

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Obor: Jaderné inženýrství



**Analýza citlivostí a nejistot koeficientu
násobení palivových mříží tlakovodních
reaktorů pomocí nástrojů SCALE**

**Sensitivity and Uncertainty Analysis of
Multiplication Factor for Fuel Grids of
Pressurized Water Reactors by SCALE
Computation Code**

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Vypracoval: Dominik Celárek
Vedoucí práce: Ing. Lenka Frýbortová, Ph.D.
Rok: 2021



ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student: **Dominik Celárek**

Studijní program: Aplikace přírodních věd

Obor: Jaderné inženýrství

Název práce česky: **Analýza citlivostí a nejistot koeficientu násobení palivových mříží tlakovodních reaktorů pomocí nástrojů SCALE**

Název práce anglicky: Sensitivity and Uncertainty Analysis of Multiplication Factor for Fuel Grids of Pressurized Water Reactors by SCALE Computational Code

Pokyny pro vypracování:

1. Seznamte se s knihovnamí zhodnocených jaderných dat, formátem zápisu dat do knihoven a způsobem jejich vytváření. Popište nejistoty zhodnocených jaderných dat a ilustруйте je na příkladech.
2. Seznamte se s balíkem výpočetních kódů SCALE s důrazem na NEWT, TSUNAMI a SAMPLER.
3. Seznamte se s konstrukcí palivových souborů a připravte reprezentativní model palivového souboru.
4. Proveďte jednoduchý výpočet, který demonstruje vliv vybraných geometrických parametrů a jaderných dat na koeficient násobení palivové mříže.
5. Určete nejistotu stanovení koeficientu násobení při zahrnutí vlivu jaderných dat i geometrických nejistot.

Doporučená literatura:

- [1] Wieselquist W. et al.: Overview of Nuclear Data Uncertainty in Scale and Application to Light Water Reactor Uncertainty Analysis, U.S. NRC, NUREG/CR-7249, ORNL/TM-2017/706, 2018
- [2] Rearden B. T., Jessee M. A., (eds.): SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.3, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee (2018), Available from Radiation Safety Information Computational Center as CCC-834
- [3] Frýbort J.: Sensitivity and System Response of Pin Power Peaking in VVER-1000 Fuel Assembly Using TSUNAMI-2D, Nuclear Data Sheets, vol. 118, 2014, str. 579-581, ISSN: 0090-3752
- [4] Radulescu G., Mueller D. E., Wagner J. C.: Sensitivity and Uncertainty Analysis of Commercial Reactor Criticals for Burnup Credit, ORNL, USA, 2008
- [5] Cacuci D. G. (eds.): Handbook of Nuclear Engineering, Springer, 2010, ISBN: 978-0-387-98130-7

Jméno a pracoviště vedoucího práce: **Ing. Lenka Frýbortová, Ph.D.**
KJR FJFI ČVUT v Praze

Datum zadání bakalářské práce: 19.10. 2020

Datum odevzdání bakalářské práce: 7.7. 2021

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

V Praze dne 19.10. 2020

doc. Ing. Martin Kropík, CSc.


Garant oboru

Ing. Jan Rataj, Ph.D.


Vedoucí katedry



prof. Ing. Igor Jex, DrSc.


Děkan

Prohlášení

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

V Praze dne

.....
Dominik Celárek

Poděkování

Rád bych zde poděkoval vedoucí své bakalářské práce Ing. Lence Frýbortové Ph.D. za všestrannou pomoc, množství cenných a inspirativních zdrojů, rad, podnětů, doporučení, připomínek a zároveň za trpělivost a ochotou při konzultacích poskytnutých ke zpracování této práce.

Dominik Celárek

Název práce:

Analýza citlivostí a nejistot koeficientu násobení palivových mříží tlakovodních reaktorů pomocí nástrojů SCALE

Autor: Dominik Celárek

Studijní program: Aplikace přírodních věd

Obor: Jaderné inženýrství

Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: Ing. Lenka Frýbortová, Ph.D.

Katedra jaderných reaktorů, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská,
České vysoké učení technické v Praze

Abstrakt: Tato bakalářská práce se zabývá analýzou citlivostí a nejistot koeficientů násobení vybraných palivových souborů A40, P44G6 a P47E18 tlakovodních reaktorů VVER-1000 pomocí výpočetních kódů z balíku SCALE. Mezi nejdůležitější nejistoty koeficientu násobení patří ty plynoucí z nejistot zhodnocených jaderných dat. Počítány jsou však také nejistoty způsobené nejistotami jiných vstupních parametrů, například obohacení paliva nebo rozměrů palivových pelet. Citlivostní analýzou jsou pro použité materiály a jednotlivé izotopy vypočteny citlivostní koeficienty, provedena je také kontrola těchto výpočtů. V rešeršní části této práce je prozkoumán proces zhodnocování jaderných dat včetně určování jejich nejistot a ukládání do knihoven zhodnocených jaderných dat. Nachází se zde také jednoduchý popis fungování výpočetních kódů balíku SCALE a geometrický a materiálový popis palivových souborů reaktoru VVER-1000.

Klíčová slova: SCALE, palivová mříž, nejistota, citlivost, koeficient násobení

Title:

Sensitivity and Uncertainty Analysis of Multiplication Factor for Fuel Grids of Pressurized Water Reactors by SCALE Computation Code

Author: Dominik Celárek

Abstract: This bachelor thesis deals with the sensitivity and uncertainty analysis of multiplication factor for selected fuel assemblies A40, P44G6 and P47E18 of pressurized water reactors VVER-1000 by SCALE computation code. The most important uncertainty of the multiplication factor includes those arising from the uncertainties of the evaluated nuclear data. However, uncertainty caused by uncertainties of other input parameters, such as fuel enrichment or fuel pellet dimensions, are also calculated. Sensitivity coefficients are calculated for the used materials and individual isotopes by sensitivity analysis, this calculations are also checked. The research part of this work examines the process of evaluating nuclear data, determining their uncertainties and storing them in evaluated nuclear data libraries. There is also a simple description of the operation of the SCALE computational codes and a geometric and material description of the fuel assemblies of the VVER-1000 reactor.

Key words: SCALE, Fuel Grids, Uncertainty, Sensitivity, Multiplication Factor

Obsah

Úvod	15
1. Tvorba knihoven zhodnocených jaderných dat a jejich nejistoty	17
1.1. Jaderná data	17
1.1.1. Definice účinných průřezů	18
1.2. Druhy knihoven zhodnocených jaderných dat a jejich formát	19
1.2.1. Zástupci knihoven zhodnocených jaderných dat	19
1.2.2. Formát ENDF-6	21
1.3. Proces zhodnocování jaderných dat	23
1.3.1. Analýza experimentálních dat	23
1.3.2. Data z modelů jaderných reakcí	25
1.3.3. Finální zhodnocení jaderných dat	26
1.3.4. Ukázka zhodnocených jaderných dat	27
1.4. Příklad práce s nejistotami z kovariančních matic	30
2. Balík výpočetních kódů SCALE	32
2.1. Přehled kódů důležitých pro tuto práci	33
2.1.1. NEWT	33
2.1.2. TSUNAMI	34
2.1.3. Sampler	34
2.2. Knihovna jaderných dat SCALE	35
2.2.1. Knihovna mikroskopických účinných průřezů	35
2.2.2. Knihovna kovariančních dat	36
3. Palivové soubory tlakovodních reaktorů VVER-1000	37
3.1. Konstrukce palivových souborů	37
4. Příprava reprezentativního modelu palivových souborů a vstupních souborů pro výpočty s nástroji SCALE	40
4.1. Reprezentativní model palivových souborů	40
4.2. Vstupní soubory pro výpočty s kódy balíku SCALE	42
5. Výpočty charakteristik, citlivostí a nejistot palivových souborů reaktoru VVER-1000	44
5.1. Výpočet základních charakteristik palivových souborů	44
5.2. Analýza nejistot koeficientu násobení palivových souborů kódy TSUNAMI a Sampler	46
5.2.1. Výsledky analýzy nejistot koeficientu násobení	46
5.3. Citlivostní analýza koeficientu násobení palivových souborů kódem TSUNAMI	49
5.3.1. Výsledky citlivostní analýzy koeficientu násobení	49

