

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra jaderných reaktorů
Specializace: Jaderné reaktory



Explicitní model vyhořívání aktinoidů

Explicit Actinide Depletion Model

VÝZKUMNÝ ÚKOL

Vypracoval: Bc. Miroslav Vejvoda
Vedoucí práce: Ing. František Havlůj, Ph.D.
Rok: 2021



Břehová 7 115 19 Praha 1

Katedra jaderných reaktorů

Akademický rok: 2020/2021

ZADÁNÍ VÝZKUMNÉHO ÚKOLU

Student: **Bc. Miroslav Vejvoda**

Studijní program: Jaderné inženýrství

Specializace: Jaderné reaktory

Název práce česky: **Explicitní model vyhořívání aktinoidů**

Název práce anglicky: Explicit actinide depletion model

Pokyny pro vypracování:

1. Popište a v libovolném programovacím jazyce implementujte jednoduchý model řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu .
2. S použitím výpočtů mikrokódem HELIOS pro provozní historie se změnou výkonu, hustoty chladiva a dalších parametrů pro vybraný typ palivového souboru ověřte spolehlivost modelu, tj. se známou provozní historií a dvougrupovými hustotami toku neutronů a účinnými průřezy porovnejte koncentrace aktinoidů z modelu a z výstupu mikrokódu HELIOS.
3. Porovnejte spolehlivost modelu při použití mikroskopických účinných průřezů pro konkrétní historii (které ovšem v praxi nejsou známy) a při použití mikroskopických účinných průřezů pro nominální historii; případě prozkoumejte možnosti jejich jednoduché parametrizace.
4. Zhodnoťte možnosti opravy účinných průřezů podle koncentrace aktinoidů:
 - a. přímou úpravou účinných průřezů pro absorpci a štěpení se znalostí mikroskopických účinných průřezů a koncentrací aktinoidů
 - b. využitím koncentrace ^{239}Pu jako podobnostního čísla (tzv. „spektrální index“) pro parametrizaci makroskopických účinných průřezů.

Doporučená literatura:

- [1] Bilodid Y.: Spectral History Modeling In The Reactor Dynamics Code DYN3D, HZDR-051, 2014.
- [2] Cacuci D. G.: Handbook of Nuclear Engineering, Vol. 3: Reactor Analysis, Springer US, 2010.
- [3] Havlůj F., Vočka R.: ANDREA 2.3 – uživatelská příručka a metodika programu, ÚJV ORF, 2019.
- [4] Wemple Ch. A.: HELIOS-2 Methods Manual, Studsvik Scandpower, 2011.

Jméno a pracoviště vedoucího práce:

Ing. František Havlůj, Ph.D.
ORF ÚJV Řež, a. s.

Datum zadání výzkumného úkolu: 12. 10. 2020

Datum odevzdání výzkumného úkolu: 2. 6. 2021

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

V Praze dne 12. 10. 2020

Ing. Jan Rataj, Ph.D.



Vedoucí katedry

Prohlášení

Odevzdáním tohoto výzkumného úkolu souhlasím, že v souladu s příslušnými ustanoveními autorského zákona je ČVUT oprávněno užít výzkumný úkol k výuce nebo k vlastní vnitřní potřebě, ovšem nikoliv za účelem přímého nebo nepřímého hospodářského nebo obchodního prospěchu. K užití, na které se nevztahuje předchozí věta, má ČVUT za obvyklých podmínek právo na uzavření licenční smlouvy o užití výzkumného úkolu.

Elektronická verze výzkumného úkolu je shodná s tištěnou verzí a obsahuje všechny náležitosti výzkumného úkolu.

Dále prohlašuji, že jsem svůj výzkumný úkol vypracoval samostatně a použil pouze podklady (literaturu, projekty, SW atd.) uvedené v přiloženém seznamu.

V Praze dne 7. června 2021

.....

Bc. Miroslav Vejvoda

Poděkování

Rád bych poděkoval vedoucímu Ing. Františku Havlůjovi, Ph.D. za jeho cenné rady, účinnou metodickou a odbornou pomoc při zpracování výzkumného úkolu. Také děkuji Ing. Pavlu Sukovi za odborné názory a připomínky k výzkumnému úkolu. Největší dík ovšem patří mé rodině za jejich bezmeznou podporu během celého studia.

Bc. Miroslav Vejvoda

Název práce:

Explicitní model vyhořívání aktinoidů

Autor: Bc. Miroslav Vejvoda

Studiijní program: Jaderné inženýrství

Specializace: Jaderné reaktory

Druh práce: Výzkumný úkol

Vedoucí práce: Ing. František Havlůj, Ph.D.
ORF ÚJV Řež, a.s.

Abstrakt: Celozónové výpočty neutronově-fyzikálních charakteristik jsou prováděny pomocí makrokódů, ve kterých je díky požadavkům na krátký výpočetní čas nezbytné přistoupit k řadě zjednodušení. Mezi ně patří i parametrizace makroskopických účinných průřezů, jejíž možné zpřesnění je tématem výzkumného úkolu. Práce se nejprve zabývá zhodnocením spolehlivosti parametrizace v makrokódu ANDREA a na základě těchto výsledků je popsán a implementován model řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu , který je zamýšlen použít pro zpřesnění parametrizace makroskopických účinných průřezů. Modelem predikované atomové hustoty aktinoidů jsou využity k opravě makroskopických účinných průřezů, která zohledňuje spektrální historii vyhořívání. Ve výzkumném úkolu jsou navrženy opravy pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů a pomocí parametrizace s využitím atomové hustoty ^{239}Pu .

Klíčová slova: Model aktinoidů, vliv spektrální historie, parametrizace, makroskopické účinné průřezy

Title:

Explicit Actinide Depletion Model

Author: Bc. Miroslav Vejvoda

Abstract: Core physics calculations are performed using the codes, in which is necessary to make a number of simplifications due to time calculation requirements. This includes a macroscopic cross sections parametrization that feasible enhance examies this research project. At first the project deals with a evaluation of parametrization reliability in core physics code ANDREA and on the basis of the evaluation results is described and implemented actinide depletion ^{238}U - ^{239}Pu chain model that is intended utilize to specifying the macroscopic cross sections parametrization. Actinides number densities calculating by the model are utilized for macroscopic cross sections corrections including spectral history depletion effects. In the research project are proposed macroscopic cross sections corrections using by a direct actinides number dentities correction as well a parametrization with the use of a ^{239}Pu number density.

Key words: Actinide model, spectral history effects, parametrization, macroscopic cross sections

Obsah

Seznam obrázků	9
Seznam tabulek	9
Seznam zdrojových kódů	9
Seznam indexů, symbolů a zkratek	9
Úvod	12
1 Parametrizace makroskopických účinných průřezů	13
1.1 Parametrizace v makrokódu ANDREA	13
1.2 Výpočet provozních stavů mikrokódem HELIOS	15
1.3 Hodnocení spolehlivosti parametrizace v ANDREe	15
1.4 Vliv provozní historie na grupové konstanty	22
1.5 Vliv provozní historie na spektrum neutronů	28
1.6 Indikace spektrální historie pomocí ^{239}Pu	29
2 Model řetězce aktinoidů $^{238}\text{U} - ^{239}\text{Pu}$	34
2.1 Popis izotopických změn v průběhu vyhořívání	34
2.2 Formulace a řešení bilančních rovnic	35
2.3 Přímé řešení řetězce aktinoidů pomocí Batemanovy metody	36
2.4 Implementace modelu	37
2.5 Testování modelu	38
2.5.1 Spolehlivost modelu pro známou provozní historii	39
2.5.2 Spolehlivost modelu pro provozní historie s použitím nominálních dat a odskoků	45
2.5.3 Spolehlivost modelu s parametrizovanými makroskopickými účinnými průřezy	51
3 Opravy účinných průřezů zohledňující spektrální historii	57
3.1 Přímá úprava pomocí atomových hustot aktinoidů	57
3.2 Parametrizace s využitím atomové hustoty ^{239}Pu	67
3.2.1 Určení aproximační funkce a podobnostního čísla spektrální historie	67
3.2.2 Testování parametrizace makroskopických účinných průřezů	70
Závěr	77
Přílohy	i
A Řešení bilančních rovnic $^{238}\text{U} - ^{239}\text{Pu}$ pomocí metody integračního faktoru	i
A.1 Řešení bilanční rovnice pro ^{238}U	i
A.2 Řešení bilanční rovnice pro ^{239}Np	i
A.3 Řešení bilanční rovnice pro ^{239}Pu	ii
B Zdrojový kód modelu řetězce aktinoidů $^{238}\text{U} - ^{239}\text{Pu}$	iv

C Aproximace metodou nejmenších čtverců

vi

Seznam obrázků

1.1	Závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v rychlé grupě na vyhoření použitých při výpočtu v ANDREe s referenčními hodnotami z HELIOSu pro uvažované provozní historie (vlevo) a relativní odchylky ANDREy od HELIOSu (vpravo)	17
1.2	Závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v tepelné grupě na vyhoření použitých při výpočtu v ANDREe s referenčními hodnotami z HELIOSu pro uvažované provozní historie (vlevo) a relativní odchylky ANDREy od HELIOSu (vpravo)	19
1.3	Závislost makroskopických účinných průřezů pro absorpci v rychlé grupě na vyhoření použitých při výpočtu v ANDREe s referenčními hodnotami z HELIOSu pro uvažované provozní historie (vlevo) a relativní odchylky ANDREy od HELIOSu (vpravo)	20
1.4	Závislost makroskopických účinných průřezů pro absorpci v tepelné grupě na vyhoření použitých při výpočtu v ANDREe s referenčními hodnotami z HELIOSu pro uvažované provozní historie (vlevo) a relativní odchylky ANDREy od HELIOSu (vpravo)	21
1.5	Závislost grupových konstant na vyhoření (vlevo) a jejich relativní odchylky pro historie se změnou provozních parametrů od nominální historie (vpravo)	23
1.6	Závislost grupových konstant na vyhoření (vlevo) a jejich relativní odchylky pro historie se změnou provozních parametrů od nominální historie (vpravo)	25
1.7	Závislost grupových konstant na vyhoření (vlevo) a jejich relativní odchylky pro historie se změnou provozních parametrů od nominální historie (vpravo)	26
1.8	Závislost grupových konstant na vyhoření (vlevo) a jejich relativní odchylky pro historie se změnou provozních parametrů od nominální historie (vpravo)	27
1.9	Závislost atomových hustot ^{239}Pu na vyhoření (vpravo) a relativní odchylky atomové hustoty ^{239}Pu pro historie se změnou provozních parametrů od nominální historie (vpravo)	29
1.10	Závislost změny spektrálního indexu na změně atomové hustoty ^{239}Pu pro vyhoření 30 000 MWd/t _U	31
1.11	Závislost změny ^{241}Pu na změně ^{239}Pu pro vyhoření 30 000 MWd/t _U	31
1.12	Závislost změn makroskopických účinných průřezů na změnách atomové hustoty ^{239}Pu pro historie se změnou provozních parametrů při vyhoření 30 000 MWd/t _U	32
1.13	Závislost změn makroskopických účinných průřezů na změnách atomové hustoty ^{239}Pu pro historie se změnou provozních parametrů při vyhoření 30 000 MWd/t _U	33
2.1	Schéma přeměn řetězce aktinoidů. Převzato z [8].	34
2.2	Schéma zjednodušeného linearizovaného řetězce aktinoidů $^{238}\text{U} - ^{239}\text{Pu}$	35
2.3	Závislost atomových hustot na vyhoření (vlevo) a relativní odchylky modelem vypočítaných atomových hustot ve srovnání s HELIOSem (vpravo) pro nominální provozní historii při použití známých provozních dat	40
2.4	Závislost atomových hustot na vyhoření (vlevo) a relativní odchylky modelem vypočítaných atomových hustot ve srovnání s HELIOSem (vpravo) pro provozní historie se změnou výkonu při použití známých provozních dat	42

2.5	Závislost atomových hustot na vyhoření (vlevo) a relativní odchylky modelem vy- počítaných atomových hustot ve srovnání s HELIOSem (vpravo) pro provozní his- torie se změnou hustoty moderátoru při použití známých provozních dat	43
2.6	Závislost atomových hustot na vyhoření (vlevo) a relativní odchylky modelem vy- počítaných atomových hustot ve srovnání s HELIOSem (vpravo) pro provozní his- torie se změnou koncentrace kyseliny borité při použití známých provozních dat .	44
2.7	Závislost atomových hustot na vyhoření (vlevo) a relativní odchylky modelu od HELIOSu (vpravo) při použití konkrétních mikroskopických účinných průřezů a při použití mikroskopických účinných průřezů pro nominální historii pro provozní historii s 200 % nominálního výkonu	46
2.8	Srovnání relativních odchylek atomové hustoty aktinoidů vypočítané pomocí mo- delu od referenčního výpočtu v HELIOSu pro provozní historie se změnou výkonu při použití různých přístupů k mikroskopickým účinným průřezům	48
2.9	Srovnání relativních odchylek atomové hustoty aktinoidů vypočítané pomocí mo- delu od referenčního výpočtu v HELIOSu pro provozní historie se změnou hustoty moderátoru při použití různých přístupů k mikroskopickým účinným průřezům .	49
2.10	Srovnání relativních odchylek atomové hustoty aktinoidů vypočítané pomocí mo- delu od referenčního výpočtu v HELIOSu pro provozní historie se změnou kon- centrace kyseliny borité při použití různých přístupů k mikroskopickým účinným průřezům	50
2.11	Závislost atomových hustot ^{239}Pu na vyhoření vypočítaných pomocí modelu s růz- nými přístupy k mikroskopickým účinným průřezům (vpravo) a porovnání s refe- renčními výsledky z HELIOSu (vpravo)	54
2.12	Závislost atomových hustot ^{239}Pu na vyhoření vypočítaných pomocí modelu s růz- nými přístupy k mikroskopickým účinným průřezům (vpravo) a porovnání s refe- renčními výsledky z HELIOSu (vpravo)	55
2.13	Závislost atomových hustot ^{239}Pu na vyhoření vypočítaných pomocí modelu s růz- nými přístupy k mikroskopickým účinným průřezům (vpravo) a porovnání s refe- renčními výsledky z HELIOSu (vpravo)	56
3.1	Porovnání celkové absorpcie pro tepelnou grupu způsobenou odlišnou spektrální historií s absorpcí na vybraných aktinoidech pro provozní historie se změnou výkonu	59
3.2	Porovnání celkové absorpcie pro tepelnou grupu způsobenou odlišnou spektrální historií s absorpcí na vybraných aktinoidech pro provozní historie se změnou kon- centrace kyseliny borité	60
3.3	Závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v rychlé grupě na vy- hoření získaná přímou úpravou atomových hustot aktinoidů a referenční hodnoty z HELIOSu pro různé provozní historie (vlevo) a porovnání jednotlivých provo- zních historií s nominální historií (vpravo)	62
3.4	Závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v tepelné grupě na vy- hoření získaná přímou úpravou atomových hustot aktinoidů a referenční hodnoty z HELIOSu pro různé provozní historie (vlevo) a porovnání jednotlivých provo- zních historií s nominální historií (vpravo)	64
3.5	Závislost makroskopických účinných průřezů pro absorpci v tepelné grupě na vy- hoření získaná přímou úpravou atomových hustot aktinoidů a referenční hodnoty z HELIOSu pro různé provozní historie (vlevo) a porovnání jednotlivých provo- zních historií s nominální historií (vpravo)	65
3.6	Závislost dalších makroskopických účinných průřezů na vyhoření získaná přímou opravou s referenčními hodnotami z HELIOSu pro různé provozní historie (vpravo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)	66
3.7	Výběr provozních historií pro určení podobnostního čísla spektrální historie při vyhoření 30 000 MWd/tu	69
3.8	Porovnání podobnostních čísel určených na základě testovacích a vybraných pro- vozních historií	70

3.9 Závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v rychlé grupě na vyhoření získaná pomocí parametrizace s referenčními hodnotami z HELIOSu pro různé provozní historie (vpravo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)	72
3.10 Závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v tepelné grupě na vyhoření získaná pomocí parametrizace s referenčními hodnotami z HELIOSu pro různé provozní historie (vpravo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)	74
3.11 Závislost makroskopických účinných průřezů pro absorpci v tepelné grupě na vyhoření získaná pomocí parametrizace s referenčními hodnotami z HELIOSu pro různé provozní historie (vpravo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)	75
3.12 Závislost dalších makroskopických účinných průřezů na vyhoření získaná přímou opravou s referenčními hodnotami z HELIOSu pro různé provozní historie (vpravo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)	76

Seznam tabulek

1.1 Provozní parametry pro nominální stav ve výpočtech palivového proutku	16
2.1 Provozní parametry pro nominální stav palivového souboru a13A	38

Seznam zdrojových kódů

1.1 Vstupní soubor pro QUADRGU	15
2.1 Zadání změny hustoty moderátoru v nástroji QUADRIGA	39
2.2 Parametizační manifest pro mikroskopické účinné průřezy v modelu aktinoidů .	52
3.1 Upravení modelu pro řetězce aktinoidů ^{235}U - ^{236}U a ^{238}U - ^{241}Pu	58
3.2 Parametizační manifest se zahrnutím spektrální historie	68
3.3 Parametizační manifest s vybranými provozními historiemi pro určení podobnosti čísla	70
B.1 Výřatek ze zdrojového kódu modelu řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu v programovacím jazyce Ruby	iv

Seznam indexů, symbolů a zkratek

Seznam indexů

- a* Absorpce neutronů
- alt* Historie se změněnými provozními parametry
- f* Štěpení neutronů
- g* Energetická grupa
- nom* Nominální provozní historie
- r* Typ reakce
- s* Rozptyl neutronů
- sh* Spektrální historie
- to_nom* Zpětný odskok na nominální stav
- + Kladná změna daného parametrů
- Záporná změna daného parametrů

Seznam symbolů

- A* Množina daných aktinoidů
- A_x* Efektivní přeměna absorpcí izotopu *x*
- B* Vyroření
- c_B* Koncentrace kyseliny borité
- C_x* Efektivní přeměna radiačním záchytem izotopu *x*
- f_{r,g}⁽ⁱ⁾* Aproximační funkce *i*-tého provozního parametru pro reakci *r* v grupě *g*
- h_{r,g}* Aproximační funkce spektrální historie pro reakci *r* v grupě *g*
- N_P* Atomová hustota přechodových štěpných produktů
- N_x* Atomová hustota izotopu *x*
- NUC* Množina daných nuklidů
- P* Výkon
- SI* Spektrální index
- Δt* Časový krok
- T_F* Teplota paliva

- T_M Teplota moderátoru
 T_V Doba pobytu paliva v reaktoru
 α Podobnostní číslo spektrální historie
 δx Relativní odchylka veličiny x
 Δx Absolutní odchylka veličiny x
 κ Energie uvolněná při jednom štěpení
 λ_x Rozpadová konstanta izotopu x
 ν Počet neutronů uvolněných při jednom štěpení
 ρ_M Hustota moderátoru
 $\sigma_{r,g}^x$ Mikroskopický účinný průřez rekace r v energetického grupě g izotopu x
 $\Sigma_{r,g}$ Makroskopický účinný průřez reakce r v grupě g
 τ Čas
 ϕ Hustota toku neutronů

Seznam zkratek

- CRAM** Chebyshevova aproximace racionálními funkcemi
ENDF/B-VII.1 Knihovna jaderných dat ve formátu ENDF (Evaluated Nuclear Data File)
hm% Hmotnostní procenta
HFP Horký výkonový stav reaktoru (Hot Full Power)
SA Samostatný palivový soubor (Single Assembly)
VVER Ruský tlakovodní reaktor (Vodo-vodjanov energetičeskij reaktor)

Úvod

Při provozu jaderných reaktorů je nutné provádět celozónové výpočty, pomocí kterých je ověřována bezpečnost a spolehlivost jaderných reaktorů. K tomuto účelu jsou využívány makrokódy, které představují matematický model charakterizující fyzikální procesy, které jsou popsány na základě jaderných dat. Při analýze chování aktivních zón reaktorů je nezbytné provádět velký počet výpočtů, jejichž výsledky musí být získány ve velice krátkém čase. Odtud plyně, že v makrokódech je nutné přistoupit k řadě zjednodušení z hlediska geometrie, energetického rozložení a výpočetních metod. Vzhledem k těmto důvodům je nutné pomocí mikrokódů připravit homogenizovaná data seskupená do malého počtu energetických grup, to znamená, že je nutné nahradit prostorově heterogenní části jaderného reaktoru homogenními daty, která jsou nezávislá na energii neutronů v dané energetické grupě. Ovšem při provozu jaderných reaktorů se hodnoty provozních parametrů pohybují v širokém rozmezí a jistě není možné připravit data pro všechny jejich kombinace. A proto se přistupuje k parametrisaci grupových konstant neboli k jejich approximaci pro různé provozní stavby na základě předem připravených dat.

Cílem výzkumného úkolu je ověřit možnost přesnější parametrisace makroskopických účinných průřezů, ve které by byla zahrnuta spektrální historie vyhořívání. Kapitola 1 se zabývá stručným popisem postupu parametrisace používaného v makrokódu ANDREA a jejím hodnocením. V programu ANDREA jsou aktinoidy pro libovolné provozní historie vyhořívání uvažovány implicitně, to znamená, že jejich atomové hustoty odpovídají nominální historii vyhořívání. Díky tomu se nabízí prostor pro zlepšení parametrisace, které spočívá v zahrnutí spektrální historie vyhořívání do opravy makroskopických účinných průřezů. Pro provedení je nezbytné dokázat predikovat atomové hustoty aktinoidů pro libovolné provozní stavby, k čemuž je využit model řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu , s jehož popisem a implementováním v programovacím jazyce Ruby seznámuje kapitola 2. Zde je taktéž testována spolehlivost modelu pro různé provozní historie a odlišné přístupy k použitým mikroskopickým účinným průřezům. Modelem predikované atomové hustoty aktinoidů jsou poté porovnány s referenčními výsledky vypočítanými HELIOSem. Kapitola 3 navrhuje opravy makroskopických účinných průřezů zohledňující vliv spektrální historie vyhořívání pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů a parametrisace s využitím atomové hustoty ^{239}Pu . Jejich spolehlivost je testována pro různé provozní historie vyhořívání a následně porovnána s referenčními výpočty získanými HELIOSem.

Kapitola 1

Parametrizace makroskopických účinných průřezů

Pro celozónové výpočty jsou grupové konstanty obvykle připravovány mikrokódy, pomocí kterých je provedena homogenizace v závislosti na geometrii, izotopickém složení a hustotě toku neutronů a taktéž kondenzace do vyžadované grupové struktury. Při výpočtech aktivních zón je nutné uvažovat grupové konstanty závislé na provozních stavech reaktoru, ve kterých se především zohledňuje vliv vyhořívání paliva, teplota paliva, teplota a hustota moderátoru, přítomnost přechodových štěpných produktů a koncentrace kyseliny borité v moderátoru. Při provozu reaktoru se výše jmenované parametry pohybují v širokém rozmezí hodnot a je zřejmé, že není prakticky možné připravit grupové konstanty pro všechny kombinace uvedených provozních parametrů [1]. Z tohoto důvodu se přistupuje k parametrizaci homogenizovaných makroskopických účinných průřezů, která bude pro makrokód ANDREA popsána v následující podkapitole.

1.1 Parametrizace v makrokódu ANDREA

Program ANDREA je nodální makrokód vyvíjený v ÚJV Řež, který slouží k výpočtu neutronově-fyzikálních charakteristik aktivních zón v difúzním přiblížení [2]. Při parametrizaci homogenizovaných makroskopických účinných průřezů jsou v ANDREe zavedeny zjednodušující předpoklady, aby bylo možné definovat aproximační funkce popisující změny makroskopických účinných průřezů v závislosti na provozních stavech. Jedná se o následující předpoklady

1. není uvažována spojitá závislost účinných průřezů na vyhoření, ale jsou počítány v jednotlivých krocích vyhoření,
2. vlivy jednotlivých provozních parametrů na účinné průřezy jsou uvažovány vzájemně nezávislé, i přestože to zcela neodpovídá realitě a ve skutečnosti se projevují efekty druhých řádů na účinné průřezy (tj. efekty způsobené současně měnícími se více provozními parametry), ovšem přínos ve zjednodušení aproximačních funkcí je o mnoho podstatnější než nepatrné zvýšení jejich přesnosti,
3. změny provozních stavů mají často okamžitý vliv jen na určité makroskopické účinné průřezy. Například změna hladiny výkonu reaktoru zvýší podíl otrav v reaktoru (především ^{135}Xe), které zejména ovlivňují absorpční makroskopický účinný průřez v tepelné grupě. Ovšem změny jakýchkoli provozních parametrů mají vliv na změnu spektra neutronů, ve kterém je reaktor provozován. Změna spektra neutronů způsobená provozní historií také není v parametrizaci uvažována [1].

Za předpokladů uvedených výše lze získat homogenizované makroskopické účinné průřezy závislé na daných provozních stavech reaktoru ve tvaru

$$\Sigma_{r,g}^{alt}(B, N_P, T_F, \rho_M, c_B) = \Sigma_{r,g}^{nom}(B) + f_{r,g}^{(1)}(B, N_P) + f_{r,g}^{(2)}(B, T_F) + f_{r,g}^{(3)}(B, \rho_M) + f_{r,g}^{(4)}(B, c_B), \quad (1.1)$$

kde

- r značí daný typ reakce,
- g označuje energetickou grupu,
- $\Sigma_{r,g}^{nom}$ představuje makroskopický účinný průřez pro r -tou reakci v g -té energetické grupě pro nominální stav při vyhoření B ,
- $f_{r,g}^{(i)}$ jsou approximační funkce pro r -tou reakci v g -té energetické grupě závislé pouze na jednom z uvažovaných provozních parametrů v daném kroku vyhoření B ,
- N_P označuje koncentraci rovnovážných nuklidů,
- T_F je teplota paliva,
- ρ_M značí hustotu moderátoru,
- c_B představuje koncentraci kyseliny borité v moderátoru.

Pro určení approximačních funkcí je nutné pomocí mikrokódu připravit homogenizované makroskopické účinné průřezy pro nominální stav s odskoky pro změny provozních parametrů v uvažovaných krocích vyhoření. Výpočet vyhoření je pak proveden pro nominální stav paliva a odskoky pro změněné provozní parametry jsou počítány na základě dalšího transportního výpočtu, aniž by se přepočítávala atomová hustota jednotlivých nuklidů, tj. není proveden další výpočet vyhoření. Obvykle je počítáno s jedním kladným a jedním záporným odskokem daného provozního parametru ve srovnání s nominálním stavem. Approximační funkce jsou pak sestrojeny zvlášť pro intervaly záporný odskok – nominální stav a kladný odskok – nominální stav.

Doposud nebyly zmíněny tvary approximačních funkcí v rovnici (1.1), a to z důvodu, že ANDREA disponuje možností jejich dynamické změny pomocí nástroje ANASTÁZIE, který pomocí metaprogramovací techniky umožňuje vytvářet parametrikační modul ANDREy. Velkou výhodou tohoto přístupu je, že typ approximační funkce pro jednotlivé provozní parametry a grupové konstanty je definován pouze na jednom místě, a to v tzv. parametrikačním manifestu. Zde je také uveden počet odskoků a hodnoty změněných parametrů, pomocí kterých jsou určovány approximační koeficienty. Na základě parametrikačního manifestu a dalších potřebných údajů pak ANASTÁZIE vytvoří parametrikační modul v ANDREe s typem parametrisace makroskopických účinných průřezů zadáným uživatelem. Pro běžně dosahovaný rozsah provozních parametrů v reaktoru je pro parametrisaci postačující použití polynomů prvního nebo druhého stupně s výjimkou parametrisace teploty paliva, pro kterou je uvažována závislost na odmocnině. Zmíněné approximační funkce pak mají následující tvar

$$\Delta x = a_1 \Delta p^2 + a_1 \Delta p, \quad (1.2)$$

$$\Delta x = a_1 \Delta p + a_2, \quad (1.3)$$

$$\Delta x = a_1 \sqrt{\Delta p} + a_2 \Delta p, \quad (1.4)$$

kde Δx představuje změnu dané grupové konstanty oproti nominálnímu stavu, Δp je rozdíl daného provozního parametru ve srovnání s nominálním stavem a a_1, a_2 jsou approximační koeficienty vypočítané na základě odskoků.

Pro určení makroskopických účinných průřezů závislých na daném provozním stavu reaktoru potřebuje ANDREA do parametrikačních schémat načíst jejich koeficienty. Ty jsou uloženy s dalšími potřebnými daty pro celozónový výpočet v aplikačních knihovnách, o jejichž generování se stará nástroj AKIKO. To znamená, že pomocí mikrokódu je proveden výpočet vyhoření pro nominální provozní stav s definovanými odskoky a následně z výstupního souboru mikrokódu připraví AKIKO aplikační knihovnu, kterou si při výpočtu načte ANDREA [1].

1.2 Výpočet provozních stavů mikrokódem HELIOS

Homogenizované grupové konstanty pro jednotlivé provozní stavy budou získávány na základě výpočtu v mikrokódu HELIOS verze 2.1.4, pomocí něhož se standardně připravují aplikační knihovny pro makrokód ANDREA. HELIOS je deterministický 2-D transportní kód, pomocí kterého lze počítat charakteristiky palivových mříží v závislosti na vyhoření. Tvorba vstupního souboru pro HELIOS je složitá a při ruční přípravě i zdlouhavá, a to především z důvodu dynamicky se měnící koncentrace kyseliny borité a teploty paliva během vyhořívání, a také díky nutnosti definování velkého počtu kroků během vyhořívání. Z tohoto důvodu byl pro tvorbu vstupních souborů HELIOSu použit nástroj QUADRIGA, který vytváří vstupní soubory na základě předdefinovaných šablon a taktéž zajišťuje všechny potřebné geometrické a fyzikální modely. Díky programu QUADRIGA se vytváření vstupních souborů pro HELIOS zcela automatizuje, a tedy uživatel se nedostane do přímého kontaktu s HELIOSem [2], [3].

Ukázka vstupního souboru pro QUADRGU je vypsána ve zdrojovém kódu 1.1, ve kterém je definován výpočet vyhoření pro jeden palivový proutek reaktoru VVER-1000 s obohacením 4 hm%, který je uvažován v nekonečně hexagonální mříži. Je zde nastavena homogenizace přes celou uvažovanou geometrii s kondenzací do dvou energických grup pomocí parametru NumberOfGroups. Přepínač Buckling umožňuje korekci na kritické spektrum a je používán, aby bylo dosaženo podmínek odpovídajících provozu reaktoru v kritickém stavu. Název provozního stavu se nastaví pomocí StateName a pomocí parametru BurnupList jsou nastaveny kroky vyhoření, které se zadávají v jednotkách MWd/t_U. Lomítko umožňuje rozdělení daného kroku vyhoření na více kroků s daným počtem podkroků. Provozní parametry uvedené ve zdrojovém kódu 1.1 odpovídají horkému výkonovému stavu reaktoru na 100 % nominálního výkonu. Teploty paliva během vyhořívání QUADRIGA určuje na základě teplotního modelu, ve kterém je teplota paliva počítána pomocí polynomiální funkce závislé na výkonu a vyhoření. Teplota moderátoru, při které je počítána teplota paliva, se ve vstupním souboru definuje pomocí parametru FuelReferenceTemperature. Odskoky pro jednotlivé hodnoty provozních parametrů se nastavují pomocí přepínače branches. V ukázkovém vstupním souboru pro QUADRGU 1.1 je definován odskok HFP-POW050 na výkonovou hladinu 50 % nominálního výkonu [4].

```
run:
  code: helios
  fuel: vver-1000/loetsch/40PIN
  parameters:
    NumberOfGroups: 2
    Buckling: 0
    StateName: HFP-REF
    BurnupList: 0.005,150/3,500/3,1000/3,4000/3,12000/4,60000/24
    Power: 42.5
    ModeratorPressure: 15.7
    ModeratorBoron: 3.0
    ModeratorTemperature: 304.85
    FuelReferenceTemperature: 304.85
  branches:
    HFP-POW050:
      Power: "%Power%*0.50"
  version: HEAD
```

Zdrojový kód 1.1: Vstupní soubor pro QUADRGU

1.3 Hodnocení spolehlivosti parametrizace v ANDREe

Podoba parametrizace uvedená ve vztahu (1.1) zohledňuje pouze okamžitý vliv provozních stavů reaktoru na makroskopické účinné průřezy, ale nezohledňuje vliv provozní historie na účinné průřezy. Tedy není započítáno to, že odlišné provozní podmínky vedou ke změně energetického spektra neutronů, ve kterém je reaktor provozován, čímž také dochází ke změně izotopického

složení paliva. V parametrisaci taktéž nejsou zahrnuty účinky společných vlivů, které jsou způsobeny při současné změně dvou provozních parametrů, které spolu souvisí, tj. například při změně teploty paliva se současně mění hustota moderátoru. Z tohoto důvodu bude zkoumáno, jaký vliv mají provedená zanedbání při parametrisaci na makroskopické účinné průřezы.

Kvalita parametrisace makroskopických účinných průřezů v ANDREe byla zkoumána na příkladu jednoho palivového proutku reaktoru VVER-1000 s obohacením 4 hm%. Parametry nominálního provozního stavu byly voleny podle tabulky 1.1, které odpovídají horkému výkonovému stavu reaktoru na 100 % nominálního výkonu s koncentrací kyseliny borité 3 g/kg a byly definovány stejné kroky vyhoření jako v ukázkovém zdrojovém kódu 1.1. Nejprve byl proveden dvoudimenzionální výpočet vyhoření v nekonečné hexagonální mříži pro nominální stav s potřebnými odskoky pro parametrisaci v HELIOSu a pomocí nástroje AKIKO byla připravena aplikacní knihovna, se kterou byl spuštěn výpočet vyhoření v ANDREe pro různé provozní stavy, při kterém bylo iterováno na koeficient násobení. Z výstupního souboru ANDREy pak byly pro jednotlivé provozní stavy získány makroskopické účinné průřezы, které byly ANDREou určeny na základě parametrisace. Pro hodnocení parametrisace byly vybrány makroskopické účinné průřezы pro absorpci a štěpení v tepelné a rychlé grupě, které byly analyzovány pro provozní stavy se změnou výkonu, hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité. Všechny níže uvedené změny byly vůči nominálnímu stavu, jehož parametry uvádí tabulka 1.1.

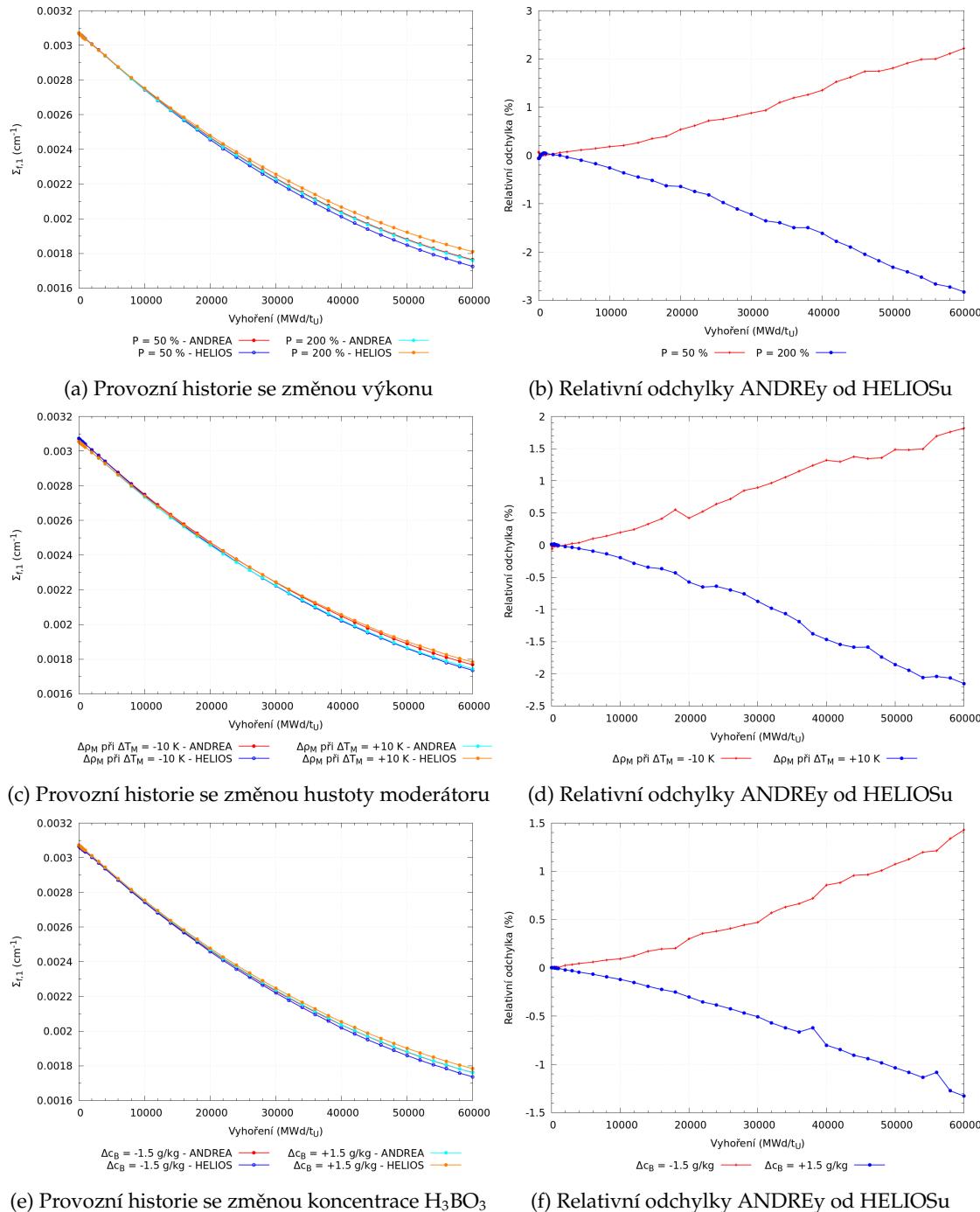
Tabulka 1.1: Provozní parametry pro nominální stav ve výpočtech palivového proutku

Parametr	Hodnota
Výkon [W/g]	42,5
Tlak moderátoru [MPa]	15,7
Koncentrace kyseliny borité [g/kg]	3,0
Teplota moderátoru [°C]	304,85
Hustota moderátoru [g/cm ³]	0,716672

Na obrázku 1.1 je zobrazena závislost makroskopického účinného průřezu pro štěpení v rychlé grupě na vyhoření. Odtud je patrné, že pro všechny uvažované provozní historie je na počátku vyhořívání dosažena mezi hodnotami z ANDREy a HELIOSu velmi dobrá shoda, ale se zvyšujícím se vyhořením výrazně roste jejich rozdíl. Obrázek 1.1a ukazuje závislost makroskopického účinného průřezu pro štěpení v rychlé grupě na vyhoření z ANDREy a referenčního výpočtu v HELIOSu pro obě uvažované výkonové hladiny. Odtud je patrné, že na počátku vyhořívání je dosažena mezi hodnotami z ANDREy a HELIOSu velmi dobrá shoda, ale se zvyšujícím se vyhořením výrazně roste jejich rozdíl. Na obrázku 1.1b jsou zobrazeny relativní odchylky hodnot z ANDREy pro výkonové hladiny 50 % a 200 % vzhledem k referenčním výsledkům z HELIOSu, přičemž pro výkon 50 % ANDREA hodnoty účinného průřezu nadhodnocuje a při maximálním vyhoření dosahuje rozdíl přibližně 2,2 % oproti HELIOSu. Naopak pro výkon 200 % je účinný průřez v ANDREe podhodnocen a je dosaženo nejvyššího rozdílu asi –2,8 % během uvažovaného vyhořívání. Pro provozní historie se změnou hustoty moderátoru jsou výsledky výpočtu z ANDREy a HELIOSu vykresleny na obrázku 1.1c a jejich relativní odchylky pak zobrazuje obrázek 1.1d, ze kterého je patrné, že s rostoucím vyhořením se zvyšuje nepřesnost použitých účinných průřezů ve srovnání s referenčními hodnotami z HELIOSu. Při maximálním vyhoření pak rozdíl mezi ANDREou a HELIOSem pro kladnou i zápornou změnu dosahuje absolutně přibližně 2 %. Obrázek 1.1f ukazuje, že i pro provozní historie se změnou koncentrace kyseliny borité lze sledovat při vyšším vyhoření horší spolehlivost parametrisace v ANDREe.

