České vysoké učení technické v Praze Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

> Katedra jaderných reaktorů Specializace: Jaderné reaktory



## Využití explicitního vyhořívání aktinoidů pro celozónové výpočty

## Application of Explicit Actinide Depletion in Core Physics Calculations

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Vypracoval: Bc. Miroslav Vejvoda Vedoucí práce: Ing. František Havlůj, Ph.D. Rok: 2022





Břehová 7 115 19 Praha 1

Katedra jaderných reaktorů

Akademický rok: 2021/2022

## ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

Student: Bc. Miroslav Vejvoda

Studijní program: Jaderné inženýrství

Specializace: Jaderné reaktory

Název práce česky: Využití explicitního vyhořívání aktinoidů pro celozónové výpočty

Název práce anglicky: Application of explicit actinide depletion in core physics calculations

#### Pokyny pro vypracování:

- 1. V návaznosti na výzkumný úkol popište implementaci připraveného modelu vyhořívání řetězce <sup>238</sup>U - <sup>239</sup>Pu v makrokódu ANDREA.
- 2. Vytvořte modul pro parametrizaci makroskopických účinných průřezů v závislosti na koncentraci <sup>239</sup>Pu; zejména navrhněte vhodný způsob výběru referenčních historií vyhořívání a určení parametrizačních koeficientů.
- 3. Do modulu pro přípravu knihoven AKIKO implementujte model vyhořívání aktinoidů pro určení referenční koncentrace aktinoidů ve zjednodušeném modelu.
- 4. Jako alternativu k parametrizaci účinných průřezů pomocí změn v koncentraci <sup>239</sup>Pu implementujte také metodu použití spektrálního indexu a jeho integrálu (parametr spektrální historie) a oba přístupy porovnejte.
- 5. Verifikujte implementovaná řešení pomocí přepočtu modelových scénářů vyhořívání, které jsou porovnatelné s výsledky mikrokódu.
- 6. Validujte implementované metody opravy makroskopických konstant zhodnocením jejich dopadu na shodu predikce s provozními daty pro několik kampaní ETE s palivem TVSA-T.

#### Doporučená literatura:

- [1] STACEY, W. M. Nuclear reactor physics. 2nd edition. Weinheim: Wiley-VCH, 2007. ISBN: 978-3-527-40679-1.
- [2] BILODID, Y. et al. Hybrid microscopic depletion model in nodal code DYN3D. *Annals of Nuclear Energy*. 2016, č. 92. ISSN: 0306-4549. DOI: 10.1016/j.anucene.2016.02.012.
- [3] BILODID, Y. et al. Spectral history model in DYN3D: Verification against coupled Monte-Carlo thermal-hydraulic code BGCore. *Annals of Nuclear Energy*. 2015, č. 81. ISSN: 0306-4549. DOI: 10.1016/j.anucene.2015.03.030.
- [4] BAHADIR, T. Modeling of shutdown cooling reactivity effects with simulate. In: *Proceedings of the International Conference on Physics of Reactors, PHYSOR 2014.* 2014.

Jméno a pracoviště vedoucího práce:

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

Datum zadání diplomové práce:18. 10. 2021Datum odevzdání diplomové práce:2. 5. 2022Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

V Praze dne 18. 10. 2021

doc. Ing. Tomáš Trojek, Ph.D.

Garant studijního programu

Ing. Jan Rataj, Ph.D.

Vedoucí katedry



prof. Ing. Igor Jex, DrSc. Děkan

#### Prohlášení

Odevzdáním této diplomové práce souhlasím, že v souladu s příslušnými ustanoveními autorského zákona je ČVUT oprávněno užít diplomovou práci 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 diplomové práce.

Elektronická verze diplomové práce je shodná s tištěnou verzí a obsahuje všechny náležitosti diplomové práce.

Dále prohlašuji, že jsem svoji diplomovou práci vypracoval samostatně a použil pouze podklady (literaturu, projekty, SW atd.) uvedené v přiloženém seznamu.

V Praze dne .....

Bc. Miroslav Vejvoda

#### Poděkování

Rád bych poděkoval vedoucímu diplomové práce Ing. Františku Havlůjovi, Ph.D. za jeho cenné rady, odborné vedení a zejména pomoc při implementaci programových částí. Obrovské poděkování patří Lauře Volejníkové, která nikdy nepřestávala věřit, že se mně zdárně podaří dokončit diplomovou práci, a jejíž optimismus mě vždy držel nad vodou. Nějvětší poděkování ovšem patří mé rodině, která mě během celého studia bezmezně podporovala. Především bych chtěl vyjádřit vděk mým rodičům, kteří mně umožnili studovat.

Bc. Miroslav Vejvoda

#### Název práce: Využití explicitního vyhořívání aktinoidů pro celozónové výpočty

Autor:	Bc. Miroslav Vejvoda
Studijní program: Specializace: Druh práce:	Jaderné inženýrství Jaderné reaktory Diplomová práce
Vedoucí práce:	Ing. František Havlůj, Ph.D. ORF ÚJV Řež, a.s.

*Abstrakt:* Celozónové výpočty neutronově-fyzikálních charakteristik jsou obvykle prováděny pomocí makrokódů, které musí poskytovat výsledky s dostatečnou přesností a navíc ve velice krátkém výpočetním čase. Kvůli tomu je v makrokódech nutné přistupovat k řadě zjednodušení, mezi která patří i parametrizace makroskopických účinných průřezů. Práce se zabývá popisem metod zohledňujících spektrální historii vyhořívání, díky nimž je možné zpřesnit rekonstrukci makroskopických účinných průřezů. Za tímto účelem je do programu ANDREA implementována metoda indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu a metoda spektrálního indexu a jeho integrálu. Pro obě uvedené metody je provedena verifikace pomocí přepočtů modelových scénářů vyhořívání, jejichž výsledky jsou porovnatelné s referenčním řešením z mikrokódu. Stěžejní částí práce je přepočet několika kampaní Jaderné elektrárny Temelín, pro které je provedena validace programu ANDREA s implementovanými metodami spektrální historie vyhořívání na provozních datech.

*Klíčová slova:* Spektrální historie vyhořívání, makroskopické účinné průřezy, parametrizace, makrokód ANDREA, celozónové výpočty

Title:

#### **Application of Explicit Actinide Depletion in Core Physics Calculations**

Author: Bc. Miroslav Vejvoda

*Abstract:* Macrocodes are the standard method for core physics calculations, which must provide results with sufficient accuracy and, moreover, in a very brief running time. This requires several simplifications including a macroscopic cross sections parametrization. This thesis deals with a description of methods taking into account spectral history effects that allow specifying the macroscopic cross sections parametrization. For this purpose <sup>239</sup>Pu history indicator and spectral history index methods are implemented into the ANDREA program. The verification of both methods is performed by using calculations of model depletion scenarios whose results are comparable to the lattice code calculations. The crucial part of this thesis is a calculation of several cycles of the Temelin Nuclear Power Plant, for which the validation of the ANDREA program with implemented spectral history methods is performed on the operating data.

*Key words:* Spectral history effects, macroscopic cross sections, parametrization, ANDREA code, core physics calculations

## Obsah

Seznamy a značení 11			11
Úv	Úvod 17		
De	efinic	e vybraných pojmů	19
1	Prob	olematika spektrální historie vyhořívání	23
	1.1	Vliv energetického spektra neutronů na grupové konstanty	25
	1.2	Metody zohledňující spektrální historii vyhořívání	29
		1.2.1 Indikace pomocí atomové hustoty <sup>239</sup> Pu	29
		1.2.2 Metoda spektrálního indexu a jeho integrálu	32
		1.2.3 Hybridní mikroskopický model vyhořívání	34
2	Výp	očetní program ANDREA	37
	2.1	Základní charakteristika programu	37
	2.2	Nástroj AKIKO a popis aplikační knihovny	38
	2.3	Nástroj ANASTAZIE	39
3	Imp	lementace metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí <sup>239</sup> Pu	41
	3.1	Model vyhořívání řetězce <sup>238</sup> U – <sup>241</sup> Pu v programu ANDREA	41
		3.1.1 Parametrizace mikroskopických účinných průřezů	43
		3.1.2 Testování parametrizace mikroskopických účinných průřezů	45
		3.1.3 Testování spolehlivosti modelu aktinoidů	52
	3.2	Model vyhořívání aktinoidů v modulu AKIKO	55
		3.2.1 Metoda reevaluate_actinides	55
		3.2.2 Výpočet hustot toku neutronů v metodě reevaluate_actinides	57
		3.2.3 Zhodnocení výpočtu atomové hustoty <sup>239</sup> Pu	59
	3.3	Parametrizační modul pro spektrální historii vyhořívání	61
		3.3.1 Třída RelativeBiExponentCorrelation	63
		3.3.2 Metodika pro stanovení podobnostních čísel	65
4	Imp	lementace metody spektrálního indexu a jeho integrálu	69
	4.1	Postup implementace v modulu AKIKO	69
	4.2	Postup implementace v programu ANDREA	71
	4.3	Volba tvaru spektrálního indexu	72
	4.4	Parametrizační modul a metodika stanovení podobnostních čísel spekt-	
		rální historie vyhořívání	73
5	Veri	fikace implementovaných metod	79
	5.1	Zhodnocení na vybraných výpočtech vyhoření	80
	5.2	Komplexní zhodnocení na modelových scénářích vyhořívání	84

6	Vali	dace implementovaných metod na provozních datech	87
	6.1	Definice hodnotících metrik	87
	6.2	Globální zhodnocení kampaní	89
	6.3	Kritická koncentrace kyseliny borité	90
	6.4	Axiální ofset	92
	6.5	Axiální rozložení výkonu	93
	6.6	Radiální rozložení výkonu	94
	6.7	Komentář k celozónovým výpočtům	97
Zá	věr		99
Bil	oliog	rafie	103
Pří	lohy		

A	Zna	čení palivových souborů	i
В	Rad	iální profily rozložení výkonu pro kampaně U1C09 a U1C13	iii
	B.1	Kampaň U1C09 – BOC	iii
	B.2	Kampaň U1C09 – EOC	v
	B.3	Kampaň U1C13 – BOC	vii
	B.4	Kampaň U1C13 – EOC	ix

# Seznamy a značení

### Seznam obrázků

1.1	Schematické znázornění vlivu spektrální historie vyhořívání	24
1.2	Vliv spektrální historie vyhořívání na makroskopické účinné průřezy	27
1.3	Porovnání rekonstruovaných makroskopických účinných průřezů v makro-	
	kódu ANDREA s referenčním výpočtem	28
1.4	Průběh atomové hustoty <sup>239</sup> Pu pro nenominální výpočty vyhoření	30
1.5	Úměrnost mezi změnami makroskopických účinných průřezů a atomo-	
	vými hustotami <sup>239</sup> Pu charakterizující spektrální historii vyhořívání	31
3.1	Schéma zjednodušeného linearizovaného řetězce aktinoidů $^{238}$ U – $^{241}$ Pu $$ .	42
3.2	Grafické znázornění metody prediktor-korektor v modelu aktinoidů	44
3.3	Postup vytváření parametrizačního schématu a aplikačních knihoven v makro	)-
	kódu ANDREA	46
3.4	Porovnání rekonstrukce mikroskopických účinných průřezů na základě	
	odlišných parametrizačních schémat	50
3.5	Přesnost parametrizačních schémat v makrokódu ANDREA pro vybrané	
	mikroskopické účinné průřezy	51
3.6	Porovnání poměrů atomové hustoty <sup>239</sup> Pu mezi makrokódem ANDREA a	
	mikrokódem HELIOS	53
3.7	Zhodnocení výpočtu atomových hustot aktinoidů v makrokódu ANDREA	54
3.8	Porovnání výpočtu nominálních atomových hustot <sup>239</sup> Pu mezi modely v ná-	
• •	stroji AKIKO a v makrokódu ANDREA	60
3.9	Porovnání výpočtu nenominálních atomových hustot <sup>239</sup> Pu mezi modely	( )
0 10	v nástroji AKIKO a v programu ANDREA	62
3.10	Zhodnocení výpočtu atomové hustoty <sup>209</sup> Pu mezi modely v nástroji AKIKO	(0)
0.11	a v makrokodu ANDREA na modelovych scenarich vyhorivani	63
3.11	Porovnani parametrizacnich funkci sestrojenych na zaklade detailnich a	(7
0 10	Pulled vyuzivajici indikator <sup>25</sup> Pulled	67
3.12	Porovnani podobnostnich cisel urcenych na zaklade aproximace detailnich	(0
	a vybraných provoznich historii v metode využívající indikator <sup>20</sup> Pu	60
4.1	Výběr tvaru spektrálního indexu	74
4.2	Porovnání parametrizačních funkcí sestrojených na základě detailních a	
	vybraných provozních historií pro metodu spektrálního indexu	77
5.1	Porovnání přesnosti rekonstrukce sigABSg2 v uvažovaných verzích pro-	
	gramu ANDREA s referenčním výpočtem	81
5.2	Porovnání přesnosti rekonstrukce sigFg1 v uvažovaných verzích pro-	
	gramu ANDREA s referenčním výpočtem	82

5.3	Porovnání přesnosti rekonstrukce sigFg2 v uvažovaných verzích pro- gramu ANDREA s referenčním výpočtem	83
5.4	Přesnost rekonstrukce vybraných grupových konstant v uvažovaných ver- zích programu ANDREA	85
6.1	Absolutní odchylky kritické koncentrace kyseliny borité mezi predikcí a měřením pro kampaň U1C09	91
6.2	Absolutní odchylky kritické koncentrace kyseliny borité mezi predikcí a měřením pro kampař U1C13	92
6.3	Absolutní odchylky axiálního ofsetu mezi predikcí a monitorovacím sys-	92
	témem aktivní zóny pro kampaň U1C09	93
6.4	Absolutní odchylky axiálního ofsetu mezi predikcí a monitorovacím sys-	
	témem aktivní zóny pro kampaň U1C13	93
6.5	Profily axiálního rozložení výkonu pro kampaň U1C09	95
6.6	Profily axiálního rozložení výkonu pro kampaň U1C13	96
A.1	Radiální řezy pro vybrané palivové soubory TVSA-T	ii
B.1	Radiální rozložení výkonu PS pro BOC U1C09 – standardní ANDREA	iii
B.2	Radiální rozložení výkonu PS pro BOC U1C09 – ANDREA- <sup>239</sup> Pu	iv
B.3	Radiální rozložení výkonu PS pro BOC U1C09 – ANDREA-SI	iv
B.4	Radiální rozložení výkonu PS pro EOC U1C09 – standardní ANDREA	v
B.5	Radiální rozložení výkonu PS pro EOC U1C09 – ANDREA- <sup>239</sup> Pu	vi
B.6	Radiální rozložení výkonu PS pro EOC U1C09 – ANDREA-SI	vi
B.7	Radiální rozložení výkonu PS pro BOC U1C13 – standardní ANDREA	vii
B.8	Radiální rozložení výkonu PS pro BOC U1C13 – ANDREA- <sup>239</sup> Pu	viii
B.9	Radiální rozložení výkonu PS pro BOC U1C13 – ANDREA-SI	viii
B.10	Radiální rozložení výkonu PS pro EOC U1C13 – standardní ANDREA	ix
B.11	Radiální rozložení výkonu PS pro EOC U1C13 – ANDREA- <sup>239</sup> Pu	x
B.12	Radiální rozložení výkonu PS pro EOC U1C13 – ANDREA-SI	x

### Seznam tabulek

1	Hodnoty hlavních parametrů pro nominální provozní historii	21
3.1 3.2	Parametrizační funkce standardně používané v makrokódu ANDREA Parametry odskokových výpočtů standardně používaných pro výpočet	47
	koeficientů parametrizačních funkcí	47
3.3	Modelové scénáře vyhořívání pro palivo TVSA-T	49
6.1	Globální zhodnocení kampaní U1C09 až U1C14	90
6.2	Zhodnocení predikované a měřené kritické koncentrace kyseliny borité pro kampaně U1C09 až U1C14	90
6.3	Statistické zhodnocení axiálního rozložení výkonu pro kampaně U1C09 až	
	U1C14	94
6.4	Statistické zhodnocení radiálního rozložení výkonu pro kampaně U1C09	
	až U1C14	95

### Seznam zdrojových kódů

3.1	Parametrizační manifest s metodou indikace spektrální historie vyhoří-	
	vání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup> Pu	65
4.1	Parametrizační manifest s metodou spektrálního indexu a jeho integrálu	76

### Seznam veličin

Veličina	Význam	Jednotka
$A_{\rm i}, C_{\rm i}$	Efektivní přeměny nuklidu i	s <sup>-1</sup>
$\mathcal{A}$	Matice efektivních přeměn nuklidů	s <sup>-1</sup>
AO	Axiální ofset	_
В	Vyhoření	MWd/t <sub>U</sub>
$B_{1}^{2}$	Kritický geometrický faktor (kritický buckling)	cm <sup>-2</sup>
$c_{\rm B}$	Koncentrace kyseliny borité	g kg <sup>-1</sup>
$D_{\mathrm{g}}$	Difuzní koeficient v grupě g	cm <sup>-1</sup>
dBC	Metrika pro absolutní rozdíl koncentrace kyseliny borité	%
dFHA	Metrika pro absolutní rozdíl koeficientu nevyrovnání vý-	%
	konu palivového souboru	
dAXP	Metrika pro absolutní rozdíl relativního výkonu po výšce	%
	palivového souboru	
$\Delta_i$	Rozdíl predikovaného a monitorovaného výkonu pro pali-	-
	vový soubor i	
FHA	Koeficient nerovnoměrnosti výkonu	-
$f_{ m r,g}$	Parametrizační funkce závislá pouze na jednom z provoz-	-
	ních parametrů pro účinný průřez reakce r a grupy ${ m g}$	
$h_{ m r,g}$	Parametrizační funkce zohledňující spektrální historii vy-	-
	hořívání pro účinný průřez reakce r a grupy ${ m g}$	
$k_{\infty}$	Koeficient násobení v nekonečném prostředí	-
$k_{ m ef}$	Efektivní koeficient násobení	-
J	Hustota proudu neutronů	$cm^{-2} s^{-1}$
$N_{\parallel}$	Atomová hustota	$b^{-1} cm^{-1}$
$N^{\star}$	Predikovaná atomová hustota	$b^{-1} cm^{-1}$
$N_{P_{\underline{u}}}$	Atomová hustota <sup>239</sup> Pu	$b^{-1} cm^{-1}$
$\delta \sqrt{N_{\mathrm{Pu}}}$	Proměnná sloužící pro indikaci spektrální historie vyhoří-	-
	vání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup> Pu	
$\delta SH$	Proměnná integrálu spektrálního indexu	-
$\delta p$	Relativní odchylka veličiny p	-
$\Delta p$	Absolutní odchylka veličiny p	_
$p_{\mathrm{M}}$	Tlak moderátoru	MPa
$q_V$	Měrný tepelný výkon vztažený na jednotku objemu	W cm <sup>-3</sup>
P	Výkon palivového souboru	W g <sup>-1</sup>
$P_p$	Percentil s hodnotou p	%
S	Zdrojový člen neutronů	cm <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup>
SI	Spektrální index	_
sh	Obecná proměnná spektrální historie vyhořívání	_
SH	Integrál spektrálního indexu	-

Veličina	Význam	Jednotka
$T_{ m F}$	Teplota paliva	°C
$T_{\mathrm{M}}$	Teplota moderátoru	°C
V	Objem	cm <sup>3</sup> nebo m <sup>3</sup>
$\alpha_{\rm r,g} \beta_{\rm r,g}$	Koeficienty parametrizačních funkcí	-
ε	Maximální zvolená odchylka mezi dvěma iteracemi	-
$\kappa$	Energie uvolněná při štěpení	J nebo eV
$\lambda$	Rozpadová konstanta	s <sup>-1</sup>
ν	Výtěžek neutronů emitovaných ze štěpení	-
$ ho_{ m F}$	Hustota paliva	g cm <sup>-3</sup>
$ ho_{ m M}$	Hustota moderátoru	g cm <sup>-3</sup>
$\sigma$	Střední kvadratická odchylka	%
$\sigma_{ m r,g}$	Mikroskopický účinný průřez reakce r v grupě ${ m g}$	b nebo cm <sup>-2</sup>
$\Sigma_{ m r,g}$	Makroskopický účinný průřez reakce r v grupě ${ m g}$	cm <sup>-1</sup>
$\phi$	Hustota toku neutronů	cm <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup>
$\chi$	Štěpné spektrum neutronů	_

### Seznam indexů

Index	Význam
a	Absorpce neutronů
$\operatorname{alt}$	Provozní stav se změněnými parametry oproti jejich nominálním hodnotám
b	Dolní polovina aktivní zóny
В	Kyselina boritá
calc	Veličina vypočítaná programem ANDREA
ef	Efektivní hodnota
f	Štěpení neutronů
$\mathbf{F}$	Palivo
$\mathbf{FA}$	Palivový soubor
$\mathrm{g},\mathrm{h},\mathrm{h}'$	Energetická grupa $g, h, h'$
Μ	Moderátor
monitor	Veličina získaná z monitorovacího systému aktivní zóny
nom	Nominální provozní stav
$\mathbf{S}$	Rozptyl neutronů
r	Reakce r
$\operatorname{ref}$	Referenční hodnota
$\mathbf{t}$	Horní polovina aktivní zóny
tot	Celková hodnota
$\hat{x}$	Veličina $x$ vztahující se k její jednotkové hodnotě
$\overline{x}$	Střední hodnota veličiny x
$\gamma$	Radiační záchyt neutronů
_	Veličina se zápornou změnou proměnné
+	Veličina s kladnou změnou proměnné
$\infty$	Parametr v nekonečném prostředí

### Seznam zkratek

Zkratka	Význam
2D	Dvourozměrný
3D	Třírozměrný
ANDREA	Standardní verze programu ANDREA
ANDREA- <sup>239</sup> Pu	Verze programu ANDREA s implementovanou metodou indikace
	spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup> Pu
ANDREA-SI	Verze programu ANDREA s implementovanou metodou spektrál-
	ního indexu a jeho integrálu
AO	Axiální ofset
AZ	Aktivní zóna
b <hodnota></hodnota>	Výpočty, ve kterých bylo vyhoříváno s danou <hodnotou> koncent-</hodnotou>
	race kyseliny borité
BOC	Začátek kampaně (Beginning Of Cycle)
CMS	Monitorovací systém aktivní zóny (Core Monitoring System)
CRAM	Chebyshevova aproximace racionálními funkcemi
EFPD	Efektivní dny plného provozu (Effective Full Power Day)
ENDF/B-VII.1	Knihovna jaderných dat ve formátu ENDF (Evaluated Nuclear Data
500	File)
EOC	Konec kampaně (End Of Cycle)
EIE	Jaderná elektrána Temelín
fisEg <g></g>	Makroskopický účinný průřez pro energii uvolněnou při štěpení
	v grupe <g></g>
FINPg <g></g>	Makroskopicky ucinny prurez pro produkci neutronu ze stepeni
LIED	V grupe <g></g>
ПГГ hm <sup>0/</sup>	Horky vykollový slav (Hot Full Power)
ПШ % Ц7Р	Hinomosuni procenta Horleý novýkonový stav (Hot Zaro Dowar)
IIZI	Ladorná oloktrárna
је Тта	Palivo spoločnosti WEC pro ETE
md <hodnotas< th=""><th>Výpočty ve kterých bylo vyboříváno s danou zbodnotous tenloty</th></hodnotas<>	Výpočty ve kterých bylo vyboříváno s danou zbodnotous tenloty
mu <nounota></nounota>	chładiya v °C vedoucí na jeho odpovídající hustotu při konstantním
	tlakı
NEM6	Nodální řešič difuzní rovnice pro hexagonální mříž (Nodal Expan-
	sion Method Solver)
OOP	Objektově-orientované programování
ORF	Oddělení reaktorové fyziky a podpory palivového cyklu
p <hodnota></hodnota>	Výpočty, ve kterých bylo vyhoříváno s danou <hodnotou> výkonu</hodnotou>
1	palivového souboru
PS	Palivový soubor
RMS	Střední kvadratická odchylka (Root Mean Square)
sa <nuc>g<g></g></nuc>	Mikroskopický účinný průřez pro absorpci na nuklidu <nuc></nuc>
	v grupě <g></g>
sc <nuc>g<g></g></nuc>	Mikroskopický účinný průřez pro radiační záchyt na nuklidu <nuc></nuc>
	v grupě <g></g>
sf <nuc>g<g></g></nuc>	Mikroskopický účinný průřez pro štěpení na nuklidu <nuc></nuc>
	v grupě <g></g>

Zkratka	Význam
sigABSg <g></g>	Makroskopický účinný průřez pro absorpci v grupě <g></g>
sigrg <g></g>	Makroskopický účinný průřez pro štěpení v grupě <g></g>
IVSA-I Uzb>Czk>	Palivo spolecnosti I VEL pro ETE Palivová kampaži zka pro blok zba Jadorná alaktrárny Tomalín
ÚJV Řež, a.s.	Ústav jaderného výzkumu Řež, a.s.
VVER	Ruský tlakovodní reaktor (Vodo-vodjanov energetičeskij reaktor)
WEC	Westinghouse Electric Company LLC

## Úvod

Výpočetní kódy v současné době představují nezbytný nástroj pro bezpečnostní hodnocení kampaní, projektování a optimalizaci palivových vsázek. Při provozu jaderných reaktorů je nutné rutinně provádět velký počet výpočtů neutronově-fyzikálních charakteristik, jejichž výsledky musí být získány ve velice krátkém výpočetním čase a navíc musí dosahovat dostatečné přesnosti. K tomuto účelu jsou využívány makrokódy představující matematický model, pomocí kterého jsou charakterizovány fyzikální procesy. Přesnost výpočtů závisí na shodě modelu s popisovaným fyzikálním procesem, ale taktéž na kvalitě dat vstupujících do výpočtu. Makrokódy využívají pro popis modelu homogenizované konstanty seskupené do malého počtu energetických grup, které slouží pro nahrazení přesné geometrie modelu. Homogenizované grupové konstanty jsou standardně připravovány pomocí mikrokódů, ve kterých se provádí výpočet vyhoření samostatných palivových souborů v nekonečné mříži s vhodnými hraničními podmínkami. Ovšem při celozónových výpočtech se provozní parametry pohybují v poměrně širokém rozmezí a jistě není možné připravit homogenizované grupové konstanty pro všechny jejich kombinace. Kvůli tomu je nezbytné přistoupit k parametrizaci homogenizovaných grupových konstant neboli k jejich aproximaci pro různé provozní stavy na základě dat připravených pomocí mikrokódů.

Diplomová práce navazuje na výzkumný úkol *Explicitní model vyhořívání aktinoidů* [1], v němž bylo ukázáno, že je možné zpřesnit standardně používanou rekonstrukci homogenizovaných grupových konstant díky zahrnutí vlivů způsobených spektrální historií vyhořívání, tj. vlivem energetického spektra neutronů zapříčiněného vyhoříváním na nenominálních provozních parametrech. V parametrizaci homogenizovaných makroskopických účinných průřezů je zohledněna spektrální historie s využitím indikátoru <sup>239</sup>Pu, jehož atomové hustoty byly určeny pomocí modelu vyhořívání aktinoidů.

Cílem diplomové práce je navrhnutý postup parametrizace homogenizovaných grupových konstant zahrnující vlivy spektrální historie vyhořívání implementovat do makrokódu ANDREA a následně provést jeho verifikaci a validaci. Kapitola 1 stručně seznamuje s problematikou spektrální historie vyhořívání a hodnotí vliv jejího nezohlednění v makrokódu ANDREA. Následně jsou prezentovány metody, pomocí kterých lze zohlednit spektrální historii vyhořívání v rekonstrukci homogenizovaných grupových konstant. V kapitole 2 je představen makrokód ANDREA a jeho pomocné nástroje, které jsou v celé diplomové práci využívány. Stěžejní část diplomové práce se zabývá implementací metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu do makrokódu ANDREA. Kapitola 3 nejprve seznamuje s modelem vyhořívání řetězce aktinoidů <sup>238</sup>U – <sup>241</sup>Pu, který je použit pro predikci atomové hustoty <sup>239</sup>Pu v programu ANDREA. Následuje popis implementace všech nezbytných úloh, které je třeba provést, aby bylo možné do rekonstrukce homogenizovaných grupových konstant v programu ANDREA zahrnout spektrální historii vyhořívání pomocí indikátoru <sup>239</sup>Pu. V kapitole 4 je prezentován popis implementace metody spektrálního indexu a jeho integrálu, která je uvažována jako alternativa pro zohlednění spektrální historie vyhořívání v makrokódu ANDREA. Verifikace obou metod zohledňujících spektrální historii vyhořívání v parametrizaci homogenizovaných grupových konstant je provedena v kapitole 5. Pro implementované metody je proveden přepočet modelových scénářů vyhořívání, jejichž výsledky jsou porovnatelné s referenčním řešením z mikrokódu. Navíc jsou porovnány verze programu ANDREA s implementovanými metodami spektrální historie vyhořívání s jeho standardní verzí, díky čemuž je možné pozorovat dopad implementovaných metod na přesnost rekonstrukce homogenizovaných grupových konstant. Z hlediska celozónových výpočtů představuje kapitola 6 nejzajímavější část diplomové práce. Pomocí programu ANDREA s implementovanými metodami spektrální historie vyhořívání je přepočítána devátá až čtrnáctá kampaň prvního bloku Jaderné elektrárny Temelín se zavezeným palivem TVSA-T. Celozónové výpočty jsou taktéž provedeny standardní verzí programu ANDREA a všechny získané výsledky jsou porovnány s provozními daty. Díky tomu lze sledovat dopad implementovaných metod spektrální historie vyhořívání na shodu predikce neutronově-fyzikálních charakteristik s provozními daty.

Obecně lze říci, že navrhovaný postup by se dal přenést do libovolného makrokódu, který v rekonstrukci homogenizovaných grupových konstant nezohledňuje spektrální historii vyhořívání.

## Definice vybraných pojmů

#### Mikrokód

Pod pojmem mikrokód jsou označovány výpočetní kódy, které řeší transportní rovnici neutronů s energetickými a úhlovými závislostmi pro nezjednodušené geometrické struktury. Mikrokódy lze rozdělit na deterministické, do kterých lze zařadit HELIOS nebo modul TRITON z výpočetního balíku SCALE, a na stochastické, do kterých spadá Serpent, MCNP nebo KENO z balíku SCALE.

#### Makrokód

Výpočetní kódy využívající zjednodušené výpočetní metody, zjednodušené energetické rozdělení a geometrii popsanou pomocí homogenizovaných dat lze označit pod pojmem makrokódy. Transport neutronů je obvykle řešen na základě zjedodušených přístupů, jakými mohou být difuzní teorie nebo SP3 metoda. Pomocí makrokódů jsou počítány neutronově-fyzikální charakteristiky aktivních zón většinou v trojrozměrné geometrii. Příkladem makrokódů mohou být ANDREA, PARCS nebo DYN3D.

#### Grupové konstanty

Veličiny používané pro popis transportu neutronů a interakcí neutronu s látkou jsou ve většině případů energeticky závislé. Přechod veličin se spojitým energetickým spektrem neutronů na skupiny dat, tj. grupy, které mají pevně dané hranice energie, lze označit pod pojmem grupování. V jednotlivých grupách jsou uvažovány fyzikální veličiny konstantní. Grupové konstanty využívané v makrokódech jsou obvykle seskupeny do malého počtu energetických grup. Použití grupových konstant je navíc omezeno na modely podobající se těm, ve kterých proběhla jejich příprava.

#### Homogenizace makroskopických účinných průřezů

Jaderný reaktor je tvořen prostorově heterogenní soustavou materiálů složenou z palivových tablet, pokrytí, moderátoru, chladiva, konstrukčních materiálů a mnoho dalších, které mají přesně danou geometrickou strukturu. V makrokódech ovšem není definovaná podrobná geometrická struktura, ale jsou uvažovány elementy o zjednodušené geometrii. Pro jejich fyzikální popis je nutné provést nahrazení přesných prostorově heterogenních částí reaktoru homogenní směsí materiálů rozmístěných ve stejném objemu jako heterogenní struktura. Přechod k prostorově homogenním datům nezávislých na energii neutronů v dané grupě je označován jako homogenizace makroskopických účinných průřezů.