5.3.2. Kontrola správnosti citlivostních koeficientů vypočtených kódem TSUNAMI-2D	53
5.4. Další analýzy nejistot palivových souborů kódem Sampler	57
Závěr	60
Literatura	63
A. Příloha: Vstupní soubory	65
B. Příloha: Grafy	70

Seznam zkratek

BNL Brookhaven National Laboratory, Národní laboratoře Brookhaven, USA.

CIELO Coordinated International Evaluation Library Organization.

CSEWG Cross Section Evaluation Working Group.

EAF The European Activation File.

ENDF Evaluated Nuclear Data File, Formát pro ukládání zhodnocených jaderných dat.

ETE Elektrárna Temelín.

EXFOR Experimental Nuclear Reaction Data Format, Formát pro ukládání experimentálních jaderných dat.

IAEA International Atomic Energy Agency, Mezinárodní agentura pro atomovou energii (MAAE), Vídeň, Rakousko.

JAEA Japan Atomic Energy Agency, Japonsko.

LANL Los Alamos National Laboratory, Národní laboratoře Los Alamos, USA.

NDC Nuclear Data Center, Jižní Korea.

NEA Nuclear Energy Agency, Paříž, Francie.

NEWT New ESC-based Weighting Transport code.

NNDC National Nuclear Data Center, Brookhaven, USA.

ORNL Oak Ridge National Laboratory, Národní laboratoře Oak Ridge, USA.

PSI Paul Scherrer Institute, Švýcarsko.

RIPL Reference Input Parameter Library, Knihovna referenčních vstupních parametrů.

SAMS Sensitivity Analysis Module for SCALE, Modul pro citlivostní analýzu s balíkem SCALE.

SCALE Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation, Balík výpočetních kódů pro analýzu a licenční hodnocení reaktorových systémů.

SSCRF State Scientific Centre of the Russian Federation, Obninsk, Rusko.

TSUNAMI Tools for Sensitivity and Uncertainty Analysis Methodology Implementation, Kód z balíku SCALE určený pro implementaci citlivostní analýzy a analýzy nejistot.

Úvod

V dnešní době se pro většinu jaderných aplikací ať už v reaktorové fyzice, jaderné medicíně, astrofyzice, či při práci s radioaktivním odpadem využívají pokročilé počítačové simulace. Z důvodu stále přísnějších předpisů pro současné jaderné reaktory, nebo také například pro vývoj reaktorů IV. generace a malých modulárních reaktorů, jsou potřeba stále komplexnější a sofistikovanější výpočetní programy. Ty během svých simulací pracují s obrovským množstvím co možná nejpřesnějších a kompletních jaderných dat, aby simulace co nejlépe odpovídaly skutečnému popisu interakcí a transportu částic v látce.

Přestože se na vytváření knihoven zhodnocených jaderných dat pro tyto simulace neustále podílí velké množství vědců v různých národních a mezinárodních institucích a knihovny zhodnocených jaderných dat jsou vylepšovány a zpřesňovány, je nutné vždy počítat s nejistotami, kterými jsou tato data zatížena. Tyto nejistoty totiž přispívají k celkovým nejistotám počítaných parametrů a tím snižují jejich přesnost, což je z úhlu pohledu bezpečnostních limitů problematické a to především v případě, že výsledná nejistota vypočtených parametrů není známá. Moderní neutronové transportní výpočetní kódy, jako například kód TSUNAMI nebo Sampler z balíku výpočetních kódů SCALE používané v této práci, jsou však schopné kromě výpočtu požadovaných parametrů provádět také analýzu jejich nejistot plynoucí z nejistot zhodnocených jaderných dat.

Výpočetní kódy přistupují k analýze nejistot zpravidla dvěma způsoby. Buďto jsou používány deterministické metody založené na nejrůznějších teoretických předpokladech, nebo stochastické metody založené především na metodě Monte Carlo. Výpočty deterministickými kódy bývají často rychlejší a efektivnější, nicméně nemusí být aplikovatelné na všechny modelované problémy. Stochastické výpočty mohou naopak trvat delší dobu, nicméně při dostatečném množství vzorků bývají velice přesné. Navíc s neustálým pokrokem v oblasti výpočetní techniky se díky snižování doby výpočtu dostávají stochastické metody čím dál více do popředí.

Nejistoty jaderných dat nejsou jediné nejistoty, které se vyskytují ve vstupních parametrech pro jaderné výpočty. Nejistoty se nachází také v různých rozměrech modelovaných zařízení, nebo v případě jaderných reaktorů také například v obohacení paliva. Tyto nejistoty se řídí výrobními tolerancemi, které udávají maximální odchylky těchto vstupních parametrů od požadovaných nominálních hodnot. Z bezpečnostních důvodů jsou pro různé jaderné aplikace prováděny také citlivostní analýzy, při kterých se zkoumá jak citlivé jsou různé výsledné počítané parametry na změnu materiálového složení daného zařízení.

Všechny již zmíněné analýzy jsou v této práci demonstrovány na příkladu výpočtu koeficientu násobení vybraných palivových souborů, které jsou používány v tlakovodních reaktorech typu VVER-1000 kupříkladu v Jaderné elektrárně Temelín. Kromě popisu konstrukce těchto palivových souborů a výpočtů citlivostní analýzy a analýzy nejistot jsou v práci představeny také použité výpočetní kódy. Podstatnou část práce tvoří také popis procesu zhodnocování a uchovávání jaderných dat spolu s kovariančními daty, ve kterých jsou uloženy informace o jejich nejistotách.

1. Tvorba knihoven zhodnocených jaderných dat a jejich nejistoty

Ve všech vědních oborech, které se zabývají strukturou jader, transportem částic a jejich interakcemi s jádry, se pro různé výpočty využívá řada parametrů, tedy jaderných dat. Všechna tato data, přesněji jejich nejpravděpodobnější hodnoty, jsou k nalezení v několika národních a mezinárodních knihovnách zhodnocených jaderných dat. Zhodnocování¹ jaderných dat a tvorba jejich knihoven je velice složitý proces založený na kombinaci experimentálních dat, teoretických znalostí, modelových předpovědí a také na zkušenosti vědců podílejících se na samotné evaluaci. Mnozí toto vše dohromady nazývají kombinací „vědy a umění“.