Taktéž pro závislosti makroskopických účinných průřezů pro štěpení v tepelné grupě na vyhoření, které jsou zobrazeny na obrázku 1.2, lze pozorovat výrazné rozdíly mezi hodnotami získanými z parametrisace v ANDREe a referenčním výsledkem z HELIOSu při vyšších vyhořeních. Z obrázku 1.2b, 1.2d a 1.2f je zřejmé, že spolehlivost parametrisace je pro makroskopický účinný průřez pro štěpení v tepelné grupě nižší než v případě rychlé grupy. Pro výkonové hladiny 50 %, resp. 200 % je během uvažovaného vyhořívání dosaženo maximální rozdílu 3,4 %, resp. –4,6 % pro výkon 200 % mezi ANDREou a HELIOSem. Obrázek 1.2d ukazuje, že v případě historií se změnou hustoty moderátoru ANDREA podhodnocuje hodnoty účinného průřezu pro kladnou

změnu hustoty moderátoru a naopak pro zápornou změnu hustoty jsou hodnoty nadhodnoceny. Při maximálním vyhoření jsou relativní odchyly ANDREy od HELIOSu 3,1 % pro zápornou změnu hustoty a -3,4 % pro kladnou změnu. I pro případ historie se změnou koncentrace kyseliny borité klesá spolehlivost parametrisace v ANDREe s roustoucím vyhořením, což je patrné z obrázku 1.2f. Při maximálním vyhoření je dosaženo relativních odchylek 2,2 % pro zápornou změnu koncentrace kyseliny borité a v případě kladné změny -2,1 %.

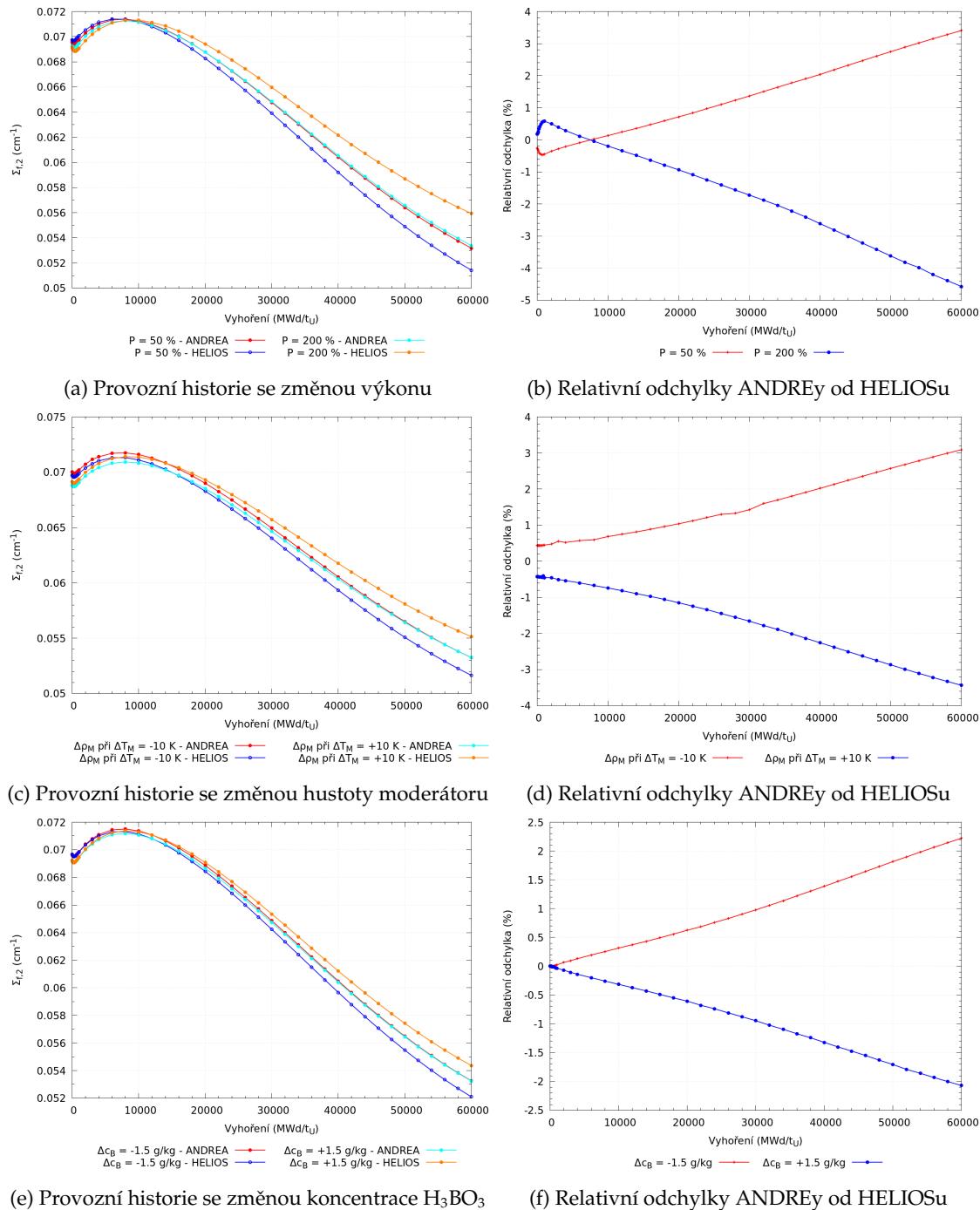


Obrázek 1.1: Závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v rychlé grupě na vyhoření použitých při výpočtu v ANDREe s referenčními hodnotami z HELIOSu pro uvažované provozní historie (vlevo) a relativní odchyly ANDREy od HELIOSu (vpravo)

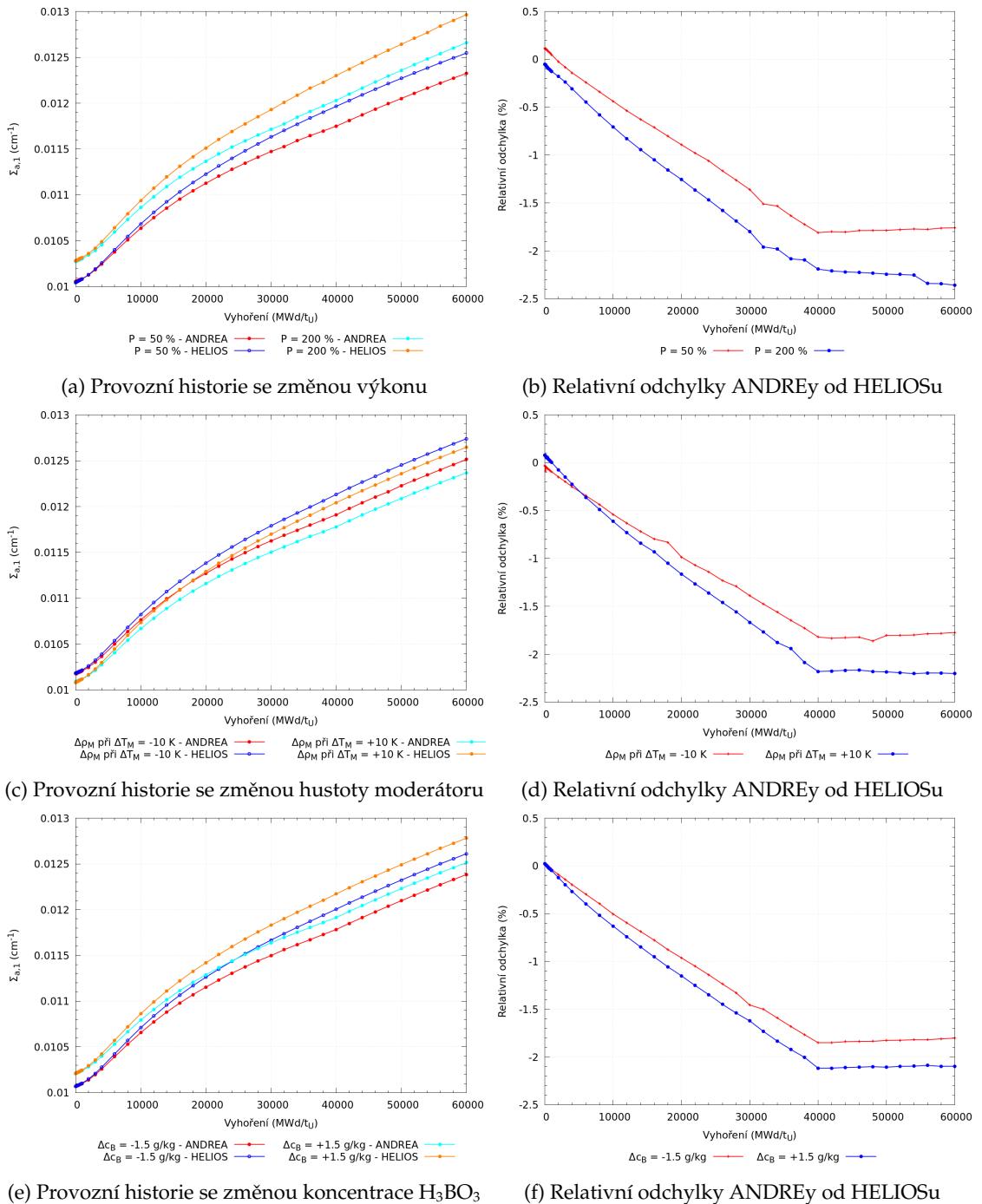
Porovnání absorpčních makroskopických účinných průřezů v rychlé grupě pro uvažované provozní historie je zobrazeno na obrázku 1.3. Na obrázcích 1.3b, 1.3d a 1.3f lze pozorovat, že makroskopické účinné průřezy pro absorpci v rychlé grupě v závislosti na vyhoření vykazují znatelné rozdíly mezi hodnotami z parametrisace v ANDREe a referenčním výsledkem z HELIOSu. Taktéž je možné pozorovat jiný charakter relativních odchylek ve srovnání s předchozími účinnými průřezy. Opět je patrné, že na počátku vyhořívání vykazuje parametrisace v ANDREe dobrou shodu s referenčním výsledkem, ale se zvyšujícím se vyhořením roste relativní odchylka od referenčního výsledku. Konkrétní hodnoty relativních odchylek ANDREy od HELIOSu pak při maximálním vyhoření dosahují přibližně $-1,8\%$ pro výkon 50 % a $-2,4\%$ pro výkon 200 %, $-1,8\%$ pro zápornou změnu hustoty moderátoru a $-2,2\%$ pro kladnou změnu, $-1,8\%$ pro zápornou změnu koncentrace kyseliny borité a $-2,1\%$ pro kladnou změnu.

Posledním analyzovaným byl makroskopický účinný průřez pro absorpci v tepelné grupě, jehož závislost na vyhoření je vykreslena na obrázku 1.4. Obrázek 1.4b ukazuje, že v prvních krocích vyhoření parametrisace v ANDREe hodnoty účinného průřezu pro výkonovou hladinu 50 % podhodnocuje ve srovnání s HELIOSem a při dalším zvyšování vyhoření naopak nadhodnocuje, přičemž nejvyšší hodnota relativní odchylky při maximálním vyhoření dosahuje hodnoty přibližně $-2,2\%$. Naopak pro výkonovou hladinu 200 % vykazují relativní odchylky ANDREy od HELIOSu opačný průběh než v případě výkonu 50 %, tj. v prvních krocích vyhoření parametrisace v ANDREe nadhodnocuje absorpční účinný průřez v tepelné grupě a se zvyšujícím vyhořením jsou jeho hodnoty podhodnoceny. Nejvyšší hodnota relativní odchylky je dosažena při maximálním vyhoření, a to přibližně $-3,4\%$. Pro provozní historie se změnami hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité není na počátku vyhořívání pozorována změna monotónnosti relativní odchylky, ale v obou případech se zvyšujícím se vyhořením pouze roste. Při maximálním uvažovaném vyhoření je dosaženo přibližně hodnoty $2,3\%$ pro zápornou změnu hustoty moderátoru a $-2,7\%$ pro kladnou změnu, $1,6\%$ pro zápornou změnu koncentrace kyseliny borité a $-1,5\%$ pro kladnou změnu.

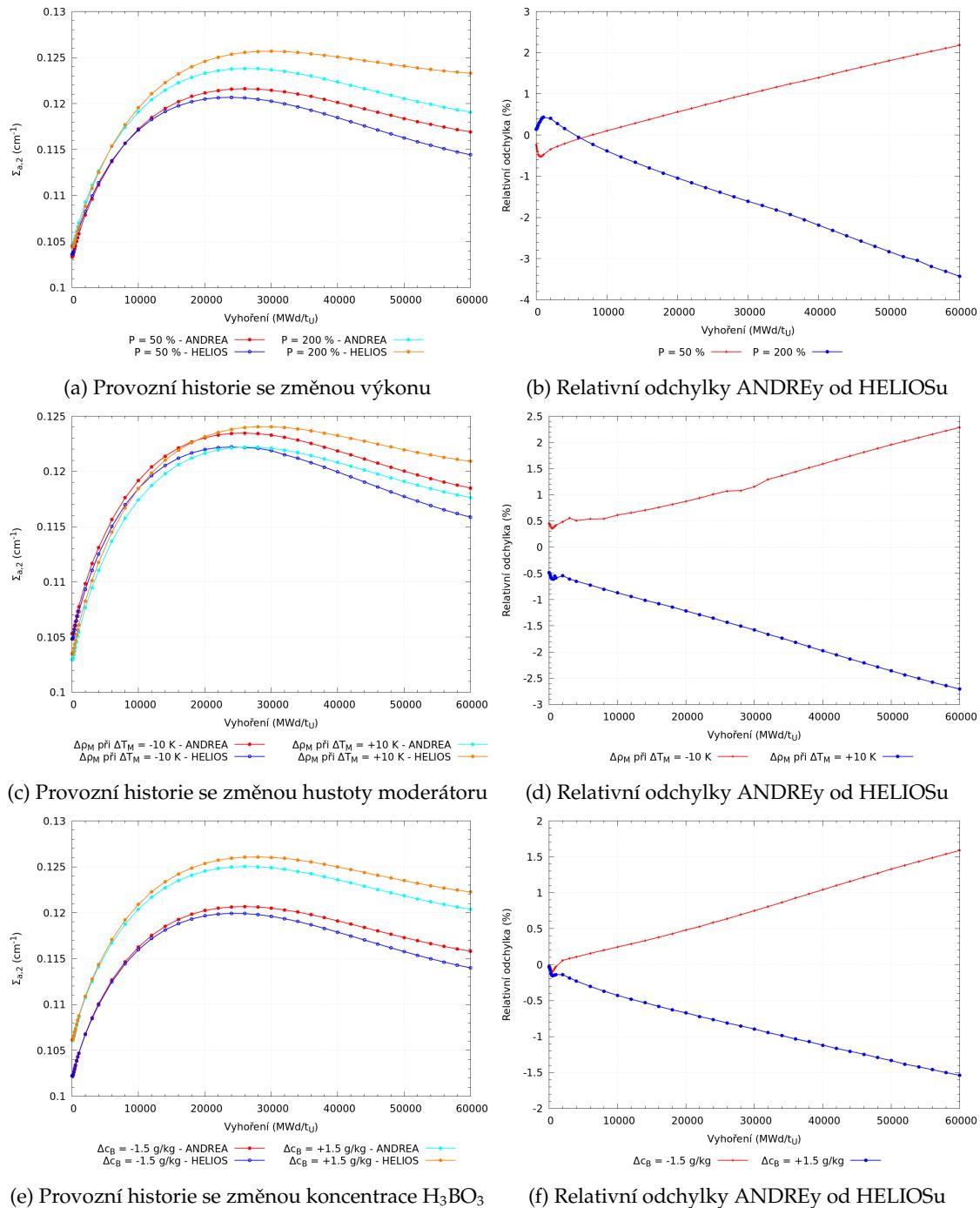
Z provedeného hodnocení je patrné, že s rostoucím vyhořením se zhoršuje spolehlivost parametrisace makroskopických účinných průřezů v ANDREe pro analyzované provozní stavy. Tento fakt napovídá tomu, že zanedbání vlivu provozní historie na účinné průřezy snižuje spolehlivost parametrisace, neboť s rostoucím vyhořením se více odlišuje izotopické složení paliva díky spektrálním změnám způsobených odlišnými provozními podmínkami, při kterých probíhalo vyhořívání. Před navrhnutím řešení, které by mohlo zohlednit vliv provozní historie při parametrisaci makroskopických účinných průřezů, bude nutné ověřit, zdali její zanedbání je opravdu jednou z příčin v odchylkách parametrisace od referenčního výsledku.



Obrázek 1.2: Závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v tepelné grupě na vyhoření použitych při výpočtu v ANDREe s referenčními hodnotami z HELIOSu pro uvažované provozní historie (vlevo) a relativní odchylky ANDREy od HELIOSu (vpravo)



Obrázek 1.3: Závislost makroskopických účinných průřezů pro absorpcí v rychlé grupě na vyhoření použitých při výpočtu v ANDREe s referenčními hodnotami z HELIOSu pro uvažované provozní historie (vlevo) a relativní odchylky ANDREy od HELIOSu (vpravo)



Obrázek 1.4: Závislost makroskopických účinných průřezů pro absorpcí v tepelné grupě na vyhorení použitych při výpočtu v ANDREE s referenčními hodnotami z HELIOSu pro uvažované provozní historie (vlevo) a relativní odchylky ANDREy od HELIOSu (vpravo)

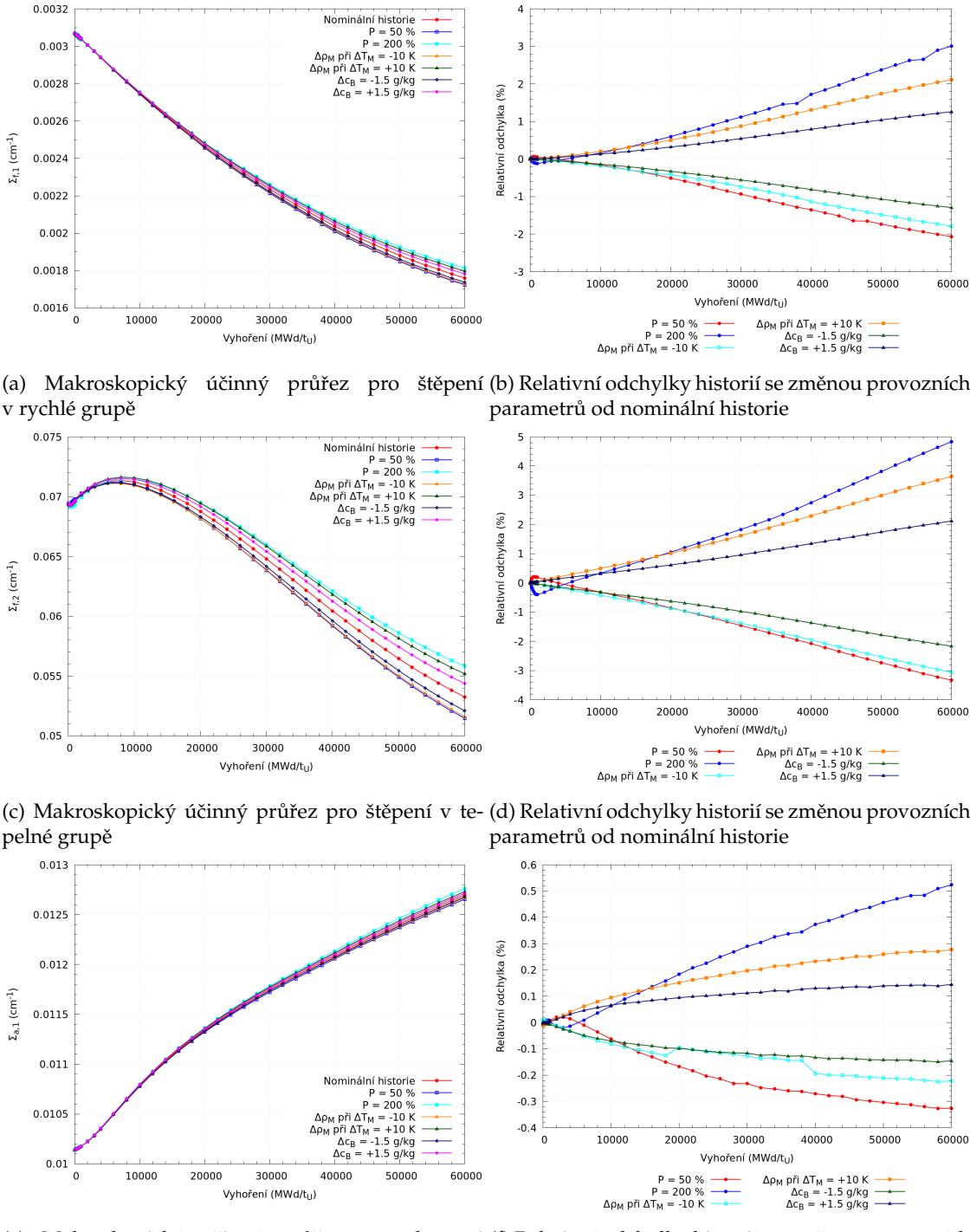
1.4 Vliv provozní historie na grupové konstanty

Ověření toho, že zanedbání provozní historie způsobuje nepřesnosti v parametrisaci, bude provedeno pomocí separátních výpočtů v HELIOSu pro jednotlivé historie se změnou provozních parametrů oproti nominální provozní historii. Aby bylo možné ocenit pouze vliv provozní historie, byly v každém výpočtu definovány odskoky na nominální stav. Tím bylo zajištěno, že všechny provozní parametry, tj. teplota paliva, teplota a hustota moderátoru aj., byly shodné s nominálním stavem a pouze izotopické složení odpovídalo změněnému provoznímu stavu. Z provozních historií byly analyzovány historie se změnou výkonu, hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité oproti nominální provozní historii s parametry uvedenými v tabulce 1.1.

Na obrázcích 1.5a a 1.5c jsou zobrazeny průběhy makroskopických účinných průřezů pro štěpení v tepelné a rychlé grupě. Odtud lze pozorovat, že odlišné provozní historie se výrazně projevují na hodnotách účinných průřezů pro štěpení v obou grupách. To znamená, že odlišné provozní stavy, při kterých je reaktor provozován, nemají pouze okamžitý vliv na makroskopické účinné průřezy, ale mají na ně také vliv v podobě provozní historie. Navíc z obrázku 1.5b je patrné, že s rostoucím vyhořením nabývá rozdíl účinného průřezu od nominální historie pro historie se zápornými změnami provozních parametrů záporných hodnot a naopak pro historie s kladnými změnami parametrů kladných hodnot. Při porovnání s obrázkem 1.1 si lze všimnout přesně opačného vlivu, že s rostoucím vyhořením parametrisace v ANDREe oproti referenčnímu výsledku hodnoty účinného průřezu pro štěpení v rychlé grupě pro provozní stavy se zápornými změnami parametrů nadhodnocuje a naopak pro kladné změny provozních parametrů pohodnocuje. Díky tomuto pozorování lze skutečně říci, že zanedbání spektrální historie v parametrisaci má vliv na odchylinky od referenčních hodnot, a to z důvodu, že v parametrisaci je použita spektrální historie související s nominálním stavem místo toho, aby byla použita spektrální historie pro konkrétní provozní stav. Tomu i velice dobře odpovídají hodnoty rozdílů účinných průřezů mezi parametrisací v ANDREe a referenčním výsledkem a rozdíly mezi danou provozní historií a nominální historií. Stejný efekt lze pozorovat i pro makroskopický účinný průřez pro štěpení v tepelný grupě, který je patrný při porovnání obrázků 1.2 a 1.5d.

Z obrázku 1.5e je zřejmé, že při srovnání s předchozími účinnými průřezy se vliv provozní historie projevuje méně až téměř zanedbatelně na makroskopických účinných průřezech pro absorpci v rychlé grupě. To je způsobeno tím, že většinová absorpcie se odehrává na hlavních aktinoidech a jejich mikroskopický účinný průřez pro absorpci v rychlé grupě nabývá malých hodnot, například pro ^{235}U přibližně 12 b a pro ^{239}Pu 14 b [5]. Při maximálním uvažovaném vyhoření dosahoval rozdíl provozních stavů se změnami parametrů oproti nominálnímu stavu nejvýše 0,5 %. Navíc při porovnání obrázků 1.3 a 1.5f je zřejmé, že zahrnutí vlivu provozní historie do parametrisace makroskopických účinných průřezů pro absorpci v rychlé grupě nebude mít pravděpodobně velký efekt na její zpřesnění. Naopak obrázek 1.6a ukazuje, že vliv provozní historie se výrazně projevuje na makroskopickém účinném průřezu pro absorpci v tepelné grupě. Na obrázku 1.6b jsou zobrazeny relativní odchylinky historií se změnou provozních stavů od nominální provozní historie. Při porovnání obrázků 1.4 a 1.6b lze opět sledovat, že rozdíl parametrisace v ANDREe oproti referenčnímu výsledku vykazuje přesně opačný vliv než rozdíly provozních stavů se změnou provozních parametrů oproti nominálnímu stavu. Z toho plyne, že zanedbání provozní historie má vliv i na přesnost parametrisace makroskopických účinných průřezů pro absorpci v tepelné grupě.

Z dalších grupových konstant byl sledován vliv provozní historie na makroskopické účinné průřezy pro energii uvolněnou ze štěpení v obou grupách, pro které jsou výsledky z výpočtu v HELIOSu zobrazeny na obrázcích 1.6c a 1.6e. Odtud je patrné, že nelze zanedbat vliv provozní historie na účinných průřezech pro energii uvolněnou ze štěpení v tepelné i rychlé grupě. Relativní odchylinky analyzovaných provozních historií od nominální provozní historie jsou zobrazeny na obrázcích 1.6d a 1.6f. Odtud plyne, že při stejném vyhoření a stejných okamžitých provozních parametrech se hodnoty účinných průřezů liší v závislosti na tom, při jakých provozních podmínkách bylo realizováno vyhořívání. To znamená, že zanedbání provozní historie způsobuje nepřesnosti i při parametrisaci makroskopických účinných průřezů pro energii uvolněnou ze štěpení v tepelné i rychlé grupě.

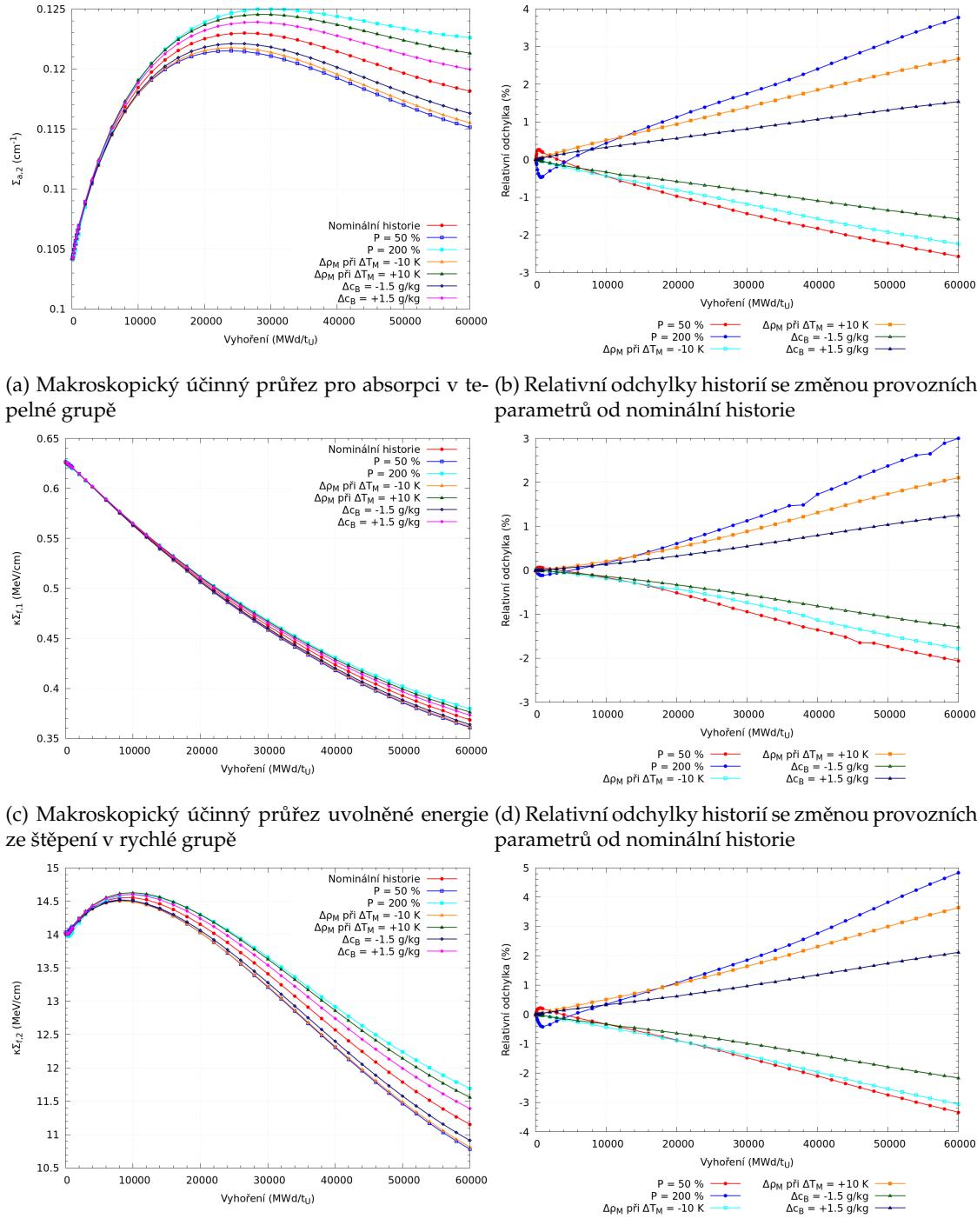


Obrázek 1.5: Závislost grupových konstant na vyhoření (vlevo) a jejich relativní odchyly pro historie se změnou provozních parametrů od nominální historie (vpravo)

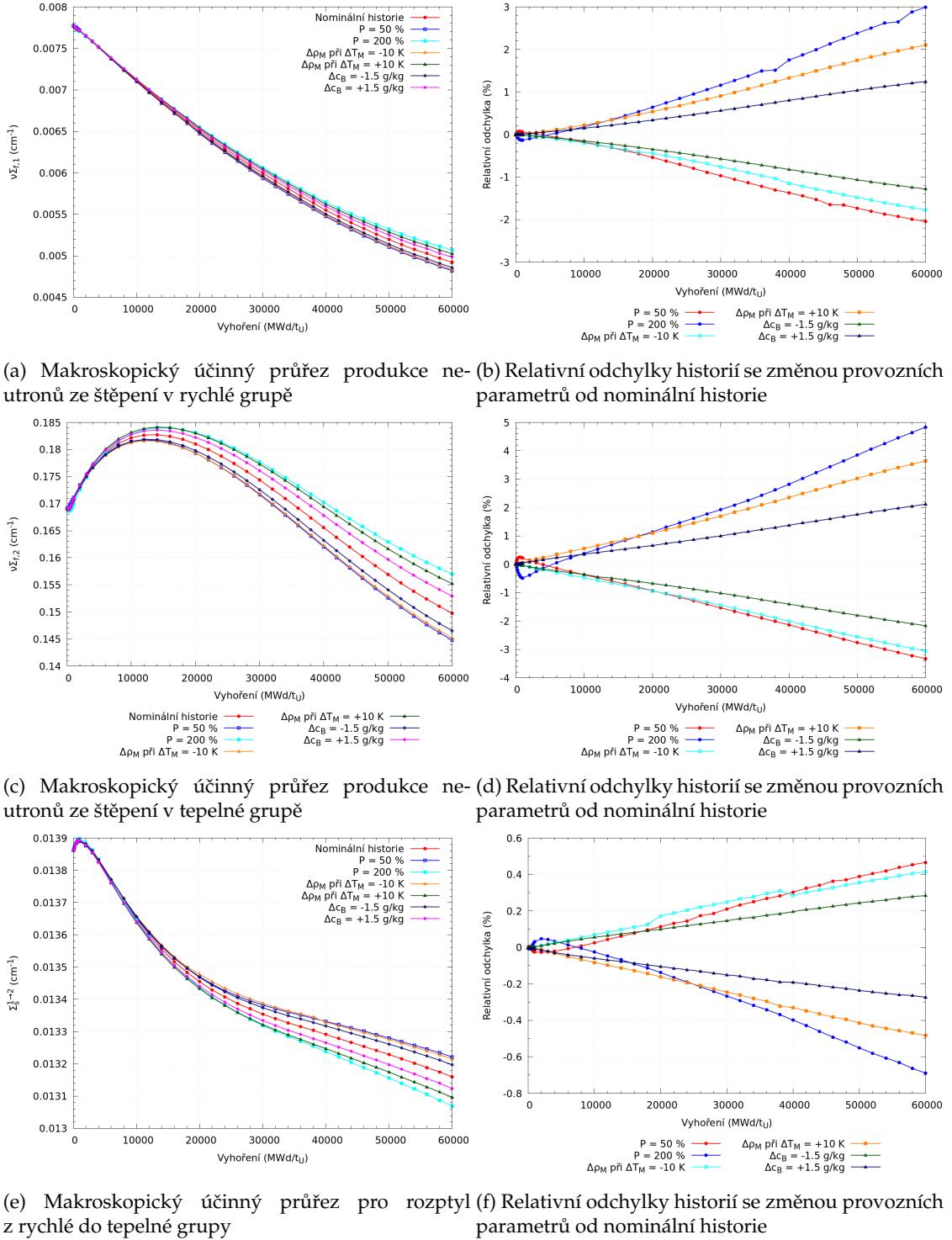
Vliv provozní historie se také projevil na makroskopických účinných průřezech produkce neutronů ze štěpení, což je patrné z obrázků 1.7a a 1.7c. Obrázky 1.7b a 1.7d opět ukazují, že při stejných provozních parametrech (teplota paliva, teplota moderátoru atd.) v daném kroku vyhoření se účinné průřezy liší v závislosti na tom, při jakých provozních parametrech probíhalo vyhořívání. To opět ukazuje na to, že vliv provozní historie nelze zanedbat v parametrisaci makroskopických účinných průřezů produkce neutronů ze štěpení v obou energetických grupách, bez toho aniž by parametrisace poskytovala nepřesné výsledky.

Dále byl zkoumán vliv provozní historie na makroskopické účinné průřezy pro rozptyl z rychlé do tepelné grupy a z tepelné do rychlé grupy, jejichž průběhy jsou vykresleny na obrázcích 1.7e a 1.8a. Provozní historie se v malé míře projevuje na účinný průřez pro rozptyl z rychlé do tepelné grupy a teprve při vyšším vyhoření je pozorovatelný rozdíl v řádu desetin procent, což je patrné z obrázku 1.7f. Závislost makroskopických účinných průřezů pro rozptyl z tepelné do rychlé grupy je zobrazen na obrázku 1.8a, ze kterého je zřejmé, že se sice provozní historie na jeho hodnotách projevuje, ale absolutní rozdíl mezi jednotlivými provozními historiemi a nominální provozní historií je pouze na úrovni 10^{-4} .