#### Parametrizace makroskopických účinných průřezů

Při celozónových výpočtech jsou grupové konstanty závislé na provozním stavech reaktoru, kdy je nezbytné zohlednit vliv vyhořívání paliva, teplotu paliva, teplotu a hustotu moderátoru, koncentraci kyseliny borité v moderátoru a přítomnost přechodových štěpných produktů. Výše uvedené parametry se při provozu reaktoru pohybují v širokém rozmezí hodnot a je zřejmé, že pomocí mikrokódů není možné připravit homogenizované grupové konstanty pro kombinace všech uvedených provozních parametrů. Aby bylo možné ocenit libovolné změny lokálních parametrů aktivní zóny na makroskopické účinné průřezy, získávají se jejich hodnoty na základě aproximačních funkcí. Tento postup je pak označován jako parametrizace makroskopických účinných průřezů.

Standardně používanou parametrizaci makroskopickýh účinných průřezů lze zapsat ve tvaru

$$\Sigma_{\rm r,g}^{\rm alt}(B, T_{\rm F}, T_{\rm M}, c_{\rm B}, N_{\rm P}) = \Sigma_{\rm r,g}^{\rm nom}(B) + f_{\rm r,g}^{(1)}(B, T_{\rm F}) + f_{\rm r,g}^{(2)}(B, T_{\rm M}) + f_{\rm r,g}^{(3)}(B, c_{\rm B}) + f_{\rm r,g}^{(4)}(B, N_{\rm P}),$$
(1)

kde

- r značí typ reakce,
- g označuje příslušnou energetickou grupu,
- alt je stav se změněnými provozními parametry vůči jejich nominálním hodnotám,
- B značí hodnotu vyhoření, pro které je uvažována diskrétní závislost,
- *T*<sub>F</sub> označuje teplotu paliva,
- *T*<sub>M</sub> představuje teplotu moderátoru,
- *c*<sub>B</sub> je koncentrace kyseliny borité v moderátoru,
- N<sub>P</sub> značí atomovou hustotu přechodových štěpných produktů,
- $\Sigma^{nom}_{r,g}$  představuje makroskopický účinný průřez pro reakci r v grupě g pro nominální provozní stav,
- *f*<sup>(k)</sup><sub>r,g</sub> jsou parametrizační funkce závislé pouze na jednom z uvažovaných provozních parametrů, kde *k* ∈ {1, 2, 3, 4}.

Pomocí mikrokódů jsou provedeny výpočty vyhoření na nominálních provozních parametrech s definovanými odskoky, ve kterých se obvykle uvažuje jedna kladná a záporná změna provozního parametru. Na základě uvedených výpočtů se určí koeficienty parametrizační funkcí  $f_{r,g}^{(k)}$ .

#### Energetické spektrum neutronů

Pod pojmem energetické spektrum neutronů se rozumí energetická distribuce neutronů v závislosti na jejich energii. Posun spektra do vyšších energií, tj. zvyšování průměrné energie neutronů, je označováno jako tvrdnutí spektra. Naopak snižování podílu rychlých neutronů ve spektru se označuje jako jeho měknutí.

#### Spektrální historie vyhořívání

Vliv energetického spektra neutronů zapříčiněný vyhoříváním na nenominálních provozních parametrech je definován pod pojmem spektrální historie vyhořívání. V anglické literatuře lze uvedený termín naleznout pod označením *history effects*.

#### Nominální provozní historie

Pod tímto pojmem se v celé práci rozumí vyhořívání na hodnotách provozních parametrů palivových souborů, které shrnuje tabulka 1. Níže uvedené hodnoty jsou shodné pro všechny typy uvažovaných palivových souborů. V tabulce 1 není uvedena referenční teplota paliva, neboť je určována pro každý krok vyhoření na základě teplotního modelu. Při výpočtu vyhořívání na nominálních provozních parametrech jsou uvažovány kroky vypsané v posledním řádku tabulky 1, přičemž je zde použit zápis pomocí lomítka, který říká, na kolik rovnocených podkroků od posledního dosaženého vyhoření je daný krok rozdělen, tj. značení 4000/3 odpovídá vyhoření s hodnotami 2000, 3000 a 4000 MWd/t<sub>U</sub>.

Parametr	Hodnota
Výkon (W/g)	36,69
Tlak moderátoru (MPa)	15,7
Teplota moderátoru (°C)	305,8
Hustota moderátoru (g/cm <sup>3</sup> )	0,714608
Koncentrace kyseliny borité (g/kg)	2,8
Kroky vyhořívání (MWd/t <sub>U</sub> )	0,005; 150/3; 500/3; 1000/3; 4000/3; 12000/4; 60000/24

Tabulka 1: Hodnoty hlavních parametrů pro nominální provozní historii

#### Referenční výpočet

V práci jsou za účelem verifikace implementovaných metod provedeny referenční výpočty pomocí mikrokódu, které jsou porovnatelné se získanými výsledky. Pro verifikaci je využit mikrokód HELIOS verze 2.1.4a, který se standardně používá pro přípravu produkčních knihoven makrokódu ANDREA. HELIOS je 2D deterministický transportní kód, který umožňuje počítat neutronově-fyzikální charakteristiky palivových mříží v závislosti na vyhoření. Pro řešení transportní rovnice je použit numerický algoritmus založený na metodě první srážky, který byl uvažován ve všech výpočtech provedených v diplomové práci. Popřípadě je možné pro řešení transportní rovnice nastavit metodu

charakteristik. Při výpočtech byly použity 49grupové knihovny jaderných dat založené na zhodnocené knihovně ENDF/B-VII.1 [2].

Je nezbytné poznamenat, že tvorba vstupních souborů pro mikrokód HELIOS je značně složitá a ruční přípravou prakticky neproveditelná. Z tohoto důvodu byl pro vytvoření veškerých vstupních souborů pro mikrokód HELIOS použit nástroj QUADRIGA3 [3]. Vstupní soubory pro HELIOS jsou vytvořeny na základě předdefinovaných šablon, do kterých QUADRIGA3 dodá veškeré potřebné geometrické a fyzikální modely. To znamená, že uživatel definuje pouze typ použitého paliva, základní provozní parametry a stavy, ve kterých se provedou odskokové výpočty.

## Kapitola 1

## Problematika spektrální historie vyhořívání

V současné době se pro celozónové výpočty nejvíce používájí programy založené na difuzním přiblížení a malém počtu energetických grup. S rozvojem výpočetní techniky se v analýzách aktivních zón stále častěji prosazují deterministické kódy řešící Boltzmanovu transportní rovnici s velkým počtem energetických grup a také stochastické kódy, v nichž lze modelovat téměř libovolnou prostorovou geometrii a dodržet velkou shodu s realitou. Ovšem z hlediska výpočetní náročnosti nejsou pro použití při bezpečnostním hodnocení kampaně a projektování palivových vsázek prozatím vhodné, a to především kvůli tomu, že je nezbytné provést velký počet výpočtů, které by pomocí nich nebylo možné získat v analyzovatelných časech [4].

Makrokódy založené na difuzním přiblížení vyžadují pro své fungování aplikační knihovny, které obsahují všechna nezbytná data potřebná k výpočtu. Knihovny jsou připravovány na základě výsledků výpočtů získaných pomocí mikrokódů, v nichž se obvykle počítá vyhořívání jednotlivých palivových souborů pro horký výkonový stav na nominálních provozních parametrech v nekonečné mříži s vhodnými hraničními podmínkami. Navíc v každém kroku vyhoření jsou definovány odskokové výpočty zohledňující změny výkonu, koncentrace kyseliny borité, teploty a hustoty chladiva a navíc i přítomnost regulačních orgánů. Výpočty odskoků spočívají v řešení transportní rovnice s konstantami odpovídajícími změněným provozním parametrům, avšak při řešení není již proveden další výpočet vyhoření. To znamená, že pro odskokové výpočty odpovídají atomové hustoty jednotlivých nuklidů nominálnímu provoznímu stavu. Na základě odskokových výpočtů jsou určeny koeficienty parametrizačních funkcí pro grupové konstanty, které jsou v závislosti na vyhoření uloženy do aplikační knihovny spolu s dalšími nezbytnými daty pro výpočet, mezi než patří grupové konstanty pro horký nevýkonový stav a nevyhořívající materiály, tj. především axiální a radiální reflektory [4, 5].

Nominální provozní parametry, při nichž je v mikrokódu počítáno vyhoření, představují střední hodnoty provozních parametrů dosahované v reaktoru během jeho provozu. Z výše popsaného postupu přípravy grupových konstant je patrné, že pokud je proveden mikrokódem pouze jeden výpočet vyhoření s definovanými odskoky, pak pro všechna data uložená v aplikační knihovně odpovídá spektrum neutronů nominálnímu provoznímu stavu. Při celozónových výpočtech se provozní parametry mohou pohybovat v širokém rozmezí hodnot a jakákoli odchylka od nominálních provozních parametrů během vyhořívání způsobí změnu lokálního spektra neutronů, které se liší od spektra, na základě něhož byly připraveny grupové konstanty v aplikační knihovně makrokódu. Vyhořívání za různých spektrálních podmínek vede k odlišnému izotopickému složení, které zapříčiní změnu grupových konstant. Vliv energetického spektra neutronů během vyhořívání na grupové konstanty je označován jako spektrální historie vyhořívání [6, 7].

Spektrální historii vyhořívání nelze postihnout, pokud je knihovna makrokódu připravena na základě jednoho výpočtu vyhoření na nominálních parametrech s definovanými odskokovými výpočty. Již z výše popsaného je zřejmé, že vliv lokálních změn provozních parametrů, tj. teploty paliva a moderátoru, koncentrace kyseliny borité aj., na grupové konstanty je ve výpočtu makrokódu zahrnut na základě parametrizace získané z odskokových výpočtů. Ovšem lokální změna provozních parametrů nemá pouze okamžitý vliv na grupové konstanty, ale projeví se také v podobě odlišné spektrální historie vyhořívání, kterou již nelze zohlednit na základě odskokových výpočtů. Popsaný jev je schematicky znázorněn na obrázku 1.1, který ukazuje nezohlednění spektrální historie vyhořívání ve standardní rekonstrukci grupových konstant provedené na základě odskokových výpočtů [6, 8].



Obrázek 1.1: Schematické znázornění vlivu spektrální historie vyhořívání při standardní rekonstrukci grupových konstant provedené na základě odskokových výpočtů

V makrokódech řešících celozónové výpočty tlakovodních reaktorů není spektrální historie vyhořívání mnohdy uvažována, a to především kvůli tomu, že její vliv na grupové konstanty při nížších hodnotách vyhoření je zanedbatelný. V případě vyhoření, které je uvažováno během provozu tlakovodních reaktorů, je díky zanedbání spektrální historie vyhořívání do výpočtu vnesena pouze nevýznamná nepřesnost. Na druhou stranu vliv spektrální historie vyhořívání je zvláště důležitý pro analýzy varných reaktorů, neboť po výšce reaktoru dochází k výrazné změně objemového podílu páry, který způsobuje nezanedbatelnou změnu energetického spektra neutronů během vyhořívání. Pro přípravu aplikačních knihoven makrokódů počítajících neutronově-fyzikální charakteristiky varných reaktorů pak bývá uvažováno více výpočtů vyhoření s odlišným spektrem neutronů [6, 7].

Stále nebyla zodpovězena otázka, zdali zohlednění spektrální historie vyhořívání

v makrokódech počítající celozónové výpočty tlakovodních reaktorů bude mít výrazný dopad. Vzhledem k častějšímu proměnlivému zatížení (load follow) tlakovodních reaktorů, kdy je výkon snižován na požadavky regulační soustavy, by mohlo být toto téma aktuální. Režim proměnlivého zatížení způsobuje častější a zároveň významnější odchylky od nominálních provozních parametrů, z čehož plyne vyšší vliv energetického spektra neutronů během vyhořívání na grupové konstanty. Dalším aspektem, který by mohl podpořit smysl zohlednění spektrální historie vyhořívání v makrokódu, je nutnost globálně kompenzovat zásobu reaktivity během provozu tlakovodních reaktorů, k čemuž se nejčastěji používá kyselina boritá. Během palivové kampaně se hodnoty koncentrace kyseliny borité pohybují v poměrně širokém rozmezí. Na počátku palivové kampaně je obvykle koncentrace kyseliny borité vyšší než uvažovaná nominální hodnota. To znamená, že energetické spektrum neutronů bude tvrdší než nominální, díky tomu, že se zvýší absorpce tepelných neutronů, a tím se zvýší podíl rychlých neutronů v energetickém spektru. Naopak na konci palivové kampaně bude díky nižší koncentraci kyseliny borité měkčí energetické spektrum neutronů ve srovnání se spektrem, které odpovídá nominálnímu provoznímu stavu. Pokud v makrokódu není zahrnuta změna energetického spektra neutronů způsobená vyhoříváním s výše popsanými změnami koncentrace kyseliny borité, pak by mohlo dojít nepřesnostem při rekonstrukci grupových konstat.

Diplomová práce se bude snažit odpovědět na otázku, zdali by nebylo možné zvýšit přesnost výpočtu makrokódu, pokud by v parametrizaci grupových konstant byla zohledněna spektrální historie vyhořívání.

#### 1.1 Vliv energetického spektra neutronů na grupové konstanty

V následující podkapitole bude stručně zhodnocen vliv energetického spektra neutronů zapříčiněný změnami provozních parametrů během vyhořívání na grupové konstanty. Podrobná analýza byla již provedena ve výzkumném úkolu [1], a proto zde budou uvedeny pouze příklady na několika makroskopických účinných průřezech, které čtenáři mohou pomoci k vytvoření si představy o vlivu spektrální historie vyhořívání.

Vliv energetického spektra neutronů během vyhořívání na homogenizované makroskopické účinné průřezy bude zhodnocen na základě výpočtů provedených mikrokódem HELIOS, který se standardně používá pro přípravu aplikačních knihoven makrokódu ANDREA. Ve 2D výpočtech bude uvažován palivový soubor a47D18<sup>1</sup> reaktoru VVER-1000 v nekonečné mříži, přičemž pro nenominální provozní historie bude vyhoříváno s jedním změněným provozním parametrem vůči jeho nominální hodnotě. Ostatní parametry budou odpovídat nominálnímu provoznímu stavu, jehož hodnoty shrnuje tabulka 1. Navíc bude ve výpočtu nastavena korekce na kritické spektrum, která zajišť uje dosažení podmínek, které odpovídají provozu reaktoru v kritickém stavu. Samotný postup ocenění vlivu odlišného energetického spektra neutronů během vyhořívání na grupové konstanty bude proveden tak, že ve výpočtech vyhoření se změněnými provozními parametry budou definovány odskoky na nominální stav. Díky tomu bude pro odskoky zajištěno, že všechny provozní parametry budou shodné s nominálními a pouze izotopické složení, bude odpovídat výpočtu se změněnými provozními parametry, což je umožněno díky tomu, že pro odskok není proveden další výpočet vyhoření. Pomocí

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Konvence značení palivových souborů reaktoru VVER-1000 používaná na ORF je stručně vysvětlena v příloze A.

výše uvedeného postupu bude možné ocenit pouze vliv na makroskopické účinné průřezy, který se projeví v podobě odlišného energetického spektra neutronů a je způsobený vyhoříváním na změněných provozních parametrech.

Obrázek 1.2 zobrazuje závislosti makroskopických účinných průřezů na vyhoření pro výpočty, v nichž bylo vyhoříváno se změněnými provozními parametry a následně proveden odskok na nominální stav. Uvedený postup umožňuje separátně zohlednit vliv energetického spektra neutronů zapříčiněný vyhoříváním na změněných provozních parametrech, aniž by v daném kroku vyhoření byla zahrnuta změna grupové konstanty způsobená okamžitou změnou provozního parametru. Na obrázku 1.2 použité značení vyjadřuje

- b<hodnota> výpočet vyhoření s <hodnotou> koncentrace kyseliny borité v jednotkách g/kg podělené faktorem 10,
- p<hodnota> výpočet vyhoření s <hodnotou> výkonu v jednotkách W/kg,

přičemž nominální hodnoty jednotlivých provozních parametrů shrnuje tabulka 1. Obrázek 1.2a ukazuje, že vliv odlišného energetického spektra neutronů způsobený vyhoříváním se změněnými provozními parametry na makroskopický účinný průřez pro absorpci v tepelné grupě není zanedbatelný. Na počátku sledovaného vyhořívání nabývají hodnoty makroskopických účinných průřezů téměř identických hodnot pro všechny provozní historie, což je dáno tím, že se izotopické složení všech provozních historií výrazně neliší od nominální provozní historie. Avšak s rostoucím vyhořením se projeví vliv odlišného energetického spektra neutronů, při kterém probíhá vyhořívání, a tím se i výrazně změní izotopické složení, které zapříčiní výraznou změnu v makroskopických účinných průřezech jednotlivých provozních historií. Na obrázku 1.2b jsou vykresleny relativní ochylky výpočtů vyhoření se změněnými provozními parametry od nominálního výpočtu. Odtud je zřejmé, že při maximálním uvažovaném vyhoření dosahují relativní odchylky značných hodnot. Obrázek 1.2b tedy kvantifikuje spektrální historii vyhořívání, tj. uvádí, o kolik procent jsou znepřesněny makroskopické účinné průřezy v jednotlivých krocích vyhoření, pokud by byl zanedbán vliv energetického spektra neutronů během vyhořívání. Pro makroskopický účinný průřez pro štěpení v rychlé grupě bylo taktéž provedeno analogické zhodnocení, jehož výsledky zobrazuje obrázek 1.2c. Z obrázku 1.2d je patrné, že vliv energetického spektra neutronů během vyhořívání se výrazně projevuje i v případě tohoto makroskopického účinného průřezu. Z obrázku 1.2d lze opět sledovat, že na počátku analyzovaného vyhořívání jsou dosahovány pouze velice nízké hodnoty relativních odchylek makroskopického účinného průřezu mezi výpočty se změněnými parametry a nominálním, což opět potvruje, že spektrální historie vyhořívání se výrazněji projeví až při vyšších hodnotách vyhoření.

V následujícím textu bude ověřeno, že zanedbání spektrální historie vyhořívání vnáší nepřesnosti do rekonstrukce grupových konstant v makrokódu, je-li použit standardní tvar parametrizace (1). Pro prozkoumání vlivu spektrální historie vyhořívání byly v makrokódu ANDREA provedeny výpočty vyhoření identického palivového souboru a47D18 reaktoru VVER-1000 jako v případě mikrokódu HELIOS. Výpočty vyhoření byly v makrokódu definovány tak, aby všechny provozní i geometrické parametry odpovídaly výpočtům v mikrokódu, a tedy jejich výsledky byly porovnatelné. To znamená, že v ANDREe byly provedeny výpočty vyhoření v nekonečné mříži s jedním změněným provozním parametrem vůči jeho nominální hodnotě a všechny definované nódy byly tvořeny stejným materiálem a47D18. Aby bylo možné porovnat výsledky s HELIOSem, byly v ANDREe



Obrázek 1.2: Vliv spektrální historie vyhořívání na makroskopické účinné průřezy uvedený na příkladu PS a47D18

nastaveny iterace na geometrický faktor pro kritický reaktor (kritický buckling). To znamená, že je hledána taková hodnota geometrického faktoru, která odpovídá kritickému koeficientu násobení. Díky tomu výpočet v makrokódu koresponduje s výpočtem v mikrokódu, ve kterém byla nastavena korekce na kritické spektrum.

Na obrázku 1.3 jsou porovnány závislosti makroskopických účinných průřezů na vyhoření mezi referenčním výpočtem v HELIOSu a makrokódem ANDREA. Obrázek 1.3a zobrazuje oba způsoby výpočtů makroskopického účinného průřezu pro absorpci v tepelné grupě v závislosti na vyhoření pro provozní historie, ve kterých bylo vyhoříváno se změněnými hodnotami koncentrace kyseliny borité a výkonu. Na obrázku 1.3b jsou vykresleny relativní odchylky makroskopického účinného průřezu z výpočtu v ANDREe od referenčního výpočtu v HELIOSu v závislosti na vyhoření pro všechny uvažované provozní historie. Je zřejmé, že relativní odchylky makroskopických účinných průřezů použitých v ANDREe od referenčích výpočtů v HELIOSu jsou dány zjednodušeními předpokládanými v parametrizaci grupových konstant. Mezi ně mimo jiné patří i zanedbání vlivu odlišného energetického spektra neutronů způsobené vyhoříváním na změněných provozních parametrech. Při porovnání obrázků 1.2b a 1.3b je patrné, že relativní odchylky ANDREy od HELIOSu a výpočtů vyhoření se změněnými provozními parametry od nominálního výpočtu vykazují přesně opačnou tendenci. To znamená, že v případě obrázku 1.2b, kdy vyhořívání při změněných provozních parametrech způ-



#### sobí změnu energetického spektra neutronů vedoucí ke kladné změně makroskopického

Obrázek 1.3: Porovnání rekonstruovaných makroskopických účinných průřezů v makrokódu ANDREA s referenčními hodnotami z mikrokódu HELIOS na příkladu PS a47D18

účinného průřezu v porovnání s jeho nominálními hodnotami, pak na obrázku 1.3b je hodnota makroskopického účinného průřezu z parametrizace v ANDREe podhodnocena v porovnání s referenční hodnotou z HELIOSu. Tento jev lze pozorovat v případě makroskopického účinného průřezu pro absorpci v tepelné grupě pro všechny analyzované provozní historie. Analogicky byla zhodnocena přesnost parametrizace pro makroskopický účinný průřez pro štěpení v rychlé grupě, pro který je jeho závislost na vyhoření z ANDREy porovnána s referenčími výsledky z HELIOSu na obrázku 1.3c. Taktéž při porovnání obrázků 1.2d a 1.3d lze sledovat stejný efekt, který byl výše popsán pro makroskopický účinný průřez pro absorpci v tepelné grupě. Díky tomuto pozorování lze skutečně usoudit, že zanedbání spektrální historie vyhořívání vnáší nepřesnosti do parametrizace makroskopických účinných průřezů, které se navíc zvyšují s rostoucím vyhořením.

Závěrem je nutné dodat, že na obrázcích 1.2 a 1.3 byly analyzovány výpočty vyhoření, při kterých byly provozní parametry změněny oproti jejich nominálním hodnotám po celou dobu vyhořívání. Při provozu tlakovodních reaktorů se provozní parametry během vyhořívání tak výrazně neodlišují od jejich nominálních hodnot a lze tedy předpokládat, že při reálné palivové kampani se bude vliv spektrální historie vyhořívání projevovat v menší míře. Z provedeného pozorování také vyplynulo, že vliv spektrální historie vyhořívání se zvyšuje s rostoucím vyhořením. Tento fakt by mohl taktéž podpořit argument, že má smysl se zabývat zohledněním spektrální historie vyhořívání v makrokódech řešící celozónové výpočty tlakovodních reaktorů, neboť aktuálním tématem v případě JE Temelín je přechod k 18měsíčním palivovým vsázkám. To znamená i zvyšování průměrného vyhoření palivových souborů, a tedy i větší příspěvěk spektrální historie vyhořívání v parametrizaci grupových konstant.

#### 1.2 Metody zohledňující spektrální historii vyhořívání

Následující podkapitola seznamuje s metodami, které umožňují zohlednit spektrální historii vyhořívání v parametrizaci makroskopických účinných průřezů. Níže uvedené metody si kladou za cíl najít takové parametrizační funkce  $h_{r,g}$ , pomocí nichž by byla v parametrizaci makroskopických účinných průřezů zahrnuta spektrální historie vyhořívání, kterou lze obecně psát ve tvaru

 $\Sigma_{\rm r,g}^{\rm alt}(B, T_{\rm F}, T_{\rm M}, c_{\rm B}, N_{\rm P}, sh) = \Sigma_{\rm r,g}^{\rm nom}(B) + f_{\rm r,g}(B, T_{\rm F}, T_{\rm M}, c_{\rm B}, N_{\rm P}) + h_{\rm r,g}(B, sh), \quad (1.1)$ 

kde

- *f*<sub>r,g</sub> značí parametrizační funkce, které jsou sestrojené na základě odskokových výpočtů zohledňují okamžité změny provozních parametrů na makroskopické účinné průřezy,
- *h*<sub>r,g</sub> je parametrizační funkce zohledňující vliv spektrální historie vyhořívání, jejíž proměnná je v rovnici (1.1) prozatím obecně značena jako *sh*,
- ostatní značení veličin použitých v rovnici (1.1) je shodné jako v obecném tvaru parametrizace (1).

#### 1.2.1 Indikace pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu

Metoda indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu byla navržena v práci [8]. Podrobné testování uvedené metody bylo provedeno ve výzkumném úkolu [1], ze kterého vyplynulo, že popisovaná metoda je vhodná pro indikaci spektrální historie vyhořívání a lze pomocí ní zpřesnit parametrizaci grupových konstant.

V podkapitole 1.1 bylo ukázáno, že jakákoli změna provozního parametru, při kterém probíhá vyhořívání, od jeho nominální hodnoty způsobí změnu energetického spektra neutronů, která vede na změnu makroskopických účinných průřezů. Ta může být kvantifikována pomocí relativní odchylky v následujícím tvaru

$$\delta \Sigma_{\rm r,g} = \frac{\sum_{\rm r,g}^{\rm alt} - \sum_{\rm r,g}^{\rm nom}}{\sum_{\rm r,g}^{\rm nom}},$$
(1.2)

kde  $\Sigma_{r,g}^{nom}$ , resp.  $\Sigma_{r,g}^{alt}$  je makroskopický účinný průřez reakce r v grupě g získaný z výpočtu vyhoření na nominálních provozních parametrech, resp. z výpočtu vyhoření při změněných provozních parametrech, ve kterém byl navíc proveden odskok na nominální provozní parametry. Veličina (1.2) tedy určuje relativní odchylku makroskopického účinného průřezu změněné provozní historie od nominální, která byla zapříčiněna odlišnou spektrální historií vyhořívání.

Popisovaná metoda využívá toho, že atomová hustota <sup>239</sup>Pu je citlivá na změnu provozních parametrů, při kterých probíhá vyhořívání. Na obrázku 1.4 jsou vykresleny průběhy atomové hustoty <sup>239</sup>Pu pro výpočty vyhoření se změněnými provozními parametry. Obrázek 1.4b uvádí relativní odchylky provozních historií se změněnými parametry od nominální, ze kterých je znatelná citlivost atomové hustoty <sup>239</sup>Pu na změnu provozních parametrů v průběhu vyhořívání. To znamená, že i pro atomovou hustotu <sup>239</sup>Pu lze určit relativní odchylku provozní historie se změněnými parametry od nominální, tj.

$$\delta N_{\rm Pu}^e = \left(\frac{N_{\rm Pu}^{\rm alt}}{N_{\rm Pu}^{\rm nom}}\right)^e - 1,\tag{1.3}$$

kde  $N_{Pu}^{nom}$ , resp.  $N_{Pu}^{nom}$  je atomová hustota <sup>239</sup>Pu pro nominální výpočet, resp. pro výpočet se změněnými provozními parametry, *e* značí exponent, který lze aplikovat na relativní odchylku atomové hustoty <sup>239</sup>Pu.



Obrázek 1.4: Průběh atomové hustoty <sup>239</sup>Pu při výpočtech vyhoření se změněnými provozními parametry ve srovnání s jejich nominálními hodnotami pro PS a47D18

Podstata metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu spočívá v tom, že lze nalézt úměrnost mezi změnami makroskopického účinného průřezu (1.2) a atomové hustoty <sup>239</sup>Pu (1.3), která nezávisí na typu změněného provozního parametru, který během vyhořívání zapříčinil změnu energetického spektra neutronů. Na obrázku 1.5 je znázorněna úměrnost mezi změnami makroskopického účinného průřezu pro štěpení v tepelné grupě a atomovou hustotou <sup>239</sup>Pu pro výpočty, ve kterých byly při vyhořívání změněny hodnoty koncentrace kyseliny borité, hustoty moderátoru a výkonu palivového souboru. Z obrázku 1.5 je patrné, že lze nalézt parametrizační funkci, která by s přijatelnou přesností postihovala vliv spektrální historie vyhořívání pro analyzované změny provozních parametrů. To znamená, že pouze se znalostí lokálních atomových hustot <sup>239</sup>Pu a parametrizační funkce spektrální historie vyhořívání lze určit změnu makroskopických účinných průřezů způsobenou odlišným energetickým spektrem neutronů bez ohledu na to, jakou změnou provozního parametru bylo spektrum během vyhořívání změněno.

Samotnou parametrizační funkci zohledňující spektrální historii vyhořívání lze po-



Obrázek 1.5: Úměrnost mezi změnami makroskopického účinného průřezu pro štěpení v tepelné grupě a atomovými hustotami <sup>239</sup>Pu využitá pro charakterizaci spektrální historie vyhořívání na příkladu PS a47D18 při vyhoření 30 GWd/t<sub>U</sub>

dobně jako v [8] zapsat ve tvaru

$$h_{\rm r,g}\left(B,\delta\sqrt{N}_{\rm Pu}\right) = \begin{cases} \alpha_{\rm r,g}^{-}\,\delta\sqrt{N}_{\rm Pu} & \text{pro} \quad \delta\sqrt{N}_{\rm Pu} \le 0\\ \\ \alpha_{\rm r,g}^{+}\,\delta\sqrt{N}_{\rm Pu} & \text{pro} \quad \delta\sqrt{N}_{\rm Pu} > 0, \end{cases}$$
(1.4)

kde

$$\delta\sqrt{N}_{\rm Pu} = \sqrt{\frac{N_{\rm Pu}^{\rm alt}}{N_{\rm Pu}^{\rm nom}}} - 1 \tag{1.5}$$

představuje proměnnou spektrální historie vyhořívání, tj. změnu lokální atomové hustoty <sup>239</sup>Pu provozní historie se změněnými parametry od nominální provozní historie. Parametrizační funkce (1.4) má navíc odlišnou směrnici pro kladnou a zápornou změnu proměnné spektrální historie vyhořívání. Pod pojmem podobnostní číslo spektrální historie vyhořívání jsou ve funkci (1.4) označovány parametrizační koeficienty  $\alpha_{r,g}$ , jejichž význam je následující

$$\alpha_{\rm r,g} = \frac{\delta \Sigma_{\rm r,g}}{\delta \sqrt{N}_{\rm Pu}},\tag{1.6}$$

tj. představují úměrnost mezi změnou makroskopického účinného průřezu pro reakci r v grupě g a změnou atomové hustoty <sup>239</sup>Pu. Je důležité poznamenat, že podobnostní čísla spektrální historie vyhořívání (1.6) jsou při přípravě aplikační knihovny makrokódu počítány pro všechny uvažované palivové soubory použité ve výpočtu. Nyní lze již zapsat parametrizaci makroskopických účinných průřezů se zahrnutím indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu, jejíž tvar je následující

$$\Sigma_{\mathrm{r,g}}^{\mathrm{alt}}\left(B, T_{\mathrm{F}}, T_{\mathrm{M}}, c_{\mathrm{B}}, N_{\mathrm{P}}, \delta\sqrt{N}_{\mathrm{Pu}}\right) = \Sigma_{\mathrm{r,g}}^{\mathrm{nom}}\left(B\right) \left[1 + h_{\mathrm{r,g}}\left(B, \delta\sqrt{N}_{\mathrm{Pu}}\right)\right] + f_{\mathrm{r,g}}\left(B, T_{\mathrm{F}}, T_{\mathrm{M}}, c_{\mathrm{B}}, N_{\mathrm{P}}\right) \right]$$
(1.7)

Ve výše uvedené rovnici (1.7) musí být parametrizační funkce  $h_{r,g}$  přenásobena nominálním makroskopickým účinným průřezem  $\Sigma_{r,g}^{nom}$ , aby byla získána absolutní změna makroskopického účinného průřezu, což plyne z tvaru podobnostního čísla spektrální historie vyhořívání (1.6).

Závěrem je důležité dodat, že pro implementaci výše popsané metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu bude nutné v makrokódu

- 1. dokázat určit lokální atomovou hustotu 239Pu pro libovolný provozní stav,
- najít vhodný postup, pomocí kterého se bude v makrokódu určovat atomová hustota <sup>239</sup>Pu pro nominální provozní historii,
- 3. implementovat parametrizační funkce spektrální historie vyhořívání (1.4),
- 4. najít vhodnou metodiku pro určování podobnostních čísel spektrální historie vyhořívání a zajistit jejich uložení do aplikační knihovny makrokódu.

#### 1.2.2 Metoda spektrálního indexu a jeho integrálu

Zohlednit spektrální historii vyhořívání v parametrizaci makroskopických účinných průřezů je taktéž možné pomocí metody spektrálního indexu a jeho integrálu. V ní je uvažován pouze jediný parametr, pomocí něhož je vzata v úvahu spektrální historie vyhořívání, tedy spektrální index. Dále se předpokládá, že jakákoli změna makroskopického účinného průřezu způsobená změnou energetického spektra neutronů je nezávislá na jevu, tj. změně teploty paliva, koncentrace kyseliny borité aj., který vyvolal změnu spektra neutronů při vyhořívání na změněném provozním parametru [6, 9].