Důležitý aparát potřebný pro evaluaci jaderných dat je Bayesovská statistika. Ta umožňuje slučovat znalosti z mnoha zdrojů, například z experimentálních dat a modelových výpočtů. Je tedy možné určovat střední hodnoty a nejistoty pro vstupní parametry modelů a ty jsou pak použity pro předpovědi fyzikálního chování tam, kde nejsou dostupná žádná experimentální data. Množství zhodnocených dat zpravidla není pro všechny izotopy, energie částic a reakce stejné. Podrobnější data jsou k dispozici pro izotopy, které jsou významně používány pro konkrétní jaderné aplikace, např. míra znalosti o ^{235}U je výrazně vyšší než o transuranech. [1]

1.1. Jaderná data

V knihovnách zhodnocených jaderných dat jsou k nalezení data především ohledně různých interakcí jader s částicemi, ale také data týkající se například radioaktivity jader. Mezi interagující částice patří neutrony, protony, gama záření, deuterium, tritium a také alfa částice. Data týkající se těžkých částic, elektronů a subatomárních částic většinou v knihovnách nebyvají k nalezení, ale jsou dostupně například v databázi experimentálních dat ve formátu EXFOR (Experimental Nuclear Reaction Data Format, Formát pro ukládání experimentálních jaderných dat). [2]

Co se týče radioaktivity, knihovny obsahují data o rozpadových řadách, druzích radioaktivní přeměny a energii uvolněných částic, dále také obecné informace, jako například poločasy rozpadu. Data ohledně srážkových procesů jsou o něco rozmanitější. Kromě toho nejdůležitějšího, tedy mikroskopických účinných průřezů (ty jsou definovány v další podkapitole) a jejich nejistot, lze v knihovnách nalézt také data

¹někdy také evaluace

ohledně úhlového a energetického rozdělení interagujících částic a nebo také o výtěžcích ze štěpení. Obecné jaderné informace, jako jsou například hmotnosti izotopů, rok jejich objevu, ale i některé informace týkající se radioaktivního rozpadu jsou k nalezení v databázi NUBASE. [3]

1.1.1. Definice účinných průřezů

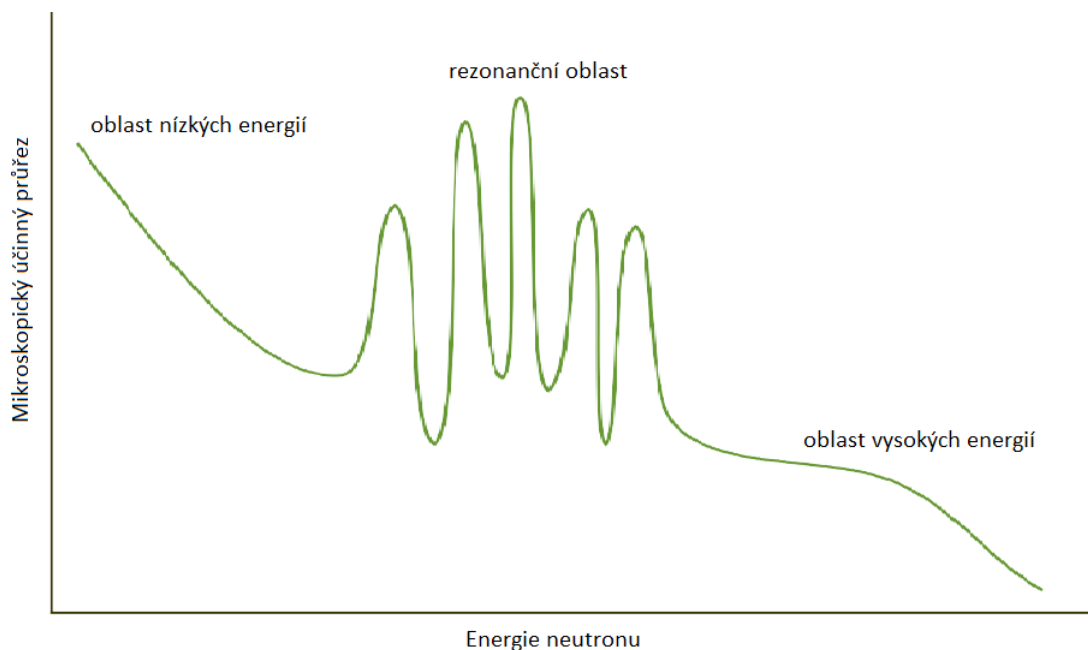
Fyzikální veličina mikroskopický účinný průřez vyjadřuje míru pravděpodobnosti neutronové interakce. Slovní definice pro mikroskopický účinný průřez je následující: „Představuje míru pravděpodobnosti, že dojde k interakci mezi jádrem nacházejícím se na ploše 1 m^2 a jedním dopadajícím neutronem, který projde kolmo touto plochou.“ [4]. Jeho jednotkou ze soustavy SI je jednotka plochy m^2 , ta se však téměř nepoužívá, mnohem častěji je mikroskopický účinný průřez vyjadřován v centimetrech čtverečních nebo častěji v barnech (b), který je s oběma předchozími v následující závislosti:

$$1 \text{ b} = 10^{-24} \text{ cm}^2 = 10^{-28} \text{ m}^2$$

Celkový mikroskopický účinný průřez je často dělen podle toho o jaké reakce se zrovna jedná. V knihovnách je tedy možné najít mikroskopické účinné průřezy pro rozptyl, ten je dále dělen na pružný a nepružný, nebo pro absorpci, který se dělí na mikroskopický účinný průřez pro štěpení, radiační záchyt, produkci neutronů a produkci nabitých částic. Na předchozích řádcích je mikroskopický účinný průřez definován pro reakce s neutrony jakožto nalétávajícími částicemi. V knihovnách se však vyskytují účinné průřezy i pro všechny ostatní již zmíněná částice, například pro protony, alfa částice nebo gama záření. Pro reaktorové neutronové výpočty, které jsou hlavním tématem této práce, jsou však stěžejními daty právě mikroskopické účinné průřezy pro interakce jader s neutrony.

Mikroskopický účinný průřez je veličina závislá na energii nalétávajícího neutronu. Na obrázku 1.1 je možné vidět obecný tvar mikroskopického účinného průřezu. Zatímco v oblasti vysokých energií je jeho hodnota poměrně malá, pro nízké energie (tedy energie menší než $0,1 \text{ eV}$) však výrazně roste. Uprostřed mezi těmito dvěma oblastmi se nachází rezonanční oblast. Zde mikroskopický účinný průřez dramaticky kolísá a je docela složité tuto oblast popisovat. Proto jsou zde často značné také nejistoty. Začátek rezonanční oblasti, tedy energie první rezonance, závisí na hmotnostním čísle jádra. Pro těžší jádra je energie první rezonance menší než pro lehčí jádra, např. pro ^{235}U je tato energie v řádu jednotek eV a pro ^{23}Na je v řádu keV.

Výjimkou jsou prahové reakce (nepružný rozptyl a reakce se štěpitelnými jádry), kde grafy mikroskopických účinných průřezů mají jiný tvar. V tomto případě má daný účinný průřez hodnotu nejvyšší pro oblast vysokých energií a postupně klesá skrze rezonanční oblast. V oblasti nízkých energií je potom mikroskopický účinný průřez nulový, protože neutrony nedosahují prahových energií pro dané reakce.