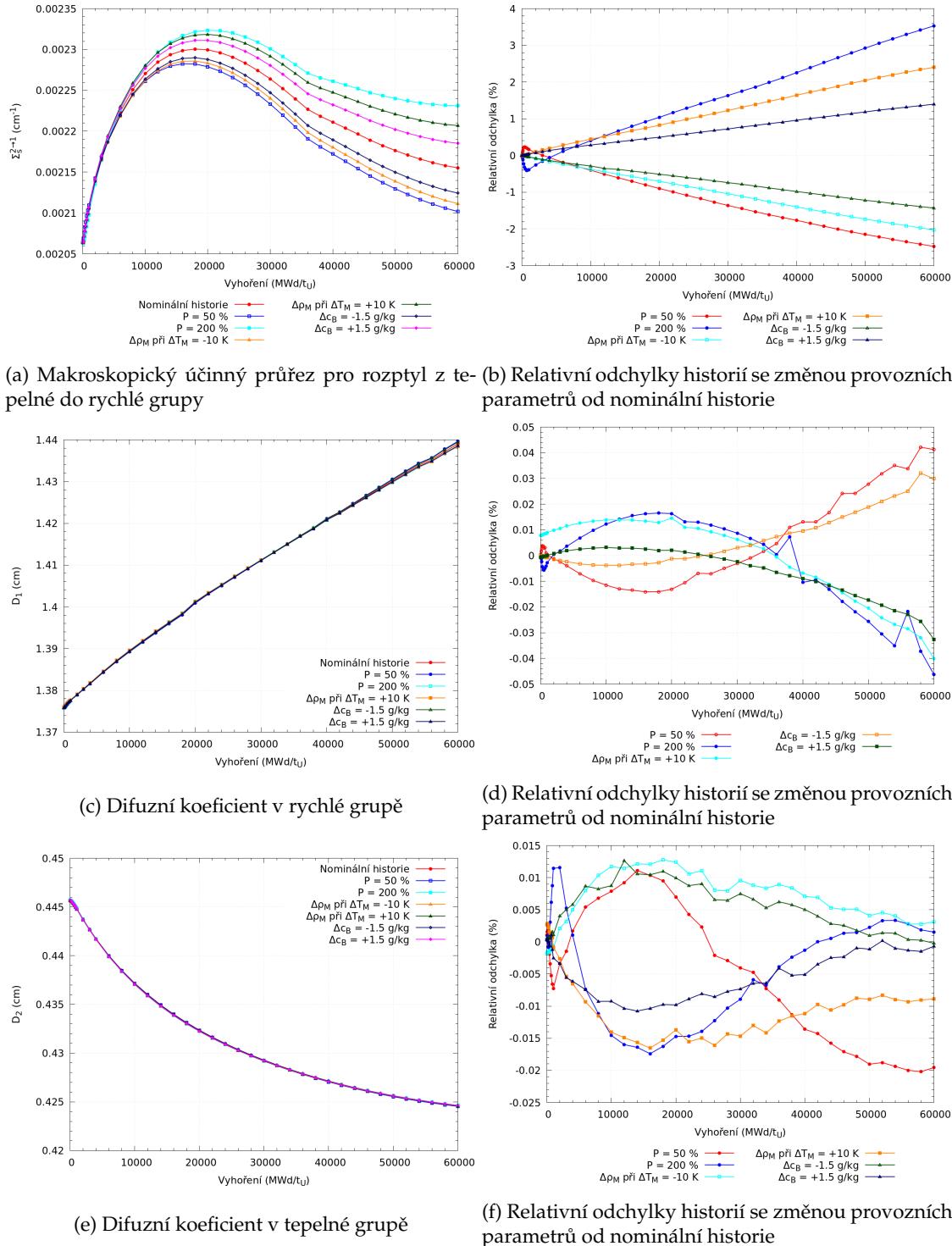
Obrázky 1.8c a 1.8e ukazují, že téměř žádný nebo pouze zanedbatelný vliv má provozní historie na difuzní koeficienty v tepelné a rychlé grupě. Z obrázku 1.8d je patrné, že v případě difuzního koeficientu v rychlé grupě je rozdíl mezi provozními historiemi se změnami parametrů a nominální historií na úrovni setin procent a v případě difuzního koeficientu pro tepelnou grupu je rozdíl na velice podobné úrovni, což je patrné z obrázku 1.8f. To znamená, že není nutné uvažovat vliv provozní historie na difuzní koeficienty.



Obrázek 1.6: Závislost grupových konstant na vyhoření (vlevo) a jejich relativní odchylky pro historie se změnou provozních parametrů od nominální historie (vpravo)



Obrázek 1.7: Závislost grupových konstant na vyhoření (vlevo) a jejich relativní odchyly pro historie se změnou provozních parametrů od nominální historie (vpravo)



Obrázek 1.8: Závislost grupových konstant na vyhoření (vlevo) a jejich relativní odchylky pro historie se změnou provozních parametrů od nominální historie (vpravo)

1.5 Vliv provozní historie na spektrum neutronů

Z předchozí podkapitoly vyplynulo, že se provozní historie výrazně projevovaly na analyzovaných makroskopických účinných průřezech. Bylo možné pozorovat, že při stejných provozních parametrech (teplota paliva, hustota moderátoru apod.) v daném kroku vyhoření se účinné průřezy liší v závislosti na tom, při jakých provozních parametrech probíhalo vyhořívání. To znamená, že změny provozních parametrů nezpůsobují pouze okamžitý vliv na účinné průřezy, ale projeví se i v podobě provozní historie. Aby bylo možné zohlednit provozní historii v parametrisaci, nejprve bude sledováno, jakým způsobem se změny provozních stavů projevují na energetickém spektru neutronů.

Energetické spektrum neutronů je definováno jako energetická distribuce neutronů v závislosti na jejich kinetické energii. Zvyšování podílu rychlých neutronů ve spektru je označováno jako tvrdnutí spektra. Tomu také odpovídá zvyšování průměrné energie neutronů. Naopak snižování podílu rychlých neutronů ve spektru je označováno jako měknutí spektra. V následujícím textu bude zkoumán vliv provozních stavů reaktoru na změnu energetického spektra neutronů, s jehož změnou jsou očekávány i změny izotopického složení paliva [5].

Změna hustoty moderátoru

V aktivních zónách lehkovodních tlakovodních reaktorů lze pozorovat výraznou prostorovou teplotní závislost chladiva. Při normálním provozu reaktoru chladivo proudí směrem nahoru aktivní zónou a zvyšuje se jeho teplota v důsledku odebírání tepla z palivových proutků. V lehkovodních reaktorech plní chladivo také funkci moderátoru a s rostoucí teplotou dochází k poklesu jeho hustoty. Při nižší hustotě moderátoru se snižuje účinnost moderace neutronů, a tím dochází ke zvyšování podílu rychlých neutronů, a tedy i k tvrdnutí spektra neutronů [5], [6].

Z hlediska změn izotopického složení paliva dochází při snížené hustotě moderátoru k vyššímu radiačnímu záchytu na izotopu ^{238}U a následnými dvěma β^- rozpady ke vzniku ^{239}Pu . Odtud tedy plyne, že tvrdnutí spektra neutronů způsobuje vyšší produkci ^{239}Pu . Zároveň při vyšší atomové hustotě ^{239}Pu dochází k vyššímu počtu štěpení, a tím i k většímu množství uvolněné energie. Jelikož vyhoření je definované jako celkové množství energie uvolněné z paliva, tak při stejném vyhoření budou provozní historie se změnou hustoty moderátoru vykazovat rozdílné atomové hustoty štěpných nuklidů ve srovnání s nominální provozní historií při stejných okamžitých provozních podmínkách [5].

Změna teploty paliva

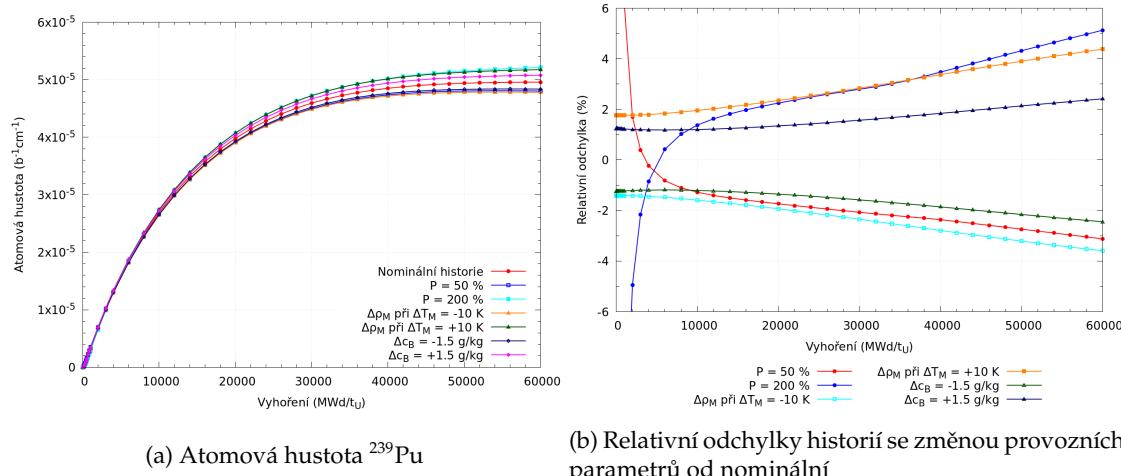
Taktéž změny teploty paliva se projeví na energetickém spektru neutronů, a to v důsledku působení Dopplerova efektu. Při zvýšení teploty paliva dojde k rozšíření rezonancí díky tepelnému pohybu jader, ale celková plocha pod rezonancí se nemění. Zároveň dochází k snižování maximální hodnoty absorpčního účinného průřezu v dané oblasti, čímž je způsobeno zvýšování hustoty toku neutronů, což vede na zvýšení resonanční absorpce neutronů. S rostoucí teplotou paliva klesá díky Dopplerovu efektu pravděpodobnost, že neutron unikne rezonančnímu záchytu, a díky tomu dochází k tvrdnutí spektra neutronů. Zároveň zvýšení resonanční absorpce na ^{238}U vede ke zvýšení atomové hustoty ^{239}Pu a opět budou při stejném vyhoření rozdílné atomové hustoty štěpných produktů, což plyne z výše uvedené definice vyhoření [7].

Změna koncentrace kyseliny borité

V celé aktivní zóně tlakovodních reaktorů je využívána kyselina boritá ke kompenzaci zásoby reaktivity. Dominantním absorbátorem tepelných neutronů v kyselině borité je izotop ^{10}B , který disponuje vysokým mikroskopickým účinným průřezem pro absorpci tepelných neutronů, a to přibližně hodnotou 3800 b. Při provozu reaktoru s vyšší koncentrací kyseliny borité dochází k vyšší

absorpci tepelných neutronů a tím se zvyšuje podíl rychlých neutronů v energetickém spektru. To znamená, že vyšší koncentrace kyseliny borité způsobuje tvrdnutí energetického spektra neutronů. Díky tomu je způsoben vyšší radiační záchyt na izotopu ^{238}U a následná vyšší produkce ^{239}Pu [3].

Z předchozího textu je patrné, že díky změnám provozních parametrů dochází ke změně energetického spektra neutronů, které poté zapříčinuje odlišné izotopické složení paliva. Vliv provozních historií lze především pozorovat na reakční rychlosť pro radiační záchyt neutronů na ^{238}U a následném vzniku ^{239}Pu . Na obrázku 1.9 jsou zobrazeny závislosti atomových hustot ^{239}Pu na vyhoření pro analyzované provozní historie. Odtud je patrné, že s rostoucím vyhořením se zvyšuje rozdíl atomové hustoty ^{239}Pu mezi historiemi se změnou provozních parametrů vůči nominální provozní historii. Relativní odchyly atomové hustoty ^{239}Pu jednotlivých historií od nominální historie pak ukazuje obrázek 1.9b.



Obrázek 1.9: Závislost atomových hustot ^{239}Pu na vyhoření (vpravo) a relativní odchyly atomové hustoty ^{239}Pu pro historie se změnou provozních parametrů od nominální historie (vpravo)

1.6 Indikace spektrální historie pomocí ^{239}Pu

Z dosud popsaných výsledků se ukázalo, že při výpočtech vyhoření jsou makroskopické účinné průřezy významně závislé na provozní historii, se kterou se mění energetické spektrum neutronů, a tím i izotopické složení paliva. Dále se ukázalo, že atomová hustota ^{239}Pu je citlivá na změny provozní historie, a tedy i na změny energetického spektra neutronů. Zde se nabízí možnost, zdali by nebylo možné využít ^{239}Pu jako indikátor spektrálních změn zapříčiněných změnami v provozní historii a dále ho využít k zohlednění spektrální historie v parametrizaci makroskopických účinných průřezů.

Aby bylo možné zjistit, zdali lze najít určitou úměrnost mezi změnami účinných průřezů a změnou atomové hustoty ^{239}Pu , byly historie se změnou provozních parametrů srovnány s nominální provozní historií. Opět byl pro uvažované provozní stavy se změnou parametrů proveden separátní výpočet v HELIOSu, ve kterém byl definován odskok na nominální stav. Tím bylo zajištěno, že vyhořívání probíhalo za odlišných provozních podmínek, ale aktuální teploty paliva, hustoty moderátoru a ostatní byly shodné s nominálním stavem. Následně byly vypočítány změny účinných průřezů mezi historií se změnou parametrů a nominální historií ve tvaru

$$\delta\Sigma_{r,g} = \frac{\Sigma_{r,g}^{alt} - \Sigma_{r,g}^{nom}}{\Sigma_{r,g}^{nom}}, \quad (1.5)$$

kde r značí typ reakce, g označuje energetickou grupu a $\Sigma_{r,g}^{alt}$, resp. $\Sigma_{r,g}^{nom}$ jsou makroskopické účinné průřezy pro změněné provozní historie, resp. pro nominální provozní historii. Analogicky

byly počítány změny pro atomovou hustotu ^{239}Pu ve tvaru

$$\delta N_{Pu} = \frac{N_{Pu}^{alt} - N_{Pu}^{nom}}{N_{Pu}^{nom}}, \quad (1.6)$$

kde N_{Pu}^{alt} , resp. N_{Pu}^{nom} jsou atomové hustoty ^{239}Pu pro změněné provozní historie, resp. pro nominální provozní historii.

Na obrázcích 1.12 a 1.13 jsou zobrazeny závislosti změn makroskopických účinných průřezů na změně atomové hustoty ^{239}Pu při vyhoření 30 000 MWd/t_U, kde byly uvažovány provozní historie se změnou

- hladiny výkonu od 30 % do 200 % nominálního výkonu,
- koncentrace kyseliny borité od 0,2 g/kg do 8 g/kg,
- hustoty moderátoru při teplotě od 284 °C do 316 °C,
- výkonu a koncentrace kyseliny borité,
- hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité,

kde společné změny dvou provozních parametrů byly uvažovány v rozsahu hodnot samostatných parametrů. Společné změny provozních parametrů byly počítány z důvodu, aby se ukázalo, zdali je tento postup aplikovatelný i na současné změny více provozních parametrů.

Z obrázků 1.12 a 1.13 je patrné, že bude možné nalézt pro všechny analyzované spektrální historie ve všech případech makroskopických účinných průřezů společnou směrnici závislosti změny daného makroskopického účinného průřezu na atomové hustotě ^{239}Pu . Ovšem v některých případech nemá závislost změny daného účinného průřezu na změně atomové hustoty ^{239}Pu stejný charakter pro všechny uvažované provozní historie, což je například zřejmé z obrázku 1.12c. Zde je zobrazena závislost změny makroskopického účinného průřezu pro absorpci v rychlé grupě na atomové hustotě ^{239}Pu a například pro změny výkonu vykazuje směrnice odlišnou hodnotu než v případě ostatních provozních historií. I v případě některých dalších účinných průřezů vykazuje směrnice změny výkonu mírně odlišné hodnoty oproti ostatním uvažovaným provozním historiím, což je patrné například z obrázků 1.12a a 1.12d.

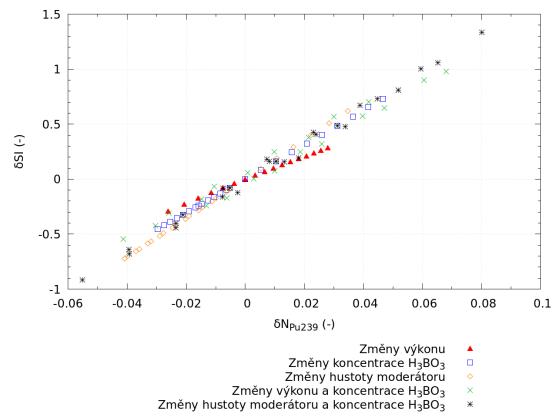
Odlišnost závislosti změny účinných průřezů na změně atomové hustoty ^{239}Pu pro provozní historie se změnami výkonu lze hledat v jejich odlišném spektru neutronů ve srovnání s ostatními provozními historiemi. Spektrální index může být podle [5] definován jako

$$SI = \frac{\phi_1}{\phi_2}, \quad (1.7)$$

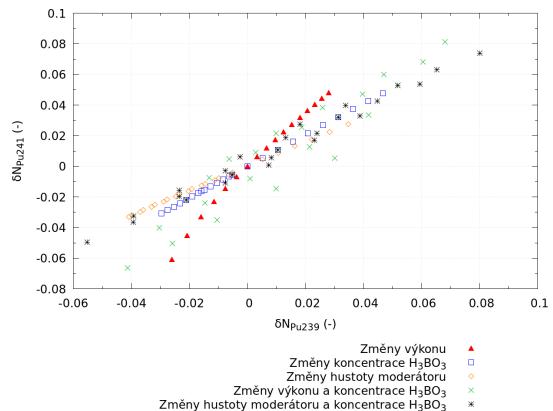
kde ϕ_1 , resp. ϕ_2 je hustota toku neutronů v rychlé, resp. tepelné grupě. Analogicky jako v předchozích případech byla vypočítána změna spektrálního indexu δSI mezi historiemi se změnou provozních parametrů SI^{alt} a nominální historií SI^{nom} , tj.

$$\delta SI = \frac{SI^{alt} - SI^{nom}}{SI^{nom}}. \quad (1.8)$$

Závislost změny spektrálního indexu na změně atomové hustoty ^{239}Pu je zobrazena na obrázku 1.10, ze kterého je patrné, že pro provozní historie se změnou výkonu je skutečně odlišná závislost spektra neutronů na atomové hustotě ^{239}Pu ve srovnání s ostatními provozními historiemi. Odlišné spektrum neutronů zapříčiní i rozdílné izotopické složení, což je možné pozorovat například na izotopu ^{241}Pu , pro který je závislost změny ^{241}Pu na změně ^{239}Pu zobrazena na obrázku 1.11. Odtud je patrné, že pro provozní historie se změnou výkonu se výrazně liší změna ^{241}Pu v závislosti na změně ^{239}Pu . Tento fakt je jedním z důvodů, kvůli kterým je možné pozorovat odlišný průběh změn účinných průřezů na změně atomové hustoty ^{239}Pu pro provozní historie se změnou výkonu oproti ostatním uvažovaným provozním historiím.



Obrázek 1.10: Závislost změny spektrálního indexu na změně atomové hustoty ^{239}Pu pro vyhoření 30 000 MWd/t_U



Obrázek 1.11: Závislost změny ^{241}Pu na změně ^{239}Pu pro vyhoření 30 000 MWd/t_U

Celkově ale lze říci, že při získání změny atomové hustoty ^{239}Pu bude možné pro všechny historie se změnami provozních parametrů s dobrou spolehlivostí určit změnu daného makroskopického účinného průřezu, která byla zapříčiněna odlišnou spektrální historií, při které probíhalo vyhořívání. Poté bude možné určit makroskopické účinné průřezy závislé na daných provozních stavech reaktoru se zahrnutím spektrální historie $\Sigma_{r,g}^{alt,sh}$ v daném kroku vyhoření v následujícím tvaru

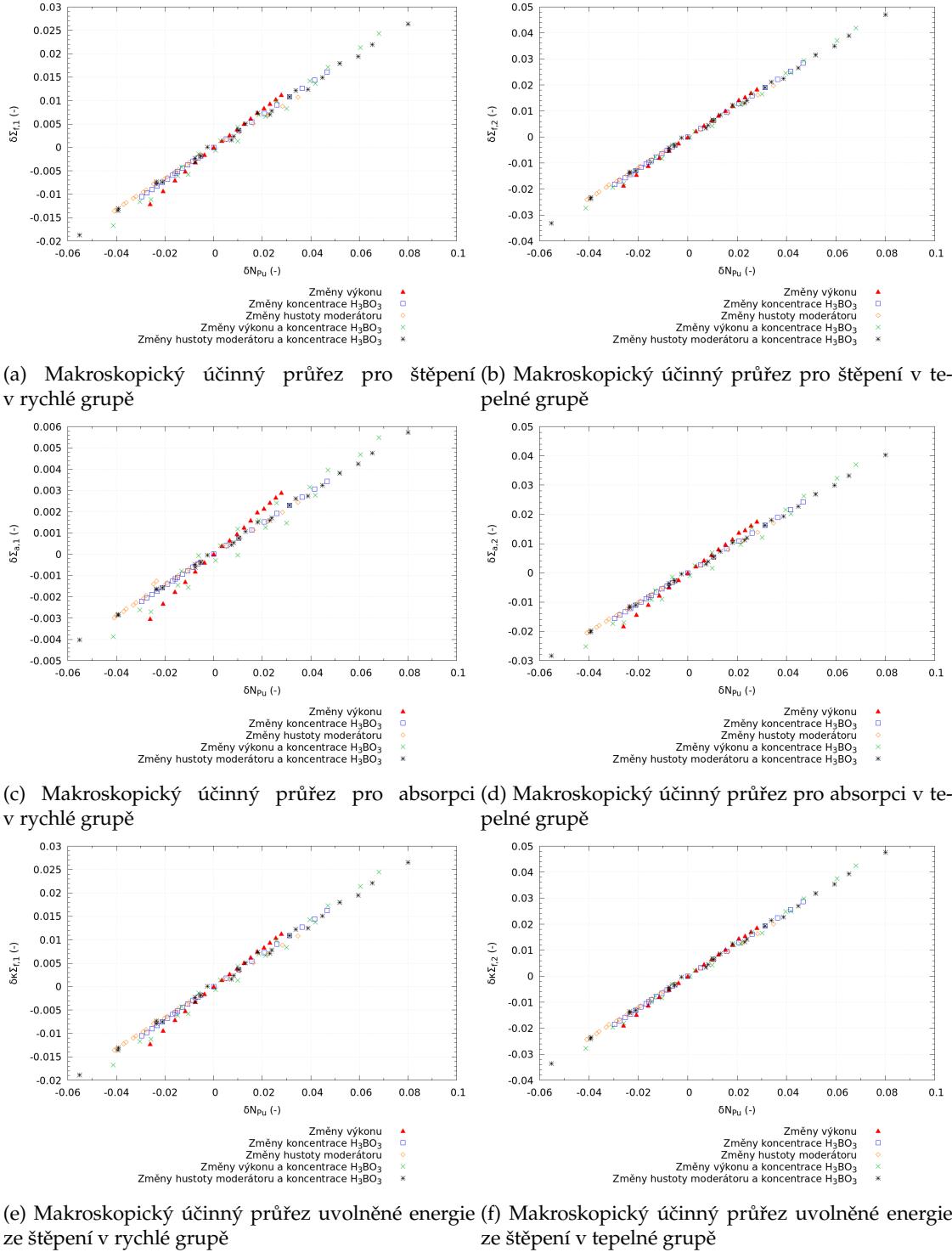
$$\Sigma_{r,g}^{alt,sh}(B, N_P, T_F, \rho_M, c_B, N_{Pu}) = \Sigma_{r,g}^{alt}(B, N_P, T_F, \rho_M, c_B) + h_{r,g}(B, N_{Pu}), \quad (1.9)$$

kde značení jednotlivých veličin odpovídá rovnici (1.1), $\Sigma_{r,g}^{alt}$ jsou makroskopické účinné průřezy pro změněné provozní stavu ve smyslu rovnice (1.1) a $h_{r,g}(B, N_{Pu})$ je aproximační funkce zohledňující spektrální historii závislou na atomové hustotě ^{239}Pu v daném kroku vyhoření B .

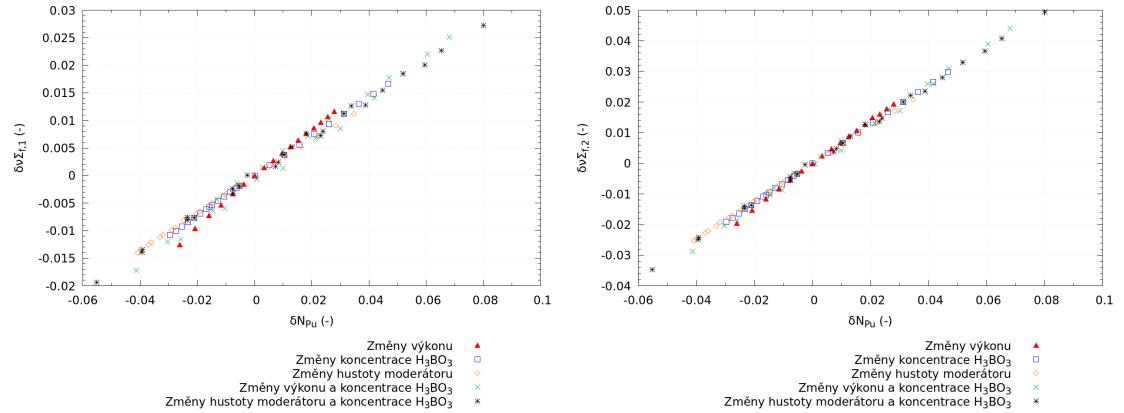
Pro aplikování výše uvedeného postupu zohledňujícího spektrální historii v parametrizaci homogenizovaných makroskopických účinných průřezů v nodálním kódu bude nutné

1. dokázat predikovat atomovou hustotu ^{239}Pu pro libovolný provozní stav ve všech uvažovaných nádech,
2. najít vhodné aproximační funkce spektrální historie pro uvažované makroskopické účinné průřezy,
3. určit vhodné provozní historie, ze kterých budou získány koeficienty aproximační funkce.

Výše uvedenými kroky postupu zohledňujícího spektrální historii v parametrizaci se budou zabývat následující kapitoly.

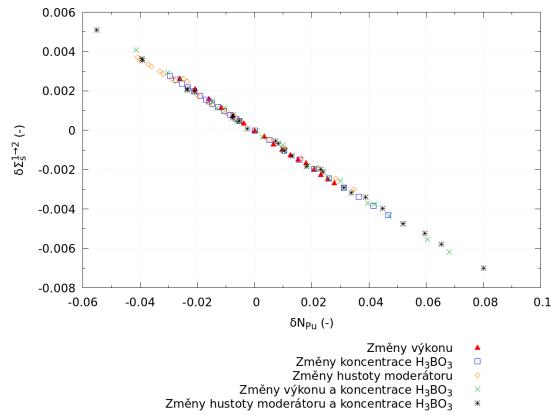


Obrázek 1.12: Závislost změn makroskopických účinných průřezů na změnách atomové hustoty ^{239}Pu pro historie se změnou provozních parametrů při vyhoření 30 000 MWd/t_U

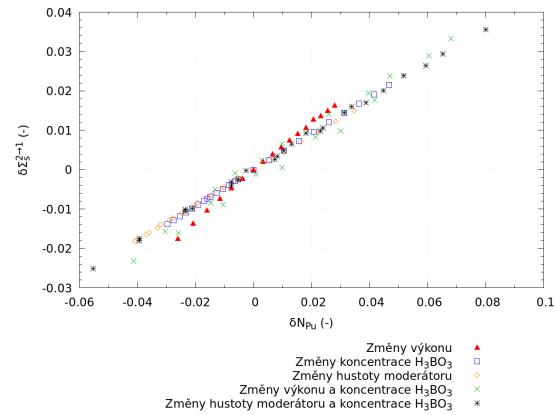


(a) Makroskopický účinný průřez produkce ne-
utronů ze štěpení v rychlé grupě

(b) Makroskopický účinný průřez produkce ne-
utronů ze štěpení v tepelné grupě



(c) Makroskopický účinný průřez pro
rozptyl z rychlé do tepelné grupy



(d) Makroskopický účinný průřez pro rozptyl z te-
pelné do rychlé grupy

Obrázek 1.13: Závislost změn makroskopických účinných průřezů na změnách atomové hustoty ²³⁹Pu pro historie se změnou provozních parametrů při vyhoření 30 000 MWd/t_U

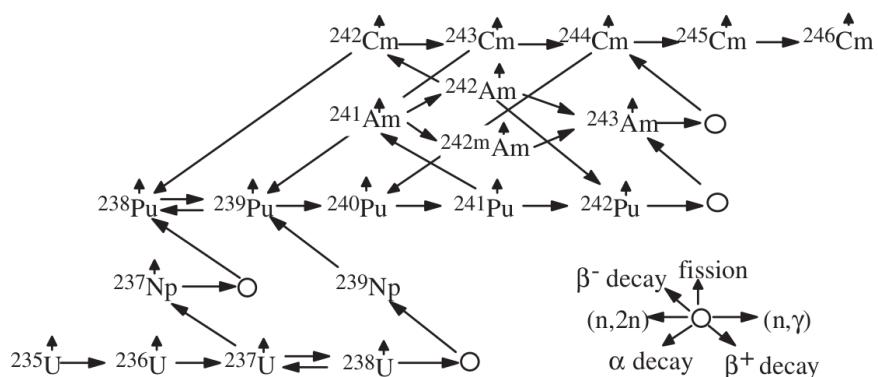
Kapitola 2

Model řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu

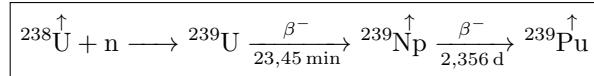
2.1 Popis izotopických změn v průběhu vyhořívání

Neutronově-fyzikální poměry v aktivní zóně reaktoru jsou během jeho provozu značně složité. Dochází zde k celé řadě jaderných interakcí, které vedou ke změnám izotopického složení paliva. Z podkapitoly 1.6 vyplýnulo, že jednou z možností určení vlivu provozní historie na makroskopické účinné průřezy by mohlo být najítí approximační funkce závislé na atomové hustotě ^{239}Pu , která je vhodným identifikátorem spektrálních změn zapříčiněných právě změnami provozní historie. Z tohoto důvodu je nutné analyzovat, jakým způsobem může v jaderném reaktoru během vyhořívání docházet ke změně atomové hustoty ^{239}Pu .

Z obrázku 2.1, který znázorňuje izotopické přeměny aktinoidů během vyhořívání, je zřejmé, že radiačním záchytem neutronu na jádru ^{238}U vzniká izotop ^{239}U , který se následnou β^- přeměnou s poločasem rozpadu 23,45 minuty mění na ^{239}Np , které se dalším β^- rozpadem s poločasem 2,356 dne rozpadá na ^{239}Pu . Naopak úbytek ^{239}Pu je způsoben jeho štěpením a dále radiačním záchytem neutronu na jeho jádře a vznikem izotopu ^{240}Pu . Další změny atomové hustoty ^{239}Pu jsou dány radiačním záchytem neutronu na jádru ^{239}Pu , α rozpadem ^{243}Cm , popřípadě reakcí $(n, 2n)$ na samotném ^{239}Pu . Ovšem při zahrnutí posledních tří jmenovaných reakcí by došlo k zacyklení řetězce, pro který by již nebylo snadné nalézt řešení atomových hustot jednotlivých aktinoidů a došlo by výrazně ke zesložitěnímu modelu řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu . Z tohoto důvodu bude pro další popis uvažován pouze zjednodušený linearizovaný řetězec zobrazený na obrázku 2.2, ve kterém navíc nebude uvažován izotop ^{239}U díky jeho krátkému poločasu rozpadu, který je zanedbatelný ve srovnání s dobou vyhořívání paliva v jaderném reaktoru [3], [5].



Obrázek 2.1: Schéma přeměn řetězce aktinoidů. Převzato z [8].



Obrázek 2.2: Schéma zjednodušeného linearizovaného řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu

2.2 Formulace a řesení bilančních rovnic

Za předpokladu uvedených zjednodušení v předchozí podkapitole budou zformulovány bilanční rovnice pro řetězec aktinoidů na obrázku 2.2 s vynecháním ^{239}U , které budou popisovat změny atomové hustoty aktinoidů ^{238}U , ^{239}Np a ^{239}Pu v čase τ . Změna atomové hustoty ^{238}U je dána radiačním záhytem na jeho jádře a také jeho štěpením. Díky radiačnímu záhytu na ^{238}U vzniká nuklid ^{239}Np a dochází ke zvyšování jeho atomové hustoty. Naopak úbytek jader ^{239}Np je charakterizován β^- rozpadem na ^{239}Pu a ostatními absorpčními reakcemi, do kterých lze zahrnout i štěpení ^{239}Np . Příbytek jader ^{239}Pu je dán β^- přeměnou ^{239}Np a snižování atomové hustoty ^{239}Pu je zapříčiněno absorpčními reakcemi na jeho jádru, ve kterých je opět zahrnuto i jeho štěpení. Do změny atomové hustoty ^{239}Pu bude zahrnut i jeho rozpad, i přestože je hodnota poločasu rozpadu 24110 let [3], z čehož plyne, že rozpad ^{239}Pu nebude mít výrazný vliv na změnu jeho atomové hustoty. Popsané přeměny lze vyjádřit pomocí bilančních rovnic v následujícím tvaru

$$\frac{dN_U(\tau)}{d\tau} = -N_U(\tau) \sum_{g=1}^2 \sigma_{a,g}^U \phi_g, \quad (2.1)$$

$$\frac{dN_{Np}(\tau)}{d\tau} = N_U(\tau) \sum_{g=1}^2 \sigma_{\gamma,g}^U \phi_g - N_{Np}(\tau) \left(\lambda_{Np} + \sum_{g=1}^2 \sigma_{a,g}^{Np} \phi_g \right), \quad (2.2)$$

$$\frac{dN_{Pu}(\tau)}{d\tau} = \lambda_{Np} N_{Np}(\tau) - N_{Pu}(\tau) \left(\lambda_{Pu} + \sum_{g=1}^2 \sigma_{a,g}^{Pu} \phi_g \right), \quad (2.3)$$

kde

- $\sigma_{a,g}^i$ značí mikroskopický účinný průřez pro celkovou¹ absropci i -tého nuklidu v grupě g ,
- $\sigma_{\gamma,g}^i$ je mikroskopický účinný průřez pro radiační záhyt i -tého nuklidu v grupě g ,
- ϕ_g značí hustotu toku neutronů v grupě g ,
- λ_i je rozpadová konstanta i -tého nuklidu,
- index g označuje danou energetickou grupu,
- značení U , Np a Pu odpovídá nuklidům ^{238}U , ^{239}Np a ^{239}Pu .

V dalším textu bude pro zjednodušení zápisu předcházejících rovnic zavedeno značení vyjadřující efektivní přeměny nuklidů jako

$$\begin{aligned} A_U &= \sum_{g=1}^2 \sigma_{a,g}^U \phi_g, & C_U &= \sum_{g=1}^2 \sigma_{\gamma,g}^U \phi_g, \\ A_{Np} &= \lambda_{Np} + \sum_{g=1}^2 \sigma_{a,g}^{Np} \phi_g, & A_{Pu} &= \lambda_{Pu} + \sum_{g=1}^2 \sigma_{a,g}^{Pu} \phi_g. \end{aligned} \quad (2.4)$$

V rovnicích (2.1), (2.2) a (2.3) byl použit dvougrupový přístup, a to z důvodu, že je typicky využíván v programech řešících celozónové výpočty tepelných reaktorů a používá jej i program

¹Mikroskopický účinný průřez zahrnuje všechny absorpční reakce včetně štěpení.

ANDREA pro řešení dvougrupové difúzní rovnice [9]. Předchozí rovnice představují soustavu lineárních diferenciálních rovnic prvního rádu a jejich analytické řešení lze nalézt pomocí metody integračního faktoru. Postup řešení je takový, že nejprve je metodou integračního faktoru řešena rovnice (2.1), jejíž výsledek se následně využije k řešení rovnice (2.2), která je opět řešena metodou integračního faktoru. Analogicky se postupuje i u rovnice (2.3), čímž se získá její řešení, a tím pádem je známo i řešení předcházející soustavy lineárních diferenciálních rovnic.

Detailní postup řešení rovnic (2.1), (2.2) a (2.3) pomocí metody integračního faktoru je uveden v příloze A. Odtud je patrné, že řešení sice nejsou složitá, ale s vyšším hmotnostním číslem aktinoidů roste počet členů řešení a i jeho celková složitost. Navíc pro implementování modelu řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu není vhodný postup, kdy jsou zadány přímo řešení jednotlivých bilančních rovnic. Vhodnější by bylo použít algoritmus, který by současně dokázal najít řešení celé soustavy rovnic. A to především kvůli tomu, pokud by bylo nutné nalézt například řešení atomové hustoty ^{241}Pu , bylo by přímé zadání řešení jednotlivých rovnic kvůli vysokému počtu členů nepříjemné a velmi obtížné proveditelné. Z tohoto důvodu bude pro implementování modelu řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu využita Batemanova metoda, která bude popsána v další podkapitole.

2.3 Přímé řešení řetězce aktinoidů pomocí Batemanovy metody

Je-li uvažován obecný linearizovaný řetězec aktinoidů, který lze popsat soustavou n lineárních diferenciálních rovnic ve tvaru

$$\frac{dN_i(\tau)}{d\tau} = F_{i,i-1}N_{i-1}(\tau) - F_{i,i}N_i(\tau), \quad (2.5)$$

kde $F_{i,i-1} = \text{konst.}$, $F_{i,i} = \text{konst.}$ jsou efektivní přeměny jednotlivých aktinoidů, které jsou během jednoho časového kroku konstantní a $i \in \{1, \dots, n\}$ označuje uvažované aktinoidy v lineárním řetězci. Výše uvedenou soustavu lineárních diferenciálních rovnic je možné přepsat do maticového tvaru jako

$$\frac{d}{d\tau} \mathbf{N}(\tau) = \mathbb{A} \mathbf{N}(\tau), \quad (2.6)$$

kde

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} -F_{1,1} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ F_{2,1} & -F_{2,2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \cdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & -F_{n-1,n-1} & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & F_{n,n-1} & -F_n \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Prvky matice \mathbb{A} budou dále označovány jako $a_{i,j}$ a navíc pro diagonální prvky bude použito značení $d_i = -a_{i,i}$. Pak lze analytické řešení soustavy lineárních diferenciálních rovnic (2.6) nalézt pomocí Batemanovy metody [10] a jeho tvar v čase $t + \Delta t$ lze vyjádřit jako

$$N_i(t + \Delta t) = N_i(t) e^{-d_i \Delta t} + \sum_{j=1}^{i-1} N_j(t) \left[\sum_{k=j}^{i-1} \frac{e^{-d_k \Delta t} - e^{-d_i \Delta t}}{d_i - d_k} a_{k+1,k} \prod_{\substack{n=j \\ n \neq k}}^{i-1} \frac{a_{n+1,n}}{d_n - d_k} \right]. \quad (2.8)$$

Z předchozího vztahu je zřejmé, že Batemanova metoda (2.8) selže v případě, že některé z efektivních přeměn na diagonále matice \mathbb{A} jsou si rovny, tj. $d_i = d_k$, resp. $d_n = d_k$. Obvyklý postup spočívá v zavedení drobných odchylek do opakujících se efektivních přeměn nuklidů, které ovšem zůstávají pod neurčitostí originálních dat. Tímto způsobem se zajistí, že nenastane rovnost diagonálních členů $d_i = d_k$, resp. $d_n = d_k$ [11].

