



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE

FAKULTA STROJNÍ

Ústav energetiky

Použití ThO₂ ke zvýšení tepelné vodivosti LWR paliv

ThO₂ improving thermal conductivity of LWR fuels

diplomová práce

Jan Kubáň

2016

studijní program: Jaderná energetická zařízení

vedoucí práce: doc. Ing. Radek Škoda, Ph.D.

Zadání diplomové práce

rok: 2015/2016
pro: Bc. Jan KUBÁŇ
program: Jaderná energetická zařízení

Název tématu: Použití ThO₂ ke zvýšení tepelné vodivosti LWR paliv
Title: ThO₂ improving thermal conductivity of LWR fuels

Zásady pro vypracování:

Na základě dat z modelu UWB1 navrhňte nové jaderné palivo na bázi UO₂ a ThO₂, které bude též zlepšovat tepelnou vodivost. Provedte ekonomické zhodnocení pro Vámi vybraný jaderný reaktor. Vyjděte ze stávající literatury a ze zkušeností z modelem UWB1.

Vedoucí diplomové práce: doc. Ing. Radek Škoda, Ph.D.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci vypracoval samostatně a použil jsem pouze podklady (literaturu, projekty, SW atd.) uvedené v příloženém seznamu.

Nemám závažný důvod proti užití tohoto školního díla ve smyslu § 60 zákona c. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon).

V Praze dne

Bc. Jan Kubáň

Anotáční list

Jméno autora:	Jan Kubáň
Název DP:	Použití ThO ₂ ke zvýšení tepelné vodivosti LWR paliv
Anglický název:	ThO ₂ improving thermal conductivity of LWR fuels
Akademický rok:	2015/2016
Ústav/Obor:	Ústav energetiky/Jaderná energetická zařízení
Vedoucí DP:	doc. Ing. Radek Škoda, Ph.D.
Bibliografické údaje:	Počet stran: 85 Počet obrázků: 35 Počet tabulek: 7 Počet příloh: 7
Klíčová slova:	ThO ₂ , thorium, tepelná vodivost, UWB1, Serpent
Keywords:	ThO ₂ , thorium, thermal conductivity, UWB1, Serpent
Anotace:	Práce se zabývá využitím thoria v jaderném palivu lehkovodních reaktorů za účelem snížení provozních teplot jaderných paliv. Výpočty jsou rozděleny na neutronicou část, kde je zkoumán vliv na neutronovou bilanci reaktoru VVER-1000, a tepelnou část, kde je simulováno sdílení tepla a vliv na maximální teplotu v palivu. V závěru je provedena analýza cen navrhovaných paliv.
Abstract:	This thesis deals with the use of thorium in of light water reactors nuclear fuels with the objective of fuel operating temperatures reduction. Calculations are divided into neutronics, investigating the impact on VVER-1000 reactor neutron balance, and thermal, studying heat transfer and its impact on maximal fuel temperature. Cost analysis of proposed fuels is also included.

Poděkování

Děkuji svému vedoucímu doc. Ing. Radkovi Škodovi, Ph.D. za velice cenné rady a náměty, díky kterým bylo možné práci neustále rozvíjet o nové nápady. Také moc děkuji za velikou ochotu při konzultacích a prosbách o pomoc.

Děkuji také svým rodičům a celé své rodině za podporu, kterou mi během celého studia poskytly.

Obsah

Úvod	1
1. Produkce a sdílení tepla v jaderném palivu.....	2
1.1. Štěpná řetězová reakce	2
1.2. Sdílení tepla mezi palivem a chladičem	4
2. Thorium	8
2.1. ThO_2	9
2.2. Kovové thorium	10
2.3. ThC a ThC_2	11
3. Vliv thoria na neutronovou bilanci reaktoru	12
3.1. $U_W B_1$	12
3.1.1. Vstupní soubor	13
3.1.2. Výsledky.....	15
3.1.3. Validace výsledků	17
3.2. Serpent	17
3.2.1. Výsledky.....	17
3.3. Porovnání výsledků v kódech $U_W B_1$ a Serpent.....	19
3.4. Vliv thoria na multiplikační koeficient.....	19
4. Tepelné výpočty	22
4.1. Výpočetní kód.....	23
4.1.1. Princip.....	23
4.1.2. Sdílení tepla zářením	25
4.1.3. Tepelný kontaktní odpor	25
4.1.4. Rozměry a parametry sítě	28
4.1.5. Tepelná vodivost použitých materiálů	29

4.1.6.	Okrajové podmínky a měrný výkon.....	29
4.1.7.	Zjednodušení a předpoklady výpočtu	31
4.2.	Homogenní rozložení thoria	32
4.3.	Heterogenní rozložení thoria	36
4.3.1.	ThO ₂	37
4.3.2.	Kovové thorium	39
4.3.3.	Kovové thorium s větším průměrem vrstvy	40
4.3.4.	Porovnání tepla uloženého v palivu	51
4.3.5.	Možné problémy konceptu	54
5.	Výpočet nákladů.....	56
5.1.	Náročnější obohacovací proces.....	56
5.2.	Menší potřeba UO ₂	57
5.3.	Cena thoria	58
5.4.	Vyšší náklady fabrikace.....	58
5.4.1.	Palivo s kovovým thoriem	58
5.4.2.	Palivo ThO ₂ -UO ₂	59
5.5.	Celkové navýšení ceny.....	59
6.	Shrnutí výsledků	60
Závěr.....		61
Přílohy.....		62
1.	Zdrojový kód U _{WB1}	62
2.	Zdrojový kód Serpent	64
3.	U _{WB1} – výsledky k _{inf} pro různé koncentrace ThO ₂	66
4.	U _{WB1} – výsledky k _{inf} pro různé koncentrace Th	68
5.	Serpent – výsledky k _{inf} pro různé koncentrace ThO ₂	70
6.	Serpent – výsledky k _{inf} pro různé koncentrace Th.....	72

7. Výpočetní kód.....	74
Seznam použitých zdrojů.....	82
Seznam obrázků	84

Úvod

Jaderná energie i přes svůj velký potenciál čelí v současné době některým obtížím, které brání stavbě nových zdrojů a to zejména v zemích Evropy. Jsou jimi hlavně vysoké investiční náklady na stavbu nové elektrárny, ale také negativní postoj některých zemí k využívání tohoto zdroje. Změna takového uvažování bude vyžadovat dlouhodobé spolehlivé využívání reaktorů, ale také nedostatek jiných zdrojů energie, které vyústí v nutnost využití jaderné energie ve větším měřítku. S investičními náklady lze však pracovat již nyní, a to optimalizací návrhu jaderného reaktoru a celé elektrárny.

Hlavní nevýhodou oxidu uraničitého (UO_2), který se v současnosti používá jako palivo prakticky ve všech energetických jaderných reaktorech, je jeho nízký koeficient tepelné vodivosti. Špatné vedení tepla pak způsobuje vysoké teploty paliva, které uprostřed nejvytíženějších palivových pelet dosahují více než 1700°C . Aby se zabránilo tavení paliva za všech možných podmínek, je třeba nastavit určitou mezní hodnotu měrného výkonu zaručující potřebné uchlazení paliva. Omezení měrného výkonu však způsobuje snížení celkového výkonu nebo zvětšení reaktoru, což je spojeno s nižší produkcí tepla, respektive s vyššími investičními náklady.

Tato práce si klade za cíl zhodnotit využití thoria ve formě oxidu thoričitého (ThO_2) ke zvýšení tepelné vodivosti paliv lehkovodních reaktorů. Vzhledem k obtížím využití homogenní směsi $\text{ThO}_2\text{-UO}_2$ o vysokém obsahu ThO_2 jsou navrženy i další možnosti začlenění thoria do stávajících paliv. V práci je zkoumáno také heterogenní rozmístění oxidu thoričitého ve stávajícím palivu, ve formě střídajících se pelet uranu a thoria. Kromě oxidu thoria je později navrženo také využití kovového thoria, které vyniká vysokým koeficientem tepelné vodivosti ve srovnání s oxidem.

Práce je rozdělena na základní popis produkce a sdílení tepla v jaderném reaktoru, neutronické výpočty, tepelné výpočty a finanční zhodnocení. V úvodní části je zjednodušeně vysvětlen princip produkce tepla v reaktoru, sdílení tepla z jaderného paliva do chladiva a důvod vysoké teploty paliva. V části neutronických výpočtů je zkoumán vliv přítomnosti thoria na bilanci neutronů v aktivní zóně, tedy jeho vliv na udržování štěpné řetězové reakce během vyhořívání paliva. V části tepelných výpočtů je popsán kód, který byl vytvořen v programovacím jazyce Python k řešení teplotního pole jaderného paliva. Dále jsou pro jednotlivé způsoby využití thoria vypočítána teplotní pole a jsou určeny maximální teploty v palivu. V poslední části jsou odhadnuty náklady na zkoumané typy paliv a porovnány s cenou stávajícího paliva. V závěru je provedeno porovnání benefitů jednotlivých způsobů využití thoria a jejich vliv na cenu paliva.

1. Produkce a sdílení tepla v jaderném palivu

Výroba elektrické energie je založena na přeměnách různých forem energie. Ve vodních a větrných elektrárnách přeměňujeme mechanickou energii média na energii elektrickou tak, že proudící voda, respektive vítr předávají energii rotoru, který pohání elektrický generátor vyrábějící elektřinu. V elektrárnách na fosilní paliva uvolňujeme spalováním chemickou energii vázanou v palivu. Pomocí uvolněného tepla vyrábíme páru, která pohání turbínu a ta roztáčí elektrický generátor. U jaderných elektráren místo chemické energie uvolňujeme jadernou energii vázanou v jádrech těžkých atomů. Kinetická energie částic, které vzniknou štěpením, se bržděním mění na energii tepelnou a tím dochází k ohřevu paliva. Palivo je chlazeno vodou nebo jiným médiem, které odvádí tepelnou energii primárním potrubím až do výměníku tepla, tzv. parogenerátoru, kde se generuje pára. Princip výroby elektrické energie z páry je pak shodný jako u klasických fosilních elektráren. Přítomnost radioaktivních látek v palivu však vyžaduje určitá opatření, aby nedošlo k jejich úniku mimo palivo.

Uvolňování chemické energie spalováním v kotli nebo ve spalovací komoře je principiálně omezeno rychlostí difúze kyslíku k povrchu paliva a odvodem produktů spalování od paliva. To znamená, že každý kotel nebo spalovací komora o určitém objemu má daný horní limit generace tepla za jednotku času. Po překročení tohoto limitu nadbytečné palivo prochází nezreagováno a více tepla se již neprodukuje. U jaderného paliva takové omezení principiálně neexistuje. Množství štěpných reakcí prakticky není omezeno, čehož je využito u jaderné bomby. Omezení objemové produkce tepla jaderného paliva je dáno dovolenými teplotami materiálů a schopností spolehlivě a bezpečně odvádět teplo chladivem primárního okruhu do sekundárního okruhu. Každý jaderný reaktor by tedy mohl produkovat více tepla, než produkuje nyní, a tím být ekonomičtější, pokud by to dovolily materiály a procesy přenosu tepla se zajištěním dostatečné bezpečnosti. [1]

1.1. Štěpná řetězová reakce

Teplo je v jaderném reaktoru produkováno štěpnými reakcemi některých těžkých izotopů, které se označují jako štěpné (U^{235} , U^{233} , Pu^{239} , Pu^{241}). Štěpná reakce je zahájena absorpcí neutronu jádrem

štěpného izotopu, pokračuje vytvořením mírně těžšího jádra s přebytkem energie a končí rozštěpením na dvě různá jádra, několik neutronů a vznikem gama záření. Hmotnost produktů reakce je mírně lehčí než původní jádro a podle Einsteinovy rovnice $E = \Delta m \cdot c^2$ se tento rozdíl hmoty přemění na energii. Tato energie se projevuje zejména jako kinetická energie štěpných trosek, případně dalších částic uvolněných při štěpení (neutrony, fotony...). Kinetická energie se v palivu téměř okamžitě mění na tepelnou energii vlivem brzdění o okolní látku. [2]

Z průměrných 2,5 neutronů uvolněných při každé reakci se některé parazitně absorbují v materiálech reaktoru, jiné jsou absorbovány neštěpnými izotopy paliva U238 (případně jinými izotopy), které se zachytem neutronu mohou přeměnit na štěpný izotop, a zbylé jednoduše opustí reaktor. Pokud je po těchto reakcích dostupný průměrně alespoň 1 neutron pro další štěpnou reakci, můžeme v reaktoru udržovat řetězovou štěpnou reakci a dlouhodobě produkovat tepelný výkon. Abychom dosáhli dostatečného počtu neutronů nutných pro další štěpení, je potřeba, aby určitou část paliva tvořily štěpné izotopy, které zlepšují neutronovou bilanci. Dnes se v energetických reaktorech využívá uranu obohaceného přibližně 3% izotopem U235, případně s určitým podílem izotopu Pu239 separovaným při přepracování použitého jaderného paliva (směsné palivo). [3]

K popisu vývoje štěpné řetězové reakce se používá multiplikační faktor k , který je definován podle rovnice 1 jako podíl počtu neutronů v jedné generaci k počtu neutronů v předcházející generaci. [3]

$$k = \frac{n_i}{n_{i-1}} \quad (1)$$

Stav, kdy $k = 1$, označujeme jako kritický, a odpovídá ustálenému stavu, kdy se počet neutronů nemění a výkon zůstává stejný. Při $k < 1$ se jedná o stav podkritický, kdy výkon reaktoru klesá, a naopak $k > 1$ popisuje stav nadkritický, kdy výkon reaktoru roste. Z rovnice lze vydedukovat, že kritický stav nezáleží na absolutním počtu neutronů, nýbrž na poměru neutronů v dvou následujících generacích, a tedy že kritický stav lze teoreticky udržovat při jakémkoliv výkonu reaktoru (určitá fyzikální omezení existují, ale prakticky jich nelze dosáhnout). Množství probíhajících štěpných reakcí je tedy v reálu omezeno maximálními teplotami materiálu, ze kterého je jaderné palivo vyrobeno, a požadavkem na odvod vznikajícího tepla do chladiva za podmínek, kdy tato teplota nebude překročena. [1] [3]

Velice zásadním rozdílem reaktoru od spalovacího kotle je, že v kotli s přerušením přívodu paliva okamžitě dochází k ukončení produkce tepla. V jaderném reaktoru je produkováno zbytkové teplo i po požadavku na odstavení, a to vlivem určité doby zapůsobení havarijních orgánů (vteřiny), zpožděných neutronů (desítky vteřin) a rozpadu štěpných produktů a transuranů (po nekonečně dlouho dobu). Při

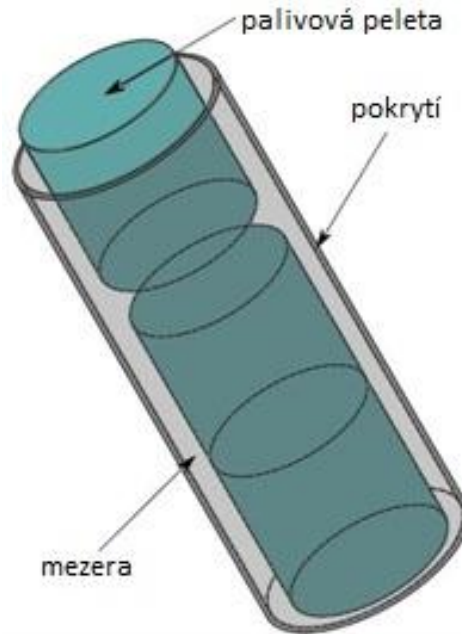
situaci, kdy dojde ke zhoršení podmínek chlazení, např. při výpadku HCČ (hlavních cirkulačních čerpadel), která cirkulují chladivo primárním okruhem, dojde během pár vteřin k odstavení reaktoru, nikoliv však k ukončení produkce tepla. Pro tento scénář je nutná určitá zásoba tepla do tavení paliva, než poklesne zbytkový výkon reaktoru pod určitou hodnotu, kterou je možné uchládit přirozenou cirkulací aktivní zóny. Provozní teplotu paliva tak nelze dimenzovat blízko teploty tavení, nýbrž tak, aby zde byla dostatečná rezerva pro různé situace, které teoreticky mohou nastat. [4]

1.2. Sdílení tepla mezi palivem a chladivem

Samotné jaderné palivo do naprosté většiny reaktorů se dnes vyrábí ve formě válečků (též pelet) vyrobených z oxidu uraničitého UO_2 . Pelety do lehkovodních reaktorů (LWR) mají dnes průměr přibližně 8mm a výšku přibližně 12mm [5]. Válečky jsou na sebe naskládány a umístěny do tenké trubičky dlouhé několik metrů, která se označuje jako pokrytí jaderného paliva.

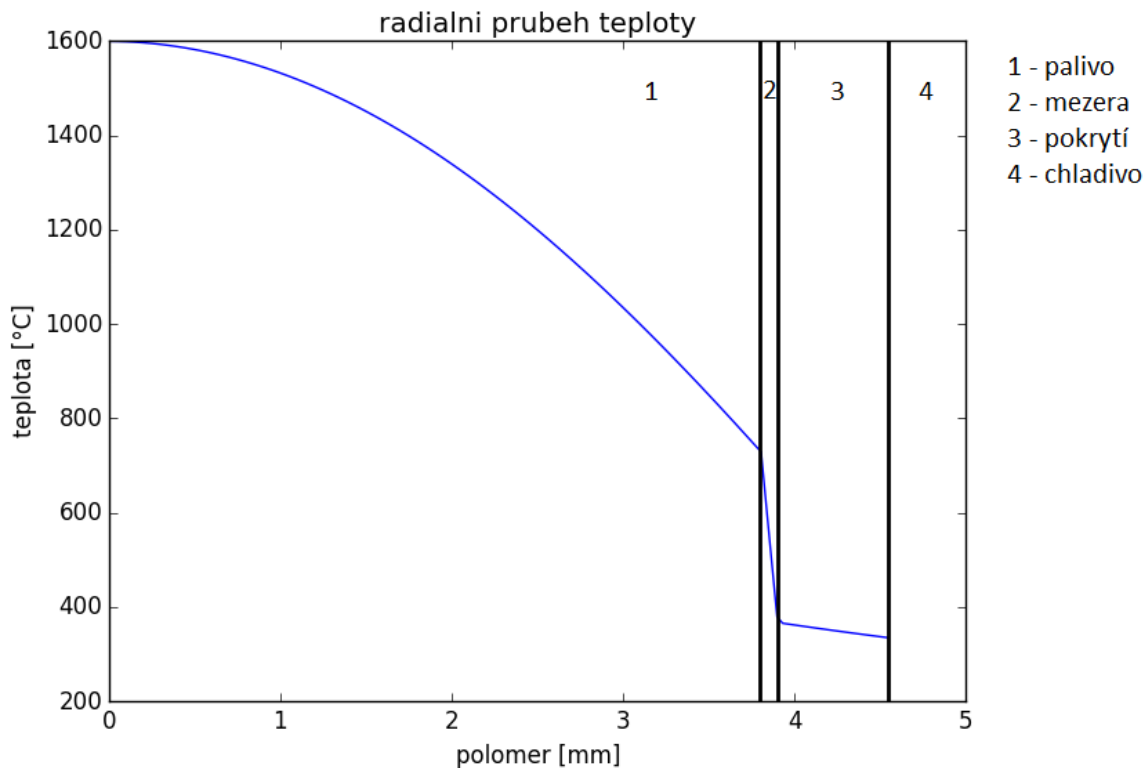
Pokrytí slouží k mechanické opoře samotného paliva a k hermetickému oddělení radioaktivních látek vznikajících v palivu od chladiva primárního okruhu. Při štěpení vznikají desítky různých prvků (stovky izotopů) jak v pevné, tak i v plynné formě. Většina z nich je držena v krystalické mřížce paliva, ale některé jsou uvolněny mimo palivo. Únik radioaktivních látek do okolí sebou přináší velice nebezpečná zdravotní rizika, ale i samotná přítomnost radioaktivních látek v primárním okruhu není přípustná a případná kontaminace sebou nese nutnost odstavení reaktoru, dekontaminace, řešení problému úniku a další časově i finančně náročné operace. Abychom zabránili přítomnosti radioaktivních látek v primárním okruhu, je nutné mezi palivo a chladivo primárního okruhu umístit fyzickou bariéru, kterou je právě pokrytí jaderného paliva. [1]

Mezi vnitřní stěnou pokrytí a válečky paliva je určitý prostor (mezera), který je vyplněn heliem a hermeticky uzavřen. Helium zde nahrazuje vzduch díky své lepší tepelné vodivosti a tím lépe odvádí teplo z paliva do pokrytí. Palivový proutek, jak se složená soustava nazývá, je zvenčí obtékán chladivem a tím je chlazen. Uložení pelet a heliovou mezeru schematicky ukazuje obr. 1.



obr. 1: schéma palivového proutku s palivem [6]

Mezera mezi palivem a pokrytím, široká asi 0,1mm, je projektována z důvodu zvětšování objemu paliva (tzv. napuchání) v průběhu kampaně. Při každém rozštěpení těžkého atomu vznikají dva atomy celkově většího objemu, z nichž některé jsou v plynné formě, a palivo tak zvětšuje svůj objem. Bez přítomnosti mezery by palivo brzy protrhlo palivový proutek a radioaktivní látky by byly uvolněny do chladiva, což je situace, které se při provozu jaderného reaktoru snažíme maximálně vyhnout. V průběhu vyhořívání paliva se vlivem napuchání mezera postupně zužuje, až dojde ke kontaktu paliva s pokrytím. V další fázi pak palivo silově působí na pokrytí a mechanicky jej roztahuje. Pokrytí je však pevnostně navrženo tak, aby dané vyhoření vydrželo. Nevýhodou mezery je, že je naplněna plynnými látkami, které obecně špatně vedou teplo. Na obr. 2 je vyobrazen typický radiální průběh teploty v čerstvém palivu, mezeře a pokrytí. Lze z něj snadno vidět, že palivo má relativně vysokou středovou teplotu, což je zapříčiněno z velké části přítomností mezery, kde na jedné desetíně milimetru je teplotní skok několika stovek stupňů. [1]

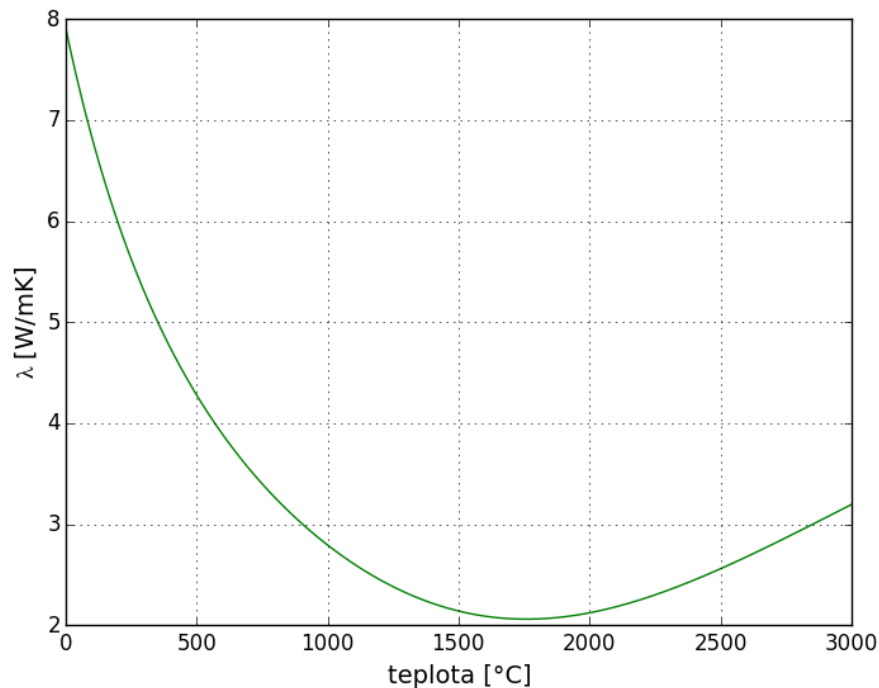


obr. 2: radiální průběh teploty v čerstvém palivu

Dalším faktorem, který ovlivňuje teplotu paliva, je jeho součinitel tepelné vodivosti λ . V dnešní době se v lehkovodních energetických reaktorech používá keramické palivo ve formě oxidu uranitého UO_2 . Tato forma uranu má své výhody i nevýhody. Jeho hlavními výhodami jsou vysoká teplota tání, přibližně 2350°C , radiační stabilita a relativně malé napuchání, které umožňuje vysoké vyhoření paliva. Jeho hlavní nevýhodou je složitá výroba paliva, relativně nízká hustota a nízký součinitel tepelné vodivosti při provozních teplotách, jak ukazuje obr. 3 (data z [7]). Oproti tomu kovová forma uranu, která se používala v minulosti zejména v reaktorech vyrábějících plutonium, má opačné vlastnosti. Kovový uran má nízkou teplotu tání, okolo 1100°C , vysokou hustotu, vysokou měrnou tepelnou vodivost a snadno se vyrábí. Jeho hlavní nevýhodou je však velmi vysoké napuchání, které zamezuje vysokému vyhoření a tím i jeho ekonomickému využití. [1]

Jedním z limitních parametrů, na které se jaderné palivo navrhuje, je jeho maximální teplota při provozu. Musí zde existovat určitá rezerva oproti teplotě tání, aby nedošlo k tavení paliva v případě zhoršení schopnosti chlazení vlivem neplánované události. Např. v palivových proutcích TVEL v reaktoru VVER-1000 je maximální teploty paliva dosaženo na počátku provozu vsázky a její hodnota činí 1703°C

[8]. Nepřesáhnutí stanovené teploty lze prakticky dosáhnout zejména zmenšováním průměru palivové pelety nebo snižováním objemového tepelného výkonu paliva. Oba dva faktory způsobují zdražování paliva. Zmenšování průměru znamená komplikovanější výrobu a nutnost výroby více palivových článků, případně menší množství paliva při stejné rozteči palivových proutků. Snižování objemového výkonu zase zvětšuje aktivní zónu, tím se zvyšuje množství paliva a dalších materiálů. Výrobní náročnost velkých komponent také neúměrně roste.

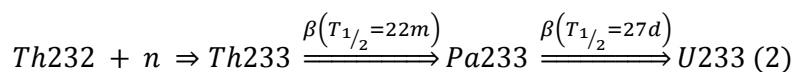


obr. 3: součinitel tepelné vodivosti UO_2 závislý na teplotě

Při návrhu reaktoru je tedy silná tendence zvyšovat objemový výkon za účelem snížení investičních nákladů. Z jaderně-fyzikálního hlediska omezení objemového výkonu prakticky neexistuje, jak bylo naznačeno na předchozích řádcích. Z hlediska materiálového a schopnosti chlazení je však nutné nastavit takové limity, které zajistí vysokou úroveň bezpečnosti a předejdou přehřátí paliva a uvolnění radioaktivních látek do okolí za všech možných podmínek. Část výzkumu a vývoje jaderného paliva se proto soustředí na možnosti snížení maximální teploty v palivu jako způsobu ke zvýšení objemového výkonu či zvýšení bezpečnosti.

2. Thorium

Thorium je těžký kov, který se v zemské kůře nachází v množství třikrát až čtyřikrát větším než uran. Izotopicky se vyskytuje prakticky v jediné formě, a to Th232. Th232 je množivý, nikoliv štěpný materiál, a tak samo o sobě není schopné vytvořit nebo udržet štěpnou řetězovou reakci. Jeho využití je tedy podmíněno přítomností štěpných izotopů např. U235, U233 nebo Pu239, kdy při vystavení neutronovému toku se thorium přeměňuje na štěpný izotop U233 podle reakce 2. Th232 a U233 jsou nejlepšími materiály pro množení, respektive štěpení v tepelném reaktoru. Problém tkví v mezikroku přeměny protaktinia na uran s poločasem rozpadu 27 dní. Pa233 je silný absorbátor neutronů a jeho přítomnost tak znesnadňuje udržování štěpné řetězové reakce. [9]



Několik experimentálních prototypových reaktorů bylo provozováno od poloviny padesátých do poloviny sedmdesátých let používajících palivo (Th,U)O₂ a (Th,U)C₂ ve vysokoteplotních plynem chlazených reaktorech HTGR, (Th,U)O₂ v lehkovodních reaktorech LWR a LiF/BeF₂/ThF₄/UF₄ v množivých reaktorech s tekutými solemi MSBR. ThO₂ byl úspěšně použit jako materiál množivého blanketu v rychlém reaktoru chlazeném tekutými kovy (LMFBR) a také pro vyrovnání neutronového toku čerstvé závážky těžkovodního reaktoru (PHWR). Tepelné množení thoria bylo demonstrováno pro palivo (Th,U)O₂ v lehkovodním množivém reaktoru LWBR v Shippingportu. Komerční využití thoriových paliv zatím nebylo realizováno, vzhledem k dostatku uranu a potřebě vysoce obohaceného štěpného materiálu při využití paliva s vysokou poměrovou částí thoria. [9]

V posledních letech došlo k opětovnému zvýšení zájmu o výzkum využití thoria v reaktorech kvůli následujícím vlastnostem [9]:

- proliferační odolnost (proti zneužití) kvůli přítomnosti U232 a jeho dceřiným produktům, z nichž některé jsou silné γ zářiče
- s mikroskopickým absorpčním průřezem pro zachyt tepelných neutronů 7,4 barnu je Th232 téměř 3x lepší množivý materiál pro tepelné množení než U238 s 2,7 barny
- lepší tepelně fyzikální vlastnosti a chemická stabilita ThO₂ v porovnání s UO₂, které zajišťují lepší provozní vlastnosti a stabilnější formu jaderného odpadu

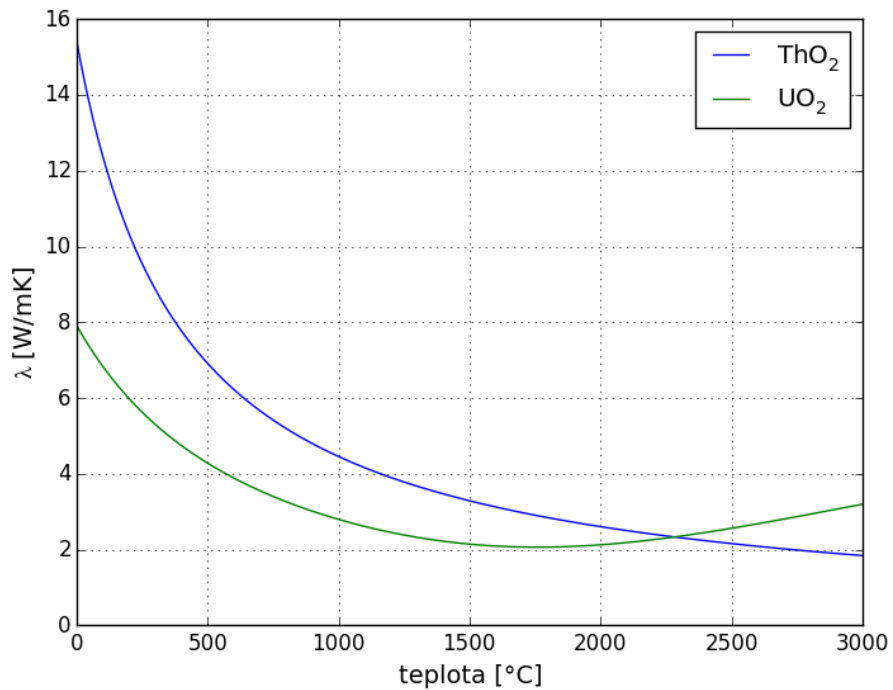
- uvolnění plynných produktů štěpení je o řád nižší než u UO_2
 - vyšší součinitel tepelné vodivosti a nižší koeficient tepelné roztažnosti v porovnání s UO_2
 - odolnost vůči oxidaci a tím výhodné chování pro dočasné i trvalé uskladnění
- menší množství minoritních aktinidů v porovnání s klasickým uranovým palivovým cyklem
- skvělé spalování plutonia v palivu $(\text{Th}, \text{Pu})\text{O}_2$ v porovnání s palivem $(\text{U}, \text{Pu})\text{O}_2$ (vhodné pro spalování vojenského plutonia)

V kontrastu těchto výhodných vlastností však existují vlastnosti nevýhodné nebo některé výzvy, které bude pro využívání thoria (zejména ThO_2) třeba vyřešit. Patří mezi ně např. špatná rozpustnost ThO_2 v kyselině dusičné, vysoká teplota tání a tím obtížná výroba i přepracování paliva s ThO_2 , vysoké gama záření spojené s některými dceřinými produkty U232 a přítomnost protaktinia Pa233 , které také vytváří jisté problémy. Jedním z nich je silná absorpce neutronů. [9]

Thorium lze v reaktoru využít v několika chemických formách. První formou je čisté kovové thorium, dalšími jsou sloučeniny thoria, např. oxid thoričitý ThO_2 nebo dikarbid thoria ThC_2 . Každá forma má své silné i slabé stránky.