Pro zahrnutí spektrální historie vyhořívání v parametrizaci makroskopických účinných průřezů se definuje integrál spektrálního indexu v následujícím tvaru

$$SH^{\text{alt}} = \frac{1}{B} \int_0^B \frac{SI^{\text{nom}}(B')}{SI^{\text{alt}}(B')} dB',$$
(1.8)

kde *SI*<sup>nom</sup>, resp. *SI*<sup>alt</sup> označuje spektrální index pro nominální provozní historii, resp. pro provozní historii se změněnými parametry, *B* značí vyhoření. Integrál spektrálního indexu (1.8) představuje poměr spektrálních indexů pro nominální a změněnou provozní historii středovaný přes daný interval vyhoření.

Nyní zbývá uvést tvar spektrálního indexu, pro nějž literatura zavádí různé definice. Standardní podoba spektrálního indexu uvažovaná například ve článcích [10, 11] je následující

$$SI = \frac{\phi_1}{\phi_2},\tag{1.9}$$

kde  $\phi_1$  resp.,  $\phi_2$  je lokální hustota toku neutronů v rychlé, resp. tepelné grupě. Výše uvedená definice spektrálního indexu (1.9) zohledňuje spektrální historii vyhořívání v podobě poměru hustot toku neutronů, tj. energetického spektra neutronů.

V práci [12] lze nalézt alternativní definici spektrálního indexu ve tvaru

$$SI = \frac{\Sigma_{a,1}}{\Sigma_{a,1} + \Sigma_{s,12}} \frac{\Sigma_{a,1}\phi_1}{\Sigma_{f,1}\phi_1 + \Sigma_{f,2}\phi_2},$$
(1.10)

kde

- Σ<sub>a,1</sub> resp., Σ<sub>a,2</sub> značí makroskopický účinný průřez pro absorpci v rychlé, resp. tepelné grupě,
- Σ<sub>f,1</sub> resp., Σ<sub>f,2</sub> označuje makroskopický účinný průřez pro štěpení v rychlé, resp. tepelné grupě.
- $\Sigma_{s,12}$  je makroskopický účinný průřez pro rozptyl z rychlé do tepelné grupy.

Použití alternativní definice spektrální indexu (1.10) je v článku [12] objasněno tím, že standardní definice spektrálního indexu (1.9) nepřesně postihnuje provozní historie se změnou teploty paliva. V definici spektrálního indexu (1.10) představuje první výraz pravděpodobnost pro rezonanční absorpci, která především stanovuje produkci <sup>239</sup>Pu vzniklého absorpcí na <sup>238</sup>U a je nejvíce ovlivněna změnou teploty paliva. Druhý výraz ve vztahu (1.10) odpovídá poměru reakční rychlosti pro absorpci v rychlé grupě a celkové reakční rychlosti pro štěpení a z hlediska spektrální historie vyhořívání jej nejvíce ovlivňují změny hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité [12, 13].

Poslední zde uvedený spektrální index, který byl odvozen na základě změny atomové hustoty <sup>239</sup>Pu během vyhořívání, prezentuje článek [14] ve tvaru

$$SI = \frac{\Sigma_{\gamma,1}}{\Sigma_{a,1} + \frac{1}{2} \left( \Sigma_{s,12} + \Sigma_{s,12}^{nom} \right)} \frac{\Sigma_{\gamma,1} \phi_1}{\Sigma_{f,1} \phi_1 + \Sigma_{f,2} \phi_2},$$
(1.11)

kde

- $\Sigma_{\gamma,1}$  značí makroskopický účinný průřez pro radiační záchyt v rychlé grupě,
- $\Sigma_{s,12}^{nom}$  označuje makroskopický účinný průřez pro rozptyl z rychlé do tepelné grupy, který je určený na základě výpočtu vyhoření s nominálními hodnotami provozních parametrů,
- ostatní značení se shoduje s předešlými definicemi spektrálního indexu (1.9) a (1.10).

Fyzikální význam spektrálního indexu (1.11) lze interpretovat tak, že první zlomek představuje pravděpodobnost radiačního záchytu rychlých neutronů, zatímco druhý zlomek vyjadřuje poměr reakční rychlosti pro radiační záchyt v rychlé grupě a celkové reakční rychlosti pro štěpení v obou grupách [14].

Se znalostí tvaru spektrálního indexu je již možné uvést tvar parametrizační funkce  $h_{r,g}$  použité v rovnici (1.7). Literatura [10, 14] v parametrizační funkci spektrální historie vyhořívání používá proměnnou ve tvaru relativní změny integrálu spektrálního indexu mezi změněnou a nominální provozní historií, tj.

$$\delta SH = \frac{SH^{\text{alt}} - SH^{\text{nom}}}{SH^{\text{nom}}},\tag{1.12}$$

přičemž z definice integrálu spektrálního indexu (1.8) je patrné, že jeho hodnota pro nominální provozní historii je rovna jedné. Díky tomu lze proměnnou (1.12) přepsat do tvaru

$$\delta SH = SH^{\text{alt}} - 1. \tag{1.13}$$

Pro parametrizační funkci  $h_{r,g}$  je obvykle používán polynom prvního nebo druhého stupně, jehož koeficienty mají následující význam

$$\alpha_{\rm r,g} = \frac{\delta \Sigma_{\rm r,g}}{\delta SH},\tag{1.14}$$

tj. představují úměrnost mezi změnou makroskopického účinného průřezu pro reakci r v grupě g a proměnnou ve tvaru integrálu spektrální historie. Koeficienty parametrizační funkce  $\alpha_{r,g}$  jsou získané na základě výpočtů vyhoření s nominálními a změněnými provozními parametry, tj. výpočty vyhoření s odlišným energetickým spektrem neutronů [10, 14].

Závěrem je vhodné porovnat metodu spektrálního indexu a jeho integrálu s metodou indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu popsané v pod-kapitole 1.2.1, neboť obě využívají pouze jedné proměnné, pomocí které je popsán vliv spektrální historie vyhořívání. Výhoda metody spektrálního indexu spočívá v tom, že pro výpočet spektrálního indexu lze v makrokódu využít data, která jsou známá a není třeba implementovat další moduly. Ve srovnání s tím pro metodu indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu je v makrokódu nutné implementovat model vyhořívání aktinoidů, pomocí něhož je určována lokální atomová hustota <sup>239</sup>Pu pro libovolné provozní stavy. Na druhou stranu výhoda metody využívající atomovou hustotu <sup>239</sup>Pu tkví v tom, že ji lze aplikovat bez ohledu na počet grup neutronů použitých v makrokódu, zatímco spektrální index je nutné definovat pro přesnou grupovou strukturu.

#### 1.2.3 Hybridní mikroskopický model vyhořívání

V podkapitole 1.1 bylo popsáno, že vyhořívání při nenominálních provozních parametrech způsobí změnu energetického spektra neutronů, která vede na odlišné izotopické složení, které zapříčiní změnu makroskopických účinných průřezů. Zohlednění spektrální historie vyhořívání v podobě odlišného izotopického složení mezi nominální a nenominální provozní historií je právě využito ve studiích [15, 16, 17]. V těchto pracích se v parametrizaci makroskopických účinných průřezů zohledňují okamžité změny provozních parametrů standardním způsobem na základě parametrizačních funkcí. Zatímco spektrální historie vyhořívání je postihnuta na základě explicitního výpočtu daného počtu nuklidů. Parametrizační funkci pro reakci r a grupu g, kterou lze použít v rovnici (1.7), je možné zapsat jako

$$h_{\mathrm{r,g}}\left(B,N_{i}\right) = \sum_{i\in\mathbb{I}}\sigma_{\mathrm{r,g},i}^{\mathrm{nom}}\left(N_{i}^{\mathrm{alt}}-N_{i}^{\mathrm{nom}}\right),\tag{1.15}$$

kde

- I je množina sledovaných nuklidů,
- $N_i^{\text{nom}}$ , resp.  $N_i^{\text{alt}}$  značí atomové hustoty nuklidu *i* pro nominální provozní historii, resp. provozní historii se změněnými parametry,
- σ<sup>nom</sup><sub>r,g,i</sub> označuje mikroskopický účinný průřez reakce r v grupě g na nuklidu i pro nominální provozní historii.

Proměnnými parametrizační funkce (1.15) jsou atomové hustoty vybraných nuklidů z množiny I, které jsou počítány přímo v makrokódu na základě mikroskopického modelu vyhořívání. Pro správné fungování uvedené metody (1.15) je nezbytné sledovat velký počet atomových hustot nuklidů. V makrokódu SIMULATE-5 [16] bylo do pararametrizační funkce (1.15) zařazeno přibližně 50 nuklidů, konkrétně 15 aktinoidů, 30 štěpných produktů, izotopy bóru a gadolinia. Pro ně jsou definovány linearizované řetězce, jejichž řešení je provedeno pro každý ve výpočtu definovaný nód. Linearizované řetězce nuklidů jsou řešeny pomocí numerické integrace a navíc se při výpočtu vyhoření uplatňuje dvoukroková metoda prediktor-korektor. Taktéž je důležité podotknout, že v rovnici (1.15) nejsou nominální atomové hustoty  $N_i^{\text{nom}}$  brány přímo z výpočtů provedených mikrokódem, ale jsou počítány pomocí mikroskopického modelu vyhořívání. Je to z důvodu, aby bylo dosaženo konzistentnosti s výpočtem atomových hustot  $N_i^{\text{alt}}$ .

V programu DYN3D [17] byl implementován hybridní mikroskopický model vyhořívání, ve kterém jsou atomové hustoty nuklidů v prametrizační funkci (1.15) určovány na základě Chebyshevovy aproximace racionálními funkcemi (CRAM). Zde je ukázáno, že pro přesné zohlednění spektrální historie vyhořívání je nezbytné sledovat atomové hustoty 50 až 80 vybraných nuklidů.

Závěrem je vhodné poznamenat, že podle výše uvedených prací lze v makrokódu pomocí hybridního mikroskopického modelu vyhořívání vyřešit problémy související se střednědobou kinetikou aktivní zóny. Příkladem, kdy se významně projevuje středně-dobá kinetika, může být zavezení palivových souborů do aktivní zóny z bazénu sklado-vání, které v něm setrvaly významnou dobu, tj. typicky 5 a více let. V těchto situacích hrají významnou roli radioaktivní přeměny střednědobě žijících radionuklidů, jejichž správné atomové hustoty nelze bez explicitního sledování v celozónových výpočtech postihnout. Podle studie [16] by mohlo být téma střednědobé kinetiky aktivní zóny zejména aktuální pro reaktory, které jsou dlouhodobě odstaveny, ale plánuje se jejich opětovné spuštění, např. japonské reaktory. Nelze opomenout, že obtížnost implementace hybridního mikroskopického modelu vyhořívání v makrokódu značně převyšuje náročnost implementace dalších metod zohledňující spektrální historii vyhořívání popsaných v podkapitolách 1.2.1 a 1.2.2.
# Kapitola 2

# Výpočetní program ANDREA

#### 2.1 Základní charakteristika programu

Program ANDREA je třídimenzionální nodální makrokód založený na difúzním přiblížení, který je vyvíjen v ÚJV Řež od roku 2005. Program je implementován objektověorientovaným paradigmatem v jazyce C++ a umožňuje řešit statické výpočty reaktorů s trojúhelníkovou i čtvercovou mříží včetně kvazistatických výpočtů vyhořívání paliva a taktéž úlohy krátkodobé kinetiky bez zpětných vazeb. Pro řešení dvougrupové difúzní rovnice v hexagonální geometrii je standardizovaná pokročilá nodální metoda založená na principu konformního zobrazení a příčné integrace. Díky modulární struktruře programu lze použít i jiné metody pro řešení difúzní rovnice, například metodu konečných diferencí. Základním elementem geometrie je nód, který představuje objem vymezený v radiálním směru jedním palivovým elementem, zatímco v axiálním směru je možné zvolit libovolné úseky dělení, které navíc v rámci řešeného problému nemusí být ekvidistantní. Makrokód ANDREA umožňuje počítat neutronově-fyzikální charakteristiky AZ, mezi něž patří rozložení výkonu, vyhoření, kritická koncetrace kyseliny borité, koeficienty reaktivity a mnoho dalších. Významným znakem charakterizující program AN-DREA je nodální řešení difúzní rovnice s metodou poproutkové rekonstrukce, tj. určení rozložení výkonu a vyhoření na úrovni palivových proutků. V současné době je pro produkční výpočty používána ANDREA verze 2.3 [18].

Pro provedení výpočtů pomocí programu ANDREA je nezbytná knihovna obsahující homogenizované grupové konstanty pro vyhořívající i nevyhořívající materiály, geometrické charakteristiky palivových souborů, koeficienty teplotního modelu a mnoho dalších. Jednotlivé parametry jsou v knihovně ukládány v závislosti na typu paliva, vyhoření a stavu reaktoru, tj. horký výkonový nebo nevýkonový stav. Aplikační knihovna je ve formátu textového souboru, který je použit především kvůli tomu, že pomocné nástroje programu ANDREA jsou implementovány i v jiných jazycích než samotná AN-DREA. Pokud by byla knihovna uložená v binární struktuře, byla by práce s ní v různých programovacích jazycích obtížnější, avšak ANDREA by ji byla schopna načítat rychleji a také její datová velikost by byla menší. Ovšem díky tomu, že makrokód ANDREA při výpočtu knihovnu načítá pouze jednou, jsou zmíněné nevýhody textového formátu zanedbatelné. Je zcela zřejmé, že aplikační knihovna obsahuje značný počet parametrů a její ruční příprava by byla jen obtížně proveditelná. Z tohoto důvodu je pro přípravu knihoven používán nástroj AKIKO [19].

### 2.2 Nástroj AKIKO a popis aplikační knihovny

Nástroj AKIKO je modul napsaný v programovacím jazyce Ruby sloužící pro přípravu aplikačních knihoven makrokódu ANDREA. Knihovny jsou připravovány na základě výstupních souborů generovaných mikrokódy, které jsou načteny a zpracovány do příslušné datové struktury. Standardně podporovány jsou výstupní soubory mikrokódu HELIOS, Serpent, SCALE, popřípadě data ve formátu json, která mohou být připravena na základě libovolného mikrokódu, avšak musí obsahovat všechna nezbytná data pro tvorbu knihovny. V modulu AKIKO je implementován velký počet funkcionalit uplatňujících se při tvorbě knihoven. Například může být uveden výpočet koeficientů parametrizačních funkcí, korekce aplikované na makroskopické účinné průřezy, příprava koeficientů teplotního modelu a mnoho dalších [19, 20].

Pro lepší představu čtenáře bude nastíněn obsah knihovny makrokódu ANDREA. Je ovšem nutné poznamenat, že na tomto místě není možné provést detailní popis knihovny, neboť obsahuje obrovský počet parametrů. Proto zde budou pouze zkratkovitě uvedeny její hlavní části a pro detailnější informace lze nahlédnout přímo do textového formátu knihovny.

První informací zaznamenou v knihovně je hlavička, která obsahuje verzi a formát knihovny, informace o počtu energetických grup, typu palivové mříže AZ a reaktoru. Následuje výčet korekcí aplikovaných na vybrané veličiny a provozní stavy, pro které je knihovna připravena, například HZP nebo HFP. Součástí provozních stavů jsou i rozsahy výkonů a teplot, na základě kterých jsou dále uvedená data v makrokódu aplikována. Následuje přehled o použitých šablonách nástroje QUADRIGA3 pro tvorbu vstupních souborů mikrokódu, použitý mikrokód a verze konfiguračních souborů, ve kterých je voleno schéma parametrizace grupových konstant. Posledními informacemi uvedenými v hlavičce knihovny jsou kinetická data zpožděných neutronů a koeficienty polynomiální funkce teplotního modelu zapsané v závislosti na vyhoření.

Dalším oddílem knihovny je záznam o daném palivovém souboru, ve kterém je uveden typ materiálu (reflektor nebo palivo), jeho název, počet níže uvedených záznámů v závislosti na počtů kroků vyhoření a identifikátory použitých dat. Následují geometrické a obecné údaje o palivovém souboru, ve kterých jsou obsaženy plochy a rozteče palivových souborů, obohacení, číslování, souřadnice a symetrie palivových proutků a další údaje. Po obecných informacích následují záznamy obsahující grupová data, které jsou uloženy v závislosti na vyhoření a provozním stavu. Nejprve jsou zapsána data pro nominální stav pro model řetězce přechodových štěpných produktů a řetězce aktinoidů, která obsahují atomové hustoty, mikroskopické účinné průřezy a výtěžky ze štěpení požadovaných nuklidů. Následují homogenizované grupové konstanty uložené pro nominální provozní stav a stavy se zasunutými regulačními tyčemi. Konečně přicházejí na řadu koeficienty parametrizačních funkcí, které jsou určeny na základě definovaných parametrizačních schémat a odskoků v parametrizačním manifestu. Posledním záznamem o palivovém souboru jsou konstanty nutné pro poproutkovou rekonstrukci [18, 19].

Z výše popsaného je patrné, že struktura knihovny je skutečně složitá. Pro celozónové výpočty je navíc nutné mít uložené záznamy pro více palivových souborů a velký počet kroků vyhoření, což ve výsledků znamená, že knihovny se sestávají až z miliónů řádků.

## 2.3 Nástroj ANASTAZIE

Za velice robustní funkcionalitu makrokódu ANDREA lze označit způsob definování parametrizačního schématu a tvorby zdrojových souborů pro parametrizaci grupových konstant. K tomuto účelu slouží modul ANASTAZIE, který je napsaný v programovacím jazyce Ruby a využívá metaprogramovacích technik. To znamená, že parametrizační zdrojový soubor pro makrokód ANDREA v jazyce C++ je automatizovaně generován nástrojem ANASTAZIE, ve kterém se se zdrojovým kódem C++ zachází jako s datovým typem jazyka Ruby. Díky tomu lze velice jednoduše měnit podobu parametrizačního schématu v makrokódu ANDREA.

Podoba parametrizačního schématu se definuje v konfiguračních souborech, ve kterých se nastavuje parametrizovaný parametr, volba nezávislé proměnné a typ parametrizační funkce pro jednotlivé grupové konstanty. Pro lepší představu čtenáře bude uveden příklad na změnách výkonu, které představují parametrizovaný parametr. Nezávislou proměnnou je pro ně teplota paliva a například pro makroskopický účinný průřez pro absorpci v tepelné grupě lze nastavit parametrizační funkci se závislostí na druhé odmocnině. Na základě konfiguračních souborů ANASTAZIE vytvoří podprogramy ANDREy, které obsahují

- definice struktury záznamů v aplikační knihovně, jež byla stručně popsána v podkapitole 2.2,
- procedury umožňují správné čtení dat z aplikační knihovny,
- schémata rekonstrukce parametrizovaných grupových konstant.

Díky výše popsanému robustmímu mechanismu tvorby parametrizačních schémat lze dynamicky generovat formát knihovny a zdrojových kódů ANDREy. Navíc při použití automatizovaných nástrojů jsou parametrizační procedury v ANDREe a i struktura aplikační knihovny verzovány. Na počátku každého výpočtu ANDREA zkontruluje jejich verze, díky čemuž nemůže dojít k nežádoucímu použití lišící se knihovny a rekonstrukčního schématu grupových konstant [18, 19].

# Kapitola 3

# Implementace metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí <sup>239</sup>Pu

Kapitola 1 stručně seznamovala s metodami, které zohledňují vliv spektrální historie vyhořívání v parametrizaci grupových konstant. Z předešlého testování ve výzkumném úkolu [1] se ukázalo, že metoda indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu by se mohla jevit jako vhodnou pro použití v parametrizaci grupových konstant v makrokódu. Podkapitola 1.2.1 shrnula, že pro implementaci uvedené metody bude nutné v makrokódu vyřešit následující úlohy, a to

- 1. pro libovolný provozní stav dokázat predikovat atomovou hustotu <sup>239</sup>Pu,
- 2. najít vhodný způsob určení atomové hustoty <sup>239</sup>Pu pro nominální provozní stav,
- 3. implementovat vhodné parametrizační funkce zohledňující spektrální historii vyhořívání do rekonstrukčního schématu grupových konstant,
- 4. naleznout vhodnou metodiku stanovení koeficientů parametrizačních funkcí a jejich uložení do aplikačních knihoven makrokódu.

Následující kapitola popisuje postup implementace metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu do makrokódu ANDREA.

## 3.1 Model vyhořívání řetězce <sup>238</sup>U – <sup>241</sup>Pu v programu ANDREA

V práci [1] byl testován explicitní model vyhořívání řetězce aktinoidů <sup>238</sup>U - <sup>239</sup>Pu, který byl implementován v jazyce Ruby, a to především z důvodu existence podpůrných knihoven pro načítání dat z mikrokódů. Navíc pro testování modelu nehrála nižší rychlost interpretovaného jazyka významnou roli a s výhodou byla využita jeho jednodušší syntaxe. Z testování vyplynulo, že pro určení atomové hustoty <sup>239</sup>Pu jakožto indikátoru spektrální historie vyhořívání postačuje uvažovat zjednodušený linearizovaný model řetězce aktinoidů <sup>238</sup>U - <sup>239</sup>Pu, který lze popsat analyticky řešitelnými diferenciálními rovnicemi.

Podobný model byl již v minulosti implementován v jazyce C++ do makrokódu AN-DREA pro sledování vývoje atomových hustot hlavních aktinoidů, tj. pro řetězce <sup>235</sup>U - <sup>236</sup>U a <sup>238</sup>U - <sup>241</sup>Pu. I v tomto případě byly uvažovány zjednodušené linearizované řetězce, pro které lze nalézt analytické řešení. Linearizovaný řetězec <sup>238</sup>U - <sup>241</sup>Pu, ze kterého se určí stěžejní atomová hustota <sup>239</sup>Pu, je zobrazen na obrázku 3.1. Z tohoto obrázku je patrné, že radiačním záchytem neutronu na jádře <sup>238</sup>U vzniká nuklid <sup>239</sup>U, ze kterého se dvěma  $\beta^-$  přeměnami přes <sup>239</sup>Np tvoří nuklid <sup>239</sup>Pu. Následně řetězec pokračuje dvěma radiačními záchyty neutronu na jádrech <sup>239</sup>Pu a <sup>240</sup>Pu, čímž je dosaženo vzniku konečného nuklidu <sup>241</sup>Pu popisovaného řetězce aktinoidů. Pro všechny nuklidy řetězce <sup>238</sup>U - <sup>241</sup>Pu jsou taktéž uvažovány další absorpční reakce včetně štěpení, které nevedou na vznik uvažovaných aktinoidů, ale zapříčiňují pokles hustoty produkčních jader. Na obrázku 3.1 jsou zmíněné reakce zobrazeny pomocí svislé šipky nad jednotlivými nuklidy. Navíc je nutné podotknout, že v implementovaném řetězci aktinoidů v makrokódu AN-DREA je zanedbán nuklid <sup>239</sup>U díky jeho krátkému poločasu přeměny, který je zanedbatelný vůči době vyhořívání paliva v jaderném reaktoru [5].

$$\stackrel{238}{\mathrm{U}}^{\uparrow} + \mathrm{n} \longrightarrow \stackrel{239}{\longrightarrow} \mathrm{U} \xrightarrow{\beta^{-}}{23,45\,\mathrm{min}} \stackrel{239}{\longrightarrow} \stackrel{\uparrow}{\mathrm{Np}} \xrightarrow{\beta^{-}}{2,356\,\mathrm{d}} \stackrel{239}{\longrightarrow} \stackrel{\uparrow}{\mathrm{Pu}} + \mathrm{n} \longrightarrow \stackrel{240}{\longrightarrow} \stackrel{\uparrow}{\mathrm{Pu}} + \mathrm{n} \longrightarrow \stackrel{241}{\longrightarrow} \stackrel{\uparrow}{\mathrm{Pu}} \mathrm{h}$$

Obrázek 3.1: Schéma zjednodušeného linearizovaného řetězce aktinoidů <sup>238</sup>U – <sup>241</sup>Pu

Soustavu bilančních rovnic popisující spojitý časový vývoj atomových hustot řetězce aktinoidů <sup>238</sup>U – <sup>241</sup>Pu během vyhořívání lze zapsat v maticovém tvaru následovně

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau} \begin{pmatrix} N_{\mathrm{U8}} \\ N_{\mathrm{Np9}} \\ N_{\mathrm{Pu9}} \\ N_{\mathrm{Pu0}} \\ N_{\mathrm{Pu1}} \end{pmatrix} (\tau) = \underbrace{\begin{pmatrix} -A_{\mathrm{U8}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ C_{\mathrm{U8}} & -A_{\mathrm{Np9}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{\mathrm{Np9}} & -A_{\mathrm{Pu9}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_{\mathrm{Pu9}} & -A_{\mathrm{Pu0}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{\mathrm{Pu0}} & -A_{\mathrm{Pu1}} \end{pmatrix}}_{\text{orn} A} \begin{pmatrix} N_{\mathrm{U8}} \\ N_{\mathrm{Np9}} \\ N_{\mathrm{Pu9}} \\ N_{\mathrm{Pu0}} \\ N_{\mathrm{Pu1}} \end{pmatrix} (\tau) , \quad (3.1)$$

kde pro zjednodušení zápisu byly v matici A zavedeny efektivní přeměny nuklidů, které mají následující tvar

$$A_{\rm U8} = \sum_{g=1}^{2} \sigma_{\rm a,g}^{\rm U8} \phi_g, \qquad A_{\rm Np9} = \lambda_{\rm Np9} + \sum_{g=1}^{2} \sigma_{\rm a,g}^{\rm Np9} \phi_g, \qquad A_{\rm Pu9} = \sum_{g=1}^{2} \sigma_{\rm a,g}^{\rm Pu9} \phi_g, A_{\rm Pu0} = \sum_{g=1}^{2} \sigma_{\rm a,g}^{\rm Pu0} \phi_g, \qquad A_{\rm Pu1} = \lambda_{\rm Pu1} + \sum_{g=1}^{2} \sigma_{\rm a,g}^{\rm Pu1} \phi_g, C_{\rm U8} = \sum_{g=1}^{2} \sigma_{\gamma,g}^{\rm U8} \phi_g, \qquad C_{\rm Pu9} = \sum_{g=1}^{2} \sigma_{\gamma,g}^{\rm Pu9} \phi_g, \qquad C_{\rm Pu0} = \sum_{g=1}^{2} \sigma_{\gamma,g}^{\rm Pu0} \phi_g,$$
(3.2)

kde

- $\sigma_{a,g}^{i}$  označuje mikroskopický účinný průřez pro celkovou absorpci nuklidu i v grupě g, tzn., že jsou v něm zahrnuty všechny absorpční reakce včetně štěpné,
- $\sigma^{i}_{\gamma, q}$  značí mikroskopický účinný průřez pro radiační záchyt nuklidu i v grupě g,
- $\phi_g$  je hustota toku neutronů v grupě g,

- λ<sub>i</sub> představuje rozpadovou konstantu nuklidu i,
- index g značí danou energetickou grupu,
- značení U8, Np9, Pu9, Pu0 a Pu1 odpovídá nuklidům <sup>238</sup>U, <sup>239</sup>Np, <sup>239</sup>Pu, <sup>240</sup>Pu a <sup>241</sup>Pu.

Pro další účely je pro prvky matice  $\mathcal{A}$  zavedeno značení  $a_{i,j}$  a navíc pro diagonální prvky je použito značení  $d_i = -a_{i,i}$ . Řešit soustavu rovnic (3.1) se spojitou časovou závislostí není jistě možné a je nutné ji diskretizovat, neboť není možné explicitně vyjádřit časové závislosti mikroskopických účinných průřezů a hustot toků neutronů. Soustava lineárních diferenciálních rovnic (3.1) je pak v makrokódu ANDREA řešena analyticky pomocí Batemanovy metody, jejíž podrobný popis lze nalézt například v literatuře [21]. Při předpokladu časových kroků t a  $t + \Delta t$ , během nichž jsou efektivní přeměny aktinoidů (3.2) konstantní, lze řešení soustavy rovnic (3.1) pro i-tý nuklid vyjádřit v čase  $t + \Delta t$  jako

$$N_{i}(t + \Delta t) = N_{i}(t) e^{-d_{i}\Delta t} + \sum_{j=1}^{i-1} N_{j}(t) \left[ \sum_{k=j}^{i-1} \frac{e^{-d_{k}\Delta t} - e^{-d_{i}\Delta t}}{d_{i} - d_{k}} a_{k+1,k} \prod_{\substack{n=j\\n \neq k}}^{i-1} \frac{a_{n+1,n}}{d_{n} - d_{k}} \right].$$
 (3.3)

Z předchozího tvaru analytického řešení (3.3) je zřejmé, že Batemanova metoda selže, pokud si některé z diagonálních prvků matice A budou rovny, tj.  $d_i = d_k$  nebo  $d_n = d_k$ . Toho ovšem v případě řetězce <sup>238</sup>U – <sup>241</sup>Pu nemůže být dosaženo, neboť jednotlivé efektivní přeměny aktinoidů jsou unikátní, tj. každý aktinoid se v řetězci vyskytuje právě jednou. Díky tomu je zajištěno, že nedojde k selhání analytického řešení pomocí Batemanovy metody.

V makrokódu ANDREA je pro výpočet vyhoření používána dvoukroková metoda prediktor-korektor [5], která se uplatňuje i při explicitním výpočtu atomových hustot aktinoidů ve vzahu (3.3). Grafické znázornění metody prediktor-korektor je vykresleno na obrázku 3.2, kde je předpokládáno vyhořívání s kroky *i* a *i* + 1 s časovým intervalem  $\Delta t$ . Princip metody prediktor-korektor je takový, že v prvním kroku jsou vypočítány predikované atomové hustoty aktinoidů  $N_i^*$  s využitím konstant potřebných v rovnici (3.3) z *i*-tého kroku a s časovým intervalem  $\frac{\Delta t}{2}$ . Následuje druhý krok, ve kterém jsou již spočítány korigované atomové hustoty aktinoidů  $N_{i+1}$  s využitím predikovaných atomových hustot  $N_i^*$  a konstant pro krok *i* + 1, přičemž ve výpočtu je opět použit časový interval  $\frac{\Delta t}{2}$ . Tímto způsobem je postupováno pro všechny ve výpočtu definované nódy, čímž je získána lokální atomová hustota <sup>239</sup>Pu, která je nezbytná pro zahrnutí vlivu spektrální historie vyhořívání do parametrizace grupových konstant.

#### 3.1.1 Parametrizace mikroskopických účinných průřezů

Při celozónových výpočtech se mohou lokální provozní parametry aktivní zóny pohybovat v širokém rozmezí hodnot. V případě řešení difúzní rovnice jsou grupové konstanty pro aktuální lokální provozní parametry získány na základě parametrizace. Ovšem do výpočtu atomových hustot aktinoidů v rovnici (3.3) vstupují i mikroskopické účinné průřezy, které byly doposud v knihovnách makrokódu ANDREA uloženy pouze pro nominální provozní stav, tj. při výpočtu atomových hustot aktinoidů libovolného provozního stavu byly vždy v efektivních přeměnách aktinoidů (3.2) použity mikroskopické účinné průřezy pro nominální stav a lokální hustoty toku neutronů vypočítané



Obrázek 3.2: Grafické znázornění metody prediktor-korektor v modelu aktinoidů

ANDREou. Díky tomu je snížena přesnost výpočtu atomových hustot aktinoidů pomocí ANDREy ve srovnání s referenčím řešením pomocí mikrokódu. Je tedy nutné zajistit, aby nebyla ovlivněna přesnost výpočtu kvůli použití mikroskopických účinných průřezů pro nominální provozní stav.

Ve výzkumném úkolu [1] bylo ověřeno, že atomovou hustotu <sup>239</sup>Pu lze predikovat s přijatelnou přesností pro libovolný provozní stav, pokud jsou v modelu řetězce aktinoidů parametrizovány mikroskopické účinné průřezy. Stejný postup parametrizace mikroskopických účinných průřezů byl volen i v případě kódu DYN3D [8]. Do makrokódu ANDREA taktéž bude přidána parametrizace mikroskopických účinných průřezů, která bude zajišť ovat, že nebude snížena přesnost výpočtu atomových hustot aktinoidů kvůli použití mikroskopických účinných průřezů odpovídajícím nominálnímu provoznímu stavu. Parametrizace mikroskopických účinných průřezů pro stav se změněnými provozními parametry bude uvažována ve tvaru

$$\sigma_{\rm r,g,i}^{\rm alt}(B, T_{\rm F}, T_{\rm M}, c_{\rm B}) = \sigma_{\rm r,g,i}^{\rm nom}(B) + f_{\rm r,g,i}^{(1)}(B, T_{\rm F}) + f_{\rm r,g,i}^{(2)}(B, T_{\rm M}) + f_{\rm r,g,i}^{(3)}(B, c_{\rm B}), \quad (3.4)$$

kde

- r označuje příslušný typ reakce,
- g je daná energetická grupa,
- i značí uvažovaný aktinoid,
- *B* je daný krok vyhoření,
- *T*<sub>F</sub> označuje teplotu paliva,
- T<sub>M</sub> představuje teplotu moderátoru,
- *c*<sub>B</sub> značí koncentraci kyseliny borité v moderátoru,

- $\sigma_{r,g,i}^{nom}$  představuje mikroskopický účinný průřez pro nominální provozní stav,
- *f*<sup>(k)</sup><sub>r,g,i</sub> jsou aproximační funkce závislé pouze na jednom z uvažovaných provozních parametrů, kde *k* ∈ {1,2,3}, přičemž jejich tvar bude volen na základě testování modelových scénářů vyhořívání.