Pro řetězec aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu náleží index i do množiny $\{1, 2, 3\}$, přičemž $i = 1$ označuje nuklid ^{238}U , $i = 2$ značí nuklid ^{239}Np a konečně $i = 3$ označuje nuklid ^{239}Pu . Matice \mathbb{A} pro uvažovaný řetězec lze s využitím zavedených efektních přeměn (2.4) zapsat ve tvaru

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} -A_U & 0 & 0 \\ C_U & -A_{Np} & 0 \\ 0 & \lambda_{Np} & -A_{Pu} \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

V řetězci aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu jsou jednotlivé efektivní přeměny unikátní, tj. nedochází k jejich opakování. Díky tomu bude učiněn předpoklad, že diagonální prvky matice (2.9) si nemůžou být rovny, tj. $d_i \neq d_k$, resp. $d_n \neq d_k$. Tím bude zajištěno, že nedojde k selhání Batemanovy metody (2.8) a bude ji možné bezpečně použít k predikci atomových hustot uvažovaných aktinoidů v závislosti na vyhoření.

2.4 Implementace modelu

Model řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu byl implementován v programovacím jazyce Ruby s využitím Batemanovy metody (2.8), která byla použita pro řešení soustavy lineárních diferenciálních rovnic popisujících změny atomových hustot aktinoidů v čase. Výňatek z implementovaného modelu je vypsán v příloze B ve zdrojovém kódě B.1, ve kterém bylo využito objektově-orientovaného programování, jež programovací jazyk Ruby nabízí. Nejprve byla definována třída `PredictConcentration` s konstruktorem `initialize`, ve kterém se nastaví výchozí hodnoty všech vlastností. Samotné řešení bilančních rovnic (2.1), (2.2) a (2.3) je provedeno pomocí metody `solve`, ve které je implementováno analytické řešení (2.8).

Z výstupního souboru HELIOSu byly získány počáteční atomové hustoty uvažovaných aktinoidů odpovídající materiálovému složení, dvougrupové mikroskopické účinné průřezy a dvougrupové hustoty toku neutronů pro všechny uvažované kroky vyhoření. Aby při dalším testování modelu nemusela být pokaždé data z výstupního souboru HELIOSu extrahována, byla uložena do souboru ve formátu `json`, z něhož se načtu při volání třídy `PredictConcentration` v jejím konstruktoru.

Pro použití Batemanovy metody (2.8) je nutné určit časový krok vyhoření Δt , který se stanovuje na základě kroků vyhoření definových ve vstupním souboru HELIOSu. Obecně je vyhoření B definováno jako celkové množství energie uvolněné z paliva za dobu jeho pobytu v reaktoru a lze ho vyjádřit jako

$$B = \int_0^{T_V} P(t) dt, \quad (2.10)$$

kde P je výkon reaktoru a T_V je doba pobytu paliva v reaktoru [3]. Je-li v dané oblasti během jednoho vyhořívajícího kroku předpokládán konstantní výkon, pak lze ze znalosti vyhoření definovaném v HELIOSu snadno určit časové trvání vyhoření podle rovnice (2.10). Časový krok vyhoření Δt je poté stanoven jako rozdíl po sobě jdoucích časů vyhoření, tj. $\Delta t = t_i - t_{i-1}$. Ve zdrojovém kódě B.1 se časový krok Δt určuje pomocí metody `delta_time`.

Postup metody `solve` při predikci atomové hustoty aktinoidů ^{238}U , ^{239}Np a ^{239}Pu probíhá tak, že je iterováno přes všechny uvažované kroky vyhoření. V prvním kroku iterace, ve kterém není uvažováno žádné vyhoření, jsou počáteční atomové hustoty aktinoidů získané z HELIOSu přiřazeny do proměnné instance `@calcData`. V dalším kroku, jehož časové trvání odpovídá Δt , jsou nejprve vypočítány efektivní přeměny aktinoidů pomocí metod `effective_absorption` a `effective_capt ion`. Tyto metody určují efektivní přemény na základě vztahů (2.4), v nichž budou testovány různé přístupy k mikroskopickým účinným průřezům pro objasnění spolehlivosti modelu pro jednotlivé provozní historie. Testováním modelu se podrobně zabývá následující podkapitola 2.5. Pomocí metody `init_matrix` je vytvořena dvoudiagonální matice s jednotlivými efektivními přeměnami ve tvaru (2.7). Dále je již postupováno podle Batemanova analytického řešení (2.8), jímž jsou určeny atomové hustoty všech uvažovaných aktinoidů v daném kroku vyhoření a přiřazeny do proměnné instance `@calcData`. Analogicky je postupováno pro

všechny kroky vyhoření, přičemž k řešení atomové hustoty v daném kroku vyhoření jsou vždy využity atomové hustoty z předcházejícího kroku.

2.5 Testování modelu

Cílem modelu je dokázat predikovat atomové hustoty aktinoidů ^{238}U , ^{239}Np a ^{239}Pu pro libovolnou provozní historii bez toho, aniž by byly známy její mikroskopické účinné průřezy. To znamená dokázat určit atomové hustoty pouze na základě mikroskopických účinných průřezů pro nominální historii, popřípadě s jejich parametrizací. Předtím, nežli bude ukázáno, zdali je vůbec možné tento postup aplikovat tak, aby bylo dosaženo uspokojivých přesností predikovaných atomových hustot, je nejprve nutné ověřit spolehlivost implementovaného modelu při použití známých mikroskopických účinných průřezů a dvougrupových hustot toků neutronů provozní historie.

Pro testování modelu byl vybrán dvoudimenzionální model palivového souboru reaktoru VVER-1000 s označením a13A umístěný v nekonečné hexagonální mříži. Jedná se o neprofilovaný palivový soubor se středním obohacením 1,3 hm% původního ruského paliva TVEL [12], ve kterém nebyly uvažovány regulační orgány a pro ně určený prostor ve vodících trubkách byl nahrazen moderátorem. Parametry nominálního provozního stavu byly voleny podle tabulky 2.1 a odpovídají horkému výkonovému stavu na 100 % nominálního výkonu s koncentrací kyseliny borité 2,8 g/kg. Při výpočtech v HELIOSu byla nastavena kondenzace do dvou energetických grup a homogenizace přes celou geometrii palivového souboru. Navíc pro získání výsledků odpovídajících provozu reaktoru v kritickém stavu byla použita B_1 korekce na kritické spektrum.

Tabulka 2.1: Provozní parametry pro nominální stav palivového souboru a13A

Parametr	Hodnota
Výkon [W/g]	36,69
Tlak moderátoru [MPa]	15,7
Teplota moderátoru [$^{\circ}\text{C}$]	305,8
Hustota moderátoru [g/cm ³]	0,714608
Koncentrace kyseliny borité [g/kg]	2,8

Spolehlivost modelu bude testována pro nominální provozní historie a také pro provozní historie se změnami provozních parametrů vůči nominální historii. Budou zde zahrnuty následující změny

- výkonu,
- hustoty moderátoru,
- koncentrace kyseliny borité v moderátoru,

kdy bude uvažována jedna kladná a jedna záporná změna příslušného parametru. Konkrétně se bude jednat o změny výkonové hladiny na 50 % a 200 % nominálního výkonu, změny hustoty moderátoru, která nastane při změně teploty moderátoru o $-15\ ^{\circ}\text{C}$ a $+10\ ^{\circ}\text{C}$, a konečně o změny koncentrace kyseliny borité na 1,0 g/kg a 6,0 g/kg ve srovnání s nominální historií. Hodnoty změn jednotlivých parametrů byly vybrány na základě hodnot odskoků obvykle používaných při parametrizaci v ANDREe.

Změna hustoty moderátoru bude uváděna při změně teploty moderátoru a nikoliv v konkrétních hodnotách g/cm³, a to z důvodu, že v programu QUADRIGA je možnost měnit hustotu moderátoru pomocí změny teploty moderátoru. Ukázka změny hustoty moderátoru při změně teploty moderátoru o $+10\ ^{\circ}\text{C}$ oproti nominálnímu stavu v programu QUADRIGA je uvedena ve zdrojovém kódu 2.1. Pomocí parametru ModeratorTemperature je nastavena teplota moderátoru,

při které je vypočítána jeho hustota. Parametr ModeratorTemperatureDelta provede vrácení teploty moderátoru na nominální hodnotu, a tedy ve výpočtu je definována pouze změna hustoty odpovídající změně teploty moderátoru o $+10^{\circ}\text{C}$ a teplota moderátoru je nastavena na nominální hodnotu.

```
ModeratorTemperature: 315.8
ModeratorTemperatureDelta: -10.0
```

Zdrojový kód 2.1: Zadání změny hustoty moderátoru v nástroji QUADRIGA

2.5.1 Spolehlivost modelu pro známou provozní historii

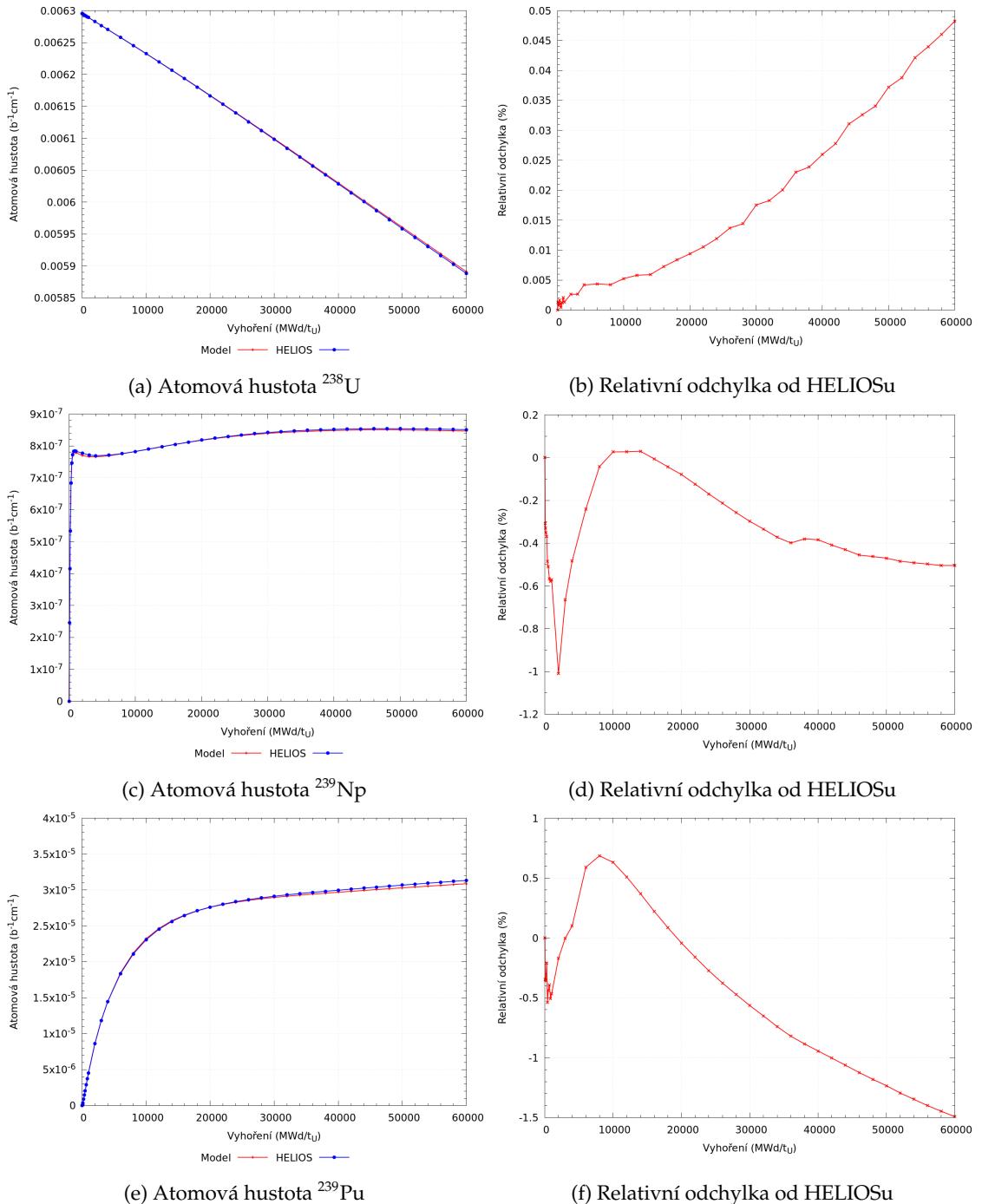
Prvním krokem při testování modelu pro výše uvedené provozní historie bude ověření spolehlivosti při znalosti konkrétních dvougrupových hustot toku neutronů a mikroskopických účinných průřezů, které budou získány na základě výpočtu mikrokódem HELIOS. Vstupní soubory pro HELIOS byly připraveny pomocí nástroje QUADRIGA, se kterým velice stručně seznamovala podkapitola 1.2. Následně byl proveden výpočet HELIOSem a z jeho výstupního souboru pak byly pro všechny nadefinované kroky vyhoření získány dvougrupové hustoty toku neutronů a mikroskopické účinné průřezy, s nimiž byly pro jednotlivé aktinoidy vypočítány jejich efektivní přemény podle vztahu (2.4), které byly dále použity v modelu pro predikci atomových hustot.

Nejprve bylo provedeno testování modelu pro nominální provozní historii. Obrázek 2.3 zobrazuje získané výsledky atomových hustot jednotlivých aktinoidů spolu s porovnáním atomových hustot vypočítaných HELIOSem v závislosti na vyhoření. Z obrázků 2.3a, 2.3c a 2.3e je patrné, že závislost atomové hustoty uvažovaných aktinoidů na vyhoření vykazuje velice dobrou shodu mezi modelem a výpočtem v HELIOSu. Pro názornější porovnání výsledků byly vypočítány relativní odchylky atomových hustot vypočítaných modelem od referenčního výpočtu v HELIOSu ve tvaru

$$\delta N = \frac{N_{model} - N_{helios}}{N_{helios}}, \quad (2.11)$$

kde N_{model} je atomová hustota daného aktinoidu predikovaná modelem a N_{helios} je referenční atomová hustota daného aktinoidu vypočítaná HELIOSem. Pro atomovou hustotu ^{238}U se s rostoucím vyhořením sice zvyšuje relativní odchylka modelu vykreslená na obrázku 2.3b, ale během uvažovaného vyhořívání nepřesahuje hodnotu 0,05 %. Model v prvních krocích vyhoření podhodnocuje atomovou hustotu ^{239}Np a při dalším vyhořívání je naopak její hodnota nadhodnocena, jak je zřejmé z obrázku 2.3d. Celkově relativní odchylka modelem vypočítané atomové hustoty ^{239}Np nepřekročí absolutně hodnotu 1,1 %. Na atomové hustotě ^{239}Pu vypočítané pomocí modelu se již výrazněji projevují provedená zjednodušení v řetězci aktinoidů, což lze pozorovat na obrázku 2.3f. Při maximálním uvažovaném vyhoření je atomová hustota ^{239}Pu vypočítaná pomocí modelu přibližně o 1,4 % podhodnocena ve srovnání s referenčním výsledkem z HELIOSu. Rozdíly ve výpočtech mezi modelem a HELIOSem jsou dány jednánymi zjednodušeními v řetězci aktinoidů, jednak použitím podrobné 49grupové knihovny jaderných dat ENDF/B-VII.1 v HELIOSu ve srovnání s dvougrupovým přístupem v modelu.

V dalším kroku byla testována spolehlivost modelu pro historie se změnami provozních parametrů, které byly uvedeny v podkapitole 2.5. Na obrázku 2.4 jsou vykresleny závislosti atomových hustot na vyhoření pro provozní historie na výkonových hladinách 50 % a 200 % nominálního výkonu. Z obrázků 2.4a, 2.4c a 2.4e je patrné, že model vykazuje velice dobrou spolehlivost i při predikování atomových hustot uvažovaných aktinoidů pro provozní historie se změnou výkonu. Obrázky 2.4b, 2.4d a 2.4f ukazují vývoj relativní odchylky modelu od HELIOSu v závislosti na vyhoření pro všechny predikované atomové hustoty, ze kterých lze pozorovat velice podobný charakter chování predikovaných atomových hustot pro uvažované aktinoidy jako v případě nominální historie. V případě atomové hustoty ^{238}U pro obě výkonové hladiny rozdíl v absolutní hodnotě nepřesáhl 0,05 % a pro atomové hustoty ^{239}Np pak 1,2 % v průběhu uvažovaného vyhořívání. Pro atomovou hustotu ^{239}Pu byly dosaženy největší rozdíly ve srovnání s referenčními hodnotami při maximálním vyhoření, a to přibližně v absolutní hodnotě o 1,7 % pro výkonovou hladinu 50 % nominálního výkonu a 1,1 % pro výkonovu hladinu 200 %.

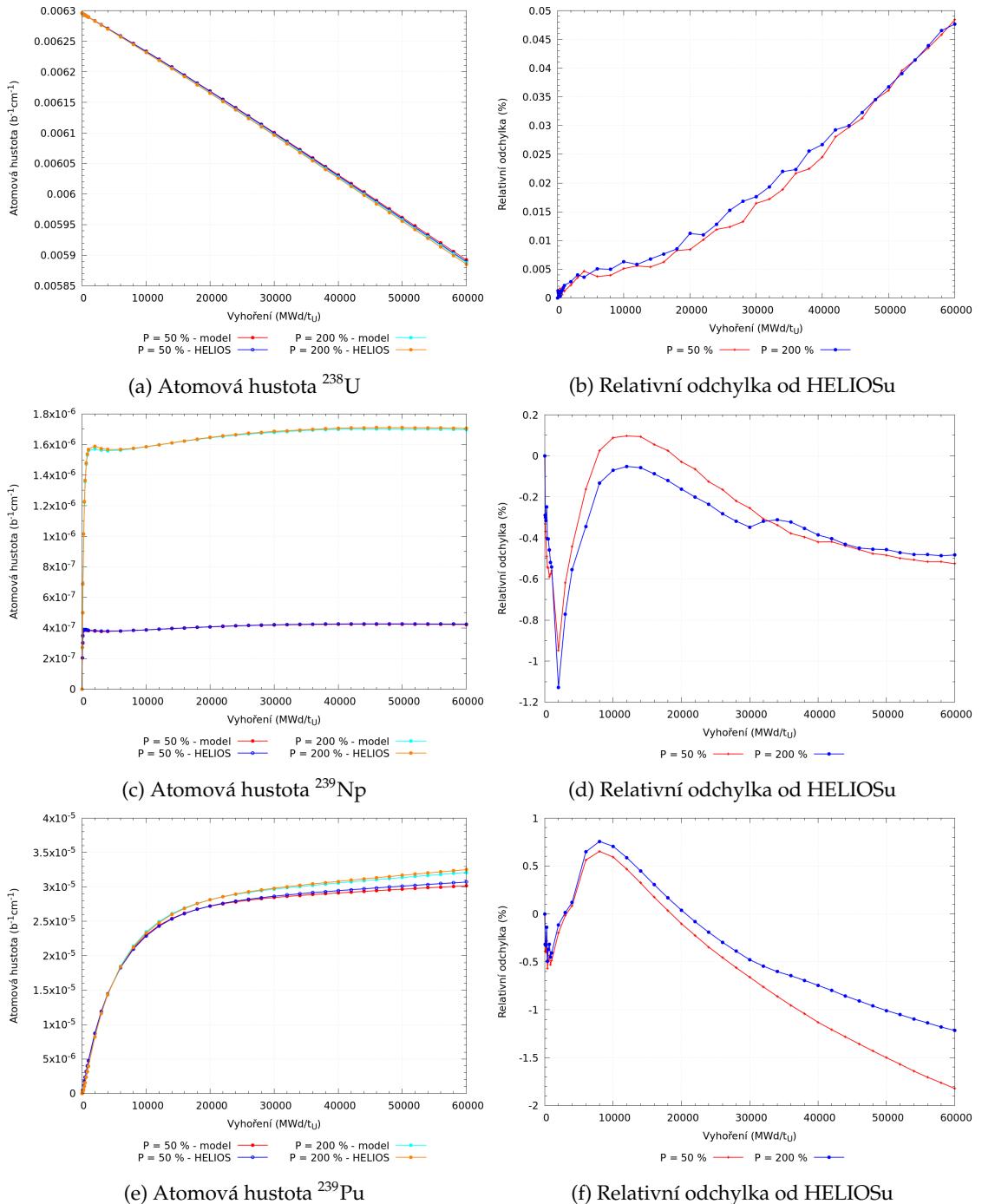


Obrázek 2.3: Závislost atomových hustot na vyhoření (vlevo) a relativní odchylky modelem vypočítaných atomových hustot ve srovnání s HELIOSem (vpravo) pro nominální provozní historii při použití známých provozních dat

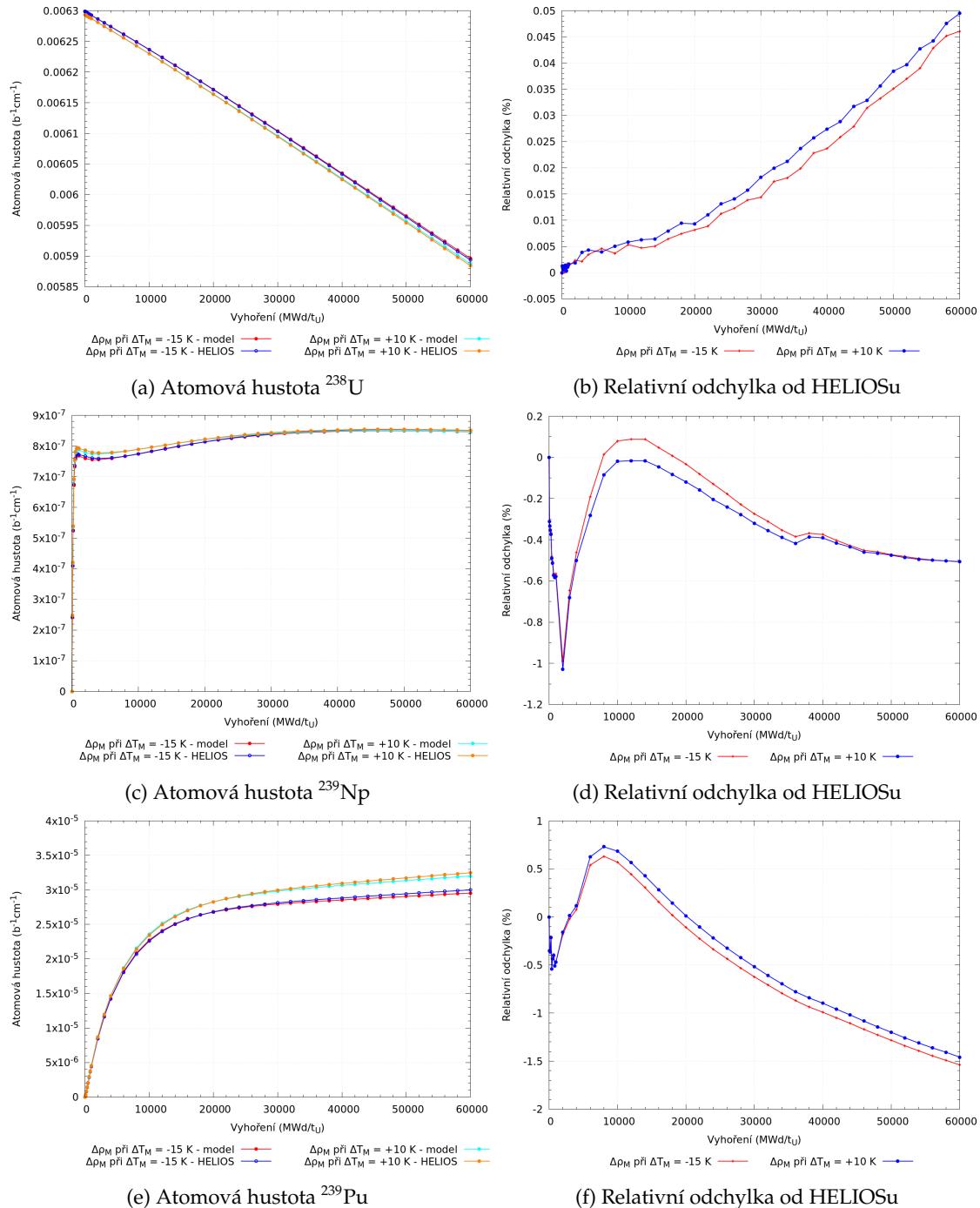
Následně byly testovány provozní historie se změnou hustoty moderátoru, pro které jsou výsledky výpočtů zobrazeny na obrázku 2.5. I v případě kladné a záporné změny hustoty moderátoru ve srovnání s nominálním stavem se přesnost predikce atomových hustot uvažovaných aktinoidů pohybovala na podobné úrovni jako v předchozích případech, což je patrné z obrázků 2.5a, 2.5c a 2.5e. Rozdíly v atomových hustotách pro ^{238}U a ^{239}Np mezi modelem a HELIOSem vyházel velice podobně jako v dříve testovaných historiích. Stěžejní atomová hustota ^{239}Pu byla podhodnocena o 1,4 % pro zápornou změnu hustoty moderátoru a o 1,3 % pro kladnou změnu hustoty moderátoru ve srovnání s referenčním výsledkem z HELIOSu.

Poslední testovanou byla provozní historie se změnou koncentrace kyseliny borité ve srovnání s nominálním stavem. Obrázek 2.6 zobrazuje vypočítané výsledky atomových hustot pomocí modelu a jejich srovnání s HELIOSem. Opět bylo dosaženo dobré shody mezi modelem a referenčním výsledkem, což je patrné z obrázků 2.6a, 2.6c a 2.6e. Rozdíly atomových hustot mezi modelem a HELIOSem dosahovaly podobných hodnot jako v předchozích případech a jsou vykresleny na obrázcích 2.6b, 2.6d a 2.6f.

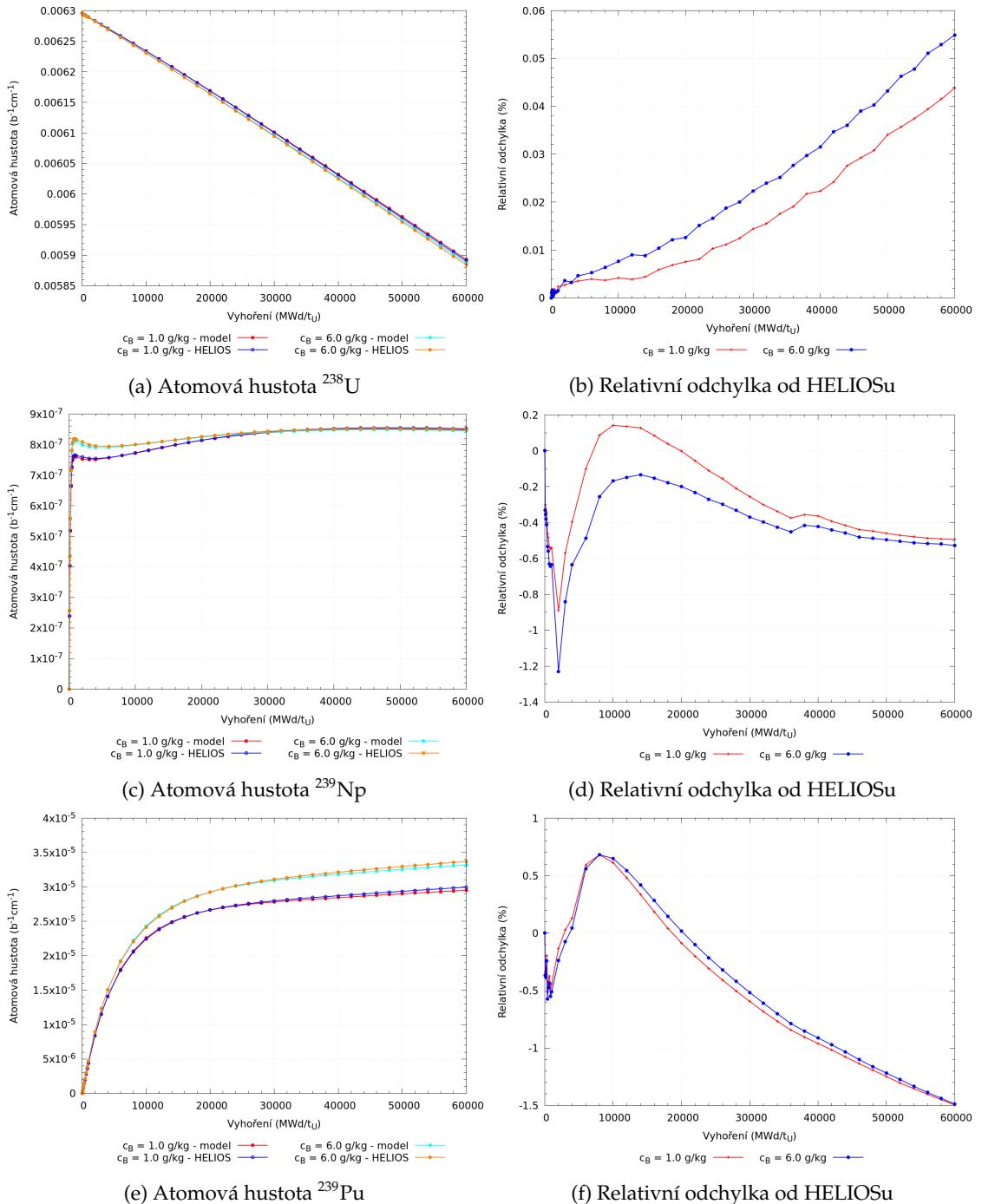
Závěrem lze říci, že model aktinoidů vykazuje konzistenci pro všechny testované provozní historie. Rozdíl stěžejní atomové hustoty ^{239}Pu mezi modelem a referenčním výsledkem pro analyzované provozní historie nepřesáhl 2 %. Ze získaných výsledků lze konstatovat, že při použití známých dvougrupových hustot toků neutronů a mikroskopických účinných průřezů přináší model uspokojivé výsledky při predikci atomových hustot aktinoidů ^{238}U , ^{239}Np a ^{239}Pu .



Obrázek 2.4: Závislost atomových hustot na vyhoření (vlevo) a relativní odchylky modelem vypočítaných atomových hustot ve srovnání s HELIOSem (vpravo) pro provozní historie se změnou výkonu při použití známých provozních dat



Obrázek 2.5: Závislost atomových hustot na vyhoření (vlevo) a relativní odchylky modelem vypočítaných atomových hustot ve srovnání s HELIOSem (vpravo) pro provozní historie se změnou hustoty moderátoru při použití známých provozních dat



Obrázek 2.6: Závislost atomových hustot na vyhoření (vlevo) a relativní odchylky modelem vypočítaných atomových hustot ve srovnání s HELIOSem (vpravo) pro provozní historie se změnou koncentrace kyseliny borité při použití známých provozních dat

2.5.2 Spolehlivost modelu pro provozní historie s použitím nominálních dat a odskoků

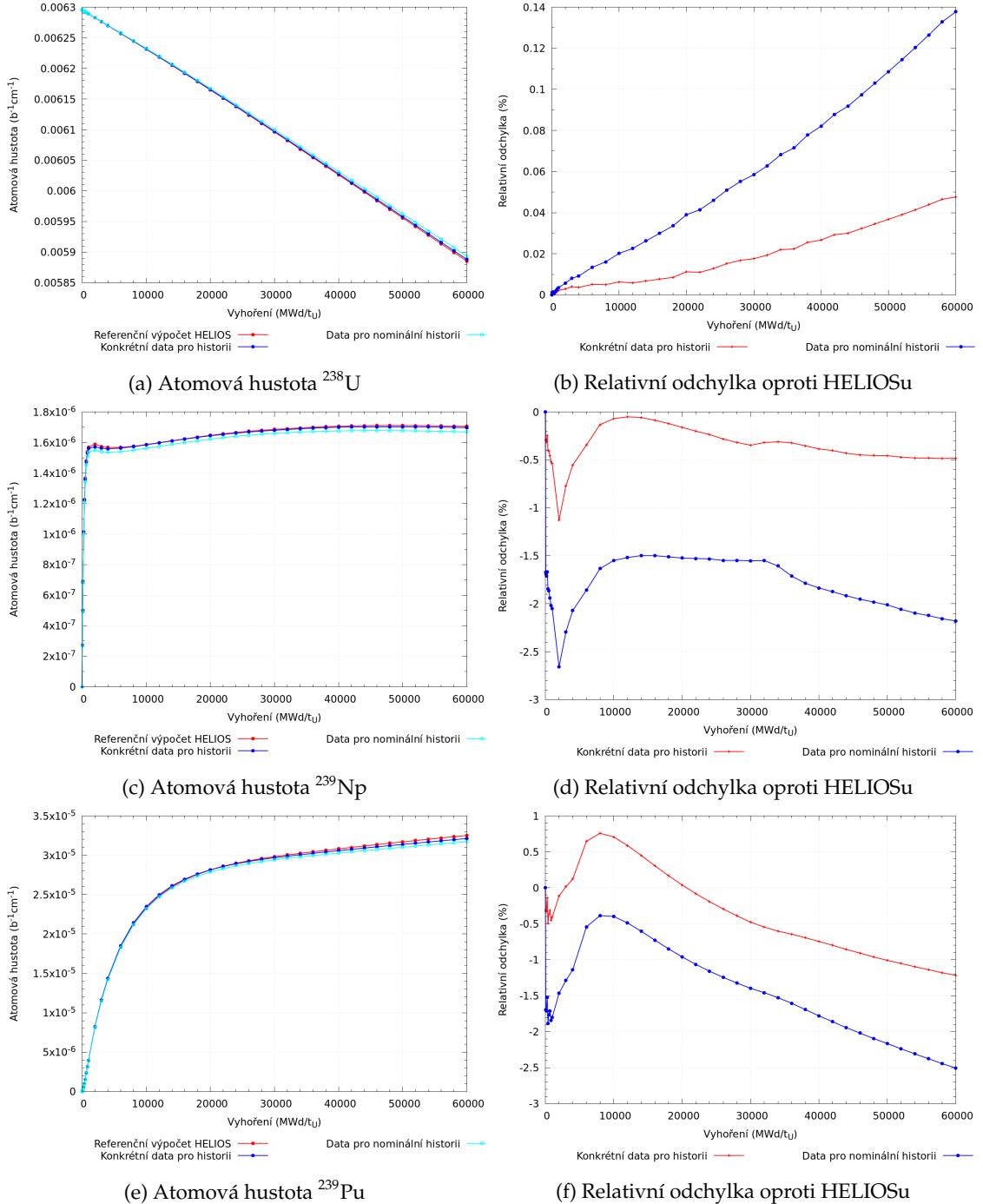
V předchozí podkapitole bylo ukázáno, že při znalosti konkrétních dvougrupových hustot toků neutronů a mikroskopických účinných průřezů lze pomocí modelu predikovat atomové hustoty aktinoidů s uspokojivými výsledky. Při celozónových výpočtech ovšem není možné připravit aplikační knihovny pro všechny kombinace provozních parametrů, a tedy nejsou známy konkrétní hodnoty mikroskopických účinných průřezů. Z tohoto důvodu bude zjištováno, zdali by nebylo možné použít mikroskopické účinné průřezy pro nominální historii i pro historie se změnami provozních parametrů tak, aby byly získány přijatelné hodnoty atomových hustot aktinoidů pro danou provozní historii. Je důležité poznamenat, že budou uvažovány konkrétní dvougrupové hustoty toků neutronů pro danou provozní historii, tj. přesné dvougrupové hustoty toků neutronů počítané například na základě difuzního přiblížení. To znamená, že bude bráno v potaz, že v praxi by bylo dosahováno horších výsledků.

Použití mikroskopických účinných průřezů pro nominální historii v modelu aktinoidů bylo nejprve testováno na provozní historii se změnou hladiny výkonu na 200 % nominální hodnoty. Na obrázku 2.7 jsou zobrazeny atomové hustoty uvažovaných aktinoidů v závislosti na vyhoření vypočítané modelem při použití nominálních a konkrétních mikroskopických účinných průřezů. Obrázky 2.7b, 2.7d a 2.7f ukazují, že při použití dat pro nominální historii se výrazně zhorší spolehlivost modelu ve srovnání s použitím konkrétních mikroskopických účinných průřezů. Nejvyšší rozdíl atomové hustotu ^{238}U mezi modelem a HELIOSem se během uvažovaného vyhořívání zhoršil z 0,05 % na 0,15 %. V případě atomové hustoty ^{239}Np došlo absolutně k zhoršení z 1,2 % na 2,6 % a pro stejnou atomovou hustotu ^{239}Pu bylo pozorováno zhoršení z 1,1 % na 2,5 %. Odtud je patrné, že model aktinoidů při použití nominálních mikroskopických účinných průřezů pro historie se změnami provozních parametrů nepřináší slibné výsledky, a tedy bude nutné najít jiný přístup k mikroskopickým účinným průřezům tak, aby se zlepšila spolehlivost modelu.