2.1. ThO_2

Oxid thoričitý ThO_2 je s teplotou tání 3378°C jedním z nejvíce žáropevných materiálů [7]. Podobně jako UO_2 je radiačně stabilní a je možné jej z prášku vypékat s různou pórovitostí, čímž se dá předejít vysokému napučání. Jeho tepelná vodivost je vyšší než tepelná vodivost UO_2 až do zhruba 2250°C , jak ukazuje obr. 4 (data z [7]), čímž se stává materiálem teoreticky použitelným pro zvyšování tepelné vodivosti oxidických paliv. Vztahy použité pro průběh koeficientů tepelných vodivostí jsou uvedeny v kapitole 4.1.4. Mnohé z dalších vlastností oxidu thoričitého byly zmíněny na přecházejících řádcích v obecných vlastnostech thoria.



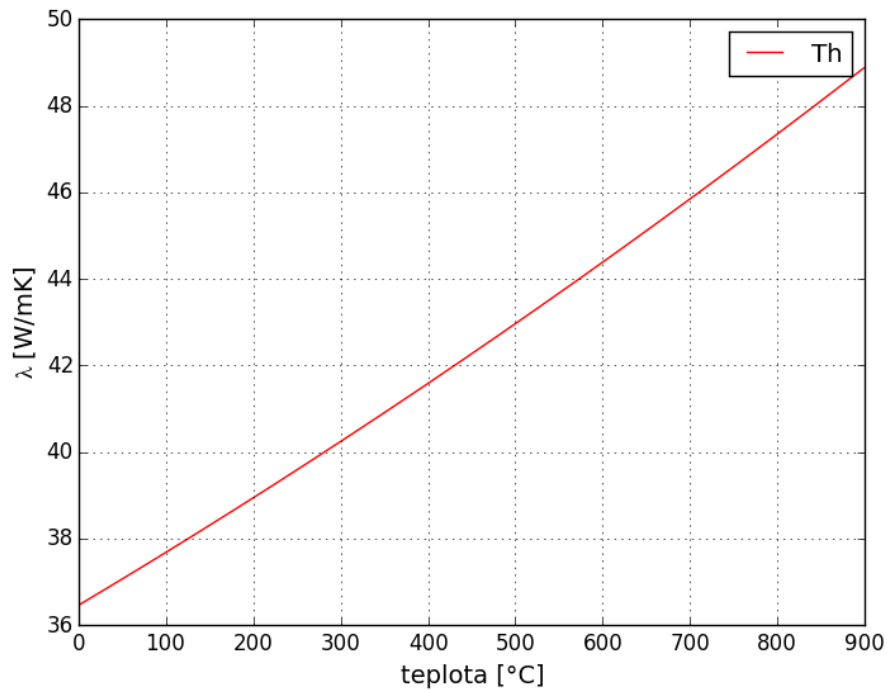
obr. 4: součinitel tepelné vodivosti ThO₂ a UO₂ závislý na teplotě

2.2. Kovové thorium

Kovové thorium je v mnoha ohledech výhodnější než kovový uran. Jeho teplota tání je přibližně 1750 °C a až do 1400 °C má plošně středěnou kubickou krystalickou mřížku, která je izotropní a tedy není náchylná na radiační růst. Díky této mřížce má thorium značně nižší hustotu (11,7 g/cm³) než kovový uran (19,7 g/cm³), což je u jaderného paliva nevýhoda [10]. Na druhou stranu napučá výrazně méně než uran, protože v mřížce je více místa pro atomy vznikající při štěpení. Slitiny thoria s uranem až do 20 % uranu vykazují dobré chování při ozařování. Napučání vzorků slitiny s 20% uranu bylo naměřeno ve výši 1-2% na 1% FIMA při 500 °C a 4% na 1% FIMA při 775 °C. Míru napučání čistého kovového thoria nebo thoria s nízkým podílem uranu se nepodařilo dohledat, což je dáno tím, že se tento materiál v reaktorech nepoužívá. Thorium je také 50-100 krát odolnější proti korozi ve vodě než kovový uran. [1]

Součinitel tepelné vodivosti pro kovové thorium byl naměřen pro několik různých teplot [11]. Z těchto hodnot byla pro potřebu tepelných výpočtů lineární aproximací určena funkce závislosti součinitele tepelné vodivosti na teplotě ve tvaru rovnice (3). Závislost je vynesena na obr. 5.

$$\lambda_{Th} = 36.465 + 0.012 \cdot T + 2 \cdot 10^{-6} \cdot T^2, \left[\frac{W}{mK} \right], T[^\circ C] \quad (3)$$



obr. 5: součinitel tepelné vodivosti kovového thoria

2.3. ThC a ThC₂

Teplota tání karbidu thoria je přibližně 2 500°C a dikarbidu thoria přibližně 2 640°C. Stejně jako karbidy uranu i karbidy thoria rychle reagují s vodou nebo s vlhkým vzduchem a musí být před vlhkostí chráněny během výroby i skladování. Tato forma thoria byla použita v některých vysokoteplotních plynem chlazených reaktorech většinou smíchaná s dikarbidem uranu UC₂. [11]

Hodnoty součinitele tepelné vodivosti pro ThC byly naměřeny (W/mK) dle [12]: 8.4 při 200°C, 7.9 při 300°C, 7.9 pro 400°C. Pro ThC₂ byly naměřeny hodnoty 23.4 při 200°C, 20.9 při 300°C a 20.5 při 400°C [12]. Lze vidět, že dikarbid thoria vede teplo velice dobře ve srovnání např. s ThO₂.

3. Vliv thoria na neutronovou bilanci reaktoru

Jednou ze zásadních vlastností, které určují možnost využití materiálu v aktivní zóně reaktoru, je jeho vliv na neutronovou bilanci. Materiál může mít sebelepší vliv na mechanické, fyzikální nebo chemické vlastnosti paliva, ale pokud neumožní efektivní udržování štěpné řetězové reakce a bude mít příliš negativní vliv na neutronovou bilanci, nebude jej možné v reaktoru s úspěchem využít. Přitom se nemusí jednat jen o vlastnosti prvku nebo izotopu, který do paliva umístíme. Vlivem neutronového záření vzniká z daného izotopu různými jadernými reakcemi (štěpením, záchytem, rozpadem) postupně mnoho izotopů, z nichž kterýkoliv může mít na bilanci neutronů velký vliv.

K analýze neutronové bilance a složení paliva během vyhořívání se nejčastěji využívají kódy založené na metodě Monte Carlo. Příkladem může být známý kód MCNP (Monte Carlo N-Particle Transport Code), což je univerzální software určený k simulaci široké škály jaderných procesů vyvíjený od konce 60. let v USA v národních laboratořích Los Alamos. Tyto stochastické kódy provádějí simulace jednotlivých částic a výsledné očekávané chování těchto částic je pak určeno statisticky z průměrného chování těchto částic během simulace. Z toho plyne, že výpočty v těchto typech kódů jsou velice výpočetně a tedy i časově náročné. [13] [14]

3.1. $U_w B_1$

K analýze vlivu thoria na neutronovou bilanci byl použit kód $U_w B_1$, poměrně nedávno vyvinutý na západočeské univerzitě v Plzni. $U_w B_1$ nevyužívá k řešení transportních rovnic stochastickou metodu Monte Carlo, ale analyticky řeší Batemanovy rovnice pro omezený počet časových intervalů, na které je doba pobytu paliva v reaktoru rozdělena. Batemanovy rovnice, které popisují změnu koncentrace jednotlivých izotopů v palivu, mají v obecném tvaru formu:

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_j l_{ij} \lambda_j N_j + \varphi \sum_j f_{ij} \sigma_j N_j - \lambda_i N_i - \varphi \sigma_i N_i \quad (4),$$

kde $\sum_j l_{ij} \lambda_j N_j$ popisuje tvorbu nuklidu N_i rozpadem nuklidu N_j , $\varphi \sum_j f_{ij} \sigma_j N_j$ popisuje tvorbu nuklidu N_i absorpční reakcí, $-\lambda_i N_i$ popisuje zánik nuklidu N_i jeho rozpadem a $-\varphi \sigma_i N_i$ popisuje zánik nuklidu N_i absorpční reakcí. Batemanovy rovnice jsou řešeny pro 3820 nuklidů přítomných v knihovně jaderných

dat ENDF/B-VII.1. Rovnice jsou řešeny pro omezený počet časových kroků, během kterých jaderné vlastnosti a neutronový tok zůstávají konstantní, aby bylo možné řešit soustavu diferenciálních rovnic s konstantními koeficienty. Různé časové kroky jsou vybrány pro přesné modelování vyhořívání a tvorby nuklidů v jaderném palivu. Výsledkem výpočtu jsou koncentrace všech 3820 nuklidů po každém časovém kroku a hodnota koeficientu násobení k_{inf} , který určuje zásobu nebo nedostatek reaktivity v palivu nekonečného reaktoru. To umožní velké zrychlení celého výpočtu vyhoření vůči současně používaným kódům s minimálním vlivem na přesnost výpočtu. Vyhoření jedné vsázky je pak možné na běžném osobním počítači spočítat v čase kratším než jedna hodina. [15]

3.1.1. Vstupní soubor

Složení paliva je ve vstupním souboru nutné definovat atomovou hustotou. Výpočet atomových hustot jednotlivých izotopů je prováděn následně popsáním postupem.

Při určování hmotnostních koncentrací jednotlivých izotopů U238, U235, Th232 a O16 v palivu bylo uvažováno nahrazení určité části uranu 238 thoriem 232. Množství štěpného izotopu U235 tak zůstává konstantní. Toho však v praxi nelze dosáhnout jinak, než vytvořením obohacenější směsi uranu izotopem 235 a následného přidání thoria, či oxidu thoričitého. Nové obohacení uranu lze pak podle zadané koncentrace přidaného materiálu určit podle rovnice 5.

$$e_{235,1} = \frac{e_{235,0}}{1 - e_{Th}} \quad (5),$$

kde $e_{235,1}$ je nové obohacení U235, $e_{235,0}$ je původní obhacení U235 a e_{Th} je objemový podíl thoria či oxidu thoričitého. Lze provést vzorový výpočet např. pro objemový podíl thoria 5 a 10% a počáteční obohacení U235 5%.

$$e_{235,1} = \frac{5}{1 - 0.05} = 5,263\%$$

$$e_{235,1} = \frac{5}{1 - 0.10} = 5,555\%$$

Je zřejmé, že takovéto palivo s obohacenějším uranem bude dražší navzdory stejnému absolutnímu množství U235. To je dáno zvýšenou prací obohacovacích zařízení pro dosažení většího obohacení. Finanční vliv na výrobu je rozebrán v kapitole 0.

Předpokládejme následující zadání objemového složení paliva:

- $w_{U235O2} = 0,05$; U235 ve formě UO_2
- $w_{ThO2} = 0,04$; Th232 ve formě ThO_2
- $w_{U238O2} = 0,91$; U238 ve formě UO_2

Dále jsou k výpočtu potřeba hustoty (uvažovány jako 95% teoretické hustoty [7]), atomové hmotnosti jednotlivých izotopů, a také Avogadrova konstanta.

- $\rho_{UO2} = 10,4 gcm^{-3}$; hustota UO_2 [9]
- $\rho_{ThO2} = 9,5 gcm^{-3}$; hustota ThO_2 [9]
- $N_A = 0,602214199 at mol^{-1} cm^{-2} b^{-1}$; Avogadrova konstanta [16]
- $M[g mol^{-1}]$; atomové hmotnosti jednotlivých izotopů vztahované k hmotnosti neutronů

Samotný výpočet pak probíhá následovně:

- objemový podíl U235:

$$w_{U235} = w_{U235O2} \cdot \frac{M_{U235}}{M_{U235} + 2 \cdot M_{O16}} = 0,05 \frac{235,044}{235,044 + 2 \cdot 15,995} = 0,04401$$

- výsledná hustota směsného paliva:

$$\rho = (1 - w_{ThO2}) \cdot \rho_{UO2} + w_{ThO2} \cdot \rho_{ThO2} = (1 - 0,04) \cdot 10,4 + 0,04 \cdot 9,5 = 10,368 gcm^{-3}$$

- atomová hustota U235:

$$N_{U235} = \frac{\rho \cdot N_A \cdot w_{U235}}{M_{U235}} = \frac{10,368 \cdot 0,602214 \cdot 0,04401}{235,044} = 1,16910E - 03 at cm^{-1} barn^{-1}$$

Podobně byly vypočítány atomové hustoty pro U238, O16 a Th232, a to pro různé hmotnostní koncentrace Th i ThO_2 v palivu. Izotopické složení moderátoru a pokrytí bylo ponecháno ze vzorových vstupních souborů kódu U_wB_1 pro reaktor VVER-1000. Koncentrace bóru v tomto případě odpovídá 650ppm a je držena po celou dobu výpočtu. To je také hlavním důvodem, proč multiplikační koeficient k_{inf} klesá pod hodnotu 1 relativně za nízkého vyhoření i přes uvažované obohacení 5% U235, ačkoliv průměrné obohacení U235 v reaktoru VVER-1000 je okolo 3%. Cílem výpočtu však není spočítat přesnou hodnotu k_{eff} pro daný reaktor a určité složení paliva, nicméně získat představu o tom, co se děje s materiálem v palivu pod daným neutronovým tokem a jaký vliv tyto materiály mají na průběh

multiplikačního koeficientu. K tomuto účelu je dostačující využít výpočtů nekonečné mříže s geometrickými parametry mříže paliva reaktoru VVER-1000.

Rozměry paliva a palivové mříže byly definovány podle současného paliva reaktoru TVSAT VVER-1000 [17]:

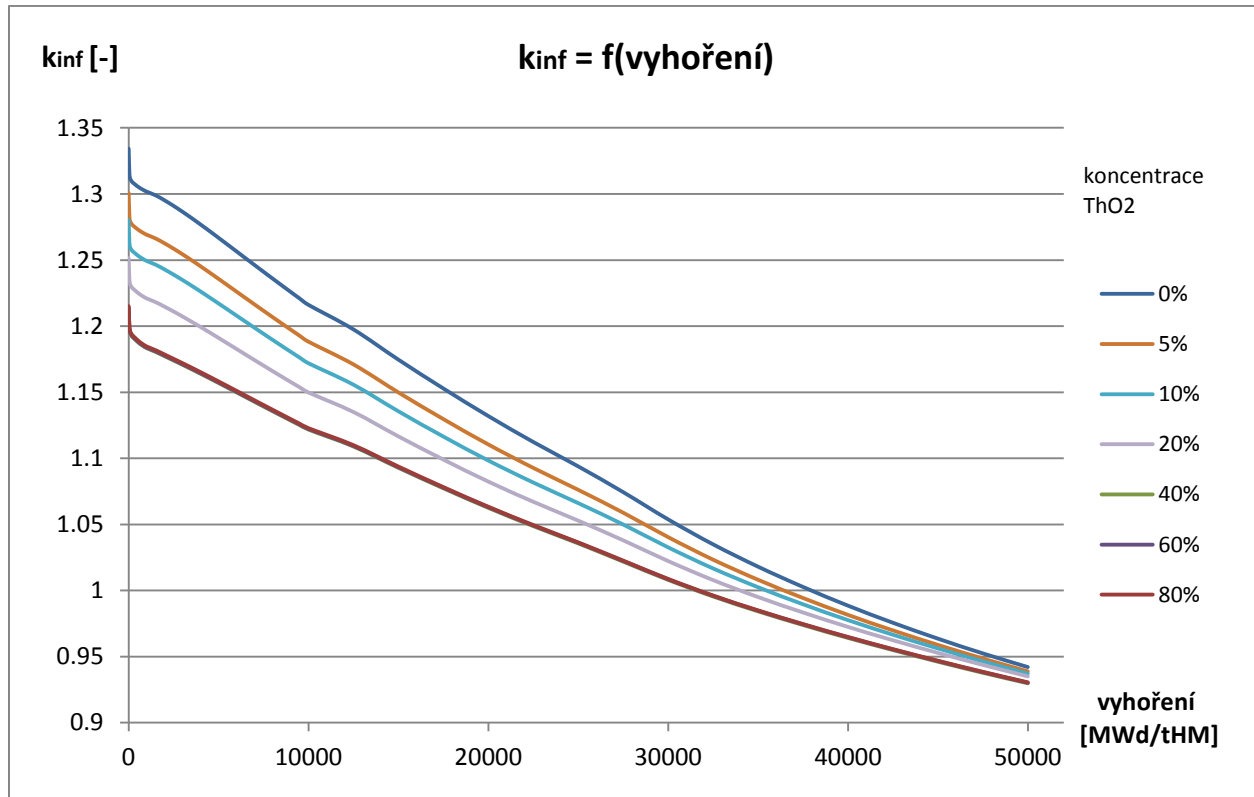
- $R_{FO} = 3,8 \text{ mm}$, poloměr palivové pelety
- $R_{CI} = 3,9 \text{ mm}$, vnitřní poloměr pokrytí
- $R_{CO} = 4,55 \text{ mm}$, vnější poloměr pokrytí
- $p = 1,275 \text{ cm}$, rozteč palivových proutků
- trojúhelníková mříž

Příklad vstupního souboru lze vidět v příloze 1. Všechny vstupní soubory jsou pak uloženy na přiloženém CD.

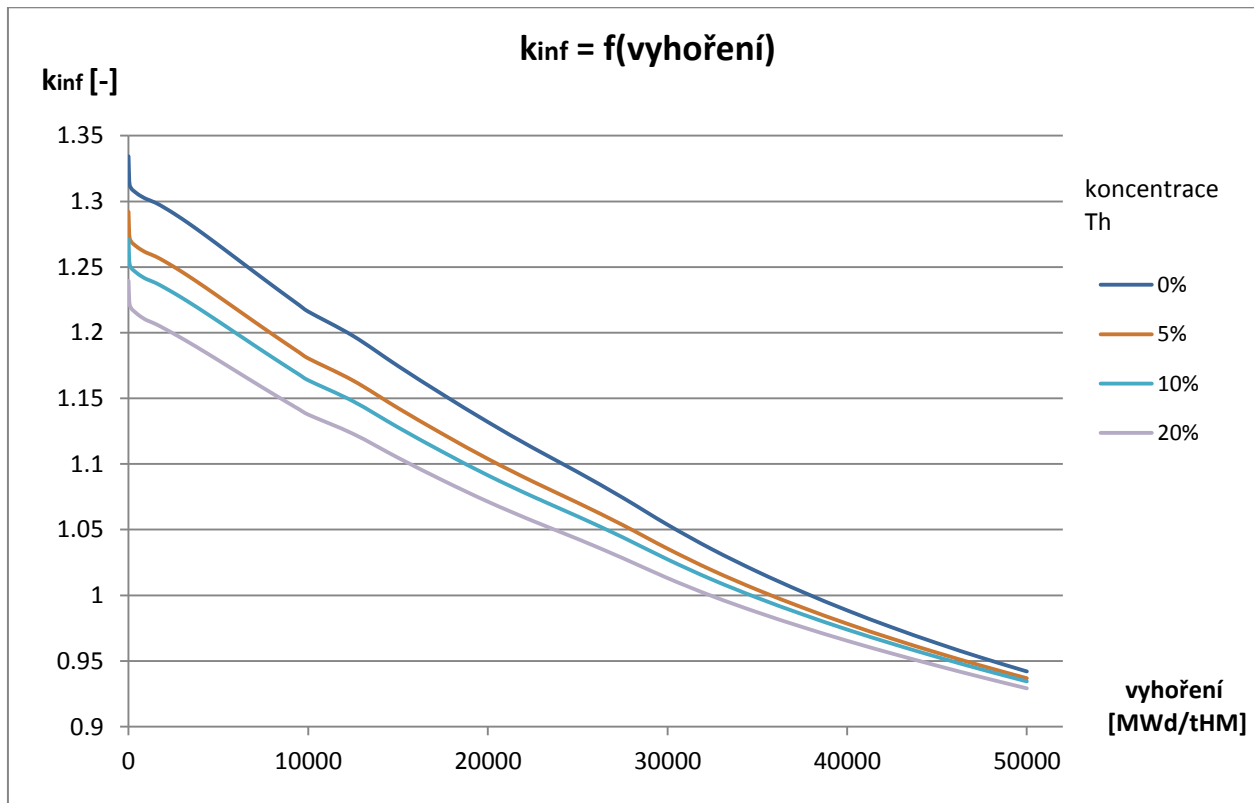
3.1.2. Výsledky

Pro koncentrace od 0 do 20 % oxidu thoričitého ThO_2 , respektive čistého thoria Th, s krokem 1% (do 10%) nebo 2% (od 10 do 20%) byly pomocí U_{wB_1} vypočítány průběhy multiplikačního koeficientu k_{inf} v závislosti na vyhoření až do 50 000MWd/tHM (mega watt dní na tunu těžkých kovů). Pro ThO_2 jsou navíc počítány koncentrace 40, 60, 80 a 90%. Na obr. 6 a obr. 7 jsou zobrazeny výsledky některých z těchto výpočtů, konkrétně průběhy pro hmotnostní koncentrace ThO_2 a Th 0, 5, 10, 20 % (40, 60 a 80% navíc pro ThO_2). Všechny přesné číselné hodnoty k_{inf} jsou zobrazeny v příloze 3 a 4.

Z provedených výpočtů lze vidět, že přítomnost thoria má na k_{inf} záporný vliv. Tento vliv je nejvýraznější u čerstvého paliva a s vyhoříváním klesá. Toto chování je velice podobné vyhořívajícím absorbátorům, které se do paliva přidávají za účelem snížení počátečního přebytku reaktivity, a po čase jejich vliv zanikne. Thorium má však negativní vliv po celou dobu vyhořívání paliva v reaktoru. Také je vidět, že kolem 40% dojde k "nasycení" záporného vlivu přítomnosti thoria a multiplikační koeficient již není dále snižován. Křivky pro 40, 60 a 80% ThO_2 tudíž splývají. Další věcí k povšimnutí je, že čisté kovové thorium má větší negativní vliv než oxid thoria (křivky pro stejné koncentrace jsou dále od sebe). To lze jednoduše vysvětlit tím, že v oxidu thoričitém je část sloučeniny zastoupena kyslíkem, který nemá negativní vliv na k_{inf} , a tudíž je vliv ThO_2 celkově menší.



obr. 6: závislost multiplikačního koeficientu v závislosti na vyhoření a koncentraci ThO₂



obr. 7: závislost multiplikačního koeficientu v závislosti na vyhoření a koncentraci Th

3.1.3. Validace výsledků

Při výpočtech v kódu U_wB_1 bylo zjištěno, že při provádění výpočtů stejného paliva pro různé délky vyhoření se výsledky liší. Tedy např. pokud se stejné palivo vypočítalo pro vyhoření 30 000 MWd/tHM a 60 000 MWd/tHM, průběh do 30 000 MWd/tHM byl různý a křivky nesplývaly. Chyba je pravděpodobně způsobena ne zcela přesným výpočtem spektra neutronového toku, jehož průběh byl aproximován podle délky vyhoření.

Jelikož nebylo jasné, jak velká chyba se ve výpočtech vyskytuje, bylo třeba provést kontrolní výpočty v jiném kódu. Pro validaci výsledků U_wB_1 byl využit výpočetní kód Serpent, který je vyvíjen v technickém výzkumném centru VTT ve Finsku od roku 2004. Od této doby tento kód získal po světě relativně velkou oblibu, navíc je pro některé instituce, mezi které patří i ČVUT, po zažádání volně dostupný. Kód je validován s kódem MCNP a délka výpočtů pro vyhořívání paliva je pro nekonečnou mříž přijatelná (2-3 hodiny na lepším osobním počítači). [18]

3.2. Serpent

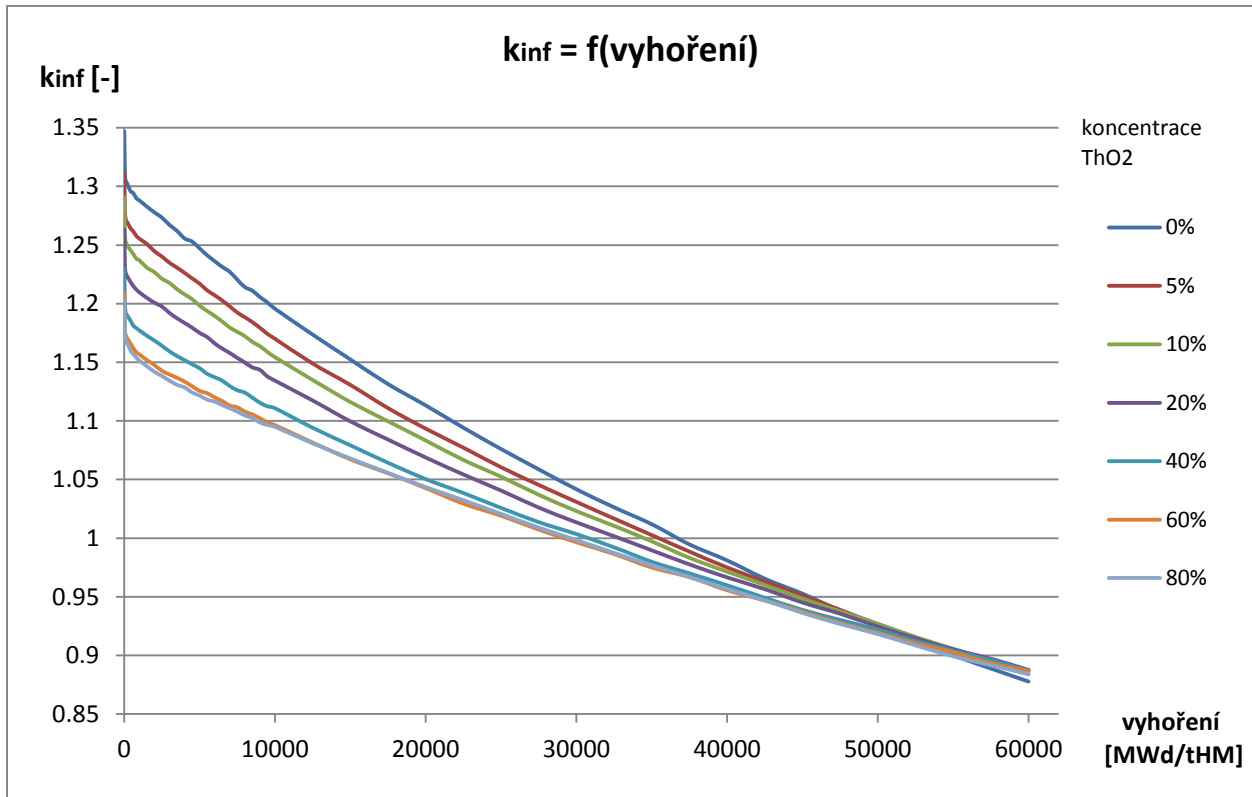
Serpent je třírozměrný výpočetní kód Monte Carlo pro reaktorovou fyziku. Základní schopností tohoto kódu je provádět výpočty vyhořívání materiálů, na které působí neutronové záření. Lze tak zjistit jak průběh mnoha různých parametrů během vyhořívání paliva, např. multiplikační koeficient k_{inf} , ale také izotopické změny paliva včetně jejich koncentrací. [19]

Pro výpočet bylo zvoleno nastavení s nekonečnou mříží, jejíž geometrie odpovídá rozměrům mříže v reaktoru VVER-1000. Geometrie mříže a koncentrace materiálů byly uvažovány stejné jako pro výpočet v kódu U_wB_1 , při uvažování stejného zastoupení thoria. Příklad vstupního souboru lze vidět v příloze 2 a všechny vstupní soubory jsou opět uloženy v přílohách na přiloženém CD.

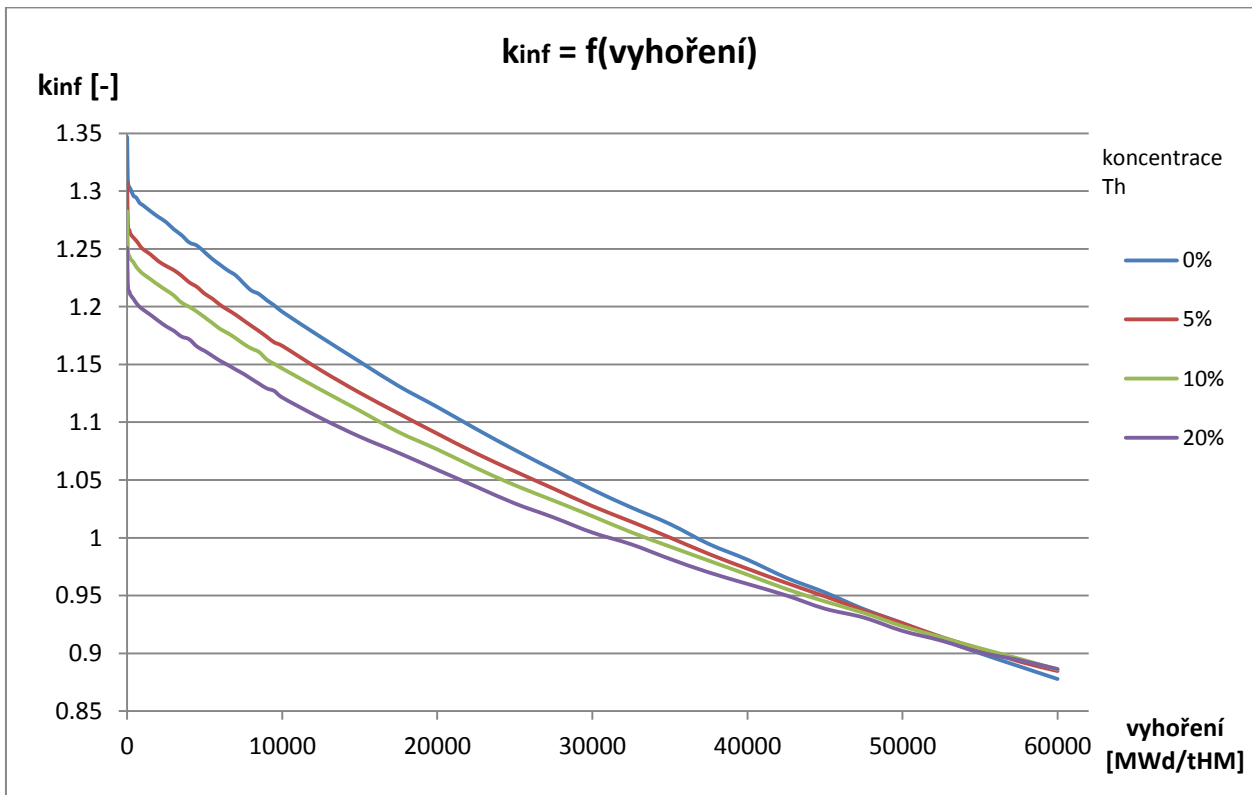
3.2.1. Výsledky

Na grafech na obr. 8 a obr. 9 jsou zobrazeny průběhy k_{inf} vypočtené pro stejné koncentrace ThO_2 , respektive Th, jako při výpočtech v U_wB_1 . Kompletní číselné průběhy multiplikačního koeficientu pro různé hmotnostní koncentrace jsou zobrazeny v příloze 5 a 6.