Obrázek 1.1.: Náčrt obecného tvaru mikroskopického účinného průřezu (pro neprahové reakce), obě osy jsou v logaritmickém měřítku [5]

V zahraniční literatuře je často mikroskopický účinný průřez nazýván bez slova mikroskopický, tedy pouze „cross section“. Zde je však nutné být obezřetný aby nedošlo k záměně za makroskopický účinný průřez Σ . Ten je dán součinem mikroskopického účinného průřezu a atomové hustoty terčíku. Na rozdíl od mikroskopického je ten makroskopický o něco snadnější pro představu, vyjadřuje totiž míru pravděpodobnosti interakce částice s terčíkem na jednotku dráhy a tedy lépe popisuje makroskopické vlastnosti látky. Nejčastěji používanou jednotkou je cm^{-1} . Obdobně jako u mikroskopického účinného průřezu je možné i ten celkový makroskopický dále dělit podle druhu reakce na terčíku nebo nalétávající částice. [5]

1.2. Druhy knihoven zhodnocených jaderných dat a jejich formát

1.2.1. Zástupci knihoven zhodnocených jaderných dat

V této podkapitole budou prezentovány nejznámější používané knihovny zhodnocených jaderných dat. Je zajímavé si povšimnout, že každá knihovna neobsahuje striktně pouze svá vlastní data, ale její součástí jsou i data z jiných knihoven. Toto nastává především v těch sekcích knihoven, kde daná instituce, která knihovnu vytváří, svá vlastní data nemá nebo jsou nedostatečná. Data pro některé izotopy, respektive reakce na nich, mohou v knihovnách chybět úplně. Příkladem izotopu, pro který v knihovnách data často chybí, může být kyslík ^{18}O , který se sice ve výpočtech s transportními kódy často vyskytuje, má však na transport neutronů zanedbatelný vliv.

ENDF/B-VII.1 a ENDF/B-VIII.0: Autorem knihoven ENDF/B (Evaluated Nuclear-Data File) je skupina CSEWG (Cross Section Evaluation Working Group) sdružující americké a kanadské jaderné instituce, která stojí za ustanovením formátu ENDF-6 popsaném v následující podkapitole. Verze knihovny VII.1 byla vydána v roce 2011 a je stále doporučována pro používání v jaderných vědách a technologických aplikacích. V roce 2018 však byla vydána nová verze VIII.0, ve které jsou již plně integrovány nové standardy neutronových dat, obsahuje vylepšená data ohledně rozptylu tepelných neutronů a navíc byla pro její tvorbu použita nová zhodnocená data z projektu CIELO (Coordinated International Evaluation Library Organization). Nová verze knihovny byla vystavena skupinou CSEWG integrálním testům a obecně je možné říci, že knihovna dosahuje znatelně lepších výsledků oproti předchozí verzi. Knihovny ENDF/B jsou navíc výchozí nízkoenergetické (od setin meV až po desítky MeV) knihovny jaderných dat pro transportní kódy, jako například SCALE, který je stěžejní pro tuto práci. [6][7]

JEFF-3.3: Tato knihovna z roku 2017 je výsledkem mezinárodní spolupráce států, které jsou součástí NEA (Nuclear Energy Agency, Paříž, Francie). Obsahuje pečlivě aktualizovaná data týkající se neutronových interakcí, rozpadových řad, štěpných výtěžků a také data důležitá pro neutronovou aktivační analýzu ve formátu EAF (The European Activation File). Reakční data pro další částice (alfa a gama záření, protony atd.) byla převzata z knihovny TENDL-2017 a zakomponována do knihovny JEFF-3.3. [8]

JENDL-4.0: Knihovna JENDL-4.0 má poskytovat japonskou standardní knihovnu pro rychlé množivé reaktory, tepelné reaktory, výpočty fúzní neutroniky, stínění a další aplikace. Byla vytvořena v roce 2010 japonskou agenturou JAEA (Japan Atomic Energy Agency, Japonsko). Obsahuje data pro 406 nuklidů s energiemi v rozsahu od setin meV až do 20 MeV. Stejně jako obě předchozí knihovny využívá formátu ENDF-6. [9]

TENDL-2019: Jak již ze samotného názvu knihovny vyplývá, byla zveřejněna v roce 2019 a jejími autory jsou vědci ze švýcarského institutu PSI (Paul Scherrer Institute, Švýcarsko) ve spolupráci s IAEA (International Atomic Energy Agency, Mezinárodní agentura pro atomovou energii (MAAE), Vídeň, Rakousko). Tato knihovna je speciální v tom, že pro zhodnocování dat nepoužívá experimentů, ale jsou výstupem jaderného modelu TALYS (a dalších výpočetních kódů z něj odvozených). Díky tomuto se například všechna data rezonancí řídí statistickými hypotézami. Knihovna poskytuje informace o přibližně 2800 izotopech až do energií částic 200 MeV spolu s kovariančními daty. Většina dat v této knihovně je originální až na data týkající se 24 izotopů, například izotopů vodíku, helia, bóru, kyslíku ale také uranu (konkrétně ^{233}U , ^{235}U a ^{238}U) a plutonia. Tato konkrétní data přebírá z americké knihovny ENDF/B-VIII. [10]

Další knihovny: Mezi další důležité knihovny zhodnocených jaderných dat je nutné zařadit také ruskou knihovnu BROND-3.1 a čínskou knihovnu CENDL-3.1. Obě poskytují informace především k neutronovým interakcím (energie neutronů od termálních po 20 MeV). [11][12]

1.2.2. Formát ENDF-6

Formát ENDF-6 je mezinárodně uznávaný formát pro knihovny zhodnocených jaderných dat. Jsou k dispozici i jiné formáty, ty starší se v současnosti již téměř nepoužívají, existují však tendence na tvorbu nového formátu, jehož struktura by měla ještě lépe vyhovovat způsobu čtení dat výpočetními programy. Všechny normy a pravidla formátu určuje americká NNDC (National Nuclear Data Center, Brookhaven, USA) jako zástupce mezinárodní CSEWG. Formát ENDF byl původně soustředěn především pro neutronová jaderná data, nicméně s postupem času je již dnešní formát ENDF-6 zaměřen i na data reakcí s fotony a nabitými částicemi a také na podstatně širší spektrum energií interagujících částic. Přidány byly také data například ohledně rozpadů nebo výtěžků ze štěpení.

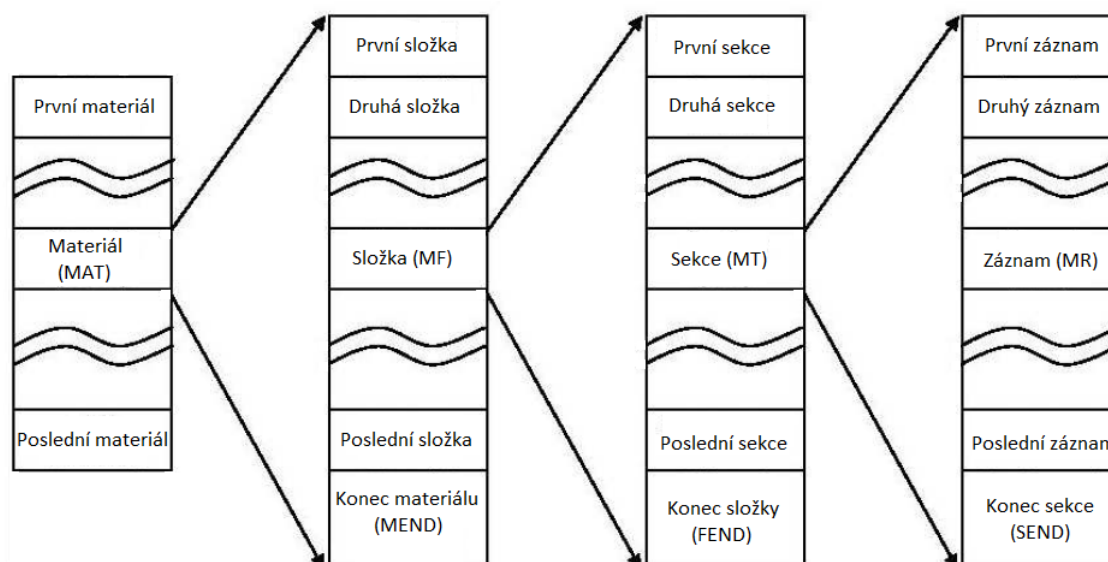
Jelikož bývá v knihovnách nepřehledné množství dat, je tvorba všeobecně uznávaného formátu jejich ukládání naprosto stěžejní pro co nejjednodušší vyhledávání a následnou práci s daty. Samotný formát ENDF-6 není nijak složitý, jedná se o poměrně jednoduše větvený formát. Kromě samotného formátu jsou poskytovány také normy a doporučení pro procedury samotného zhodnocování jaderných dat. Ty však nejsou všemi institucemi dodržovány, nýbrž mohou mít své vlastní. Řídí se jimi však samotná CSEWG vztahující se ke knihovnám ENDF/B.