V kapitole 1 byl nastíněn obvyklý postup parametrisace grupových konstant v makrokódech, ke kterému jsou využívány výpočty odskoků. Samotný výpočet odskoků probíhá tak, že mikrokód provede výpočet vyhoření na nominálních parametrech a již nepřepočítává atomové hustoty jednotlivých nuklidů. Odskok je pak počítán pomocí transportního výpočtu při stejném izotopickém složení, ale se změněnými hodnotami provozních parametrů. Podobný přístup byl použit i pro mikroskopické účinné průřezy v modelu aktinoidů, a tedy při výpočtu nominální provozní historie v HELIOSu bylo nutné definovat odskoky pro analyzované historie se změnami provozních parametrů. Navíc je nutné poznamenat, že při použití odskokových mikroskopických účinných průřezů je nezbytné zohlednit stejný podíl koncentrací přechodových štěpných produktů, kde se především jedná o otravy z řetězce $^{135}I - ^{135}Xe$, jejichž podíl je nejvíce závislý na změně hladin výkonu. Jelikož podíl přechodových štěpných produktů odpovídá jiné hodnotě pro korektorový nominální stav a odskok v korektorovém stavu, nelze použít přímo mikroskopický účinný průřez pro odskok v korektorovém stavu, ale je nutné provést opravu. Při výpočtu odskoku v HELIOSu je uvažován nominální stav s odpovídající koncentrací rovnovážných nuklidů a dále je určen odskok pro změněný parametr v prediktorovém stavu z prediktorového nominálního stavu, ve kterých koncentrace rovnovážných nuklidů odpovídá nominálnímu stavu. Následně je přepočítán obsah rovnovážných nuklidů a určen z korektorového nominálního stavu korektorový stav se změněnými parametry, ve kterém již koncentrace rovnovážných nuklidů odpovídá změněnému provoznímu stavu. Aby bylo zajištěno, že pro mikroskopický účinný průřez se změněným parametrem $\sigma_{r,g}^{alt}$ bude uvažována stejná koncentrace rovnovážných nuklidů jako při nominálním stavu, je nezbytné provést následující opravu

$$\sigma_{r,g}^{alt} = \sigma_{r,g}^{nom,C} + (\sigma_{r,g}^{branch,P} - \sigma_{r,g}^{nom,P}), \quad (2.12)$$

kde r značí daný typ reakce, g označuje energetickou grupu, $\sigma_{r,g}^{nom,C}$, resp. $\sigma_{r,g}^{nom,P}$ jsou mikroskopické účinné průřezy pro nominální stav v korektorovém, resp. prediktorovém stavu a $\sigma_{r,g}^{branch,P}$ jsou mikroskopické účinné průřezy pro odskok v prediktorovém stavu [1].



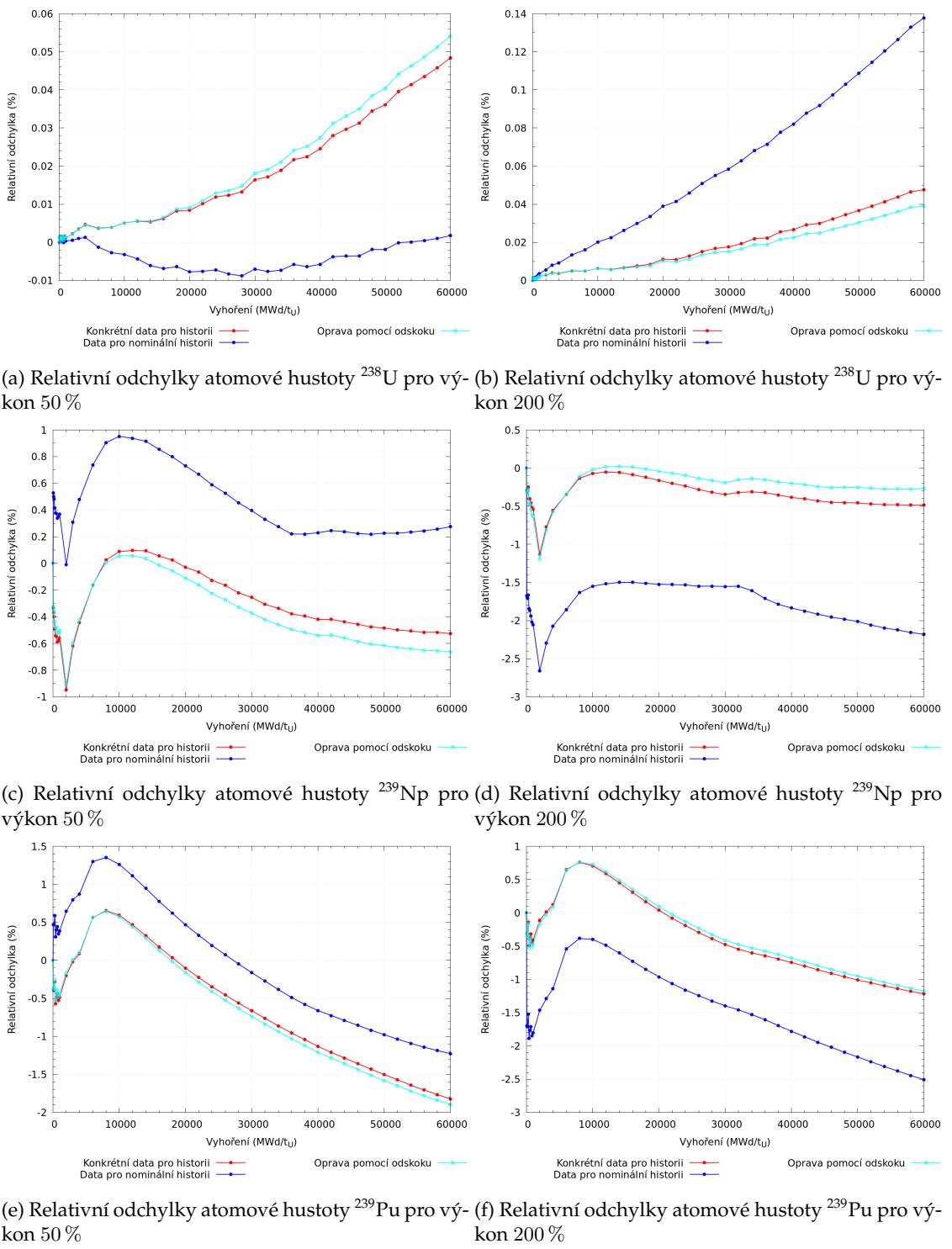
Obrázek 2.7: Závislost atomových hustot na vyhoření (vlevo) a relativní odchylky modelu od HELIOSu (vpravo) při použití konkrétních mikroskopických účinných průřezů a při použití mikroskopických účinných průřezů pro nominální historii pro provozní historii s 200 % nominálního výkonu

Výše uvedený postup opravy (2.12) byl v modelu aktinoidů aplikován na mikroskopické účinné průřezy pro absorpci a štěpení všech uvažovaných aktinoidů pro historie se změnami provozních parametrů. V následujícím textu bude sledována spolehlivost modelu při použití opravených mikroskopických průřezů a bude provedeno srovnání spolehlivosti při použití konkrétních mikroskopických účinných průřezů pro provozní historii a při použití mikroskopických účinných průřezů pro nominální historii. Je nutné připomenout, že ve všech přístupech k mikroskopickým účinným průřezům budou v efektivních přeměnách aktinoidů (2.4) použity konkrétní dvougrupové hustoty toků neutronů pro danou provozní historii vypočítané HELIOSem. Pro názornější srovnání spolehlivosti modelu při použití různých přístupů k mikroskopickým účinným průřezům budou dále zobrazeny jen relativní odchylky jednotlivých přístupů od referenčního výsledku vypočítaného pomocí HELIOSu.

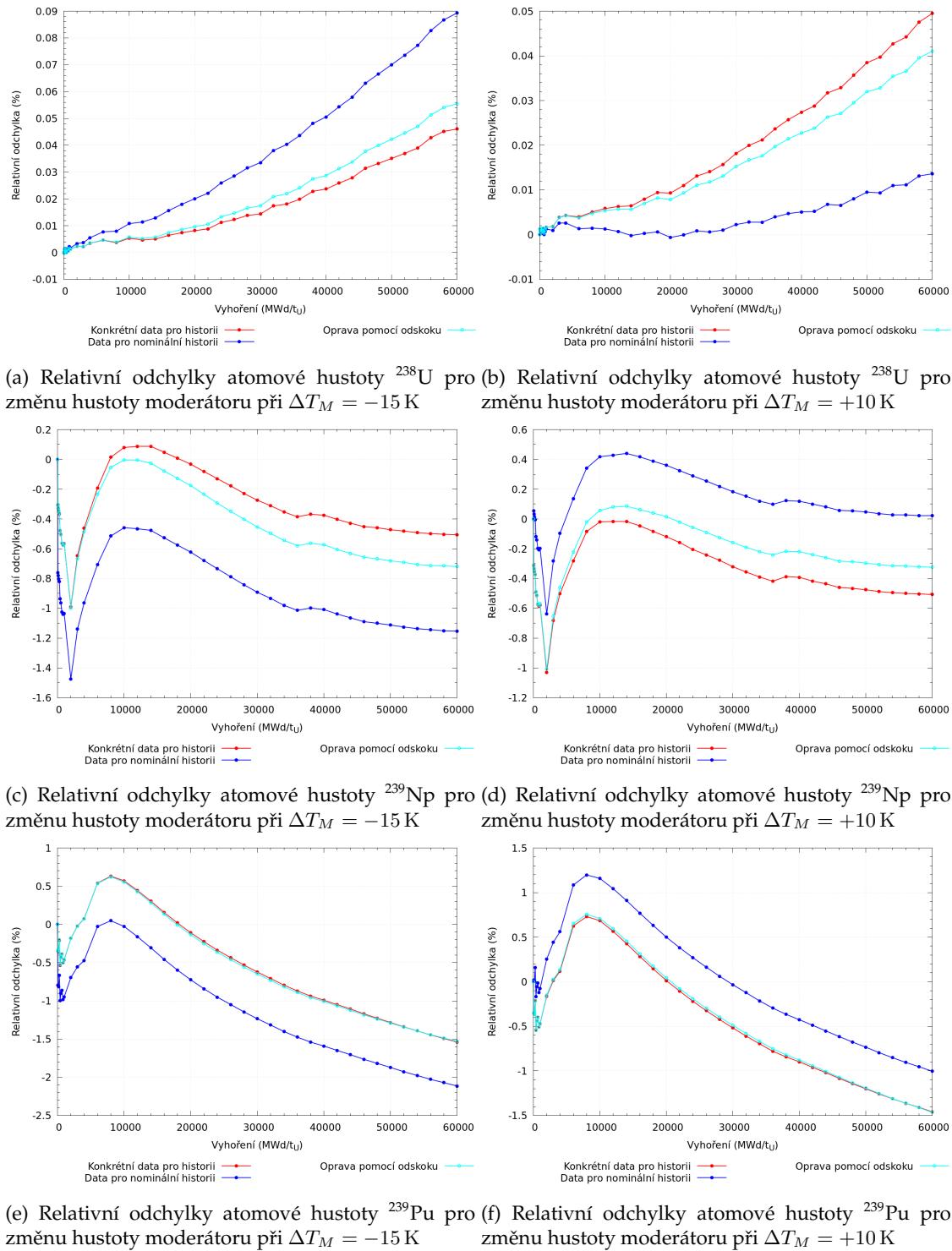
Nejprve byly testovány jednotlivé přístupy k mikroskopickým účinným průřezům pro provozní historie se změnou výkonu, přičemž získané výsledky jsou vykresleny na obrázku 2.8. Odtud je patrné, že při použití opravených mikroskopických účinných průřezů z odskoků se spolehlivost modelu pro uvažované aktinoidy výrazně zlepší ve srovnání s použitím dat pro nominální historii. Z obrázků 2.8a a 2.8b je patrné, že atomové hustoty ^{238}U vypočítané modelem s konkrétními daty a opravenými daty z odskoku vykazují pro obě výkonové hladiny mnohem lepší shodu než při použití dat pro nominální provozní historii. Obrázky 2.8c a 2.8d ukazují, že i pro atomovou hustotu ^{239}Np přineslo použití dat z odskoků zvýšení spolehlivosti modelu ve srovnání s použitím dat pro nominální provozní historii a relativní odchylky od referenčních dat z HELIOSu jsou na podobné úrovni jako při použití konkrétních dat pro danou historii. U atomové hustoty ^{239}Pu také vykazuje model pro obě výkonové hladiny velice dobrou spolehlivost při použití opravených mikroskopických účinných průřezů z odskoků, což je patrné z obrázků 2.8e a 2.8f, na kterých je relativní odchylka atomové hustoty ^{239}Pu při použití opravených dat z odskoků srovnatelná jako při použití konkrétních dat během celého uvažovaného vyhořívání.

Analogicky bylo provedeno testování i pro provozní historie se změnou hustoty moderátoru, jejichž výsledky jsou zobrazeny na obrázku 2.9. Je zřejmé, že použití opravených mikroskopických účinných průřezů z odskoků v modelu aktinoidů přispělo k výraznému zpřesnění výsledku ve srovnání s použitím mikroskopických účinných průřezů pro nominální historii i pro historie se změnou hustoty moderátoru. U atomové hustoty ^{239}Np lze pozorovat, že pro vyšší vyhoření model s opravenými daty z odskoků nevykazuje úplnou shodu s přístupem, kdy byla použita konkrétní data pro historii, ale i tak je pozorováno zlepšení oproti použití dat pro nominální historii. Obrázky 2.9e a 2.9f ukazují, že model při použití dat z odskoků predikuje stěžejní atomové hustoty ^{239}Pu téměř na stejně úrovni jako při použití konkrétních dat pro danou historii.

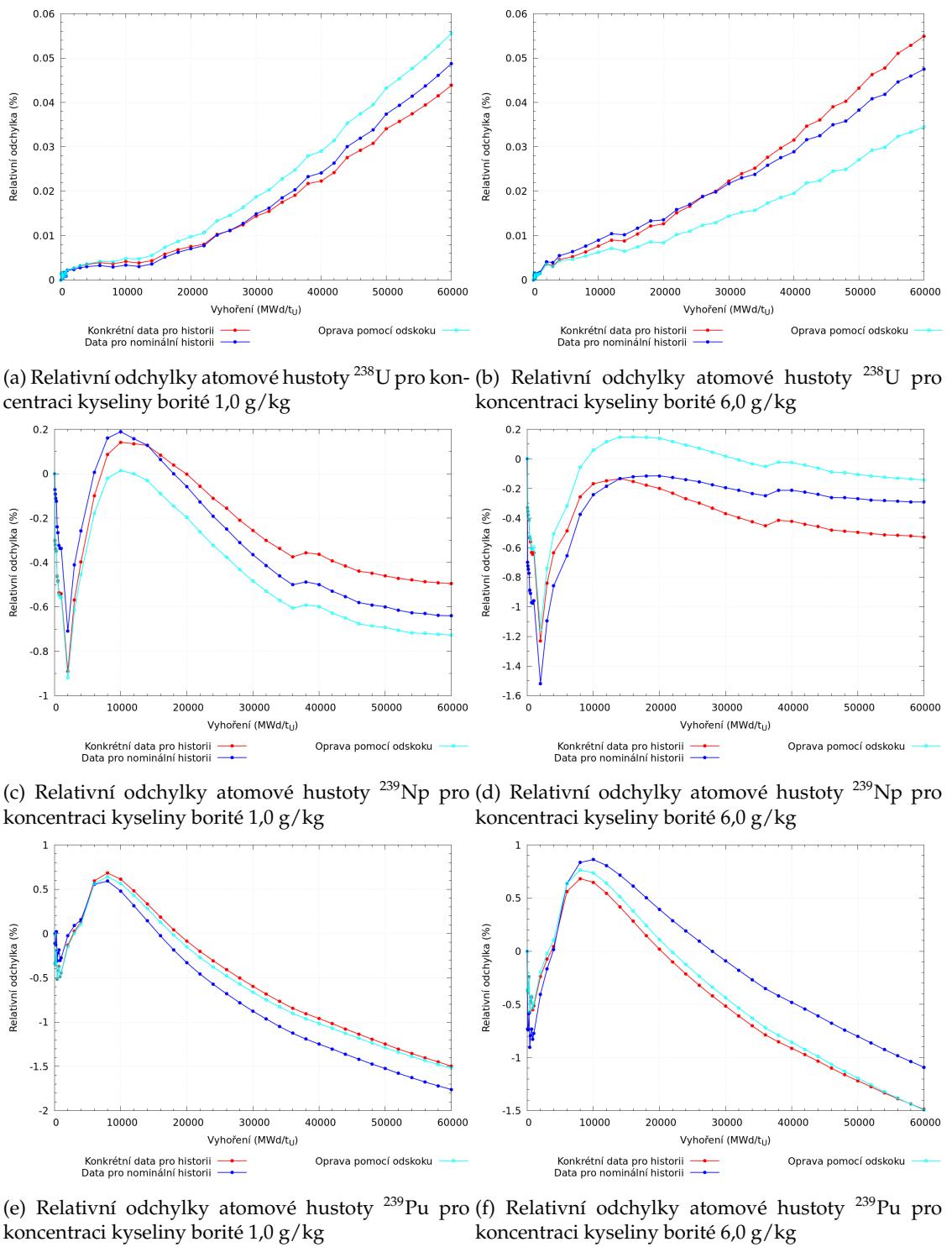
Poslední testované byly provozní historie se změnou koncentrace kyseliny borité v moderátoru, pro které jsou získané výsledky zobrazeny na obrázku 2.10. Ve srovnání s ostatními změnami provozních parametrů je z obrázku 2.10 patrné, že použití opravených mikroskopických účinných průřezů z odskoků v modelu obecně nepřináší výrazné zlepšení ve srovnání s tím, kdy byly v modelu použity mikroskopické účinné průřezy pro nominální historii. To je například patrné ze závislosti relativních odchylek atomových hustot ^{239}Np na vyhoření zobrazených na 2.10c a 2.10d. Z obrázků 2.10e a 2.10f je zřejmé, že pro stěžejní atomovou hustotu ^{239}Pu vykazuje na začátku vyhořívání použití dat z odskoků velice dobrou shodu s konkrétními daty pro danou historii nežli použití dat pro nominální historii. S rostoucím vyhořením se snižuje spolehlivost modelu při použití opravených dat z odskoků ve srovnání s konkrétními daty. Během uvažovaného vyhořívání je maximální rozdíl mezi těmito přístupy přibližně 0,1 % pro koncentraci kyseliny borité 1,0 g/kg a 0,2 % pro koncentraci kyseliny borité 6,0 g/kg.



Obrázek 2.8: Srovnání relativních odchylek atomové hustoty aktinoidů vypočítané pomocí modelu od referenčního výpočtu v HELIOSu pro provozní historie se změnou výkonu při použití různých přístupů k mikroskopickým účinným průřezům



Obrázek 2.9: Srovnání relativních odchylek atomové hustoty aktinoidů vypočítané pomocí modelu od referenčního výpočtu v HELIOSu pro provozní historie se změnou hustoty moderátoru při použití různých přístupů k mikroskopickým účinným průřezům



Obrázek 2.10: Srovnání relativních odchylek atomové hustoty aktinoidů vypočítané pomocí modelu od referenčního výpočtu v HELIOSu pro provozní historie se změnou koncentrace kyseliny borité při použití různých přístupů k mikroskopickým účinným průřezům

2.5.3 Spolehlivost modelu s parametrizovanými mikroskopickými účinnými průřezy

Doposud bylo ukázáno, že je možné pomocí modelu predikovat atomové hustoty aktinoidů pomocí opravených mikroskopických účinných průřezů z odskoků s uspokojivou přesností. Ovšem výpočty atomové hustoty aktinoidů byly provedeny vždy pouze pro konkrétní provozní stav, pro který byl počítán odskok. Při výpočtech aktivních zón se ale provozní parametry pohybují v širokém rozmezí hodnot, a jak už bylo zmíněno v předchozím textu, není možné napočítat homogenizované grupové konstanty pro všechny možné kombinace provozních parametrů. Aby bylo možné predikovat atomové hustoty aktinoidů pro libovolný provozní stav, byla v modelu použita parametrizace mikroskopických účinných průřezů podobná jako v případě makroskopických účinných průřezů (1.1). Mikroskopické účinné průřezy daného aktinoidu pro r -tou reakci v grupě g závislé na uvažovaných provozních parametrech v daném kroku vyhoření B lze získat ve tvaru

$$\sigma_{r,g}^{alt}(B, T_F, T_M, c_B) = \sigma_{r,g}^{nom}(B) + f_{r,g}^{(1)}(B, T_F) + f_{r,g}^{(2)}(B, T_M) + f_{r,g}^{(3)}(B, c_B), \quad (2.13)$$

kde značení provozních parametrů je shodné jako v rovnici (1.1), $\sigma_{r,g}^{nom}$ je r -tý mikroskopický účinný průřez v grupě g daného aktinoidu pro nominální provozní historii a $f_{r,g}^{(i)}$ jsou approximační funkce pro r -tou reakci v grupě g daného aktinoidu závislé pouze na jednom z uvažovaných provozních parametrů v kroku vyhoření B .

Vliv provozních historií se změnou výkonové hladiny je v parametrizaci mikroskopických účinných průřezů oceněn pomocí teploty paliva, a to z důvodu, že ve vstupním souboru HELIOSu jsou pomocí nástroje QUADRIGA definovány teploty paliva pro každý krok vyhoření na základě teplotního modelu. To znamená, že při stejném výkonu a teplotě moderátoru jsou během uvažovaného vyhořívání teploty paliva závislé na vyhoření. V modelu aktinoidů pak byla approximační funkce $f_{r,g}^{(1)}$ závislá na daném vyhoření B a aktuální teplotě paliva T_F uvažována ve tvaru

$$f_{r,g}^{(1)}(B, T_F) = \begin{cases} \frac{\sigma_{r,g}^-(B) - \sigma_{r,g}^{nom}(B)}{\sqrt{T_F^-(B)} - \sqrt{T_F^{nom}(B)}} \left[\sqrt{T_F} - \sqrt{T_F^{nom}(B)} \right] & \text{pro } T_F \leq T_F^{nom} \\ \frac{\sigma_{r,g}^+(B) - \sigma_{r,g}^{nom}(B)}{\sqrt{T_F^+(B)} - \sqrt{T_F^{nom}(B)}} \left[\sqrt{T_F} - \sqrt{T_F^{nom}(B)} \right] & \text{pro } T_F > T_F^{nom}, \end{cases} \quad (2.14)$$

ve které byla pro mikroskopické účinné průřezy daných nuklidů uvažována závislost na odmocnině z teploty paliva. K sestrojení approximační funkce byly použity tři body, a to konkrétně odskoky na zápornou změnu výkonové hladiny, kladnou změnu výkonové hladiny a nominální provozní stav. Approximační funkce byla sestrojena po částech, tj. její směrnice je závislá na hodnotě teploty paliva pro daný provozní stav. V rovnici (2.14) pak jednotlivé členy představují

- $\sigma_{r,g}^-$, resp. $\sigma_{r,g}^+$, resp. $\sigma_{r,g}^{nom}$ mikroskopický účinný průřez pro r -tou reakci v grupě g daného nuklidu závislý na daném vyhoření B pro záporný odskok, resp. kladný odskok, resp. nominální stav,
- T_F^- , resp. T_F^+ , resp. T_F^{nom} teplotu paliva závislou na daném vyhoření B pro záporný odskok, resp. kladný odskok, resp. nominální provozní stav.

Analogicky bylo postupováno i pro approximační funkci $f_{r,g}^{(2)}$, která zohledňuje vliv provozních historií se změnou hustoty moderátoru na mikroskopické účinné průřezy. Změny hustoty moderátoru jsou parametrizovány pomocí teploty moderátoru s uvažovanou lineární závislostí. K sestrojení approximační funkce opět byly použity odskoky na zápornou a kladnou změnu hustoty moderátoru a nominální provozní stav, přičemž approximační funkce byla sestrojena taktéž po částech. Tvar approximační funkce $f_{r,g}^{(2)}$ závislý na daném vyhoření B a teplotě moderátoru T_M je

následující

$$f_{r,g}^{(2)}(B, T_M) = \begin{cases} \frac{\sigma_{r,g}^-(B) - \sigma_{r,g}^{nom}(B)}{T_M^-(B) - T_M^{nom}(B)} [T_M - T_M^{nom}(B)] & \text{pro } T_M \leq T_M^{nom} \\ \frac{\sigma_{r,g}^+(B) - \sigma_{r,g}^{nom}(B)}{T_M^+(B) - T_M^{nom}(B)} [T_M - T_M^{nom}(B)] & \text{pro } T_M > T_M^{nom}, \end{cases} \quad (2.15)$$

ve které se značení mikroskopických účinných průřezů shoduje s rovnicí (2.14) a T_M^- , resp. T_M^+ , resp. T_M^{nom} představují teplotu moderátoru pro záporný odskok, resp. kladný odskok, resp. nominální stav.

Poslední approximační funkce $f_{r,g}^{(3)}$ zohledňuje vliv koncentrace kyseliny borité na mikroskopické účinné průřezy. V approximační funkci byla uvažována lineární závislost mikroskopických účinných průřezů na koncentraci kyseliny borité a jako v předchozích případech byla opět sestrojena pomocí tří bodů, a to kladného a záporného odskoku a nominálního stavu. Tvar approximační funkce $f_{r,g}^{(3)}$ závislé na vyhoření a aktuální koncentraci kyseliny borité je následující

$$f_{r,g}^{(3)}(B, c_B) = \begin{cases} \frac{\sigma_{r,g}^-(B) - \sigma_{r,g}^{nom}(B)}{c_B^-(B) - c_B^{nom}(B)} [c_B - c_B^{nom}(B)] & \text{pro } c_B \leq c_B^{nom} \\ \frac{\sigma_{r,g}^+(B) - \sigma_{r,g}^{nom}(B)}{c_B^+(B) - c_B^{nom}(B)} [c_B - c_B^{nom}(B)] & \text{pro } c_B > c_B^{nom}, \end{cases} \quad (2.16)$$

kde značení mikroskopických účinných průřezů je v souladu s předchozími approximačními funkcemi a c_B^- , resp. c_B^+ , resp. c_B^{nom} značí odskok se zápornou změnou koncentrace kyseliny borité vůči nominálnímu stavu, resp. kladnou změnou koncentrace kyseliny borité, resp. nominální stav.

V modelu aktinoidů byl definován parametrizační manifest pro mikroskopické průřezy, který je vypsán ve zdrojovém kódu 2.2. V něm se definují odskoky na historie se změnami výkonu, hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité, které jsou použity pro určení koeficientů approximačních funkcí (2.14), (2.15) a (2.16). Výhodou tohoto přístupu je, že lze jednoduše měnit odskoky, které mají být použity k určení approximačních koeficientů. Při testování spolehlivosti modelu byly pro parametrizaci mikroskopických účinných průřezů zvoleny odskoky na provozní historie, se kterými probíhalo testování v podkapitole 2.5.2 a které jsou vypsány ve zdrojovém kódu 2.2. Opět je nutné připomenout, že v efektivních přeměnách nuklidů (2.4) v modelu aktinoidů byly spolu s parametrizovanými mikroskopickými účinnými průřezy použity přesné hodnoty hustot toku neutronů pro danou provozní historii, které byly získány na základě výpočtu v HE-LIOSu.

```
module Manifest

BRANCHES = {
    power: %w{HFP-POW050 HFP-POW200},
    coolant_density: %w{HFP-MD290 HFP-MD315},
    boron_concentration: %w{HFP-BC100 HFP-BC600}
}

end
```

Zdrojový kód 2.2: Parametrizační manifest pro mikroskopické účinné průřezy v modelu aktinoidů

Spolehlivost modelu aktinoidů s parametrizovanými mikroskopickými účinnými průřezy bude ukázána pouze na atomové hustotě ^{239}Pu . Tím bude jistě možné identifikovat spolehlivost modelu pro celý řetězec aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu , neboť k výpočtu atomové hustoty ^{239}Pu jsou využity atomové hustoty ostatních aktinoidů vypočítané pomocí modelu. To znamená, že pokud by došlo k nepřesnostem ve výpočtu atomových hustot ^{238}U nebo ^{239}Np , tak by se to zcela jistě projevilo na atomové hustotě ^{239}Pu . Pro testování byly vybrány provozní historie, které měly provozní parametry odpovídající polovině approximačního intervalu pro parametrizaci mikroskopických účinných průřezů, tj. provozní historie

- s výkonovou hladinou 75 % a 150 % nominálního výkonu,
- se změnou hustoty moderátoru při změně teploty moderátoru o $-7,5$ K a $+5$ K vůči nominálnímu stavu,
- s koncentrací kyseliny borité 1,9 g/kg a 4,4 g/kg,

a to z důvodu, že v polovině approximačního intervalu je předpokládána největší nepřesnost parametrizace mikroskopických účinných průřezů.

Na obrázku 2.11a jsou zobrazeny atomové hustoty ^{239}Pu v závislosti na vyhoření pro provozní historie s hladinami 75 % a 150 % nominálního výkonu, které byly vypočítány pomocí modelu s konkrétními mikroskopickými účinnými průřezy pro danou historii získanými z výpočtu v HELIOSU a s parametrizovanými mikroskopickými účinnými průřezy podle vztahu (2.13). Obrázek 2.11b porovnává oba přístupy k mikroskopickým účinným průřezům v modelu s referenčními výsledky z HELIOSu. Z porovnání je patrné, že model vykazuje téměř stejnou spolehlivost s parametrizovanými účinnými průřezy jako s jejich konkrétními hodnotami a jejich rozdíl během celého uvažovaného vyhořívání nepřekročí 0,05 %. To znamená, že pro historie se změnou výkonu lze v modelu použít parametrizované mikroskopické účinné průřezy s dosažením přijatelných hodnot atomových hustot aktinoidů.

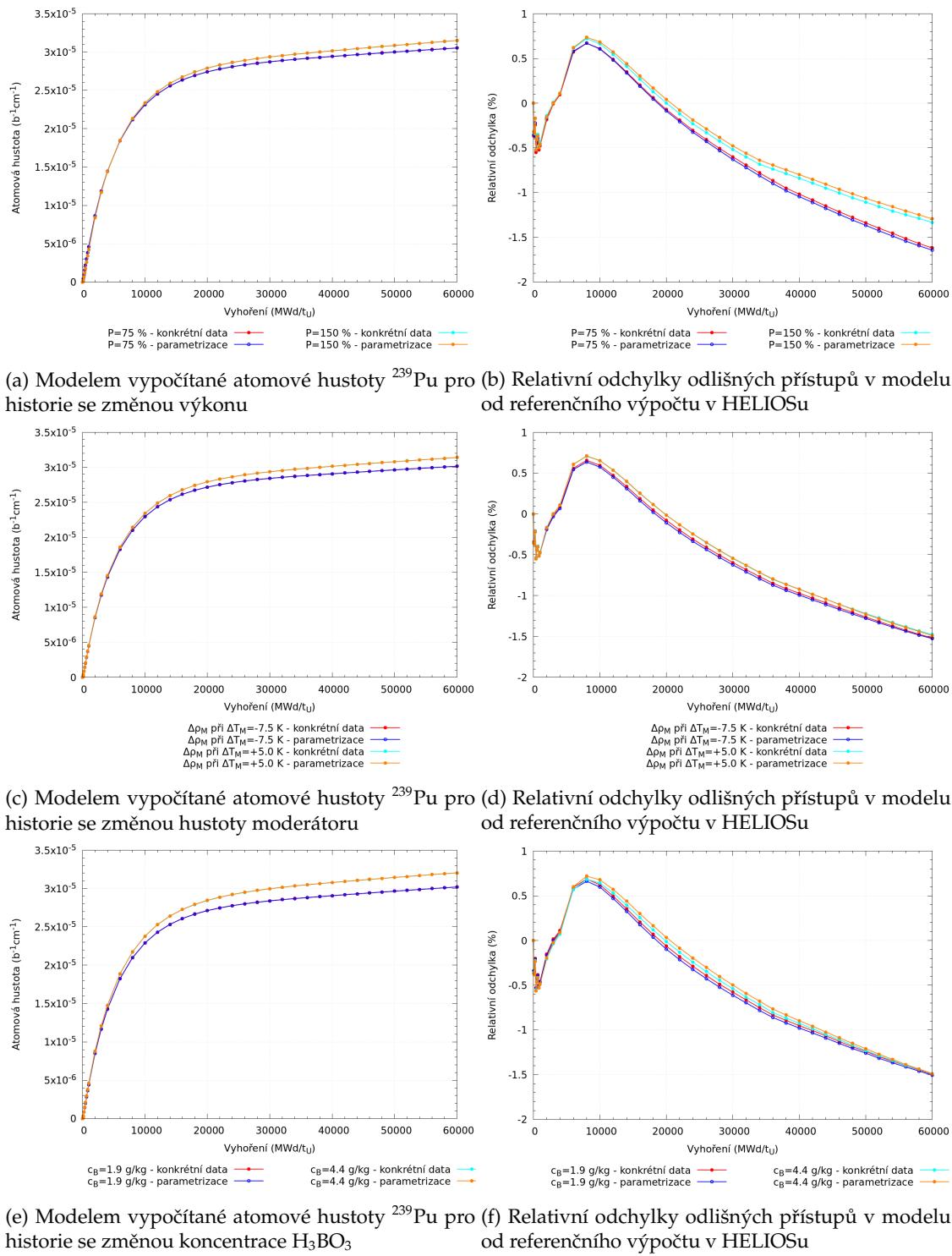
Následně byly testovány historie se změnou hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité, pro které jsou závislosti atomové hustoty ^{239}Pu na vyhoření vykreslené na obrázcích 2.11c a 2.11e. Odtud je patrné, že bylo dosaženo téměř identických hodnot atomové hustoty ^{239}Pu při použití parametrizovaných mikroskopických účinných průřezů jako v případě jejich konkrétních hodnot. Obrázky 2.11d a 2.11f ukazují relativní odchylky obou přístupů k mikroskopickým účinným průřezům od referenčních výsledků z HELIOSu. Je opět zřejmé, že rozdíly mezi oběma přístupy k mikroskopickým účinným průřezům jsou minimální, a to znamená, že i pro provozní historie se změnami hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité lze spolehlivě predikovat atomové hustoty ^{239}Pu při použití parametrizace mikroskopických účinných průřezů ve tvaru (2.13).

Do této chvíle byly uvažovány pouze historie se samostatnými změnami provozních parametrů, ale v reálných případech se současně mění více provozních parametrů najednou. Aby bylo opravdu možné prohlásit, že pomocí modelu lze predikovat atomové hustoty aktinoidů pro libovolnou provozní historii, bude nutné ověřit spolehlivost modelu s parametrizovanými mikroskopickými průřezy pro více současně se měnících provozních parametrů.

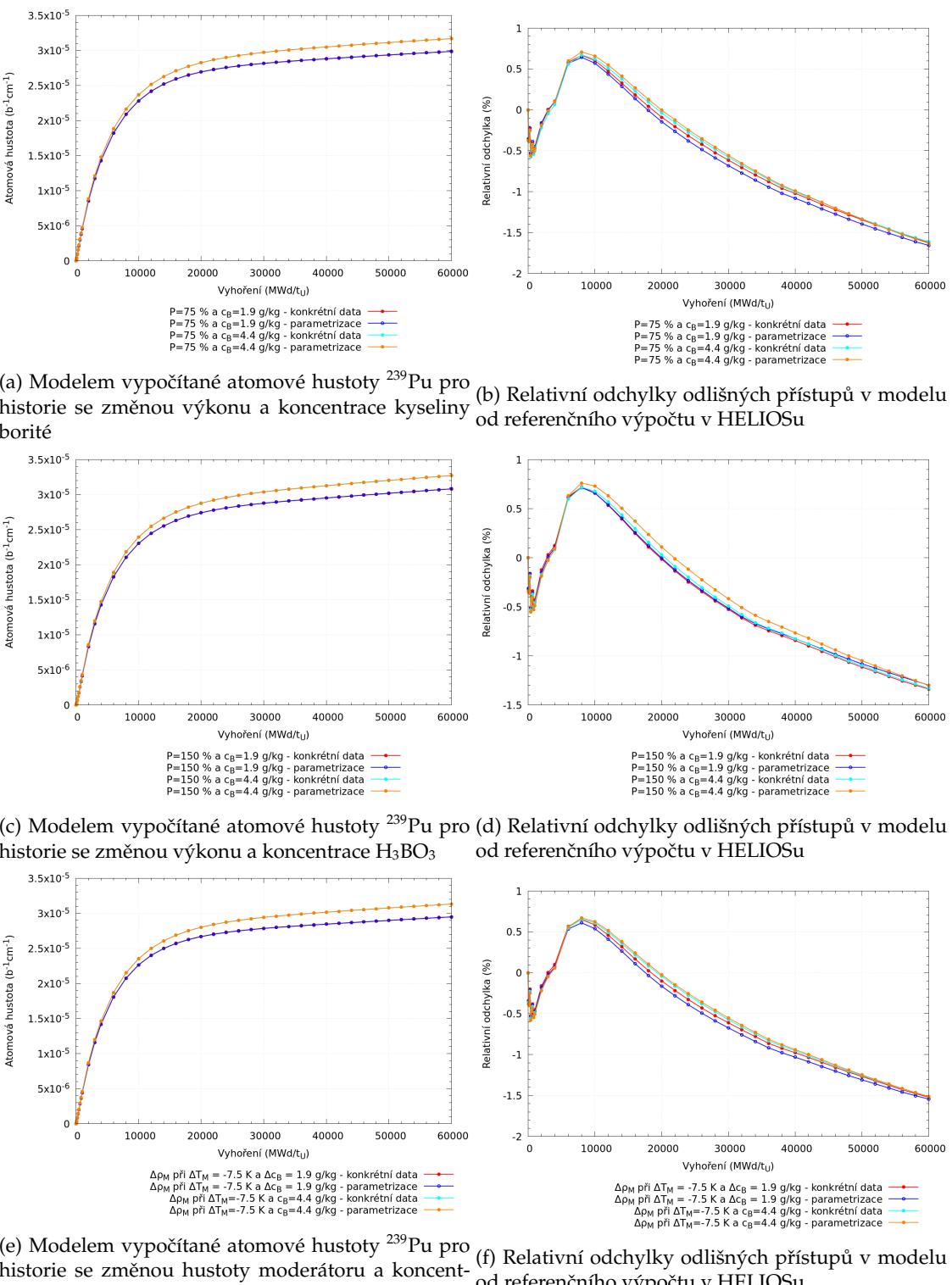
Na obrázcích 2.12a a 2.12c je vykreslena závislost atomové hustoty ^{239}Pu na vyhoření pro provozní historie se společnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité, přičemž byly uvažovány kombinace výkonů 75 % a 150 % a koncentrací kyseliny borité 1,9 g/kg a 4,4 g/kg, tj. hodnoty, ve kterých by parametrizace mikroskopických účinných průřezů v modelu měla vykazovat největší nepřesnosti. Ve všech případech kombinací výkonů a koncentrací kyseliny borité bylo při použití parametrizovaných mikroskopických účinných průřezů dosaženo téměř identických výsledků jako při použití jejich konkrétních hodnot. Relativní odchylky obou přístupů v modelu od referenčního výpočtu v HELIOSu jsou zobrazeny na obrázcích 2.12b a 2.12d, ze kterých je opět patrné, že i v případě společně se měnícího výkonu a koncentrace kyseliny borité vykazuje model s parametrizovanými mikroskopickými účinnými průřezy velmi dobrou spolehlivost, která je téměř na stejné úrovni jako při použití mikroskopických účinných průřezů pro konkrétní historii vypočítaných HELIOSem.