Ačkoliv jsou výpočty provedeny až do vyhoření 60 000 MWd/tHM (v U_wB_1 byly výpočty prováděny do 50 000 MWd/tHM), je na první pohled vidět, že se průběhy křivek do vyhoření 50 000 MWd/tHM liší. Zatímco z U_wB_1 se křivky v celém průběhu vyhoření neprotínají, ze Serpentu se křivky



obr. 8: závislost multiplikačního koeficientu v závislosti na vyhoření a koncentraci ThO₂



obr. 9: závislost multiplikačního koeficientu v závislosti na vyhoření a koncentraci Th

protínají kolem vyhoření 50 000 MWd/tHM. Protnutí křivek signalizuje dobu, kdy zmizí negativní vliv thoria na k_{inf} a tedy dobu, kdy je schopno palivo s thoriem dosáhnout stejného vyhoření jako palivo UO_2 . Je proto přínosné provést porovnání výsledků a určit maximální chybu U_{WB_1} oproti Serpentu. Z výpočtů v Serpentu vyplývá, že záporný vliv thoria na k_{inf} se nad koncentrace 60% již příliš nezvyšuje.

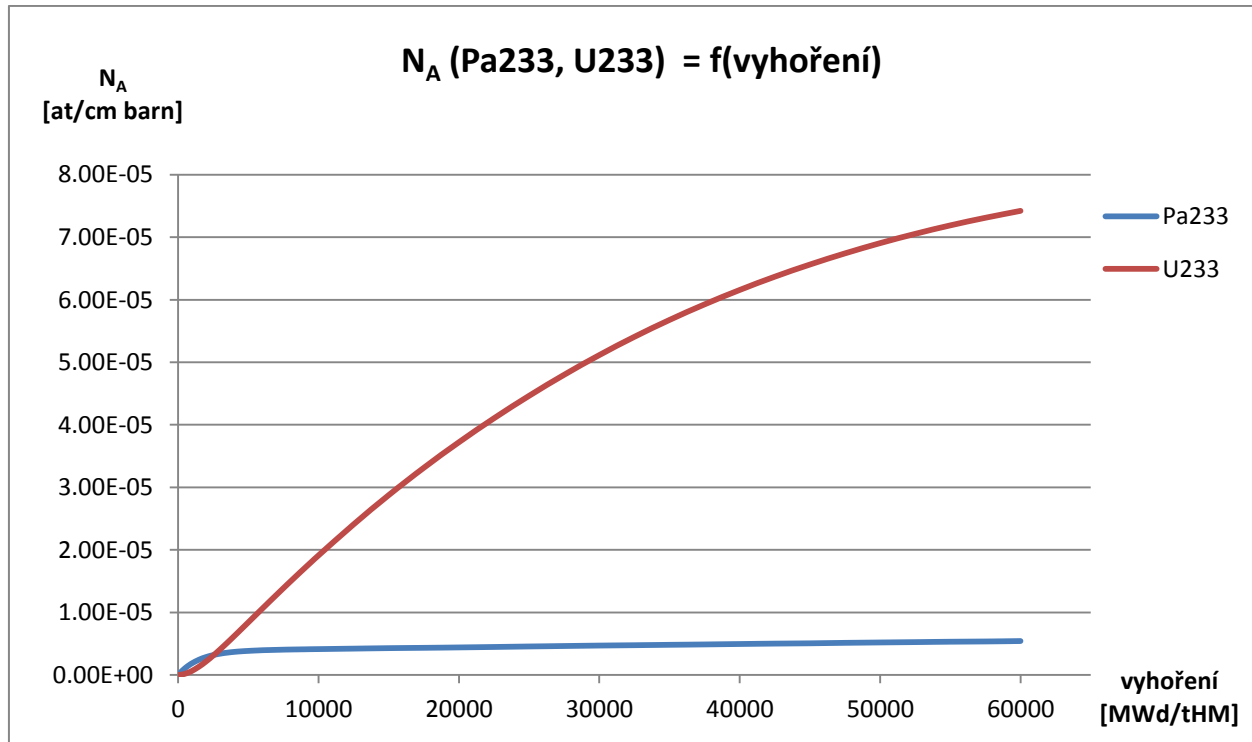
3.3. Porovnání výsledků v kódech U_{WB_1} a Serpent

Pro jednotlivé koncentrace ThO_2 a Th v palivu byly porovnány hodnoty k_{inf} v jednotlivých fázích vyhoření paliva. Byly vypočítány procentní odchylky hodnot k_{inf} výsledků z U_{WB_1} od hodnot vypočítaných v Serpentu pro ThO_2 , respektive Th. Po zkoumání odchylek lze říci, že chyba U_{WB_1} od Serpentu na k_{inf} se pohybuje v rozsahu $\pm 2\%$. Vzhledem k tomu, že v Serpentu byly nakonec provedeny všechny potřebné výpočty, k dalšímu využití budou využity přesnější výsledky z kódu Serpent.

3.4. Vliv thoria na multiplikační koeficient

Vliv thoria na neutronovou bilanci aktivní zóny je dán jadernými vlastnostmi thoria a prvků, které z něj při záchytu neutronu postupně vznikají. Těmi jsou hlavně protaktinium-233 a uran-233. Jejich vznik probíhá podle rovnice 2. Zatímco Th_{233} vzniká pohlcením Th_{232} téměř okamžitě a Pa_{233} vzniká β rozpadem z Th_{233} s poločasem rozpadu přibližně 22 minut, tedy také poměrně rychle, U_{233} vzniká z Pa_{233} β rozpadem s poločasem rozpadu asi 27 dní. Uran se tedy tvoří oproti protaktiniu s jistým zpožděním.

Průběhy atomových hustot Pa_{233} a U_{233} pro palivo s 10% ThO_2 byly získány výpočtem ze Serpentu a lze je vidět na obr. 10. Během vyhoření 5 000 MWd/tHM se vytvoří určitá koncentrace Pa_{233} , která s dalším vyhořením roste jen velmi málo. To je dáno větším účinným průřezem pro záchyt tepelných neutronů protaktinia-233 (39,5 barnu) oproti thoriu-232 (7,35 barnu) [20]. Vzhledem k thoriu tak přednostně "vychytává" neutrony a navíc se radioaktivně rozpadá a jeho koncentrace se tedy udržuje na nízkých hodnotách. Oproti tomu uran-233 i přes svůj vysoký absorpční průřez pro štěpení tepelnými neutrony (529,1 barn [20]) je téměř stabilním izotopem a tak jeho koncentrace roste do 20 000 MWd/tHM téměř lineárně a poté se tempo jeho růstu postupně snižuje. Zejména koncentracemi těchto prvků je pak dán vliv thoria na multiplikační koeficient k_{inf} v průběhu vyhořívání paliva. Na začátku má přítomnost thoria (vlivem Pa_{233}) poměrně velký negativní vliv. S rostoucím vyhořením se však negativní vliv zmenšuje spolu s tím, jak v palivu roste koncentrace U_{233} , který je štěpným izotopem.



obr. 10: průběh atomových hustot izotopů v průběhu vyhoření v palivu 10%ThO₂

V tabulce 1 je pro hmotnostní koncentrace ThO₂ a Th zobrazených na grafech průběhu k_{inf} určeno vyhoření, kdy zcela vymizí negativní vliv thoria či oxidu thoričitého a je pomalu nahrazován pozitivním vlivem na k_{inf} . Při dosažení těchto vyhoření je palivo s thoriem z hlediska dosažitelné délky kampaně rovnocenné s klasickým palivem. Tyto hodnoty jsou určeny z podrobných číselných průběhů k_{inf} v přílohách.

koncentrace thoria	ThO ₂	Th
0,05	47 500 MWd/tHM	50 000
0,08	47 500	50 000
0,10	47 500	52 500
0,12	50 000	52 500
0,16	52 500	52 500
0,20	52 500	55 000
0,40	52 500	nepočítáno
0,60	55 000	nepočítáno
0,80	57 500	nepočítáno

tabulka 1: vyhoření, při kterém má palivo o dané koncentraci thoria vyšší koeficient násobení k_{inf}

Například pro podíl kovového thoria 5% zmizí negativní vliv na k_{inf} oproti palivu z čistého UO_2 při vyhoření 50 000 MWd/tHM a při dalším vyhoření je vliv již pozitivní, tedy k_{inf} je vyšší oproti palivu z čistého UO_2 . Na základě tohoto chování lze thorium označit jako vyhořívající absorbátor. Na začátku kampaně snižuje přítomnost thoria koeficient násobení vlivem vznikajícího $Pa233$ a tento negativní vliv se během vyhořívání paliva zmenšuje, až úplně vymizí.

Vzhledem k tomu, že palivový soubor typu VVER-1000 TVSA-T, používaný v reaktoru VVER-1000, dosahuje průměrného vyhoření 58 000 MWd/tHM a maximálního vyhoření 66 000 MWd/tHM [17], je vliv paliva s thoriem při dosažení průměrného vyhoření kladný (ač minimálně) ve všech případech uvažovaných koncentrací thoria.

Pokud se v budoucnu bude využívat obohacnější palivo s vyšším vyhořením, např. 70 000 MWd/tHM nebo více, bylo by možné nahradit určitou část paliva thoriem a využít tak jeho vlastností vyhořívajícího absorbátoru k omezení počátečního přebytku reaktivity s pozitivním vlivem na koeficient násobení na konci životnosti paliva. Vyšší obohacení by však muselo zajistit posunutí křivek průběhů k_{inf} směrem k vyšším hodnotám, aby bylo možné štěpnou řetězovou reakci udržovat při takto vysokých vyhořeních.

Při všech výpočtech vyhořívání paliva je uvažování homogenní rozložení thoria či oxidu thoričitého v palivu. V pozdější části této práce je uvažováno i heterogenní rozložení thoria v klasickém palivu. Dopouštíme se tak určité chyby, nicméně náročnost výpočtu je neúměrně menší a tak byl v rámci této zvolen práce zvolen tento způsob. Koncentrace kovového thoria je počítána do 20%, jelikož je u něj uvažováno jen heterogenní rozložení, a z prováděných tepelných výpočtů vyplynulo, že vyšší koncentrace pro snižování teploty již nemají smysl. Je důležité zopakovat, že při výpočtech je uvažováno stejné absolutní množství $U235$ v palivu, a tedy že uranová část paliva bude díky přítomnosti thoria více obohacená. Z tohoto důvodu bude takovéto palivo dražší, vlivem náročnějšího obohacovacího procesu. Zdražení paliva oproti klasickému palivu je rozebráno v kapitole 0.

4. Tepelné výpočty

Cílem této práce je dosáhnout co nejvyššího snížení maximální teploty v jaderném palivu. K tomu je třeba zvolit vhodný nástroj k určení celkového teplotního pole v palivu, heliové mezeře i pokrytí v závislosti na zadaných hodnotách, kterými jsou rozměry, okrajové podmínky, zdroj tepla a další.

Sdílení tepla v materiálu je obecně popsáno diferenciálními rovnicemi. Při řešení některých jednodušších úloh lze tyto rovnice analyticky vyřešit, a to i v případě, kdy uvažujeme součinitel tepelné vodivosti λ závislý na teplotě. Výsledkem dosazení do těchto vztahů je pak teplota závislá na vzdálenosti od okraje a teplotu v daném místě lze tudíž snadno určit. Pro úlohy, kde se mění podmínky v materiálu (např. zdroj tepla) nebo úlohy s vícerozměrným vedením tepla (2D, 3D) se však situace komplikuje a analytické řešení vzniklých diferenciálních rovnic je příliš složité nebo není možné. Pak je nutné využít namísto analytického řešení numerických metod.

Principem numerických metod je rozdělení (diskretizace) celého objemu na síť bodů, mezi kterými již dané rovnice popisující sdílení tepla řešit lze. Průběh teplot pak neuvažujeme spojitý, ale diskrétní. To znamená, že v jednom bodě a jeho okolí uvažujeme určitou teplotu, a v sousedním bodě a jeho okolí se pak teplota skokově změní. Čím hustší je tedy síť bodů, tím menší jsou rozdíly teplot mezi sousedními body, průběh teplot je "hladší" a výpočet je přesnější.

Velice zjednodušeně lze tento postup ilustrovat na Fourierově zákoně, který vyjadřuje vedení tepla v materiálu a je popsán rovnicí 6 [21]. Tento zákon popisuje tepelný tok q [W] mezi dvěma místy přes plochu A [m²], materiálem o koeficientu tepelné vodivosti λ [W/mK], přičemž mezi těmito místy existuje tepelný gradient $\frac{dT}{dx}$ [K/m]. Rovnici 6 lze pak mezi dvěma body integrovat a získat rovnici 7. Taková rovnice může být napsána mezi každými sousedícími dvěma body sítě a vzniklou soustavu obyčejných rovnic lze pak relativně dobře řešit numericky.

$$q = -A\lambda \frac{dT}{dx} \quad (6)$$

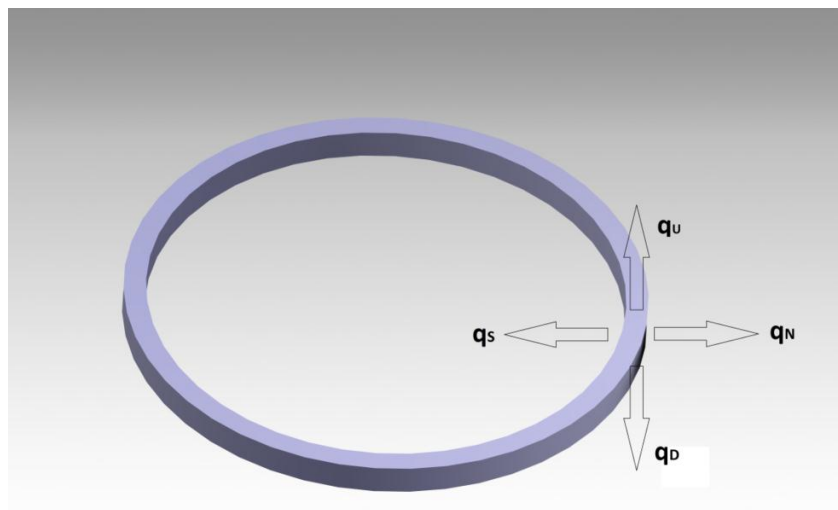
$$q = -A\lambda \frac{T_2 - T_1}{x_2 - x_1} \quad (7)$$

4.1. Výpočetní kód

4.1.1. Princip

K řešení teplotního pole byl napsán vlastní kód. Pro výpočty vedení tepla v palivovém proutku nebylo třeba použít CFD software, protože cílem bylo zkoumat pouze vedení tepla z paliva do chladiva o dané teplotě (v určitém místě aktivní zóny), nikoliv průběh teplot paliva a chladiva po výšce celé zóny. Ve vlastním kódu je také možné snadno simulovat různé faktory zhoršující přestup tepla, např. kontaktní odpor nebo geometrické změny vlivem tepelné roztažnosti. Dalším důvodem byl také autorův zájem o programování a o tvorbu vlastního kódu.

Kód je napsán v programovacím jazyce Python a je založen na metodě konečných objemů. Celý počítaný objem – vícevrstvý válec, složený z několika materiálů, je rozdělen na určitý počet kontrolních objemů - elementů. Válec je rozdělen jak axiálně, tak radiálně, a každý element tedy představuje mezikruží o určité výšce. Díky tomu, že na daném poloměru je ve stejné výšce teplota stejná, není třeba nadále třeba rozdělovat mezikruží na jednotlivé výšece. Výsledek je stejný: teplota ve středu elementu (při uvažování výšece mezikruží) je zároveň teplotou na středním poloměru daného mezikruží (při uvažování celého mezikruží). Pro každý kontrolní objem musí platit zákon zachování energie pro ustálený stav říkající, že tepelný výkon tvořící se v materiálu (štěpením) sečtený s tepelnými toky přes všechny povrchy (přes které dochází ke sdílení tepla) je roven nule. Směry tepelných toků přes hranice jednoho kontrolního objemu jsou schematicky naznačeny na obr. 11.



obr. 11: schéma tepelných toků přes hranice kontrolního objemu

Zákon zachování energie matematicky vyjadřuje rovnice 8 (akumulaci tepla neuvažujeme, jelikož bereme v úvahu ustálený stav).

$$q_S + q_N + q_U + q_D - S = 0 \quad (8)$$

kde:

- q_S je tepelný tok přes hranici směrem ke středu pelety
- q_N je tepelný tok přes hranici směrem k okraji pelety
- q_U je tepelný tok přes hranici směrem k hornímu okraji pelety
- q_D je tepelný tok přes hranici směrem k dolnímu okraji pelety
- S je zdroj tepla v daném kontrolním objemu

Pro každý kontrolní objem musí být určeny všechny tyto veličiny. Definování těchto veličin však není prováděno pro každý element zvlášť. Celý objem válce, který se skládá z více materiálů (při některých tepelných výpočtech uvažujeme heterogenní rozmístění thoria), je rozdělen na několik oblastí tak, aby se pro danou část dali tepelné toky určovat stejným způsobem, a poté je využito cyklů.

Tepelné toky jsou určovány podle Fourierova zákona, a to podle toho, zda dochází k tepelnému sdílení uvnitř materiálu, na rozhraní materiálu a helia, nebo na rozhraní dvou pevných materiálů (při výpočtech jsou uvažovány i případy s heterogenním rozložením thoria). Tepelné toky jsou principiálně vyjádřeny pomocí rovnic 9, 10 a 11. [22]

$$q = A\lambda_1 \frac{\Delta T}{\Delta x} \quad (9) \text{ tepelný tok přes hranici elementů v homogenním materiálu}$$

$$q = \frac{\Delta T}{\frac{\Delta x_1}{\lambda_1 A} + \frac{\Delta x_2}{\lambda_{He} A}} \quad (10) \text{ tepelný tok přes rozhraní materiálu a helia}$$

$$q = \frac{\Delta T}{\frac{\Delta x_1}{\lambda_1 A} + \frac{\Delta x_2}{\lambda_2 A} + \frac{\Delta_{gap}}{\lambda_{He} A}} \quad (11) \text{ tepelný tok přes rozhraní dvou pevných materiálů}$$

kde

- ΔT je rozdíl teplot sousedících kontrolních objemů
- $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_{He}$ jsou součinitele tepelné vodivosti materiálů, respektive helia (závislé na teplotě)
- A je plocha, přes kterou je tepelný výkon sdílen
- Δx je vzdálenost středních poloměrů sousedících kontrolních objemů
- $\Delta x_1, \Delta x_2$ jsou vzdálenosti středů elementů od rozhraní
- Δ_{gap} je myšlená mezera mezi dvěma pevnými materiály, vzniklá drsností a jinými povrchovými nerovnostmi

Pro každý kontrolní objem dostaneme čtyři výrazy tepelných toků přes povrchy, kde je uvažováno vedení tepla, vyjádření zdroje tepla a výslednou rovnicí zachování energie v daném elementu. Celkem je počet rovnic zachování energií takový, kolik je kontrolních objemů v celém objemu válce. Pro numerické řešení vzniklé soustavy je využit numerický řešič (Newton-Krylov) [23], kterému jsou zadány počáteční podmínky (odhad teplotního pole) a výsledná maximální chyba řešení. Řešič pak při každé iteraci zpřesňuje teplotní pole tak, aby se každá rovnice pokud možno co nejvíce přiblížila nule a výsledek se blížil stavu, který odpovídá reálnému sdílení tepla v celé soustavě. Výsledkem je teplotní pole, tedy soubor středových teplot všech kontrolních objemů.

4.1.2. Sdílení tepla zářením

Každé těleso vyzařuje elektromagnetické záření, které mu odebírá část energie a přenáší ho na okolní hmotu. Tento jev přenosu tepla zářením se projeví zejména přenosem tepla přes plynovou mezeru, tedy z povrchu pelet na vnitřní povrch pokrytí, čímž dochází ke snížení teplot paliva. Tepelný výkon, který produkuje reálné těleso je popsán Stefan-Boltzmanovým zákonem podle rovnice 12.

$$q = \varepsilon \cdot \sigma \cdot A \cdot T^4 \quad (12),$$

kde q [W] je tepelný výkon, ε [-] je emisivita materiálu, σ [$Wm^{-2}K^{-4}$] je Stefan-Boltzmanova konstanta ($\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} Wm^{-2}K^{-4}$), A [m^2] je povrch tělesa a T [K] je teplota povrchu. Přenos tepla zářením byl uvažován mezi vnějším povrchem paliva a vnitřním povrchem pokrytí. Pro emisivitu materiálů byly brány následující hodnoty.

$$e_F = 0,85, \text{emisivita } UO_2 [7]$$

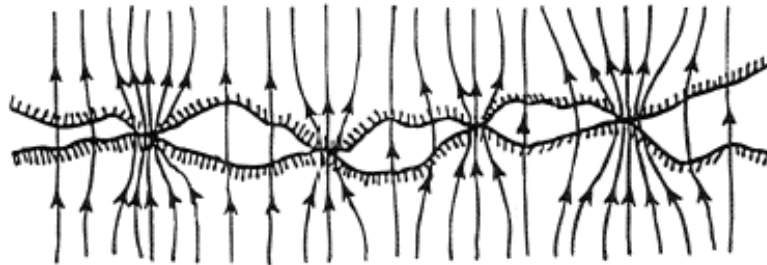
$$e_{Cl} = 0,4, \text{emisivita pokrytí}$$

Emisivita pokrytí se velmi mění v závislosti na tloušťce oxidické vrstvy. Z více zdrojů byla hodnota pro čerstvé palivo odhadnuta. Vzhledem k nízkým teplotám pokrytí však tato hodnota nemá na sdílení tepla téměř žádný vliv.

4.1.3. Tepelný kontaktní odpor

Protože se v některých případech výpočtů setkáváme s kontaktem mezi dvěma pevnými povrchy, je třeba uvažovat nedokonalé sdílení tepla mezi těmito dvěma povrchy. Je zřejmé, že žádný povrch není dokonale hladký, má určitou makroskopickou i mikroskopickou geometrii, tedy má jisté zakřivení a

drsnost. Z toho vyplývá, že při kontaktu dvou ploch je teplo přenášeno nikoliv celou plochou, ale jen její částí, jak lze vidět na obr. 12. Tuto část obvykle tvoří jednotky procent celé kontaktní plochy. [22]

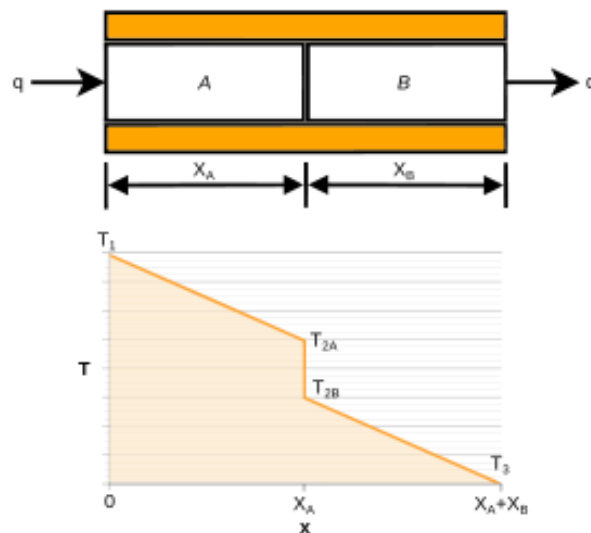


obr. 12: schéma skutečného kontaktu mezi dvěma pevnými povrchy [24]

Tento jev nedokonalého přenosu se nazývá teplotní kontaktní odpor a závisí na několika proměnných, kterými jsou [22]:

- makroskopická a mikroskopická geometrie povrchu
- tlak, kterým jsou povrchy tisknuty k sobě
- teplota
- typ obou materiálů
- typ tekutiny v mezerách

Důsledkem tohoto jevu je pak určitý teplotní skok mezi oběma povrchy, jak naznačuje obr. 13.



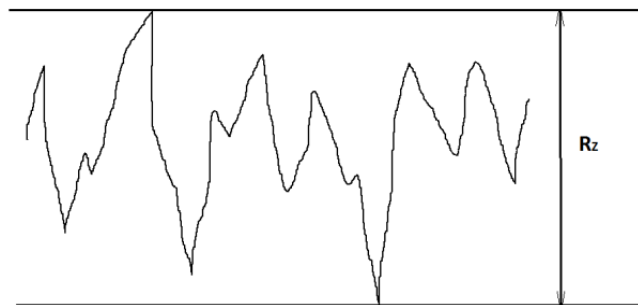
obr. 13: teplotní skok v místě kontaktu dvou pevných materiálů [25]

Tepelný tok přes tuto hranici je pak definován podle rovnice 13 [22].

$$q = \frac{T_1 - T_3}{\frac{\Delta x_A}{\lambda_A A} + \frac{\Delta x_B}{\lambda_B A} + \frac{1}{h_C A}} \quad (13) \text{ tepelný tok na rozhraní dvou pevných materiálů,}$$

kde $h_C [m^2 K/W]$ je teplotní kontaktní odpor. Jeho velikost je obvykle určena přesně pro daný případ a spadá mezi 0.000005 a $0.0005 m^2 K/W$ [22]. To je velké rozmezí a pro přesnější výpočet je zapotřebí provést experimentální měření, nebo se snažit kontaktní odpor odhadnout jiným způsobem. Vzhledem k použitým materiálům (uran, thorium), kontaktním teplotám (více než $500^\circ C$) a přítomnosti helia bylo od experimentálního měření v rámci této diplomové práce upuštěno a problém byl modelován teoreticky.

Namísto známé hodnoty kontaktního odporu h_C byl člen $\frac{1}{h_C A}$ nahrazen přidáním heliové mezery mezi povrchy materiálů v kontaktu. Maximální velikost takovéto mezery lze již celkem dobře odhadnout z maximální výšky drsnosti povrchu pelet. Maximální drsnost R_z je definována jako vzdálenost nejnižšího a nejvyššího bodu povrchu měřená kolmo k povrchu, jak ukazuje obr. 14.



obr. 14: maximální výška drsnosti

Při kontaktu dvou povrchů může teoreticky dojít ke kontaktu dvou nejvyšších míst, čímž dojde k vytvoření mezery o maximální šířce $\Delta_{gap} = 2 \cdot R_z$. Průměrná šířka mezery však bude vzhledem k vzájemné pohyblivosti pelet nižší, pravděpodobně velikosti $\Delta_{gap} \cong R_z$. Maximální drsnost je hodnota udávána výrobcem a u pelet UO_2 má hodnotu $3,2 \mu m$ [26]. Při využití velikosti mezery $\Delta_{gap} = 2 \cdot R_z$ uvažujeme nejhorší možný případ, který může nastat. Výrazem 14 pak můžeme nahradit výraz s kontaktním odporem 15 a zaručit, že jeho hodnota by v reálném případě měla mít už jen nižší hodnotu, což by znamenalo pouze zlepšení přestupu tepla, nikoliv zhoršení.

$$\frac{\Delta_{gap}}{\lambda_{He}A} \quad (14)$$

$$\frac{1}{h_c A} \quad (15)$$

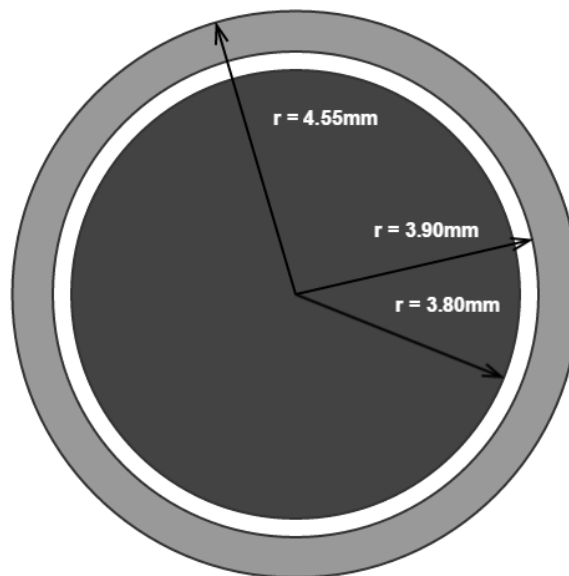
Vzniklá rovnice tepelného toku mezi dvěma pevnými materiály v kontaktu má pak tvar rovnice 16.

$$q = \frac{\Delta T}{\frac{\Delta x_1}{\lambda_1 A} + \frac{\Delta x_2}{\lambda_2 A} + \frac{\Delta_{gap}}{\lambda_{He} A}} \quad (16)$$

4.1.4. Rozměry a parametry sítě

rozměry paliva (zobrazeny na obr. 15) [17]:

- $R_{FO} = 3,8 \text{ mm}$, poloměr palivové pelety
- $R_{CI} = 3,9 \text{ mm}$, vnitřní poloměr pokrytí
- $R_{CO} = 4,55 \text{ mm}$, vnější poloměr pokrytí



obr. 15: řez čerstvým palivovým proutkem

proměnné parametry, pro jejichž různé hodnoty jsou počítány výsledky; příklady hodnot

- $L = 6 \text{ mm}$, výška pelety UO_2
- $Th_{vol} = 0,05$, objemová část (poměr) thoria

rozměry a počty kontrolních objemů:

- $dL = 0,1\text{mm}$, axiální délka elementů v UO_2
- $dRF = 0,1\text{mm}$, radiální délka elementů
- $n_C = 5$, radiální počet elementů v pokrytí
- $n_{GAP} = 5$, radiální počet elementů v mezeře
- $n_{ad} = 4$, axiální počet elementů v přídavném materiálu

Tyto hodnoty byly ve výsledku určeny optimalizací pomocí citlivostní analýzy. V určitém momentě totiž téměř nedochází ke zpřesňování výsledků, ale pouze k prodlužování výpočetního času.