Jak již bylo napsáno, formát ENDF-6 je větvený formát. Každá instance, neboli úroveň, je označena svou zkratkou, které je pak přiřazena určitá nejčastěji číselná hodnota. V následujících odrážkách jsou instance postupně seřazeny od těch nejvyšších až po ty nejnižší. [13]

- NLIB - Tímto číslem je v první instanci definována samotná knihovna. Například pro knihovnu ENDF/B je NLIB = 0 nebo a pro knihovnu JEFF je NLIB = 2. Pro další popis knihovny se používají následující parametry:
 - NVER - Parametr vyjadřující verzi knihovny.
 - LREL - Určuje číslo vydání dané knihovny.
 - NFOR - Používá se pro stanovení formátu, ve kterém je knihovna seřazena. Například pro formát ENDF-6 je NFOR = 6.
- NSUB - Udává typ reakcí a vstupujících částic. Parametr NSUB je počítán podle vzorce $NSUB = 10 \cdot IPART + ITYPE$, kde IPART souvisí právě se vstupujícími částicemi (především s jejich atomovým a protonovým čísle) a ITYPE s druhem reakcí. Příkladem pro srážková neutronová data je NSUB = 10, pro data radiaktivního rozpadu je NSUB = 4, pro fotojaderná data je NSUB = 0, nebo pro srážková data alfa částic je NSUB = 20040.

- MAT - Další důležitý parametr určující materiál, na kterém dochází k daným reakcím. Materiálem totiž mohou být buďto jednotlivé nuklidy, nebo konkrétní materiály, např. sloučeniny (lehká a těžká voda) nebo slitiny (zirkoniové slitiny - E110, E635). Navíc samostatný nuklid může být v různých stavech - v základním nebo excitovaných. Hodnota MAT je specifická pro jednotlivé materiály a nabývá hodnot od 1 od 9999. Číslování materiálů nemusí být ve všech knihovnách jednotné. Formát ENFD-6 zde definuje pouze určitou konvenci číslování, nejedná se však o vyžadovanou normu.
 - MOD - Při různých opětovných zhodnocování dat se používá právě tohoto parametru, jehož hodnota počítá, kolikrát již byla data v dané oblasti změněna. Parametr MOD nepřichází v úvahu pouze pro parametr materiálu MAT, ale může být použit i pro jiné subsekcce, které jsou zde dále popsány.
- MF - Tento parametr dělí instanci MAT do jednotlivých složek (z anglického „files“) a označuje určitý druh dat. Pro příklad je možné zmínit MF = 1 označující všeobecné informace, MF = 3 pro reakční účinné průřezy nebo MF = 33 pro kovarianční data reakčních účinných průřezů.
- MT - Předchozí složky jsou dále děleny do sekcí MT, které popisují konkrétní druh jaderné reakce. U reakcí, kde dochází k rozpadu, je z něj možné dokonce vyčíst jaký je druh i energie emitovaných částic. Například pro pružný rozptyl je MT = 2, MT = 3 pro nepružný rozptyl, MT = 18 pro celkové štěpení a MT = 27 pro celkovou absorpci. MT = 1 se potom používá pro celkový mikroskopický účinný průřez.
- MR - Poslední parametr označující samotné záznamy dat (z anglického „record“). Všechny záznamy v knihovnách jsou děleny do šesti hlavních skupin:
 - TEXT - Označuje textový soubor používaný například pro různé komentáře nebo poskytování informací k datům.
 - CONT - Používá se pro různá kontrolní data.
 - LIST - Označení pro jednoduchý seznam čísel.
 - TAB1 a TAB2 - Používá se pro ukládání dat do 2 dimenzionálních matic, tedy pro funkce $f(x)$, a do 3 dimenzionálních matic, tedy pro funkce $f(x, y)$.
 - INTG - Slouží například pro ukládání korelačních matic ve formátu integer.

Na obrázku 1.2 je pro lepší přehlednost možné sledovat postupnou hierarchii mezi parametry MAT, MF, MT a MR.



Obrázek 1.2.: Struktura dat posledních instancí formátu ENDF-6 (originál přeložen do češtiny) [13]

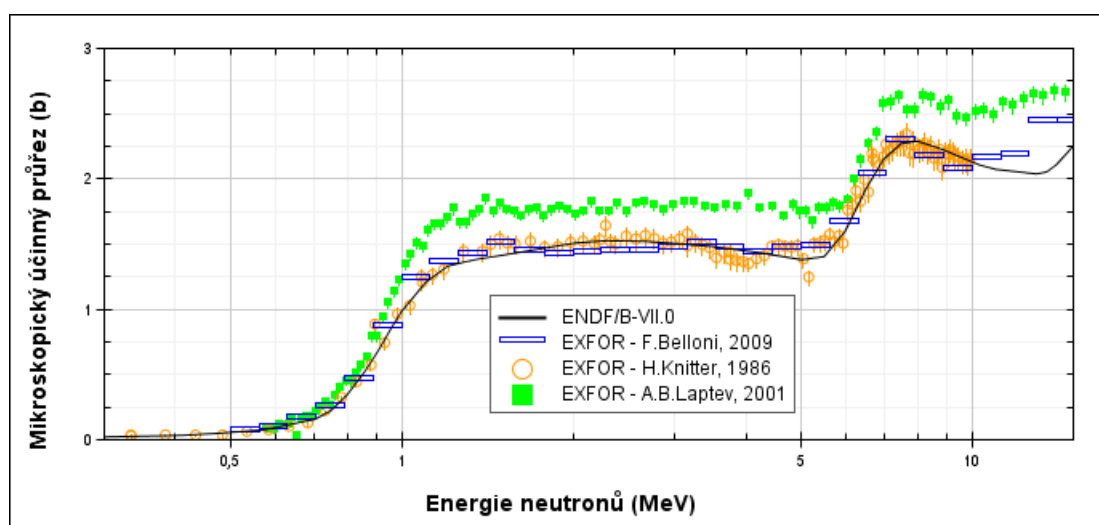
1.3. Proces zhodnocování jaderných dat

V některých případech se pro zhodnocování jaderných dat používají experimentální data, jindy jsou to spíše teoretické modelové predikce, většinou však přichází na řadu kombinace obojího. Pro velké množství jaderných interakcí různých energií se uplatňují rozdílné postupy zhodnocování dat. Níže bude tedy popsán souhrnný postup, na kterém je možné dobře demonstrovat celý proces zhodnocování dat.