Tvar parametrizace (3.4) byl volen podobně jako v případě parametrizace grupových konstant, tj. tak, aby byl oceněn vliv lokálních parametrů aktivní zóny v jednotlivých krocích vyhoření na mikroskopické účinné průřezy.

V programu ANDREA představuje změna parametrizačního schématu poměrně jednoduchou úlohu. To znamená, že i přidání parametrizace mikroskopických účinných průřezů bude relativně snadné díky robustnosti nástrojů pro vytváření parametrizačního schématu a knihoven, jejichž proces fungování je zobrazen na obrázku 3.3. Pomocí mikrokódu je počítáno vyhořívání jednotlivých palivových souborů na nominálních provozních parametrech s definovanými odskoky v každém kroku vyhoření. Následně jsou výstupní soubory mikrokódu zpracovány pomocí modulu AKIKO, který zajistí jejich načtení do požadované datové struktury. Výhoda konceptu, ve kterém jsou pro každý mikrokód definovány třídy starající se o zpracování výstupních souborů, především spočívá v snadném rozšíření funkcionalit nástroje AKIKO pro další mikrokódy. Nastavení parametrizačního schématu a záznamu dat do knihoven umožňují manifesty, tedy konfigurační soubory. V manifestu knihovny jsou definovány veličiny, které se mají načítat z výstupních souborů mikrokódu, jejich datová struktura, relace pro čtení dat z knihovny ANDREou a mnoho dalších. V parametrizačním manifestu jsou uvedeny odskoky definované ve výpočtu mikrokódem použité pro nalezení parametrizačních koeficientů a samotná parametrizační schémata, která se skládají z parametrizovaných parametrů, volby nezávislých proměnných a typů aproximačních funkcí použitých pro parametrizaci. Na základě konfiguračních souborů vytvoří AKIKO pro jednotlivé palivové soubory a kroky vyhoření záznam všech nezbytných dat do knihovny včetně koeficietnů parametrizačních funkcí. Pro správnou rekonstrukci dat při výpočtu v ANDREe je nutné použít parametrizační schémata, která odpovídají záznamům v knihovně, tj. definované v parametrizačním manifestu. Pro tento účel slouží metaprogramovací nástroj ANASTAZIE, jehož funkce je připravit zdrojový soubor pro paramatrizaci v ANDREe na základě manifestů. Pomocí výše uvedných technik lze dynamicky měnit obsah knihoven i tvar rekonstrukce grupových konstant při výpočtech ANDREou. Navíc díky tomuto postupu je zajištěno, že jsou-li pro výpočet použity neodpovídající verze knihovny a ANDREy, resp. jejího rekonstručního schématu, výpočet neproběhne a nemůže tak dojít k nežádoucím problémům [5, 19].

#### 3.1.2 Testování parametrizace mikroskopických účinných průřezů

Samotné přidání parametrizace mikroskopických účinných průřezů pro model aktinoidů v programu ANDREA spočívá v doplnění parametrizačního manifestu o všechny mikroskopické účinné průřezy použité v efektivních přeměnách nuklidů (3.2) s příslušnými parametrizačními funkcemi. V makrokódu ANDREA se pro parametrizaci grupových konstant standardně používají polynomiální funkce nejvýše druhého řádu, výjimkou je však závislost makroskopického účinného průřezu pro absorpci na teplotě paliva, pro který je uvažována odmocninná parametrizační funkce [5].



Obrázek 3.3: Postup vytváření parametrizačního schématu a aplikačních knihoven v makrokódu ANDREA. Upraveno z [19]

Pro parametrizaci mikroskopických účinných průřezů v modelu aktinoidů jsou využity následující funkce definované obecně pro provozní parametr p. První z nich je lineární funkce mající tvar

$$f_{\mathrm{r,g,i}}^{(1)}(B,p) = \begin{cases} \alpha_{\mathrm{r,g,i}}^{-} \Delta p & \text{pro } \Delta p \leq 0\\ \\ \alpha_{\mathrm{r,g,i}}^{+} \Delta p & \text{pro } \Delta p > 0, \end{cases}$$
(3.5)

dále funkce s odmocninnou závislostí definovaná jako

$$f_{\mathrm{r,g,i}}^{(2)}(B,p) = \begin{cases} \alpha_{\mathrm{r,g,i}}^{-} \Delta p + \beta_{\mathrm{r,g,i}}^{-} \sqrt{\Delta p} & \text{pro } \Delta p \leq 0\\\\ \alpha_{\mathrm{r,g,i}}^{+} \Delta p + \beta_{\mathrm{r,g,i}}^{+} \sqrt{\Delta p} & \text{pro } \Delta p > 0, \end{cases}$$
(3.6)

a poslední zde uvedenou funkcí kvadratická s následujícím předpisem

$$f_{\mathrm{r,g,i}}^{(3)}(B,p) = \begin{cases} \alpha_{\mathrm{r,g,i}}^{-} \Delta p + \beta_{\mathrm{r,g,i}}^{-} \Delta p^{2} & \mathrm{pro} \ \Delta p \leq 0\\ \alpha_{\mathrm{r,g,i}}^{+} \Delta p + \beta_{\mathrm{r,g,i}}^{+} \Delta p^{2} & \mathrm{pro} \ \Delta p > 0. \end{cases}$$
(3.7)

Ve všech výše definovaných parametrizačních funkcích (3.5), (3.6) a (3.7) jsou navíc uvažovány odlišné směrnice pro zápornou a kladnou změnu  $\Delta p = p - p^{\text{nom}}$ , tj. změnu daného provozního parametru od hodnoty pro nominální stav,  $\alpha_{\text{r,g,i}}^-$ ,  $\beta_{\text{r,g,i}}^-$ , resp.  $\alpha_{\text{r,g,i}}^+$ ,  $\beta_{r,g,i}^+$  jsou koeficienty příslušných parametrizačních funkcí pro zápornou, resp. kladnou změnu provozního parametru a další značení je shodné s rovnicí (3.4).

V programu ANDREA je vliv lokálních provozních parametrů na grupové konstanty zohledněn parametrizačními funkcemi, které jsou vypsány v tabulce 3.1. Uvedené funkce byly pro jednotlivé provozní parametry vybrány na základě podrobného testování a dlouhodobých zkušeností [19]. Je nutné poznamenat, že volba těchto funkcí uvedená v tabulce 3.1 bude v dalším textu označována jako standardní a je uvažována pro horký výkonový stav. Taktéž v parametrizaci mikroskopických účinných průřezů (3.4) bude pro zohlednění změn jednotlivých provozních parametrů použita stejná volba funkcí jako v tabulce 3.1.

Tabulka 3.1: Standardně používané typy parametrizačních funkcí v makrokódu AN-

DREA pro HFP

Provozní	Nezávislá	Parametrizační
parametr	proměnná	funkce
P	$T_{ m F}$	Lineární/Odmocninná
$ ho_{ m M}$	$T_{ m M}$	Kvadratická
$c_{\mathrm{B}}$	$N_{10}{}_{ m B}$	Kvadratická

Nyní pouze zbývá vyjastnit, jakým způsobem budou určeny koeficienty parametrizačních funkcí (3.5), (3.6) a (3.7). Obvyklým způsobem se pomocí mikrokódu provedou výpočty vyhoření na nominálních parametrech v nekonečné mříži s vhodnými hraničními podmínkami pro jednotlivé palivové soubory. Navíc v mikrokódu se pro každý krok vyhoření definují odskoky na dané hodnoty provozních parametrů, pro které se již nepřepočítává izotopické složení. Odskok je pak počítán pomocí dalšího transportního výpočtu při stejném izotopickém složení s grupovými konstantami, které odpovídají změněným hodnotám provozních parametrů. Koeficienty parametrizačních funkcí grupových konstant se pro HFP standardně v ANDREe určují z kladných a záporných odskoků, jejichž hodnoty pro uvažované provozní parametry uvádí tabulka 3.2. Stejné odskoky jsou použity i pro určení koeficientů funkcí v parametrizace mikroskopických účinných průřezů (3.4).

Tabulka 3.2: Hodnoty odskokových provozních parametrů standardně používaných v makrokódu ANDREA při výpočtu koeficientů parametrizačních funkcí pro HFP

Stav	Pnom (%)	$T_{\mathbf{M}}(^{\circ}\mathbf{C})$	$c_{\rm B}~({ m g/kg})$
Záporný odskok	50	295,8	1,0
Nominální stav	100	305,8	2,8
Kladný odskok	200	315,8	8,0

Předtím, nežli se přejde k diskuzi výsledků získaných z testování parametrizace mikroskopických účinných průřezů, je nutné uvést prospektivní poznámku o modifikaci parametrizačního schématu mikroskopických účinných průřezů popsaného rovnicí (3.4). Po implementaci všech kroků metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu, které shrnuje celá kapitola 3, byla taktéž uvážena možnost o zohlednění spektrální historie vyhořívání v parametrizaci mikroskopických účinných průřezů. Je důležité si uvědomit, že se požaduje, aby mikroskopické účinné průřezy, které figurují ve výpočtech atomových hustot aktinoidů, byly parametrizovány pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu, která je pro daný krok vyhoření zatím neznámá. Ovšem díky tomu, že pro evoluční úlohy je v makrokódu ANDREA využita metoda prediktor-korektor, je taktéž možné mikroskopické účinné průřezy parametrizovat pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu. Pomocí obrázku 3.2, na kterém byla schematicky znázorněna metoda prediktorkorektor, bude vysvětlen postup parametrizace mikroskopických účinných průřezů zahrnující indikátor <sup>239</sup>Pu. Nechť je předpokládáno vyhořívání s kroky *i* a *i* + 1 a s časovým intervalem  $\Delta t$ , pak jsou mikroskopické účinné průřezy v kroku *i* + 1 získány na základě parametrizace, do které navíc vstupuje predikovaná atomová hustota  $N_{Pu}^{*}$  určená na základě atomových hustot a potřebných konstant z kroku *i* a časového intervalu  $\frac{\Delta t}{2}$ . Parametrizaci mikroskopických účinných průřezů se zohledněním spektrální historie vyhořívání pomocí predikované atomové hustoty <sup>239</sup>Pu lze popsat analogicky jako v rovnici (1.7), tj.

$$\sigma_{\mathrm{r,g,i}}^{\mathrm{alt}}\left(B, T_{\mathrm{F}}, T_{\mathrm{M}}, c_{\mathrm{B}}, \delta\sqrt{N}_{\mathrm{Pu}}^{\star}\right) = \sigma_{\mathrm{r,g,i}}^{\mathrm{nom}}\left(B\right) \left[1 + h_{\mathrm{r,g,i}}\left(B, \delta\sqrt{N}_{\mathrm{Pu}}^{\star}\right)\right] + f_{\mathrm{r,g,i}}\left(B, T_{\mathrm{F}}, T_{\mathrm{M}}, c_{\mathrm{B}}\right),$$
(3.8)

kde  $h_{r,g,i}$ , resp.  $\delta \sqrt{N_{Pu}^{\star}}$  je parametrizační funkce, resp. proměnná spektrální historie vyhořívání, jejichž tvary jsou identické s rovnicemi (1.4), resp. (1.5), funkce  $f_{r,g,i}$  zahrnuje vliv všech uvažovaných provozních parametrů a představuje zjednodušený zápis parametrizačních funkcí z rovnice (3.4), přičemž jejich tvary jsou jako v předchozím případě voleny podle tabulky 3.1. Parametrizace mikroskopických účinných průřezů (3.8) se zahrnutím spektrální historie vyhořívání a volbou funkcí podle tabulky 3.1 bude v dalším textu označována jako standardní s historií.

Nyní lze již konečně přistoupit k testování parametrizačního schématu mikroskopických účinných průřezů, k čemuž budou použity modelové scénáře vyhořívání, které byly vybrány na základě toho, aby bylo možné porovnat výpočty ANDREou s referenčími výsledky získanými z mikrokódu. Za modelové scénáře vyhořívání byly zvoleny samostatné palivové soubory paliva TVSA-T uvažované v nekonečném prostředí, jejichž výčet shrnuje tabulka 3.3. Konvence použitá pro značení palivových souborů je stručně vysvětlena v příloze A. Pro každý palivový soubor pak byly napočítány provozní historie vyhořívání se změnou výkonu, koncentrace kyseliny borité a hustoty moderátoru, ve kterých byl vždy měněn jeden z uvažovaných provozních parametrů v porovnání s jeho nominální hodnotou, která je uvedena v tabulce 1. V tabulce 3.3 je použito značení modelovových scénářů vyhořívání, přičemž jeho význam je následující:

- p<hodnota> značí použitou hodnotu výkonu ve W/g,
- b<hodnota> označuje hodnotu koncentrace kyseliny borité v jednotkách g/kg přenásobenou faktorem 10,
- md<hodnota> značí teplotu chladiva v °C vedoucí na jeho odpovídající hustotu. Pro všechny modelové scénáře vyhořívání byly uvažovány konstantní hodnoty tlaku chladiva.

Ze zavedeného značení efektivních přeměn nuklidů (3.2) plyne, že při výpočtu atomových hustot aktinoidů je použit nemalý počet mikroskopických účinných průřezů a vykreslovat zde výsledky z testování parametrizace mikroskopických účinných průřezů pro všechny uvažované modelové scénáře vyhořívání by jistě bylo značně nepraktické a neefektivní. Z tohoto důvodu budou nejprve vykresleny výsledky testování parametrizace pro několik modelových scénářů a vybraných mikroskopických účinných průřezů.

Měněné parametry	Výčet uvažovaných scénářů	
PS	a20A, a40A, a40A6a, a44E6a, a47D12, a47D18	
P	p19, p25, p30, p35, p40, p45 p50, p55, p60, p65, p70, p75, p79	
$c_{\mathrm{B}}$	b00, b05, b07, b10, b15, b20, b30 b40, b45, b50, b55, b60, b65, b70, b80	
$ ho_{ m M}$	md286, md289, md291, md293, md295, md298 md300, md303, md308, md310, md313, md315	

Následně bude pomocí histogramu provedeno komplexní zhodnocení testování parametrizace vybraných mikroskopických účinných průřezů pro všechny uvažované modelové scénáře vyhořívání.

Na obrázku 3.4 jsou zobrazeny závislosti vybraných mikroskopických účinných průřezů na vyhoření pro zvolené modelové scénáře vyhořívání, které byly získány na základě standardního parametrizačního schématu (3.4) a parametrizačního schématu se zahrnutím spektrální historie vyhořívání (3.8). Ve všech případech jsou taktéž vykresleny referenční výsledky mikroskopických účinných průřezů získané pomocí mikrokódu HELIOS, se kterými budou obě uvažovaná parametrizační schémata porovnávána. Obrázky 3.4a, 3.4c a 3.4e zobrazují vybrané mikroskopické účinné průřezy, které figurují v bilančních rovnicích pro výpočet stěžejní atomové hustoty <sup>239</sup>Pu. Odtud je patrné, že ve všech znázorněných případech vykazuje parametrizace se zahrnutím spektrální historie vyhořívání přesnější výsledky než standardní parametrizace při porovnání s referenčními výpočty. Na obrázcích 3.4b, 3.4d a 3.4f jsou následně vykresleny hodnoty relativních odchylek od referenčních výpočtů v HELIOSu během celého uvažovaného vyhořívání. I přestože relativní odchylky standardní parametrizace od referenčních výsledků nejsou značné a při maximálním vyhoření dosahují nejvýše 0,5 %, je patrné, že s rostoucím vyhořením se jejich hodnoty přibližně lineárně zvyšují. To je způsobeno tím, že při vyšších hodnotách vyhoření se spektrální historie vyhořívání podílí na hodnotách mikroskopických účinných průřezů větší měrou. Na druhou stranu lze z obrázků 3.4b, 3.4d a 3.4f pozorovat, že parametrizace mikroskopických účinných průřezů se zohledněním spektrální historie vyhořívání vykazuje nižší relativní odchylky ve srovnání se standardní parametrizací, a navíc i s rostoucími hodnotami vyhoření lze pozorovat téměř konstatní závislosti relativní odchylky od HELIOSu na vyhoření, které na zobrazených modelových scénářích nepřevyšují hodnotu 0,1 %.

Kompletní zhodnocení parametrizace vybraných mikroskopických účinných průřezů pro všechny modelové scénáře vyhořívání vypsané v tabulce 3.3 je provedeno na obrázku 3.5. Jsou zde opět znázorněny mikroskopické účinné průřezy potřebné k výpočtu stěžejní atomové hustoty <sup>239</sup>Pu sloužící k indikaci spektrální historie vyhořívání. Histogramy zobrazují četnosti relativních odchylek daných mikroskopických účinných průřezů od referečních výpočtů získané ze všech kroků vyhoření pro uvažovaná parametrizační schémata. Z obrázku 3.5 je patrné, že ve všech uvažovaných případech poskytuje parametrizace se zahrnutím spektrální historie vyhořívání vyšší přesnost ve srovnání se standardní parametrizací a v oblasti kolem relativní odchylky 0,0 % je vždy zastoupen

větší počet relativních odchylek pro parametrizaci zohledňující spektrální historii vyhořívání.

Na základě zhodnocení provedeného v této podkapitole bude pro další testování v modelu aktinoidů použita parametrizace mikroskopických průřezů se zahrnutím spektrální historie vyhořívání ve tvaru (3.8).



Obrázek 3.4: Porovnání vybraných mikroskopických účinných průřezů rekonstruovaných na základě odlišných parametrizačních schémat v makrokódu ANDREA s referenčími výpočty vyhoření pro dané modelové scénáře vyhořívání



Obrázek 3.5: Přesnost parametrizačních schémat v makrokódu ANDREA pro vybrané mikroskopické účinné průřezy vzhledem k referenčním výpočtům odvozená na základě modelových scénářů vyhořívání

#### 3.1.3 Testování spolehlivosti modelu aktinoidů

Nyní lze již přistoupit k testování modelu vyhořívání aktinoidů v programu AN-DREA. Je vhodné připomenout, že v analytickém řešení bilančních rovnic (3.1) provedeného pomocí Batematovy motedy (3.3) jsou použity lokální hustoty toku neutronů pro daný nód vypočítané ANDREou a parametrizované mikroskopické účinné průřezy získané na základě vztahu (3.8). Spolehlivost modelu bude testována vůči referenčím výpočtům provedeným mikrokódem HELIOS. Je zřejmé, že provést absolutní porovnání atomových hustot aktinoidů mezi modelem v makrokódu ANDREA a v mikrokódu HE-LIOS by nebylo úplně vhodné, neboť přístupy výpočtu jsou velice odlišné. V programu ANDREA je uvažován pouze zjednodušený linearizovaný model, zatímco v HELIOSu je používán podrobný nelinearizovaný model, ve kterém jsou zahrnuty i reakce typu (n, xn) a komplikovanější alfa přeměny. Navíc jeho řešení je provedeno pomocí numerické Rungeovy–Kuttovy–Fehlbergovy metody čtvrtého řádu [22]. Z tohoto důvodu budou sledovány poměry atomových hustot v následujícím tvaru

$$\frac{V_i^{\text{nom}}}{N_i^{\text{alt}}},$$
 (3.9)

kde  $N_i^{\text{nom}}$ , resp.  $N_i^{\text{alt}}$  jsou atomové hustoty aktinoidu i pro nominální výpočet vyhoření, resp. výpočet, ve kterém bylo vyhoříváno se změněnými provozními parametry oproti jejich nominálním hodnotám. Je důležité poznamenat, že sledovaný poměr pro <sup>239</sup>Pu vystupuje v proměnné spektrální historie vyhořívání  $\delta\sqrt{N}_{\text{Pu}}$ . V případě, že chování poměrů atomové hustoty <sup>239</sup>Pu pro model a referenční výpočet bude vykazovat konzistentní chování, bude možné použít zjednodušený model pro predikci atomové hustoty <sup>239</sup>Pu, jejíž znalost je nezbytná pro zahrnutí spektrální historie vyhořívání do parametrizace grupových konstant.

Na obrázku 3.6 je zobrazeno porovnání poměrů (3.9) stěžejního <sup>239</sup>Pu pro model v ANDREe a referenční výpočet, přičemž byly uvažovány výpočty vyhoření se změnami koncentrace kyseliny borité, výkonu a hustoty moderátoru pro palivový soubor a47D18. Z obrázků 3.6a, 3.6c a 3.6e je patrné, že pro všechny analyzované výpočty vykazuje model v programu ANDREA velice podobné chování jako referenční výpočet. S rostoucím vyhořením lze pozorovat výraznější odchylky mezi modelem a referenčním výpočtem, což je především dáno tím, že v modelu je uvažován pouze zjednodušený řetězec, ve kterém oproti HELIOSu není postihnut vliv vyšších aktinoidů. Obrázky 3.6b, 3.6d a 3.6f ukazují relativní odchylky poměru atomové hustoty <sup>239</sup>Pu mezi modelem a HELIOSem. Odtud je patrné, že pro všechny analyzované výpočty dosahují relativní odchylky nejvyšší hodnoty přibližně 0,5 % při maximální hodnotě uvažovaného vyhoření.

Kompletní zhodnocení modelu aktinoidů v programu ANDREA bylo provedeno na modelových scénářích vyhořívání vypsaných v tabulce 3.3. Histogramy vykreslené na obrázku 3.7 uvádí četnosti relativních odchylek poměrů (3.9) pro model v makrokódu ANDREA od referenčních výpočtů všech krocích vyhoření uvažovaných v modelových scénářích. Kromě stěžejní atomové hustoty <sup>239</sup>Pu jsou na obrázku 3.7 uvedeny i výsledky pro ostatní aktinoidy z řetězce <sup>238</sup>U – <sup>241</sup>Pu. Na obrázku 3.7a je vykreslena četnost relativních odchylek pro nuklid <sup>238</sup>U. Odtud lze pozorovat, že hodnoty relativních odchylek dosahují velice nízkých hodnot, a to především kvůli tomu, že nuklid <sup>238</sup>U je v palivu zastoupen v obrovském množství, ale vyhořívá ho poměrně málo. Většina četností relativních odchylek pro nuklid <sup>239</sup>Np vykreslený na obrázku 3.7b se nachází přibližně v rozmezí od -0,3 % do 0,3 %. Obrázky 3.7c a 3.7d ukazují, že pro izotopy <sup>239</sup>Pu a <sup>240</sup>Pu většina relativních odchylek leží přibližně v rozmezí od -0,8 % do 0,8 %. V případě aktinoidu <sup>241</sup>Pu je z obrázku 3.7e zřejmé, že bylo dosaženo vyšších četností pro relativní odchylky s vyššími hodnotami, což je pravděpodobně způsobeno použitím zjednodušeného modelu v programu ANDREA.



Obrázek 3.6: Porovnání poměrů atomové hustoty <sup>239</sup>Pu při výpočtu vyhoření v makrokódu ANDREA a v mikrokódu HELIOS na příkladu PS a47D18



Obrázek 3.7: Zhodnocení výpočtu atomových hustot aktinoidů pomocí modelu vyhořívání řetězce aktinoidů <sup>238</sup>U – <sup>241</sup>Pu v makrokódu ANDREA na modelových scénářích vyhořívání

### 3.2 Model vyhořívání aktinoidů v modulu AKIKO

V parametrizační funkci spektrální historie vyhořívání (1.4), resp. v její proměnné (1.5) vystupují atomové hustoty <sup>239</sup>Pu pro změněnou provozní historii a taktéž pro nominální provozní historii. Atomová hustota <sup>239</sup>Pu pro změněnou provozní historii je v programu ANDREA počítána na základě modelu řetězce aktinoidů popsaného v podkapitole 3.1 pro každý ve výpočtu definovaný nód. Počítat navíc v makrokódu atomovou hustotu <sup>239</sup>Pu pro nominální provozní historii by bylo značně neefektivní a z hlediska implementace taktéž nepraktické. Nabízí se možnost jejího uložení v závislosti na vyhoření pro všechny materiály použité ve výpočtu do aplikační knihovny. Hlavním cílem je, aby nominální atomová hustota <sup>239</sup>Pu, která bude uložena do knihovny, byla vypočítána konzistentním způsobem jako atomová hustota <sup>239</sup>Pu v makrokódu ANDREA. V opačném případě by byla negativně ovlivněna přesnost parametrizace, ve které se používá atomová hustota <sup>239</sup>Pu jakožto indikátor spektrální historie vyhořívání. Z tohoto důvodu je zřejmé, že nelze použít atomovu hustotu <sup>239</sup>Pu vypočítanou přímo mikrokódem, ale bude nezbytné do modulu AKIKO implementovat model vyhořívání aktinoidů.

#### 3.2.1 Metoda reevaluate\_actinides

Pro přípravu knihoven makrokódu ANDREA je využíván modul AKIKO, který se mimo jiné stará o načítání výstupních souborů mikrokódů, jejich zpracováním a následným vytvořením knihovny. Mezi načítanými daty jsou i atomové hustoty aktinoidů vypočítané mikrokódem, které ovšem bude nutné kvůli výše uvedeným důvodům přepočítat stejným postupem jako v modelu řetězce aktinoidů v makrokódu ANDREA. K tomuto účelu byla v nástroji AKIKO implementována metoda reevaluate\_actinides. Mezi její hlavní funkce patří již zmiňovaný výpočet nominální atomové hustoty <sup>239</sup>Pu, jejíž hodnoty budou v závislosti na vyhoření pro všechny typy uvažovaných materiálů zapsány do aplikační knihovny. Makrokód ANDREA si načte nominální atomové hustoty <sup>239</sup>Pu při každém výpočtu a uplatní je při rekonstrukci grupových konstant v členu, který zohledňuje spektrální historii vyhořívání. Druhou funkcí je přepočítání atomových hustot <sup>239</sup>Pu pro všechny výpočty vyhoření provedené mikrokódem, které slouží pro postihnutí spektrální historie vyhořívání, tj. výpočty, ve kterých bylo vyhoříváno na nenominálních provozních parametrech. Znalost přepočítaných atomových hustot <sup>239</sup>Pu pro všechny výpočty vyhoření je nezbytná v paremetrizačním modulu nástroje AKIKO, neboť bez nich by nebylo možné určit koeficienty parametrizačních funkcí pro spektrální historii vyhořívání, jejichž význam uvádí vztah (1.6). Pokud by pro určení uvedených koeficientů byly použity atomové hustoty <sup>239</sup>Pu vypočítané přímo mikrokódem a nebyly vypočítány konzistentním způsobem jako v makrokódu ANDREA, opět by mohlo dojít k vnesení nepřesností do parametrizace grupových konstant.

Přepočítání atomových hustot aktinoidů je v metodě reevaluate\_actinides realizováno analytickým řešením zjednodušených linearizovaných bilančních rovnic řetězce aktinoidů <sup>238</sup>U – <sup>241</sup>Pu (3.1) pomocí Batemanovy metody, jejíž postup řešení je vypsán v rovnici (3.3). Navíc i v metodě reevaluate\_actinides je implementována metoda prediktor-korektor, aby byl skutečně výpočet atomových hustot aktinoidů proveden stejným způsobem jako v programu ANDREA.

Postup přepočítání atomových hustot aktinoidů v metodě reevaluate\_actinides je takový, že pro řešení bilančních rovnic aktinoidů (3.3) jsou v prvním kroku výpočtu použity atomové hustoty aktinoidů odpovídající materiálovému složení paliva, které jsou převzaty z výpočtu mikrokódu. Časový krok  $\Delta t$  vystupující v rovnici (3.3) je určen na základě rozdílu dvou po sobě jdoucích kroků vyhoření *i* a *i* + 1, během nichž je konstantní hodnota výkonu PS, tj.

$$\Delta t = \frac{B_{i+1} - B_i}{P},\tag{3.10}$$

přičemž hodnoty vyhoření i výkonu PS jsou získány z provedeného výpočtu vyhoření mikrokódem. Do metody prediktor-korektor vstupuje časový krok  $\frac{\Delta t}{2}$  a poté jsou vypočítány predikované atomové hustoty aktinoidů s využitím pro výpočet potřebných veličin z kroku *i*. Následuje výpočet korigovaných atomových hustot aktinoidů, které se získají pomocí predikovaných atomových hustot aktinoidů, potřebných veličin pro výpočet z kroku *i* + 1 a časového kroku  $\frac{\Delta t}{2}$ . Analogický postup je proveden pro všechny kroky vyhoření, které byly definovány ve výpočtu mikrokódu.

V ideálním případě by bylo požadováno, aby výpočet atomových hustot aktinoidů pro libovolný provozní stav v nástroji AKIKO byl identický s výpočtem v makrokódu ANDREA. Implementované metody jsou v obou modelech totožné, takže rozhodující vliv na určení atomových hustot aktinoidů mají veličiny vstupující do jejich výpočtu. V efektivních přeměnách nuklidů (3.2) vystupují mimo jiné mikroskopické účinné průřezy a hustoty toku neutronů. V nástroji AKIKO jsou k dispozici mikroskopické účinné průřezy získané přímo z výstupu mikrokódu. Je důležité poznamenat, že pro výpočet nominálních atomových hustot aktinoidů jsou jejich hodnoty v souladu s použitými hodnotami v makrokódu ANDREA, neboť pro nominální provozní stav se neuplatňují žádné korekce, tj. všechny parametrizační členy jsou rovny nule. Naopak pro nenominální provozní historie již nebudou použité mikroskopické účinné průřezy v obou modelech identické, neboť v makrokódu ANDREA jsou získány na základě parametrizace podrobně popsané v podkapitole 3.1.1, zatímco v nástroji AKIKO jsou použity jejich přesné hodnoty z výpočtu mikrokódem. I přestože byla přesnost parametrizace mikroskopických účinných průřezů v programu ANDREA vůči referenčnímu výpočtu zvýšena díky zohlednění spektrální historie vyhořívání, jistě nebudou mikroskopické účinné průřezy získané z parametrizace a vypočítané mikrokódem zcela identické. Díky tomu lze předpokládat, že ani vypočítané atomové hustoty aktinoidů pomocí modelů v nástroji AKIKO a v makrokódu ANDREA nebudou zcela totožné a bude možné mezi nimi pozorovat odchylky. Ale až následné porovnání ukáže, zdali použití neidentických mikroskopických účinných průřezů bude mít vliv na získané výsledky a zdali bude možné přijmout zjednodušující předpoklad, kdy v modelu aktinoidů v nástroji AKIKO budou použity mikroskopické účinné průřezy získané přímo z výpočtu mikrokódu.

Nyní však zbývá dořešit otázku, jakým způsobem použít hustoty toku neutronů, jejichž hodnoty je taktéž nutné dosadit do efektivních přeměn nuklidů (3.2). Nabízí se možnost použít hustoty toku neutronů vypočítané přímo HELIOSem, které jsou získány na základě detailního řešení transportní rovnice s 49 energetickými grupami a následným zkondenzováním do 2 energetických grup. Na druhou stranu v makrokódu ANDREA je pro nodální řešení difúzní rovnice využita metoda konformního zobrazení a příčné integrace, která je realizována pro hexagonální mříž pomocí řešiče NEM6. Odtud je zřejmé, že přístup ve výpočtu hustoty toku neutronů je rozdílný, a tedy bude nezbytné reprodukovat výpočet hustot toku neutronů podobným způsobem jako v makrokódu ANDREA, ve kterém jsou jejich hodnoty získány na základě homogenizovaných grupových konstant. Následující podkapitola se pokusí popsat postup, pomocí kterého by bylo možné určit hustoty toku neutronů v modulu AKIKO tak, aby jejich hodnoty odpovídaly výpočtu v makrokódu ANDREA [2, 5, 19].