4.1.5. Tepelná vodivost použitých materiálů

Koeficienty tepelné vodivosti jsou uvažovány závislé na teplotě (teploty T jsou dosazovány v °K, $t=T/1000$ a vztahy λ [W/mK] pro UO_2 a ThO_2 jsou brány pro 95% teoretické hustoty)

- $\lambda_{UO_2} = \frac{100}{6.548+23.533t} + \frac{6400}{t^{\frac{5}{2}}} \exp\left(\frac{-16.35}{t}\right)$ [7]
- $\lambda_{ThO_2} = \frac{1}{-0.03198} + \frac{2.3559}{10^4} T$ [7]
- $\lambda_{Th} = 36.465 + 0.012T + 2 \cdot 10^{-6}T^2$, teplota dosazována ve °C, závislost byla vypočtena lineární aproximací hodnot z [11]
- $\lambda_{He} = 0.24475 + 0.0002687(T - 300)$, pro tlak 0.4MPa, teplota dosazována ve °C, tato závislost byla vypočtena lineární aproximací hodnot z [27]
- $\lambda_{Zr-1\%Nb} = 23.48 + 1.92 \cdot 10^{-2}T + 1.68 \cdot 10^{-5}T^2$ [7]
- $\lambda_{ThO_2(0.80)UO_2(0.20)} = \frac{1}{0.02771+2.4695 \cdot 10^{-4} \cdot T}$ [7]
- $\lambda_{ThO_2(0.90)UO_2(0.10)} = \frac{1}{-0.1751+2.5827 \cdot 10^{-4} \cdot T}$ [7]
- $\lambda_{ThO_2(0.96)UO_2(0.04)} = \frac{1}{-0.04505+2.6241 \cdot 10^{-4} \cdot T}$ [7]

4.1.6. Okrajové podmínky a měrný výkon

4.1.6.1. Teplota chladiva

Teplota chladiva uprostřed aktivní zóny byla vypočítána jako průměr vstupní teploty a výstupní teploty.

$$T_{chl} = \frac{290 + 320}{2} = 305^\circ\text{C}$$

4.1.6.2. Součinitel přestupu tepla

Součinitel přestupu tepla mezi chladivem a pokrytím byl vypočten podle vztahu 17 pro VVER [8].

$$\alpha = 0,021 \cdot \frac{\lambda}{d_h} \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^{0,43} \cdot \left(\frac{Pr}{Pr_{wall}} \right)^{0,25} \cdot K_n \quad (17)$$

kde λ je měrná tepelná vodivost chladiva [kW/(m °C)], d_h je hydraulický průměr buňky [m], Pr je Prandtlovo číslo, Pr_{wall} je Prandtlovo číslo při teplotě stěny.

$$K_n = \left(\frac{L_1 \cdot L_2}{d_{co}^2} \right)^{0,18}$$

kde L_1 je vzdálenost mezi palivovými proutky [m], L_2 je vzdálenost mezi řadami palivových proutků [m] a d_{co} je vnější průměr palivového proutku [m]. Pro výpočet byly uvažovány následující parametry:

- *termofyzikální vlastnosti vody byly brány při 15,7 Mpa a 305°C*
- *intenzita hmotnostního průtoku 3878,8 kg/m²s [8]*
- *průměr palivových proutků 9,1mm; rozteč 12,75mm*

$$\alpha \approx 39000 \text{ Wm}^{-2}\text{K}$$

4.1.6.3. Měrný výkon

Vzhledem k tomu, že kód nepočítá objemové změny paliva vlivem rekrystalizace UO₂ nad 1600°C, pro finální výpočty byl zvolen takový měrný výkon, při kterém se teplota uprostřed palivového proutku přibližně rovnala 1600°C. Této teplotě odpovídal měrný výkon $S = 5,5 \cdot 10^8 \text{ W/m}^3$. Pro vyšší hodnoty měrného výkonu bychom se dopouštěli určité chyby, ale lze očekávat, že teploty budou snižovány podobně jako pro počítaný měrný výkon.

$$S = 5,5 \cdot 10^8 \text{ W/m}^3$$

Při uvažování heterogenního rozložení thoria je pak část s UO₂ uvažována jako více obohacená podle rovnice 5. Úměrně tomu tedy dojde i ke zvýšení měrného výkonu a tedy produkce tepla v této části paliva podle rovnice 18.

$$S_1 = \frac{S_0}{1 - e_{Th}} \quad (18),$$

kde S_1 je nový měrný výkon v UO_2 , S_0 je původní měrný výkon a e_{Th} je objemový podíl thoria či oxidu thoričitého.

4.1.7. Zjednodušení a předpoklady výpočtu

Vzhledem k omezenému času a složitosti modelování některých problémů bylo nutné provést určitá zjednodušení přenosu tepla v palivu, i když se tím dopouštíme určité chyby. Pokud bychom se chtěli dopočítat k co nejreálnějším hodnotám, bylo by zapotřebí zahrnout do výpočetního kódu i další jevy, které byly v této práci zanedbány.

Konstantní rozložení radiálního vývinu tepla v peletě

Ve skutečnosti dochází na okraji pelety k vyšší intenzitě štěpení než uprostřed pelety a tedy i k vyšší produkci tepla. Tento jev tzv. samo-stínění je však velice složitý a bylo rozhodnuto v rámci této práce zvolit zjednodušení konstantní produkce tepla po poloměru pelety.

Uvažování čerstvého paliva

Palivo během vyhořívání mění jak svůj objem a geometrický tvar, tak i své teplo-fyzikální vlastnosti. Dochází tedy ke změně podmínek přenosu tepla v palivu. Tento proces je však velice složitý, a vzhledem k tomu, že nejvyšší teploty dosahuje palivo jako čerstvé, nebo brzy poté, postačí modelování čerstvého paliva a tedy doby, kdy je za normálních provozních podmínek teplota v palivu nejvyšší [8]. Při uvažování heterogenního rozmístění thoria v palivu uvažujeme nulovou produkci tepla v této části paliva, jelikož výraznější množství tepla se zde začne tvořit až později vlivem štěpení jader $U233$.

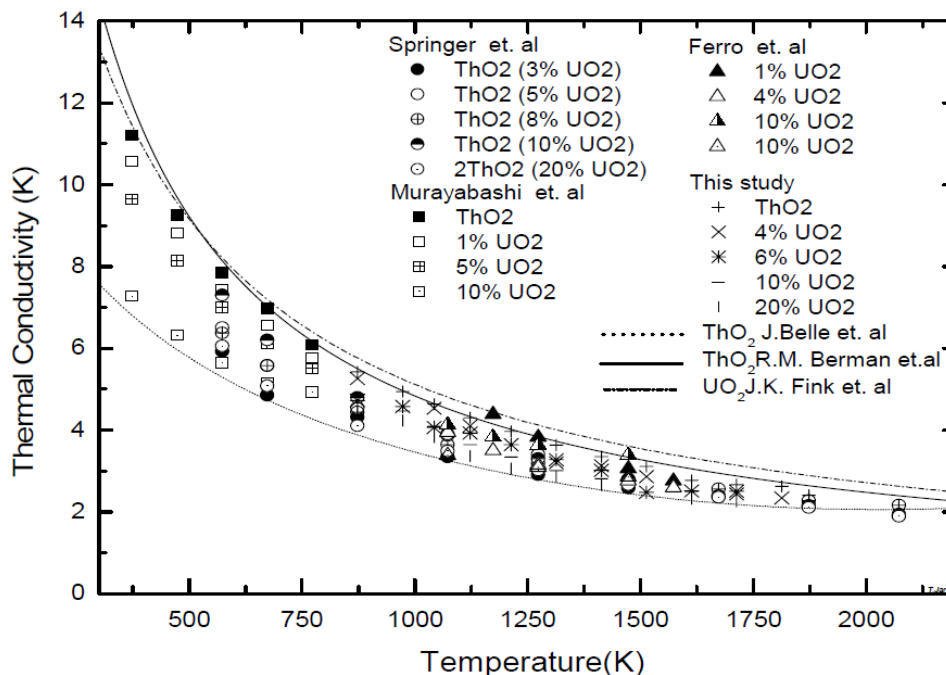
Neuvažování rekrystalizace UO_2 nad $1600^\circ C$

UO_2 nad $1600^\circ C$ mění svou krystalickou mřížku a dochází ke zvýšení hustoty. U některých pelet v reaktoru VVER-1000 dosahuje středová teplota mírně přes $1700^\circ C$ [8]. Nad $1800^\circ C$ dochází k dalšímu zhušťování, ovšem této teploty v reaktoru za normálních provozních podmínek nedosahujeme. U těchto pelet dochází k vytvoření centrálního otvoru velice malého průměru, jehož přítomnost mírně změní teplotní pole v peletě.

Zdrojový kód jádra výpočetního kódu je uveden v příloze 7 a je uložen na příloženém CD.

4.2. Homogenní rozložení thoria

Výzkumy zabývající se homogenním rozložením ThO_2 v UO_2 jsou relativně časté a pro koeficient tepelné vodivosti směsného paliva existuje mnoho vztahů. Na obr. 16 lze vidět některé průběhy korelací, které byly pro toto směsné palivo určeny. Vztahy pro koeficienty tepelné vodivosti využitě v této práci jsou doporučenými vztahy mezinárodní atomové agentury (IAEA).



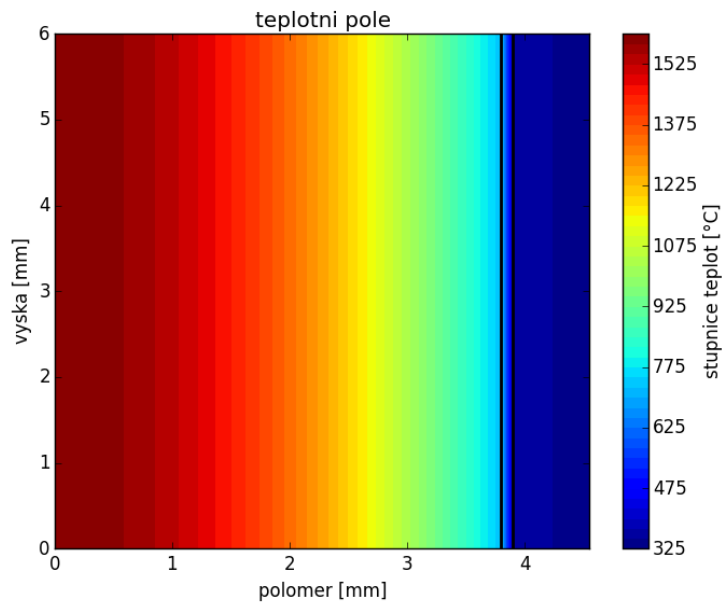
obr. 16: průběh koeficientů tepelných vodivostí pro UO_2 , ThO_2 a jejich směsi v závislosti na teplotě [7]

Z popisků v grafu lze vidět, že pro toto směsné palivo se výzkumy provádějí pro vysoké hmotnostní koncentrace ThO_2 , vyšší než 80%, protože pro nižší koncentrace je přínos zlepšení tepelné vodivosti minimální. Na základě toho budou provedeny výpočty s hmotnostními koncentracemi 80, 90 a 96 % ThO_2 .

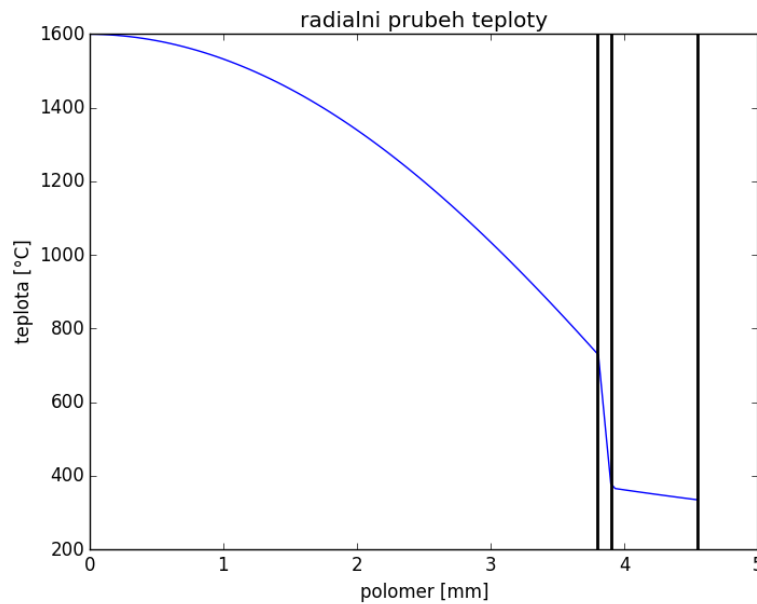
4.2.1. Teplotní pole v peletě UO_2

V palivu skládajícího se jen z pelet UO_2 (nebo homogenně rozmíseného ThO_2) probíhá vedení materiálu prakticky jen radiálně, pokud zanedbáme vzniklé mezery mezi peletami, ve kterých teplo štěpením nevzniká a tak budou mít mírně nižší teplotu. Tento vliv je však zanedbatelný. Vedení tepla v takovémto uspořádání je graficky znázorněno na obr. 17, kde je vidět, že axiálně se teploty na daném poloměru nemění. Přenos tepla je způsoben radiálním rozdílem teplot, které se snižují od středu pelety, přes

mezeru, pokrytí až k chladiivu. Na výšce pelety nezávisí, protože nedochází k axiálnímu vedení. Na obr. 18 je pak vidět radiální průběh teplot v palivu, mezeře i pokrytí.



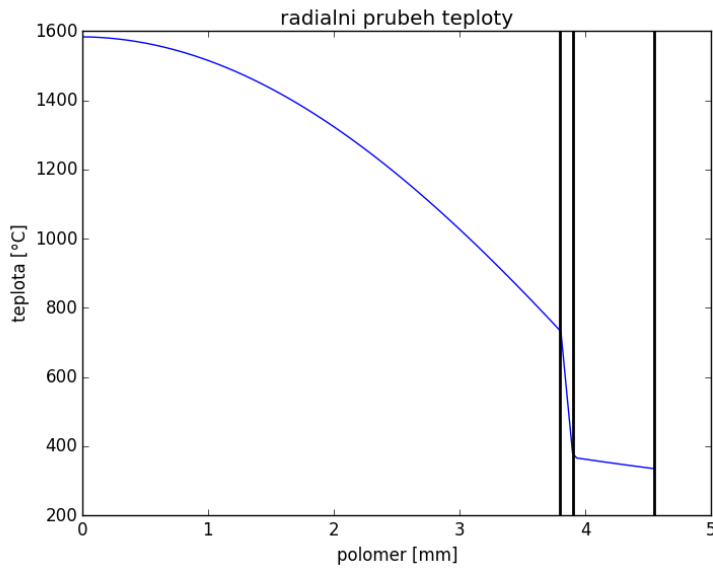
obr. 17: teplotní pole pelety UO₂



obr. 18: radiální průběh teplot v peletě UO₂

Pro dané rozměry paliva, okrajové podmínky a zdroj tepla je maximální teplota uprostřed palivové pelety 1599°C. Dále jsou vypočítána teplotní pole pro palivo s danými hmotnostními koncentracemi ThO₂, je určen radiální průběh teplot a maximální (středová) teplota

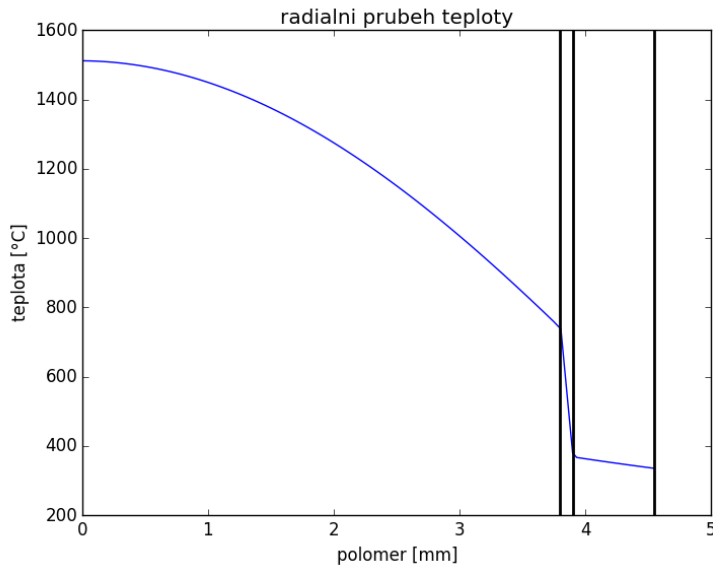
4.2.2. $ThO_2(0,80) - UO_2(0,20)$



obr. 19: radiální průběh teploty pro palivo s 80% ThO_2

- maximální teplota je 1583°C

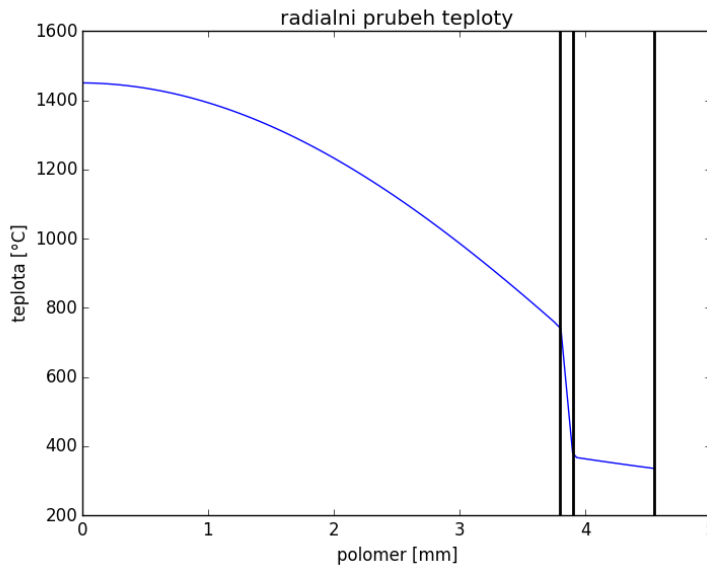
4.2.3. $ThO_2(0,90) - UO_2(0,10)$



obr. 20: radiální průběh teploty pro palivo s 90% ThO_2

- maximální teplota je 1512°C

4.2.4. $ThO_2(0,96) - UO_2(0,04)$



obr. 21: radiální průběh teploty pro palivo s 96% ThO2

- maximální teplota je 1450°C

Výsledky maximálních teplot jsou shrnuty v tabulce 2. Pro hmotnostní koncentrace ThO_2 nad 90% je pokles teploty znatelný, nicméně i tak relativně malý. Tento benefit je však kromě některých problémů, které vyplývají z využití ThO_2 (viz kapitola thorium), vyvážen vysokou cenou tohoto paliva. Při vysokém podílu thoria je totiž třeba do paliva přidat vysoce obohacený uran, což je problémem jak z hlediska finančního, tak i z hlediska zneužitelnosti vysoce obohaceného uranu. Uran obohacený víc jak 20% $U235$ se považuje za vysoce obohacený uran (HEU) a jeho využívání je v posledních letech stále více omezováno, a to např. i ve výzkumných reaktorech. Jeho využívání v energetických reaktorech proto dnes nepřichází příliš v úvahu. Přibližné ceny tohoto paliva jsou vypočítány v kapitole 0. Vzhledem k nízkým benefitům snížení teplot a předpokládané vysoké ceně paliva byla navržena další možnost, jak uplatnit ThO_2 do paliv lehkovodních reaktorů za účelem snížení teploty paliva, a to heterogenním způsobem.

podíl ThO_2 [%]	0	80	90	96
maximální teplota v palivu [°C]	1599	1582	1508	1445
rozdíl teplot[°C]	0	17	91	154

Tabulka 2: maximální teploty a obohacení uranu při použití směsného paliva ThO_2-UO_2

4.3. Heterogenní rozložení thoria

Další možností jak začlenit nový materiál do stávajícího paliva je heterogenním způsobem. Heterogenní rozložení znamená, že materiál nebude rovnoměrně rozmíchán v palivu, ale že výsledná soustava se bude dělit na části s původním materiálem UO_2 a novým materiálem, tedy oxidem thoričitým ThO_2 , případně jinou sloučeninou thoria.

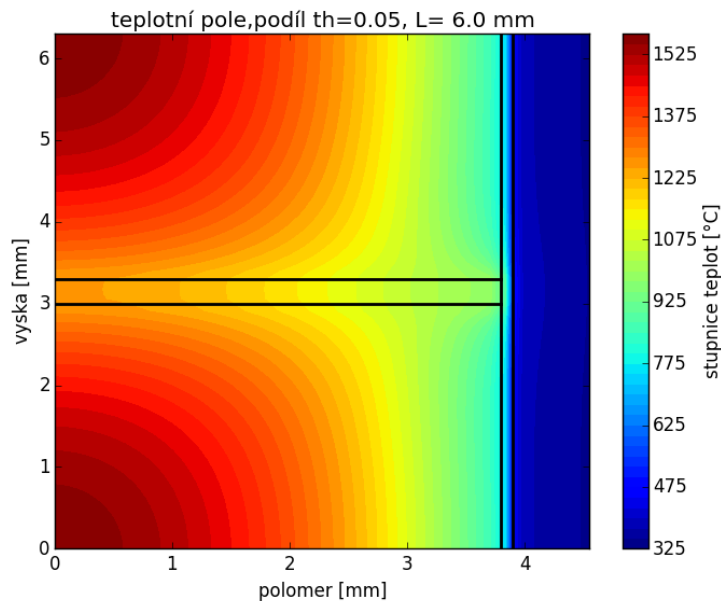
Nejlogičtější možností heterogenního rozložení materiálu je střídání původních pelet UO_2 a vrstev ThO_2 jak lze vidět na obr. 22. Výhodou tohoto rozložení materiálu je, že se nemusíme omezovat jen na materiál chemicky podobný UO_2 , tak aby bylo možné materiály dokonale smíchat a vyrobit. Tak lze kromě pelet ThO_2 , případně ThC_2 , mezi pelety UO_2 vložit např. plíšek z kovového thoria, nebo teoreticky jakýkoliv jiný materiál, který by zde svými vlastnostmi mohl mít přínos.



obr. 22: střídání pelet UO_2 a vrstev jiného materiálu

Je zřejmé, že materiál přidaný tímto způsobem nemůže zlepšit koeficient tepelné vodivosti základního materiálu UO_2 . Přínos vloženého materiálu ve vedení tepla však spočívá v jiném členu Fourierova zákona, který určuje tepelný tok mezi dvěma místy, a tím je rozdíl teplot. Při využití materiálu s lepším koeficientem tepelné vodivosti než UO_2 bude rozložení teplot tohoto materiálu rovnoměrnější. V ose pelety bude mít přídavný materiál nižší teplotu než UO_2 . To způsobí axiální vedení tepla a chlazení

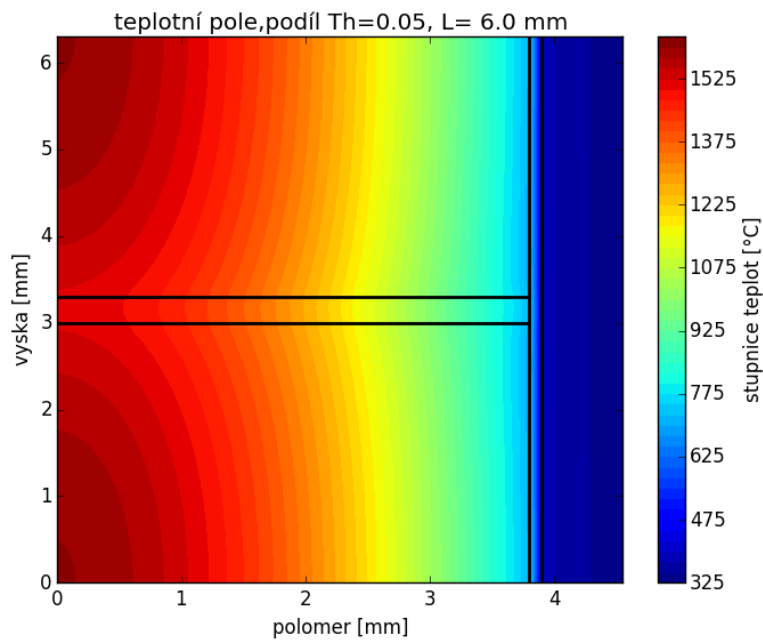
povrchu pelet UO_2 povrchem materiálu s nižší teplotou. Snížení povrchové teploty pak způsobí i snížení středové (maximální) teploty v peletě velké podle toho, jak velký rozdíl teplot bude toto vedení tepla hnát. Příklad výsledného teplotního pole je graficky znázorněn na obr. 23. Černými čarami jsou znázorněny hranice materiálů: tenká vrstva je umístěna mezi dvě pelety UO_2 , které jsou zobrazeny jen z poloviny.



obr. 23: teplotní pole vlnkové vrstvy materiálu s lepší tepelnou vodivostí

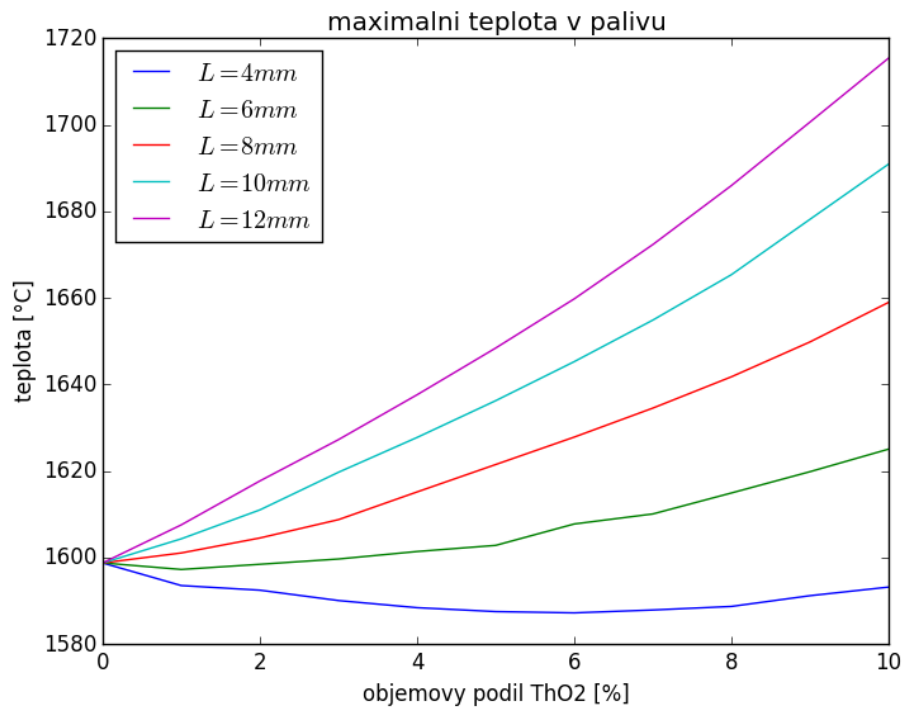
4.3.1. ThO_2

První možností bylo přidání vrstvy ThO_2 mezi stávající pelety z UO_2 . Na obr. 24 je znázorněno teplotní pole tohoto případu, kdy je využito heterogenního přidání oxidu thoričitého ThO_2 ve formě úzkých pelet (délka pelet UO_2 je 6mm, podíl ThO_2 je 5%, výška vrstvy je tedy 0,3mm). Je vidět, že teplotní pole se od teplotního pole klasické pelety příliš neliší. To je dáno jednak tím, že koeficient tepelné vodivosti ThO_2 se příliš neliší od UO_2 , ale také narůstajícím zdrojem tepla v UO_2 , které je více obohacené, aby absolutní množství U^{235} zůstalo v palivu stejné a možnost dosažitelného vyhoření byla srovnatelná s původním palivem.



obr. 24: teplotní pole za případu přidání vrstvy ThO₂ mezi pelety UO₂

Na obr. 25 jsou uvedeny průběhy maximálních teplot v palivu v závislosti na objemovém podílu ThO₂ a výšce pelet UO₂.



obr. 25: maximální teplota v palivu v závislosti na podílu ThO₂ pro různé výšky pelet UO₂

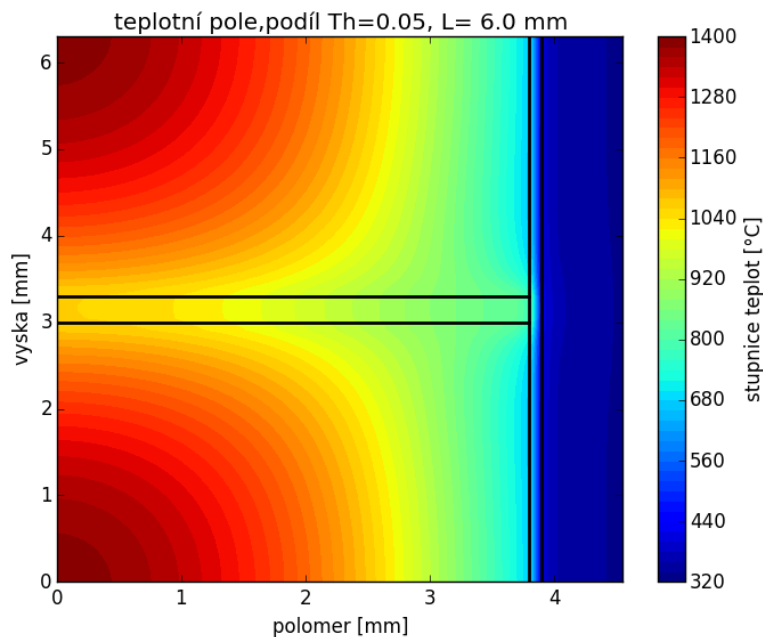
Z provedených výpočtů vyplývá, že heterogenní přidání ThO_2 nemá na snížení maximální teploty žádaný vliv. Naopak, vlivem obohacenějšího základního materiálu, kde je z toho důvodu větší vývin tepla, maximální teplota roste. Jen u pelety UO_2 vysoké 4mm teplota pro určité koncentrace klesá, nicméně minimálně. Dalšími nevýhodami je vyšší cena tohoto paliva vlivem vyššího obohacení UO_2 a drahé výroby úzkých pelet ThO_2 z důvodu jeho vysoké teploty tání.

Takovéto palivo nepřináší žádné benefity a jeho případná realizace tudíž nedává smysl. Využití ThO_2 jak homogenním, tak heterogenním způsobem nepřináší významné snížení maximální teploty paliva. Vzhledem k možnosti přidání jiného materiálu bylo navrženo přidat jako materiál vrstvy s lepší tepelnou vodivostí kovové thorium, jehož koeficient tepelné vodivosti je řádově lepší než koeficient tepelné vodivosti ThO_2 . Tím by se mohlo dosáhnout výraznějšího snížení teplot. Proto bylo i další zkoumání zařazeno do této práce, ač se nejedná přímo o oxid thoričitý ThO_2 .

4.3.2. Kovové thorium

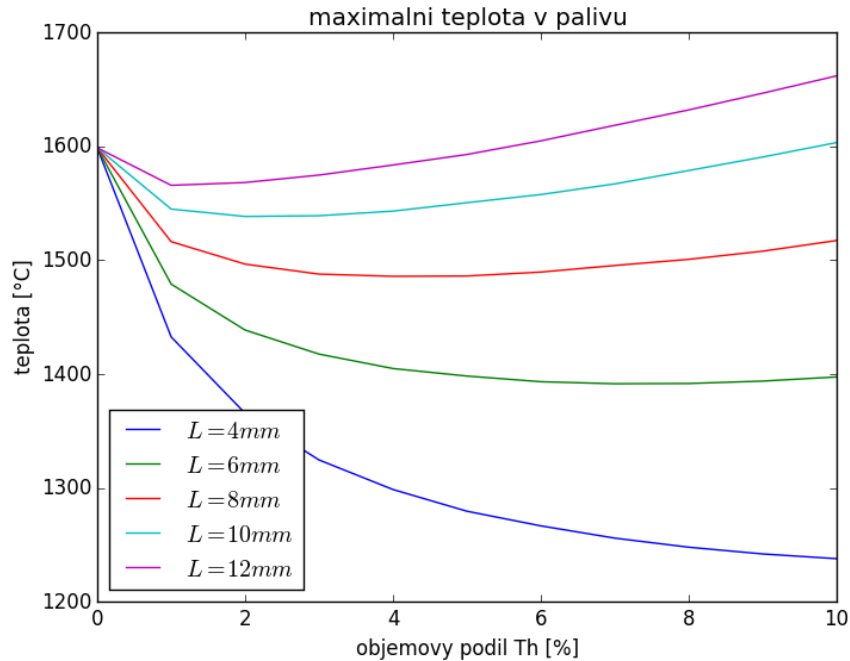
V následujících výpočtech je oxid thoričitý nahrazen kovovým thoriem. Je tedy využito faktu, že při heterogenním uspořádání nemusejí být materiály mísitelné a mít podobnou chemickou strukturu.