1.3.1. Analýza experimentálních dat

Téměř pokaždé při zhodnocování jaderných dat je v první řadě na místě nasbírat a analyzovat všechna existující experimentální data týkající se konkrétního izotopu a reakce na něm. V minulosti byla tato data uchovávána v tištěné (knižní) podobě, v dnešní době se však již nachází v různých počítačových databázích. Výhodou digitální formy dat je nejen lepší a jednodušší dostupnost (např. na různých webech) ale také možnost používat vyhledávací a vykreslovací programy. Na shromažďování nových dat, opravování již existujících databází a digitalizaci starých dat v tištěné podobě se podílí mnoho jaderných institucí po celém světě, jako například NNDC, NEA nebo NDC (Nuclear Data Center, Jižní Korea) při IAEA. Existuje navíc jednotný formát pro ukládání těchto experimentálních dat - EXFOR, který definuje klíčová slova a různé sekce pro co nejjednodušší vyhledávání požadovaných informací. Pro většinu vědců zabývajících se zhodnocováním jaderných dat (dále hodnotitelé) je však problém, že spousta experimentátorů toto formátování příliš nedodrжуje, což komplikuje proces zhodnocování jaderných dat.

Bohužel neplatí ideální stav, kdy data z různých experimentálních datových souborů popisující stejné reakce na stejných jádrech jsou si odpovídající. Experimentální data jsou totiž obvykle zatížena známými, ale i neznámými nejistotami, chybami nebo korekčními faktory. Pouhé zpracování těchto dat by tedy mohlo vést k chybným výsledkům a hodnotitelé musí dbát na důsledné prostudování dostupné dokumentace k experimentu. Další nebezpečí chybného vyhodnocení se skrývá také v tom, že během experimentu nejsou jeho výsledky to, co bylo ve skutečnosti měřeno. Například měření účinného průřezu pro štěpení (n,f) na plutoniu ^{239}Pu se stanovuje relativně vůči účinnému průřezu štěpení na uranu ^{235}U , který je považován jako standardní (je určen s přesností kolem 1 %). Nicméně je pravděpodobné, že při starších experimentech se standardní účinný průřez liší od toho dnešního a hodnotitelé musí data přetransformovat do podoby odpovídající aktuálnímu standartu (více o standardech v podkapitole 1.3.3). Pokud navíc k experimentu chybí potřebná dokumentace je celkový přístup hodnotitelů k datům a jejich nejistotám více subjektivní.



Obrázek 1.3.: Graf zhodnocených dat a vybraných experimentálních dat mikroskopického účinného průřezu pro reakci ^{243}Am (n,f) (vykresleno pomocí softwaru NEA JANIS)

Dalším problémem se kterým je možné se při zhodnocování setkat je fakt, že data z různých experimentů se mohou rozcházet o více než 1 nebo 2 směrodatné odchylky, přestože není jasné, kde alespoň v jednom z těchto experimentů došlo k chybě. Řešením těchto problémů může být použití teoretických znalostí a různých modelových předpokladů. Například na obrázku 1.3 je možné vidět zhodnocená jaderná data (z knihovny ENDF/B-VII.0) a experimentální data pro účinný průřez pro štěpení $^{243}\text{Am}(n,f)$, kde se pro energie neutronů od 1 MeV do 10 MeV data silně rozcházejí. Řešením tohoto problému pak bylo použití integrálních dat (ta jsou popsána dále).

Jedním z nejsložitějších úkolů bývá vyčíslování experimentálních nejistot a speciálně korelace mezi nimi. Jak už bylo výše psáno, spousta experimentálních dat není doplněna kvalitní dokumentací celého experimentu. Z hodnotitelů se pak často stávají vyšetřovatelé, kteří se snaží například zjistit, proč se některá data tak rozcházejí, nebo proč jsou nejistoty u některých dat tak malé. Zjednodušeně je možné experimentální nejistoty rozdělit do dvou kategorií - statistické a systematické nejistoty.

Zatímco velikost nejistot první kategorie se zpravidla zmenšuje s počtem měření a navíc tyto nejistoty bývají v dokumentaci docela dobře zaznamenány, co se týče systematických nejistot, tak jejich velikost se s počtem měření nesnižuje. Příčinou těchto nejistot je například nízká účinnost a špatná kalibrace detektorů nebo také nečistoty ve vzorcích. O tomto druhu nejistot se většinou v dokumentaci nepíše a je tedy složitější je odhalit a správně vyčíslit. [1][14]

1.3.2. Data z modelů jaderných reakcí

Pro vytváření knihoven jaderných dat není možné používat pouze data z experimentů, ty totiž nejsou schopné pokrýt celé spektrum izotopů, reakcí a energií nalétávajících částic. Provést tolik potřebných experimentů by bylo ekonomicky i časově velice náročné a navíc některé experimenty by v současné době nebylo možné ani provést. Pokud se tedy hodnotitel dostane do situace, že experimentální data vůbec nejsou nebo je jich jen velice málo, nastupují na řadu výpočty podle modelů jaderných reakcí. Ty se často používají i pro potvrzení experimentálních dat (i v případech, kde jich je dostatek).

Pro teoretické pochopení fyziky stojící za všemi jadernými procesy je potřeba využít mnoha znalostí z částicové a kvantové fyziky. K popisu jader a jaderných reakcí se proto využívá celá řada modelů, které se snaží co nejvíce přiblížit skutečnému chování. Asi nejznámější model pro popis štěpení je takzvaný kapkový model, kde se jádro může dělit na dvě části podobně jako kapka vody. Pro popis jádra při štěpení je pak nutných minimálně 5 parametrů (např. prodloužení ve směru štěpení, hmotnostní asymetrie levé a pravé části, nebo šířka krčku mezi oběma částmi). Existují také sofistikovanější, ale na druhou stranu výpočetně mnohem složitější, modely jako například „R-matrix“ teorie, která je vhodná kupříkladu pro výpočet v rezonanční oblasti. [1][15]

Co se týče nejistot jejichž zdrojem jsou právě modely jaderných reakcí je možné je rozdělit do dvou hlavních skupin - nejistoty parametrů modelů a nejistoty plynoucí z nedostatků modelů. Bohužel stejně jako u nejistot z experimentálních dat i zde je velice obtížné dvě skupiny nejistot rozlišit. Nejistoty parametrů modelů byly velkým problémem převážně v minulosti. Kvůli nim se lišily výsledky modelových výpočtů z různých institucí až v několika řádech. Velký pokrok v této oblasti byl zaznamenán až po vytvoření mezinárodní knihovny referenčních vstupních parametrů RIPL (Reference Input Parameter Library, Knihovna referenčních vstupních parametrů), která je považována za standardní pro počáteční parametry modelů a jejich nejistot.