#### 3.2.2 Výpočet hustot toku neutronů v metodě reevaluate\_actinides

V modulu AKIKO bude výpočet hustot toku neutronů proveden na základě homogenizovaných grupových konstant v nekonečném prostředí. Transportní rovnici v P1 přiblížení lze podle článku [23] zapsat ve tvaru

$$\nabla J_{\rm h} + \Sigma_{\rm tot,h} \phi_{\rm h} = \sum_{h'} \Sigma_{\rm s0,h'h} \phi_{h'} + \frac{\chi_{\rm h}}{k_{\rm ef}} \sum_{h'} \nu_{h'} \Sigma_{{\rm f},h'} \phi_{h'}, \qquad (3.11)$$

$$\frac{1}{3}\nabla\phi_{\rm h} + \Sigma_{\rm tot,h}J_{\rm h} = \sum_{h'}\Sigma_{\rm s1,h'h}J_{h'},\tag{3.12}$$

kde

- h, resp. h' značí danou energetickou grupu,
- *J*<sub>h</sub> je hustota proudu neutronů,
- $\Sigma_{tot,h}$  označuje celkový makroskopický účinný průřez, pro který platí

$$\Sigma_{\text{tot,h}} = \Sigma_{\text{a,h}} + \sum_{\substack{h' \\ h' < h}} \Sigma_{\text{s0,h'h}}, \qquad (3.13)$$

- Σ<sub>s0,h'h</sub>, resp. Σ<sub>s1,h'h</sub> je nultý, resp. první moment makroskopického účinného průřezu pro rozptyl neutronů z energetické grupy h' do h,
- *X*<sub>h</sub> představuje distribuční funkci energie neutronů,
- k<sub>ef</sub> je efektivní koeficient násobení,
- $\nu_{h'}$  značí výtěžek neutronů emitovaných ze štěpení v energetické grupě h'.

V nekonečném prostředí neutrony zanikají pouze absorpcí, z čehož plyne, že únik je nulový. S využitím tohoto předpokladu lze hustotu toku neutronů pro grupu h vyjádřit z rovnice (3.11) v následujícím tvaru

$$\phi_{\rm h} = \frac{\sum_{h'} \overline{\Sigma}_{\rm s0,h'h} \phi_{h'} + \frac{\chi_{\rm h}}{k_{\infty}} \sum_{h'} \overline{\nu}_{h'} \overline{\Sigma}_{\rm f,h'} \phi_{h'}}{\overline{\Sigma}_{\rm tot,h}},\tag{3.14}$$

kde za  $\Sigma_{s0,h'h}$  jsou dosazovány hodnoty z rozptylové matice, v níž jsou zahrnuty zisk i ztráta energie rozptylem, tedy down-scattering i up-scattering. Výše uvedený postup výpočtu hustot toku neutronů z rovnice (3.14) je využit v modulu AKIKO. Je důležité podotknout, že středované veličiny v rovnici (3.14) značí homogenizované grupové konstanty v příslušné grupové struktuře, které jsou v nástroji AKIKO k dispozici z výpočtu mikrokódem. Jejich hodnoty budou použity v rovnici (3.14) k výpočtu hustot toku neutronů.

Stejně jako v případě mikroskopických účinných průřezů diskutovaných v předchozí podkapitole nebudou pro nenominální výpočty hodnoty grupových konstant použitých pro výpočet hustot toku neutronů v nástroji AKIKO a v programu ANDREA totožné. Rozdíl je způsoben kvůli tomu, že v makrokódu ANDREA jsou jejich hodnoty získány na základě parametrizace, zatímco v nástroji AKIKO jsou použity jejich hodnoty získané

přímo z výpočtu mikrokódu. Vhodnost použití grupových konstant získaných přímo z výpočtu mikrokódem pro výpočet hustot toku neutronů bude možno pozorovat při porovnání atomových hustot aktinoidů vypočítaných pomocí modelů v nástroji AKIKO a makrokódu ANDREA.

Nyní bude popsán postup řešení soustavy rovnic (3.14), na kterou se aplikuje standardní metoda vnitřních a vnějších iterací. Pro první odhad se iniciuje koeficient násobení a všechny hustoty toku neutronů na hodnoty

$$k_{\infty} = 1, \qquad \phi_{h'} = 1.$$
 (3.15)

Dále se vypočítá hodnota zdrojového členu jako

$$S = \sum_{h} \overline{\nu}_{h} \overline{\Sigma}_{\mathrm{f},h} \phi_{h}, \qquad (3.16)$$

a je provedena první vnitřní iterace, při které se vypočítají aktuální hustoty toku neutronů pomocí soustavy rovnic (3.14). Při vnitřních iteracích navíc hodnota zdrojového členu zůstává konstantní. Následně je při vnější iteraci ze znalosti vypočítaných hustot toku neutronů určena aktuální hodnota zdrojového členu a stanoven koeficient násobení jako poměr zdrojů ve dvou po sobě jdoucích iteracích, tj.

$$k_{\infty} = \frac{S_i}{S_{i-1}}.\tag{3.17}$$

Následuje další vnitřní iterace, při které jsou nové hodnoty hustot toku neutronů a koeficientu násobení dosazeny do soustavy rovnic (3.14), čímž jsou opět získány nové hustoty toku neutronů. Výše uvedený postup probíhá až do chvíle, než je dosaženo stanoveného limitu pro dvě po sobě jdoucí iterace, tj. pro vnitřní

$$\left|\phi_{\rm h}^{i} - \phi_{\rm h}^{i-1}\right| < \varepsilon, \tag{3.18}$$

a pro vnější

$$\left|k_{\infty}^{i}-k_{\infty}^{i-1}\right|<\varepsilon,\tag{3.19}$$

kde  $\varepsilon$  je maximální odchylka mezi dvěma po sobě jdoucími iteracemi [21, 24].

Z výse uvedeného postupu je patrné, že při výpočtu hustot toku neutronů nebyl žádným způsobem zohledněn únik neutronů. Ovšem grupové konstanty použité v rovnici 3.14 jsou připravovány pomocí mikrokódu, ve kterém je provedena korekce na kritické spektrum neutronů. Aby bylo možné i ve výpočtu hustot toku neutronů v nástroji AKIKO ocenit únik neutronů, bude nezbytné stanovit kritický geometrický faktor  $B_1^2$ . Postup pro jeho výpočet je takový, že je iterováno na kritický koeficient násobení, tj.

$$k_{\infty} = 1, \tag{3.20}$$

jehož hodnota je získána podle vztahu 3.17, přičemž při jeho určení vstupují do výpočtu hustot neutronů podle rovnice 3.14 a výše uvedeného interačního postupu makroskopické účinné průřezy pro absorpci v grupě g, jejichž hodnoty jsou upraveny podle následujícího vztahu

$$\Sigma_{\mathrm{a,h}}^{B_1} = \Sigma_{\mathrm{a,h}} + D_\mathrm{h} B_1, \tag{3.21}$$

kde  $D_h$  je difuzní koeficient v grupě h. Iterace na kritický koeficient násobení probíhá až do chvíle, než je dosaženo stanoveného limitu pro dvě po sobě jdoucí iterace kritického geometrického faktoru, tj.

$$\left|B_1^i - B_1^{i-1}\right| < \varepsilon, \tag{3.22}$$

a navíc pro první krok výpočtu kritického geometrického faktoru je nastavena iniciační hodnota  $B_1 = 10^{-3}$ . Po určení hodnoty kritického geometrického faktoru jsou podle rovnice 3.17 a výše uvedeného iteračního postupu přepočítány hustoty toku neutronů, přičemž v jejich výpočtu je uvažován  $\Sigma_{a,h}^{B_1}$ , tj. makroskopický účinný průřez pro absorpci v grupě h korigovaný na únik neutronů odpovídající kritickému stavu.

Ve výše popsaném postupu výpočtu byly pro první iteraci předpokládány jednotkové hustoty toku neutronů. Pokud mají být získány hustoty toku neutronů odpovídající přímo daným palivovým souborům, je nezbytné, aby byly přeškálovány na základě známého výkonu palivového souboru. Měrný tepelný výkon vztažený na jednotku objemu  $\hat{q}_V$ , který odpovídá jednotkovým hustotám toku neutronů  $\hat{\phi}_h$ , lze vyjádřit v následujícím tvaru

$$\hat{q}_V = \sum_h \overline{\kappa}_h \overline{\Sigma}_{\mathrm{f},h} \hat{\phi}_h, \qquad (3.23)$$

kde  $\overline{\kappa}_h$  je energie uvolněná ze štěpení v energetické grupě *h*. Při definování výpočtu v mikrokódu je zadáván tepelný výkon palivového souboru vztažený na jednotku hmotnosti  $P_{\text{FA}}$ . Aby bylo možné ho použít k přeškálování hustoty toku neutronů, je nutné ho přepočítat na měrný tepelný výkon vztažený na jednotku objemu  $q_{V,\text{FA}}$  pomocí následujícího vztahu

$$q_{V,\mathrm{FA}} = \rho_{\mathrm{F}} \frac{V_{\mathrm{F}}}{V_{\mathrm{FA}}} P_{\mathrm{FA}}, \qquad (3.24)$$

kde  $\rho_{\rm F}$  značí hustotu paliva,  $V_{\rm F}$ , resp.  $V_{\rm FA}$  je objem paliva v palivovém souboru, resp. objem palivového souboru vztažený na jednotku axiální délky. Všechny veličiny uvedené v předchozím vztahu (3.24) jsou získány z výstupního souboru mikrokódu a poměr  $\frac{V_{\rm F}}{V_{\rm FA}}$  zde vystupuje z důvodu přepočítání hustoty paliva na hustotu vztaženou k celkovému objemu palivového souboru. Se znalostí měrných tepelných výkonů (3.23) a (3.24) lze vyjádřit hustotu toku neutronů pro grupu h v nekonečném prostředí odpovídající danému palivovému souboru ve tvaru

$$\phi_{\rm h} = \frac{q_{V,\rm FA}}{\hat{q}_V} \hat{\phi}_{\rm h}.$$
(3.25)

#### 3.2.3 Zhodnocení výpočtu atomové hustoty <sup>239</sup>Pu

Z výše provedeného popisu plyne, že výpočty atomových hustot pomocí modelu aktinoidů v nástroji AKIKO budou provedeny s mikroskopickými účinnými průřezy vypočítanými přímo mikrokódem a hustotami toku neutronů určenými podle postupu uvedeného v podkapitole 3.2.2. Nyní lze již přistoupit k porovnání stěžejní atomové hustoty <sup>239</sup>Pu mezi nástrojem AKIKO, ve kterém je její výpočet zajištěn pomocí metody reevaluate\_actinides, a makrokódem ANDREA. Na začátku podkapitoly 3.2 byl vytyčen hlavní cíl, a sice zajištění identického výpočtu atomové hustoty <sup>239</sup>Pu mezi modulem AKIKO a programem ANDREA. Kvůli zavedeným zjednodušením lze očekávat, že nebude možné vytyčený cíl bezezbytku naplnit.

Na obrázku 3.8 jsou porovnány nominální atomové hustoty <sup>239</sup>Pu mezi nástrojem AKIKO a makrokódem ANDREA pro vybrané palivové soubory z modelových scénářů. Z obrázku 3.8a je patrné, že pro všechny analyzované palivové soubory bylo dosaženo téměř totožných atomových hustot <sup>239</sup>Pu mezi oběma přístupy během celého uvažovaného vyhořívání. Obrázek 3.8b ukazuje, že relativní odchylky mezi oběma přístupy dosahují pouze úrovně zaokrouhlovacích chyb. Navíc s rostoucím vyhořením, kdy se zvyšuje atomová hustota <sup>239</sup>Pu, se její hodnota blíží téměř nule. Je velice podstatné, že pro nominální výpočet vyhoření lze určit pomocí metody reevaluate\_actinides atomové hustoty <sup>239</sup>Pu, jejichž hodnoty jsou identické s atomovými hustotami <sup>239</sup>Pu vypočítanými makrokódem ANDREA. Jejich shoda je důležitá především proto, že výpočet nominální atomové hustoty <sup>239</sup>Pu v nástroji AKIKO nahrazuje výpočet v makrokódu ANDREA, který by jinak musel být proveden při každém běhu programu, aby bylo možné použít proměnnou  $\delta\sqrt{N_{\rm Pu}}$  pro zohlednění spektrální historie vyhořívání. I přes zavedená zjednodušení byly získány pro oba přístupy identické výsledky, a to díky tomu, že pro nominální výpočet vyhoření jsou v makrokódu ANDREA při rekonstrukci grupových konstant všechny parametrizační členy nulové. To znamená, že hodnoty grupových konstant použitých v obou modelech jsou shodné, a tedy i nominální atomové hustoty <sup>239</sup>Pu jsou shodné.







Obrázek 3.8: Porovnání výpočtu atomových hustot <sup>239</sup>Pu mezi modely v nástroji AKIKO a v makrokódu ANDREA pro nominální výpočet vyhoření na příkladech vybraných palivových souborů

Je vhodné připomenout, že v nástroji AKIKO jsou nominální i nenominální atomové hustoty <sup>239</sup>Pu přepočítané metodou reevaluate\_actinides předány parametrizačnímu modulu, ve kterém jsou pomocí nich určeny koeficienty parametrizačních funkcí. Takto vypočítané koeficienty jsou použity při rekonstrukci grupových konstant v makro-kódu ANDREA v členu, který zohledňuje spektrální historii vyhořívání. Pokud by byl koeficient parametrizační funkce určen na základě atomové hustoty <sup>239</sup>Pu, resp. proměnné  $\delta\sqrt{N_{Pu}}$ , která se výrazně liší od atomové hustoty <sup>239</sup>Pu vypočítané v programu ANDREA, pak by pomocí parametrizační funkce nebylo možné přesně zohlednit změnu makroskopického účinného průřezu zapříčiněného spektrální historií vyhořívání. Z tohoto důvodu je důležité, aby i nenominální atomové hustoty <sup>239</sup>Pu vypočítané pomocí nástroje AKIKO a makrokódu ANDREA byly v co nejvyšší shodě.

Na obrázku 3.9 je provedeno porovnání atomových hustot <sup>239</sup>Pu pro výpočty vyhoření se změnami koncentrace kyseliny borité, výkonu a hustoty moderátoru vůči jejich nominálním hodnotám na příkladu palivového souboru a44E6a. Obrázky 3.9a, 3.9c a 3.9e ukazují, že i pro všechny analyzované nenominální atomové hustoty <sup>239</sup>Pu bylo dosaženo velice dobré shody mezi metodou reevaluate\_actinides a výpočtem v makrokódu ANDREA. Z obrázků 3.9b, 3.9d a 3.9f je patrné, že pro všechny analyzované výpočty se změněnými parametry nepřesahuje relativní odchylka atomových hustot <sup>239</sup>Pu vypočítaná nástrojem AKIKO od hodnot z makrokódu ANDREA o více než 0,2 % během celého uvažovaného vyhořívání. Relativní odchylky mezi oběma způsoby výpočtu jsou způsobeny zavedenými zjednodušeními, které především spočívají v použití neidentických grupových konstant pro modely vyhořívání aktinoidů v nástroji AKIKO a v makrokódu ANDREA.

Kompletní zhodnocení výpočtu atomových hustot <sup>239</sup>Pu mezi modelem v nástroji AKIKO a v makrokódu ANDREA bylo opět provedeno pro všechny modelové scénáře vyhořívání uvedené v tabulce 3.3. Na histogramu 3.10 jsou vykresleny četnosti relativní odchylky mezi oběma přístupy výpočtu atomové hustoty <sup>239</sup>Pu pro všechny kroky vyhoření uvažované v modelových scénářích vyhořívání. Odtud je zřemé, že většina porovnaných kroků vyhoření spadá do rozsahu relativních odchylek od -0,3 % do 0,3 %.

Závěrem lze konstantovat, že i přes zavedená zjednodušení, lze považovat shodu výpočtů atomových hustot <sup>239</sup>Pu mezi modelem v nástroji AKIKO a v makrokódu AN-DREA za akceptovatelnou. Čtenář by jistě mohl podotknout, zdali by nebylo možné i v nástroji AKIKO použít totožné parametrizované grupové konstanty, které jsou použity v makrokódu ANDREA. Uvedená možnost byla zamýšlena, ale architektura nástroje AKIKO je taková, že parametrizační modul se uplatní až po provedení všech procesů, mezi něž patří i přepočítání atomových hustot aktinoidů. Koeficienty všech parametrizačních funkcí jsou získány až po přepočítání atomových hustot aktinoidů, a tedy provést rekonstrukci grupových konstant přímo v metodě reevaluate\_actinides by bylo velice obtížně proveditelné. Navíc do výpočtu hustot toku neutronů popsaných v podkapitole 3.2.2 vstupují makroskopické účinné průřezy pro absorpci, které jsou v parametrizaci makrokódu ANDREA uvažovány bez přechodových štěpných produktů, neboť jejich hodnoty jsou počítány na základě explicitního modelu přechodových štěpných produktů. To znamená, že pro rekonstrukci stejných makroskopických účinných průřezů pro absorpci by bylo nutné do nástroje AKIKO implementovat i model přechodových štěpných produktů. Z výše uvedeného je zřejmé, že dokázat použít v nástroji AKIKO totožné parametrizované grupové konstanty jako v makrokódu ANDREA je velice složitá úloha. Proto budou akceptována zavedená zjednodušení a bráno v potaz, že díky nim nebude výpočet atomových hustot <sup>239</sup>Pu mezi modely v nástroji AKIKO a programu ANDREA zcela identický.

#### 3.3 Parametrizační modul pro spektrální historii vyhořívání

Z vytyčených úkolů na začátku kapitoly 3, které jsou nezbytné pro implementování metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu do makrokódu ANDREA, byl již popsán model vyhořívání aktinoidů. S jeho využitím je možné určit stěžejní atomovou hustotu <sup>239</sup>Pu ve všech definovaných nódech výpočtu pro libovolný provozní stav. Taktéž již byla do nástroje pro přípravu knihoven AKIKO implementována metoda pro výpočet referenční atomové hustoty <sup>239</sup>Pu, kterou si při výpočtech načte ANDREA. Nyní zbývá doplnit do rekonstrukce makroskopických účinných průřezů členy zohledňující spektrální historii vyhořívání s využitím atomové hustoty <sup>239</sup>Pu.

V podkapitole 3.1.1 byl již stručně popsán postup, jakým lze modifikovat parametrizační schémata, což díky využití nástroje ANASTAZIE nepředstavovalo složitou úlohu. Je třeba poznamenat, že pro parametrizaci mikroskopických účinných průřezů byly aplikovány korelace, které se standardně používají při parametrizaci grupových konstant. V podkapitole 1.2.1 byla představena metoda využívající <sup>239</sup>Pu jakožto indikátor spektrální historie vyhořívání včetně možného tvaru parametrizační funkce. Při porovnání parametrizační funkce (1.4) se standardně používanými funkcemi (3.5) až (3.7) je zřejmé, že tvar jejich proměnných je odlišný. Typ funkce, ve které by vystupovala relativní pro-



Obrázek 3.9: Porovnání výpočtu atomových hustot <sup>239</sup>Pu mezi modely v nástroji AKIKO

Obrázek 3.9: Porovnání výpočtu atomových hustot <sup>239</sup>Pu mezi modely v nástroji AKIKO a v programu ANDREA pro historie se změnami provozních parametrů na příkladu palivového souboru a44E6a



Obrázek 3.10: Zhodnocení výpočtu atomové hustoty <sup>239</sup>Pu mezi modely v nástroji AKIKO a v makrokódu ANDREA na modelových scénářích vyhořívání

měnná, se prozatím v makrokódu ANDREA pro parametrizaci grupových konstant nevyužíval, a proto bylo nutné implementovat modul, který by obsahoval všechny nezbytné funkcionality pro její použití.

#### 3.3.1 Třída RelativeBiExponentCorrelation

Korelace, které se používají pro parametrizaci grupových konstant, jsou v rámci pomocných nástrojů makrokódu ANDREA definovány ve společném zdrojovém souboru napsaném v jazyce Ruby. Nástoje AKIKO a ANASTAZIE jej využívají pro určení koeficientů parametrizačních funkcí, které jsou zapsány do aplikační knihovny, a také pro tvorbu modulů makrokódu ANDREA, které umožňují správné čtení dat z aplikační knihovny a rekonstrukci parametrizovaných grupových konstant.

V korelačním zdrojovém souboru byla pro obecný provozní parametr p definována třída RelativeBiExponentCorrelation, pomocí které je charakterizována korelace pro grupovou konstantu reakce r v grupě g ve tvaru

$$h_{\rm r,g}\left(B,\delta p^e\right) = \begin{cases} \alpha_{\rm r,g}^- \,\delta p^e & \text{pro} \quad \delta p^e \le 0\\ \\ \alpha_{\rm r,g}^+ \,\delta p^e & \text{pro} \quad \delta p^e > 0, \end{cases}$$
(3.26)

kde

•  $\delta p^e = \left(\frac{p^{an}}{p^{nom}}\right)^e - 1$  představuje relativní proměnnou mezi změněným a nominálním provozním parametrem, na kterou je aplikován exponent *e*, •  $\alpha_{r,g}^-$ , resp.  $\alpha_{r,g}^+$  jsou koeficienty korelační funkce (3.26) pro zápornou, resp. kladnou změnu relativní proměnné  $\delta p^e$ .

Tvar parametrizační funkce (3.26) odpovídá po částech lineární funkci bez absolutního členu s relativní proměnnou. To znamená, že výhodně může být využita dědičnost vlastností pro třídu RelativeBiExponentCorrelation z již definované třídy BiLinear-Correlation. Díky tomu nebude muset být vytvořena úplně nová korelační třída, ale bude stačit jen redefinovat některé metody z třídy BiLinearCorrelation.

Nyní budou stručně popsány procesy fungování popisované korelační třídy. Nejprve jsou načtena data z výstupních souborů mikrokódů, která již prošla preprocessingem a na základě kterých jsou generovány parametrizační funkce. V případě metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí <sup>239</sup>Pu to jsou grupové konstanty a atomové hustoty <sup>239</sup>Pu pro nominální provozní historii a pro historie, ve kterých bylo vyhoříváno se změněnými parametry a následně proveden odskok na nominální stav. V prvním kroku jsou nastaveny hranice pro analyzovaná data, tj. jsou nalezeny jejich extrémy a provedena zběžná kontrola dat. Ve třídě RelativeBiExponentCorrelation byla pro určení koeficientů parametrizační funkce implementována polynomiální metoda nejmenších čtverců, jejíž matematický aparát lze nalézt například v učebním textu [25]. Hlavní důvod pro použití aproximační metody založené na proložení bodů křivkou byl předpoklad, že koeficienty parametrizačních funkcí budou moci být určovány na základě většího počtu výpočtů vyhoření se změněnými provozními parametry. Ve srovnání s tím jsou koeficienty ostatních typů standardně používaných parametrizačních funkcí, které postihují změny okamžitých parametrů (tj. teplota paliva, hustota moderátoru aj.), určovány pouze na základě jedné kladné a záporné změny daného parametru, k čemuž není nutné používat aproximační metody. Před samotným použitím aproximační metody jsou nejprve data roztříděna podle znaménka změny relativní proměnné  $\delta p^e$  a následně jsou proložením bodů  $(\delta \Sigma_{r,g}; \delta p^e)$  pomocí metody nejmenších čtverců získány koeficienty parametrizační funkce  $\alpha_{r,g}^{-}$  a  $\alpha_{r,g}^{+}$ . Pomocí nástroje AKIKO jsou takto vypočítané parametrizační koeficienty zapsány do aplikační knihovny v závislosti na uvažovaných krocích vyhoření pro grupové konstanty, které mají být parametrizovány na spektrální historii vyhořívání.

Ve třídě RelativeBiExponentCorrelation bylo taktéž nutné redefinovat metody, které používá metaprogramovací nástroj ANASTAZIE pro generování zdrojových kódů ANDREy umožňující správné čtení záznamů z knihovny a také rekonstrukci parametrizovaných grupových konstant. Všechny metody potřebné pro nástroj ANASTAZIE byly redefinovány tak, aby při generování zdrojových souborů pro ANDREu tvar parametrizační funkce odpovídal rovnici (3.26). Je vhodné připomenout, že ve třídě Relative-BiExponentCorrelation jsou uvažovány relativní změny makroskopických účinných průřezů  $\delta\Sigma_{r,g}$ . To znamená, že parametrizační funkce (3.26) musejí být přenásobeny  $\Sigma_{r,g}^{nom}$ , aby byla započítána absolutní změna do rekonstruovaného makroskopického účinného průřezu. Podrobnější vysvětlení lze nalézt v podkapitole 1.2.1 pro parametrizaci makroskopických účinných průřezů (1.7).

Ve zdrojovém kódu 3.1 je vypsán parametrizační manifest pro makrokód ANDREA, ve kterém je již zahrnut člen zohledňující spektrální historii vyhořívání s využitím atomové hustoty <sup>239</sup>Pu. V parametrizačním manifestu 3.1 se nejprve v konstantě BRANCHES definují výpočty provedené pomocí mikrokódu, které se použijí pro určení koeficientů parametrizačních funkcí. Pro zohlednění spektrální historie vyhořívání byl do konstanty BRANCHES přidán klíč :history, kde se definují právě výpočty vyhoření na nenominálních provozních parametrech. Metodikou výběru provozních historií pro určení podobnostních čísel se bude zabývat následující podkapitola 3.3.2. V konstantě PARAMETRI-ZATION je pro jednotlivé členy parametrizačního schématu zadáván parametrizovaný parametr, který je pro spektrální historii vyhořívání označen symbolem : history, volba nezávislé proměnné značená jako : relative\_nd\_pu239 a posledním údajem jsou volby korelací pro parametrizované grupové konstanty, které jsou zadány pomocí klíče : correlations. V souladu s popisem metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu v podkapitole 1.2.1 byly pro grupové konstanty voleny parametrizační funkce ve tvaru (1.4). Pro ně byla v parametrizačním manifestu použita třída RelativeBiRootCorrelation, ve které je definován exponent *e* s hodnotou 0,5 a dědí veškeré vlastnosti obecné třídy RelativeBiExponentCorrelation.

```
module Manifest
 BRANCHES = \{
    . . .
   history: {
     branches: %w{H1 H2},
     other_branches: [/^H\d+$/]
   },
    . . .
  }
  PARAMETRIZATION = \{
    ' * ' => [
      . . .
      {
       parametrized_by: :relative_nd_pu239,
        parameter: :history,
        correlations: ({
          . . .
               => RelativeBiRootCorrelation,
          :d
          :ss => RelativeBiRootCorrelation,
          :xsa => RelativeBiRootCorrelation,
          :nf => RelativeBiRootCorrelation,
          :kf => RelativeBiRootCorrelation,
          :sf => RelativeBiRootCorrelation,
         })
       },
      . . .
    ]
  }
```

end

Zdrojový kód 3.1: Parametrizační manifest s metodou indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu

#### 3.3.2 Metodika pro stanovení podobnostních čísel

Prozatím nebylo vyjasněno, na základě jakých výpočtů vyhoření se změněnými provozními parametry budou stanoveny koeficienty parametrizačních funkcí (3.26), tj. podobnostní čísla spektrální historie vyhořívání. Při popisu metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí <sup>239</sup>Pu v podkapitole 1.2.1 byl uveden předpoklad, že lze nalézt úměrnost mezi změnami grupové konstanty a proměnné  $\delta \sqrt{N_{\text{Pu}}}$ , přičemž úměrnost nezávisí na typu změněného provozního parametru, který během vyhořívání zapříčinil změnu energetického spektra neutronů. Uvedený předpoklad bude ověřen tak, že v prvním kroku budou podobnostní čísla  $\alpha_{r,g}$  určena na základě velkého počtu výpočtů vyhoření se změněnými provozními parametry, které korespondují s modelovými scénaři vyhořívání uvedenými v tabulce 3.3. Podobnostní čísla určená pomocí velkého počtu výpočtů budou v dalším textu označována jako získaná z detailních historií. Následně budou určena podobnostní čísla pouze na základě nominálního výpočtu a dvou vybraných výpočtů vyhoření se změněnými provozními parametry, přičemž ve srovnání s nominálním výpočtem bude uvažován výpočet s jednou kladnou a zápornou změnou proměnné  $\delta \sqrt{N_{Pu}}$ . Podobnostní čísla vypočítaná pomocí tohoto postupu budou v dalším textu označována jako získaná z vybraných historií. Pokud pomocí obou postupů budou získána podobnostní čísla, která se nebudou výrazně lišit, bude obecně možné pro stanovení podobnostních čísel použít pouze malý počet výpočtů vyhoření s nenominálními provozními parametry. Takový výsledek by představoval ideální scénář, neboť provést velký počet výpočtů vyhoření na nenominálních provozních parametrech pomocí mikrokódů za účelem stanovení podobnostních čísel spektrální historie vyhořívání by v praxi bylo velice nežádoucí.

Na obrázku 3.11 je provedeno porovnání parametrizačních funkcí s podobnostními čísly určenými na základě detailních a vybraných provozních historií pro makroskopické účinné průřezy pro štěpení v rychlé a tepelné grupě, resp. pro absorpci v tepelné grupě. Analýza podobnostních čísel byla provedena pro palivový soubor a47D12 při vyhoření 30 GWd/t<sub>U</sub> a byly uvažovány výpočty, ve kterých bylo vyhoříváno se změněnými hodnotami výkonu, hustoty moderátoru a koncentrace kyseliny borité ve srovnání s nominálními hodnotami uvedenými v tabulce 1. Navíc je důležité podotknout, že na obrázku 3.11 byly změny makroskopických účinných průřezů v závislosti na změně proměnné  $\delta \sqrt{N_{\rm Pu}}$  voleny tak, aby pro všechny typy změn provozních parametrů byly přibližně stejné obory hodnot. Tím se zajistí, že všechny typy výpočtů se změněnými provozními parametry budou mít při porovnání přibližně stejnou váhu. Na obrázcích 3.11a, 3.11c a 3.11e jsou podobnostní čísla parametrizační funkce získány na základě proložení všech bodů  $(\delta \Sigma_{r,g}; \delta \sqrt{N_{Pu}})$ , které je provedeno separátně pro záporné a kladné změny proměnné  $\delta \sqrt{N}_{Pu}$ . Naproti tomu na obrázcích 3.11b, 3.11d a 3.11f jsou podobnostní čísla parametrizačních funkcí určena pouze pomocí nominálního výpočtu a výpočtů vyhoření s jednou kladnou a zápornou změnou proměnné  $\delta \sqrt{N_{\text{Pu}}}$ , konkrétně výpočtů se změnami hustoty moderátoru md292 a md316. Na obrázku 3.11 jsou pro všechny analyzované případy vykresleny taktéž relativní odchylky jednotlivých bodů od proložené parametrizační funkce. Odtud je zřejmé, že relativní odchylky vykazují pro parametrizační funkce sestrojené na základě detailních i vybraných historií velice podobné hodnoty. To znamená, že pro stanovení podobnostních čísel parametrizační funkce spektrální historie vyhořívání bude možné použít pouze výpočty s jednou kladnou a zápornou změnou proměnné  $\delta \sqrt{N_{Pu}}$  a bude dosaženo přijatelné spolehlivosti v aproximaci spektrální historie vyhořívání.

Také je nutné podotknout, že v případě makroskopického účinného průřezu pro absorpci v tepelné grupě zobrazeného na obrázcích 3.11e, resp. 3.11f lze pozorovat, že závislost  $\delta \Sigma_{a,2}$  na  $\delta \sqrt{N_{Pu}}$  vykazuje mírně odlišný charakter pro jednotlivé výpočty se změněnými provozními parametry. Analýza uvedeného jevu byla detailně zkoumána ve výzkumném úkolu [1] a byla vysvětlena tím, že při vyhořívání s odlišnými typy změněných provozních parametrů se odlišuje i vývoj změny energetického spektra neutronů. Z tohoto důvodu pak nelze úplně přesně vystihnout spektrální historii vyhořívání pomocí společné parametrizační funkce s proměnnou  $\delta\sqrt{N}_{\rm Pu}$  pro všechny typy výpočtů se změněnými provozními parametry. Celkově lze ale říci, že i v případě makroskopického



(a) Parametrizační funkce pro sigFg1 sestro- (b) Parametrizační funkce pro sigFg1 sestrojená z detailních historií jená z vybraných historií



(c) Parametrizační funkce pro sigFg2 sestro- (d) Parametrizační funkce pro sigFg2 sestrojená z detailních historií jená z vybraných historií



(e) Parametrizační funkce pro sigABSg2 se- (f) Parametrizační funkce pro sigABSg2 sestrostrojená z detailních historií jená z vybraných historií

Obrázek 3.11: Porovnání parametrizačních funkcí sestrojených na základě detailních a vybraných výpočtů vyhoření v metodě využívající indikátor <sup>239</sup>Pu pro vybrané makroskopické účinné průřezy na příkladu PS ¤47D12 při vyhoření 30 GWd/t<sub>U</sub> účinného průřezu pro absorpci v tepelné grupě lze pomocí <sup>239</sup>Pu postihnout spektrální historii vyhořívání pro všechny analyzované provozní historie, ovšem s menší spolehlivostí než v případě dalších makroskopických účinných průřezů.