Na obr. 26 je znázorněno teplotní pole za případu, kdy je mezi pelety UO_2 přidán tenký plíšek thoria. Lze pozorovat axiální rozdíly teplot v řádech stovek stupňů. To je zapříčiněno vysokým koeficientem tepelné vodivosti kovového thoria.



obr. 26: teplotní pole za případu přidání vrstvy kovového Th mezi pelety UO_2

Na obr. 27 jsou pro různé podíly kovového thoria a různé výšky pelet UO_2 počítány maximální teploty v palivu. Snížení teplot pro menší výšky pelet UO_2 jsou relativně velké. Např. pro výšku pelety UO_2 6mm a podíl thoria 5% je maximální teplota snížena přibližně na teplotu 1400°C.



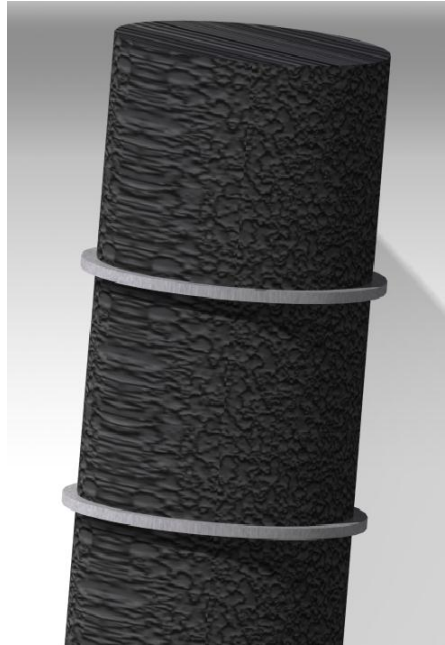
obr. 27: průběh maximálních teplot v palivu v závislosti na podílu Th pro různé výšky pelet UO_2

Vzhledem k využitému materiálu byl navržen způsob, jak dále snižovat maximální teplotu v palivu teplotu, a to rozšířením průměru kovové vrstvy thoria. Tím se dosáhne lepšího přestupu tepla a dalšího snížení teplot.

4.3.3. Kovové thorium s větším průměrem vrstvy

Palivové pelety se vyrábějí průměru o 0,2 mm menším, než je vnitřní průměr pokrytí [17]. Palivo v průběhu kampaně zvětšuje svůj objem a mezera je zde nutná, aby bylo sníženo tlakové namáhání na pokrytí a předešlo se jeho prasknutí.

V případě využití heterogenního rozložení základního a přídavného materiálu je teoreticky možné tenké pelety nebo plíšky vyrobit s větším průměrem a zlepšit tak vedení tepla od paliva směrem k povlaku tím, že by se zúžila šířka mezery, jak naznačuje obr. 28. To by bylo možné za předpokladu malých radiálních objemových změn přídavného materiálu, aby se předešlo kontaktu přídavného materiálu s pokrytím. Je tedy nutné provést analýzu štěpení a odhad napuchání přídavného materiálu, aby byla získána představa o tom, jestli je možné toto řešení využít.



obr. 28: střídání pelet UO₂ a vrstev jiného materiálu s mírně větším průměrem

4.3.3.1. Štěpení v thoriu

Nejprve je zapotřebí zjistit, jaké množství přídavného materiálu bylo rozštěpeno, a toto množství přepočítat na procento rozštěpených těžkých kovů (FIMA). Se znalostí FIMA pak můžeme odhadovat velikost napuchání přídavného materiálu. Postup určení množství štěpení v přídavném materiálu byl zvolen následující.

K určení množství štěpení v thoriovém materiálu použijeme porovnání složení paliva čerstvého a paliva o určitém vyhoření. Od počáteční koncentrace thoria v materiálu odečteme koncovou koncentraci thoria a tím získáme představu o tom, jaká část thoria byla neutrony přeměněna v jiné prvky. Pokud od této části odečteme koncentrace prvků, které vznikly přeměnou vycházející z thoria, a stále se vyskytují v inventáři, tudíž nebyly rozštěpeny, získáme počet rozštěpených těžkých jader v thoriovém materiálu, neboli FIMA. Samozřejmě je obtížné zjistit, jaká část některých izotopů pochází původem z thoria a jaká část ze základního materiálu, tedy U238 a U235. Ze znalosti inventáře a koncentrací prvků na konci kampaně při využití čistého paliva UO₂ však můžeme usuzovat na to, které izotopy a v přibližně jaké koncentraci pocházejí původem z thoria. Mezi tyto prvky patří protaktinium-233, uran-233 a uran-234. Se započtením koncentrací těchto izotopů (což jsou podle analýzy použitého paliva z U_wB₁ všechny izotopy, které mají významnější koncentraci, pokud uvažujeme izotopy thoria, protaktinia a uranu s hmotnostním číslem 234 a menším) byl určen poměr mezi koncovou a počáteční koncentrací těžkých jader. Z výpočtu vychází, že koncentrace těžkých jader použitého paliva vůči koncentraci jader thoria

paliva čerstvého, je přibližně 0,984 při vyhoření 40 000 MWd/tHM, 0,973 při vyhoření 50 000 MWd/tHM a 0,96 při 60 000 MWd/tHM. To odpovídá poměru rozštěpených těžkých jader (FIMA) 1,6%, 2,7 % respektive 4%. Záleží tedy velmi na dosaženém vyhoření v thoriu, které lze těžko odhadovat, protože v thoriu umístěném heterogenně bude přirozeně jiné vyhoření než v peletách UO_2 . Velikost napučání v závislosti na FIMA pro čisté kovové thorium také není k dispozici a přesnější hodnotu je proto těžké odhadovat.

Dalším faktorem je, že při napučání přídavného materiálu, jehož tvar má podobu tenkých plíšků o tloušťce několika desetin milimetru a průměru několika jednotek milimetrů bude mít materiál tendenci zvětšovat svůj objem v axiálním směru, neboť tímto směrem bude materiál klást menší odpor. Tento jev nelze pozorovat u klasických pelet, neboť jejich výška a průměr se přibližně rovnají. To je výhodou z hlediska radiálního napučání, nicméně palivo zase bude zvyšovat svůj axiální rozměr.

Ne každý materiál je vhodný pro koncept většího průměru přídavného materiálu. Pro udržení tvaru a celistvosti v průběhu vyhořívání jsou nutné jisté vlastnosti jako např. pevnost, pružnost, radiační stálost a jiné. Při porovnání vlastností oxidu thoričitého a kovového thoria je zřejmé, že křehký ThO_2 v keramické formě bude pro tuto aplikaci méně vhodný než plíšek z kovového thoria.

4.3.3.2. Výpočet radiální tepelné roztažnosti

Při dalších úvahách je třeba zohlednit tepelnou roztažnost přídavného materiálu ve vztahu k tepelné roztažnosti pokrytí. Je třeba zajistit, aby se peleta či plíšek o vyšším průměru při fabrikaci dali do trubky pokrytí s vůlí vložit a při provozní teplotě pak vlivem roztažnosti získali ideální rozměry. Fyzikální princip tepelné roztažnosti tomuto konceptu napomáhá. To je dáno vyšší teplotou paliva oproti teplotě pokrytí a možností využití materiálu s vyšším koeficientem teplotní roztažnosti. Tyto dva jevy pak zajistí, že za pokojové teploty bude možné vložení pelet či plíšků do trubky pokrytí s vůlí, a za provozních teplot dojde vlivem teplotní roztažnosti k přiblížení obou materiálů a tím zlepšení přenosu tepla přes mezeru. Úplný kontakt je však nežádoucí, vzhledem k možným tvarovým změnám tenké vrstvy (ohnutí do tvaru čočky).

Pro určení tepelné roztažnosti pokrytí a thoria zjistíme z jednoho typického výpočtu teplotního pole (5% thoria, 6mm vysoké pelety) přibližně průměrnou teplotu obou materiálů, která činí:

$$\overline{T}_{Zr} = 393^{\circ}\text{C}, \quad \overline{T}_{Th} = 742^{\circ}\text{C}$$

Pro odhad roztažnosti je takový způsob dostačující, pro získání přesné hodnoty bude třeba podrobnějšího iteračního výpočtu. Od průměrné teploty se odečte teplota, při které se palivo ukládá do proutku, tedy pokojová teplota, a tím získá se teplotní rozdíl pro výpočet roztažení materiálu.

$$\Delta_{Zr} = \overline{T_{Zr}} - 20^{\circ}\text{C} = 373^{\circ}\text{C}, \quad \Delta_{Th} = \overline{T_{Th}} - 20^{\circ}\text{C} = 722^{\circ}\text{C}$$

Koeficient lineární tepelné roztažnosti about materiálů:

$$\alpha_{Th} = 13,8 \cdot 10^{-6} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}, \text{ pro rozmezí teplot } 675 - 1000^{\circ}\text{C} \text{ [11]}$$

$$\alpha_{Zr} = (5,599 + 0,002241t) \cdot 10^{-6} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1} \text{ [11]}$$

Vnitřní průměr pokrytí po roztažení lze pak snadno vypočítat:

$$\begin{aligned} L &= L_0 + \Delta L = L_0 + L_0 \cdot \Delta T \cdot \alpha_{Zr} = L_0 \cdot (\Delta T \cdot \alpha_{Zr} + 1) \\ &= 7,8 \cdot (373 \cdot (5,599 + 0,002241 \cdot 393) \cdot 10^{-6}) + 1 = 7,8188 \text{ mm} \end{aligned}$$

Pro uvažování teoretického kontaktu při dosažení provozních teplot můžeme vypočítat průměr thoriového plíšku za pokojové teploty:

$$L_0 = \frac{L}{(\Delta T \cdot \alpha_{Th} + 1)} = \frac{7,8188}{722 \cdot 13,810^{-6} + 1} = 7,74 \text{ mm}$$

Dále budeme uvažovat velikosti radiálních mezer mezi přídavným materiálem a pokrytím za provozních podmínek 10 μm , 20 μm a 30 μm a vypočítáme přibližné výrobní vůle při pokojové teplotě pro tyto případy.

$$\Delta_{10\mu\text{m}} = 7,8 - \frac{L - 2 \cdot 0,01}{(\Delta T \cdot \alpha_{Th} + 1)} = 7,8 - \frac{7,8188 - 0,02}{722 \cdot 13,810^{-6} + 1} = 0,083 \text{ mm}$$

$$\Delta_{20\mu\text{m}} = 7,8 - \frac{L - 2 \cdot 0,02}{(\Delta T \cdot \alpha_{Th} + 1)} = 7,8 - \frac{7,8188 - 0,04}{722 \cdot 13,810^{-6} + 1} = 0,103 \text{ mm}$$

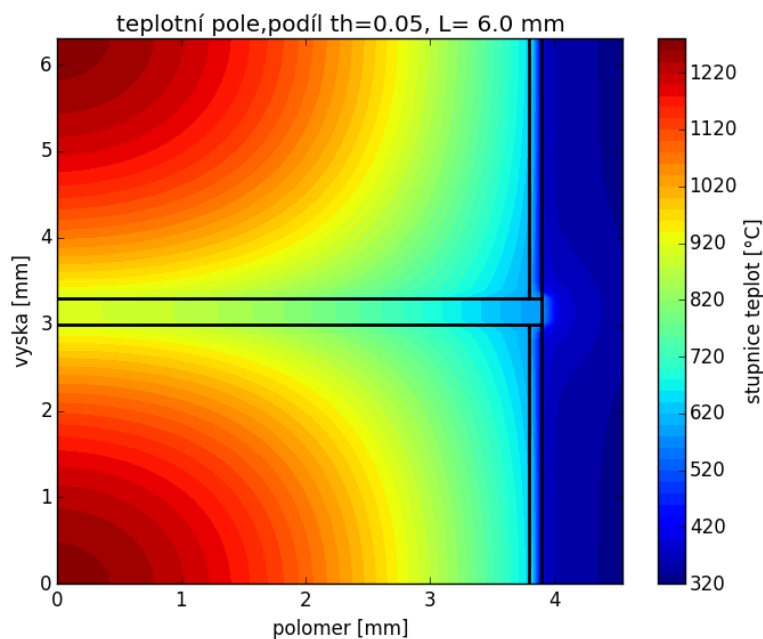
$$\Delta_{30\mu\text{m}} = 7,8 - \frac{L - 2 \cdot 0,03}{(\Delta T \cdot \alpha_{Th} + 1)} = 7,8 - \frac{7,8188 - 0,06}{722 \cdot 13,810^{-6} + 1} = 0,123 \text{ mm}$$

Z provedených výpočtů vyplývá, že oproti výrobní vůli klasického paliva 0,2 mm (2x šířka mezery 0,1mm) jsou výrobní vůle menší, a to přibližně dvakrát. Vůle velká přibližně 0,1mm by však pro montáž měla být dostačující.

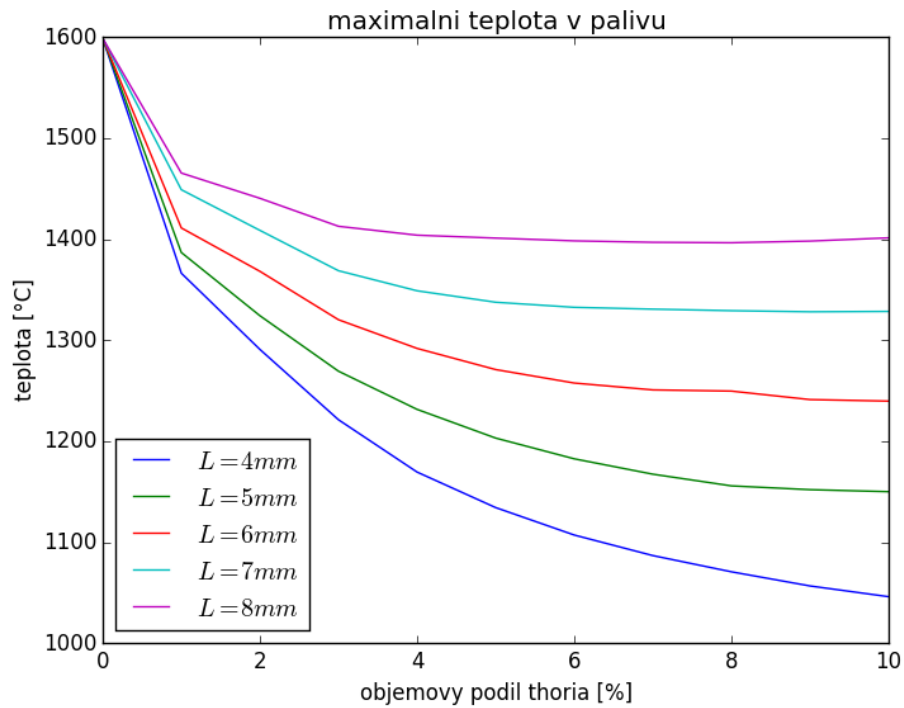
4.3.3.3. Tepelné výpočty

Dále jsou provedeny výpočty pro velikost radiální mezery mezi thoriovým plíškem a pokrytím 10, 20 a 30 μm pro různé výšky pelet UO_2 a různé koncentrace thoria. Pro každý případ jsou uvedeny grafické průběhy teplot a číselné hodnoty rozdílů maximálních teplot daného paliva od maximální teploty v klasickém palivu UO_2 . Na obr. 29 je vidět získané teplotní pole velikost mezery 10 μm . Černými čarami je zobrazeno roztažení přídavného materiálu.

velikost mezery 10 μm



obr. 29: teplotní pole pro případ vložení rozšířené vrstvy kovového thoria

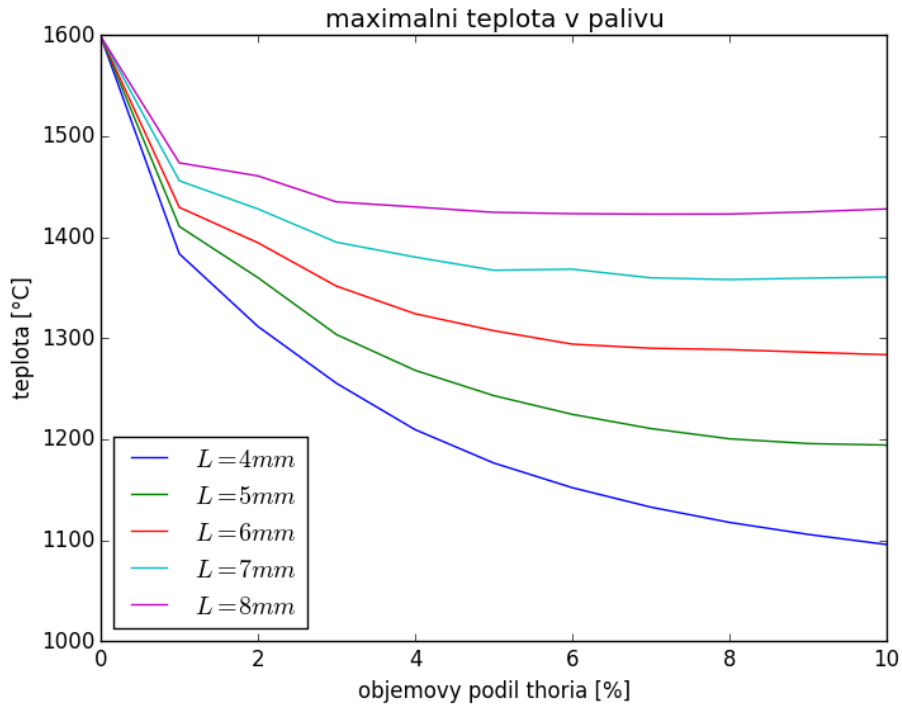


obr. 30: průběh maximálních teplot v palivu v závislosti na podílu Th pro různé výšky pelet UO_2 pro velikost mezery $10\mu m$

podíl Th[%] \ L[mm]	4	5	6	7	8
0	0°C	0	0	0	0
1	233	212	188	151	134
2	308	275	231	190	159
3	378	330	279	230	186
4	430	368	307	250	195
5	465	396	328	261	198
6	492	416	341	267	201
7	512	432	348	268	202
8	528	443	350	270	203
9	542	447	358	271	201
10	553	449	360	271	198

tabulka 3: snížení maximální teploty v palivu [°C] v závislost na výšce pelety UO_2 L a podílu thoria pro velikost mezery $10\mu m$

velikost mezery 20 μ m

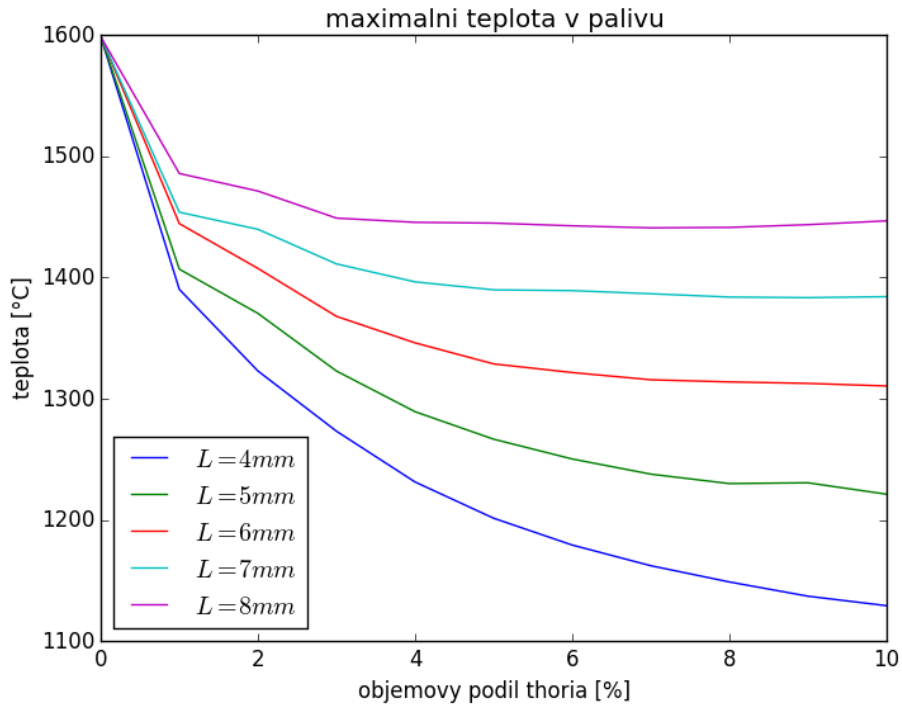


obr. 31: průběh maximálních teplot v palivu v závislosti na podílu Th pro různé výšky pelet UO₂ pro velikost mezery 20 μ m

podíl Th[%] \ L[mm]	4	5	6	7	8
0	0 °C	0	0	0	0
1	215	188	170	143	125
2	287	239	205	171	138
3	344	295	248	204	164
4	390	331	275	219	169
5	423	356	292	232	174
6	447	374	305	231	176
7	466	388	309	239	176
8	481	399	310	241	176
9	493	403	313	240	174
10	503	405	316	239	171

tabulka 4: snížení maximální teploty v palivu [°C] v závislost na výšce pelety UO₂ L a podílu thoria pro velikost mezery 20 μ m

velikost mezery 30 μ m



obr. 32: průběh maximálních teplot v palivu v závislosti na podílu Th pro různé výšky pelet UO₂ pro velikost mezery 30 μ m

podíl Th[%] \ L[mm]	4	5	6	7	8
0	0 °C	0	0	0	0
1	209	192	154	145	113
2	276	229	191	159	128
3	326	276	231	188	150
4	368	310	253	203	153
5	398	332	270	209	154
6	420	349	277	210	156
7	437	361	283	212	158
8	450	369	285	215	158
9	462	368	286	216	155
10	470	378	288	215	152

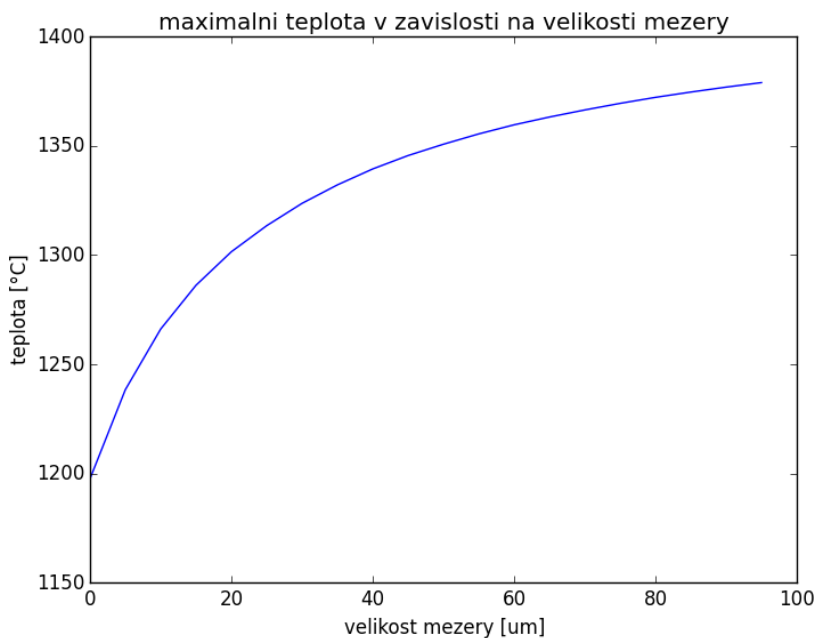
tabulka 5: snížení maximální teploty v palivu [°C] v závislost na výšce pelety UO₂ L a podílu thoria pro velikost mezery 30 μ m

4.3.3.4. *Vliv velikosti radiální mezery mezi plíškou a pokrytím*

Po provedení tepelných výpočtů případu využití rozšířeného plíšku z kovového thoria s uvažováním mezer 10, 20 a 30 μm je vidět, že velikost radiální mezery mezi pokrytím a vrstvou thoria má na teplotu v palivu velký vliv. Je proto vhodné provést výpočet závislosti maximální teploty na šířce této mezery pro určitou velikost pelety a podíl thoria, abychom mohli dobře vidět vliv šířky této mezery.

Závislost byla vypočítána pro konstantní parametry:

- $L = 6\text{mm}$, výška pelety UO_2
- $Th_{vol} = 0,05$,
objemová část (poměr) přídavného materiálu, odpovídající 0,3mm vrstvě thoria
- $drsnost = 3,2\mu\text{m}$, drsnost povrchů pelety UO_2 a přídavného materiálu



obr. 33: závislost maximální teploty v palivu v závislosti na velikosti radiální mezery mezi vrstvou thoria a pokrytím

Vliv radiální mezery mezi roztaženým plíškem a pokrytím je znázorněn na obr. 33. Velikost této mezery lze měnit rozměry plíšků z thoria. Vypočítaný průběh nemá lineární průběh, ale spíše exponenciální. Pro maximální redukci teploty bude tedy snahou snižovat velikost mezery co nejvíce, ale zároveň tak, aby rozměr plíšku nebyl příliš velký a neprojevil se jiné možné nežádoucí efekty, kterými mohou být způsobeny kontaktem obou materiálů, a to např.:

- příliš velký tlak na pokrytí
- ohnutí plíšku vlivem
 - teplotní roztažnosti
 - objemových změn způsobených napucháním materiálu

Teoreticky lze průměr plíšku vypočítat tak velký, aby se vlivem teplotní roztažnosti po dosažení provozních teplot dotkl vnitřní strany pokrytí. V reálu bude zapotřebí započítat výrobní nepřesnosti, drsnost obou materiálů a objemové změny zapříčiněné štěpením. To ve výsledku určí maximální průměr thoriového plíšku.

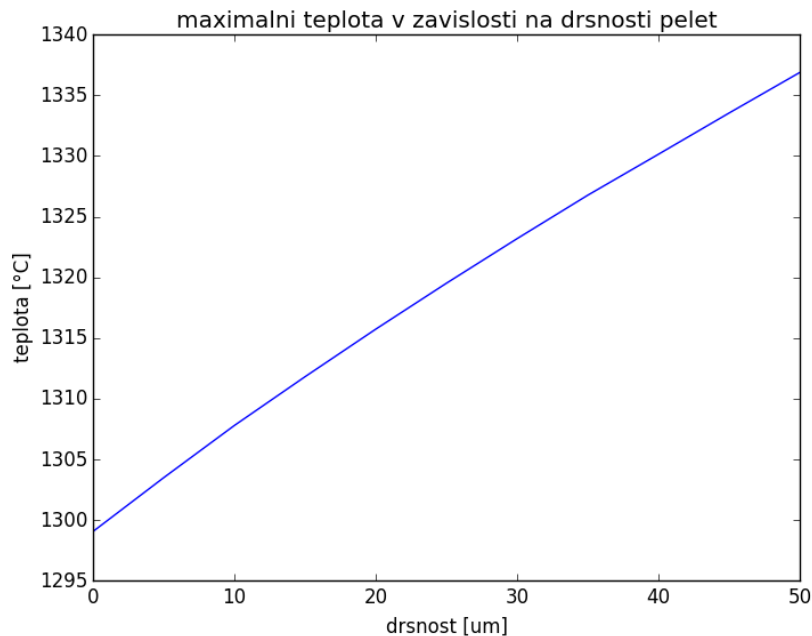
Vliv drsnosti pelet na maximální teplotu

Pro lepší představu, jaký vliv má drsnost povrchů pelet, respektive plíšků na maximální teplotu v palivovém elementu, byl vypočítán průběh této teploty na velikosti mezery, jejíž šířka se rovná dvojnásobku velikosti drsnosti povrchů, které jsou v kontaktu.

Závislost byla vypočítána pro konstantní parametry:

- $L = 6\text{mm}$, délka pelety UO_2
- $Th_{vol} = 0,05$, objemová část (poměr) přídavného materiálu, odpovídající vrstvě thoria $0,3\text{mm}$
- $mezera = 20\mu\text{m}$, radiální velikost mezery mezi pokrytím a vrstvou thoria

Výsledek je možné vidět na obr. 34. Závislost se jeví téměř lineárně. Axiální velikost mezery nemá překvapivě na maximální teplotu příliš velký dopad. Např. při zajištění maximální drsnosti povrchu $3,2\mu\text{m}$, což je maximální předepsaná drsnost pro palivové pelety [26], je rozdíl oproti teoreticky naprosto hladkým povrchům v řádu jednotek stupňů.



obr. 34: závislost maximální teploty v palivu na velikosti drsnosti povrchů v kontaktu

Výrobní (počáteční) rovinnost a drsnost samozřejmě nebude v průběhu vyhořívání paliva v reaktoru zachována. V palivu dochází ke geometrickým změnám vlivem tepelné roztažnosti a napuchání paliva, způsobené štěpením probíhajícím v materiálu. Vypočítaný průběh pak může být využit pro pozdější analýzu geometrických změn v palivu, jejímž výstupem by mohla být např. šířka mezery při určitém vyhoření paliva. Daný průběh se však jeví velice slibně, pokud vezmeme v úvahu fakt, že při rozšiřování axiální mezery bude docházet vlivem radiálního napuchání k zužování mezery mezi palivem a pokrytím. Tento jev pak bude působit opačně, tedy bude srážet maximální teplotu v palivu.

Vliv axiální tepelné roztažnosti na různých průměrech

V kódu je brán ohled na axiální tepelnou roztažnost pelet. Důvodem je, že peleta má ve středu obecně vyšší teploty než na okraji. To se projeví tak, že v ose se peleta tepelně roztáhne nejvíce, a směrem ke kraji bude roztažnost teplem klesat a bude se tak tvořit mezera. Velikost takto vzniklé mezery je např. pro peletu vysokou 6mm a koncentraci thoria 5% okolo 20 μ m. Velikost vzniklé mezery je vypočítána, a její část (podle toho na jakém poloměru se daný kontrolní objem nachází) přičtena k mezeře vzniklé drsností povrchů. Uprostřed je přičtená velikost rovná nule, a naopak na kraji je přičtena plná velikost (např. zmíněných 20 μ m). Velikost mezery na ostatních poloměrech je dopočítána lineárně.