Druhá skupina nejistot je neméně důležitá, je totiž zřejmé, že samotné modely nemohou být naprosto přesné a že se v nich nacházejí určité nedostatky. Ty se zde objevují z několika důvodů. Jednak se při tvorbě modelů provádí spousta odhadů a zjednodušení, aby bylo možné výpočty vůbec provést. Dalším zdrojem modelových nedostatků je to, že často nemáme dostatečné teoretické informace a tedy modely ani nemohou být dokonalé. Vyčíslování tohoto druhu nejistot se často provádí po-

rovnáním modelového výpočtu s dobře definovanými parametry a dat z kvalitního experimentálního měření v dostatečně prozkoumaných oblastech (izotopů, energií atd.). [14]

1.3.3. Finální zhodnocení jaderných dat

Všechna data (jak ta experimentální tak ta z modelových výpočtů), která jsou hodnotitelům dostupná, je třeba zkombinovat a provést jejich konečné vyhodnocení. Existují dva hlavní přístupy k této problematice - deterministický a stochastický. Ten první je starší a v současné době stále ten nejpoužívanější, naopak stochastický přístup je poměrně moderní a jeho rozvoj je dnes díky čím dál vyspělejšími informačním technologiím budoucností této vědy.

Naprostá většina deterministických přístupů používajících se při vyhodnocování jaderných reakcí s neutrony je založena na metodě nejmenších čtverců. Například při zhodnocování účinného průřezu je možné (velice zjednodušeně) říci, že pomocí této metody se hodnotitelé snaží minimalizovat velikost následujícího výrazu:

$$\left[(y - y_E)^T \cdot (V_E)^{-1} \cdot (y - y_E) \right] + \left[(\sigma - \sigma_C)^T \cdot (V_C)^{-1} \cdot (\sigma - \sigma_C) \right] = \text{minimum},$$

kde y_E znázorňuje experimentální data s kovarianční maticí V_E , σ_C data z modelových výpočtů s kovarianční maticí V_C a σ jsou zhodnocená data účinného průřezu. [14]

Ve skutečnosti se však používají mnohem sofistikovanější modely využívající Bayesovské statistiky, která umí pracovat s podmíněnými pravděpodobnostmi a díky ní je možné mnohem lépe kombinovat experimentální data s těmi z modelových teoretických predikcí. Příkladem modelu, který se používá například pro tvorbu široké škály kovariančních matic pro účinné průřezy knihovny ENDF/B-VII.1, je kód KALMAN, který má svůj základ v lineárním Kalmanově filtru.

Stochastické modely určené pro konečné zhodnocení jaderných dat jsou založeny na mnoha technikách Monte Carlo (např. Filtered Monte Carlo (FMC), Unified Monte Carlo (UMC), Backward-Forward Monte Carlo (BFMC), Total Monte Carlo (TMC) atd.). Každý z těchto přístupů je rozdílný, vždy se však jedná o tvorbu náhodného vzorku dat vstupních parametrů různých modelů a následné měření a minimalizace nesrovnalostí mezi modely a experimentálními daty pro získání těch nejlepších možných vstupních parametrů. Metoda TMC jde dokonce ještě dále, neslouží totiž pro tvorbu zhodnocených jaderných dat do knihoven, ale pracuje s daty a jejich nejistotami přímo v transportních modelech a simulacích.

Existují zhodnocená data, která se opírají schválně jen a pouze o experimentální data. Pro tato vyhodnocení bylo nasbíráno velké množství dat a jejich nejistoty jsou oproti jiným poměrně malé. Reakce, které tomuto odpovídají, se označují jako standardní a díky jejich hlubšímu poznání jsou velice důležité pro kalibraci a poměrová měření jiných experimentů. Při neutronových měření je totiž složité měřit

absolutní hodnoty, proto se často měří relativně právě vůči standardním datům. V dnešní době do standardních reakcí pro mikroskopické účinné průřezy patří například $H(n,n)$, ${}^3\text{He}(n,p)$, ${}^6\text{Li}(n,t)$, ${}^{10}\text{B}(n,\alpha)$, $C(n,n)$, $\text{Au}(n,\gamma)$ nebo ${}^{235}\text{U}(n,f)$.

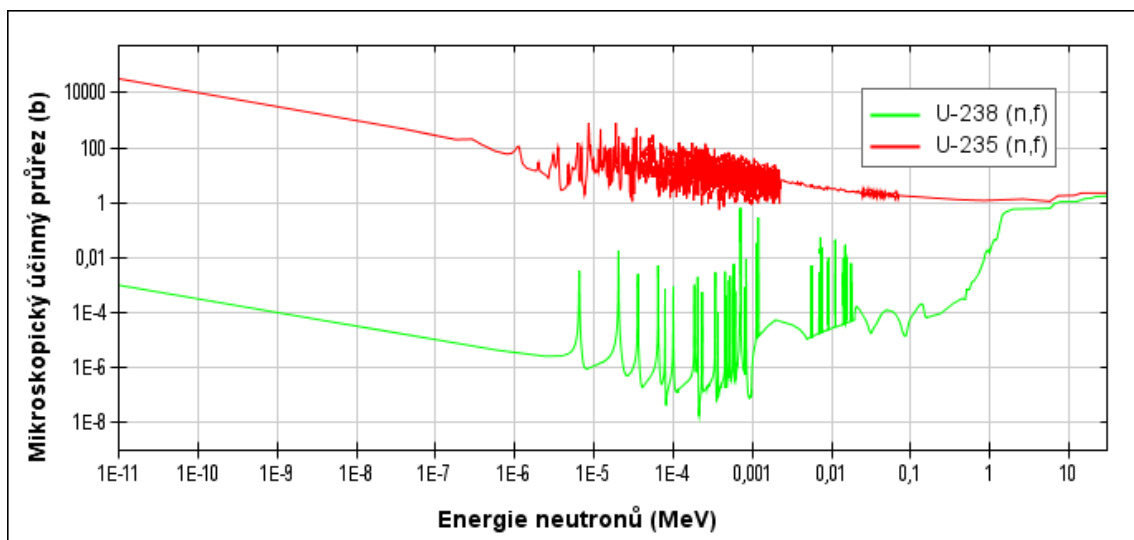
Poslední důležitou částí zhodnocování jaderných dat je jejich testování integrálními daty. Zatímco doposud bylo popsáno používání diferenciálních experimentálních dat, kde je kladen důraz na měření fyzikálních veličin přímo, integrální experimentální data neposkytují přesné informace o fyzikálních veličinách. Během integrálního měření se například počítá pouze celkový počet impulzů v detektoru za určité časové období. Jak již bylo napsáno, z těchto dat není možné určit například pravděpodobnost štěpení (tedy mikroskopický účinný průřez pro štěpení) přímo. Jejich kombinací je však možné testovat, jak dobře již zhodnocená jaderná data odpovídají skutečnému chování systému. [1][14]