Poslední testované byly společné změny hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité, ve kterých byly uvažovány kombinace změn hustoty moderátoru při změně jeho teploty o $-7,5$ K a $+5$ K a koncentrací kyseliny borité 1,9 g/kg a 4,4 g/kg. Modelem vypočítané atomové hustoty ^{239}Pu v závislosti na vyhoření jsou vykresleny na obrázcích 2.12e a 2.13a, ze kterých je zřejmé, že i pro společné kombinace změn hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité bylo dosaženo téměř stejných hodnot při použití parametrizovaných a konkrétních mikroskopických účinných průřezů v modelu aktinoidů. Obrázky 2.12f a 2.13b pak zobrazují relativní odchylky obou přístupů k mikroskopickým účinným průřezům od referenčního výpočtu v HELIOSu.

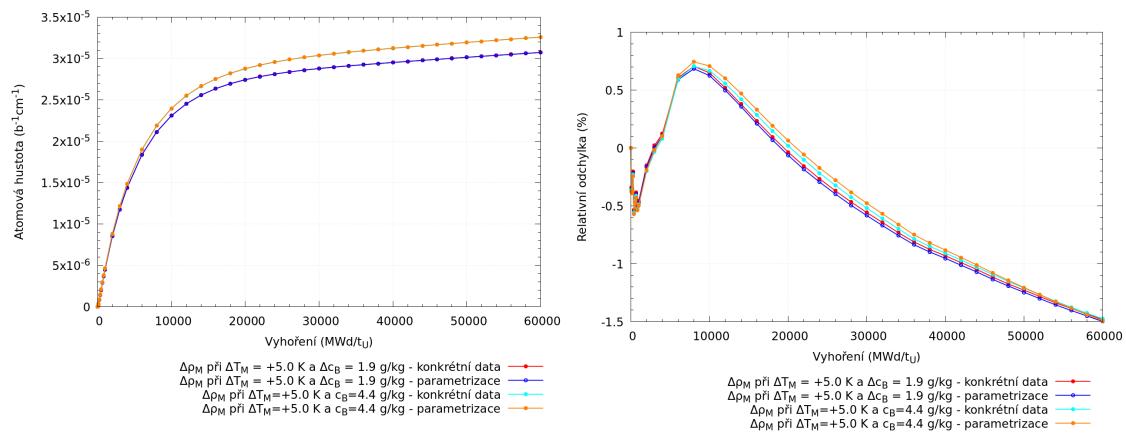
Závěrem lze konstatovat, že pomocí modelu řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu lze predikovat atomové hustoty s přijatelnou přesností pro historie s libovolnými změnami provozních parametrů s tím, že byly využity parametrisované mikroskopické účinné průřezy a konkrétní hustoty toku neutronů pro danou historii napočítané HELIOSem. V případě, že by model byl implementován do makrokódu, pak by byly použity hustoty toků neutronů ním vypočítané. Tímto byl splněn první bod nutný k zohlednění spektrální historie v parametrisaci makroskopických účinných průřezů a další kapitola se již bude zabývat opravami makroskopických účinných průřezů zohlednující právě spektrální historii.



Obrázek 2.11: Závislost atomových hustot ^{239}Pu na vyhření vypočítaných pomocí modelu s různými přístupy k mikroskopickým účinným průřezům (vpravo) a porovnání s referenčními výsledky z HELIOSu (vpravo)



Obrázek 2.12: Závislost atomových hustot ^{239}Pu na vyhoření vypočítaných pomocí modelu s různými přístupy k mikroskopickým účinným průřezům (vpravo) a porovnání s referenčními výsledky z HELIOSu (vpravo)



(a) Modelem vypočítané atomové hustoty ^{239}Pu pro historie se změnou hustoty moderátoru a koncentrace H_3BO_3

(b) Relativní odchylky odlišných přístupů v modelu od referenčního výpočtu v HELIOSu

Obrázek 2.13: Závislost atomových hustot ^{239}Pu na vyhření vypočítaných pomocí modelu s různými přístupy k mikroskopickým účinným průřezům (vpravo) a porovnání s referenčními výsledky z HELIOSu (vpravo)

Kapitola 3

Opravy účinných průřezů zohledňující spektrální historii

Z kapitoly 1 vyplynulo, že při stejném vyhoření a stejných okamžitých provozních parametrech (teplota paliva, hustota moderátoru aj.) se liší makroskopické účinné průřezy v závislosti na tom, za jakých provozních podmínek probíhalo vyhořívání, tj. makroskopické účinné průřezy jsou závislé na spektrální historii. Taktéž se ukázalo, že vhodným indikátorem spektrální historie by mohla být atomová hustota ^{239}Pu , kterou je možné pro libovolný provozní stav určit s přijatelnou přesností pomocí modelu řetězce aktinoidů $^{238}\text{U} - ^{239}\text{Pu}$, který byl popsán a jeho spolehlivost podrobně testována v kapitole 2. Díky možnosti predikovat atomové hustoty aktinoidů se nabízí, zdali by nebylo možné zohlednit vliv spektrální historie v parametrizaci makroskopických účinných průřezů pouze pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů. Předtím, nežli bude pokračováno s parametrizací s využitím indikátoru spektrální historie ^{239}Pu , bude zhodnocena možnost opravy makroskopických účinných průřezů pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů.

3.1 Přímá úprava pomocí atomových hustot aktinoidů

Ve studii [13] je popsán hybridní model vyhořívání v makrokódu SIMULATE-4, ve kterém jsou k opravě makroskopických účinných průřezů použity atomové hustoty vybraných nuklidů. Makroskopické účinné průřezy pro jednotlivé nody v závislosti na daných provozních podmínkách jsou získávány jako

$$\Sigma_{r,g}^{actual} = \Sigma_{r,g}^{SA} (B, \rho_M, T_F, \dots) + \sum_{i \in NUC} \sigma_{r,g}^{SA,i} (B, \rho_M, T_F, \dots) (N_i^{actual} - N_i^{SA}), \quad (3.1)$$

kde

- r značí danou reakci,
- g označuje energetickou grupu,
- SA reprezentuje značení pro samostatný palivový soubor,
- $\Sigma_{r,g}^{SA}$ je makroskopický účinný průřez pro daný palivový soubor závislý na provozních podmínkách,
- $\sigma_{r,g}^{SA,i}$ jsou mikroskopické účinné průřezy pro i -tý nuklid daného palivového souboru závislé na provozních podmínkách,

- N_i^{actual} , resp. N_i^{SA} jsou atomové hustoty i -tého nuklidu pro aktuální provozní stav, resp. pro nominální provozní stav
- NUC je množina nuklidů, které byly uvažovány v hybridním modelu.

Rozdíl $N_i^{actual} - N_i^{SA}$ v rovnici (3.1) zohledňuje fakt, že se liší lokální atomové hustoty jednotlivých nuklidů pro historii s aktuálními provozními podmínkami oproti nominální provozní historii, tj. je zde zohledněna odlišná spektrální historie. Do opravy bylo zařazeno přibližně 50 nuklidů (15 aktinoidů, 30 štěpných produktů, izotopy bóru a gadolinia). Atomové hustoty jednotlivých nuklidů pro nominální i aktuální provozní stav jsou určovány pomocí pre-procesoru makrokódu SIMULATE-4. Přístup uvedený ve vztahu (3.1) vykazoval ve studii [13] velice dobré zlepšení ve srovnání s nezahrnutím spektrální historie do parametrizace makroskopických účinných průřezů. Výhody hybridního modelu se zejména projevily v případech, kdy během provozu reaktoru byly výrazně měněny hladiny výkonu, a to především kvůli tomu, že byly zohledněny nuklidы s krátkým poločasem rozpadu, jejichž atomová hustota je velice citlivá na změny výkonu [5]. Podobný přístup byl popsán i ve článku [14] pro program DYN3D, ve kterém bylo v hybridním modelu uvažováno až 300 nuklidů, jejichž atomové hustoty byly určovány na základě Chebysheovy approximace racionálními funkciemi (CRAM).

Z výše uvedeného je patrné, že pouze znalost atomových hustot aktinoidů ^{238}U , ^{239}Np a ^{239}Pu nebude k opravě makroskopických účinných průřezů pravděpodobně dostatečná. Z tohoto důvodu byl model z kapitoly 2 rozšířen o další důležité aktinoidy, a to konkrétně o řetězec ^{235}U - ^{236}U a také byl doplněn řetězec ^{238}U - ^{239}Pu o aktinoidy ^{240}Pu a ^{241}Pu . Díky tomu, že v modelu byla pro řešení atomových hustot implementována Batemanova metoda, stačilo v modelu udělat pouze několik jednoduchých úprav, z nichž nejvýznamnější jsou vypsány ve zdvojovém kódu 3.1.

```
class PredictConcentration

    def initialize(histories, nominal_option, altered_option)
        @nuclides = { "chainU238" => ["U238", "Np239", "Pu239", "Pu240", "Pu241"], \
                      "chainU235" => ["U235", "U236"] }
        @init = { "chainU238" => {1 => "U238", 2 => "Np239", 3 => "Pu239", \
                                    4 => "Pu240", 5 => "Pu241"}, "chainU235" => {1 => "U235", 2 => "U236"} }
        ...
    end

    ...

end
```

Zdrojový kód 3.1: Upravení modelu pro řetězce aktinoidů ^{235}U - ^{236}U a ^{238}U - ^{241}Pu

Předtím, nežli bude provedena oprava účinných průřezů pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů, je důležité ověřit, zdali zahrnutí pouze uvažovaných aktinoidů

$$A = \{^{235}\text{U}, ^{236}\text{U}, ^{238}\text{U}, ^{239}\text{Np}, ^{239}\text{Pu}, ^{240}\text{Pu}, ^{241}\text{Pu}\} \quad (3.2)$$

může přinášet slibné výsledky při opravě účinných průřezů. Je zřejmé, že zohlednění spektrální historie pouze v podobě atomových hustot uvažovaných aktinoidů bude fungovat pro případ makroskopických účinných průřezů pro štěpení, ve kterých se projeví pouze zanedbání minoritních aktinoidů. Ale je otázkou, zdali tento postup bude aplikovatelný na makroskopické účinné průřezy pro absorpci, neboť pro odlišné provozní historie se liší i izotopické složení štěpných produktů, na kterých je také nezanedbatelná absorpce. Ověření tohoto předpokladu bylo provedeno pomocí provedených separátních výpočtů v HELIOSu pro historie se změněnými provozními parametry, ve kterých byl definován odskok na nominální provozní stav, čímž bylo zajištěno, že byl oceněn pouze vliv odlišné spektrální historie mezi historiemi se změnou provozních parametrů a nominální historií. Následně byly vypočítány rozdíly makroskopických účinných průřezů pro absorpci v tepelné grupě zohledňující pouze vliv spektrální historie ve tvaru

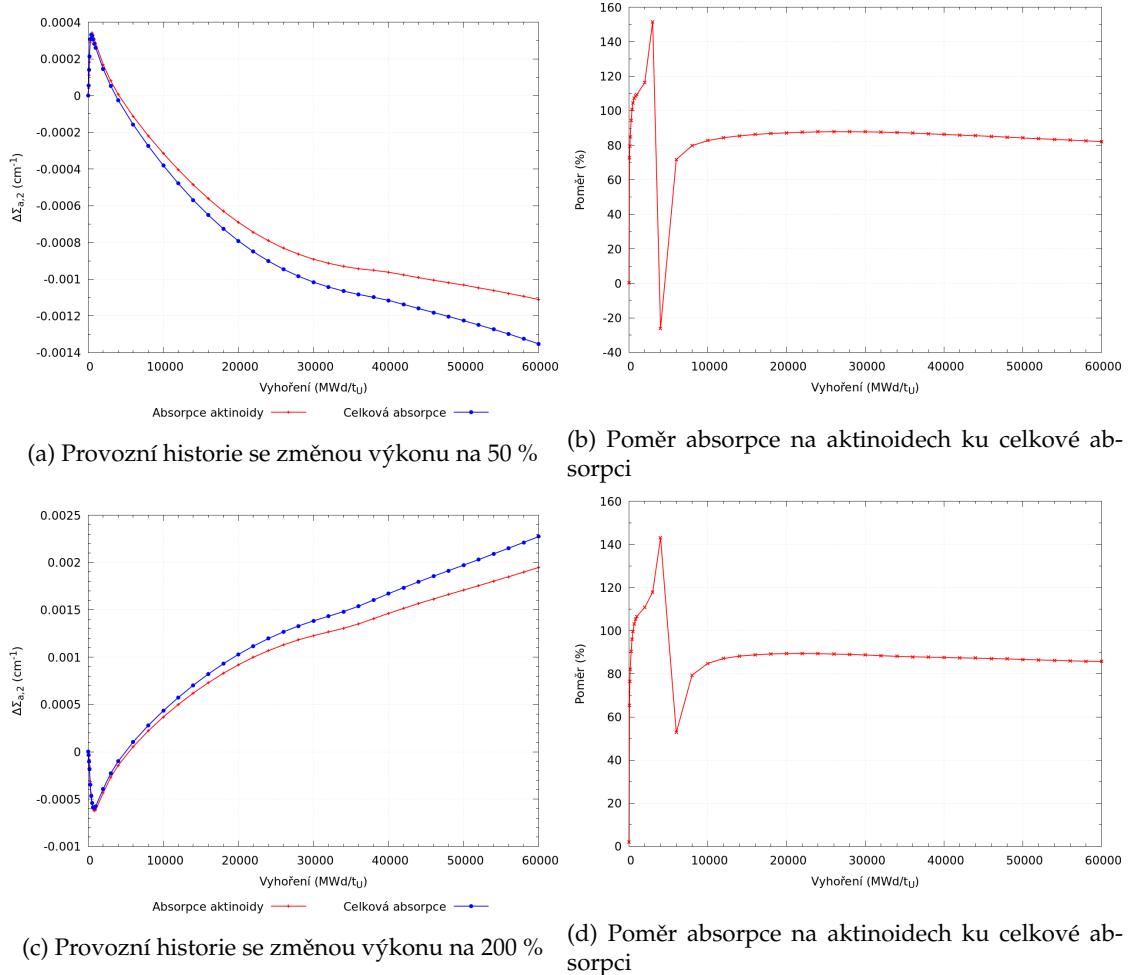
$$\Delta\Sigma_{a,2}^{sh} = \Sigma_{a,2}^{to,nom} - \Sigma_{a,2}^{nom}, \quad (3.3)$$

kde $\Sigma_{a,2}^{to,nom}$ značí makroskopický účinný průřez odskočený ze změněné historie na nominální a $\Sigma_{a,2}^{nom}$ je makroskopický účinný průřez pro nominální historii. Následně byla vypočítána absorpce v tepelné grupě na uvažovaných aktinoidech způsobená odlišným izotopickým složením mezi historiemi se změnami provozních parametrů a nominální historií ve tvaru

$$\Delta\Sigma_{a,2}^A = \sum_{i \in A} \sigma_{a,2}^{nom,i} (N_i^{alt} - N_i^{nom}), \quad (3.4)$$

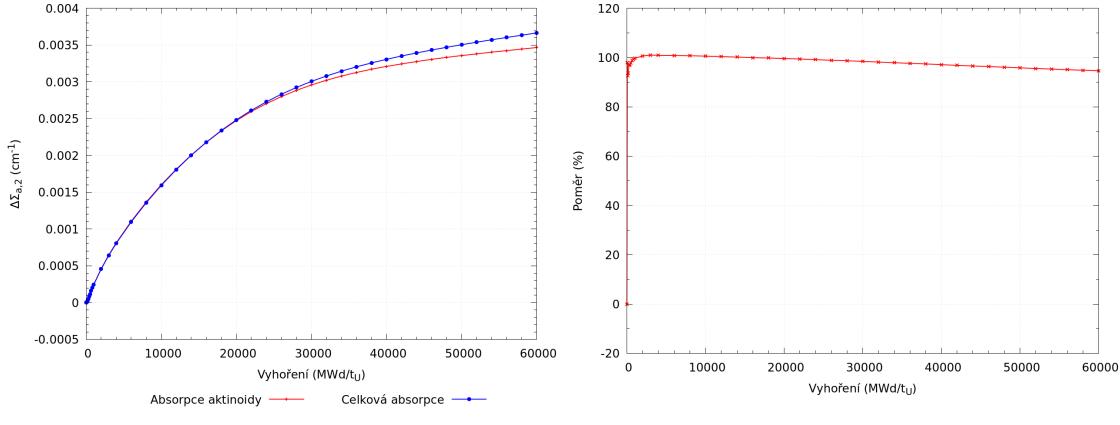
kde $\sigma_{a,2}^{nom,i}$ je mikroskopický účinný průřez pro absorpci v tepelné grupě i -tého aktinoidu pro nominální historii a N_i^{alt} , resp. N_i^{nom} jsou atomové hustoty i -tého aktinoidu pro historii se změnou provozních parametrů, resp. nominální provozní historii a konečně index i představuje uvažované aktinoidy uvedené v (3.2). Je důležité poznamenat, že ve vztahu (3.4) byly použity hodnoty všech veličin napočítané pomocí HELIOSu a dále, že zde musí být skutečně použit mikroskopický účinný průřez pro nominální historii, neboť je zkoumána změna absorpce zapříčiněná odlišnou spektrální historií vztažená k nominální provozní historii.

Je zřejmé, že v největší míře se absorpce na štěpných produktech bude projevovat pro historie se změnami výkonu, a to z důvodu, že výkon je úměrný počtu štěpení. Porovnání změn celkové absorpce a absorpce na aktinoidech pro historie s výkonovými hladinami 50 % a 200 % nominálního výkonu je vykresleno na obrázcích 3.1a a 3.1c, ze kterých je patrné, že velká část absorpce se právě odehrává na aktinoidech. Obrázky 3.1b a 3.1d ukazují, že po ustálení atomových hustot rovnovážných nuklidů představuje absorpce na aktinoidech více než 80 % z celkové absorpce



Obrázek 3.1: Porovnání celkové absorpce pro tepelnou grupu způsobenou odlišnou spektrální historií s absorpcí na vybraných aktinoidech pro provozní historie se změnou výkonu

pro obě výkonové hladiny. To znamená, že zahrnutím uvažovaných aktinoidů do opravy účinných průřezů je možné postihnout velkou část absorpce způsobenou odlišnou spektrální historií. Navíc je nutné si uvědomit, že historie se změnou výkonu vykazují největší rozdíly z hlediska odlišného izotopického složení štěpných produktů od nominální provozní historie. Například pro historie se změnami koncentrace kyseliny borité bude absorpce na aktinoidech představovat větší poměr z celkové absorpce, což lze pozorovat z obrázku 3.2b. Odtud je patrné, že téměř veškerá absorpce se odehrává na aktinoidech, a tedy pro historie se změnou koncentrace kyseliny borité bude oprava účinných průřezů pomocí úpravy atomových hustot aktinoidů vykazovat velice dobrou spolehlivost.



(a) Provozní historie s koncentrací kyseliny borité 6 g/kg (b) Poměr absorpce na aktinoidech ku celkové absorpci

Obrázek 3.2: Porovnání celkové absorpce pro tepelnou grupu způsobenou odlišnou spektrální historií s absorpcí na vybraných aktinoidech pro provozní historii se změnou koncentrace kyseliny borité

Nyní lze již přistoupit k samotné opravě účinných průřezů pomocí úpravy atomových hustot aktinoidů. Podobně jako ve vztahu (3.1) bude v parametrizaci makroskopických účinných průřezů (1.9) uvažována aproximační funkce zohledňující vliv spektrální historie závislá na atomových hustotách příslušných aktinoidů N_i v daném kroku vyhoření B ve tvaru

$$h_{r,g}(B, N_i) = \sum_{i \in A} \sigma_{r,g}^{nom,i}(B) \left[N_i^{alt}(B) - N_i^{nom}(B) \right], \quad (3.5)$$

kde $\sigma_{r,g}^{nom,i}$ je mikroskopický účinný průřez i -tého aktinoidu pro r -tou reakci v grupě g pro nominální stav v daném kroku vyhoření N_i^{alt} , resp. N_i^{nom} jsou atomové hustoty i -tého aktinoidu pro historie se změnou provozních parametrů, resp. pro nominální provozní historii a konečně index i jde přes množinu aktinoidů A uvedenou v (3.2).

Samotné provedení opravy makroskopických účinných průřezů pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů zohledňující spektrální historii v daném kroku vyhoření bude provedeno podle následujícího vztahu

$$\Sigma_{r,g}^{alt,sh}(B, N_i) = \Sigma_{r,g}^{nom}(B) + h_{r,g}(B, N_i), \quad (3.6)$$

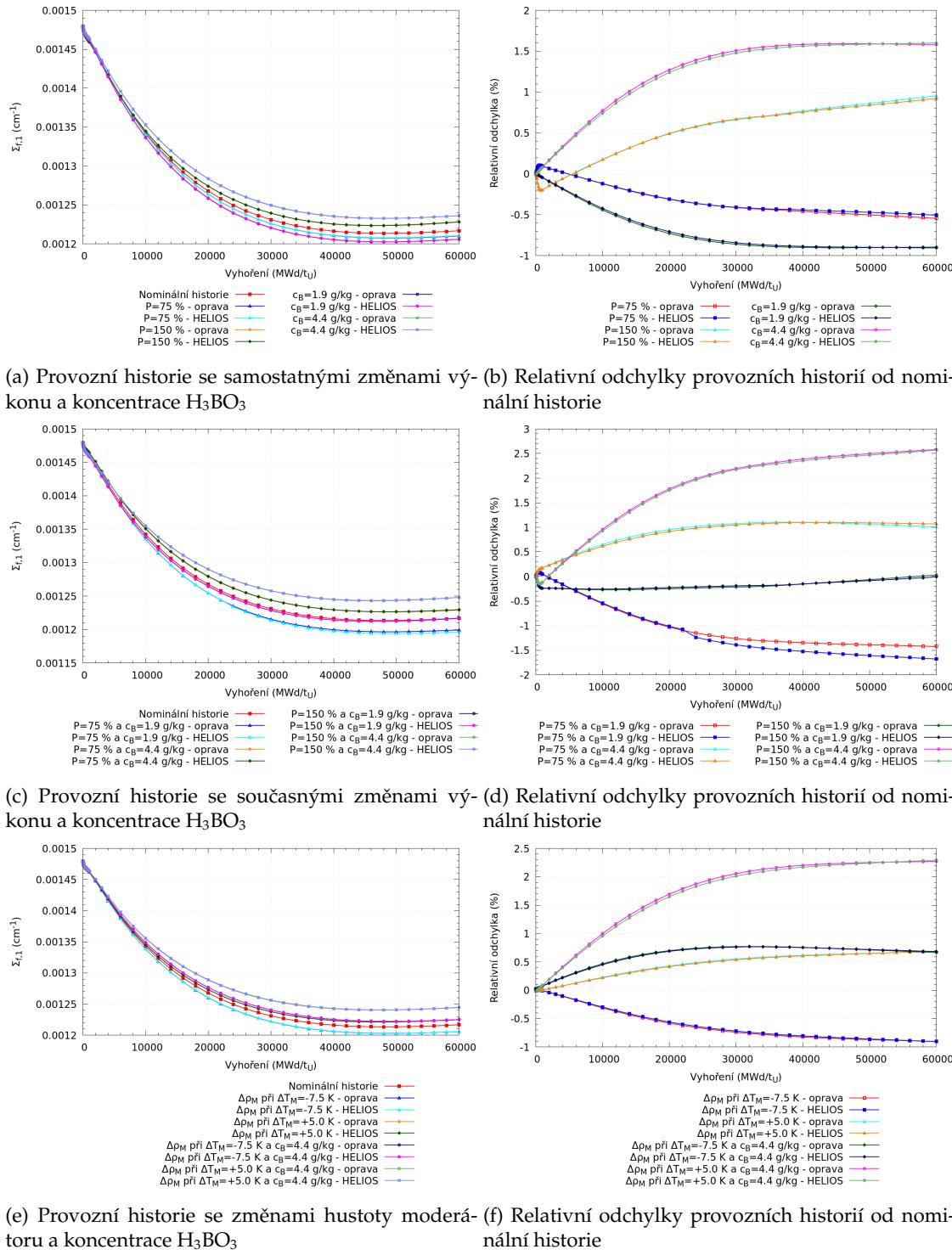
kde $\Sigma_{r,g}^{nom}$ je makroskopický účinný průřez pro historii s nominálními provozními parametry a $h_{r,g}$ je aproximační funkce zohledňující spektrální historii ve smyslu rovnice (3.5). V rovnici (3.6) budou atomové hustoty daných aktinoidů pro historie se změnou provozních parametrů N_i^{alt} určovány pomocí implementovaného modelu aktinoidů, přičemž atomové hustoty daných aktinoidů pro nominální historii N_i^{nom} nebudou brány přímo z výstupního souboru HELIOSu, ale budou také počítány pomocí modelu. Důvodem je, aby atomové hustoty aktinoidů pro historie se změnami provozních parametrů a pro nominální historii byly počítány konzistentními způsoby. Analogický přístup byl použit i ve studiích [13], [14].

Nejprve budou provedeny opravy makroskopických účinných průřezů pro štěpení v rychlé a tepelné grupě a dále pro absorpci v tepelné grupě pro historie se změnami výkonu, hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité. Makroskopický účinný průřez pro absorpci v rychlé grupě nebude předmětem oprav, neboť z podkapitoly 1.4 vyplynulo, že vykazuje jen minimální závislost na spektrální historii. Pro výpočet atomových hustot ve vztahu (3.6) byl použit model aktinoidů s parametrizovanými mikroskopickými účinnými průřezy popsaný v podkapitole 2.5.3, ve kterém opět byly použity přesné hustoty toku neutronů pro danou provozní historii. Získané hodnoty z opravy pak budou porovnány s referenčními hodnotami z HELIOSu, které byly získány provedením separátních výpočtů pro danou provozní historii s odskokem na nominální stav, čímž bylo zajištěno, že při stejných okamžitých provozních parametrech (teplota paliva, hustota moderátoru apod.) bude oceněn pouze vliv odlišné spektrální historie.

Na obrázku 3.3 je zobrazena závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v rychlé grupě získaná pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů a také referenční výsledky z HELIOSu. Výsledky opravy pro provozní historie se samostatnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité jsou vykresleny na obrázku 3.3a, přičemž byly uvažovány analogické provozní historie jako v podkapitole 2.5.3, tj. ty, u kterých je očekávána nejvyšší nepřesnost parametrisace mikroskopických účinných průřezů v modelu aktinoidů. Z obrázku 3.3b je patrné, že pro historie se změnou výkonu a koncentrace kyseliny borité bylo pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů dosaženo velice dobrých výsledků, přičemž pro všechny uvažované provozní historie rozdíl mezi opravou a referenčním výsledkem z HELIOSu nepřesáhl 0,1 %. Smysl porovnání jednotlivých provozních historií vůči nominální historii na obrázku 3.3b spočívá v tom, že je za prvé ukázána změna účinného průřezu způsobená rozdílnou provozní historií ve srovnání s nominální a za druhé možné zpřesnění parametrisace účinných průřezů při použití přímé úpravy atomových hustot aktinoidů.

Pro ověření komplexnosti metody přímé úpravy atomových hustot aktinoidů byly opravovány makroskopické účinné průřezy pro štěpení v rychlé grupě pro historie se společnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité. Výsledky opravy a také referenční výpočty z HELIOSu jsou vykresleny na obrázku 3.3c, ze kterého je společně s obrázkem 3.3d patrné, že i pro historie se společnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité bylo pro tento účinný průřez dosaženo téměř shodných výsledků jako z referenčního výpočtu v HELIOSu. V případě historie s 75 % nominálního výkonu a 1,9 g/kg koncentrace kyseliny borité při B_1 korekci na kritické spektrum bohužel došlo k nezkorvegování výpočtu v HELIOSu a následnému přepnutí na nekonečné spektrum, díky čemuž je pro tuto historii porovnání opravy a referenčního výpočtu při vyšším vyhoření nerelevantní. Poslední testované v případě makroskopického účinného průřezu pro štěpení v rychlé grupě byly historie se samostatnými změnami hustoty moderátoru a taktéž se společnými změnami hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité, pro které jsou výsledky opravy vykresleny na obrázku 3.3e. I pro tyto historie bylo dosaženo velice dobrých výsledků při srovnání s referenčními výsledky a jejich rozdíl vykazoval hodnoty menší než 0,1 %.

Oprava byla dále provedena pro makroskopický účinný průřez pro štěpení v tepelné grupě, jejíž výsledky jsou zobrazeny na obrázku 3.4. Pro testování metody přímé úpravy atomových hustot aktinoidů pro účinný průřez pro štěpení v tepelné grupě byly opět vybrány analogické provozní historie jako v předchozím případě. Nejprve byla provedena oprava pro provozní historie se samostatnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité, jejíž výsledky jsou spolu s referenčními výpočty vykresleny na obrázku 3.4a, ze kterého je patrné, že i pro tento účinný průřez přímá úprava atomových hustot aktinoidů zafungovala velice dobře a lze pomocí ní velmi dobře zohlednit spektrální historii. Obrázek 3.4b ukazuje, že spektrální historie se projevuje ve větší míře na makroskopický účinný průřez pro štěpení v tepelné grupě než v případě rychlé grupy, ale taktéž bylo při opravě dosaženo mírně horších výsledků. To lze například pozorovat pro historii s koncentrací kyseliny borité 4,4 g/kg. Maximální rozdíly mezi opravou a referenčním výsledkem dosahovaly přibližně 0,2 %, což ve srovnání s zpřesněním účinných průřezů pomocí přímé úpravy je mnohonásobně menší hodnota. Taktéž byly provedeny opravy pro historie se společnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité, jejichž výsledky spolu s referenčními výpočty v HELIOSu lze pozorovat na obrázku 3.4c. Z obrázku 3.4d je zřejmé, že i pro historie se společnými změnami parametrů bylo při opravě účinných průřezů pomocí přímé úpravy dosaženo velice dobrých výsledků a pokud by byla tato oprava zohledňující spektrální historii



(e) Provozní historie se změnami hustoty moderátoru a koncentrace H₃BO₃ (f) Relativní odchylky provozních historií od nominální historie

Obrázek 3.3: Závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v rychlé grupě na vyhōření získaná přímou úpravou atomových hustot aktinoidů a referenční hodnoty z HELIOSu pro různé provozní historie (vlevo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)

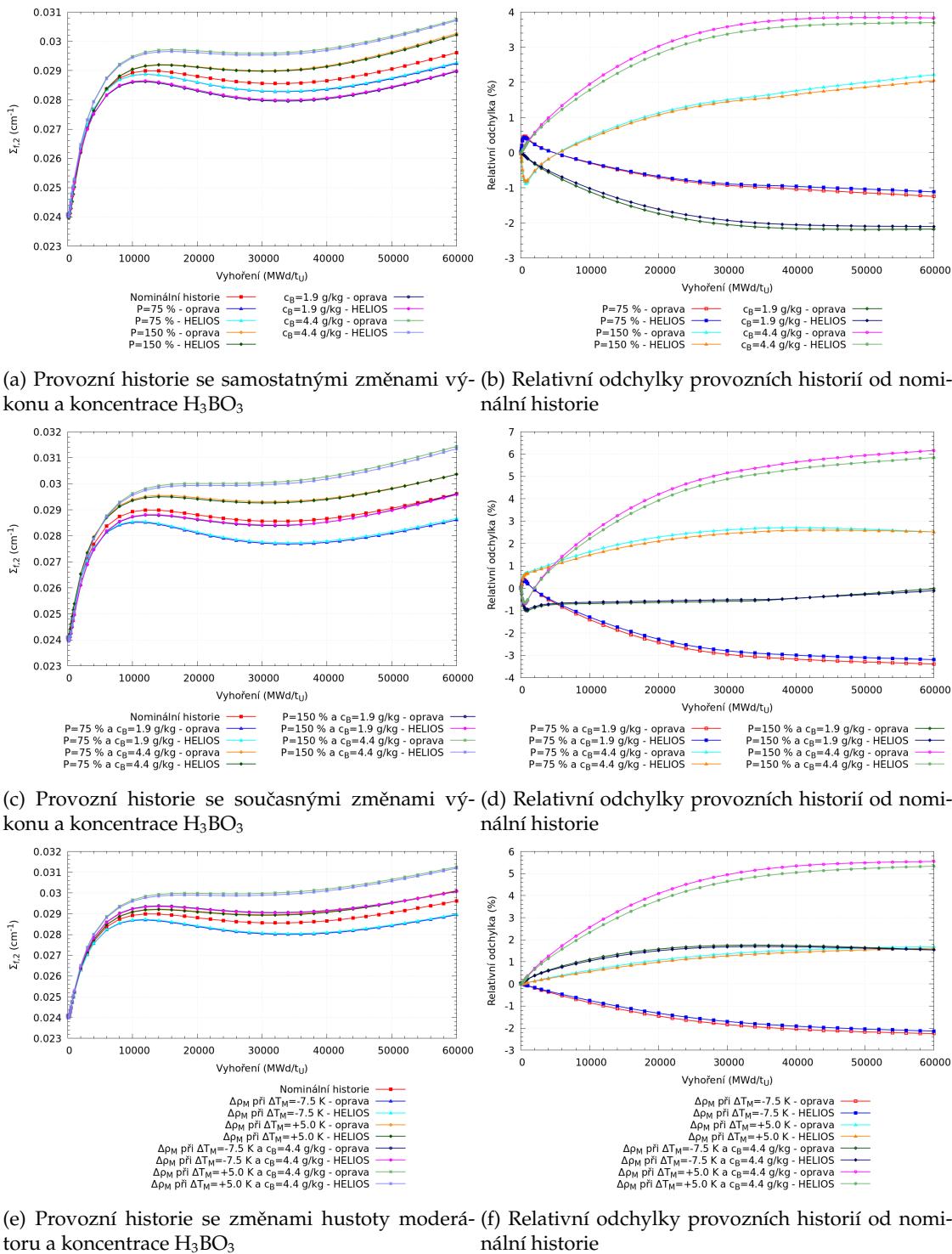
zahrnuta do parametrisace účinných průřezů, bylo by možné pro určité provozní historie dosáhnout zpřesnění hodnot účinných průřezů až o 5 %. Na druhou stranu rozdíl mezi opravou a referenčními výsledky dosahuje nejvíce 0,3 % ze všech zkoumaných provozních historií, což je oproti zpřesnění účinných průřezů zanedbatelná hodnota. Poslední analyzované byly historie se

samostatnými změnami hustoty moderátoru a taktéž se společnými změnami hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité, pro které jsou výsledky opravy zobrazeny na obrázku 3.4e. I v případě těchto historií je možno pozorovat vysokou spolehlivost opravy účinných průřezů pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů. Relativní odchylky jednotlivých historií se změnami provozních parametrů oproti nominální provozní historii jsou zobrazeny na obrázku 3.4f, ze kterého je možné vidět, že i pro tyto provozní historie nebyl rozdíl mezi opravou a referenčním výsledkem z HELIOSu větší než 0,3 % pro všechny analyzované provozní historie během uvažovaného vyhořívání.

Následně byla provedena pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů oprava makroskopického účinného průřezu pro absorpci v tepelné grupě, jejíž výsledky jsou pro uvažované provozní historie vykresleny na obrázku 3.5. I přestože do opravy byly zahrnuty pouze vybrané aktinoidy a nebyla zohledněna absorpcie na štěpných produktech a ostatních izotopech, vykazovala oprava makroskopického účinného průřezu pro absorpci v tepelné grupě velice dobrých výsledků pro všechny analyzované provozní historie. Výsledky opravy spolu s referenčními výsledky z HELIOSu pro historie se změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité jsou vykresleny na obrázku 3.5a a relativní odchylky jednotlivých provozních historií se změnami parametrů od nominální provozní historie uvádí obrázek 3.5b. Odtud je patrné, že zahrnutí spektrální historie v podobě přímé úpravy atomových aktinoidů do parametrizace účinných průřezů velice přispěje ke zpřesnění výsledků, a to především při vyšších vyhořeních. I přes zavedená zjednodušení rozdíl mezi opravou a referenčními výsledky z HELIOSu nepřesahuje 0,3 % pro analyzované provozní historie během uvažovaného vyhořívání. Dále byly provedeny opravy pro historie se společnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité zobrazené na obrázku 3.5c a pro historie se samostatnými změnami hustoty moderátoru a společnými změnami hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité vykreslené na obrázku 3.5e. I v případě těchto provozních historií se ukázala oprava účinného průřezu pro absorpci v tepelné grupě pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů za velice spolehlivou. Obrázky 3.5d a 3.5f zobrazují relativní odchylky jednotlivých provozních historií od nominální a vyplývá z nich, že nepřesnost opravy dosáhla maximálně 0,4 % oproti referenčnímu výsledku pro historie se společnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité a maximálně 0,3 % pro historie se změnami hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité. To znamená, že i pro makroskopické účinné průřezy pro absorpci v tepelné grupě přinese přímá úprava atomových hustot aktinoidů mnohem větší zpřesnění hodnot účinných průřezů ve srovnání s její nepřestností vůči referečním výsledkům.