Kompletní porovnání podobnostních čísel získaných na základě detailních a vybraných provozních historií pro všechny uvažované kroky vyhoření je provedeno na obrázku 3.12. Na obrázcích 3.12a, resp. 3.12b jsou samostatně vykresleny podobnostní čísla pro záporné, resp. kladné změny proměnné  $\delta\sqrt{N}_{\rm Pu}$ . Odtud je zřejmé, že podobností čísla pro makroskopické účinné průřezy pro štěpení v rychlé i tepelné grupě určené pomocí detailních a vybraných provozních historií vykazují přijatelnou shodu během celého uvažovaného vyhořívání pro kladné i záporné změny proměnné  $\delta\sqrt{N}_{\rm Pu}$ . Pro makroskopický účinný průřez pro absorpci v tepelné grupě lze pozorovat mezi oběma přístupy určení podobnostních čísel vyšší hodnoty rozdílů, což je zapříčiněno výše popsaným jevem.

Z obrázků 3.12 je také patrné, že na počátku vyhořívání jsou předpokládány hodnoty podobnostních čísel rovny nule, a to především kvůli tomu, že efekty spektrální historie vyhořívání se projevují až při vyšších hodnotách vyhoření. Dalším důvodem je, že na počátku vyhořívání by při určování podobnostních čísel mohlo docházet k patologickým případům, kdy při velmi malých atomových hustotách <sup>239</sup>Pu i zanedbatelné rozdíly mezi nominální a změněnou historií skončí poměrně velkou opravou. Určení nenulových podobnostních čísel se řídí podle hodnoty nominální atomové hustoty <sup>239</sup>Pu, která figuruje v proměnné  $\delta \sqrt{N_{Pu}}$ , přičemž na základě testování byla nastavena hodnota  $N_{Pu}^{nom} = 1 \cdot 10^{-5} \text{ b}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ . Je-li hodnota  $N_{Pu}^{nom}$  menší než uvedený limit, pak se do knihovny pro příslušnou grupovou konstantu zapíší nulová podobnostní čísla, a to znamená, že se v parametrizaci neuplatňuje člen zohledňující spektrální historii vyhořívání.

Na závěr lze konstatovat, že podle provedené analýzy je možné získat podobnostní čísla spektrální historie vyhořívání pouze na základě nominálního výpočtu vyhoření a výpočtů vyhoření s jednou kladnou a zápornou změnou proměnné  $\delta\sqrt{N_{\rm Pu}}$ , aniž by došlo k jejich nepřesnému určení. Všechny vytyčené kroky na začátku kapitoly 3, které jsou nezbytné pro fungování metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu v makrokódu ANDREA, byly provedeny a nyní lze již přistoupit k verifikaci implementované metody.



Obrázek 3.12: Porovnání podobnostních čísel získaných na základě aproximace detailních a vybraných provozních historií v metodě využívající indikátor <sup>239</sup>Pu na příkladu palivového souboru a47D12

# Kapitola 4

# Implementace metody spektrálního indexu a jeho integrálu

V úvodní kapitole 1 byly představeny metody, pomocí kterých lze zahrnout spektrální historii vyhořívání do parametrizace grupových konstant. Mezi nimi byla uvedena i metoda spektrálního indexu a jeho integrálu, která bude implementována do makrokódu ANDREA jako alternativa k metodě indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu. Díky tomu bude možné porovnat více metod, které zohledňují spektrální historii vyhořívání, a určit vhodnost jejich použití.

Ve srovnání s metodou využívající atomovou hustotu <sup>239</sup>Pu nebude pro metodu spektrálního indexu nutné v makrokódu, resp. v nástroji pro tvorbu knihoven implementovat další modely fyzikálních jevů. Pro určení spektrálního indexu a jeho integrálu budou moci být v makrokódu využity hustoty toku neutronů, resp. rekonstruované makroskopické účinné průřezy. Díky tomu bude implementace popisované metody jednodušší než v případě metody využívající <sup>239</sup>Pu jakožto indikátor spektrální historie vyhořívání. Pro zahrnutí členů zohledňujích spektrální historii vyhořívání pomocí metody spektrálního indexu do parametrizace makroskopických účinných průřezů v makrokódu ANDREA bude nezbytné provést následující úkoly, a to

- implementovat metodu pro výpočet spektrálního indexu a jeho integrálu v nástroji AKIKO,
- 2. zajistit výpočet spektrálního indexu a jeho integrálu v programu ANDREA,
- 3. naleznout vhodný tvar spektrálního indexu a parametrizačních funkcí,
- doplnit rekonstrukční schéma grupových konstant makrokódu ANDREA o příslušné členy zohledňující spektrální historii vyhořívání,
- 5. provést výběr vhodných výpočtů vyhoření na nenominálních parametrech pro určení koeficientů parametrizačních funkcí.

### 4.1 Postup implementace v modulu AKIKO

V podkapitole 1.2.2 bylo uvedeno, že metoda spektrálního indexu využívá pro zohlednění spektrální historie vyhořívání v parametrizaci grupových konstant integrál spektrálního indexu *SH*, resp. proměnnou  $\delta SH$ . Pro úspěšné fungování metody spektrálního indexu je kvůli níže popsaným důvodům nezbytné, aby do modulu AKIKO byl implementován výpočet spektrálního indexu, resp. jeho integrálu, který bude zajišťovat metoda evaluate\_spectral\_index.

Implementovaná metoda v modulu AKIKO disponuje dvěma hlavními funkcemi. První z nich je výpočet nominálního spektrálního indexu, který je obsažen v definici integrálu spektrálního indexu (1.8) a který by bylo nepraktické počítat při každém výpočtu makrokódu. Podobně jako nominální atomová hustota <sup>239</sup>Pu je v nástroji AKIKO určen nominální spektrální index a následně je uložen do aplikační knihovny, odkud si jej při každém výpočtu načte makrokód ANDREA. Druhou funkcí metody evaluate\_spectral\_index je výpočet integrálů spektrálního indexu pro všechny výpočty vyhoření provedené mikrokódem, které slouží pro postihnutí spektrální historie vyhořívání. Znalost integrálů spektrálního indexu je potřebná v parametrizačním modulu nástroje AKIKO, neboť bez nich by nebylo možné určit koeficienty parametrizační funkce, které mají význam uvedený v rovnici (1.14).

Nyní lze již přistoupit k popisu fungování metody evaluate\_spectral\_index v nástroji AKIKO. Nejprve jsou na základě homogenizovaných grupových konstant, které si AKIKO načte z výstupních souborů mikrokódu, spočítány spektrální indexy pro všechny výpočty, které byly provedeny mikrokódem a mají být použity pro charakterizovaní spektrální historie vyhořívání. Určení spektrálních indexů je provedeno pro všechny kroky vyhoření, které byly ve výpočtu mikrokódu definovány. Následuje výpočet integrálů spektrálního indexu, které jsou použity pro určení koeficientů parametrizačních funkcí. Je zcela zřejmé, že homogenizované grupové konstanty jsou pro evoluční úlohy ve výstupních souborech mikrokódů ukládány v závislosti na vyhoření, a tedy nelze použít symbolickou definici integrálu spektrálního indexu se spojitou závislostí na vyhoření uvedenou ve vztahu (1.8). Z tohoto důvodu je nezbytné zadefinovat integrál spektrálního indexu během jednoho vyhořívacího kroku lze psát

$$SH_{i+1} = \frac{1}{B_{i+1}} \sum_{j=0}^{i} \frac{SI_{j+1}^{\text{alt}}}{SI_{j+1}^{\text{nom}}} \Delta B_j,$$
(4.1)

rekurzivně lze výpočet integrálu spektrálního indexu zapsat ve tvaru

$$SH_{i+1} = \frac{1}{B_{i+1}} \left( SH_i + \frac{SI_{i+1}^{\text{alt}}}{SI_{i+1}^{\text{nom}}} \Delta B_i \right),$$
(4.2)

kde

- *i* značí daný krok vyhoření, přičemž platí  $i = 0, \dots, n-1$ ,
- *n* je celkový počet kroků vyhoření,
- $B_{i+1}$  představuje celkové vyhoření v kroku i + 1,
- $SI_{j+1}^{\text{alt}}$ , resp.  $SI_{j+1}^{\text{nom}}$  označuje spektrální index pro výpočet vyhoření se změněnými, resp. nominálními provozní parametry v kroku j + 1,
- $\Delta B_j$  značí *j*-tý rozdíl vyhoření mezi dvěma po sobě jdoucími kroky, pro který platí

$$\Delta B_j = B_{j+1} - B_j, \tag{4.3}$$

 navíc platí, že SH<sub>0</sub> = 1, tj. integrál spektrálního indexu je roven jedné v nultém kroku výpočtu, což odpovídá tomu, že spektrální indexy pro nominální a změněnou provozní historii jsou si rovny.

Díky výše uvedené formulaci integrálu spektrálního indexu nenastane dělení nulou v nultém kroku výpočtu, ve kterém je vyhoření rovno nule. Z tvaru integrálu spektrálního indexu (4.1) je také zřejmé, že musí platit

$$B_{i+1} = \sum_{j=0}^{i} \Delta B_j, \tag{4.4}$$

tj. celkové vyhoření v kroku i + 1 je dáno součtem nultého až *i*-tého rozdílů mezi jednotlivými kroky vyhoření. Z rovnice (4.1) vyplývá, že vliv spektrální historie vyhořívání se v integrálu spektrálního indexu akumuluje a navíc středuje přes celkové dosažené vyhoření v daném kroku vyhoření. Integrály spektrálního indexu vypočítáné pomocí výše uvedeného postupu si následně převezme parametrizační modul v AKIKu a určí koeficienty parametrizačních funkcí spektrální historie vyhořívání.

Doposud nebyl zmíněn tvar spektrálního indexu, který byl v předchozích výpočtech používán. Důvodem bylo, že prozatím bude předpokládán obecný tvar spektrálního indexu a volba jeho tvaru bude provedena až v podkapitole 4.3. První krok nutný k implementaci metody spektrálního indexu formulovaný na začátku kapitoly byl proveden a nyní je možné se přesunout k popisu implementace metody spektrálního indexu v samotném makrokódu ANDREA.

## 4.2 Postup implementace v programu ANDREA

Před začátkem popisu implementace je vhodné poznamenat, že metoda spektrálního indexu byla pro zohlednění spektrální historie vyhořívání v makrokódu ANDREA uvažována pouze jako alternativa k metodě indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hutoty <sup>239</sup>Pu. Ve srovnání s ní taktéž nebyla metoda spektrálního indexu testována ve výzkumném úkolu [1], a i přestože je podle literatury uvedené v podkapitole 1.2.2 široce používanou, nebylo možné předjímat vhodnost jejího použití v programu ANDREA. Z tohoto důvodu byl výhodně využit modul programu ANDREA starající se o výpočet atomových hustot aktinoidů popsaný v podkaptiole 3.1, do kterého byl implementován výpočet integrálu spektrálního indexu. Díky tomu se snížila obtížnost implementace uvedené metody a i v případě získání neuspokojivých výsledků, by nebylo vynaloženo mnoho úsilí na její implementaci.

Nejprve je potřeba získat nominální spektrální index z aplikační knihovny, který musí být načten ve dvojí datové struktuře, resp. ve dvou krocích vyhoření, aby mohl být vážen na aktuální hodnotu vyhoření. K tomu jsou využity standardní procedury, které se využívají k načítání ostatních veličin z aplikační knihovny. Následně se vypočítá lokální spektrální index pro daný stav a příslušný nód, k čemuž jsou využita rekonstruovaná grupová data, která jsou připravena pro příslušný krok vyhoření. Po načtení, resp. výpočtu spektrálních indexů lze přistoupit k výpočtu integrálu spektrálního indexu, pomocí kterého je v metodě spektrálního indexu parametrizována spektrální historie vyhořívání. Určení integrálu spektrálního indexu je provedeno v modulu pro výpočet atomových hustot aktinoidů, ve kterém je popsán model vyhořívání řetězce aktinoidů. Je důležité

poznamenat, že do modulu pro výpočet atomových hustot aktinoidů vstupuje časový rozdíl  $\Delta t$  dvou po sobě jdoucích kroků vyhoření *i* a *i* + 1. Ovšem v integrálu spektrálního indexu figurují rozdíly vyhoření  $\Delta B$ , které lze získat pomocí následujícího vztahu

$$\Delta B = P \Delta t, \tag{4.5}$$

kde *P* je nodální výkon pro příslušný krok vyhoření v jednotkách W/g. Pro vyhoření  $B + \Delta B$  se integrál spektrálního indexu určí analogicky jako v nástroji AKIKO, tj.

$$SH\left(B+\Delta B\right) = \frac{1}{B+\Delta B} \left[SH\left(B\right) + \frac{SI^{\text{alt}}\left(B+\Delta B\right)}{SI^{\text{nom}}\left(B+\Delta B\right)}\Delta B\right],\tag{4.6}$$

kde

- SH (B) je integrál spektrálního indexu určený v předcházejícím kroku výpočtu při vyhoření B,
- $\frac{SI^{\text{alt}}(B + \Delta B)}{SI^{\text{nom}}(B + \Delta B)}$  značí podíl nominálního a změněného spektrálního indexu pro vyhoření  $B + \Delta B$ .

Je dobré podotknout, že další důvod pro implementaci výpočtu integrálu spektrálního indexu do modulu pro výpočet atomových hustot je, že nebude třeba řešit případy s překládkami, popřípadě s načítaním \* .dump souborů, neboť všechno potřebné je již v uvedeném modulu implementováno. To znamená, že integrál spektrálního indexu je pouze další veličinou, stejně jako atomové hustoty aktinoidů, která je v tomto modulu počítána. Následně vstupují integrály spektrálního indexu určené pomocí výše popsaného postupu jako proměnná spektrální historie vyhořívání do rekonstrukce grupových konstant, jejíž popis vytváření spolu s výběrem parametrizačních funkcí určené pro metodu spektrálního indexu bude popsán v podkapitole 4.4.

#### 4.3 Volba tvaru spektrálního indexu

Nyní lze již konečně přistoupit k výběru tvaru spektrální indexu, který byl v doposud provedeném popisu implementací předpokládán v obecném tvaru. V podkapitole 1.2.2 byly uvedeny možné tvary spektrálního indexu, které prezentuje odborná literatura. Spektrální index bude vybrán pouze z tvarů (1.9) a (1.10), a to především kvůli tomu, že pro spektrální index (1.11) jsou koeficienty parametrizační funkce zohledňující spektrální historii vyhořívání určovány poměrně komplikovaně. Koeficienty jsou samostatně počítány pro jednotlivé výpočty se změněnými provozními parametry, které způsobují změnu spektrální historie vyhořívání. Celkový koeficient parametrizační funkce zohledňují spektrální historii vyhořívání je pak i funkcí jednotlivých termofyzikálních parametrů. Jelikož je metoda spektrálního indexu uvažována pouze jako alternativa k metodě využívající atomovou hustotu <sup>239</sup>Pu, nebude rozvíjena detailně s poměrně komplikovanou parametrizační funkcí pro spektrální index ve tvaru (1.11).

Výběr tvaru spektrálního indexu bude proveden na základě vynesení závislostí relativní změny makroskopických účinných průřezů  $\Sigma_{r,g}$  na proměnné spektrální historie vyhořívání  $\delta SH$  definované ve vztahu (1.13) pro výpočty vyhoření na nenominálních parametrech, které shrnuje tabulka 3.3. V proměnné  $\delta SH$  bude počítán integrál SH, ve kterém budou použity definice spektrálního indexu (1.9) a (1.10). Následně budou pomocí
metody nejmenších čtverců určena podobnostní čísla spektrální historie vyhořívání, tj. koeficienty parametrizační funkce pro metodu spektrálního indexu. Podobnostní čísla budou určována samostatně pro záporné a kladné změny proměnné  $\delta SH$  proložením bodů ( $\Sigma_{r,g}$ ;  $\delta SH$ ). S takto získanými koeficienty budou sestrojeny parametrizační funkce s lineární závislostí na proměnné  $\delta SH$  pro oba typy spektrálních indexů. Tvar spektrálního indexu bude zvolen podle hodnot relativních odchylek analyzovaných bodů od parametrizační funkce s podobnostními čísly určenými na základě příslušného tvaru spektrálního indexu.

Provedení výše popsaného zhodnocení pro volbu spektrálního indexu je zobrazeno na obrázku 4.1, na kterém jsou vykresleny závislosti změn vybraných makroskopických účinných průřezů na proměnné  $\delta SH$  pro palivový soubor a47D12 při uvažovaném vyhoření 30 GWd/t<sub>U</sub>. Podobně jako v podkapitole 3.3.2 byly uvažovány výpočty, ve kterých bylo vyhoříváno se změněnými hodnotami koncentrace kyseliny borité, výkonu a hustoty moderátoru ve srovnání s jejich nominálními hodnotami. Na obrázcích 4.1a, 4.1c a 4.1e jsou vykresleny závislosti  $\Sigma_{r,g}$  na proměnné  $\delta SH$  spolu s parametrizačními funkcemi, ve kterých byl použit tvar spektrálního indexu (1.9). To jest spektrální index získaný pouze na základě podílu hustot toku neutronů v rychlé a tepelné grupě. Obrázky 4.1b, 4.1d a 4.1f zobrazují analyzované závislosti, ve kterých je použit tvar spektrálního indexu (1.10), tj. s korekcí na pravděpodobnost rezonanční absorpce. U všech analyzovaných makroskopických účinných průřezů na obrázku 4.1 lze pozorovat, že relativní odchylky jednotlivých bodů ( $\Sigma_{r,g}; \delta SH$ ) od parametrizační funkce v daném bodě dosahují nižších hodnot pro spektrální index ve tvaru (1.10). Mezi oběma typy spektrálních indexů je možné pozorovat největší rozdíl na analyzovaných závislostech pro výpočty se změněnými hodnotami výkonu, které spektrální index ve tvaru (1.9) postihuje hůře. Takový výsledek byl očekávatelný, neboť jej stejným způsobem prezentoval článek [12]. Ovšem bylo nezbytné provést zhodnocení na příslušných výpočtech a potvrdit závěry uvedeného článku. Na základě výše provedené analýzy bude v makrokódu ANDREA v proměnné  $\delta SH$  uvažován spektrální index ve tvaru (1.10).

### 4.4 Parametrizační modul a metodika stanovení podobnostních čísel spektrální historie vyhořívání

Pro správné fungování metody spektrálního indexu a jeho integrálu je potřebné doplnit rekonstrukci grupových konstant o členy zohledňující spektrální historii vyhořívání. Parametrizační modul pro spektrální historii vyhořívání byl již implementován pro metodu indikace spektrální historie vyhořívání pomocí <sup>239</sup>Pu a popsán v podkapitole 3.3. Stejný modul bude možné využít i pro metodu spektrálního indexu, neboť byl implementován pro obecný provozní parametr, jehož podoba se nastavovala až v parametrizačním manifestu. To znamená, že stačí doplnit relace pro čtení spektrálního indexu, resp. koeficientů parametrizačních funkcí z aplikační knihovny a definovat proměnné pro metaprogramovací nástroj ANASTAZIE, které vystupující v rekonstrukčním schématu grupových konstant v členech zohledňujích spektrální historii vyhořívání. Jejich tvar tedy musí odpovídat proměnným, které jsou použity v procedurách programu AN-DREA popsanými v podkapitole 4.2, které jsou nezbytné pro fungování metody spektrálního indexu.

Předtím, nežli bude moci být pomocí nástroje ANASTAZIE vytvořeno parametrizační schéma se členy, ve kterých figuruje spektrální index, je nezbytné vybrat vhodný tvar



Obrázek 4.1: Výběr tvaru spektrálního indexu na příkladu palivového souboru a<br/>47D12 při vyhoření 30 GWd/t $_{\rm U}$ 

parametrizačních funkcí. Podkapitola 1.2.2 uváděla, že standardně používanými jsou funkce s lineární nebo kvadratickou závislostí. Při výběru tvaru spektrálního indexu byla použita lineární funkce s relativní proměnnou  $\delta SH$ , která bude uplatněna i v makrokódu ANDREA pro metodu spektrálního indexu v parametrizaci makroskopických účinných průřezů reakce r pro grupu g ve tvaru

$$h_{\rm r,g} \left( B, \delta SH \right) = \begin{cases} \alpha_{\rm r,g}^{-} \, \delta SH & \text{pro} \quad \delta SH \leq 0 \\ \\ \alpha_{\rm r,g}^{+} \, \delta SH & \text{pro} \quad \delta SH > 0, \end{cases}$$
(4.7)

kde

•  $\delta SH$  je relativní proměnná spektrální historie vyhořívání v metodě spektrálního indexu, v níž figuruje integrál spektrálního indexu počítaný podle vzahu (4.6). Platí pro ni již dříve uvedený vztah

$$\delta SH = SH - 1, \tag{4.8}$$

•  $\alpha_{r,g}^-$ , resp.  $\alpha_{r,g}^+$  jsou podobnostní čísla spektrální historie vyhořívání pro zápornou, resp. kladnou změnu proměnné  $\delta SH$ .

Je zřejmé, že pro definování parametrizační funkce (4.7) v korelačním zdojovém souboru bude moci být využita obecná třída RelativeBiExponentCorrelation, jejíž proces fungování byl podrobně popsán v podkapitole 3.3.1. To znamená, že pro metodu spektrálního indexu bude využita třída RelativeBiLinearCorrelation, která dědí veškeré vlastnosti třídy RelativeBiExponentCorrelation, a pouze je definován exponent odpovídající lineární relativní proměnné, tj. e = 1. Použití uvedené třídy pro proměnnou  $\delta SH$  je možné díky tomu, že integrál spektrálního indexu pro nominální provozní historii je vždy roven jedné. Pak obecná proměnná  $\delta p^e$  definovaná v podkapitole 3.3.1 pro integrál spektrálního indexu přechází na tvar (4.8). Podrobné vysvětlení bylo provedeno v podkapitole 1.2.2.

Popis fungování obecné třídy pro spektrální historii vyhořívání určené pro parametrizační modul byl podrobně popsán v podkapitole 3.3.1, a tedy není nutné jej zde pro třídu RelativeBiLinearCorrelation opakovat. Pouze je vhodné poznamenat, že parametrizační modul si převezme hodnoty integrálu spektrálního indexu vypočítané pomocí metody evaluate\_spectral\_index a následně určí podobnostní čísla  $\alpha_{r,g}^-$ , resp.  $\alpha_{r,g}^+$  pomocí metody nejmenších čtverců, která jsou zaznamenána do aplikační knihovny v závislosti na vyhoření a typu palivového souboru. O generování zdrojových souborů pro rekonstrukci grupových konstant a správné čtení dat z aplikační knihovny se postará nástroj ANASTAZIE, pro který jsou všechny nezbytné informace obsaženy taktéž ve třídě RelativeBiLinearCorrelation.

Nyní zbývá zmínit, jakým způsobem se nastaví metoda spektrálního indexu pro zohlednění spektrální historie vyhořívání v parametrizaci grupových konstant v makrokódu ANDREA. Přenastavení metody je provedeno pomocí konstanty PARAMETRIZATI-ON v parametrizačním manifestu, jehož výňatek je vypsán ve zdrojovém kódu 4.1. Pro metodu spektrálního indexu a jeho integrálu byl zaveden symbol : spectral\_integral, který se přiřadí ke klíči : parametrized\_by, a díky tomu bude uvedená metoda použita v rekonstrukci grupových konstant. Nastavení parametrizačních funkcí pro příslušné grupové konstanty se provede pomocí klíče :correlations, kam se přiřadí příslušné korelační třídy, tj. v případě metody spektrálního indexu třída RelativeBiLinear-Correlation.

Pro aplikování metody spektrálního indexu do parametrizačního schématu makrokódu ANDREA je nutné spustit nástroj ANASTAZIE, který vytvoří všechny nezbytné zdrojové soubory pro správné fungování rekonstrukce grupových konstant. Následně je potřebné zkompilovat program ANDREA a vytvořit pomocí nástroje AKIKO novou aplikační knihovnu, ve které budou uloženy spektrální indexy pro nominální výpočet a koeficienty parametrizačních funkcí pro metodu spektrálního indexu. S nově vytvořenou knihovnou lze již spustit výpočet makrokódu ANDREA, ve kterém je uvažována parametrizace zohledňující spektrální historii vyhořívání pomocí metody spektrálního indexu a jeho integrálu.

```
module Manifest
```

```
PARAMETRIZATION = {
 ′ * ′ => [
    . . .
    {
     parametrized_by: :spectral_integral,
     parameter: : history,
     correlations: ({
        . . .
             => RelativeBiLinearCorrelation,
        :d
       :ss => RelativeBiLinearCorrelation,
        :xsa => RelativeBiLinearCorrelation,
        :nf => RelativeBiLinearCorrelation,
        :kf
             => RelativeBiLinearCorrelation,
        :sf => RelativeBiLinearCorrelation,
       })
     },
    . . .
  ]
}
```

#### end

Zdrojový kód 4.1: Parametrizační manifest s metodou spektrálního indexu a jeho integrálu

Poslední krok, který je nutné provést pro metodu spektrálního indexu, je výběr výpočtů vyhoření na nenominálních provozních parametrech, které budou použity pro určení podobnostních čísel spektrální historie vyhořívání. V ideálním scénáři by opět bylo vhodné, aby pro určení podobnostních čísel mohl být použit pouze malý počet výpočtů vyhoření se změněnými provozními parametry. Metodika pro stanovení podobnostních čísel spektrální historie vyhořívání pro metodu spektrálního indexu bude provedena analogicky jako v podkapitole 3.3.2. Nejprve budou podobnostní čísla vypočítána na základě velkého počtu výpočtů vyhoření, které byly uvažovány v modelových scénářích vyhoření v tabulce 3.3 a budou označovány jako detailní historie. V druhém kroku budou podobnostní čísla získány pouze pomocí nominálního výpočtu vyhoření a dvou vybraných výpočtů vyhoření, v nichž bude uvažována jedna kladná a záporná změna proměnné  $\delta SH$ . Pro ně je zavedeno označení vybrané historie.

Na obrázku 4.2 je provedeno porovnání parametrizačních funkcí sestrojených s podobnostními čísly určenými na základě detailních a vybraných provozních historií. Analyzovány byly makroskopické účinné průřezy pro štěpení v rychlé a tepelné grupě, resp.

0.01

0.008

0.006

0.004

0.002

-0.002

-0.004

-0.006

-0.008

-0.03 -0.02 -0.01 0 0.01 0.02 0.03 0.04

0

50



(a) Parametrizační funkce pro sigFg1 sestrojená z detailních historií

0.03









Nominální historie Parametrizační funkce Relativní odchylky Změny koncentrace H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub> Změny výkonu Změny hustoty moderátoru (b) Parametrizační funkce pro sigFg1 sestrojená z vybraných historií

δSH (-)

40

30

20

10

٥

-10

-20

-30

-40

pdc



(d) Parametrizační funkce pro sigFg2 sestrojená z vybraných historií





Obrázek 4.2: Porovnání parametrizačních funkcí sestrojených na základě detailních a vybraných provozních historií v metodě spektrálního indexu pro vybrané makroskopické účinné průřezy na příkladu PS a47D12 při vyhoření 30 GWd/t<sub>U</sub>

(%)

i odchylka

absorpci v tepelné grupě pro palivový soubor a47D12 při vyhoření 30 GWd/t<sub>U</sub>. Podobně jako v podkapitole 3.3.2 i zde byly z modelových scénářů vyhořívání vybrány výpočty vyhoření se změnami provozních parametrů tak, aby jejich obory hodnot přibližně odpovídaly, a tedy všechny výpočty měly při porovnání přibližně stejnou váhu. Obrázky 4.2a, 4.2c a 4.2e zobrazují body ( $\Sigma_{r,g}$ ;  $\delta SH$ ) pro detailní provozní historie spolu s parametrizační funkcí, jejíž koeficienty byly vypočítány pomocí metody nejmenších čtverců samostatně pro zápornou a kladnou změnu proměnné  $\delta SH$ . Ve srovnání s tím jsou na obrázcích 4.2b, 4.2d a 4.2f zobrazeny analyzované závislosti spolu s parametrizační funkcí, ve které byla podobnostní čísla určena na základě vybraných provozních historií. Konkrétně zde byly použity nenominální výpočty, ve kterých bylo vyhoříváno se změněnou koncentrací kyseliny borité, tj. b10 a b60.

Na obrázku 4.2 jsou taktéž vykresleny relativní odchylky jednotlivých bodů od parametrizační funkce. Odtud je zřejmé, že parametrizační funkce sestrojené na základě detailních i vybraných provozních historií vykazují velice podobné hodnoty relativních odchylek pro všechny analyzované makroskopické účinné průřezy. Je ovšem nutné poznamenat, že pro vybrané historie jsou získány podobné hodnoty relativních odchylek jen díky tomu, že pro stanovení podobnostního čísla byly vybrány provozní historie se změnou koncentrace kyseliny borité, které nejlépe vystihují proložení detailních historií pomocí metody nejmenších čtverců. Je důležité podotknout, že pro metodu spektrálního indexu není zcela splněn následující předpoklad uvedený například v článku [6], tj. jakákoli změna makroskopického účinného průřezu způsobená změnou energetického spektra neutronů je nezávislá na jevu, který během vyhořívání vyvolal změnu spektra. Bohužel to je vlastnost uvedené metody, díky které nebude moci být zcela přesně postihnuta spektrální historie vyhořívání pro libovolné provozní historie. Z obrázku 4.2 je patrné, že pro určení podobnostních čísel mohou být jako nejlepší odhad použity vybrané výpočty, ve kterých je vyhoříváno se změněnou koncentrací kyseliny borité. Díky tomu budou podobnostní čísla určená na základě vybraných provozních historií velice dobře odpovídat výpočtu, ve kterém byly k jejich určení použity detailní provozní historie.

### Kapitola 5

### Verifikace implementovaných metod

Verifikaci metod zohledňujících spektrální historii vyhořívání, jejichž implementace byla popsána v kapitolách 3 a 4, je nezbytné provést, neboť do makrokódu ANDREA i nástroje AKIKO byla implementována řada modulů a je nutné ověřit, zdali všechny fungují dle očekávání. Taktéž je důležité zhodnotit, zdali se zpřesní rekonstrukce grupových konstant v makrokódu ANDREA díky zahrnutí vlivu spektrální historie vyhořívání.

Ověření implementovaných metod v makrokódu ANDREA bude provedeno pomocí přepočtu vybraných modelových scénářů vyhořívání, jejichž výsledky jsou porovnatelné s referenčním řešením provedeným pomocí mikrokódu HELIOS. Pro tyto účely byly pro makrokód ANDREA definovány modely obsahující samostatný palivový soubor paliva TVSA-T v nekonečném prostředí, ve kterém jsou všechny uvažované nódy tvořeny stejným materiálem. Hodnoty geometrických i provozních parametrů byly voleny tak, aby odpovídaly referenčnímu výpočtu v kódu HELIOS. Ve výpočtech mikrokódů, které slouží pro přípravu aplikačních knihoven, se standardně uvažuje korekce na únik neutronů korespondující s podmínkami v reaktoru, které odpovídají vyhořívání při kritickém spektru neutronů. V programu ANDREA lze nastavit iterace na kritický geometrický faktor (kritický buckling), při kterém je hledána taková hodnota geometrického faktoru, jež odpovídá kritickému stavu. Díky tomu je při výpočtech v nekonečném prostředí provedených makrokódem ANDREA možné postihnut únik neutronů a získané výsledky lze porovnávat s mikrokódem HELIOS, ve kterém je nastavena již zmíněná korekce na kritické spektrum neutronů. Taktéž je důležité poznamenat, že pro všechny uvažované verze programu ANDREA byly vygenerovány pomocí nástroje AKIKO aplikační knihovny, které navíc obsahovaly všechny dodatečné záznamy potřebné pro správné fungování metod zohledňujících spektrální historii vyhořívání.

V dalším textu bude pro provedené výpočty použito značení, které vyjadřuje následující

- HELIOS referenční řešení provedené pomocí mikrokódu HELIOS,
- ANDREA standardní verze programu ANDREA bez zahrnutí vlivu spektrální historie vyhořívání,
- ANDREA-<sup>239</sup>Pu program ANDREA s implementovanou metodou indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu,
- ANDREA-SI program ANDREA s implementovanou metodou spektrálního indexu a jeho integrálu.