4.3.4. Porovnání tepla uloženého v palivu

Dalším benefitem takto změněného teplotního pole je, že kromě snížené maximální teploty jsou teploty v palivovém proutku celkově sníženy, a to tím více, čím dále od středu pelety. V palivu je tak uloženo celkově méně tepla. Tento stav je výhodný např. pro případ výpadku všech HCČ. V tomto případě je reaktor během pár vteřin odstaven, ale dále produkuje teplo. V prvních desítkách sekund není reaktor schopen chladit se bez chodu čerpadel přirozenou cirkulací a pozvolný doběh čerpadel je zajištěn setrvačníky. Setrvačnost čerpadel tak musí mít dostatečnou schopnost chladit reaktor tak, aby vlivem tepla uloženého v palivu a zbytkového výkonu reaktoru nedošlo k tavení paliva nebo jeho pokrytí. V případě menšího množství uloženého tepla v palivu existuje větší rezerva tepla, které je palivo schopné přijmout, než se začne tavit. Pro tento účel bylo provedeno porovnání uloženého tepla v palivu využívaném nyní a palivem teoreticky zkoumaném v této práci. [4]

Výpočet tepla uloženého v palivu

Při výpočtu tepla uloženého v palivu, tedy jeho entalpie, využijeme již získané teplotní pole a rozdělení na kontrolní objemy, kterých bylo využito v jádru výpočetního kódu. Suma entalpií jednotlivých kontrolních objemů pak dává celkové teplo, uložené v jedné palivové peletě (přesněji jen v polovině pelety, protože kód díky symetrii počítá jen polovinu).

Základem výpočtu jsou rovnice entalpií v závislosti na teplotě. Nepočítáme zde celkovou entalpii, která by byla vztažena k absolutní nule, ale její rozdíl oproti pokojové teplotě 25°C. Rovnice entalpie byly pro UO₂ a helium získány přímo a pro thorium a zirkoniové pokrytí byly dopočteny integrací rovnice tepelných kapacit v závislosti na teplotě. Takto získané rovnice dávají informaci o entalpii vztažené na jeden mol nebo jeden kilogram látky a tak bylo nutno množství látky pro jednotlivé kontrolní objemy dopočítat.

Postup výpočtu

UO₂

$$\rho_{UO_2} = 10.4 \frac{g}{cm^3}, \text{ hustota materiálu v kontrolním objemu}$$

$$M_{UO_2} = 238 + 2 * 16 = 270 \frac{g}{mol}, \text{ molární hmotnost materiálu v kontrolním objemu}$$

$$dm = dV \cdot \rho_{UO_2}, \text{ hmotnost kontrolního objemu}$$

$$n = \frac{dm}{M_{UO_2}} \text{ [mol]}, \text{ látkové množství kontrolního objemu}$$

$$H(T) - H(298.15K) = -21.1762 + 52.1743t + 43.9753t^2 - 28.0804t^3 + 7.88552t^4 - 0.52668t^5 + 0.71391t^{-1} \left[\frac{kJ}{mol} \right], \text{ rovnice entalpie pro daný materiál [7]}$$

kde $t = T[K]/1000$

$Q = n \cdot H [J]$, výsledné akumulované teplo v kontrolním objemu

Th

$$\rho_{Th} = 11.7 \text{ g/cm}^3$$

$$M_{Th} = 232 + 2 \cdot 16 = 264 \text{ g/mol}$$

$$c_p(T) = 24.905 + 4.049 \cdot 10^{-3}T + 5.591 \cdot 10^{-6}T^2 \text{ [J/molK]} [7]$$

integrací získáme obecný vztah pro entalpii

$$H(T) = 24.905T + 2.0245 \cdot 10^{-3}T^2 + 1.8637 \cdot 10^{-6}T^3 + K$$

konstantu dopočítáme pro okrajovou podmínku $H(298.15K) = 0$

$$H(T) - H(298.15K) = -7654.784 + 24.905T + 2.0245 \cdot 10^{-3}T^2 + 1.8637 \cdot 10^{-6}T^3 \text{ [J/mol]}$$

Zr

$$\rho_{Zr} = 6.52 \text{ g/cm}^3$$

$$M_{Zr} = 91 \text{ g/mol}$$

$$c_p(T) = 255.66 + 0.1024T \text{ [J/molK]} [7]$$

integrací získáme obecný vztah pro entalpii

$$H(T) = 255.66T + 0.0512T^2 + K$$

konstantu dopočítáme pro okrajovou podmínku $H(298.15K) = 0$

$$H(T) - H(298.15K) = -80776.4 + 255.66T + 0.0512T^2 \text{ [J/mol]}$$

He

tlak $p_e = 0.4 \text{ Mpa}$

látkové množství dopočítáme ze stavové rovnice pro ideální plyn

$$n = \frac{p \cdot V}{R \cdot T}$$

$$H(T) - H(298.15K) = -6.19734 + 20.786t \text{ [27]}$$

kde $t = T[K]/1000$

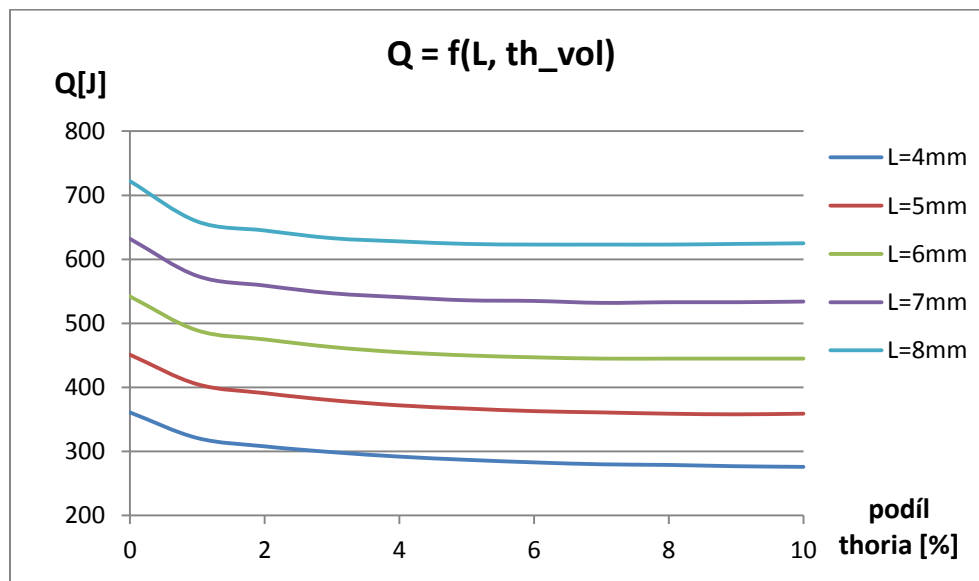
Tím jsme dostali entalpii každého kontrolního objemu a jejich sumou získáme celkové teplo uložené v peletě oproti stavu při pokojové teplotě. Funkce pro výpočet entalpií je uvedena v příloze 7.

Výsledky

Tabulka 6 ukazuje hodnoty entalpií jednotlivých elementů, získané výpočtem pro různé hodnoty podílu thoria a výšek pelet UO_2 pro velikost radiální mezery mezi pokrytím a vrstvou thoria $20\mu m$. Např. pro peletu o délce $L = 6mm$ a objemového podílu thoria 5% dostáváme uložené teplo 446 J oproti 536 J, které jsou uloženy v klasickém palivu bez thoria.

podíl Th[%] \ L[mm]	4	5	6	7	8
0	361 J	451	542	632	722
1	321	405	489	574	659
2	308	391	475	559	645
3	299	380	463	547	633
4	292	372	455	541	628
5	287	367	450	536	624
6	283	363	447	535	623
7	280	361	445	532	623
8	279	359	445	533	623
9	277	358	445	533	624
10	276	359	445	534	625

tabulka 6: entalpie uložená v palivové peletě v závislosti na délce pelety a podílu thoria



obr. 35: průběh tepla uloženého v palivu v závislosti na výšce pelety a podílu thoria

Při pohledu na grafické znázornění na obr. 35 lze pozorovat, že ze začátku se s přidáváním thoria entalpie snižuje nejvyšším tempem, ale nad 5% jsou úbytky již minimální. Tabulka 7 znázorňuje, jakou část tepla peleta o dané výšce s daným množstvím thoria obsahuje v porovnání s klasickým palivem. Lze vidět, že snížení entalpie o 15% může být reálně dosaženo i u pelety vysoké 6 či 7mm. Zjistit přínos takto snížené entalpie by vyžadovalo složitý výpočet, pro který bychom museli znát průběh tepelného výkonu reaktoru po signálu pro havarijní odstavení reaktoru. Velký vliv zde hraje doba pádu absorpčních tyčí, množství a délky života zpožděných neutronů pro dané palivo.

podíl Th[%] \ L[mm]	4	5	6	7	8
0	1	1	1	1	1
1	0.889	0.898	0.902	0.908	0.913
2	0.853	0.867	0.876	0.884	0.893
3	0.828	0.843	0.854	0.866	0.877
4	0.809	0.825	0.839	0.856	0.870
5	0.795	0.814	0.830	0.848	0.864
6	0.784	0.805	0.825	0.847	0.863
7	0.776	0.800	0.821	0.842	0.863
8	0.773	0.796	0.821	0.843	0.863
9	0.767	0.794	0.821	0.843	0.864
10	0.765	0.796	0.821	0.845	0.866

tabulka 7: podíl entalpie uložené v palivové peletě (a ve vrstvě thoria) v závislosti na délce pelety a podílu thoria vůči entalpii v klasickém palivu

4.3.5. Možné problémy konceptu

Při využití navrženého typu jaderného paliva s heterogenním rozmístěním kovového thoria může docházet k jevům, které u klasického paliva UO_2 nevidíme. Některé z nich budou popsány na následujících řádcích.

Tvarová deformace

Během provozu by bylo nutné zabránit větším tvarovým změnám tenké vrstvy thoria, např. ohnutí do tvaru čočky. Tento stav by mohl nastat při kontaktu vrstvy s pokrytím a následném tlaku, který by zapříčinil deformaci materiálu s menší tuhostí. Z toho důvodu by bylo nutné přesně navrhnout průměr thoriového plíšku, aby se zamezilo kontaktu i se započítáním nepřesností výroby, tvarových deformací během provozu a určité rezervy.

Chemické reakce

Jak je známo, v jaderném palivu se během vyhořívání tvoří celá řada prvků a jejich izotopů, z nichž kterýkoliv teoreticky může chemicky reagovat s thoriem a způsobit nežádoucí jevy. Těmi může být např. vytvoření vrstvy o nižší tepelné vodivosti, která by způsobila zhoršení přestupu tepla.

Lokální zahřátí pokrytí

Při uvažování roztažené vrstvy thoria dochází lokálně k většímu ohřevu materiálu pokrytí než v jiných místech. Tento vzrůst teploty může způsobit nesouměrné tepelné namáhání pokrytí a ztrátu mechanických vlastností pokrytí. Pro námi často uvažovaný případ přidání 5% thoria při výšce UO_2 pelet 6mm a radiální mezeře $20\mu\text{m}$ lokální teplota pokrytí dosahuje 380°C . Na nejchladnějším místě vnitřního povrchu je teplota 348°C . Při uvažování radiální mezery $10\mu\text{m}$ je nejvyšší teplota vnitřní stěny 392°C ve srovnání s nejnižší teplotou 347°C . Tyto rozdíly i maximální teploty jsou vzhledem k vlastnostem zirkonia přijatelné. Může, však nastat stav, kdy bude plíšek asymetricky umístěn u jedné stěny. V tom případě teplota pokrytí v daném místě opět vzroste. Při uvažování mezery $0\mu\text{m}$ teplota dosahuje až 449°C , což už je teplota, při které zirkonium ztrácí některé mechanické vlastnosti. V reálném případě však musíme uvažovat drsnost jak vrstvy thoria, tak vnitřní drsnost pokrytí, a již při uvažování mezery $5\mu\text{m}$ dosahuje teplota maximálně 403°C . Je však nutné podotknout, že i při dosažení vyšších teplot je tento vzrůst velice lokální a tudíž nehrozí ztráta vlastností pokrytí po celém jeho průřezu, ale jen na malé vrstvě u vnitřního povrchu.

Popraskání pelet omezující axiální vedení

Jaderné palivo během vyhořívání vlivem nesouměrného tepelného namáhání praská a vzniklé pukliny pak zhoršují vedení tepla materiálem. Pokud by docházelo k prasklinám v horizontálním směru, vedení tepla by v axiálním směru bylo omezeno, což by způsobilo vzrůst teploty. Odhadovat vliv tohoto jevu je však mimo možnosti autora.

5. Výpočet nákladů

V této kapitole bude porovnána cena klasického paliva, směsného paliva $\text{ThO}_2 - \text{UO}_2$ (96% ThO_2 ; u nižších koncentrací není snížení teploty značné) a paliva s heterogenní příměsí 5% kovového thoria. Z hlediska možného uplatnění navrhovaného paliva je velice důležitým faktorem jeho cena. Na změnu ceny paliva má vliv zejména:

- náročnější obohacovací proces uranu
- menší potřeba UO_2 vlivem nahrazení určité části thoriem
- fabrikace většího množství pelet kvůli snížení jejich výšky – u heterogenního paliva
- cena kovového thoria nebo ThO_2
- fabrikace plíšku thoria či dražší výroba ThO_2
- náročnější kontrola paliva u heterogenního paliva

5.1. Náročnější obohacovací proces

Jak bylo popsáno v kapitole 3.1.1, uranová část paliva bude oproti původnímu palivu více obohacena. Úměrně k původnímu palivu o obohacení 3% je nové obohacení paliva vypočítáno podle rovnice 5.

$$e_{235,1} = \frac{3}{1 - 0,05} = 3,16\% \text{ pro } 5\% \text{ thoria objemových}$$

96% hmotnostních je potřeba převést na objemový podíl.

$$\frac{\frac{w_{\text{ThO}_2}}{\rho_{\text{ThO}_2}}}{\frac{w_{\text{ThO}_2}}{\rho_{\text{ThO}_2}} + \frac{w_{\text{UO}_2}}{\rho_{\text{UO}_2}}} = \frac{\frac{96}{9,5}}{\frac{96}{9,5} + \frac{4}{10,4}} = 0,963$$

$$e_{235,1} = \frac{3}{1 - 0,963} = 81,08\% \text{ pro } 96,3\% \text{ thoria objemových}$$

Pro výpočet cen paliva o různém obohacení byl využit kalkulátor cen paliva na webových stránkách UxC (the Ux Consulting Company) [28]. Ceny jednotlivých surovin či fází výroby obohaceného uranu předpokládá kalkulátor na základě současných cen surovin nebo služeb (květen 2016). Pro tento výpočet byly uvažovány následující předpoklady:

- obohacení přírodního uranu 0,711%
- obohacení ochuzeného uranu 0,194% (optimální hodnota vypočítaná kalkulátorem)
- obohacení produktu

- 3,16% U235 pro palivo s objemovými 5% Th
- 81,08% U235 pro palivo s hmotnostními 96% ThO₂
- cena U₃O₈ 28,50\$/lb
- cena konverze 6,5 \$/kg uranu ve formě UF₆
- konverzní faktor UF₆ 2,61283
- cena obohacovací jednotky SWU 59,00 \$

Výsledné ceny:

- pro obohacení produktu 3,00% EUP = 698 \$/kgU
- pro obohacení produktu 3,16% EUP = 743 \$/kgU
- pro obohacení produktu 81,08% EUP = 24 815 \$/kgU

5.2. Menší potřeba UO₂

Díky tomu, že thorium tvoří v palivu určitou objemovou část (zde 5% nebo 96,3%), potřeba uranu bude o tuto část snížena (ale zase bude obohacnější tak, aby množství U235 bylo ve srovnání s klasickým palivem stejné). Uran pro 1kg směsného paliva pak bude stát:

$$m_{Th} = 0,05 \cdot \frac{\rho_{Th}}{\rho_{UO_2}} = 0,05 \cdot \frac{11,7}{10,4} = 0,056kg$$

$$743 \cdot (1 - 0,056) = 701$, *pro 5% thoria*$$

$$22\,906 \cdot (1 - 0,96) = 916$, *pro 96% thoria*$$

Potřebné množství uranu pro nové palivo bude poměrně k ceně uranu původního paliva o 0,4%, respektive o 31,2% dražší.

$$\frac{701}{698} = 1,0043 \quad \textit{pro 5% thoria}$$

$$\frac{916}{698} = 1,312 \quad \textit{pro 96% thoria}$$

5.3. Cena thoria

Využívání thoria je dnes velice omezené, využívání kovového thoria prakticky nulové. Z toho důvodu lze informace o cenách oxidu nebo kovu velice obtížně dohledávat. Také lze očekávat, že při vyšším využívání thoria v reaktorech by se jeho cena měnila. Nejběžnější zdroj thoria je fosfátový minerál monazit, který obsahuje průměrně 6-7% fosfátu thoria. Cena, za kterou je ekonomické thorium získávat byla odhadnuta na 80 \$/kg podle [29]. Pro účely této práce bude tedy cena oxidu thoria volena na 80 \$/kg a cena kovového thoria na 150 \$/kg (vzhledem k nulovému uplatnění v jiných odvětvích a nízké potřebě kovového thoria pro navrhované palivo).

Na kilogram směsného paliva pak cena thoria při objemové části 5%, respektive hmotnostní části 96% odpovídá:

$$\text{cena} = 0,056 \cdot 150 = \frac{8,44\$}{kg} \text{ směsného paliva s } 5,6\% \text{ hmotnosti Th}$$

$$\text{cena} = 0,96 \cdot 80 = \frac{76,8\$}{kg} \text{ směsného paliva s } 96\% \text{ hmotnosti ThO}_2$$

5.4. Vyšší náklady fabrikace

5.4.1. Palivo s kovovým thoriem

Náklady na fabrikaci jaderného paliva jsou dnes přibližně 300\$/kg [30]. Náklady na fabrikaci paliva s kovovým thoriem budou ovlivněny následujícími faktory:

- výroba většího množství pelet. Pelety dnes používaných LWR paliv mají výšku přibližně 12mm. Při využití uvažovaného paliva bude tedy nutné nařezat a obrobit přibližně dvojnásobné množství pelet
- výroba thoriových plíšků přesných rozměrů
- náročnější kontrola paliva, aby bylo jisté, že mezi každými dvěma peletami z uranu bude thoriový plíšek

Informace o ceně jednotlivých kroků fabrikace, jimiž jsou konverze UF_6 na práškový UO_2 , zpracování prášku a výroba pelet, výroba palivových proutků, distančních mřížek, dalších konstrukčních částí palivového souboru a jeho sestavení se nepodařilo dohledat. V rámci této práce bude učiněn hrubý odhad navýšení fabrikace o +10% ceny, čímž by se dodatečné kroky měly bezpečně pokrýt. To odpovídá navýšení ceny fabrikace o 30 \$/kg paliva.

5.4.2. Palivo ThO₂-UO₂

Pro toto palivo bude hlavní přírůžkou ceny složitější postup fabrikace pelet ThO₂ vzhledem k vysoké teplotě tání 3300°C. Byl nalezen odhad ceny, který počítá s navýšením +20% ceny fabrikace [9]. Při uvažované ceně fabrikace paliva UO₂ 300 \$/kg odpovídá toto navýšení 60 \$/kg.

5.5. Celkové navýšení ceny

Cena původního paliva odpovídá součtu cen obohaceného uranu a ceny fabrikace:

$$P_{UO_2} = 698 + 300 = 998 \text{ \$/kg}$$

Cena navrhovaného paliva s obsahem 5% kovového thoria se skládá z ceny uranu, thoria a fabrikace. Poměrné zdražení paliva oproti klasickému palivu pak odpovídá přibližně 4%.

$$P_{UO_2+Th} = 701 + 8 + 330 = 1039 \text{ \$/kg}$$

$$\text{poměr cen} = \frac{1039}{998} = 1,041$$

Cena směsného paliva ThO₂-UO₂ s 96% ThO₂ se vypočítá obdobně. Zdražení tohoto typu paliva odpovídá +35%.

$$P_{ThO_2+UO_2} = 916 + 71 + 360 = 1347 \text{ \$/kg}$$

$$\text{poměr cen} = \frac{1347}{998} = 1,35$$

Také je třeba zmínit, že palivo s thoriem ušetří určité provozní náklady z důvodu zmenšení počátečního přebytku reaktivity a uvolněním výkonového efektu vlivem snížení teplot paliva. Ocenit tyto benefity je však mimo rozsah této práce.

Výsledky zjednodušené ekonomické analýzy jsou zobrazeny v tabulce 8.

typ paliva	UO ₂	95%UO ₂ -Th	96%ThO ₂ -UO ₂
cena [\\$]	998	1044	1347
zdražení [%]	-	4,1	35

tabulka 8: ceny jednotlivých typů paliv a jejich poměrné zdražení vůči palivu UO₂

6. Shrnutí výsledků

Na následujících řádcích budou sloučeny výsledky z jednotlivých kapitol a bude porovnáno palivo z pelet UO_2 s palivem s homogenní nebo heterogenní příměsí thoria. Vzhledem k tomu, že nižší koncentrace homogenně rozmístěného ThO_2 nepřinesly výrazné benefity snížení maximální teploty a heterogenní rozmístění ThO_2 mělo na středové teploty v palivu dokonce nežádoucí efekt, byly k porovnání zvoleny tyto typy paliv:

- UO_2
- $\text{ThO}_2 - \text{UO}_2$, homogenní směs s 96% hmotnosti ThO_2
- $\text{Th} - \text{UO}_2$, heterogenní směs 5% objemu kovového thoria s UO_2

Pro případ 5% kovového thoria uvažujeme pelety UO_2 vysoké 6mm a tomu odpovídající 0,3m tenké thoriovou vrstvou. Radiální mezera mezi thoriovou vrstvou a pokrytím za provozních teplot je uvažována 20 μm , čemuž odpovídá výrobní vůle pro montáž do pokrytí 0,1mm za studeného stavu.

Výsledky jsou shrnuty v tabulce 9.

	UO_2	$\text{ThO}_2(96\%)-\text{UO}_2$	$\text{Th}(5\%)-\text{UO}_2$
vyhoření, kdy je k_{inf} srovnáno UO_2 [MWd/tHM]	-	60 000	50 000
maximální teplota v palivu [$^{\circ}\text{C}$]	1599	1445	1307
snížení maximální teploty [$^{\circ}\text{C}$]	-	154	292
cena za kg paliva [Š]	998	1347	1044
procentní zdražení ve srovnání s UO_2 [%]	-	35	4,1

Tabulka 9: srovnání parametrů jednotlivých typů paliv

Ze srovnání jednoznačně vyplývá, že co se týče vlivu na multiplikační koeficient, snížení maximální teploty a ceny je navrhované palivo s heterogenním rozmístěním 5% kovového thoria lepší ve všech porovnávaných parametrech. U heterogenního způsobu přidání thoria je navíc celkově sníženo teplotní pole v palivu, což má za následek pokles akumulovaného tepla v peletě přibližně o 15%. Teplotu lze navíc nadále redukovat snižováním výšky pelet, a tím i vrstvy thoria. Pro peletu UO_2 vysokou 4mm a plíšek thoria o tloušťce 0,2mm je odpovídající maximální teplota snížena na 1378 $^{\circ}\text{C}$.

Závěr

Úkolem této práce bylo zkoumat využití thoria, ve formě ThO_2 , s cílem zvýšení tepelné vodivosti paliv lehkovodních reaktorů, ve kterých se dnes jako palivo používá uran, ve formě UO_2 . Smyslem zvyšování tepelné vodivosti je snížení teplotního pole, které je v používaném palivu relativně vysoké. Výpočty paliva byly rozděleny na tři základní části: neutronické výpočty, kde byl zkoumán vliv thoria na udržování štěpné reakce, tepelné výpočty, jejichž úkolem bylo určení teplotního pole paliva a maximální teploty, a výpočet nákladů, porovnávající cenu paliva s nyní využívaným palivem. Maximální teplota původního paliva byla vypočítána na 1599°C a pro výpočet nákladů bylo uvažováno průměrné obohacení 3% U235 .

Po zkoumání homogenní směsi ThO_2 - UO_2 se ukázalo, že zásadnější snížení maximální teploty se projeví až při velice vysoké koncentraci ThO_2 . Např. pro 96% ThO_2 pokles odpovídá přibližně 150°C . Toho je však dosaženo za cenu využití vysoce obohaceného uranu přibližně 80% U235 , což je jedním z hlavních důvodů zdražení tohoto paliva přibližně o 35%. Dalšími problémy využití tohoto paliva jsou dosud nevyřešené postupy palivového cyklu s ThO_2 a využití vysoce obohaceného uranu, které se dnes maximálně omezuje.

Bylo proto navrženo další využití ThO_2 , a to v heterogenním rozmístění, kdy se v palivu střídají pelety UO_2 a úzké pelety ThO_2 . Tímto způsobem však nebylo dosaženo poklesu teplot, i přes vyšší koeficient tepelné vodivosti ThO_2 ve srovnání s UO_2 .

V další části bylo místo oxidu thoria využito kovové thorium, které vyniká vysokou tepelnou vodivostí. Bylo také navrženo rozšíření průměru vrstvy thoria za cílem zvýšení přestupu tepla. Podařilo se dosáhnout relativně velkého snížení teplot v řádech stovek stupňů, v závislosti na podílu thoria a výšce pelet UO_2 . Např. pro pelety UO_2 vysoké 6 milimetrů a objemový podíl thoria 5%, čemuž odpovídá výška thoriové vrstvy 0,3 milimetru, bylo dosaženo redukce maximální teploty palivu přibližně o 290°C . Při snížení výšky pelety na 4mm, což odpovídá výšce vrstvy thoria 0,2mm, je teplota snížena dokonce o 420°C . Díky nízkému podílu thoria je toto palivo schopné dosáhnout při stejném absolutním množství U235 stejného vyhoření jako nyní používaná paliva. Zdražení paliva bylo odhadnuto na necelých 5%, což je poměrně nízké navýšení ceny ve srovnání s dosaženými benefity.

Ač byly v práci uvažovány některé jevy, které se při výpočtu navrhovaného typu paliva projeví, mnohé z nich byly kvůli složitosti v rámci této práce zanedbány. Důkladnější zhodnocení tohoto paliva bude vyžadovat zahrnutí všech těchto jevů a případné experimentální výzkumy, aby se ukázalo, zda je možné toto palivo v reaktoru se zjištěným přínosem a bezpečně využít.

Přílohy

1. Zdrojový kód UwB₁

```

uwbl vver50 depletion test
4                                prl_threads - number of threads
20000                            npg - number of neutrons per generation
5                                nsng - number of skipped neutron generations
105                              tnnng - total number of neutron generations
2                                n_ccregion - number of concentric cylinder regions
0.38 0.455                      rccregion - concentric cylinder region radii
0.6375                          hpitch - half pitch
2                                lat - lattice type (1=square, 2=hexagonal)
43                              idepl - number of depletion intervals
4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01
4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01
4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01
4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01
4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01
4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01
4.00000E+01 depl_power - irradiation power
1.00000E+00 2.00000E+00 3.00000E+00 4.00000E+00 5.00000E+00 1.00000E+01 1.50000E+01
2.00000E+01 2.50000E+01 3.75000E+01 5.00000E+01 6.25000E+01 7.50000E+01 8.75000E+01
1.00000E+02 1.12500E+02 1.25000E+02 1.37500E+02 1.50000E+02 1.62500E+02 1.75000E+02
1.87500E+02 2.00000E+02 2.12500E+02 2.25000E+02 2.37500E+02 2.50000E+02 3.12500E+02
3.75000E+02 4.37500E+02 5.00000E+02 5.62500E+02 6.25000E+02 6.87500E+02 7.50000E+02
8.12500E+02 8.75000E+02 9.37500E+02 1.00000E+03 1.06250E+03 1.12500E+03 1.18750E+03
1.25000E+03 depl_time - irradiation days
1 0 0                            depl_type - regions depletion (0=no depletion, 1=power depletion, 2=flux
depletion)
1 2 2                            reg_libtype - regions transport/burnup libraries position
900.0 625.0 578.0              maxwell_kelvin - regions maxwell temperatures
"/uwbl1libs/"                 folder with uwbl libraries
uwblzaid0423to3820.txt         position of transport nuclides in depletion nuclides
uwblnmass.txt                 nuclide mass relative to neutron
uwblqvalues4mc.txt            qvalues for inelastic reactions
uwblchi16.txt                 xs_n2n chi data library
uwblchi17.txt                 xs_n3n chi data library
uwblchi18.txt                 xs_fission chi data library
uwblchi91.txt                 xs_inelastic_continuum chi data library
uwblnubar.txt                 nubar data library
uwblangular02.txt            xs_elastic angular distribution data library
uwblangular51t90.txt         xs_inelastic_discrete angular distribution data library
uwblangular91.txt            xs_inelastic_continuum angular distribution data library
uwblegrid.txt                 energy grid for xs data
uwblxscom0900k.txt           xs data library no1
uwblxscom0600k.txt           xs data library no2
uwblaiiuni.txt                transition matrix Aii, universal flux-independent part
uwblfijphi.txt                transition data Fij, part of Aij, case-flux-dependent part

```

```

uwb1ajuni.txt           transition matrix Aij, universal flux-independent part
uwb1deplxscom0900k.txt cross section library for depletion reactions no1
uwb1deplxscom0600k.txt cross section library for depletion reactions no2
uwb1qvalues4depl.txt   recoverable energy library for depletion reactions
4                       number of nuclides in region 1 (fuel)
12                      number of nuclides in region 2 (clad)
4                       number of nuclides in region 3 (mod)
15  86  80160 4.63170E-02   nuclear densities in region 1 (fuel)
349 3459 902320 9.46001E-04
362 3514 922350 1.16922E-03
365 3518 922380 2.10433E-02
117 1039 400900 2.19170E-02   nuclear densities in region 2 (clad)
118 1041 400910 4.77956E-03
119 1042 400920 7.30565E-03
121 1044 400940 7.40363E-03
123 1046 400960 1.19276E-03
124 1081 410930 4.22623E-04
304 2594 721740 1.05594E-08
305 2596 721760 3.47139E-07
306 2597 721770 1.22753E-06
307 2600 721780 1.80037E-06
308 2603 721790 8.98867E-07
309 2606 721800 2.31514E-06
1  1  10010 5.01551E-02   nuclear densities in region 3 (mod)
10 41  50100 4.98826E-06
11 42  50110 2.00784E-05
15 86  80160 2.50775E-02
eof

```

2. Zdrojový kód Serpent

```
set title "VVER-1000 depletion"
```

```
surf 1 cyl 0.0 0.0 0.38  
surf 2 cyl 0.0 0.0 0.455  
surf 3 hexxc 0.0 0.0 0.6375
```

```
cell 1 0 fuel -1  
cell 2 0 clad 1 -2  
cell 3 0 mod 2 -3  
cell 4 0 outside 3
```

```
mat fuel sum burn 1  
8016.09c 4.63113E-02  
90232.09c 9.45924E-04  
92235.09c 1.16910E-03  
92238.09c 2.10406E-02
```

```
mat clad sum  
40090.06c 2.19170E-02  
40091.06c 4.77956E-03  
40092.06c 7.30565E-03  
40094.06c 7.40363E-03  
40096.06c 1.19276E-03  
41093.06c 4.22623E-04  
72174.06c 1.05594E-08  
72176.06c 3.47139E-07  
72177.06c 1.22753E-06  
72178.06c 1.80037E-06  
72179.06c 8.98867E-07  
72180.06c 2.31514E-06
```

```
mat mod sum  
1001.06c 5.01551E-02  
5010.06c 4.98826E-06  
5011.06c 2.00784E-05  
8016.06c 2.50775E-02
```

```
set acelib "/home/outgazer/Plocha/serpent/xsdata/endfb7/sss_endfb7u.xsdata"  
set declib "/home/outgazer/Plocha/serpent/xsdata/endfb7/sss_endfb7.dec"  
set nfylib "/home/outgazer/Plocha/serpent/xsdata/endfb7/sss_endfb7.nfy"
```

```
set bc 3
```

```
set pop 10000 105 5
```

```
set powdens 40e-3
```

```
dep butot
```


4.000E-02 8.000E-02 1.200E-01 1.600E-01 2.000E-01
4.000E-01 6.000E-01 8.000E-01 1.000E+00 1.500E+00
2.000E+00 2.500E+00 3.000E+00 3.500E+00 4.000E+00
4.500E+00 5.000E+00 5.500E+00 6.000E+00 6.500E+00
7.000E+00 7.500E+00 8.000E+00 8.500E+00 9.000E+00
9.500E+00 1.000E+01 1.250E+01 1.500E+01 1.750E+01
2.000E+01 2.250E+01 2.500E+01 2.750E+01 3.000E+01
3.250E+01 3.500E+01 3.750E+01 4.000E+01 4.250E+01
4.500E+01 4.750E+01 5.000E+01 5.250E+01 5.500E+01
5.750E+01 6.000E+01

set inventory

“seznam izotopů, jejichž průběh chceme vidět ve výstupním souboru“

902320
912330
922330
922340
922350
922360
922370
922380

...