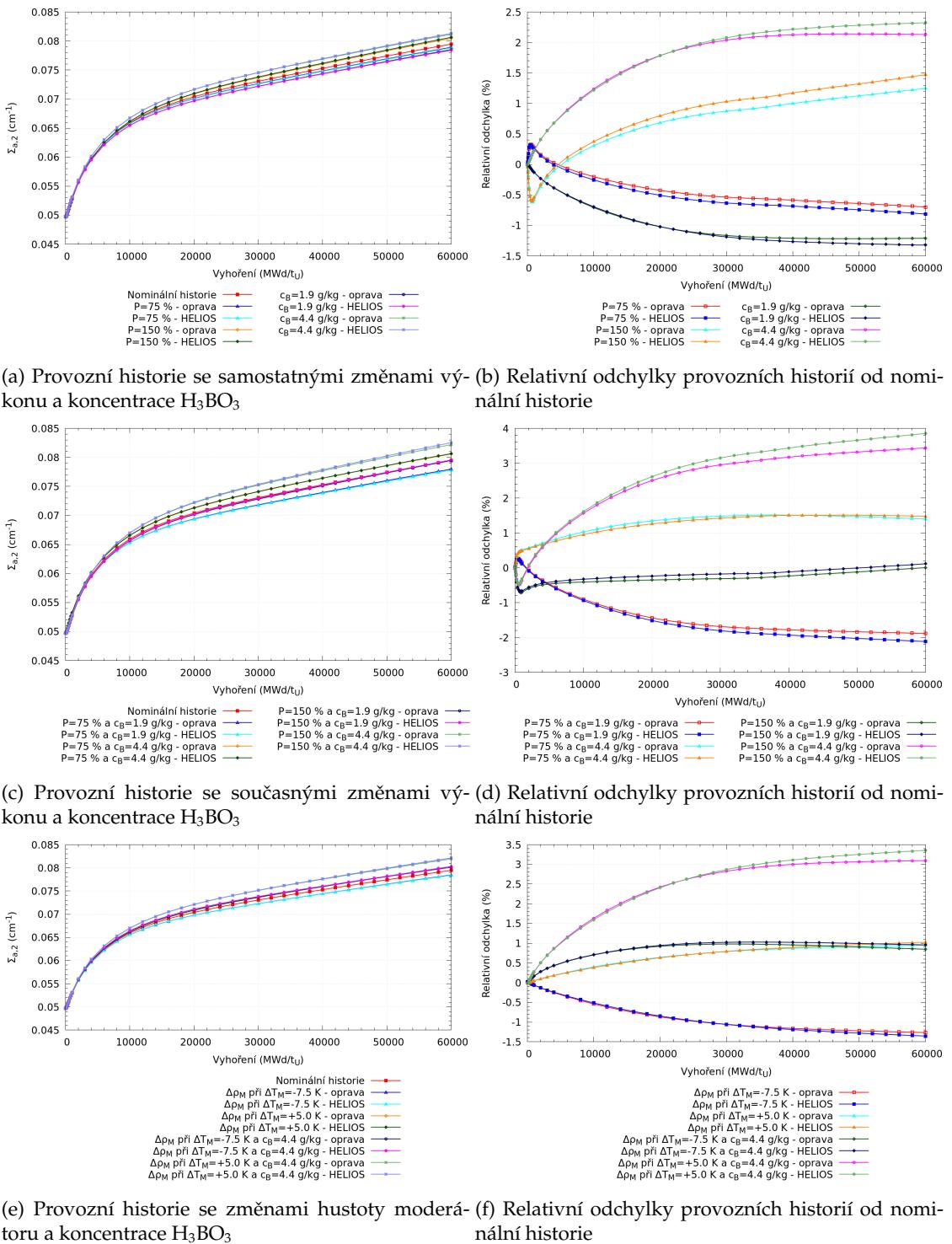
Na závěr bude pro vybrané provozní historie ukázáno, že přímou úpravu atomových hustot aktinoidů lze spolehlivě využít i pro opravu makroskopických účinných průřezů pro energii uvolněnou ze štěpení a produkci neutronů ze štěpení. Na obrázku 3.6a jsou zobrazeny výsledky opravy účinného průřezu pro energii uvolněnou ze štěpení v rychlé grupě s referenčními výsledky z HELIOSu pro provozní historie se změnami hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité. Z obrázku 3.6b je patrné, že pro všechny analyzované provozní historie bylo dosaženo velice dobrých výsledků, které téměř odpovídaly referenčním hodnotám z HELIOSu, a rozdíly mezi opravou a HELIOSem nepřevyšovaly 0,1 % relativní odchylky jednotlivých provozních historií od nominální. Taktéž pro opravy účinných průřezů pro energii uvolněnou ze štěpení a pro produkci neutronů ze štěpení v tepelné grupě vykreslených na obrázcích 3.6c a 3.6e bylo dosaženo velmi dobrých výsledků ve srovnání s referenčním výpočtem v HELIOSu. Z obrázků 3.6d a 3.6f je zřejmé, že odlišná spektrální historie má velký vliv na tyto účinné průřezy a pomocí opravy byly získány téměř stejně výsledky jako z referenčního výpočtu v HELIOSu.

Celkově se ukázala oprava účinných průřezů pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů jako perspektivní metoda pro zohlednění spektrální historie. I přestože byly do přímé úpravy zahrnuty jen významné aktinoidy uvedené v (3.2), bylo dosaženo velice uspokojivých výsledků. Atomové hustoty byly počítány pomocí modelu aktinoidů s parametrizovanými mikroskopickými účinnými průřezy a konkrétními hustotami toků neutronů pro danou provozní historii. Při implementování opravy účinných průřezů pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů do makrokódu by pravděpodobně bylo dosahováno horších výsledků, a to z důvodu, že by v modelu aktinoidů byly použity hustoty toků neutronů vypočítané makrokódem. Avšak před případným implementováním opravy do makrokódu nelze toto tvrzení potvrdit.

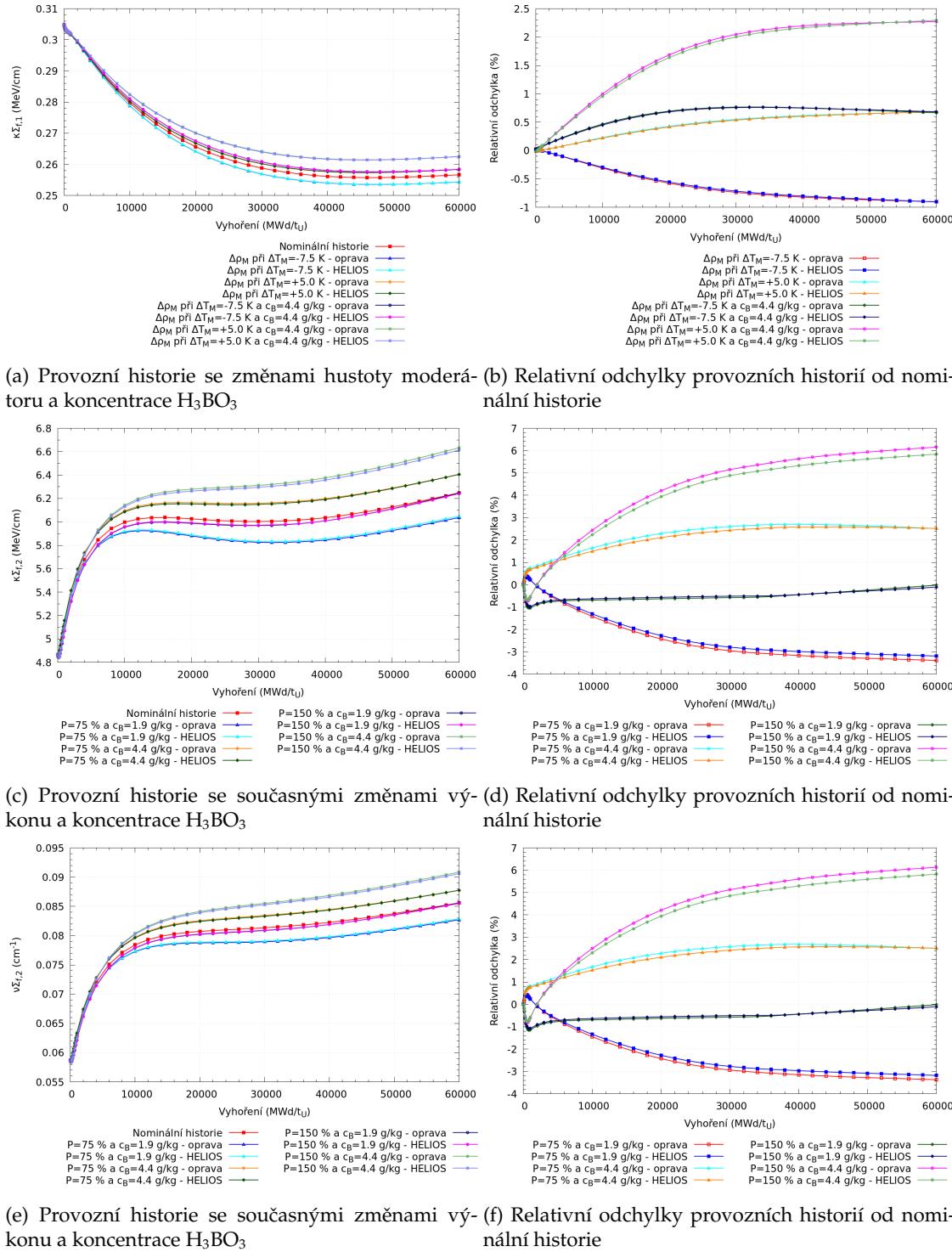


(e) Provozní historie se změnami hustoty moderátoru a koncentrace H₃BO₃ (f) Relativní odchylky provozních historií od nominální historie

Obrázek 3.4: Závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v tepelné grupě na vyhoření získaná přímou úpravou atomových hustot aktinoidů a referenční hodnoty z HELIOSu pro různé provozní historie (vlevo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)



Obrázek 3.5: Závislost makroskopických účinných průřezů pro absorpcí v tepelné grupě na vyhoření získaná přímou úpravou atomových hustot aktinoidů a referenční hodnoty z HELIOSu pro různé provozní historie (vlevo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)



Obrázek 3.6: Závislost dalších makroskopických účinných průřezů na vyhoření získaná přímou opravou s referenčními hodnotami z HELIOSu pro různé provozní historie (vpravo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)

3.2 Parametrizace s využitím atomové hustoty ^{239}Pu

V kapitole 1 byly vytyčeny kroky, které je nutné provést, aby mohla být zohledněna spektrální historie pomocí atomové hustoty ^{239}Pu v parametrizaci makroskopických účinných průřezů. V kapitole 2 již byl podrobně popsán a testován model aktinoidů, pomocí kterého je možné pro libovolný provozní stav určit lokální atomovou hustotu ^{239}Pu . Nyní zbyvá nalézt vhodné approximační funkce a vhodné provozní historie, ze kterých budou určeny koeficienty approximačních funkcí, a poté bude již možné přistoupit k samotné parametrizaci makroskopických účinných průřezů.

3.2.1 Určení approximační funkce a podobnostního čísla spektrální historie

Z podkapitoly 1.6 vyplynulo, že při znalosti změny atomové hustoty ^{239}Pu dané provozní historie oproti nominální historii lze určit změnu makroskopického účinného průřezu dané provozní historie oproti nominální historii. Změna makroskopického účinného průřezu je zapříčiněna odlišnými provozními parametry, při kterých probíhalo vyhořívání, tj. vyhořívání probíhalo při jiném spektru neutronů. Taktéž se ukázalo, že při uvažování relativních změn makroskopických účinných průřezů ve tvaru (1.5) a relativních změn atomové hustoty ^{239}Pu ve tvaru (1.6) bude možné nalézt s dobrou spolehlivostí approximační funkce spektrální historie v lineárním tvaru. Z těchto důvodů byly definovány approximační funkce zohledňující spektrální historii pro makroskopický účinný průřez r -té reakce v grupě g závislé na daném kroku vyhoření B a atomové hustotě ^{239}Pu ve tvaru

$$h_{r,g}(B, N_{Pu}) = \begin{cases} \alpha_{r,g}^-(B) \frac{N_{Pu}^{alt}(B) - N_{Pu}^{nom}(B)}{N_{Pu}^{nom}(B)} & \text{pro } \frac{N_{Pu}^{alt}(B) - N_{Pu}^{nom}(B)}{N_{Pu}^{nom}(B)} \leq 0 \\ \alpha_{r,g}^+(B) \frac{N_{Pu}^{alt}(B) - N_{Pu}^{nom}(B)}{N_{Pu}^{nom}(B)} & \text{pro } \frac{N_{Pu}^{alt}(B) - N_{Pu}^{nom}(B)}{N_{Pu}^{nom}(B)} > 0, \end{cases} \quad (3.7)$$

kde N_{Pu}^{nom} , resp. N_{Pu}^{alt} jsou atomové hustoty ^{239}Pu v daném kroku vyhoření pro nominální, resp. změněnou provozní historii a $\alpha_{r,g}^-$, resp. $\alpha_{r,g}^+$ jsou podobnostní čísla spektrální historie pro r -tý makroskopický účinný průřez v grupě g v daném kroku vyhoření pro zápornou, resp. kladnou změnu atomové hustoty ^{239}Pu , které vyjadřují poměr relativní změny r -tého makroskopického účinného průřezu v grupě g a relativní změny atomové hustoty ^{239}Pu dané provozní historie oproti nominální provozní historii.

Relativní lineární závislost na atomové hustotě ^{239}Pu byla v approximační funkci (3.7) zvolena kvůli tomu, že pro určování podobnostních čísel spektrální historie budou používány změny atomové hustoty ^{239}Pu získané přímo z výpočtu v HELIOSu, ale v parametrizaci makroskopických účinných průřezů budou použity atomové hustoty ^{239}Pu vypočítané pomocí modelu aktinoidů. Atomové hustoty N_{Pu}^{nom} a N_{Pu}^{alt} budou vždy počítány konzistentními způsoby, tj. buď HELIO-Sem, nebo modelem aktinoidů. Díky tomu, že je uvažována relativní závislost změny makroskopických účinných průřezů na relativní změně atomové hustoty ^{239}Pu , měla by parametrizace zohledňující spektrální historii poskytovat spolehlivé výsledky, i přestože při určování podobnostního čísla spektrální historie a v samotné parametrizaci budou použity odlišné způsoby výpočtu atomových hustot ^{239}Pu .

Po formulování approximačních funkcí zohledňujících spektrální historii lze již přistoupit k určení jejich koeficientů, tj. k určení podobnostního čísla spektrální historie. Ty budou získány separátně pro kladnou a zápornou změnu atomové hustoty ^{239}Pu v každém kroku vyhoření na základě proložení bodů $(\delta N_{Pu}; \delta \Sigma_{r,g})$ lineární funkci pomocí approximace metody nejmenších čtverců, jejíž zdrojový kód je uveden v příloze C. Provozní historie, pomocí kterých se určí podobnostní čísla, se definují analogicky jako pro mikroskopické účinné průřezy v parametračním manifestu uvedeném ve zdrojovém kódu 3.2, do kterého byl přidán klíč `history`. Je zřejmé, že musí být věnována značná pozornost vybrání vhodných provozních historií pro určení podobnostních čísel, neboť na jejich hodnotách bude závislá kvalita parametrizace makroskopických účinných průřezů zohledňující spektrální historii.

```
module Manifest

BRANCHES = {
    power: %w{HFP-POW050 HFP-POW200},
    coolant_density: %w{HFP-MD290 HFP-MD315},
    boron_concentration: %w{HFP-BC100 HFP-BC600},
    history: %w{HFP-POW030 HFP-POW050 ... HFP-POW180 HFP-POW200 \
HFP-MD281 HFP-MD286 ... HFP-MD315 HFP-MD317 \
HFP-BC060 HFP-BC100 ... HFP-BC600 HFP-BC700 \
HFP-POW060BC190 HFP-POW060BC550 ... HFP-POW150BC190 HFP-POW150BC440 \
HFP-MD281BC700 HFP-MD298BC190 ... HFP-MD311BC700 HFP-MD316BC300}
}

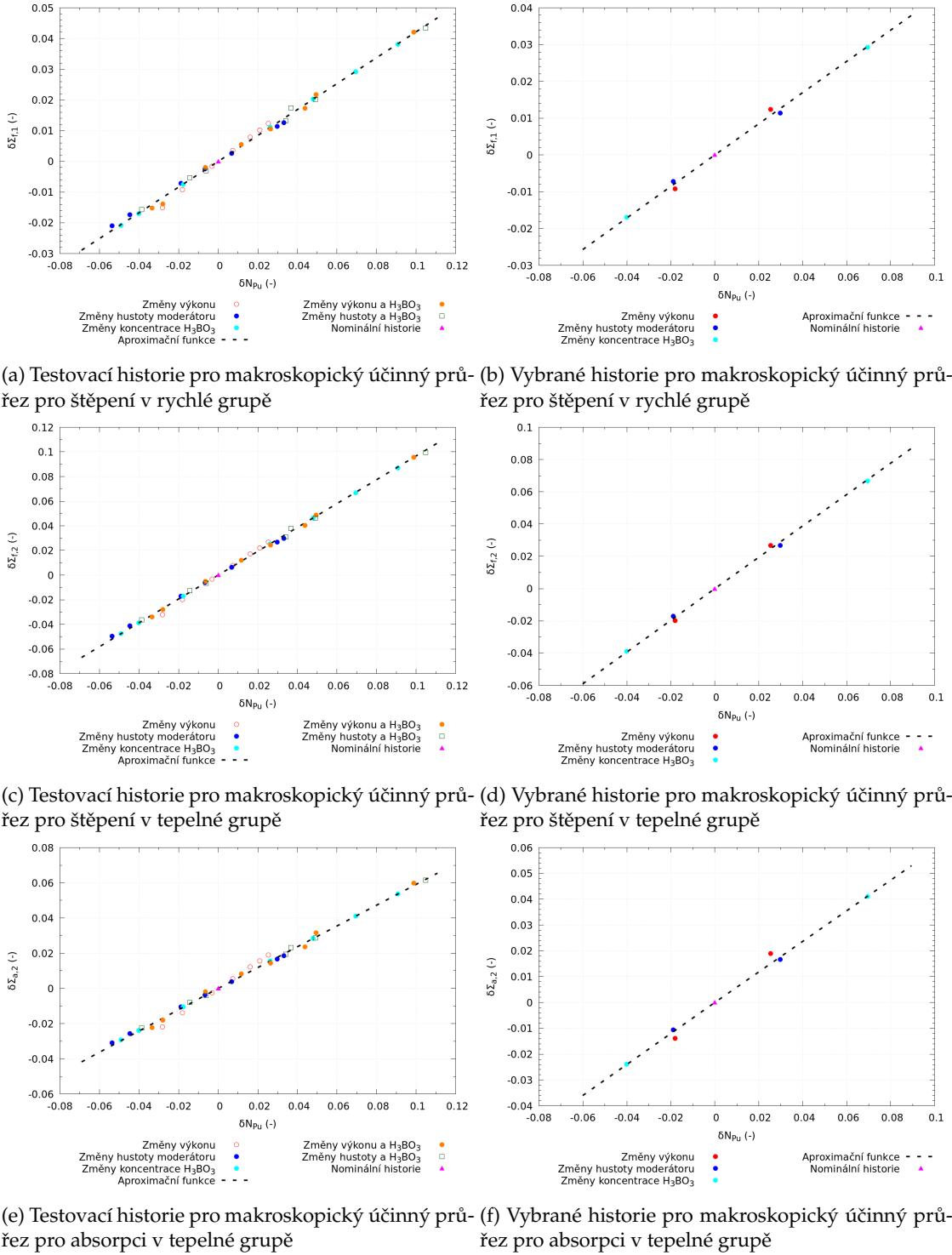
end
```

Zdrojový kód 3.2: Parametizační manifest se zahrnutím spektrální historie

Určení podobnostního čísla bude ukázáno pro makroskopické účinné průřezy pro štěpení v rychlé a tepelné grupě a pro absorpci v tepelné grupě. Makroskopický účinný průřez pro absorpci v rychlé grupě nebude předmětem parametrizace zohledňující spektrální historii ze stejných důvodů, které byly diskutovány v předchozí podkapitole 3.1. V prvním kroku byla podobnostní čísla určena pro velký počet testovacích provozních historií, ve kterých byly zahrnuty historie se změnami výkonu, hustoty moderátoru, koncentrace kyseliny borité a jejich kombinacemi. Naznačení výčtu použitých testovacích provozních historií je vypsáno ve zdrojovém kódu 3.2. Závislosti změn jednotlivých makroskopických účinných průřezů na změně atomové hustoty ^{239}Pu při vyhoření 30 000 MWd/t_U jsou pro uvažované provozní historie vykresleny na obrázcích 3.7a, 3.7c a 3.7e, na kterých jsou také vykresleny approximační funkce (3.7). Jak již bylo zmíněno, jejich koeficienty byly získány proložením lineární funkcí pomocí metody nejmenších čtverců. Z obrázků 3.7a, 3.7c a 3.7e je možné pozorovat, že approximace lineární funkcí vykazuje pro všechny analyzované provozní historie velkou spolehlivost, a to i v případě současných změn více provozních parametrů. Výraznější odchylky lze kupříkladu pozorovat v případě historií se změnou výkonu pro makroskopický účinný průřez pro absorpci v tepelné grupě, což bylo diskutováno v podkapitole 1.6 a vysvětleno tím, že historie se změnou výkonu jsou charakteristické výrazně odlišným spektrem neutronů oproti ostatním provozním historiím.

Je zřejmé, že v praxi není žadoucí, aby bylo nutné pro určení podobnostních čísel napočítat pomocí mikrokódu obrovský počet provozních historií, a to především z důvodu, že je nutné připravit aplikační knihovny pro všechny typy palivových souborů. Navíc se ukázalo, že i historie se současnými změnami více provozních parametrů vykazují chování, které lze spolehlivě popsat approximačními funkcemi, to znamená, že se jen minimálně projevují efekty druhých řádů. Aby bylo případně možné využít parametrizaci účinných průřezů pomocí atomové hustoty ^{239}Pu zohledňující spektrální historii v makrokódu, bude testováno, jakým způsobem se na podobnostních číslech projeví zahrnutí pouze několika vybraných provozních historií se samostatnými změnami výkonu, hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité.

Pro získání nových approximačních funkcí stačí pouze v parametizačním manifestu přepsat provozní historie, pomocí kterých jsou určeny podobnostní čísla. Postup získání nových approximačních funkcí je naznačen ve zdrojovém kódu 3.3, přičemž byly vybrány provozní historie s odskokem na nominální provozní parametry, které jsou vypsány ve zdrojovém kódu 3.3, tj. byla vždy uvažována jedna kladná a záporná změna výkonu, hustoty moderátora a koncentrace kyseliny borité oproti nominální provozní historii a samozřejmě nominální provozní historie. Závislost změn daných makroskopických účinných průřezů na změnách atomové hustoty ^{239}Pu pro vybrané provozní historie při vyhoření 30 000 MWd/t_U je spolu s approximačními funkcemi vykreslena na obrázcích 3.7b, 3.7d a 3.7f, přičemž koeficienty approximačních funkcí byly opět určeny samostatně pro kladné a záporné změny atomové hustoty ^{239}Pu pomocí metody nejmenších čtverců.



Obrázek 3.7: Výběr provozních historií pro určení podobnostního čísla spektrální historie při vyhoření 30 000 MWd/t_U

```

module Manifest

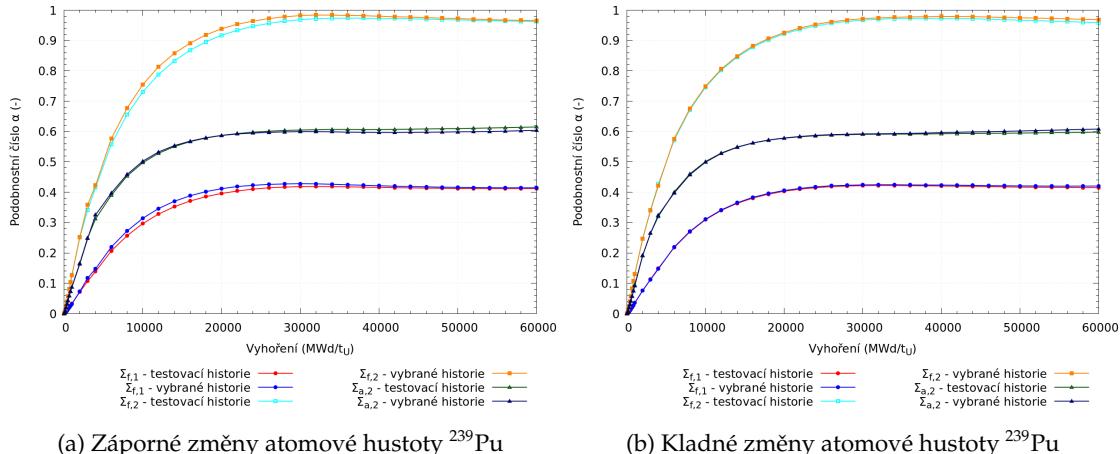
BRANCHES = {
    ...
    history: %w{HFP-POW050 HFP-POW200 HFP-MD298 HFP-MD315 HFP-BC100 HFP-BC600}
}

end

```

Zdrojový kód 3.3: Parametrizační manifest s vybranými provozními historiemi pro určení podobnostního čísla

Nyní budou porovnána podobnostní čísla analyzovaných makroskopických účinných průřezů pro všechny uvažované kroky vyhoření, která byla určena pomocí detailních testovacích provozních historií a pomocí vybraných historií pouze s jednou kladnou a zápornou změnou výkonu, hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité. Obrázek 3.8 zobrazuje závislosti podobnostních čísel na vyhoření pro jednotlivé makroskopické účinné průřezy. Pro záporné, resp. kladné změny atomové hustoty ^{239}Pu je průběh podobnostních čísel vykreslen na obrázcích 3.8a, resp. 3.8b, ze kterých je zřejmé, že při použití testovacích a vybraných provozních historií je pro analyzované makroskopické účinné průřezy dosaženo téměř shodných hodnot podobnostních čísel během celého uvažovaného vyhořívání. Z tohoto důvodu budou v parametrizaci makroskopických účinných průřezů zohledňující spektrální historii uvažovány pouze vybrané provozní historie uvedené ve zdrojovém kódu 3.3, i přestože tím dojde k mírnému znepřesnění výsledků parametrizace. Postup, při kterém jsou podobnostní čísla získána na základě jen několika různých provozních historií, také lépe odpovídá způsobu určování koeficientů approximačních funkcí zohledňující provozní parametry (teplota paliva, hustota paliva aj.) v makrokódu a případně by byl lépe přenesen do jeho parametrizace účinných průřezů.



Obrázek 3.8: Porovnání podobnostních čísel určených na základě testovacích a vybraných provozních historií

3.2.2 Testování parametrizace makroskopických účinných průřezů

Nyní lze již přistoupit k samotné parametrizaci makroskopických účinných průřezů pomocí indikátoru spektrální historie ^{239}Pu , neboť jsou známy approximační funkce zohledňující spektrální historii i vhodné provozní historie pro určení jejich koeficientů. Makroskopické účinné průřezy pro r -tou reakci v grupě g se zahrnutím opravy na spektrální historii v daném kroku vyhoření závislé na atomové hustotě ^{239}Pu pro historii se změněnými provozními parametry lze určit podle následujícího vztahu

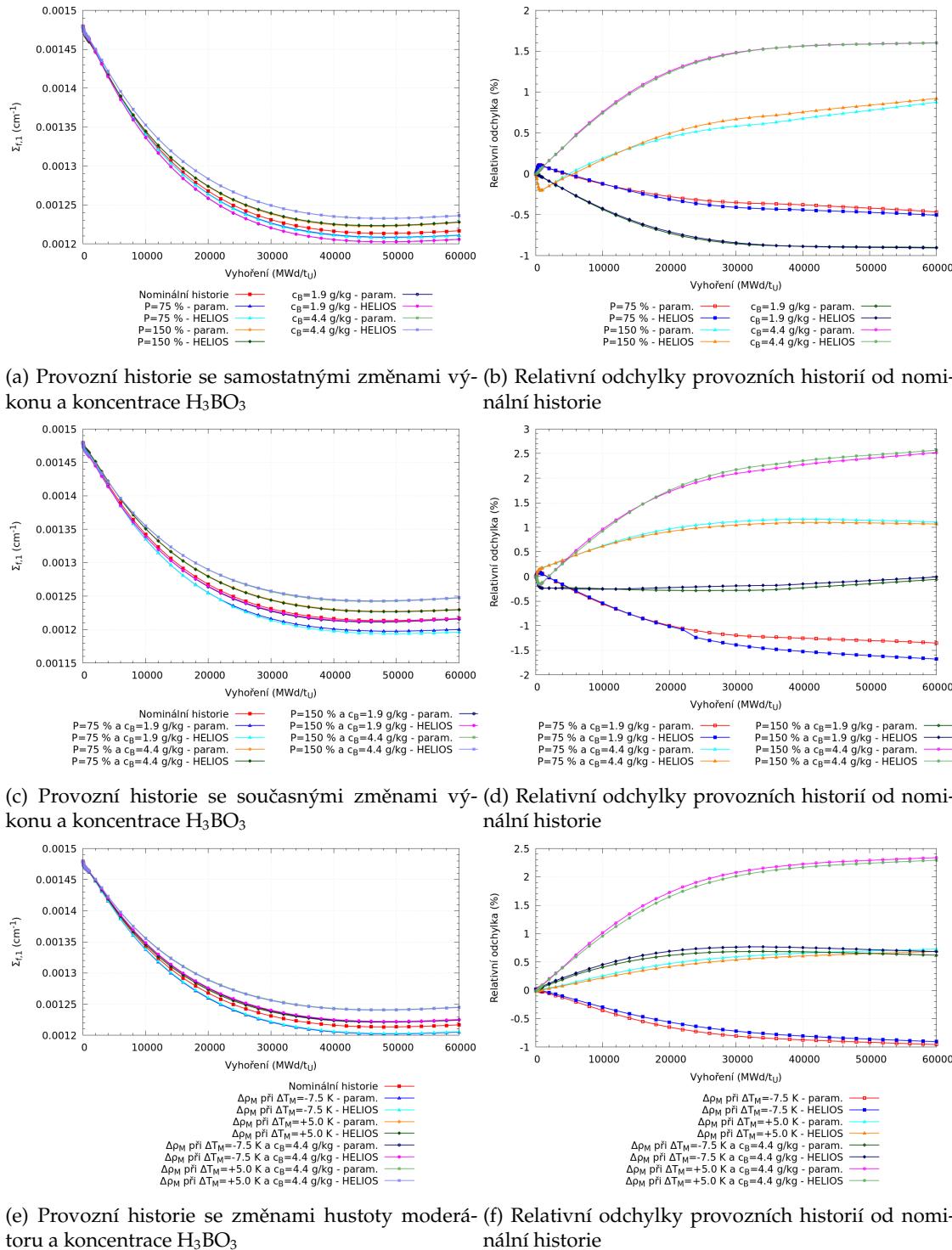
$$\Sigma_{r,g}^{alt,sh}(B, N_{Pu}) = \Sigma_{r,g}^{nom}(B) \left[1 + h_{r,g}(B, N_{Pu}) \right], \quad (3.8)$$

kde $\Sigma_{r,g}^{nom}$ je makroskopický účinný průřez r -té reakce v grupě g pro nominální provozní historii a $h_{r,g}$ je approximační funkce ve tvaru (3.7). V rovnici (3.8) musí být approximační funkce $h_{r,g}$ přenásobena $\Sigma_{r,g}^{nom}$, aby byla získána absolutní změna daného makroskopického účinného průřezu pro změněnou provozní historii oproti nominální. Je to z důvodu, že v approximačních funkcích jsou uvažovány relativní změny, ale do výsledného opraveného makroskopického účinného průřezu je nutné připočítat absolutní změnu. Pro ověření kvality parametrizace (3.8) budou opravené makroskopické účinné průřezy porovnány s referenčními výsledky z HELIOSu, které budou získány provedením separátních výpočtů dané provozní historie s odskokem na nominální historii, čímž bude zajištěno, že bude zohledněn pouze vliv odlišné spektrální historie.

Parametrizace s využitím atomové hustoty ^{239}Pu byla provedena pro makroskopické účinné průřezy pro štěpení v tepelné a rychlé grupě a pro absorpci v tepelné grupě pro analogické provozní historie jako v podkapitole 3.1, tj. historie, u kterých je očekávána největší nepřesnost v parametrizaci mikroskopických účinných průřezů v modelu aktinoidů. V parametrizaci (3.8) byla použita podobnostní čísla, která byla vypočítána pomocí vybraných historií uvedených ve zdrojovém kódu 3.3 a oprávněnost jejich použití byla diskutována v předchozí podkapitole. Ve vztahu (3.8) bude pro historie se změněnými provozními parametry atomovová hustota ^{239}Pu určována pomocí modelu aktinoidů s parametrizovanými mikroskopickými účinnými průřezy a konkrétními hustotami toku neutronů.

Obrázek 3.9 zobrazuje výsledky parametrizace pro makroskopický účinný průřez pro štěpení v rychlé grupě. Na obrázku 3.9a jsou vykresleny výsledky opravy pomocí parametrizace spolu s referenčními výpočty z HELIOSu pro historie se samostatnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité. Relativní odchylky analyzovaných provozních historií od nominální provozní historie pro parametrizaci i HELIOS jsou vykresleny na obrázku 3.9b, který ukazuje, jakého zpřesnění lze dosáhnout při zahrnutí spektrální historie do parametrizace. Odtud je také patrné, že při parametrizaci s využitím atomové hustoty ^{239}Pu byly získány velice dobré výsledky, které téměř odpovídaly referenčním hodnotám. Větší rozdíl parametrizace oproti referenčním výpočtům z HELIOSu lze pozorovat pro historie se změnou výkonu, ale rozdíly pro všechny analyzované historie mezi parametrizací a HELIOSem nepřesahly 0,1 % relativní odchylky dané historie od nominální během uvažovaného vyhodnocení. Taktéž byla provedena parametrizace pro historie se současnými změnami více provozních parametrů, jejíž výsledky spolu s referenčními výpočty pro historie se současnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité jsou vykresleny na obrázku 3.9c. I v případě současných změn výkonu a koncentrace kyseliny borité lze z obrázku 3.9d pozorovat vysokou spolehlivost parametrizace při porovnání s referenčními výpočty v HELIOSu. Jako v případě přímé úpravy atomových hustot aktinoidů HELIOS pro historii s 75 % nominálního výkonu a 1,9 g/kg koncentrací kyseliny borité při korekci na kritické spektrum nezkonvergoval a přepnul na nekonečné spektrum. To znamená, že porovnání mezi parametrizací a HELIOSem pro tuto historii je nerelevantní. V případě ostatních historií rozdíl mezi parametrizací a HELIOSem nepřevyšil hodnotu 0,1 % relativní odchylky jednotlivých historií od nominální historie. Pro makroskopický účinný průřez pro štěpení v rychlé grupě byly poslední testované historie se samostanými změnami hustoty moderátoru a současnými změnami hustoty moderátoru a kyseliny borité, pro které jsou výsledky opravy s výsledky z HELIOSu zobrazeny na obrázku 3.9e. Na obrázku 3.9e je možné vidět, že i pro tyto provozní historie bylo dosaženo velice dobrých výsledků, které vykazují velice dobrou shodu s referenčními výsledky z HELIOSu.

Následně byla provedena parametrizace pro makroskopický účinný průřez pro štěpení v tepelné grupě, jejíž výsledky zobrazuje obrázek 3.10. Opět byly analyzovány totožné provozní historie jako v předchozím případě. Nejprve byly parametrizací získány účinné průřezy pro historie se změnami výkonu a koncentrace, jejichž průběhy spolu s referenčními hodnotami jsou vykresleny na obrázku 3.10a, ze kterého je zřejmé, že parametrizace vykazuje velice dobrou spolehlivost pro uvedené historie ve srovnání s HELIOSem. Obrázek 3.10b uvádí relativní odchylky daných provozních historií pro parametrizaci a HELIOS od nominální provozní historie, tj. zobrazuje, jakou nepřesnost pro jednotlivé provozní historie způsobuje zanedbání spektrální historie v parametrizaci. Opět je možné sledovat, že v případě historií se samostatnými změnami výkonu parametrizace vykazuje nepatrně horší nepřesnost než v případě historií se změnami koncentrace kyseliny borité, což je opět dánou odlišným spektrem neutronů pro historie se změnami výkonu než v případě ostatních provozních historií. Pro ukázání komplexnosti parametrizace pomocí indikátoru



Obrázek 3.9: Závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v rychlé grupě na vyhoření získaná pomocí parametrisace s referenčními hodnotami z HELIOSu pro různé provozní historie (vpravo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)

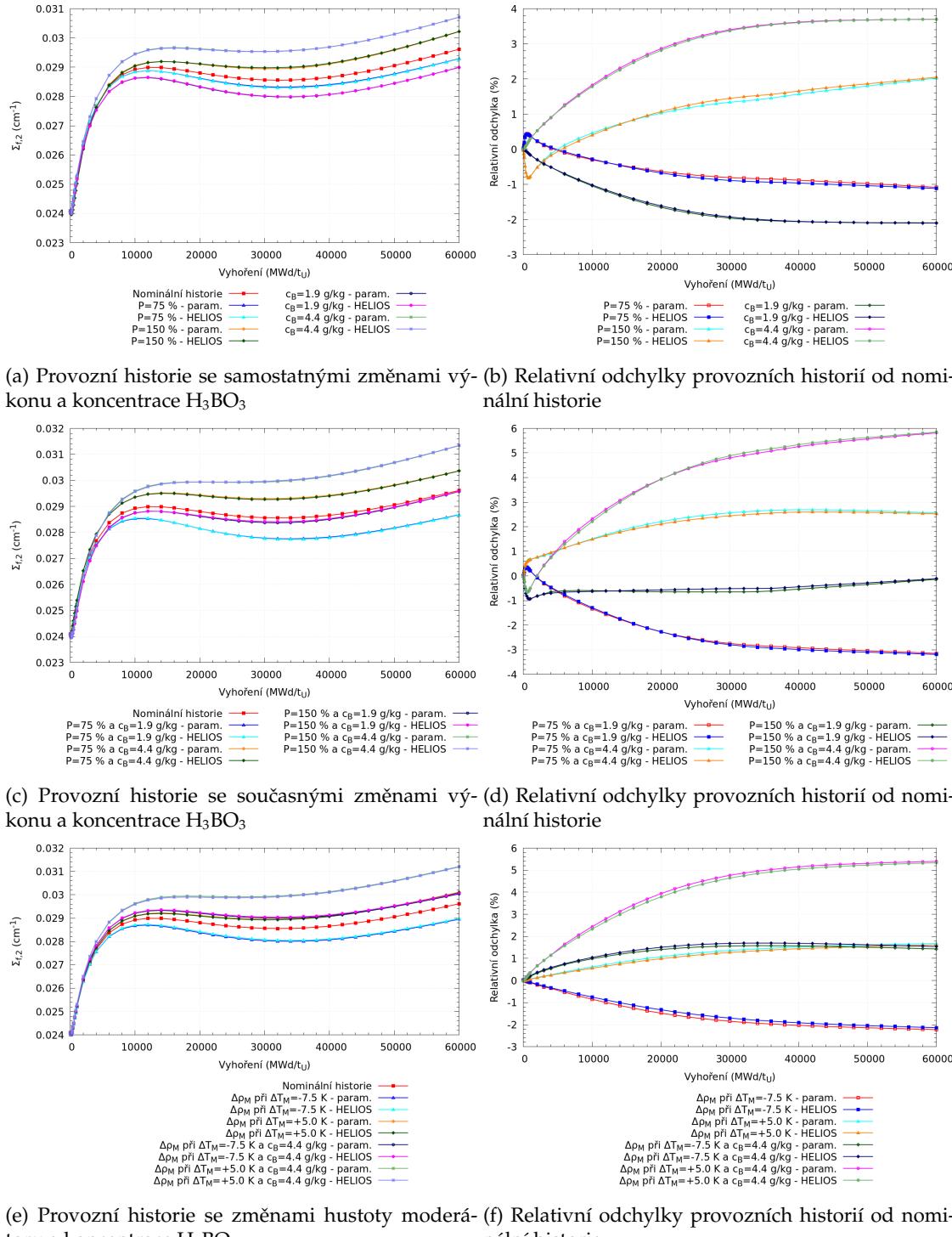
^{239}Pu byly i v případě účinného průřezu pro štěpení v tepelné grupě testovány historie se současnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny boritě, pro které jsou výsledky parametrisace spolu s referenčním výpočtem zobrazeny na obrázku 3.10c. Taktéž v tomto případě vykazuje parametrisace velice uspokojivých výsledků a její hodnoty během celého uvažovaného vyhořívání téměř odpovídají referenčním hodnotám. Relativní odchylky jednotlivých provozních historií od

nominální historie pro parametrizaci i HELIOS zobrazuje obrázek 3.10d, ze kterého je možné pozorovat, jak velký vliv má odlišná spektrální historie na účinné průřezy. Poslední analyzované byly provozní historie se samostatnými změnami hustoty moderátoru a současnými změnami hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité. Výsledky parametrizace s referenčními hodnotami z HELIOSu uvádí obrázek 3.10e, ze kterého lze pozorovat, že i v případě těchto historií vykazuje parametrizace velice dobrou spolehlivost. Relativní odchylky jednotlivých provozních historií od nominální historie jsou vykresleny na obrázku 3.10f.