#### 5.1 Zhodnocení na vybraných výpočtech vyhoření

Nyní lze již přejít k samotné verifikaci, která bude v prvním kroku provedena pro vybrané výpočty vyhoření, ve kterých bylo vyhoříváno se změněnými provozními parametry vůči jejich nominálním hodnotám, které uvádí tabulka 1. Ve všech níže analyzovaných případech byly uvažovány změny koncentrace kyseliny borité, výkonu a hustoty moderátoru. Pro verifikaci implementovaných metod byly vybrány makroskopické účinné průřezy pro štěpení v rychlé a tepelné grupě, resp. absorpci v tepelné grupě. Ve všech případech budou navíc verze programu ANDREA s implementovanými metodami spektrální historie vyhořívání porovnány s verzí programu ANDREA, ve které není zohledněna spektrální historie vyhořívání. Díky tomu bude možné porovnat vliv implementovaných metod na přesnost rekonstrukce grupových konstant ve srovnání se standardní verzí makrokódu ANDREA.

Na obrázku 5.1 jsou zobrazeny průběhy rekonstruovaného makroskopického účinného průřezu pro absorpci v tepelné grupě pro jednotlivé verze makrokódu ANDREA spolu s referenčím výpočtem z HELIOSu v závislosti na vyhoření. Analyzovány byly všechny výše uvedené změny provozních parametrů pro palivový soubor a47D18. Obrázky 5.1a, 5.1c a 5.1e ukazují závislost makroskopického účinného průřezu na vyhoření, zatímco na obrázcích 5.1b, 5.1d a 5.1f jsou vykresleny relativní odchylky jednotlivých verzí programu ANDREA od referenčního řešení provedeného mikrokódem HELIOS v závislosti na vyhoření. Odtud je patrné, že obě implementované metody zohledňující spektrální historii vyhořívání přináší zpřesnění parametrizace pro všechny analyzované provozní historie ve srovnání se standardní verzí programu ANDREA. Z obrázku 5.1b je zřejmé, že obě implementované metody velice výrazně zpřesní rekonstrukci makroskopického účinného průřezu pro absorpci v tepelné grupě pro výpočty, ve kterých bylo vyhoříváno se změněnou koncentrací kyseliny borité, ve srovnání s tím, kdy v parametrizaci není zahrnuta spektrální historie vyhořívání. Metoda využívající <sup>239</sup>Pu jakožto indikátor spektrální historie poskytuje výrazné zpřesnění parametrizace pro všechny analyzované výpočty vyhoření se změnami provozních parametrů bez ohledu na to, že pro určení koeficientů parametrizačních funkcí byl použit nominální výpočet a výpočty vyhoření s jednou zápornou a kladnou změnou hustoty moderátoru ve srovnání s jejich nominální hodnotou. Zatímco v případě metody spektrálního indexu lze z obrázků 5.1d a 5.1f pozorovat, že zpřesnění parametrizace není příliš výrazné. Je to způsobeno tím, že v metodě spektrálního indexu nelze pomocí proměnné  $\delta SH$  přesně vystihnout libovolnou změnu provozního parametru. Díky tomu, že pro určení koeficientů parametrizačních funkcí byly použity výpočty vyhoření se změnou koncentrace kyseliny borité, nelze přesně vystihnout spektrální historii vyhořívání pro výpočty se změnou výkonu a hustoty moderátoru. Je vhodné vysvětlit, že pro verzi programu ANDREA využívající <sup>239</sup>Pu lze pro všechny analyzované výpočty na počátku vyhořívání pozorovat skok v hodnotách relativních odchylek. Ten je zapříčiněn tím, že se parametrizační člen s proměnnou  $\delta \sqrt{N_{\rm Pu}}$  uplatňuje až od stanovené hodnoty nominální atomové hustoty <sup>239</sup>Pu, která byla určena v podkapitole 3.3.2.

Na obrázcích 5.2 a 5.3 jsou zhodnoceny výpočty provedené uvažovanými verzemi programu ANDREA pro makroskopické účinné průřezy pro štěpení v rychlé, resp. v tepelné grupě. I v případě těchto grupových konstant lze pro všechny analyzované provozní historie pozorovat zpřesnění parametrizace, pokud je v ní uvažován člen zohledňující spektrální historii vyhořívání. Z obrázků 5.2b, 5.2d a 5.2f, resp. 5.3b, 5.3d a 5.3f je zřejmé, že pro verze programu ANDREA s implementovanými metodami zohledňují-



Obrázek 5.1: Porovnání přesnosti rekonstrukce sigABSg2 v uvažovaných verzích programu ANDREA s referenčními hodnotami z mikrokódu HELIOS pro vybrané výpočty vyhoření se změněnými provozními parametry na příkladu PS a47D18



Obrázek 5.2: Porovnání přesnosti rekonstrukce sigFg1 v uvažovaných verzích programu ANDREA s referenčními hodnotami z mikrokódu HELIOS pro vybrané výpočty vyhoření se změněnými provozními parametry na příkladu PS a47D18



Obrázek 5.3: Porovnání přesnosti rekonstrukce sigFg2 v uvažovaných verzích programu ANDREA s referenčními hodnotami z mikrokódu HELIOS pro vybrané výpočty vyhoření se změněnými provozními parametry na příkladu PS a47D18

cími spektrální historii vyhořívání lze získat přesnější hodnoty rekonstruovaných makroskopických účinných průřezů ve srovnání se standardní verzí makrokódu ANDREA. Velmi výrazného zpřesnění parametrizace je dosaženo pro verzi makrokódu ANDREA s<sup>239</sup>Pu, která navíc funguje univerzálně bez ohledu na to, pomocí jakých výpočtů vyhoření se změněnými provozními parametry byly připraveny koeficienty parametrizační funkce zohledňující spektrální historii vyhořívání. Ve srovnání s tím verze programu ANDREA s metodou spektrálního indexu přináší menší zpřesnění pro provozní historie se změnou výkonu a hustoty moderátoru, což je opět způsobeno tím, že proměnná  $\delta SH$  nedokáže zcela přesně postihnout spektrální historii pro libovolné změny provozních parametrů.

#### 5.2 Komplexní zhodnocení na modelových scénářích vyhořívání

V druhém kroku budou metody zohledňující spektrální historii vyhořívání, které byly implementovány do makrokódu ANDREA, verifikovány na modelových scénářích vyhořívání pro palivo TVSA-T, které vypisuje tabulka 3.3. Postup verifikace je takový, že pro všechny palivové soubory uvedené v tabulce 3.3 jsou provedeny výpočty vyhoření zahrnující všechny změny uvedených provozních parametrů. Následuje porovnání rekonstruovaných grupových konstant získaných pomocí jednotlivých verzí programu ANDREA s referenčními hodnotami vypočítanými mikrokódem HELIOS. V každém kroku vyhoření jsou stanoveny relativní odchylky ANDREy od HELIOSu, které jsou následně zaznamenány do histogramu. Díky tomu se získá rozdělení relativních odchylek pro všechny uvažované verze programu ANDREA a bude možné provést verifikaci na větším množství dat.

Obrázek 5.4 zobrazuje histogramy, ve kterých jsou zaznamenány četnosti relativních odchylek získané na základě porovnání všech kroků vyhoření modelových scénářů mezi makrokódem ANDREA a mikrokódem HELIOS. Na obrázku 5.4 je využito značení makroskopických účinných průřezů

- sigABSg1, resp. sigABSg2 pro absorpci v rychlé, resp. tepelné grupě,
- FNPg1, resp. FNPg2 pro produkci neutronů ze štěpení v rychlé, resp. tepelné grupě,
- fisEg1, resp. fisEg2 pro energii uvolněno při štěpení v rychlé, resp. tepelné grupě.

Pro všechny výše uvedené makroskopické účinné průřezy dosahuje nejvyšších četností kolem relativní odchylky 0,0 % verze programu ANDREA s metodou využívající indikátor <sup>239</sup>Pu. Taktéž větší počet četností relativních odchylek programu ANDREA s metodou spektrálního indexu se nachází blíže hodnotě 0,0 % ve srovnání se standardní verzí programu ANDREA. Z obrázku 5.4a lze pozorovat, že pro makroskopický účinný průřez pro absorpci v rychlé grupě se pro většinu výpočtů relativní odchylka zredukuje přibližně do intervalu -0,1 % až 0,1 % pro verzi ANDREA-<sup>239</sup>Pu a do intervalu -0,2 % až 0,1 % pro verzi ANDREA-SI. Ve srovnání s tím pro standardní verzi programu ANDREA dosahuje většina četností relativních odchylek přibližně intervalu od -0,5 % do 0,3 %. V případě ostatních analyzovaných makroskopických účinných průřezů zobrazených na obrázcích 5.4b až 5.4f je možné sledovat velice podobné rozdělení četností relativních odchylek. Při použití metody využívající indikátor <sup>239</sup>Pu v makrokódu ANDREA se zredukuje většina četností relativních odchylek rekonstruovaných makroskopických účinných většina četností relativních odchylek rekonstruovaných makroskopických účinných makroskopických účinných nakroskopických účinných vytě so statních odchylek rekonstruovaných makroskopických účinných většina četností relativních odchylek rekonstruovaných makroskopických účinných



Obrázek 5.4: Přesnost rekonstrukce vybraných grupových konstant v uvažovaných verzích programu ANDREA vzhledem k referenčním výpočtům provedených v mikrokódu HELIOS pro všechny modelové scénáře vyhořívání

průřezů vůči referenčnímu řešení do intervalu přibližně -0,5 % až 0,5 %. V případě verze programu ANDREA se spektrálním indexem lze pozorovat, že většina četností relativních odchylek se nachází v intervalu přibližně od -1,5 % do 1,5 %. Za zmínku stojí, že pro standardní verzi makrokódu ANDREA většina četností relativních odchylek leží v intervalu přibližně od -3,0 % do 3,0 %, kde navíc poslední zobrazený bin zahrnuje veškeré četnosti relativních odchylek, jejichž hodnoty převyšovaly vykreslený rozsah. Odtud je zřejmé, že pomocí implementovaných metod, které zohledňují spektrální historii vyhořívání, lze snížit nepřesnosti při rekonstrukci grupových konstant vůči jejich referenčním hodnotám.

Na základě výše provedeného zhodnocení lze konstatovat, že implementované metody zohledňující spektrální historii vyhořívání použité v makrokódu ANDREA byly verifikovány. Podle očekávání se ukázalo, že při zahrnutí spektrální historie vyhořívání do rekonstrukce grupových konstant je možné zpřesnit jejich hodnoty vůči referenčnímu řešení. Z provedeného zhodnocení taktéž vyplynula očekávaná skutečnost, že spektrální historii vyhořívání lze obecně lépe vystihnout pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu ve srovnání se spektrálním indexem, resp. jeho integrálem, který nefunguje zcela univerzálně pro libovolný výpočet vyhoření se změněnými provozními parametry. Poslední zde uvedenou poznámkou je, že až validace implementovaných metod na provozních datech ukáže negativní, neutrální, či pozitivní vliv na přesnost celozónových výpočtů prováděných makrokódem ANDREA.

### Kapitola 6

## Validace implementovaných metod na provozních datech

Poslední kapitola se zabývá celozónovými výpočty aktivních zón, které budou provedeny pomocí makrokódu ANDREA s implementovanými metodami zahrnující spektrální historii vyhořívání. Získané výsledky celozónových výpočtů budou validovány na provozních datech, díky čemuž bude možné pozorovat přesnost predikce neutronověfyzikálních charakteristik pomocí programu ANDREA. Pro validaci byla vybrána devátá až čtrnáctá kampaň prvního bloku JE Temelín se zavezeným palivem TVSA-T, pro něž je v následujícím textu zavedeno značení U1C09 až U1C14.

Zhodnocení celozónových výpočtů bylo provedeno pomocí validačního nástroje AD-RIENA, který nejprve připraví vstupní soubory pro makrokód ANDREA, v nichž jednotlivé kroky výpočtu a provozní parametry přesně korespondují s odečtem provozních dat. Díky tomu je skutečně možné provést porovnání mezi predikcí programu AN-DREA a provozními daty. Následně jsou vytvořeny aplikační knihovny pro uvažované verze programu ANDREA, které obsahují všechny nezbytné záznamy potřebné pro výpočet. Obsah aplikační knihovny byl stručně popsán v podkapitole 2.2, do které byly navíc pro verze makrokódu ANDREA zahrnující spektrální historii vyhořívání doplněny všechny potřebné záznamy uvedené v kapitolách 3 a 4. Nástroj ADRIENA vygeneruje výstupní soubor, který obsahuje značný počet hodnotících metrik sloužících pro validaci programu ANDREA na provozních datech. Navíc do porovnání bude zahrnuta i standardní verze programu ANDREA, která je používána pro produkční výpočty. Díky tomu bude možné pozorovat, jaký vliv má zahrnutí spektrální historie vyhořívání na celozónové výpočty provedené makrokódem ANDREA.

#### 6.1 Definice hodnotících metrik

Úplná validace programu ANDREA představuje velice rozsáhlý úkol a jistě by nebylo vhodné ji provádět v diplomové práci. Z tohoto důvodu byly pro hodnocení vybrány pouze následující veličiny

- kritická koncentrace kyseliny borité,
- axiální ofset,

- axiální rozložení výkonu,
- radiální rozložení výkonu,

přičemž pro kampaně U1C09 až U1C14 bylo provedeno pouze globální zhodnocení výše uvedených veličin. Detailní srovnání výše uvedených veličin mezi predikcí programem ANDREA a provozními daty bylo provedeno pro kampaň U1C09, ve které je zavezeno zcela čerstvé palivo TVSA-T, a pro kampaň U1C13 obsahující již částečně vyhořelé palivo TVSA-T.

Předtím, nežli se přejde ke srovnání celozónových výpočtů provedených uvažovanými verzemi programu ANDREA s provozními daty, budou uvedeny hodnotící metriky, pomocí nichž bude provedena validace a jejichž definice jsou následující:

- dBC<sup>HZP</sup>, resp. dBC<sup>HFP</sup> absolutní rozdíl kritické koncentrace kyseliny borité mezi programem ANDREA a provozními daty pro horký nevýkonový stav, resp. horký výkonový stav,
- dAO absolutní rozdíl axiálního ofsetu mezi programem ANDREA a monitorovacím systémem aktivní zóny,
- dFHA absolutní rozdíl koeficientu nevyrovnání výkonu palivového souboru mezi programem ANDREA a monitorovacím systémem aktivní zóny,
- dAXP absolutní rozdíl axiálního výkonu mezi programem ANDREA a monitorovacím systémem aktivní zóny.

Ve výše uvedených metrikách byl použit axiální ofset, který je definován vztahem

$$AO = \frac{P_{\rm t} - P_{\rm b}}{P_{\rm t} + P_{\rm b}},\tag{6.1}$$

kde $P_{\rm t},$ resp.  $P_{\rm b}$  je výkon horní, resp. dolní poloviny aktivní zóny a dále koeficient nevyrovnání výkonu, jehož definice je následující

$$FHA = \frac{P_{\rm FA}}{\overline{P}_{\rm FA}},\tag{6.2}$$

kde  $P_{\text{FA}}$ , resp.  $\overline{P}_{\text{FA}}$  je výkon palivového souboru, resp. střední výkon palivového souboru v aktivní zóně.

Pro výše uvedené metriky je potřeba zvolit vhodný statistický způsob vyhodnocení. V případě metrik hodnotích kritickou koncentraci kyseliny borité budou při statistickém zpracování použity

- max nejvyšší absolutní rozdíl mezi predikovanou a měřenou kritickou koncentrací kyseliny borité v daném statistickém souboru,
- avg střední hodnota absolutního rozdílu predikované a měřené kritické koncentrace kyseliny borité pro uvažovaný statistický soubor.

Pro výkonové metriky je porovnávanou veličinou rozdíl predikovaného a monitorovaného výkonu palivových souborů, který lze vyjádřit pro záznam *i* ve tvaru

$$\Delta_i = P_{\text{calc},i} - P_{\text{monitor},i},\tag{6.3}$$

kde  $P_{calc}$ , resp.  $P_{monitor}$  je relativní výkon predikovaný programem ANDREA, resp. relativní výkon získaný z monitorovacího systému aktivní zóny. Pod pojmem záznam jsou zde myšleny hodnoty výkonu pro daný palivový soubor v příslušném kroku vyhoření. Při statistickém zpracování rozložení výkonu v aktivní zóně bude sledován

- jednostranný percentil P<sub>p</sub>, který odděluje 100p% menších, resp. větších hodnot proměnné Δ<sub>i</sub> od zbytku statistického souboru,
- střední kvadratická ochylka  $\sigma$  proměnné  $\Delta_i$ , pro kterou platí následující vztah

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} \left(\Delta_i - \overline{\Delta}\right)^2},\tag{6.4}$$

kde  $\overline{\Delta}$  je střední hodnota rozdílu predikovaného a monitorovaného výkonu v AZ pro daný krok vyhoření a N je počet hodnocených záznámů [18].

#### 6.2 Globální zhodnocení kampaní

Pro všechny uvažované kampaně U1C09 až U1C14 bylo provedeno globální zhodnocení celozónových výpočtů provedených programem ANDREA s implementovanými metodami zohledňujícími spektrální historii vyhořívání a jeho standardní verzí na provozních datech. Díky tomu lze získat prvnotní informaci o vlivu zahrnutí spektrální historie vyhořívání, která je určena na základě statistického souboru obsahujícího velké množství dat.

Výsledky validace, která byla provedena pomocí metrik definovaných v podkapitole 6.1, pro všechny uvažované kampaně shrnuje tabulka 6.1. Odtud je zřejmé, že pomocí všech uvažovaných verzí programu ANDREA dosahuje predikce kritické koncentrace kyseliny borité pro HZP přibližně stejných hodnot. Naopak metrika dBCHFP ukazuje, že zahrnutí metod zohledňujících spektrální historii do programu ANDREA přináší značné zlepšení v predikci kritické koncentrace kyseliny borité. Metriky dBC<sup>HFP</sup> vyhodnocené pomocí veličin max a avg nabývají pro obě verze programu ANDREA zohledňující spektrální historii vyhořívání velice podobných hodnot. V tabulce 6.1 je taktéž srovnáno predikované rozložení výkonu pomocí uvažovaných verzí programu ANDREA s monitorovacím systémem aktivní zóny. Prvním sledovaným parametrem je axiální ofset, který je vyhodnocen pomocí 90% percentilu. Pro verze ANDREA-<sup>239</sup>Pu a ANDREA-SI lze pozorovat mírné zhoršení hodnot metriky dAO ve srovnání se standardně používanou verzí programu ANDREA, ovšem je nutné podotknout, že uvedený rozdíl nepřevyšuje hodnotu 1 %. Přesnost predikce radiálního rozložení výkonu je sledována pomocí metriky dFHA, která byla vyhodnocena pomocí 2,5% a 97,5% jednostranných percentilů a pomocí střední kvadratické odchylky. V tomto případě jsou pro všechny verze makrokódu ANDREA dosaženy téměř stejné hodnoty metriky dFHA. Poslední analyzovanou globální metrikou je dAXP, jejíž vyhodnocení bylo provedeno pomocí 99% percentilu a střední kvadratické odchylky. Pro axiální rozložení výkonu lze sledovat mírné zhoršení verzí programu ANDREA se zahrnutím spektrální historie vyhořívání oproti standardní verzi, které ovšem nepřesahuje 0,6 %.

Závěrem lze říci, že na základě globálního zhodnocení kampaní U1C09 až U1C14 bylo možné pozorovat zvýšení přesnosti predikce kritické koncentrace kyseliny borité při

zohlednění spektrální historie vyhořívání v makrokódu ANDREA ve srovnání se standardní verzí programu ANDREA. Na druhou stranu zahrnutí spektrální historie vyhořívání do makrokódu ANDREA přineslo mírně horší výsledky v predikci výkonu. Možné důvody zhoršení rozložení výkonu predikovaného verzemi programu ANDREA s metodami spektrální historie vyhořívání ve srovnání se standardní verzí programu ANDREA budou nastíněny v podkapitole 6.7.

Metrika		ANDREA	ANDREA- <sup>239</sup> Pu	ANDREA-SI
$dBC^{HZP}$ (g/kg)	max	-0,28	-0,29	-0,30
	avg	0,09	0,10	0,11
dBC <sup>HFP</sup> (g/kg)	max	-0,42	-0,33	-0,31
	avg	0,15	0,10	0,10
dAO (%)	$P_{0,90}$	1,0	1,2	1,7
dFHA (%)	$P_{0,025}$	-3,1	-3,1	-3,0
	$P_{0,975}$	3,3	3,2	3,3
	$\sigma$	1,6	1,6	1,6
dAXP (%)	$P_{0,99}$	8,0	8,4	8,3
	$\sigma$	2,3	2,6	2,9

Tabulka 6.1: Globální zhodnocení kampaní U1C09 až U1C14

#### 6.3 Kritická koncentrace kyseliny borité

Na základě globálního zhodnocení z předešlé podkapitoly 6.2 vyplynulo, že při zahrnutí spektrální historie vyhořívání do makrokódu ANDREA lze dosáhnout vyšší shody predikce kritické koncentrace kyseliny borité s provozními daty. Nyní lze přejít k podrobnému srovnání predikované a měřené kritické koncentrace kyseliny borité dosahované během kampaně. Tabulka 6.2 uvádí hodnoty metriky dBC<sup>HFP</sup> statisticky vyhodnocené pomocí max a avg pro všechny uvažované kampaně a jednotlivé verze programu ANDREA. Odtud je zřejmé, že ve všech uvažovaných případech lze pomocí programů

Tabulka 6.2: Statistické zhodnocení absolutních odchylek kritické koncentrace kyseliny borité mezi predikcí a měřením pro kampaně U1C09 až U1C14

Kampaň	$dBC^{HFP}$ (g/kg)	ANDREA	ANDREA- <sup>239</sup> Pu	ANDREA-SI
U1C09	max	-0,39	-0,33	-0,31
	avg	0,23	0,20	0,17
U1C10	max	-0,24	-0,22	-0,19
	avg	0,12	0,11	0,09
U1C11	max	-0,21	-0,17	-0,19
	avg	0,13	0,09	0,11
U1C12	max	0,21	0,19	0,24
	avg	0,12	0,05	0,08
U1C13	max	-0,42	-0,27	-0,31
	avg	0,12	0,06	0,07
U1C14	max	-0,31	-0,21	0,16
	avg	0,20	0,12	0,08

ANDREA-<sup>239</sup>Pu a ANDREA-SI přesněji predikovat kritickou koncentraci kyseliny borité než pomocí standardní verze programu ANDREA.

Na obrázku 6.1 je zobrazen detailní průběh absolutního rozdílu predikované a měřené kritické koncentrace kyseliny borité v závislosti na vyhoření v EFPD pro kampaň U1C09 a všechny uvažované verze programu ANDREA. V případě verze ANDREA-SI lze během celé kampaně pozorovat zpřesnění predikce koncentrace kyseliny borité vzhledem k provozním datům oproti standardní verzi programu ANDREA. Pro verzi ANDREA-<sup>239</sup>Pu je na BOC dosaženo mírného zhoršení predikce kritické koncentrace kyseliny borité ve srovnání se standardní verzí programu ANDREA, ale s rostoucím vyhořením je možné pozorovat zlepšení predikce pomocí verze ANDREA-<sup>239</sup>Pu, která lépe odpovídá provozním datům a dosahuje podobných hodnot jako verze programu ANDREA-SI.



Obrázek 6.1: Absolutní odchylky kritické koncentrace kyseliny borité predikované uvažovanými verzemi programu ANDREA od měření v závislosti na provozu kampaně U1C09

Obrázek 6.2 ukazuje závislost metriky dBC<sup>HFP</sup> na vyhoření v EFPD pro kampaň U1C13, ve které je již zavezeno částečně vyhořelé palivo, díky čemuž by se ve větší míře mělo projevit zohlednění spektrální historie vyhořívání v rekonstrukci grupových konstant makrokódu. Z obrázku 6.2 je skutečně patrné, že zahrnutí spektrální historie vyhořívání do programu ANDREA přináší snížení rozdílů mezi predikovanou a měřenou kritickou koncentrací kyseliny borité. Na BOC lze pozorovat mírně horší shodu predikce s provozními daty pro verze ANDREA-<sup>239</sup>Pu a ANDREA-SI ve srovnání se standardní verzí programu, ovšem při dalším průběhu kampaně nastane výrazné zpřesnění predikce kritické koncentrace kyseliny borité provedené pomocí verzí programu ANDREA se spektrální historií vyhořívání ve srovnání se standardní verzí programu ANDREA. Přibližně od vyhoření 130 EFPD představuje zpřesnění predikce téměř 0,2 g/kg, přičemž podobný trend lze sledovat až na konec analyzované kampaně.



Obrázek 6.2: Absolutní odchylky kritické koncentrace kyseliny borité predikované uvažovanými verzemi programu ANDREA od měření v závislosti na provozu kampaně U1C13

#### 6.4 Axiální ofset

Axiální ofset představuje nepřímo měřený parametr, který je stanovován monitorovacím systémem aktivní zóny. Takto určené hodnoty budou použity pro porovnání s axiálním ofsetem, který je predikován programem ANDREA. Detailní srovnání axiálního ofsetu bylo opět provedeno pro kampaně U1C09 a U1C13 a všechny uvažované verze programu ANDREA. Na obrázku 6.3 je vykreslena závislost metriky dAO na vyhoření v EFDP pro kampaň U1C09. Odtud je patrné, že na BOC je predikovaný axiální ofset více podhodnocován vůči monitorovacímu systému pro verze programu ANDREA-<sup>239</sup>Pu a ANDREA-SI ve srovnání se standardní verzí programu ANDREA. Naopak s rostoucím vyhořením lze pozorovat nadhodnocení predikce axiálního ofsetu vůči monitorovacímu systému aktivní zóny pro verze programu ANDREA s implementovanými metodami zohledňující spektrální historii vyhořívání. Z obrázku 6.3 je zřejmé, že chování predikce axiálního ofsetu pro všechny uvažované verze programu ANDREA vykazuje stejný charakter a v přípdě verzí ANDREA-<sup>239</sup>Pu a ANDREA-SI lze pozorovat vyšší hodnoty rozdílů mezi predikcí a monitorovacím systémem.

Obrázek 6.3 zobrazuje závislost metriky dAO na vyhoření pro kampaň U1C13. V případě kampaně, ve které je již zčásti vyhořelé palivo, je možné pozorovat vyšší nadhodnocení axiálního ofsetu predikovaného verzemi ANDREA-<sup>239</sup>Pu a ANDREA-SI ve srovnání se standardní verzí programu ANDREA. Z obrázku 6.3 je opět patrný podobný charakter průběhu rozdílu monitorovaného a predikovaného axiálního ofsetu pro všechny uvažované verze programu ANDREA. Skoky v axiálním ofsetu vykreslené na obrázku 6.3 jsou způsobeny tím, že v programu ANDREA se počítá zjednodušená historie provozu kampaně. Při pohybech regulačních orgánů, a tedy změnách axiálního ofsetu, nejsou porovnávány zcela ustálené stavy a výpočet v programu ANDREA zcela neodpovídá realitě.

Závěrem lze poznamenat, že pomocí programu ANDREA s metodami spektrální historie vyhořívání je dosahován vyšší rozdíl mezi predikovaným a monitorovaným axiál-



ním ofsetem ve srovnání se standardní verzí programu ANDREA.

Obrázek 6.3: Absolutní odchylky axiálního ofsetu mezi uvažovanými verzemi programu ANDREA a monitorovacím systémem aktivní zóny pro kampaň U1C09



Obrázek 6.4: Absolutní odchylky axiálního ofsetu mezi uvažovanými verzemi programu ANDREA a monitorovacím systémem aktivní zóny pro kampaň U1C13

#### 6.5 Axiální rozložení výkonu

Pro axiální rozložení výkonu byla nejprve vyhodnocena metrika dAXP statisticky zpracovaná pomocí střední kvadratické odchylky pro všechny uvažované kampaně U1C09 až U1C14. Vyhodnocení metriky dAXP pro jednotlivé kampaně je vypsáno v tabulce 6.3.

Odtud je patrné, že pro všechny uvažované kampaně je celkově dosahována horší predikce axiálního výkonu pomocí programu ANDREA se zahrnutím spektrální historie vyhořívání ve srovnání se standardní verzí programu ANDREA. Nejvyšší střední kvadratickou odchylku metriky dAXP pro všechny analyzované případy vykazuje verze ANDREA-SI. Ovšem je nutné podotknout, že rozdíly střední kvadratické odchylky mezi standardní verzí programu ANDREA a verzí ANDREA-<sup>239</sup>Pu, resp. ANDREA-SI nepřevyšují hodnotu 0,5 %, resp. 1,0 %.

Tabulka 6.3: Statistické zhodnocení axiálního rozložení výkonu pomocí středních kvadratických odchylek metriky dAXP pro kampaně U1C09 až U1C14

Kampaň	dAXP (%)	ANDREA	ANDREA- <sup>239</sup> Pu	ANDREA-SI
U1C09	$\sigma$	2,12	2,41	2,54
U1C10	$\sigma$	2,35	2,61	2,83
U1C11	$\sigma$	2,28	2,50	2,65
U1C12	$\sigma$	2,32	2,66	2,84
U1C13	$\sigma$	2,46	2,87	3,16
U1C14	$\sigma$	2,28	2,62	3,06

Detailní zhodnocení axiálního rozložení výkonu je provedeno pro kampaň U1C09 na obrázku 6.5. Průběhy relativního axiálního výkonu v aktivní zóně v závislosti na relativní výšce, které byly získány z monitorovacího systému aktivní zóny a predikcí pomocí programu ANDREA, jsou vykresleny pro BOC a EOC na obrázcích 6.5a a 6.5c. Z obrázku 6.5b, na kterém jsou zobrazeny absolutní odchylky axiálního výkonu mezi monitorovacím systémem a predikcí na začátku kampaně U1C09 v závislosti na relativní výšce, je patrné, že pro všechny verze programu ANDREA byly získány velice podobné průběhy, jejichž hodnoty se po celé výšce aktivní zóny neliší o více než 1 %. Na obrázku 6.5d jsou vykresleny absolutní odchylky monitorovaného a predikovaného axiálního výkonu v závislosti na relativní výšce pro konec kampaně U1C09. Odtud je patrné, že při zahrnutí spektrální historie vyhořívání do makrokódu ANDREA lze dosáhnout vyšší shody predikovaného axiálního výkonu s monitorovacím systémem aktivní zóny než v případě standardní verze makrokódu ANDREA.

Obrázek 6.6 zobrazuje axiální rozložení výkonu pro BOC a EOC kampaně U1C09, přičemž závislost relativního axiálního výkonu na relativní výšce je vykreslena na obrázcích 6.6a a 6.6c. Absolutní odchylky mezi predikovaným a monitorovaným axiálním výkonem v závislosti na relativní výšce pro BOC kampaně U1C09 jsou zobrazeny na obrázku 6.5b. Odtud je možné sledovat, že zahrnutí spektrální historie vyhořívání do makrokódu ANDREA mírně zhorší predikci axiálního výkonu oproti jeho standardní verzi. Naopak závislost absolutní odchylky na relativní výšce pro EOC, která je vykreslena na obrázku 6.6d, vykazuje větší míru shody mezi standardní verzí ANDREA a ANDREA-<sup>239</sup>Pu, které se mezi sebou liší přibližně o 1 %. V případě verze ANDREA-SI lze pozorovat zhoršení predikce axiálního výkonu ve srovnání se standardní verzí programu ANDREA.

#### 6.6 Radiální rozložení výkonu

Posledním hodnoceným parametrem při validaci programu ANDREA s implementovanými metodami spektrální historie vyhořívání na provozních datech bude radiální



Obrázek 6.5: Porovnání predikovaného a monitorovaného axiálního výkonu pro kampaň U1C09

rozložení výkonu. Nejprve bude vyhodnocena metrika dFHA statisticky zpracovaná pomocí střední kvadratické odchylky pro všechny uvažované kampaně. Z tabulky 6.4 je zřejmé, že pro všechny uvažované verze programu ANDREA byly získány srovnatelné výsledky středních kvadratických odchylek pro všechny uvedené kampaně. To znamená, že zahrnutí spektrální historie do makrokódu ANDREA jen velice nepatrně ovlivní hodnoty koeficientu nevyrovnání výkonu.