3. UWB₁ – výsledky k_{inf} pro různé koncentrace ThO₂

Vyhoření\ThO ₂	0 %	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0 MWd/tHM	1.334	1.325	1.318	1.312	1.308	1.301	1.294	1.291	1.287	1.284
40	1.315	1.306	1.299	1.293	1.290	1.283	1.277	1.274	1.269	1.266
80	1.312	1.303	1.296	1.290	1.286	1.279	1.273	1.270	1.266	1.263
120	1.311	1.302	1.295	1.289	1.285	1.278	1.272	1.269	1.265	1.262
160	1.310	1.301	1.294	1.288	1.284	1.277	1.271	1.268	1.264	1.261
200	1.309	1.300	1.293	1.287	1.283	1.277	1.271	1.268	1.263	1.260
400	1.307	1.298	1.291	1.285	1.281	1.274	1.268	1.265	1.261	1.258
600	1.305	1.296	1.289	1.283	1.279	1.272	1.266	1.263	1.259	1.256
800	1.303	1.294	1.287	1.281	1.277	1.271	1.265	1.262	1.257	1.254
1000	1.302	1.293	1.286	1.280	1.276	1.269	1.263	1.260	1.256	1.253
1500	1.299	1.290	1.283	1.277	1.273	1.266	1.260	1.257	1.253	1.250
2000	1.295	1.286	1.279	1.273	1.269	1.263	1.257	1.254	1.249	1.246
2500	1.291	1.282	1.275	1.269	1.265	1.259	1.253	1.250	1.245	1.242
3000	1.286	1.278	1.271	1.265	1.261	1.254	1.249	1.246	1.241	1.238
3500	1.282	1.273	1.266	1.260	1.256	1.250	1.244	1.241	1.237	1.234
4000	1.277	1.268	1.261	1.256	1.252	1.245	1.240	1.237	1.232	1.229
4500	1.272	1.263	1.257	1.251	1.247	1.241	1.235	1.232	1.228	1.225
5000	1.267	1.258	1.252	1.246	1.242	1.236	1.230	1.227	1.223	1.220
5500	1.262	1.253	1.247	1.241	1.237	1.231	1.226	1.223	1.219	1.216
6000	1.257	1.248	1.242	1.236	1.232	1.226	1.221	1.218	1.214	1.211
6500	1.251	1.243	1.237	1.231	1.227	1.221	1.216	1.213	1.209	1.206
7000	1.246	1.238	1.232	1.226	1.223	1.216	1.211	1.209	1.205	1.202
7500	1.241	1.233	1.227	1.221	1.218	1.212	1.207	1.204	1.200	1.197
8000	1.236	1.228	1.222	1.216	1.213	1.207	1.202	1.199	1.195	1.193
8500	1.231	1.223	1.217	1.212	1.208	1.202	1.197	1.195	1.191	1.188
9000	1.226	1.218	1.212	1.207	1.203	1.197	1.193	1.190	1.186	1.184
9500	1.221	1.213	1.207	1.202	1.199	1.193	1.188	1.186	1.182	1.179
10000	1.216	1.208	1.202	1.197	1.194	1.188	1.184	1.181	1.177	1.175
12500	1.198	1.190	1.185	1.180	1.176	1.171	1.167	1.164	1.161	1.158
15000	1.175	1.168	1.163	1.158	1.155	1.150	1.146	1.144	1.140	1.138
17500	1.153	1.147	1.142	1.137	1.134	1.130	1.126	1.124	1.121	1.119
20000	1.132	1.126	1.122	1.118	1.115	1.110	1.107	1.105	1.103	1.101
22500	1.112	1.107	1.103	1.099	1.097	1.093	1.090	1.088	1.086	1.084
25000	1.094	1.089	1.085	1.082	1.080	1.076	1.074	1.072	1.070	1.068
27500	1.074	1.070	1.067	1.064	1.062	1.059	1.057	1.055	1.053	1.052
30000	1.054	1.050	1.048	1.045	1.043	1.040	1.039	1.037	1.036	1.035
32500	1.035	1.032	1.030	1.027	1.026	1.023	1.022	1.021	1.020	1.018
35000	1.018	1.016	1.014	1.011	1.010	1.008	1.007	1.006	1.005	1.004
37500	1.003	1.001	0.999	0.997	0.996	0.994	0.994	0.993	0.992	0.991
40000	0.989	0.987	0.986	0.984	0.983	0.982	0.981	0.980	0.980	0.979
42500	0.976	0.974	0.973	0.972	0.971	0.970	0.970	0.969	0.968	0.968
45000	0.964	0.963	0.962	0.960	0.960	0.959	0.959	0.958	0.958	0.958
47500	0.952	0.952	0.951	0.950	0.949	0.949	0.949	0.948	0.948	0.948
50000	0.942	0.942	0.941	0.940	0.939	0.939	0.939	0.938	0.939	0.938

Vyhoření \ThO2	10 %	12	14	16	18	20	40	60	80	90
0 MWd/tHM	1.280	1.272	1.265	1.260	1.256	1.251	1.214	1.214	1.215	1.215
40	1.263	1.255	1.249	1.244	1.240	1.235	1.198	1.198	1.199	1.199
80	1.260	1.252	1.245	1.240	1.236	1.232	1.195	1.195	1.196	1.196
120	1.259	1.251	1.244	1.239	1.235	1.231	1.194	1.194	1.195	1.195
160	1.258	1.250	1.243	1.238	1.234	1.230	1.193	1.193	1.194	1.194
200	1.257	1.249	1.243	1.237	1.234	1.229	1.192	1.192	1.193	1.193
400	1.255	1.247	1.240	1.235	1.231	1.226	1.189	1.190	1.191	1.190
600	1.253	1.245	1.238	1.233	1.229	1.224	1.187	1.187	1.188	1.188
800	1.251	1.243	1.236	1.231	1.227	1.223	1.185	1.185	1.186	1.186
1000	1.249	1.242	1.235	1.230	1.226	1.221	1.183	1.184	1.185	1.184
1500	1.246	1.239	1.232	1.227	1.223	1.218	1.180	1.181	1.182	1.182
2000	1.243	1.235	1.229	1.223	1.219	1.215	1.177	1.178	1.179	1.178
2500	1.239	1.232	1.225	1.220	1.216	1.211	1.174	1.174	1.175	1.175
3000	1.235	1.228	1.221	1.216	1.212	1.207	1.171	1.171	1.172	1.172
3500	1.231	1.223	1.217	1.212	1.208	1.203	1.167	1.168	1.169	1.168
4000	1.226	1.219	1.213	1.208	1.204	1.199	1.164	1.164	1.165	1.165
4500	1.222	1.215	1.208	1.204	1.200	1.195	1.160	1.161	1.162	1.161
5000	1.217	1.210	1.204	1.199	1.196	1.191	1.157	1.157	1.158	1.158
5500	1.213	1.206	1.200	1.195	1.191	1.187	1.153	1.154	1.155	1.154
6000	1.208	1.201	1.195	1.191	1.187	1.183	1.150	1.150	1.151	1.151
6500	1.203	1.197	1.191	1.186	1.183	1.178	1.146	1.147	1.147	1.147
7000	1.199	1.192	1.186	1.182	1.178	1.174	1.143	1.143	1.144	1.144
7500	1.194	1.188	1.182	1.178	1.174	1.170	1.139	1.140	1.140	1.140
8000	1.190	1.184	1.178	1.174	1.170	1.166	1.136	1.136	1.137	1.137
8500	1.185	1.179	1.173	1.169	1.166	1.162	1.132	1.133	1.133	1.133
9000	1.181	1.175	1.169	1.165	1.162	1.158	1.129	1.129	1.130	1.130
9500	1.176	1.171	1.165	1.161	1.158	1.154	1.125	1.126	1.126	1.126
10000	1.172	1.166	1.161	1.157	1.154	1.150	1.122	1.122	1.123	1.123
12500	1.156	1.151	1.145	1.142	1.139	1.135	1.109	1.109	1.110	1.110
15000	1.136	1.131	1.126	1.123	1.120	1.117	1.093	1.093	1.094	1.094
17500	1.116	1.112	1.108	1.105	1.102	1.099	1.077	1.078	1.078	1.078
20000	1.098	1.095	1.090	1.088	1.085	1.082	1.063	1.063	1.063	1.063
22500	1.082	1.078	1.075	1.072	1.070	1.067	1.049	1.049	1.050	1.050
25000	1.066	1.063	1.060	1.057	1.055	1.053	1.036	1.036	1.036	1.036
27500	1.050	1.047	1.044	1.042	1.040	1.038	1.022	1.022	1.023	1.023
30000	1.033	1.031	1.028	1.026	1.024	1.022	1.008	1.008	1.009	1.009
32500	1.017	1.015	1.013	1.011	1.010	1.008	0.995	0.996	0.996	0.996
35000	1.002	1.001	0.999	0.998	0.997	0.995	0.984	0.985	0.985	0.985
37500	0.990	0.989	0.987	0.986	0.985	0.983	0.974	0.974	0.975	0.975
40000	0.978	0.977	0.975	0.974	0.974	0.972	0.964	0.965	0.965	0.965
42500	0.967	0.966	0.965	0.964	0.963	0.962	0.955	0.955	0.956	0.956
45000	0.956	0.956	0.955	0.954	0.954	0.953	0.946	0.947	0.947	0.947
47500	0.946	0.946	0.946	0.945	0.945	0.944	0.938	0.938	0.938	0.938
50000	0.937	0.937	0.937	0.936	0.936	0.935	0.930	0.930	0.931	0.930

4. U_{wB1} - výsledky k_{inf} pro různé koncentrace Th

Vyhoření \ Th	0 %	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0 MWd/tHM	1.334	1.321	1.312	1.304	1.297	1.292	1.286	1.281	1.277	1.275
40	1.315	1.302	1.294	1.286	1.280	1.274	1.269	1.264	1.260	1.258
80	1.312	1.299	1.290	1.283	1.276	1.271	1.265	1.260	1.256	1.255
120	1.311	1.298	1.289	1.282	1.275	1.270	1.264	1.259	1.255	1.254
160	1.310	1.297	1.288	1.281	1.274	1.269	1.263	1.258	1.254	1.253
200	1.309	1.296	1.287	1.280	1.273	1.268	1.263	1.258	1.253	1.252
400	1.307	1.294	1.285	1.278	1.271	1.266	1.260	1.255	1.251	1.250
600	1.305	1.292	1.283	1.276	1.269	1.264	1.258	1.253	1.249	1.248
800	1.303	1.290	1.281	1.274	1.267	1.262	1.257	1.252	1.247	1.246
1000	1.302	1.289	1.280	1.273	1.266	1.261	1.255	1.250	1.246	1.245
1500	1.299	1.286	1.277	1.270	1.263	1.258	1.252	1.247	1.243	1.242
2000	1.295	1.282	1.273	1.266	1.259	1.254	1.248	1.244	1.239	1.238
2500	1.291	1.278	1.269	1.262	1.255	1.250	1.244	1.240	1.236	1.234
3000	1.286	1.274	1.265	1.258	1.251	1.246	1.240	1.236	1.231	1.230
3500	1.282	1.269	1.260	1.253	1.247	1.242	1.236	1.231	1.227	1.226
4000	1.277	1.264	1.256	1.249	1.242	1.237	1.231	1.227	1.223	1.221
4500	1.272	1.259	1.251	1.244	1.237	1.232	1.227	1.222	1.218	1.217
5000	1.267	1.254	1.246	1.239	1.232	1.228	1.222	1.217	1.214	1.212
5500	1.262	1.249	1.241	1.234	1.228	1.223	1.217	1.213	1.209	1.208
6000	1.257	1.244	1.236	1.229	1.223	1.218	1.212	1.208	1.204	1.203
6500	1.251	1.239	1.231	1.224	1.218	1.213	1.208	1.203	1.200	1.198
7000	1.246	1.234	1.226	1.219	1.213	1.208	1.203	1.199	1.195	1.194
7500	1.241	1.229	1.221	1.214	1.208	1.204	1.198	1.194	1.190	1.189
8000	1.236	1.224	1.216	1.210	1.203	1.199	1.193	1.189	1.186	1.185
8500	1.231	1.219	1.211	1.205	1.199	1.194	1.189	1.185	1.181	1.180
9000	1.226	1.214	1.206	1.200	1.194	1.190	1.184	1.180	1.177	1.176
9500	1.221	1.209	1.202	1.195	1.189	1.185	1.180	1.176	1.172	1.171
10000	1.216	1.205	1.197	1.191	1.185	1.180	1.175	1.171	1.168	1.167
12500	1.198	1.187	1.179	1.173	1.168	1.164	1.158	1.155	1.152	1.151
15000	1.175	1.164	1.157	1.152	1.146	1.143	1.138	1.135	1.132	1.131
17500	1.153	1.143	1.137	1.131	1.126	1.123	1.118	1.115	1.113	1.112
20000	1.132	1.123	1.117	1.112	1.107	1.104	1.100	1.097	1.095	1.094
22500	1.112	1.104	1.098	1.094	1.090	1.087	1.083	1.080	1.078	1.077
25000	1.094	1.086	1.081	1.077	1.073	1.071	1.067	1.065	1.063	1.062
27500	1.074	1.067	1.063	1.059	1.056	1.054	1.050	1.048	1.047	1.046
30000	1.054	1.048	1.044	1.040	1.038	1.036	1.032	1.031	1.030	1.029
32500	1.035	1.029	1.026	1.023	1.021	1.019	1.016	1.015	1.014	1.013
35000	1.018	1.013	1.010	1.008	1.006	1.004	1.001	1.000	1.000	0.999
37500	1.003	0.998	0.996	0.994	0.992	0.991	0.988	0.987	0.987	0.987
40000	0.989	0.985	0.983	0.981	0.979	0.978	0.976	0.975	0.975	0.975
42500	0.976	0.972	0.971	0.969	0.968	0.967	0.965	0.964	0.964	0.964
45000	0.964	0.961	0.959	0.958	0.957	0.956	0.954	0.954	0.954	0.954
47500	0.952	0.950	0.949	0.947	0.947	0.946	0.944	0.944	0.944	0.944
50000	0.942	0.940	0.939	0.937	0.937	0.937	0.935	0.935	0.935	0.935

Vyhoření \Th	10 %	12	14	16	18	20
0 MWd/tHM	1.271	1.263	1.257	1.250	1.244	1.240
40	1.254	1.246	1.240	1.234	1.228	1.224
80	1.251	1.243	1.237	1.231	1.225	1.220
120	1.250	1.242	1.236	1.230	1.224	1.219
160	1.249	1.241	1.235	1.229	1.223	1.218
200	1.248	1.240	1.234	1.228	1.222	1.218
400	1.246	1.238	1.232	1.226	1.220	1.215
600	1.244	1.236	1.230	1.224	1.218	1.213
800	1.242	1.234	1.228	1.222	1.216	1.211
1000	1.241	1.233	1.226	1.220	1.214	1.210
1500	1.238	1.230	1.224	1.217	1.212	1.207
2000	1.234	1.226	1.220	1.214	1.208	1.203
2500	1.230	1.222	1.216	1.210	1.204	1.199
3000	1.226	1.218	1.212	1.206	1.200	1.195
3500	1.222	1.214	1.208	1.202	1.196	1.191
4000	1.218	1.210	1.204	1.198	1.192	1.187
4500	1.213	1.206	1.199	1.194	1.188	1.183
5000	1.209	1.201	1.195	1.189	1.184	1.179
5500	1.204	1.197	1.191	1.185	1.179	1.175
6000	1.199	1.192	1.186	1.181	1.175	1.171
6500	1.195	1.188	1.182	1.176	1.171	1.166
7000	1.190	1.183	1.177	1.172	1.167	1.162
7500	1.186	1.179	1.173	1.168	1.162	1.158
8000	1.181	1.174	1.169	1.163	1.158	1.154
8500	1.177	1.170	1.164	1.159	1.154	1.150
9000	1.172	1.166	1.160	1.155	1.150	1.146
9500	1.168	1.161	1.156	1.151	1.146	1.142
10000	1.164	1.157	1.152	1.147	1.142	1.138
12500	1.148	1.142	1.136	1.132	1.127	1.123
15000	1.128	1.122	1.117	1.113	1.109	1.105
17500	1.109	1.104	1.099	1.095	1.091	1.087
20000	1.091	1.087	1.082	1.079	1.075	1.071
22500	1.075	1.071	1.066	1.063	1.060	1.057
25000	1.060	1.056	1.052	1.049	1.046	1.043
27500	1.044	1.041	1.037	1.034	1.031	1.028
30000	1.027	1.025	1.021	1.019	1.015	1.013
32500	1.012	1.009	1.006	1.004	1.001	0.999
35000	0.998	0.996	0.993	0.991	0.989	0.987
37500	0.986	0.984	0.981	0.980	0.977	0.976
40000	0.974	0.973	0.970	0.969	0.966	0.965
42500	0.963	0.962	0.960	0.959	0.956	0.956
45000	0.953	0.952	0.950	0.949	0.947	0.946
47500	0.944	0.943	0.941	0.940	0.938	0.938
50000	0.934	0.934	0.932	0.932	0.929	0.929

5. Serpent – výsledky k_{inf} pro různé koncentrace ThO_2

Vyhoření \ ThO2	0%	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0 MWd/tHM	1.347	1.337	1.329	1.323	1.317	1.312	1.307	1.304	1.299	1.295
40	1.311	1.302	1.296	1.288	1.282	1.278	1.274	1.271	1.266	1.262
80	1.305	1.295	1.288	1.283	1.276	1.273	1.268	1.263	1.260	1.256
120	1.304	1.295	1.287	1.281	1.276	1.270	1.266	1.262	1.258	1.255
160	1.303	1.294	1.287	1.281	1.274	1.269	1.265	1.261	1.257	1.254
200	1.302	1.293	1.285	1.279	1.274	1.269	1.264	1.261	1.255	1.253
400	1.296	1.288	1.281	1.274	1.269	1.264	1.259	1.255	1.251	1.249
600	1.294	1.284	1.279	1.272	1.266	1.262	1.256	1.253	1.248	1.245
800	1.290	1.283	1.274	1.267	1.262	1.258	1.253	1.249	1.246	1.243
1000	1.288	1.279	1.272	1.265	1.260	1.255	1.252	1.246	1.243	1.239
1500	1.283	1.274	1.266	1.260	1.255	1.251	1.246	1.242	1.239	1.234
2000	1.278	1.269	1.261	1.256	1.250	1.245	1.241	1.237	1.234	1.229
2500	1.273	1.264	1.256	1.250	1.246	1.240	1.237	1.231	1.229	1.225
3000	1.267	1.258	1.252	1.246	1.242	1.235	1.232	1.228	1.224	1.220
3500	1.262	1.254	1.247	1.242	1.235	1.231	1.227	1.223	1.220	1.217
4000	1.256	1.248	1.243	1.237	1.230	1.226	1.221	1.219	1.214	1.211
4500	1.253	1.243	1.237	1.231	1.226	1.222	1.217	1.213	1.209	1.206
5000	1.247	1.238	1.232	1.226	1.221	1.217	1.213	1.208	1.206	1.201
5500	1.241	1.233	1.226	1.223	1.217	1.211	1.208	1.203	1.200	1.198
6000	1.236	1.228	1.222	1.217	1.211	1.207	1.203	1.199	1.196	1.193
6500	1.231	1.223	1.218	1.212	1.206	1.203	1.198	1.194	1.191	1.190
7000	1.227	1.219	1.213	1.207	1.202	1.198	1.191	1.190	1.187	1.183
7500	1.220	1.214	1.206	1.201	1.198	1.192	1.188	1.186	1.182	1.180
8000	1.214	1.208	1.201	1.197	1.192	1.188	1.184	1.180	1.178	1.175
8500	1.211	1.203	1.198	1.192	1.189	1.184	1.180	1.177	1.173	1.170
9000	1.206	1.199	1.192	1.187	1.183	1.179	1.176	1.172	1.169	1.166
9500	1.201	1.194	1.187	1.183	1.179	1.174	1.171	1.168	1.164	1.162
10000	1.196	1.189	1.184	1.179	1.174	1.170	1.167	1.164	1.160	1.157
12500	1.174	1.167	1.162	1.156	1.153	1.149	1.146	1.143	1.141	1.138
15000	1.152	1.145	1.140	1.138	1.133	1.131	1.126	1.124	1.121	1.119
17500	1.131	1.127	1.121	1.117	1.113	1.111	1.108	1.108	1.104	1.101
20000	1.113	1.107	1.102	1.100	1.096	1.093	1.092	1.088	1.086	1.086
22500	1.094	1.090	1.086	1.081	1.079	1.077	1.075	1.072	1.071	1.069
25000	1.076	1.072	1.069	1.066	1.064	1.061	1.058	1.058	1.056	1.053
27500	1.059	1.055	1.053	1.050	1.049	1.045	1.044	1.042	1.040	1.038
30000	1.042	1.039	1.037	1.035	1.032	1.031	1.030	1.027	1.026	1.026
32500	1.026	1.024	1.022	1.020	1.018	1.017	1.015	1.014	1.013	1.011
35000	1.012	1.008	1.007	1.006	1.004	1.003	1.001	1.000	0.999	0.998
37500	0.995	0.994	0.994	0.991	0.990	0.989	0.988	0.988	0.987	0.985
40000	0.981	0.979	0.979	0.977	0.976	0.975	0.974	0.974	0.973	0.972
42500	0.965	0.965	0.965	0.964	0.963	0.963	0.962	0.962	0.959	0.960
45000	0.953	0.952	0.952	0.951	0.950	0.951	0.950	0.951	0.950	0.949
47500	0.938	0.938	0.938	0.938	0.938	0.939	0.938	0.937	0.938	0.937
50000	0.926	0.926	0.927	0.927	0.927	0.927	0.927	0.928	0.927	0.927
52500	0.912	0.914	0.915	0.915	0.916	0.915	0.916	0.916	0.917	0.915
55000	0.900	0.902	0.903	0.903	0.905	0.904	0.905	0.905	0.904	0.905
57500	0.889	0.890	0.892	0.892	0.893	0.894	0.895	0.895	0.897	0.896
60000	0.878	0.880	0.881	0.883	0.884	0.884	0.885	0.886	0.887	0.886

Vyhoření \ThO2	10 %	12	14	16	18	20	40	60	80	90
0 MWd/tHM	1.291	1.285	1.278	1.274	1.268	1.263	1.230	1.209	1.203	1.217
40	1.258	1.253	1.247	1.242	1.237	1.233	1.200	1.180	1.175	1.189
80	1.253	1.247	1.241	1.236	1.233	1.227	1.193	1.174	1.169	1.183
120	1.251	1.246	1.240	1.234	1.230	1.225	1.191	1.173	1.168	1.181
160	1.251	1.244	1.239	1.234	1.228	1.224	1.191	1.171	1.166	1.181
200	1.250	1.243	1.238	1.233	1.227	1.223	1.190	1.170	1.166	1.179
400	1.246	1.240	1.232	1.227	1.223	1.219	1.186	1.166	1.160	1.175
600	1.242	1.236	1.230	1.224	1.220	1.215	1.181	1.162	1.157	1.170
800	1.238	1.232	1.226	1.221	1.217	1.212	1.179	1.159	1.154	1.166
1000	1.237	1.231	1.225	1.219	1.214	1.210	1.177	1.157	1.152	1.164
1500	1.231	1.225	1.220	1.214	1.209	1.205	1.173	1.152	1.147	1.159
2000	1.227	1.220	1.215	1.210	1.205	1.201	1.169	1.148	1.142	1.154
2500	1.221	1.215	1.211	1.206	1.200	1.198	1.164	1.143	1.138	1.150
3000	1.218	1.211	1.205	1.201	1.196	1.192	1.159	1.140	1.134	1.146
3500	1.212	1.207	1.201	1.197	1.191	1.188	1.155	1.137	1.131	1.143
4000	1.208	1.202	1.196	1.193	1.188	1.184	1.152	1.134	1.129	1.140
4500	1.204	1.198	1.193	1.188	1.184	1.180	1.148	1.130	1.124	1.135
5000	1.198	1.194	1.189	1.183	1.179	1.175	1.145	1.126	1.122	1.133
5500	1.194	1.188	1.183	1.179	1.175	1.172	1.140	1.124	1.118	1.131
6000	1.190	1.185	1.179	1.175	1.171	1.166	1.137	1.120	1.116	1.128
6500	1.185	1.180	1.175	1.170	1.166	1.162	1.134	1.117	1.114	1.125
7000	1.180	1.176	1.170	1.166	1.161	1.158	1.130	1.113	1.111	1.122
7500	1.176	1.170	1.166	1.162	1.159	1.154	1.126	1.112	1.108	1.120
8000	1.172	1.168	1.162	1.158	1.154	1.150	1.124	1.108	1.105	1.117
8500	1.167	1.162	1.159	1.153	1.150	1.146	1.120	1.106	1.102	1.115
9000	1.164	1.158	1.154	1.150	1.146	1.144	1.116	1.102	1.099	1.111
9500	1.159	1.155	1.150	1.145	1.142	1.138	1.112	1.099	1.097	1.109
10000	1.154	1.150	1.145	1.141	1.139	1.134	1.111	1.096	1.095	1.106
12500	1.135	1.131	1.126	1.123	1.120	1.117	1.094	1.082	1.081	1.093
15000	1.116	1.112	1.109	1.105	1.102	1.100	1.079	1.067	1.068	1.080
17500	1.100	1.096	1.092	1.089	1.087	1.084	1.064	1.055	1.056	1.067
20000	1.083	1.079	1.076	1.074	1.071	1.069	1.050	1.043	1.044	1.055
22500	1.067	1.065	1.061	1.059	1.057	1.054	1.039	1.029	1.032	1.044
25000	1.052	1.050	1.047	1.044	1.042	1.041	1.026	1.019	1.021	1.031
27500	1.037	1.036	1.033	1.031	1.029	1.026	1.014	1.007	1.009	1.019
30000	1.023	1.021	1.020	1.018	1.015	1.014	1.004	0.997	0.998	1.007
32500	1.011	1.007	1.007	1.005	1.003	1.002	0.992	0.987	0.987	0.994
35000	0.997	0.995	0.994	0.993	0.990	0.990	0.980	0.975	0.977	0.983
37500	0.983	0.983	0.982	0.980	0.979	0.978	0.970	0.967	0.967	0.972
40000	0.971	0.970	0.969	0.968	0.968	0.967	0.960	0.956	0.957	0.959
42500	0.960	0.959	0.958	0.957	0.956	0.957	0.949	0.947	0.947	0.949
45000	0.948	0.948	0.948	0.945	0.946	0.945	0.939	0.938	0.936	0.937
47500	0.938	0.937	0.935	0.936	0.935	0.936	0.930	0.928	0.927	0.927
50000	0.927	0.926	0.926	0.925	0.924	0.925	0.922	0.919	0.918	0.916
52500	0.916	0.916	0.916	0.916	0.915	0.915	0.912	0.910	0.909	0.907
55000	0.906	0.906	0.906	0.906	0.906	0.905	0.904	0.903	0.899	0.897
57500	0.896	0.897	0.898	0.896	0.896	0.897	0.896	0.894	0.892	0.888
60000	0.887	0.887	0.888	0.889	0.887	0.888	0.887	0.887	0.884	0.879

6. Serpent - výsledky k_{inf} pro různé koncentrace Th

Vyhoření \ Th	0 %	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0 MWd/tHM	1.347	1.336	1.327	1.319	1.312	1.307	1.301	1.297	1.293	1.288
40	1.311	1.301	1.292	1.286	1.279	1.274	1.268	1.264	1.258	1.255
80	1.305	1.293	1.286	1.279	1.272	1.267	1.262	1.257	1.254	1.249
120	1.304	1.293	1.285	1.278	1.271	1.266	1.262	1.256	1.252	1.248
160	1.303	1.292	1.284	1.276	1.271	1.266	1.259	1.254	1.251	1.247
200	1.302	1.291	1.283	1.276	1.270	1.263	1.259	1.254	1.249	1.245
400	1.296	1.288	1.278	1.272	1.265	1.260	1.254	1.251	1.245	1.242
600	1.294	1.284	1.274	1.267	1.261	1.257	1.250	1.246	1.242	1.237
800	1.290	1.280	1.272	1.265	1.259	1.253	1.248	1.243	1.240	1.234
1000	1.288	1.278	1.270	1.262	1.256	1.250	1.244	1.241	1.237	1.233
1500	1.283	1.272	1.264	1.257	1.252	1.245	1.241	1.235	1.231	1.227
2000	1.278	1.267	1.259	1.252	1.246	1.240	1.236	1.231	1.228	1.223
2500	1.273	1.262	1.253	1.249	1.241	1.235	1.231	1.226	1.222	1.218
3000	1.267	1.258	1.249	1.241	1.236	1.232	1.227	1.222	1.217	1.212
3500	1.262	1.253	1.244	1.238	1.231	1.227	1.222	1.216	1.213	1.209
4000	1.256	1.248	1.240	1.233	1.226	1.221	1.216	1.212	1.207	1.203
4500	1.253	1.242	1.234	1.228	1.222	1.217	1.212	1.207	1.203	1.199
5000	1.247	1.238	1.230	1.224	1.217	1.211	1.206	1.203	1.198	1.194
5500	1.241	1.233	1.223	1.218	1.213	1.207	1.203	1.198	1.195	1.189
6000	1.236	1.228	1.219	1.212	1.207	1.202	1.198	1.193	1.188	1.184
6500	1.231	1.221	1.214	1.207	1.203	1.197	1.192	1.189	1.185	1.181
7000	1.227	1.217	1.209	1.203	1.198	1.193	1.188	1.184	1.180	1.176
7500	1.220	1.210	1.204	1.199	1.192	1.188	1.183	1.180	1.175	1.171
8000	1.214	1.207	1.200	1.194	1.187	1.184	1.177	1.175	1.171	1.168
8500	1.211	1.202	1.194	1.188	1.183	1.179	1.175	1.170	1.168	1.162
9000	1.206	1.198	1.191	1.185	1.178	1.174	1.170	1.166	1.163	1.160
9500	1.201	1.192	1.185	1.180	1.174	1.169	1.166	1.162	1.158	1.155
10000	1.196	1.188	1.181	1.176	1.170	1.166	1.162	1.157	1.153	1.150
12500	1.174	1.166	1.159	1.154	1.149	1.145	1.141	1.138	1.134	1.131
15000	1.152	1.145	1.139	1.132	1.129	1.126	1.122	1.118	1.115	1.112
17500	1.131	1.125	1.120	1.115	1.111	1.108	1.104	1.101	1.097	1.095
20000	1.113	1.107	1.102	1.097	1.093	1.090	1.088	1.084	1.081	1.079
22500	1.094	1.089	1.085	1.080	1.076	1.073	1.070	1.069	1.065	1.063
25000	1.076	1.071	1.067	1.063	1.061	1.058	1.054	1.052	1.049	1.047
27500	1.059	1.055	1.051	1.048	1.046	1.043	1.041	1.039	1.036	1.033
30000	1.042	1.038	1.036	1.033	1.030	1.027	1.026	1.024	1.022	1.021
32500	1.026	1.023	1.020	1.018	1.016	1.014	1.012	1.010	1.009	1.007
35000	1.012	1.009	1.007	1.003	1.001	1.000	0.997	0.996	0.996	0.994
37500	0.995	0.993	0.992	0.990	0.988	0.986	0.985	0.983	0.984	0.981
40000	0.981	0.979	0.977	0.976	0.975	0.973	0.973	0.971	0.971	0.969
42500	0.965	0.964	0.963	0.963	0.962	0.961	0.960	0.958	0.957	0.958
45000	0.953	0.951	0.950	0.950	0.949	0.949	0.947	0.948	0.946	0.946
47500	0.938	0.939	0.938	0.937	0.937	0.937	0.937	0.936	0.935	0.935
50000	0.926	0.926	0.926	0.926	0.926	0.926	0.925	0.925	0.925	0.925
52500	0.912	0.913	0.914	0.915	0.915	0.914	0.914	0.915	0.914	0.914
55000	0.900	0.902	0.903	0.903	0.904	0.904	0.903	0.903	0.904	0.904
57500	0.889	0.891	0.892	0.893	0.893	0.893	0.894	0.894	0.894	0.894
60000	0.878	0.880	0.881	0.883	0.884	0.885	0.885	0.886	0.885	0.885