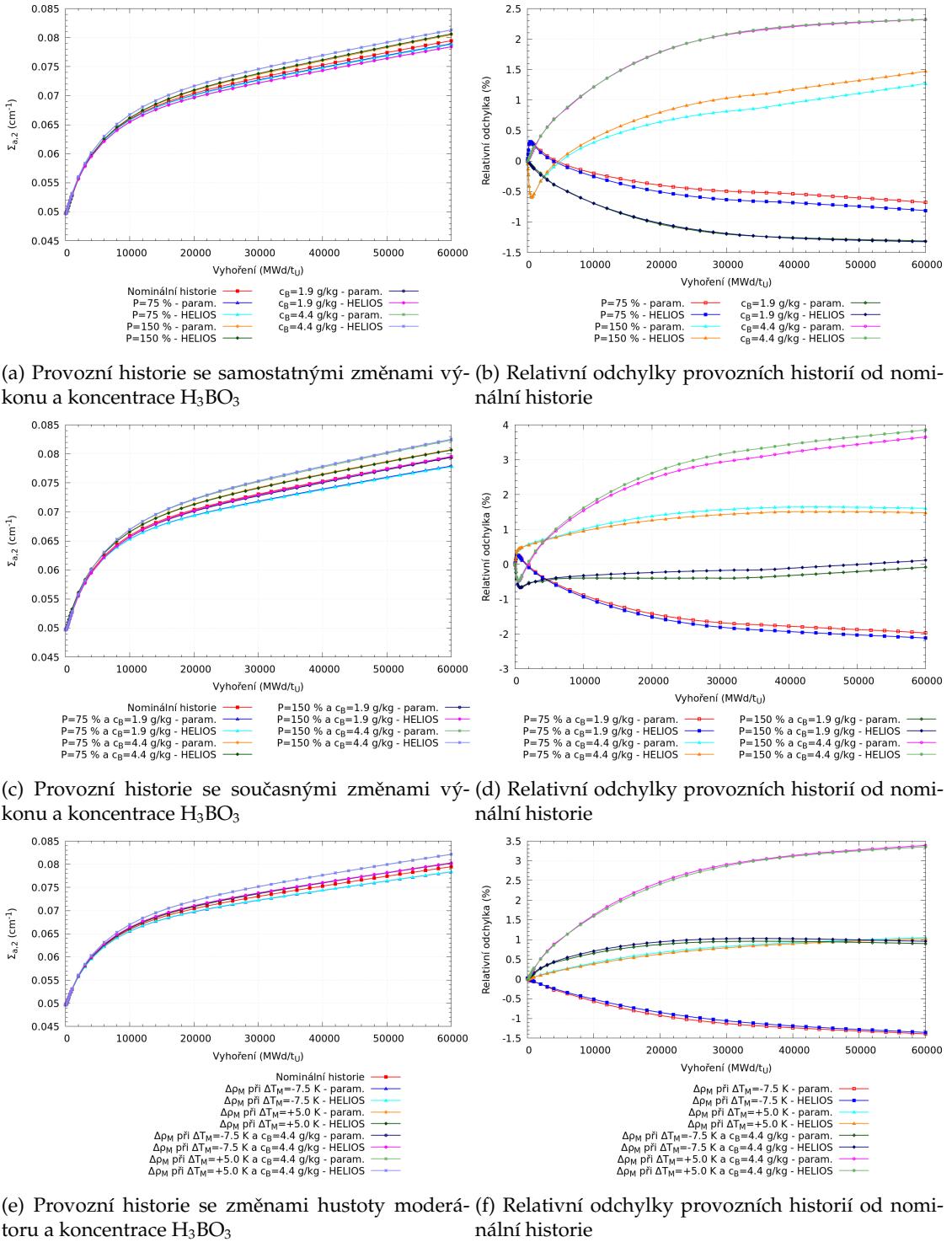
Dále byla provedena oprava makroskopického účinného průřezu pro absorpci v tepelné grupě pomocí parametrizace s využitím atomové hustoty ^{239}Pu , jejíž výsledky zobrazuje obrázek 3.11. Nejprve byly analyzovány provozní historie se samostatnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité, pro než jsou výsledky parametrizace spolu s referenčními výsledky vykresleny na obrázku 3.11a. Parametrizace ve srovnání s referenčními výsledky vykazuje velmi dobrou spolehlivost i v případě tohoto účinného průřezu, což je patrné z obrázku 3.11b. Mírně horší výsledky byly získány pro historie se změnami výkonu, což bylo diskutováno již v předchozím textu a je to dáný mírně odlišným spektrem neutronů pro historie se změnou výkonu oproti ostatním provozním historiím. Taktéž byla testována parametrizace pro historie se společnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité, jejíž výsledky jsou vykresleny na obrázku 3.11c. I v tomto případě lze spolehlivě získat hodnoty účinných průřezů se zahrnutím opravy na spektrální historii, což je patrné z obrázku 3.11d. Poslední analyzované byly provozní historie se samostatnými změnami hustoty moderátoru a současnými změnami hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité, pro které výsledky parametrizace spolu s referenčními výpočty z HELIOSu zobrazuje obrázek 3.11e. Relativní odchylky jednotlivých historií od nominální historie pro parametrizaci i HELIOS ukazuje obrázek 3.11f, odkud je zřejmé, že i pro analyzované provozní historie dosahuje parametrizace velmi dobrých výsledků ve srovnání s referenčními výsledky z HELIOSu.

Na závěr bude demonstrováno, že lze atomovou hustotu ^{239}Pu využít i pro parametrizaci dalších makroskopických účinných průřezů. Pro vybrané provozní historie byly ukázány opravy na makroskopických účinných průřezech pro energii uvolněnou ze štěpení a produkci neutronů ze štěpení v tepelné grupě a také pro rozptyl neutronů z tepelné do rychlé grupy neutronů, pro než jsou výsledky parametrizace spolu s referenčními výsledky zobrazeny na obrázku 3.12. Z obrázků 3.12a a 3.12c je patrné, že oprava s využitím atomové hustoty ^{239}Pu zafungovala velice dobře pro makroskopické účinné průřezy pro energii uvolněnou ze štěpení a produkce neutronů ze štěpení v tepelné grupě. Obrázky 3.12b a 3.12d ukazují relativní odchylky jednotlivých provozních historií od nominální historie. Z těchto obrázků je zřejmé, že odlišné spektrum neutronů jednotlivých provozních historií oproti nominální historii se výrazně projevuje na hodnotách účinných průřezů, a to znamená, že pokud bude do parametrizace účinných průřezů zahrnuta oprava s využitím atomové hustoty ^{239}Pu dojde především při vyšších vyhřeňích k jejímu zpřesnění. Obrázek 3.12e ukazuje výsledky parametrizace spolu s referenčními výpočty z HELIOSu pro makroskopický účinný průřez pro rozptyl z tepelné do rychlé grupy pro historie se současnými změnami výkonu a koncentrace kyseliny borité. Relativní odchylky jednotlivých historií od nominální provozní historie jsou zobrazeny na obrázku 3.12f, z něhož je patrné, že parametrizace dosahuje velice spolehlivých výsledků ve srovnání s referenčními výsledky z HELIOSu. Taktéž se ukázalo, že opravu s využitím atomové hustoty ^{239}Pu lze využít i pro další účinné průřezy, na kterých se projevuje odlišná spektrální historie.

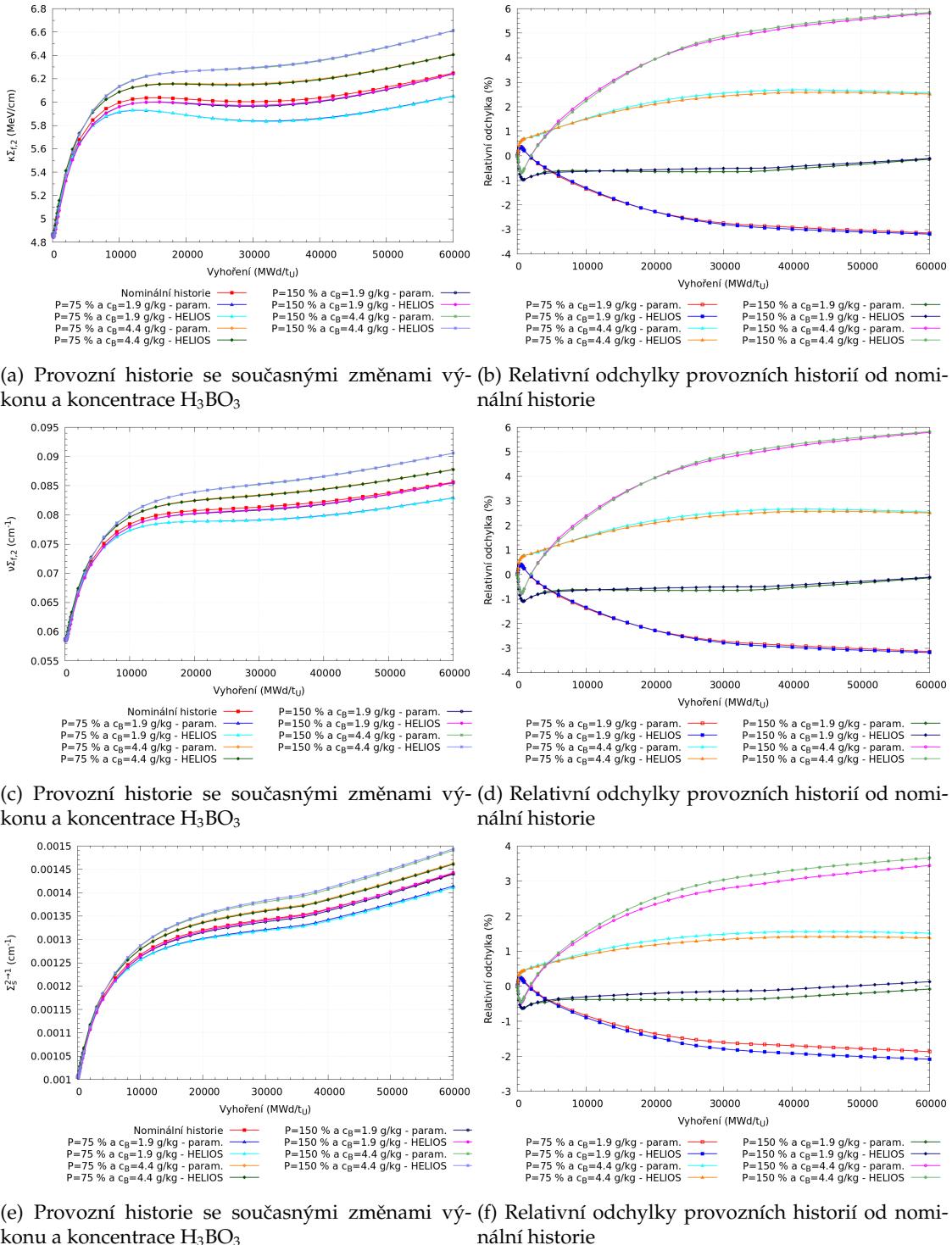
Celkově lze konstatovat, že parametrizace makroskopických účinných průřezů s využitím atomové hustoty ^{239}Pu se ukázala jako velice spolehlivá pro všechny analyzované provozní historie, a to i při současné změně více provozních parametrů. Ve všech případech byla prokázána vysoká spolehlivost parametrizace, i přestože k výpočtu podobnostního čísla spektrální historie bylo použito pouze několik historií se samostatnými změnami provozních parametrů. Lokální atomové hustoty ^{239}Pu v approximačních funkcích (3.7) byly pro jednotlivé provozní historie určovány pomocí modelu aktinoidů s parametrizovanými mikroskopickými účinnými průřezy a konkretními hustotami toku neutronů pro danou provozní historii.



Obrázek 3.10: Závislost makroskopických účinných průřezů pro štěpení v tepelné grupě na vyrobení získaná pomocí parametrisace s referenčními hodnotami z HELIOSu pro různé provozní historie (vpravo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)



Obrázek 3.11: Závislost makroskopických účinných průřezů pro absorpci v tepelné grupě na vyhoření získaná pomocí parametrisace s referenčními hodnotami z HELIOSu pro různé provozní historie (vpravo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)



Obrázek 3.12: Závislost dalších makroskopických účinných průřezů na vyhoření získaná přímou opravou s referenčními hodnotami z HELIOSu pro různé provozní historie (vpravo) a porovnání jednotlivých provozních historií s nominální historií (vpravo)

Závěr

Ve výzkumném úkolu byl nejprve stručně popsán postup parametrizace makroskopických účinných průřezů v makrokódu ANDREA, jejíž spolehlivost byla testována na příkladu jednoho palivového proutku reaktoru VVER-1000. Ukázalo se, že s rostoucím vyhořením se snižuje spolehlivost parametrizace ve srovnání s referenčními hodnotami z HELIOSu, přičemž dosahované nepřesnosti nabývaly nezanedbatelných hodnot. Tento fakt byl přisuzován zanedbání spektrální historie v parametrizaci účinných průřezů. Pro potvrzení vlivu spektrální historie na makroskopické účinné průřezy byly v HELIOSu provedeny separátní výpočty historií se změnami provozních parametrů, ve kterých byl navíc definován odskok na nominální provozní stav z důvodu, aby mohl být oceněn pouze vliv odlišné provozní historie. Tím bylo zajištěno, že všechny provozní parametry, tj. teplota paliva, hustota moderátoru aj., byly pro všechny provozní historie shodné s nominální historií a pouze izotopické složení bylo odlišné. Při porovnání výsledků z hodnocení parametrizace a vlivu provozní historie se opravdu ukázalo, že zanedbání provozní historie je jednou z příčin, která způsobuje nepřesnosti v parametrizaci. V poslední části kapitoly 1 bylo navrženo řešení, které by mohlo zohlednit vliv spektrální historie s využitím atomové hustoty ^{239}Pu jako jejího vhodného indikátoru. Aby mohl být navržený postup realizován, bylo nutné dokázat predikovat atomovou hustotu ^{239}Pu pro libovolný provozní stav a najít vhodné approximační funkce spektrální historie.

Stěžejní částí výzkumného úkolu bylo popsání a implementování modelu řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu , kterým se podrobně zabývala kapitola 2. V modelu byl uvažován pouze zjednodušený linearizovaný řetězec a k řešení jeho bilančních rovnic byla velice efektivně využita Batemanova metoda, pomocí které byla získána analytická řešení bilančních rovnic. Model řetězce aktinoidů byl implementován v programovacím jazyce Ruby a jeho spolehlivost byla ověřena na vybraném typu palivového souboru. V modelu byly testovány provozní historie se změnou výkonu, hustoty moderátoru, koncentrace kyseliny borité a jejich kombinace, přičemž v prvním kroku byly použity známé dvougrupové hustoty toku neutronů a mikroskopické účinné průřezy. S nimi bylo dosaženo uspokojivých výsledků predikovaných atomových hustot aktinoidů, ovšem v praxi nejsou známy jejich hodnoty pro konkrétní provozní historie. Z tohoto důvodu byla v modelu aktinoidů uvažována jednoduchá parametrizace mikroskopických účinných průřezů, která spočívala v sestrojení approximačních funkcí z výpočtu odskoků uvažovaných provozních parametrů. Následně bylo provedeno testování spolehlivosti modelu s parametrizovanými mikroskopickými účinnými průřezy a ukázalo se, že atomové hustoty uvažovaných aktinoidů lze určit s téměř stejnou přesností jako při použití konkrétních mikroskopických účinných průřezů pro danou provozní historii. To znamená, že pomocí modelu bylo možné predikovat atomové hustoty aktinoidů pro libovolný provozní stav s přijatelnou přesností. Je nutné poznamenat, že ve všech případech řešení bilančních rovnic byly použity konkrétní dvougrupové hustoty toku neutronů pro danou provozní historii. V případě, že by model aktinoidů byl implementován do makrokódu, byly by použity dvougrupové hustoty toku neutronů vypočítané pomocí makrokódu.

Poslední kapitola 3 se již zabývala samotnými opravami makroskopických účinných průřezů zohledňujících spektrální historii. Nejprve byla provedena oprava pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů. Díky tomu, že v modelu byla implementována Batemanova metoda pro řešení bilančních rovnic aktinoidů, mohl být model jednoduše rozšířen o další důležité aktinoidy, které byly taktéž použity k opravě makroskopických účinných průřezů. Přímá úprava atomových hustot aktinoidů spočívá v tom, že je zohledněno rozdílné izotopické složení aktinoidů mezi histo-

riem se změnou provozních parametrů a nominální historií. Opravy účinných průřezů pomocí přímé úpravy atomových hustot aktinoidů vykazovala velice dobrých výsledků a její hodnoty se pro většinu testovaných provozních historií téměř shodovaly s referenčními výsledky z HELIOSu.

Druhou zkoumanou metodou pro zohlednění spektrální historie byla parametrisace s využitím atomové hustoty ^{239}Pu . Nejprve byly navrhnuty vhodné approximační funkce, ve kterých byla uvažována relativní lineární závislost na ^{239}Pu a které udávají relativní změnu makroskopického účinného průřezu v závislosti na relativní změně atomové hustoty ^{239}Pu dané provozní historie oproti nominální provozní historii. Pro jednotlivé makroskopické účinné průřezy bylo nutné určit koeficienty approximačních funkcí na základě proložení závislosti relativních změn daných makroskopických účinných průřezů na relativní změně atomové hustoty ^{239}Pu pomocí approximace metodou nejmenších čtverců. Ukázalo se, že podobnostní čísla určená na základě historií s jednou kladnou a zápornou změnou výkonu, hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité téměř odpovídají ve všech krocích vyhoření podobnostním číslům určeným na základě velkého počtu provozních historií. K opravě makroskopických účinných průřezů s využitím atomové hustoty ^{239}Pu pak byly využity právě podobnostní čísla určená pouze pomocí několika historií, a to z důvodu, aby tento postup mohl být přenesen do praxe, kde jistě není žádoucí, aby bylo nutné pomocí mikrokódu napočítat obrovský počet provozních historií. Parametrisace makroskopických účinných průřezů pomocí atomové hustoty ^{239}Pu byla testována opět pro historie se změnami výkonu, hustoty moderátoru, koncentrace kyseliny borité a jejich kombinacemi, přičemž ve všech analyzovaných případech bylo dosaženo výsledků, které vykazovaly velice dobré shody s referenčními výsledky z HELIOSu.

Ve výzkumném úkolu byly popsány metody, pomocí kterých lze zpřesnit parametrisaci makroskopických účinných průřezů, a to díky zohlednění spektrální historie vyhořívání. V dalším pokračování je plánováno navrhnuté postupy opravy účinných průřezů implementovat do makrokódu ANDREA a provést přepočty celozónových výpočtů vyhoření, ve kterých by se zpřesnění parametrisace makroskopických účinných průřezů mělo projevit. Použití přímé úpravy atomových hustot aktinoidů v makrokódu je lákavé z důvodu, že by nemusely být upraveny aplikační knihovny a oprava by spočívala pouze ve výpočtu lokálních atomových hustot aktinoidů pomocí implementovaného modelu aktinoidů. Ale je předpokládáno, že hustoty toků neutronů vypočítané makrokódem budou mít značný vliv na přesnost výpočtu atomových hustot aktinoidů, čímž by došlo k znepřesnění opravy. Naopak v případě opravy účinných průřezů s využitím atomové hustoty ^{239}Pu je předpokládáno, že díky zvolenému tvaru approximačních funkcí i zhoršená přesnost predikce atomové hustoty ^{239}Pu v makrokódu nebude hrát velkou roli při parametrisaci makroskopických účinných průřezů. Avšak pro její použití bude nutné do aplikačních knihoven makrokódu doplnit podobnostní čísla spektrální historie a také bude nutné pozorně vybrat provozní historie, které budou použity pro jejich výpočet. Taktéž bude nezbytné se přesvědčit, že předpoklad uvažování pouze několika historií pro určení podobnostního čísla bude platný pro všechny typy palivových souborů. Tvrzení související s implementováním do makrokódu ANDREA se ukáží až po jeho provedení a následném testování.

Bibliografie

1. HAVLŮJ, F. *ANDREA an integrated framework for in-core fuel management analyses: PHD thesis.* Praha, 2013. Disertační práce. České vysoké učení technické v Praze. Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderných reaktorů.
2. VOČKA, R.; HAVLŮJ, F.; VYSOUDIL, J. *Popis metodiky programu ANDREA, r3.* 2019. Technická zpráva. ÚJV-Z-2631.
3. SKLENKA, L.; HERALTOVÁ, L. *Provozní reaktorová fyzika.* Praha: České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, 2010. ISBN 978-80-01-05901-2.
4. HAVLŮJ, F. *QUADRIGA: popis systému a uživatelský manuál.* 2009. Technická zpráva. ÚJV Z-13259.
5. BILODID, Y. *Spectral History Modeling In The Reactor Dynamics Code DYN3D [online].* 2014 [cit. 2021-03-01]. Vědecko-technická zpráva. HZDR-051. Dostupné z: https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/46/021/46021401.pdf?r=1&r=1.
6. FRÝBORT, J.; FRÝBORTOVA, L. *Spojení neutroniky a teplofyziky.* Přednášky k předmětu Fyzika jaderných reaktorů. České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderných reaktorů, 2021.
7. FRÝBORT, J.; FRÝBORTOVA, L. *Interakce neutronů s látkou.* Přednášky k předmětu Fyzika jaderných reaktorů. České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderných reaktorů, 2021.
8. SASAHARA, A. et al. Isotopic analysis of actinides and fission products in LWR high-burnup UO₂ spent fuels and its comparison with nuclide composition calculated using JENDL, ENDF/B, JEF and JEFF. *Journal of Nuclear Science and Technology - J NUCL SCI TECHNOL.* 2008, roč. 45, s. 313–327. Dostupné z DOI: 10.3327/jnst.45.313.
9. HEJZLAR, J.; VOČKA, R.; HAVLŮJ, F. *Kvalifikace výpočetního programu ANDREA, verze 2.3.* 2019. Technická zpráva. ÚJV Z-5158.
10. KNOTT, D.; YAMAMOTO, A. Lattice Physics Computations. In: CACUCI, D. G. (ed.). *Handbook of Nuclear Engineering [online].* Boston, MA: Springer US, 2010, s. 913–1239 [cit. 2021-04-11]. ISBN 978-0-387-98149-9. Dostupné z DOI: 10.1007/978-0-387-98149-9_9.
11. FRÝBORT, J. *Výpočty vyhoření.* Přednášky k předmětu Deterministické metody v reaktorové fyzice. České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderných reaktorů, 2021.
12. MIKISEK, M. *Specifikace aktivní zóny reaktoru VVER.* 2020. Technická zpráva. ÚJV-ORF-2015-009, revize 2020. ÚJV Řež, a.s.
13. BAHADIR, T.; LINDAHL, S.-Ö.; PALMTAG, S. P. SIMULATE-4 MULTIGROUP NODAL CODE WITH MICROSCOPIC DEPLETION MODEL. *American Nuclear Society Topical Meeting in Mathematics & Computations, Avignon, France.* 2005, s. 14.
14. BILODID, Y. et al. Hybrid microscopic depletion model in nodal code DYN3D. *Annals of Nuclear Energy [online].* 2016, vol. 92, s. 397–406 [cit. 2021-03-03]. ISSN 03064549. Dostupné z DOI: 10.1016/j.anucene.2016.02.012.

15. VALENTA, P. *Tutorial 05 - Function approximation — 12NME1 - Numerical methods* [online]. 2021 [cit. 2021-06-01]. Dostupné z: https://valenpe7.github.io/numerical_methods/tutorials/05-interpolation.html.

Příloha A

Řešení bilančních rovnic ^{238}U - ^{239}Pu pomocí metody integračního faktoru

A.1 Řešení bilanční rovnice pro ^{238}U

Rovnice (2.1) představuje lineární diferenciální rovnici s konstantními koeficienty bez pravé strany a její obecné řešení v závislosti na čase τ lze napsat ve tvaru

$$N_U(\tau) = Ae^{-A_U\tau}. \quad (\text{A.1.1})$$

Při uvažování časových kroků s intervalm Δt lze atomovou hustotu ^{238}U v čase $t + \Delta t$ zapsat jako

$$N_U(t + \Delta t) = Ae^{-A_U(t + \Delta t)} \quad (\text{A.1.2})$$

a pro určení konstanty A bude uvažována počáteční podmínka pro $\Delta t = 0$ ve tvaru

$$N_U(t + 0) = N_U(t), \quad (\text{A.1.3})$$

která říká, že pro výpočet atomové hustoty v prvním časovém kroku $t + \Delta t$ bude použita atomová hustota daná materiálovým složením a v dalších časových krocích již budou využity napočítané atomové hustoty z předchozího časového kroku. Dosazením počáteční podmínky do (A.1.2) se získá

$$N_U(t) = Ae^{-A_U t}, \quad (\text{A.1.4})$$

odkud je možné si vyjádřit konstantu A a jejím dosazením do obecného řešení (A.1.1) je poté získáno řešení pro atomovou hustotu ^{238}U s časovým krokem Δt ve tvaru

$$N_U(t + \Delta t) = N_U(t) e^{-A_U \Delta t}. \quad (\text{A.1.5})$$

A.2 Řešení bilanční rovnice pro ^{239}Np

Analogicky bude řešena rovnici (2.2), ve které bude za $N_U(\tau)$ dosazeno obecné řešení (A.1.1), a tedy rovnice (2.2) přechází na tvar

$$\frac{dN_{Np}(\tau)}{d\tau} + A_{Np}N_{Np}(\tau) = C_U Ae^{-A_U\tau}, \quad (\text{A.2.1})$$

kterou lze vyřešit metodou integračního faktoru a její obecné řešení v závislosti na čase τ je poté ve tvaru

$$N_{Np}(\tau) = Be^{-A_{Np}\tau} + A \frac{C_U}{A_{Np} - A_U} e^{-A_U\tau}. \quad (\text{A.2.2})$$

Následně bude vyjádřena atomová hustota N_{Np} v čase $t + \Delta t$ se zahrnutím konstanty A získané z rovnice (A.1.4), což vede na rovnici

$$N_{Np}(t + \Delta t) = B e^{-A_{Np}(t + \Delta t)} + \frac{C_U}{A_{Np} - A_U} N_U(t) e^{-A_U \Delta t}. \quad (\text{A.2.3})$$

Opět bude předpokládána počáteční podmínka pro $\Delta t = 0$ ve tvaru $N_{Np}(t + 0) = N_{Np}(t)$, čímž se získá

$$N_{Np}(t) = B e^{-A_{Np}t} + \frac{C_U}{A_{Np} - A_U} N_U(t). \quad (\text{A.2.4})$$

Úpravou předchozí rovnice je možno získat konstantu B , která má tvar

$$B = \left[N_{Np}(t) - \frac{C_U}{A_{Np} - A_U} N_U(t) \right] e^{-A_{Np}t}, \quad (\text{A.2.5})$$

následným dosazením do vztahu (A.2.3) a úpravou je získáno řešení pro atomovou hustotu ^{239}Np ve tvaru

$$N_{Np}(t + \Delta t) = N_{Np}(t) e^{-A_{Np}\Delta t} + C_U N_U(t) \frac{e^{-A_U \Delta t} - e^{-A_{Np}\Delta t}}{A_{Np} - A_U}. \quad (\text{A.2.6})$$

A.3 Řešení bilanční rovnice pro ^{239}Pu

Se znalostí řešení atomových hustot N_U a N_{Np} lze najít řešení rovnice (2.3) a dosazením obecných řešení (A.1.1) a (A.2.2) přechází rovnice (2.3) na tvar

$$\frac{dN_{Pu}(\tau)}{d\tau} + A_{Pu} N_{Pu}(\tau) = B \lambda_{Np} e^{-A_{Np}\tau} + A \frac{\lambda_{Np} C_U}{A_{Np} - A_U} e^{-A_U \tau}. \quad (\text{A.3.1})$$

Obecné řešení předcházející rovnice lze získat opět pomocí metody integračního faktoru a je možné ho vyjádřit v čase τ jako

$$N_{Pu}(\tau) = C e^{-A_{Pu}\tau} + B \frac{\lambda_{Np}}{A_{Pu} - A_{Np}} e^{-A_{Np}\tau} + A \frac{\lambda_{Np} C_U}{(A_{Np} - A_U)(A_{Pu} - A_U)} e^{-A_U \tau}. \quad (\text{A.3.2})$$

Předchozí rovnice bude opět vyjádřena v $t + \Delta t$ a dále bude upravena za pomoci vztahů (A.1.4) a (A.2.4), ze kterých budou vyjádřeny konstanty A a B , tj.

$$\begin{aligned} N_{Pu}(t + \Delta t) &= C e^{-A_{Pu}(t + \Delta t)} + \frac{\lambda_{Np}}{A_{Pu} - A_{Np}} \left[N_{Np}(t) - \frac{C_U}{A_{Np} - A_U} N_U(t) \right] e^{-A_{Np}\Delta t} + \\ &\quad + \frac{\lambda_{Np} C_U}{(A_{Np} - A_U)(A_{Pu} - A_U)} e^{-F_U \Delta t}. \end{aligned} \quad (\text{A.3.3})$$

Nechť je pro $\Delta t = 0$ předpokládáno $N_{Pu}(t + 0) = N_{Pu}(t)$, což vede na

$$N_{Pu}(t) = C e^{-A_{Pu}t} + \frac{\lambda_{Np}}{A_{Pu} - A_{Np}} N_{Np}(t) + \frac{\lambda_{Np} C_U}{A_{Pu} - A_{Np}} \left[\frac{1}{A_{Pu} - A_U} - \frac{1}{A_{Pu} - A_{Np}} \right] N_U(t), \quad (\text{A.3.4})$$

odkud je možné si vyjádřit konstantu C a následně ji dosadit do vztahu (A.3.3) a pomocí dalších úprav se získá rovnice ve tvaru

$$\begin{aligned} N_{Pu}(t + \Delta t) &= N_{Pu}(t) e^{-F_{Pu} \Delta t} - \frac{\lambda_{Np}}{A_{Pu} - A_{Np}} N_{Np}(t) e^{-A_{Pu} \Delta t} + \frac{\lambda_{Np}}{A_{Pu} - A_{Np}} N_{Np}(t) e^{-A_{Np} \Delta t} + \\ &\quad - \frac{\lambda_{Np} C_U}{A_{Pu} - A_{Np}} N_U(t) \left[\frac{1}{A_{Pu} - A_U} - \frac{1}{A_{Pu} - A_{Np}} \right] e^{-A_{Pu} \Delta t} + \\ &\quad + \frac{\lambda_{Np} C_U}{A_{Pu} - A_{Np}} N_U(t) \left[\frac{e^{-A_U \Delta t}}{A_{Pu} - A_U} - \frac{e^{-A_{Np} \Delta t}}{A_{Pu} - A_{Np}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.3.5})$$

Přeupořádáním jednotlivých členů a upravením se konečně získá výsledná rovnice

$$N_{Pu}(t + \Delta t) = N_{Pu}(t) e^{-A_{Pu}\Delta t} + \lambda_{Np} N_{Np}(t) \left[\frac{e^{-A_{Np}\Delta t} - e^{-A_{Pu}\Delta t}}{A_{Pu} - A_{Np}} \right] + \\ + \frac{\lambda_{Np} C_U}{A_{Np} - A_U} N_U(t) \left[\frac{e^{-A_U\Delta t} - e^{-A_{Pu}\Delta t}}{A_{Pu} - A_U} - \frac{e^{-A_{Np}\Delta t} - e^{-A_{Pu}\Delta t}}{A_{Pu} - A_{Np}} \right]. \quad (\text{A.3.6})$$

Příloha B

Zdrojový kód modelu řetězce aktionoidů ^{238}U - ^{239}Pu

```
require "json"

class PredictConcentration

  def initialize(histories, nominal_option, altered_option)
    @data = JSON[File.read(histories)]
    @nuclides = ["U238", "Np239", "Pu239"]
    @init = {1 => "U238", 2 => "Np239", 3 => "Pu239"}
    @power = altered_option[:power]
    @burnups = @data["bu"]
    @dTTime = delta_time
    @calcData = {"bu" => @burnups}
    ...
  end

  def delta_time
    dTime = []
    time = @burnups.map{ |i| (i * DAY) / @power }
    (1...@burnups.size).each do |i|
      dTime << (time[i] - time[i-1])
    end
    dTime
  end

  def init_matrix(absorption, caption)
    matrix, n = [], @nuclides.size
    (1..n).each do |i|
      matrix << []
      (1..n).each do |j|
        if j == i
          matrix[-1] << absorption[@init[i]]
        elsif j == i - 1
          matrix[-1] << caption[@init[i-1]]
        else
          matrix[-1] << 0.0
        end
      end
    end
    matrix
  end
end
```

```

def solve
(0...@burnups.size).each do |bu|
  @nuclides.each do |actinide|
    @calcData["nd#{actinide}"] ||= []
    i = @init.key(actinide)
    if bu == 0
      @calcData["nd#{actinide}"] << @ndHelios["nd#{actinide}"][0]
    else
      matrix = init_matrix(effective_absorption(bu), effective_caption(bu))
      y = 0.0
      # first sum from 1 to i-1
      (1..i-1).each do |j|
        z_sum = []
        # second sum from j to i-1
        (j..i-1).each do |k|
          z~= 0.0
          z+= (Math.exp(-matrix[k-1][k-1] * @dT[bu-1]) \
            - Math.exp(-matrix[i-1][i-1] * @dT[bu-1])) \
            / (matrix[i-1][i-1] - matrix[k-1][k-1]) * matrix[k][k-1]
          # product from j to i-1
          (j..i-1).each do |n|
            if n !=
              k~z*= (matrix[n][n-1] / (matrix[n-1][n-1] - matrix[k-1][k-1]))
            end
          end
          z_sum <<
        z~end
        y += @calcData["nd#{@init[j]}"][bu-1] * z_sum.reduce(&:+)
      end
      @calcData["nd#{actinide}"] << @calcData["nd#{actinide}"][bu-1] \
        * Math.exp(-matrix[i-1][i-1] * @dT[bu-1]) + y
    end
  end
  @calcData
end
...
end

```

Zdrojový kód B.1: Výňatek ze zdrojového kódu modelu řetězce aktinoidů ^{238}U - ^{239}Pu v programovacím jazyce Ruby

Příloha C

Aproximace metodou nejmenších čtverců

Metoda nejmenších čtverců se využívá k approximaci dat pomocí funkcí a spočívá v minimalizaci součtu čtverců reziduí. Matematický aparát k metodě nejmenších čtverců lze například nalézt v [15]. Implementace polynomiální metody nejmenších čtverců v programovacím jazyce Ruby je uvedena ve zdrojovém kódu C.1.

```
require "matrix"
require "rational"

# xs (array): X-coordinates of a set of datapoints
# ys (array): Y-coordinates of a set of datapoints
# n (int): degree of the approximating polynomial
# return coefficients of the approximating polynomial: a_n*x^n + a_{n-1}*x^{n-1} + \
# + ... + a_0

def polynomial_least_squares(xs, ys, n)
  vm, rv, coef = [], [], []
  raise ArgumentError, "Vectors_x_and_y_are_not_the_same_size!" if xs.size != ys.size
  unless Integer === n and n >= 0
    raise ArgumentError, "Degree_of_the_approximating_polynomial_must_be_a_natural_number_(integer)!"
  end
  (0...n+1).each do |row|
    vm[row] = []
    rv[row] = (0...xs.size).map{ |i| ys[i] * xs[i] ** row }.reduce(&:+)
    (0...n+1).each do |col|
      vm[row][col] = (0...xs.size).map{ |i| xs[i] ** (row + col) }.reduce(&:+)
    end
  end
  # Vandermonde matrix, right vector
  vm, rv = Matrix[*vm], Matrix.column_vector(rv)
  result = vm.inverse * rv
  if result.real?
    result.each { |e| coef << e.to_f }
    return coef.reverse
  else
    raise NoMethodError, "Imaginary_roots!"
  end
end
```

Zdrojový kód C.1: Metoda nejmenších čtverců v programovacím jazyce Ruby