Kampaň	dFHA (%)	ANDREA	ANDREA- <sup>239</sup> Pu	ANDREA-SI
U1C09	σ	2,30	2,22	2,36
U1C10	$\sigma$	1,54	1,55	1,52
U1C11	$\sigma$	1,14	1,15	1,11
U1C12	$\sigma$	1,32	1,40	1,25
U1C13	$\sigma$	1,70	1,77	1,51
U1C14	$\sigma$	1,62	1,62	1,54

Tabulka 6.4: Statistické zhodnocení radiálního rozložení výkonu pomocí středních kvadratických odchylek metriky dFHA pro kampaně U1C09 až U1C14

Podrobné srovnání radiálního rozložení výkonu predikovaného uvažovanými verzemi makrokódu ANDREA s monitorovacím systémem aktivní zóny bylo provedeno



Obrázek 6.6: Porovnání predikovaného a monitorovaného axiálního výkonu pro kampaň U1C13

pro kampaně U1C09 a U1C13, a to na BOC a EOC. Radiální mapy absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu jsou vykresleny v příloze B na obrázcích B.1 až B.12. Radiální profily absolutních odchylek na BOC pro kampaň U1C09 jsou zobrazeny na obrázcích B.1, B.2 a B.3. Odtud je možné pozorovat, že pro všechny uvažované verze programu ANDREA bylo dosaženo velice podobných profilů absolutních odchylek mezi predikovaným a monitorovaným výkonem palivových souborů. Absolutní odchylky mezi verzemi programu ANDREA zohledňující spektrální historii a standardní verzí programu se maximálně zhoršily o 1 %. Z obrázků B.2 a B.3 je patrné, že pro verze ANDREA-<sup>239</sup>Pu a ANDREA-SI nabývají absolutní odchylky vyšších hodnot pro palivové soubory, ve kterých nastávají extrémy absolutních odchylek, ve srovnání se standardní verzí programu ANDREA.

V případě EOC kampaně U1C09 lze z obrázků B.4, B.5 a B.6 vyčíst, že opět byl dosažen podobný charakter chování absolutních odchylek mezi predikcí všech uvažovaných verzí programu ANDREA a monitorovacím systémem aktivní zóny. Pro verze makrokódu ANDREA se spektrální historií vyhořívání je možné pozorovat, že relativní výkon je v periferních částech aktivní zóny více nadhodnocován ve srovnání se standardní verzí makrokódu ANDREA.

Dále jsou na obrázcích B.7, B.8 a B.9 zobrazeny radiální mapy absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu pro BOC kampaně U1C13. Z uvedených obrázků je možné vidět, že radiální profily absolutních odchylek vykazují pro všechny verze programu ANDREA velice podobné chování v šestině aktivní zóny, ve které jsou soustředěny palivové soubory, jejichž predikované výkony jsou značně nadhodnoceny. Z obrázků B.8 a B.9 lze pozorovat, že verze programu ANDREA se spektrální historií vyhořívání pro více palivových souborů podhodnocují výkon ve srovnání s monitorovacím systémem aktivní zóny.

Poslední zde hodnocené jsou radiální profily absolutních odchylek mezi predikovaným a monitorovaným výkonem pro EOC kampaně U1C13, které jsou zobrazeny na obrázcích B.10, B.11 a B.12. Odtud je patrné, že absolutní odchylky v radiálních profilech dosahují pro všechny uvažované verze programu ANDREA velice podobných hodnot, které se mezi sebou neliší více než o 1 %. Ve srovnání s předchozími radiálními profily lze pozorovat lepší shodu predikovaných radiálních výkonů palivových souborů s monitorovacím systémem aktivní zóny. Pouze pro některé periferní palivové soubory dochází k vyššímu nadhodnocování predikovaných výkonů ve srovnání s provozními daty.

#### 6.7 Komentář k celozónovým výpočtům

Ve výše uvedeném textu byla provedena validace makrokódu ANDREA s implementovanými metodami umožňující zohlednit spektrální historii vyhořívání na provozních datech několika kampaní ETE obsahujících palivo TVSA-T. Navíc bylo doplněno srovnání se standardní verzí programu ANDREA, díky čemuž bylo možné pozorovat vliv implementovaných metod spektrální historie vyhořívání na přesnost predikovaných veličin vůči provozním datům. Z provedeného zhodnocení vyplynulo, že při zahrnutí metod spektrální historie vyhořívání do makrokódu ANDREA lze přesněji predikovat kritickou koncentraci kyseliny borité než pomocí standardní verze programu ANDREA. Naopak pro axiální ofset, resp. axiální a radiální rozložení výkonu bylo možné pozorovat mírně zhoršenou predikci programem ANDREA s metodami spektrální historie vyhořívání ve srovnání s jeho standardní verzí. Je důležité si uvědomit, že výkonové charakteristiky byly srovnávány s monitorovacím systémem aktivní zóny, který provádí rekonstrukci výkonu aktivní zóny. To znamená, že pomocí monitorovacího systému aktivní zóny nejsou přímo měřeny uvedené charakteristiky, ale jsou určovány na základě rekonstrukce, která spočívá v interpolaci měřených a predikovaných veličin. Navíc její kvalitu ovlivňuje celá řada parametrů.

Další důležitou poznámkou je, že v makrokódu ANDREA jsou aplikovány korekce na grupové konstanty, které jsou stanoveny na základě srovnání s provozními daty. Jejich hlavní účel je zpřesnění predikce koncentrace kyseliny borité s provozními daty, neboť makrokód ANDREA se dlouhodobě potýká s problémem, kdy je s probíhajícím provozem kampaně značně podhodnocována kritická koncentrace kyseliny borité. Uvedený problém lze sledovat z obrázků 6.1 a 6.2 pro standardní verzi programu ANDREA. Odvození uvedených korekcí bylo provedeno pro standardní verzi makrokódu ANDREA a pro verze s implementovanými metodami spektrální historie vyhořívání byly použity jejich totožné hodnoty. Standardní používání programu ANDREA s implementovanými metoda zohledňujících spektrální historii vyhořívání pro celozónové výpočty by se mohlo jevit jako vhodný směr jeho dalšího vývoje. Indiciemi pro uvedené tvrzení je fakt, že při zahrnutí spektrální historie vyhořívání do makrokódu ANDREA bylo možné pozorovat snížení podhodnocení v predikci kritické koncentrace kyseliny borité ve srovnání s provozními daty. Dokonce na konci kampaně U1C13 zobrazené na obrázku 6.2 byla predikce kritické koncentrace kyseliny borité nadhodnocena vůči provozním datům, což bylo podle všeho způsobeno aplikací shodných korekcí používaných ve standardní verzi makrokódu ANDREA. Zmenšením váhy korekcí by zřejmě došlo ke snížení nadhodnocení predikce koncentrace kyseliny borité na konci kampaně U1C13 vůči provozním datům. Z obecných zkušeností při stanovování korekcí v makrokódu ANDREA je známo, že snížení váhy korekcí vede na lepší shodu mezi predikovaným a monitorovaným výkonem. Tím by se navíc vyřešil problém s mírným zhoršením predikce výkonu pomocí programu ANDREA s implementovanými metoda zohledňujícími spektrální historii vyhořívání ve srovnání s monitorovacím systémem aktivní zóny. Pro potvrzení výše uvedeného bude nezbytné provést studii týkající se nastavení hodnot korekcí pro verze programu ANDREA s implementovanými metodami spektrální historie vyhořívání. Následně bude moci být realizována úplná validace programu ANDREA s metodami spektrální historie vyhořívání a učinit závěry pro další směr vývoje programu ANDREA.

### Závěr

V diplomové práci byl nejprve stručně popsán postup rekonstrukce homogenizovaných grupových konstant standardně používaný v makrokódech. Bylo zde uvedeno, že při použití parametrizačních funkcí sestrojených na základě jednoho výpočtu vyhoření na nominálních parametrech s definovanými odskoky nelze postihnout spektrální historii vyhořívání, tj. vliv energetického spektra neutronů na grupové konstanty zapříčiněný vyhoříváním při nenominálních parametrech. Další část kapitoly 1 se zabývá zhodnocením vlivu spektrální historie vyhořívání na vybraných makroskopických účinných průřezech, které bylo provedeno pomocí mikrokódu HELIOS. Podobné výpočty byly reprodukovány v makrokódu ANDREA, v jehož rekonstrukci grupových konstant není zohledněna spektrální historie vyhořívání. Ukázalo se, že přesnost rekonstruovaných grupových konstant ve srovnání s referenčním řešením klesá s rostoucím vyhořením, a to právě kvůli zanedbání spektrální historie vyhořívání. Poslední část kapitoly 1 představuje metody, pomocí nichž lze v parametrizaci grupových konstant zohlednit spektrální historii vyhořívání. Podrobně byla popsána metoda indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu a byly vytyčeny úkoly, které bylo nutné provést, aby bylo možné uvedenou metodu implementovat do makrokódu. Dále byla popsána metoda spektrálního indexu a jeho integrálu, která pro zohlednění spektrální historie vyhořívání využívá také pouze jediný parametr, tj. spektrální index, jehož možné tvary byly prezentovány na základě provedené rešerše.

Kapitola 2 stručně seznamuje s nodálním makrokódem ANDREA a jeho pomocnými nástroji. Aplikační knihovny makrokódu ANDREA se generují pomocí nástroje AKIKO na základě výpočtů vyhoření provedených mikrokódem. Následně byl popsán nástroj ANASTAZIE, s využitím kterého lze automatizovaně vytvářet zdrojové soubory programu ANDREA, které slouží pro správné čtení dat z aplikační knihovny a rekonstrukci grupových konstant.

Stěžejní částí diplomové práce byla implementace metody indikace spektrální historie vyhořívání pomocí atomové hustoty <sup>239</sup>Pu, jejíž popisem se zabývá kapitola 3. Pro použití uvedené metody v makrokódu je nezbytné dokázat predikovat atomovou hustotu <sup>239</sup>Pu pro libovolný provozní stav ve všech definovaných nódech výpočtu. K tomuto účelu byl v makrokódu ANDREA implementován zjednodušený linearizovaný model řetězce aktinoidů <sup>238</sup>U – <sup>241</sup>Pu, který lze popsat soustavou analyticky řešitelných diferenciálních rovnic, jejichž řešení je provedeno pomocí Batematovy metody. V bilančních rovnicích modelu aktinoidů vystupují mikroskopické účinné průřezy, jejichž hodnoty jsou závislé na provozních stavech reaktoru. Z tohoto důvodu bylo nutné do makrokódu ANDREA doplnit parametrizaci mikroskopických účinných průřezů, aby nedocházelo ke snížení přesnosti predikce atomových hustot aktinoidů. Spolehlivost modelu řetězce aktinoidů <sup>238</sup>U – <sup>241</sup>Pu byla testována na modelových scénářích vyhořívání, ve kterých byly uvažovány samostatné palivové soubory v nekonečném prostředí. Získané výsledky pre-

dikovaných atomových hustot byly porovnány s mikrokódem HELIOS, přičemž bylo ukázáno, že charakter chování zjednodušeného modelu v makrokódu ANDREA velice dobře odpovídá podrobnému modelu v mikrokódu HELIOS.

Kapitola 3 také seznamuje s implementací modelu řetězce aktinoidů v nástroji AKIKO, jehož podoba je identická s modelem v makrokódu ANDREA. V nástroji AKIKO je nezbytné přepočítat atomové hustoty <sup>239</sup>Pu pomocí zjednodušeného modelu, neboť jejich nominální hodnoty figurují v proměnné spektrální historie vyhořívání a je nutné je zaznamenat do aplikační knihovny, odkud si je při každém výpočtu načte makrokód AN-DREA. V opačném případě by při jakémkoli výpočtu musel makrokód ANDREA zvláště určit nominální atomové hustoty <sup>239</sup>Pu, což by z implementačního hlediska bylo velice obtížně proveditelné. Pokud by nebyla atomová hustota <sup>239</sup>Pu v nástroji AKIKO vypočítána konzistentním způsobem jako v makrokódu ANDREA, mohlo by dojít k znepřesnění parametrizačního členu zohledňujícího spektrální historii vyhořívání. Poslední část kapitoly 3 popisuje rozšíření parametrizačního modulu o tvary funkcí použitých pro zohlednění spektrální historie vyhořívání. Navíc zde byla stanovena metodika určování podobnostních čísel spektrální historie vyhořívání. Odtud vyplynulo, že jejich hodnoty lze vypočítat na základě nominálního výpočtu vyhoření a výpočtů vyhoření s jednou kladnou a zápornou změnou proměnné spektrální historie vyhořívání. To znamená, že podobnostní čísla spektrální historie vyhořívání nemusí být určena na základě velkého počtu výpočtu, ve kterých je vyhoříváno na nenominálních provozních parametrech, a nedojde k jejich nepřesnému určení.

Popis implementace alternativní metody spektrálního indexu a jeho integrálu v makrokódu ANDREA je proveden v kapitole 4. Ve srovnání s metodou využívající atomovou hustotu <sup>239</sup>Pu jakožto indikátor spektrální historie vyhořívání nebylo pro metodu spektrálního indexu nutné v makrokódu implementovat další modely fyzikálních jevů. Stačilo pouze implementovat výpočet spektrálního indexu a jeho integrálu do nástroje AKIKO, který jejich hodnoty předá parametrizačnímu modulu. V něm se stanoví koeficienty parametrizačních funkcí zohledňující spektrální historii vyhořívání a spolu s nominálním spektrálním indexem jsou zapsány do aplikační knihovny. V programu ANDREA bylo taktéž nezbytné implementovat výpočet spektrálního indexu a jeho integrálu. K tomu bylo výhodně využito modulu starajícího se o výpočet atomových hustot aktinoidů, a to především kvůli tomu, že nebylo nutné řešit procedury týkající se překládek a jiného, neboť vše potřebné bylo již v uvedeném modulu dostupné. Posledním krokem provedeným pro metodu spektrálního indexu bylo definování tvaru parametrizačních funkcí a výpočet podobnostních čísel spektrální historie vyhořívání, k čemuž bylo možné použít již implementovaný parametrizační modul z metody využívající pro zohlednění spektrální historie vyhořívání atomovou hustotu <sup>239</sup>Pu. I pro metodu spektrálního indexu se ukázalo, že pro sestrojení parametrizačních funkcí spektrální historie vyhořívání postačuje malý počet výpočtů vyhoření na nenominálních provozních parametrech. Při stanovení metodiky určování podobnostních čísel pro metodu spektrálního indexu vyplynulo, že pomocí parametrizačních funkcí se spektrálním indexem nelze zcela přesně postihnout změny v grupových konstantách zapříčiněné vyhoříváním na libovolných provozních parametrech.

V kapitole 5 byla provedena verifikace implementovaných metod v makrokódu AN-DREA, které umožňují při rekonstrukci grupových konstant zohlednit spektrální historii vyhořívání. Implementované metody byly verifikovány na vybraných makroskopických účinných průřezech pomocí přepočtu modelových scénářů vyhořívání, ve kterých byly uvažovány samostatné palivové soubory v nekonečném prostředí. Díky tomu mohly být výsledky porovnány s referenčním řešením provedeným mikrokódem HELIOS. Do porovnání rekonstruovaných makroskopických účinných průřezů s referenčními hodnotami byla navíc zahrnuta i standardní verze makrokódu ANDREA, díky čemuž bylo možné pozorovat vliv implementovaných metod spektrální historie vyhořívání na přesnost rekonstrukce grupových konstant. Na základě provedené verifikace se podle očekávání ukázalo, že lze zpřesnit rekonstruované grupové konstanty vůči referenčnímu řešení při zahrnutí spektrální historie vyhořívání do parametrizačního schématu makrokódu ANDREA. Z provedeného zhodnocení taktéž vyplynulo, že spektrální historii vyhořívání lze obecně lépe vystihnout pomocí indikátoru <sup>239</sup>Pu ve srovnání se spektrálním indexem, resp. jeho integrálem, který nefunguje zcela univerzálně pro libovolný výpočet vyhoření se změněnými provozními parametry.

Implementované metody zohledňující spektrální historii vyhořívání v makrokódu ANDREA byly validovány na provozních datech v kapitole 6. Zhodnocení celozónových výpočtů bylo provedeno pro devátou až čtrnáctou kampaň prvního bloku JE Temelín se zavezeným palivem TVSA-T. Úplná validace programu ANDREA představuje značně rozsáhlou úlohu a nepochybně by nebylo vhodné ji provádět v diplomové práci. Z tohoto důvodu byly pro validaci implementovaných metod vybrány veličiny důležité z hlediska provozu reaktoru, a to kritická koncentrace kyseliny borité, axiální ofset, axiální a radiální rozložení výkonu. Do zhodnocení přesnosti predikovaných veličin programem AN-DREA vůči provozním datům byla opět zahrnuta i jeho standardní verze používaná pro produkční výpočty. Díky tomu bylo možné sledovat, jaký vliv způsobuje zahrnutí spektrální historie vyhořívání do rekonstrukce grupových konstant na celozónové výpočty provedené makrokódem ANDREA. Ze srovnání s provozními daty vyplynulo, že při zohlednění spektrální historie vyhořívání v rekonstrukci grupových konstant programu ANDREA lze přesněji predikovat kritickou koncentraci kyseliny borité než pomocí jeho standardní verze. Na druhou stranu bylo možné sledovat mírné zhoršení axiálního ofsetu a axiálního, resp. radiálního rozložení výkonu predikovaného pomocí verzí programu ANDREA s metodami spektrální historie vyhořívání ve srovnání s jeho standardní verzí. Z kapitoly 5 vyplynulo, že metoda spektrálního indexu a jeho integrálu nezohledňuje úplně přesně spektrální historii vyhořívání pro libovolné změny provozních parametrů. Uvedené tvrzení se ovšem zcela nenaplnilo v případě celozónových výpočtů, ve kterých byla kritická koncentrace kyseliny borité predikována přibližně ve stejné shodě s provozními daty pro obě verze programu ANDREA s implementovanými metodami spektrální historie vyhořívání. Pro verzi programu ANDREA-SI bylo možné pozorovat mírně horší shodu predikce axiálního ofsetu s monitorovacím systémem aktivní zóny než v případě verze ANDREA-<sup>239</sup>Pu. Naopak axiální a radiální rozložení výkonu bylo oběma verzemi programu ANDREA predikováno na velmi podobné úrovni.

V makrokódu ANDREA jsou aplikovány korekce na grupové konstanty, které jsou stanoveny na základě srovnání s provozními daty. Pro verze programu ANDREA s implementovanými metodami spektrální historie vyhořívání byly převzaty hodnoty korekčních členů grupových konstant ze standardní verze programu. Díky zahrnutí spektrální historie vyhořívání do rekonstrukce grupových konstant v makrokódu ANDREA se změnily výsledky celozónových výpočtů, a tedy bude nutné upravit stávající hodnoty korekčních členů. Navíc je nutné poznamenat, že právě uvedené korekce zčásti kompenzovaly vliv spektrální historie vyhořívání, a tedy při jejím zohlednění v rekonstrukci grupových konstant bude pravděpodobně možné snížit jejich váhu. Z obecných zkušeností při stanovování korekcí v makrokódu ANDREA je známo, že snížení váhy korekcí vede na lepší shodu mezi predikovaným a monitorovaným výkonem. Díky tomu by pravděpodobně program ANDREA s implementovanými metodami spektrální historie vyhoř

řívání predikoval výkonové charakteristiky ve větší shodě s monitorovacím systémem aktivní zóny.

Implementace metod zohledňujích spektrální historii vyhořívání do makrokódu AN-DREA přinesla slibné výsledky v podobě zpřesnění predikce kritické koncentrace kyseliny borité. Makrokód ANDREA se dlouhodobě potýká s problémem, kdy je s probíhajícím provozem kampaně značně podhodnocována kritická koncentrace kyseliny borité. Kvůli tomu jsou ve standardní verzi makrokódu ANDREA aplikovány korekce na grupové konstanty, které částečně vyřeší tento problém. Při zahrnutí spektrální historie vyhořívání do makrokódu ANDREA bylo možné pozorovat snížení podhodnocení v predikci kritické koncentrace kyseliny borité ve srovnání s provozními daty. Dokonce na konci kampaně U1C13 byla predikce kritické koncentrace kyseliny borité nadhodnocena vůči provozním datům, což bylo podle všeho způsobeno aplikací shodných korekcí používaných ve standardní verzi makrokódu ANDREA. Zmenšením váhy korekcí by zřejmě došlo k snížení nadhodnocení predikce koncentrace kyseliny borité na konci kampaně U1C13 vůči provozním datům a navíc by se vyřešil problém s mírným zhoršením predikce výkonu ve srovnání s monitorovacím systémem aktivní zóny. Pro další vývoj programu ANDREA by bylo velice vhodné použít v rekonstrukci grupových konstant některou z metod zohledňující spektrální historii vyhořívání, neboť by mohlo být dosaženo lepší shody v predikci kritické koncentrace kyseliny borité. Navíc by použití uvedených metod v makrokódu ANDREA přineslo zpřesnění predikovaných veličin díky zohlednění pozorovaného fyzikálního jevu – spektrální historie vyhořívání. Dále by pro zvýšení shody predikovaných veličin s provozními daty nemusely mít uměle aplikované korekce tak velkou váhu.

Na základě výsledků prezentovaných v celé diplomové práci lze považovat stanovené cíle za splněné.

## Bibliografie

- VEJVODA, M. Explicitní model vyhořívání aktinoidů. Praha: České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, 2021. Výzkumný úkol. Vedoucí výzkumného úkolu Ing. František Havlůj, Ph.D. Dostupné také z: https://github.com/vejvomir/VU-2021/.
- WEMPLE, C. HELIOS-2 Methods Manual. 2011. SSP-11/452 Rev 1. Studsvik Scandpower.
- 3. HAVLŮJ, F. *QUADRIGA: popis systému a uživatelský manuál.* 2009. Technická zpráva. ÚJV Z-13259.
- SKLENKA, Ľ.; HERALTOVÁ, L. Provozní reaktorová fyzika. Praha: České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, 2010. ISBN 978-80-01-05901-2.
- 5. VOČKA, R.; HAVLŮJ, F.; VYSOUDIL, J. *Popis metodiky programu ANDREA, R3.* 2019. Technická zpráva. ÚJV-Z-2631. ÚJV Řež, a.s.
- SZAMES, E.; TOMATIS, D. A review of history parameters in PWR core analysis. *Nuclear Engineering and Design* [online]. 2019, roč. 347, s. 158–174 [cit. 2022-01-12]. ISSN 0029-5493. Dostupné z DOI: 10.1016/j.nucengdes.2019.03.012.
- TOMATIS, D. et al. Quantification of history effects in PWR modelling. *Nuclear Engineering and Design* [online]. 2017, vol. 325, s. 205–217 [cit. 2022-03-22]. ISSN 00295493. Dostupné z DOI: 10.1016/j.nucengdes.2017.08.022.
- 8. BILODID, Y. Spectral History Modeling In The Reactor Dynamics Code DYN3D [online]. 2014 [cit. 2022-03-01]. Vědecko-technická zpráva. HZDR-051. Dostupné z: https: //inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/\_Public/46/021/ 46021401.pdf?r=1&r=1.
- REMPE, K. R.; SMITH, K. S.; HENRY, A. F. SIMULATE-3 Pin Power Reconstruction: Methodology and Benchmarking. *Nuclear Science and Engineering* [online]. 1989, vol. 103, no. 4, s. 334–342 [cit. 2022-03-22]. ISSN 0029-5639, 1943-748X. ISSN 0029-5639, 1943-748X. Dostupné z DOI: 10.13182/NSE89–A23686.
- LEE, C. H. et al. Incorporation of a New Spectral History Correction Method into Local Power Reconstruction for Nodal Methods. *Nuclear Science and Engineering* [online]. 1996, vol. 124, no. 1, s. 160–166 [cit. 2022-03-22]. ISSN 0029-5639, 1943-748X. ISSN 0029-5639, 1943-748X. Dostupné z DOI: 10.13182/NSE96-A24231.
- FUJITA, T.; ENDO, T.; YAMAMOTO, A. A macroscopic cross-section model for BWR pin-by-pin core analysis. *Journal of Nuclear Science and Technology* [online]. 2014, vol. 51, no. 3, s. 282–304 [cit. 2022-04-03]. ISSN 0022-3131, 1881-1248. ISSN 0022-3131, 1881-1248. Dostupné z DOI: 10.1080/00223131.2014.864248.

- 12. CABELLOS, O.; AHNERT, C.; ARAGONES, J. Generalized effects in two-group cross sections and discontinuity factors for PWR's. In: Japan, 1996, s. 615. INIS Reference Number: 28021777.
- BILODID, I.; MITTAG, S. Use of the local Pu-239 concentration as an indicator of burnup spectral history in DYN3D. *Annals of Nuclear Energy* [online]. 2010, vol. 37, no. 9, s. 1208–1213 [cit. 2020-11-19]. ISSN 0306-4549. Dostupné z DOI: 10.1016/j. anucene.2010.04.019.
- BATURIN, D. M.; VYGOVSKII, S. B. Taking account of the spectral history of fuel burnup during the preparation of the neutron-physical constants for VVER-1000 fuel assemblies. *Atomic Energy* [online]. 2001, roč. 90, č. 4, s. 267–272 [cit. 2022-01-17]. ISSN 10634258. Dostupné z DOI: 10.1023/A:1011369130707.
- 15. 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.
- BAHADIR, T. Modeling of shutdown cooling reactivity effects with SIMULATE. In: Proceedings of the International Conference on Physics of Reactors (PHYSOR 2014). Japan, 2015, sv. JAEA-Conf 2014-003, s. 12. Dostupné z DOI: https://doi.org/10. 11484/jaea-conf-2014-003.
- 17. 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.
- 18. HEJZLAR, J.; VOČKA, R.; HAVLŮJ, F. Kvalifikace výpočetního programu ANDREA, verze 2.3. 2019. Technická zpráva. ÚJV Z-5158. ÚJV Řež, a.s.
- 19. HAVLŮJ, F.; VOČKA, R. *ANDREA v2.1 developer documentation*. 2013. Nuclear Research Institute at Řež.
- 20. HAVLŮJ, F.; VOČKA, R. *Andrea data libraries system*. 2015. Technical report. ÚJV-ORF-2015-018. Nuclear Research Institute at Řež.
- 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. 2022-02-17]. ISBN 978-0-387-98149-9. Dostupné z DOI: 10.1007/978-0-387-98149-9\_9.
- 22. VOČKA, R. Deník údržby programu HELIOS. 2022. ÚJV Řež, a.s.
- LEPPÄNEN, J.; PUSA, M.; FRIDMAN, E. Overview of methodology for spatial homogenization in the Serpent 2 Monte Carlo code. *Annals of Nuclear Energy* [online]. 2016, vol. 96, s. 126–136 [cit. 2022-02-22]. ISSN 0306-4549. Dostupné z DOI: 10.1016/j.anucene.2016.06.007.
- 24. FRÝBORT, J. *Numerická řešení transportní rovnice*. Přednášky k předmětu Deterministické metody v reaktorové fyzice. České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderných reaktorů, 2021.
- 25. VALENTA, P. Tutorial 05 Function approximation 12NME1 Numerical methods [online]. 2021 [cit. 2022-04-19]. Dostupné z: https://valenpe7.github.io/ numerical\_methods/tutorials/05-interpolation.html.
- 26. MIKISEK, M. Core Specification for NF Calculations. 2022. Technical report. ÚJV-ORF-2015-009. ÚJV Řež, a.s.
- 27. HAVLŮJ, F.; HEJZLAR, J.; VOČKA, R. *ANDREA data libraries. VVER-1000/TVSA-T*. 2021. Nuclear Research Institute at Řež.

# Přílohy

### Příloha A

## Značení palivových souborů

V následujícím textu bude stručně vysvětlena konvence používaná na pracovišti ORF ÚJV Řež pro označování palivových souborů reaktoru VVER-1000 pro JE Temelín. Níže uvedené značení využívá toho, že většina palivových souborů disponuje pravidelným vzorem s nejvýše dvěma typy obohacení v palivových proutcích bez vyhořívajících absorbátorů. Je nutné poznamenat, že níže uvedené značení popisuje pouze standardně používané palivové soubory a taktéž nezahrnuje palivo pro 18měsíční palivový cyklus, ve kterém se uplatňuje složitější radiální profilace [26].

Značení palivových souborů obsahuje 4 až 7 znaků, přičemž poslední z nich je volitelný. Používaná konvence bude vysvětlena na příkladu palivového souboru

a44E6a,

kde

1. znak označuje design paliva, přičemž přípustné jsou následující znaky, které označují

- a původní ruské palivo TVSA-T,
- b mod1 TVSA-T,
- c mod2 TVSA-T,
- d americké palivo LTA společnosti WEC.
- 2. a 3. znak uvádí obohacení palivových proutků nacházejících se v neperiferních pozicích palivového souboru, které je vynásobeno faktorem 10. Pro výše uvedený příklad odpovídá obohacení 4,4 hm%.
- 4. znak označuje radiální profilaci palivových proutků bez vyhořívajících absorbátorů, přičemž standardně jsou používány znaky A až K, které popisují rozdíl v obohacení periferních palivových proutků oproti centrálním, tedy A: 0,0 hm%, B: 0,1 hm% až K: 1,0 hm%. Na popisovaném příkladu mají periferní palivové proutky o 0,4 hm% nižší obohacení než neperiferní, což je také patrné z obrázku A.1d.
- 5., resp. 5. a 6. znak značí počet proutků s vyhořívajícím absorbátorem v palivovém souboru. Ve výše uvedeném příkladu obsahuje palivový soubor 6 proutků s vyhořívajícím absorbátorem.
- 7. volitelný znak popisuje umístění a obohacení palivových proutků s vyhořívajícím absorbátorem. Pokud není znak uveden, předpokládá se nejběžnější vzor umístění a

obohacení. Podrobný popis pro ostatní znaky lze nalézt v technické zprávě [26]. Obrázek A.1d ukazuje, že na popisovaném příkladu jsou umístěny proutky s vyhořívajícím absorbátorem u rohových pozic, jejich obohacení je 3,6 hm% a podíl vyhořívajícího absorbátoru je 5 hm%.



Obrázek A.1: Radiální řezy palivovými soubory TVSA-T použitými v modelových scénářích vyhořívání. Převzato z [27]
## Příloha B

# Radiální profily rozložení výkonu pro kampaně U1C09 a U1C13

B.1 Kampaň U1C09 – BOC



Zona: ete-u1-c09, Teff = 22.51 EFPD / ANDREA

Obrázek B.1: Radiální profil absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu PS při použití standardní verze programu ANDREA pro kampaň U1C09 na BOC



Zona: ete-u1-c09, Teff = 22.51 EFPD / ANDREA-Pu239

Obrázek B.2: Radiální profil absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu PS při použití verze programu ANDREA-<sup>239</sup>Pu pro kampaň U1C09 na BOC



Zona: ete-u1-c09, Teff = 22.51 EFPD / ANDREA-SI

Obrázek B.3: Radiální profil absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu PS při použití verze programu ANDREA-SI pro kampaň U1C09 na BOC

### B.2 Kampaň U1C09 – EOC



Zona: ete-u1-c09, Teff = 272.31 EFPD / ANDREA

Obrázek B.4: Radiální profil absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu PS při použití standardní verze programu ANDREA pro kampaň U1C09 na EOC



Zona: ete-u1-c09, Teff = 272.31 EFPD / ANDREA-Pu239

Obrázek B.5: Radiální profil absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu PS při použití verze programu ANDREA-<sup>239</sup>Pu pro kampaň U1C09 na EOC



Zona: ete-u1-c09, Teff = 272.31 EFPD / ANDREA-SI

Obrázek B.6: Radiální profil absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu PS při použití verze programu ANDREA-SI pro kampaň U1C09 na EOC

#### B.3 Kampaň U1C13 – BOC



Zona: ete-u1-c13, Teff = 5.91 EFPD / ANDREA

Obrázek B.7: Radiální profil absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu PS při použití standardní verze programu ANDREA pro kampaň U1C13 na BOC



Zona: ete-u1-c13, Teff = 5.91 EFPD / ANDREA-Pu239

Obrázek B.8: Radiální profil absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu PS při použití verze programu ANDREA-<sup>239</sup>Pu pro kampaň U1C13 na BOC



Zona: ete-u1-c13, Teff = 5.91 EFPD / ANDREA-SI

Obrázek B.9: Radiální profil absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu PS při použití verze programu ANDREA-SI pro kampaň U1C13 na BOC

### B.4 Kampaň U1C13 – EOC



Zona: ete-u1-c13, Teff = 300.63 EFPD / ANDREA

Obrázek B.10: Radiální profil absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu PS při použití standardní verze programu ANDREA pro kampaň U1C13 na EOC



Zona: ete-u1-c13, Teff = 300.63 EFPD / ANDREA-Pu239

Obrázek B.11: Radiální profil absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu PS při použití verze programu ANDREA-<sup>239</sup>Pu pro kampaň U1C13 na EOC



Zona: ete-u1-c13, Teff = 300.63 EFPD / ANDREA-SI

Obrázek B.12: Radiální profil absolutních odchylek predikovaného a monitorovaného výkonu PS při použití verze programu ANDREA-SI pro kampaň U1C13 na EOC