به عبارتی ضریب تکثیر مؤثر در یک سیستم واقعی در حال کار، همواره یک است (سیستم همواره بحرانی است)؛ در حالی که در محاسبات فرسایش سوخت فاز IB، ضریب تکثیر بی‌نهایت میله سوخت که با شرط مرزی بازتابنده کامل در نظر گرفته می‌شود، در حدود  $1/3$  است که این خود می‌تواند توازن نوترون را در سیستم تغییر دهد. همچنین طیف به دست آمده بین شرایط واقعی راکتور با شبیه‌سازی یک تک‌میله سوخت، مقداری تفاوت دارد که این تفاوت می‌تواند منشأ خطا در محاسبات شود.

علت دیگر بروز خطا در محاسبات، صرف‌نظر کردن از بعضی هسته‌ها در محاسبات ترابرد نوترون است. همان‌طور که پیش‌تر توضیح داده شد، کد BATIS 1.0 تنها هسته‌هایی را در محاسبات ترابرد MCNP وارد می‌کند که اول، سطح مقطع کل آن هسته در فایل SIGT.XS موجود باشد؛ دوم، کتابخانه پیوسته آن هسته با پسوند مورد نظر در فایل XSDIR موجود باشد و سوم، کسر سطح مقطع ماکروسکوپی کل هسته در یک ماده از یک مقدار آستانه بیشتر باشد.

1. Moler, C. and Loan, C.V., '*Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years*'. Industrial and Applied Mathematics. **45**: p. 3-000, 2003.
2. Knott, D. and Yamamoto, A., '*Burnup Calculation*', in '*Handbook of Nuclear Engineering*', D.G. Cacuci, Editor, Springer. p. 1161-1207, 2010.
3. Lapidus, L. and Luus, R., '*Optimal control of engineering processes*'. Blaisdell. 1967.
4. Okumura, K., Nagaya, Y., and Mori, T., '*MVP-BURN: Burnup calculation code using a continuous-energy Monte Carlo code MVP*', 2007.
5. Cetnar, J., '*General solution of Bateman equations for nuclear transmutations*'. Annals of Nuclear Energy. **33**: p. 640-645, 2006.
6. Higham, N.J., '*The Scaling and Squaring Method for the Matrix Exponential Revisited*'. Society for Industrial and Applied Mathematics. **51**(4): p. 747-764, 2009.
7. Yamamoto, A., Tatsumi, M., and Sugimura, N., '*Numerical Solution of Stiff Burnup Equation with Short Half Lived Nuclides by the Krylov Subspace Method*'. Journal of nuclear science and technology. **44**(2): p. 147-154, 2007.
8. Kawamoto, Y., Chiba, G., Tsuji, M., and Narabayashi, T., '*Numerical solution of matrix exponential in burn-up equation using mini-max polynomial approximation*'. Annals of Nuclear Energy. **80**: p. 219-224, 2015.
9. Pusa, M., '*Computing the Matrix Exponential in Burnup Calculations*'. NUCLEAR SCIENCE AND ENGINEERING. **164**: p. 140-150, 2010.
10. Croff, A.G., '*ORIGEN2 - A revised and updated version of the Oak Ridge isotope generation and depletion code*', 5621, 1980.
11. Poston, D.I. and Trellue, H.R., '*USER'S MANUAL, VERSION 2.0 FOR MONTEBURNS, VERSION 5B*', LA-UR-99-4999, 1999.
12. Hendricks, J.S., Mckinney, G.W., Fensin, M.L., James, M.R., Johns, R.C., Durkee, J.W., Finch, J.P., Pelowitz, D.B., Waters, L.S., and Johnson, M.W., '*MCNPX 2.6.0 Extensions*': Los Alamos National Laboratory, 2008.
13. '*MCNP4C: Monte Carlo 'N-Particle Transport Code System*': Los Alamos National Laboratory, 2000.
14. Rosman, K.J.R. and Taylor, P.D.P., '*The 1997 report of the IUPAC Subcommittee for Isotopic Abundance Measurements*'. Pure Appl. Chem. **71**: p. 1593-1607, 1999.
15. '*THE NUCLEAR ENERGY AGENCY*'. Available from: [WWW.OECD-NEA.ORG/GENERAL/ABOUT](http://WWW.OECD-NEA.ORG/GENERAL/ABOUT), 2017
16. Dehart, M.D., Brady, M.C., and Parks, C.V., '*BURNUP CREDIT CALCULATIONAL CRITICALITY BENCHMARK, PHASE I-B RESULTS*', OECD/NEA, NEA/NSC/DOC(96)-06, ORNL-6901, 1996.