Vyhoření \Th	10	12	14	16	18	20
0 MWd/tHM	1.283	1.275	1.268	1.263	1.258	1.251
40	1.251	1.244	1.237	1.231	1.225	1.220
80	1.246	1.237	1.232	1.226	1.220	1.214
120	1.243	1.237	1.230	1.223	1.218	1.213
160	1.244	1.236	1.230	1.223	1.217	1.213
200	1.242	1.234	1.228	1.222	1.217	1.211
400	1.239	1.229	1.223	1.217	1.212	1.207
600	1.234	1.227	1.220	1.214	1.208	1.203
800	1.231	1.224	1.216	1.211	1.205	1.200
1000	1.229	1.221	1.215	1.209	1.202	1.198
1500	1.224	1.216	1.209	1.204	1.199	1.193
2000	1.219	1.212	1.205	1.198	1.193	1.188
2500	1.214	1.207	1.200	1.195	1.189	1.183
3000	1.210	1.202	1.196	1.189	1.184	1.179
3500	1.204	1.198	1.191	1.185	1.180	1.174
4000	1.200	1.195	1.187	1.180	1.176	1.172
4500	1.196	1.189	1.183	1.177	1.171	1.166
5000	1.191	1.183	1.178	1.173	1.168	1.162
5500	1.186	1.179	1.174	1.168	1.162	1.157
6000	1.181	1.175	1.169	1.164	1.159	1.153
6500	1.177	1.172	1.164	1.159	1.154	1.150
7000	1.173	1.166	1.160	1.156	1.151	1.146
7500	1.168	1.162	1.156	1.152	1.146	1.142
8000	1.164	1.158	1.152	1.147	1.142	1.138
8500	1.161	1.154	1.147	1.143	1.138	1.133
9000	1.154	1.150	1.144	1.139	1.134	1.129
9500	1.150	1.146	1.139	1.136	1.130	1.127
10000	1.147	1.141	1.135	1.130	1.127	1.121
12500	1.128	1.122	1.117	1.113	1.107	1.104
15000	1.110	1.105	1.100	1.096	1.091	1.088
17500	1.092	1.088	1.084	1.079	1.075	1.074
20000	1.077	1.072	1.068	1.064	1.061	1.059
22500	1.060	1.057	1.053	1.050	1.047	1.044
25000	1.046	1.042	1.038	1.036	1.033	1.030
27500	1.032	1.029	1.026	1.023	1.021	1.018
30000	1.019	1.015	1.013	1.010	1.009	1.005
32500	1.005	1.002	1.000	0.998	0.996	0.994
35000	0.992	0.990	0.987	0.985	0.984	0.982
37500	0.980	0.977	0.976	0.974	0.972	0.970
40000	0.968	0.966	0.965	0.964	0.962	0.960
42500	0.956	0.955	0.953	0.951	0.950	0.950
45000	0.945	0.944	0.942	0.942	0.940	0.939
47500	0.935	0.934	0.932	0.932	0.931	0.931
50000	0.923	0.924	0.923	0.921	0.921	0.919
52500	0.914	0.913	0.913	0.914	0.911	0.911
55000	0.904	0.904	0.903	0.903	0.904	0.901
57500	0.895	0.895	0.895	0.894	0.893	0.894
60000	0.886	0.886	0.887	0.886	0.886	0.886

7. Výpočetní kód

```

16 import numpy as np
17 import scipy.optimize as solver
18 import matplotlib.pyplot as plt
19
20 L = 6.0e-3           #m, vyska pelety - zakladni material
21 th_vol = 0.05       #objemova cast pridavneho materialu
22 drsnost = 3.2e-6    #m, drsnost povrchu v kontaktu
23 mezera_2 = 20e-6    # radialni velikost mezery mezi pokrytim a vrstvou
24
25
26 alfa = 39000.0      #W/m2K, soucinitel prestupu tepla chladivo-pokryti
27 T_chl = 305         #C, teplota chladiva v uvazovanem miste
28 Sf = 5.4e8          #W/m3, objemovy zdroj tepla - merny vykon
29
30 sigma = 5.67e-8     #W/m2K4 Stefan-Boltzmonaova konstanta
31 epsilon_u = 0.85    #emisivita UO2
32 epsilon_c = 0.4     #emisivita pokryti
33
34 dL = 0.1e-3         #m, axialni delka elementu - zakladni material
35 n_L = int(L/dL/2)   #pocet axialnich elementu - zakladni material
36
37 R_fo = 3.8e-3       #m, polomer pelety - zakladni material
38 dRF = 0.1e-3       #m, radialni delka elementu
39 n_RF = int(R_fo/dRF) #pocet radialnich elementu - zakladni material
40
41 R_ci = 3.9e-3       #m, vnitri polomer pokryti
42 R_co = 4.55e-3     #m, vnejsi polomer pokryti
43 t_C = R_co-R_ci    #m, tloustka pokryti
44 n_C = 5             #pocet radialnich elementu v pokryti
45 dRC = t_C/n_C      #m, radialni delka elementu v pokryti
46
47 delta_ax = 18e-6   #m, mezera na kraji vytvorena tepelnou roztaznosti
48
49 if th_vol ==0:     # uprava pro nepritomnost pridavneho materialu
50     n_ad=0
51     dTh =0
52 else:
53     n_ad = 4        # pocet axialnich elementu - pridavny material
54     dTh = L*th_vol/n_ad/2 #axialni delka elementu - pridavny material
55
56 d_gap = R_ci-R_fo  #velikost mezery
57 n_gap = 5          #pocet radialnich elementu v mezere
58 dRG = d_gap/n_gap  #radialni delka elementu v mezere
59
60 n_R = n_RF+n_C+n_gap #celkovy pocet radialnich elementu
61 n_A = n_L + n_ad     #celkovy pocet axialnich elementu
62
63 #matice materialu, 0 ~ zakladni material, 1 ~ pridavny material
64 mat = np.zeros(n_A,dtype = int)
65 for i in range(n_L,n_L+n_ad,1):
66     mat[i] = 1
67
68 #vytvoreni matice teplot a nulove matice
69 T = np.ones((n_A,n_R), dtype=float)*1000
70 rovnice = np.zeros((n_A,n_R), dtype=float)
71

```

```

72 #definovani zdroje tepla
73 def heat_source(a):
74     if mat[a] == 0:
75         return Sf/(1-th_vol)    #zdroj v uranu je navysen
76     if mat[a] == 1:
77         return 0                #zdroj v pridavnem materialu je nulovy
78
79 def lamU(T): #W/mK, UO2 soucinitel tepelne vodivosti
80     return 100/(7.5408+17.692*((T+273.15)/1000)+3.6142*((T+273.15)/1000)**2)
81     +6400/(((T+273.15)/1000)**(5/2)*np.exp(-16.35/((T+273.15)/1000)))
82
83 def lamTh(T): #W/mK, soucinitel tepelne vodivosti pridavneho materialu
84     #return 1/(0.0213+1.597/10000*(T+273)) #ThO2
85     return 2*(10**-6)*T**2 + 0.012*T + 36.465 #Th kov
86
87 def lam_gap(T):#W/mK, soucinitel tepelne vodivosti helia
88     return 0.24475+(T-300)*0.0002687
89
90 def lamC(T): #W/mK, soucinitel tepelne vodivosti pokryti
91     return 23.48 - (T+273.15)*1.92*10**-2 + ((T+273.15)**2)*1.68*10**-5
92
93 def q(T): # vytvoreni matice zachovani toku enrgii
94     for a in range(n_A): # axiální cyklus
95         for r in range(n_R): # radiální cyklus
96
97             T_p = T[a,r]
98             try:
99                 T_n = T[a,r+1]
100            except:
101                pass
102            try:
103                T_s = T[a,r-1]
104            except:
105                pass
106            try:
107                T_u = T[a+1,r]
108            except:
109                pass
110            try:
111                T_d = T[a-1,r]
112            except:
113                pass
114
115     #-----definovani tepelneho toku smerem ke stredu
116     if r == 0:#stredova bunka
117         R_s = 0.0
118         q_s = 0.0
119
120     elif n_RF > r > 0:                #palivo
121         R_s = r*dRF
122         O_s = 2*R_s*np.pi
123         if mat[a] == 0:
124             A_s = O_s * dL
125             q_s = (T_p - T_s)*lamU(T[a,r])/dRF*A_s
126         else:
127             A_s = O_s * dTh
128             q_s = (T_p - T_s)*lamTh(T[a,r])/dRF*A_s
129
130

```

```

131 elif r == n_RF: # 1. bunka v mezere
132     R_s = R_fo
133     O_s = 2*R_s*np.pi
134     if mat[a] == 0:
135         A_s = O_s * dL
136         q_s = (T_p - T_s)/( dRG/(A_s*lam_gap((T[a,r]))*2)
137                 + dRF/(A_s*lamU(T[a,r])*2) )
138     else:
139         A_s = O_s * dTh
140         q_s = (T_p - T_s)/( dRG/(A_s*lamTh(T[a,r])*2)
141                 + dRF/(A_s*lamTh(T[a,r])*2) )
142
143 elif n_RF+n_gap > r > n_RF: # ostatni bunky v mezere
144     R_s = R_fo + dRG*(r-n_RF)
145     O_s = 2*R_s*np.pi
146     if mat[a] == 0:
147         A_s = O_s * dL
148         q_s = (T_p - T_s)*lam_gap((T[a,r]))/dRG*A_s
149     else:
150         A_s = O_s * dTh
151         q_s = (T_p - T_s)*lamTh(T[a,r])/dRG*A_s
152
153 elif r == n_RF+n_gap: #1.bunka v pokryti
154     R_s = R_ci
155     O_s = 2*R_s*np.pi
156     if mat[a] == 0:
157         A_s = O_s * dL
158         q_s = ((T_p - T_s)/( dRG/(A_s*lam_gap((T[a,r]))*2)
159                 + dRC/(A_s*lamC(T[a,r])*2) )
160                 + sigma*A_s*(T[a,r]+273.15)**4*epsilon_c
161                 - sigma*R_fo*2*np.pi*dL**(T[a,r-n_gap-1]+273.15)**4
162                 *epsilon_u)
163     else:
164         A_s = O_s * dTh
165         q_s = ((T_p - T_s)/( dRG/(A_s*lamTh(T[a,r])*2)
166                 + dRC/(A_s*lamC(T[a,r])*2)
167                 + mezera_2/(A_s*lam_gap(T[a,r])) )
168                 + sigma*A_s*(T[a,r]+273.15)**4*epsilon_c
169                 - sigma*R_fo*2*np.pi*dTh**(T[a,r-n_gap-1]+273.15)**4
170                 *epsilon_u)
171
172
173 else: #pokryti zbytek
174     R_s = R_ci + (r-n_RF-n_gap)*dRC
175     O_s = 2*R_s*np.pi
176     if mat[a] == 0:
177         A_s = O_s * dL
178         q_s = (T_p - T_s)*lamC(T[a,r])/dRC*A_s
179     else:
180         A_s = O_s * dTh
181         q_s = (T_p - T_s)*lamC(T[a,r])/dRC*A_s
182
183
184 #-----definovani tepelneho toku smerem k okraji
185
186
187 if n_RF-1 > r >= 0: #palivo bez kraje
188     R_n = (r+1)*dRF
189     O_n = 2*R_n*np.pi

```

```

190     if mat[a] == 0:
191         A_n = O_n * dL
192         q_n = (T_p - T_n)*lamU(T[a,r])/dRF*A_n
193     else:
194         A_n = O_n * dTh
195         q_n = (T_p - T_n)*lamTh(T[a,r])/dRF*A_n
196
197 elif r == n_RF-1:                                     #palivo krajni bunka
198     R_n = R_fo
199     O_n = 2*R_n*np.pi
200     if mat[a] == 0:
201         A_n = O_n * dL
202         q_n = ((T_p - T_n)/( dRG/(A_n*lam_gap(T[a,r])*2)
203                + dRF/(A_n*lamU(T[a,r])*2) )
204                + sigma*A_n*(T[a,r]+273.15)**4*epsilon_u
205                - sigma*R_ci*2*np.pi*dL**(T[a,r+n_gap+1]+273.15)**4
206                *epsilon_c)
207     else:
208         A_n = O_n * dTh
209         q_n = ((T_p - T_n)/( dRG/(A_n*lamTh(T[a,r])*2)
210                + dRF/(A_n*lamTh(T[a,r])*2) )
211                + sigma*A_n*(T[a,r]+273.15)**4*epsilon_u
212                - sigma*R_ci*2*np.pi*dTh**(T[a,r+n_gap+1]+273.15)**4
213                *epsilon_c)
214
215 elif n_RF+n_gap-1 > r > n_RF-1:                       #bunky v mezere
216     R_n = R_fo + dRG*(r-n_RF+1)
217     O_n = 2*R_n*np.pi
218     if mat[a] == 0:
219         A_n = O_n * dL
220         q_n = (T_p - T_n)*lam_gap(T[a,r])/dRG*A_n
221     else:
222         A_n = O_n * dTh
223         q_n = (T_p - T_n)*lamTh(T[a,r])/dRG*A_n
224
225 elif r == n_RF+n_gap-1:                               #posledni bunka v mezere
226     R_n = R_ci
227     O_n = 2*R_n*np.pi
228     if mat[a] == 0:
229         A_n = O_n * dL
230         q_n = (T_p - T_n)/( dRG/(A_n*lam_gap(T[a,r])*2)
231                + dRC/(A_n*lamC(T[a,r])*2) )
232     else:
233         A_n = O_n * dTh
234         q_n = (T_p - T_n)/( dRG/(A_n*lamTh(T[a,r])*2)
235                + dRC/(A_n*lamC(T[a,r])*2)
236                + mezera_2/(A_s*lam_gap(T[a,r])) )
237
238
239 elif n_R-1 > r > n_RF+n_gap-1:                       #pokryti
240     R_n = R_ci + dRC*(r-n_RF-n_gap+1)
241     O_n = 2*R_n*np.pi
242     if mat[a] == 0:
243         A_n = O_n * dL
244     else:
245         A_n = O_n * dTh
246     q_n = (T_p-T_n)*lamC(T[a,r])/(dRC)*A_n
247

```

```

248 else:                                     # bunka na kraji pokryti u chladiva
249     R_n = R_co
250     O_n = 2*R_n*np.pi
251     if mat[a] == 0:
252         A_n = O_n * dL
253     else:
254         A_n = O_n * dTh
255     q_n = (T_p-T_chl)/( dRC/(A_n*lamC(T[a,r])*2) + 1/(alfa*A_n) )
256
257 #-----definovani tepelneho toku smerem dolu
258
259 S_ax = np.pi*(R_n**2 - R_s**2)
260
261 if a == 0: #prvni bunka
262     q_d = 0.0
263
264 elif 0 < a < n_L:                         #zakladni material
265     if r < n_RF:
266         q_d = (T_p-T_d)*lamU(T[a,r])/dL*S_ax
267     elif n_RF + n_gap > r >= n_RF:
268         q_d = (T_p-T_d)*lam_gap(T[a,r])/dL*S_ax
269     else:
270         q_d = (T_p-T_d)*lamC(T[a,r])/dL*S_ax
271
272
273 elif a == n_L:                             #pridavny material 1. bunka
274     if r < n_RF:
275         delta = delta_ax*R_n/R_fo
276         q_d = (T_p-T_d)/( dTh/(S_ax*lamTh(T[a,r])*2)
277             + dL/(S_ax*lamU(T[a,r])*2)
278             + (drsnost*2+delta)/(S_ax*lam_gap(T[a,r])) )
279     elif n_RF + n_gap > r >= n_RF:
280         q_d = (T_p-T_d)/( dTh/(S_ax*lamTh(T[a,r])*2)
281             + dL/(S_ax*lam_gap(T[a,r])*2) )
282     else:
283         q_d = (T_p-T_d)*lamC(T[a,r])/(dL/2+dTh/2)*S_ax
284
285 else :                                     #pridavny material zbytek
286     if r < n_RF:
287         q_d = (T_p-T_d)*lamTh(T[a,r])/dTh*S_ax
288     elif n_RF + n_gap > r >= n_RF:
289         q_d = (T_p-T_d)*lamTh(T[a,r])/dTh*S_ax
290     else:
291         q_d = (T_p-T_d)*lamC(T[a,r])/dTh*S_ax
292
293
294
295 #-----definovani tepelneho toku smerem nahoru
296
297
298 if 0 <= a < n_L-1:                         #zakladni material krome kraje s Th
299     if r < n_RF:
300         q_u = (T_p-T_u)*lamU(T[a,r])/dL*S_ax
301     elif n_RF + n_gap > r >= n_RF:
302         q_u = (T_p-T_u)*lam_gap(T[a,r])/dL*S_ax
303     else:
304         q_u = (T_p-T_u)*lamC(T[a,r])/dL*S_ax
305
306 elif a == n_L-1: #zakladni material kraj s pridavnym materialem

```

```

307     if th_vol == 0:
308         q_u = 0
309     else:
310         if r < n_RF:
311             delta = delta_ax*R_n/R_fo
312             q_u = (T_p-T_u)/( dTh/(S_ax*lamTh(T[a,r])*2)
313                 + dL/(S_ax*lamU(T[a,r])*2)
314                 + (drsnost*2+delta)/(S_ax*lam_gap(T[a,r])) )
315         elif n_RF + n_gap > r >= n_RF:
316             q_u = (T_p-T_u)/( dTh/(S_ax*lamTh(T[a,r])*2)
317                 + dL/(S_ax*lam_gap(T[a,r])*2) )
318         else:
319             q_u = (T_p-T_u)*lamC(T[a,r])/(dL/2+dTh/2)*S_ax
320
321     elif n_L-1 < a < n_A-1:           #pridavny material krome kraje
322         if r < n_RF:
323             q_u = (T_p-T_u)*lamTh(T[a,r])/dTh*S_ax
324         elif n_RF + n_gap > r >= n_RF:
325             q_u = (T_p-T_u)*lamTh(T[a,r])/dTh*S_ax
326         else:
327             q_u = (T_p-T_u)*lamC(T[a,r])/dTh*S_ax
328
329
330     else:                               #posledni bunka
331         q_u = 0.0
332
333     S = heat_source(a)
334
335     if 0 <= r < n_RF:
336         S = S
337     else:                                # mimo palivo je zdroj=0
338         S = 0.0
339
340     dV = S_ax * dL
341     S = S*dV
342     rovnice[a,r] = q_n + q_s + q_u + q_d - S
343
344     return rovnice
345
346 T = solver.newton_krylov(q,T,verbose=True,f_tol=1e-3)

```

funkce na určení axiální tepelné roztažnosti

```
406
407 def axial_exp(T):
408     L0 = 0
409     L1 = 0
410     for a in range(n_A-n_ad):
411         t = T[a,0] + 273
412         t1 = T[a,n_RF-1] + 273
413         if t<923:
414             L0=L0 + dL*(9.9734*10**-1 + 9.802*10**-6*t - 2.705*10**-10*t**2
415                       + 4.391*10**-13*t**3)
416             L1=L1 + dL*(9.9734*10**-1 + 9.802*10**-6*t1 - 2.705*10**-10*t1**2
417                       + 4.391*10**-13*t1**3)
418         else:
419             L0=L0 + dL*(9.9672*10**-1 + 1.179*10**-5*t - 2.429*10**-9*t**2
420                       + 1.219*10**-12*t**3)
421             L1=L1 + dL*(9.9672*10**-1 + 1.179*10**-5*t1 - 2.429*10**-9*t1**2
422                       + 1.219*10**-12*t1**3)
423     deltaL=L0-L1
424     print(L0,L1,deltaL)
425
426 axial_exp(T)
427
```


funkce na určení množství tepla v palivu

```

428 Q = np.ones((n_A,n_R), dtype=float)
429 def heat_storage(T):
430     ro_U = 10400
431     M_U = 238+32
432     ro_Th = 11700
433     M_Th = 232
434     p_He = 4E5
435     ro_Zr = 6520
436     for a in range(n_A):
437         for r in range(n_R):
438             if n_RF > r >= 0:
439                 R_s = r*dRF
440                 R_n = (r+1)*dRF
441                 S_ax = np.pi*(R_n**2 - R_s**2)
442                 if mat[a]==0:
443                     dV = S_ax * dL
444                     dm = dV*ro_U
445                     N = dm/M_U*1000
446                     t = (T[a,r]+273.15)/1000
447                     H = (-21.1762+52.1743*t+43.9753*t**2-28.0804*t**3
448                         +7.88552*t**4-0.52668*t**5+0.71391/t)*1000
449                     Q[a,r] = H*N
450                 else:
451                     dV = S_ax * dTh
452                     dm = dV*ro_Th
453                     N = dm/M_Th*1000
454                     t = (T[a,r]+273.15)
455                     H = -7654.78+24.905*t+2.02E-3*t**2+1.86E-6*t**3
456                     Q[a,r] = H*N
457             elif n_RF+n_gap > r >= n_RF:
458                 R_s = R_fo + dRG*(r-n_RF)
459                 R_n = R_fo + dRG*(r-n_RF+1)
460                 S_ax = np.pi*(R_n**2 - R_s**2)
461                 if mat[a]==0:
462                     dV = S_ax * dL
463                     N=p_He*dV/8.31/(T[a,r]+273.15)
464                     t = (T[a,r]+273.15)/1000
465                     H = (20.786*t - 6.19734)*1000
466                     Q[a,r] = H*N
467                 else:
468                     dV = S_ax * dTh
469                     dm = dV*ro_Th
470                     N = dm/M_Th*1000
471                     t = (T[a,r]+273.15)
472                     H = -7654.78+24.905*t+2.02E-3*t**2+1.86E-6*t**3
473                     Q[a,r] = H*N
474             else:
475                 R_s = R_ci + (r-n_RF-n_gap)*dRC
476                 R_n = R_ci + dRC*(r-n_RF-n_gap+1)
477                 S_ax = np.pi*(R_n**2 - R_s**2)
478                 if mat[a]==0:
479                     dV = S_ax * dL
480                 else:
481                     dV = S_ax * dTh
482                     dm = dV*ro_Zr
483                     t = (T[a,r]+273.15)
484                     H = -80.776+255.66*t+0.0512*t**2
485                     Q[a,r] = H*dm
486     Q_t = np.sum(Q)

```

Seznam použitých zdrojů

- [1] Berger, Nuclear Materials and Fuel Elements, University of London, 1992.
- [2] Lewis, Fundamentals of Nuclear Reactor Physics, Academic Press, 2008.
- [3] D. Klik, Jaderná Energetika, Praha: Vydavatelství ČVUT, 2002.
- [4] K. N. Hezoučký, Základy Teorie Provozních Režimů Jaderných Elektráren s Tlakovodními Reaktory, 2005.
- [5] Č. a.s., *Maketa Palivové Pelety*.
- [6] Laughlin, „Stanford University,“ Stanford University, 2011. [Online]. Available: <http://large.stanford.edu/courses/2011/ph241/nazir2/images/f1.jpg>. [Přístup získán 2016].
- [7] IAEA, „TECDOC-1496, Thermophysical Properties Database of Materials for Light Water and Heavy Water Reactors,“ Vienna, 2006.
- [8] ČEZ, Přepravní bezpečnostní zpráva 1. a 2. bloku JE Temelín.
- [9] IAEA, „TECDOC-1450, Thorium Fuel Cycle - Potential benefits and challenges,“ IAEA, 2005.
- [10] A. D. Peterson, Properties of Thorium, its alloys and its compounds, Oak Ridge National Laboratory, 1965.
- [11] P. L. Benedict, Nuclear Chemical Engineering, McGraw-Hill Book Company, 1981.
- [12] Kosolapova, Carbides: Properties, Production and Application, Plenum Press, 1971.
- [13] Wikipedia, „Monte Carlo N-Particle Transport Code,“ 2016. [Online]. Available: https://en.wikipedia.org/wiki/Monte_Carlo_N-Particle_Transport_Code.
- [14] L. A. N. Laboratory, „MCNP,“ [Online]. Available: <https://mcnp.lanl.gov/>.
- [15] P. P. Š. Lovecký, „UwB1 - Fast Nuclear Depletion Code,“ *Annals of Nuclear Energy*, 2014.
- [16] Lovecký, UwB1 User's Manual, University of Western Bohemia, 2015.
- [17] TVEL, „Nuclear Fuel for VVER Power Reactors,“ 2011.
- [18] Leppanen, „Serpent - A continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code,“ 2016. [Online]. Available: <http://montecarlo.vtt.fi/index.htm>.
- [19] Lappanen, Serpent User Manual, 2013.

- [20] IAEA, „Nuclear Data Services,“ 2016. [Online]. Available: <https://www-nds.iaea.org/>.
- [21] P. S. V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, 1981: Hemisphere Publishing Corporation.
- [22] C. Y. A., Heat Transfer: A practical Approach, McGraw-Hill, 2002.
- [23] SciPy, „SciPy Reference Guide,“ 2016. [Online]. Available: http://docs.scipy.org/doc/scipy-0.14.0/reference/generated/scipy.optimize.newton_krylov.html.
- [24] Thermopedia, „THERMAL CONTACT RESISTANCE,“ 2011. [Online]. Available: <http://www.thermopedia.com/content/1188/>.
- [25] Wikipedia, „Thermal contact conductance,“ 2016. [Online]. Available: https://en.wikipedia.org/wiki/Thermal_contact_conductance.
- [26] L. Pajo, UO₂ Fuel Pellet Impurities, Pellet Surface Roughness and n(18O)/(n(16O) Ratios, Applied to Nuclear Forensic Science, University of Helsinki, 2001.
- [27] NIST, „Thermophysical Properties of Fluid Systems,“ 2016. [Online]. Available: <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>.
- [28] UxC, „UxC Fuel Quantity & Cost Calculator,“ 2016. [Online]. Available: <https://www.uxc.com/p/tools/FuelCalculator.aspx>.
- [29] WNA, „Thorium,“ 2016. [Online]. Available: <http://www.world-nuclear.org/information-library/current-and-future-generation/thorium.aspx>.
- [30] WNA, „The Economics of Nuclear Power,“ 2016. [Online]. Available: <http://www.world-nuclear.org/information-library/economic-aspects/economics-of-nuclear-power.aspx>.

Seznam obrázků

obr. 1: schéma palivového proutku s palivem [6]	5
obr. 2: radiální průběh teploty v čerstvém palivu	6
obr. 3: součinitel tepelné vodivosti UO_2 závislý na teplotě.....	7
obr. 4: součinitel tepelné vodivosti ThO_2 a UO_2 závislý na teplotě	10
obr. 5: součinitel tepelné vodivosti kovového thoria.....	11
obr. 6: závislost multiplikačního koeficientu v závislosti na vyhoření a koncentraci ThO_2	16
obr. 7:závislost multiplikačního koeficientu v závislosti na vyhoření a koncentraci Th.....	16
obr. 8: závislost multiplikačního koeficientu v závislosti na vyhoření a koncentraci ThO_2	18
obr. 9: závislost multiplikačního koeficientu v závislosti na vyhoření a koncentraci Th	18
obr. 10: průběh atomových hustot izotopů v průběhu vyhoření v palivu 10% ThO_2	20
obr. 11: schéma tepelných toků přes hranice kontrolního objemu.....	23
obr. 12: schéma skutečného kontaktu mezi dvěma pevnými povrchy [23]	26
obr. 13: teplotní skok v místě kontaktu dvou pevných materiálů [24]	26
obr. 14: maximální výška drsnosti.....	27
obr. 15: řez čerstvým palivovým proutkem	28
obr. 16: průběh koeficientů tepelných vodivostí pro UO_2 , ThO_2 a jejich směsi v závislosti na teplotě [7] .	32
obr. 17: teplotní pole pelety UO_2	33
obr. 18: radiální průběh teplot v peletě UO_2	33
obr. 19: radiální průběh teploty pro palivo s 80% ThO_2	34
obr. 20: radiální průběh teploty pro palivo s 90% ThO_2	34
obr. 21: radiální průběh teploty pro palivo s 96% ThO_2	35
obr. 22: střídání pelet UO_2 a vrstev jiného materiálu	36
obr. 23: teplotní pole vniklé přidání vrstvy materiálu s lepší tepelnou vodivostí.....	37
obr. 24: teplotní pole za případu přidání vrstvy ThO_2 mezi pelety UO_2	38
obr. 25: maximální teplota v palivu v závislosti na podílu ThO_2 pro různé výšky pelet UO_2	38
obr. 26: teplotní pole za případu přidání vrstvy kovového Th mezi pelety UO_2	39
obr. 27: průběh maximálních teplot v palivu v závislosti na podílu Th pro různé výšky pelet UO_2	40
obr. 28: střídání pelet UO_2 a vrstev jiného materiálu s mírně větším průměrem.....	41
obr. 29: teplotní pole pro případ vložení rozšířené vrstvy kovového thoria.....	44

obr. 30: průběh maximálních teplot v palivu v závislosti na podílu Th pro různé výšky pelet UO ₂ pro velikost mezery 10μm	45
obr. 31: průběh maximálních teplot v palivu v závislosti na podílu Th pro různé výšky pelet UO ₂ pro velikost mezery 20μm	46
obr. 32: průběh maximálních teplot v palivu v závislosti na podílu Th pro různé výšky pelet UO ₂ pro velikost mezery 30μm	47
obr. 33: závislost maximální teploty v palivu v závislosti na velikosti radiální mezery mezi vrstvou thoria a pokrytím	48
obr. 34: závislost maximální teploty v palivu na velikosti drsnosti povrchů v kontaktu	50
obr. 35: průběh tepla uloženého v palivu v závislosti na výšce pelety a podílu thoria	53