1.3.4. Ukázka zhodnocených jaderných dat

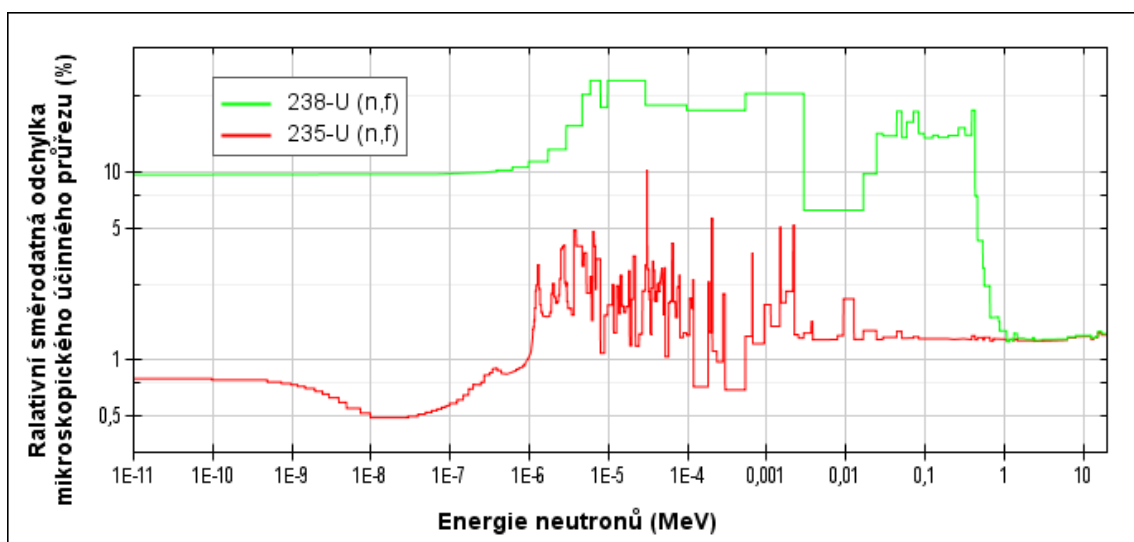
V této sekci je na konkrétním příkladě ukázán výstup z práce hodnotitelů. Příkladem jsou data účinných průřezů pro reakce ${}^{235}\text{U}(n,f)$ a ${}^{238}\text{U}(n,f)$, které jsou čerpány z knihovny zhodnocených jaderných dat ENDF/B-VIII.0 od americké CSEWG. Struktura knihoven a jejich různé druhy byly popsány v předchozí kapitole. V grafu 1.4 jsou vykresleny průběhy mikroskopických účinných průřezů pro jednotlivé reakce (tedy jejich střední hodnoty). Je zvykem vykreslovat mikroskopické účinné průřezy v logaritmickém měřítku. To zde však vede k tomu, že z průběhu pro ${}^{238}\text{U}$ není patrné, že se jedná o prahovou reakci. Nenulové hodnoty při vyšších energiích jsou důsledkem kvantové fyziky, ale prakticky k nim nedochází.

Knihovna mikroskopických účinných průřezů obsahuje také informace o nejistotách jednotlivých dat. V grafu 1.5 je možné sledovat relativní směrodatné odchytky prezentovaných hodnot mikroskopických účinných průřezů. V grafu je například vidět, že relativní směrodatná odchytky mikroskopického účinného průřezu pro štěpení ${}^{235}\text{U}$ je na úrovni 1 %. Relativní směrodatná odchytky mikroskopického účinného průřezu pro štěpení ${}^{238}\text{U}$ se v oblasti vysokých energií, tedy v oblasti kde probíhá jeho štěpení pohybuje podobně jako v případě ${}^{235}\text{U}(n,f)$ kolem 1 %. V rezonanční oblasti jsou však z důvodu obtížného popisu odchytky vysoké (až 10 % pro ${}^{235}\text{U}$). Celkově je však možné říct, že nejistoty pro reakci štěpení na ${}^{235}\text{U}$ jsou poměrně malé, což je i jedním z důvodů proč se právě reakce ${}^{235}\text{U}(n,f)$ považuje za standardní.

Co se týče relativních směrodatných odchylek mikroskopických účinných průřezů, je vhodné je porovnat také mezi různými knihovnami jaderných dat. V grafu 1.6 je toto provedeno pro reakci ${}^{235}\text{U}(n,f)$ a pro nejnovější knihovny ENDF/B, JEFF, JENDL a BROND. U všech knihoven je možné sledovat obdobnou tendenci, kde odchytky bývají největší v rezonanční oblasti a pro vysoké i nízké energie klesají k nebo pod 1 %.

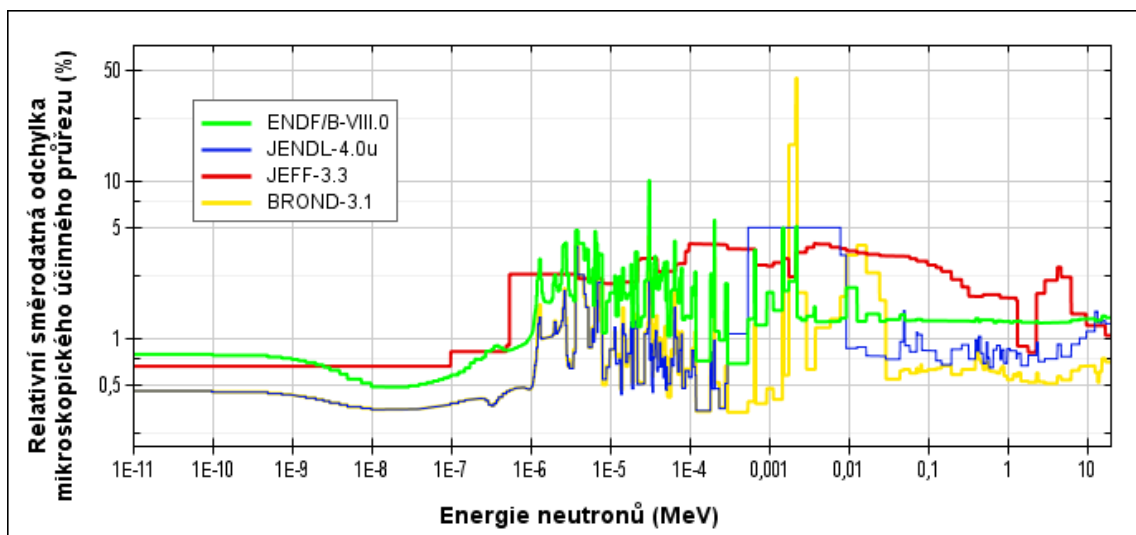


Obrázek 1.4.: Graf zhodnocených mikroskopických účinných průřezů pro $^{235}\text{U}(n,f)$ a $^{238}\text{U}(n,f)$ (data z knihovny ENDF/B-VIII.0 a vykresleno pomocí softwaru NEA JANIS)



Obrázek 1.5.: Graf relativních směrodatných odchylek mikroskopických účinných průřezů pro $^{235}\text{U}(n,f)$ a $^{238}\text{U}(n,f)$ (data z knihovny ENDF/B-VIII.0 a vykresleno pomocí softwaru NEA JANIS)

Ve většině knihoven jaderných dat (včetně ENDF/B-VIII.0) jsou nejistoty dat mikroskopických účinných průřezů ukládány do korelačních a kovariančních matic. [16] Než budou zprostředkovány tyto matice pro výše zmíněné reakce, je třeba objasnit, co se v těchto maticích nachází a tedy co to je korelace a kovariance. Korelace je statistická vlastnost vyjadřující vztah mezi dvěma veličinami (nebo procesy), respektive vyjadřuje, jak moc změna jedné veličiny ovlivňuje změnu té druhé. V korelačních maticích je pak možné najít míru korelace (korelační koeficient), která nabývá hodnot z intervalu od -1 do 1 a říká, jak moc lineárně na sobě dané veličiny závisí. V případě hodnoty 1 resp. -1 jde o úplnou přímou resp. nepřímou lineární závislost. Pro hodnoty kolem 0 pak téměř není možné vzájemný vztah, tedy korelaci, vyčíst. [17]



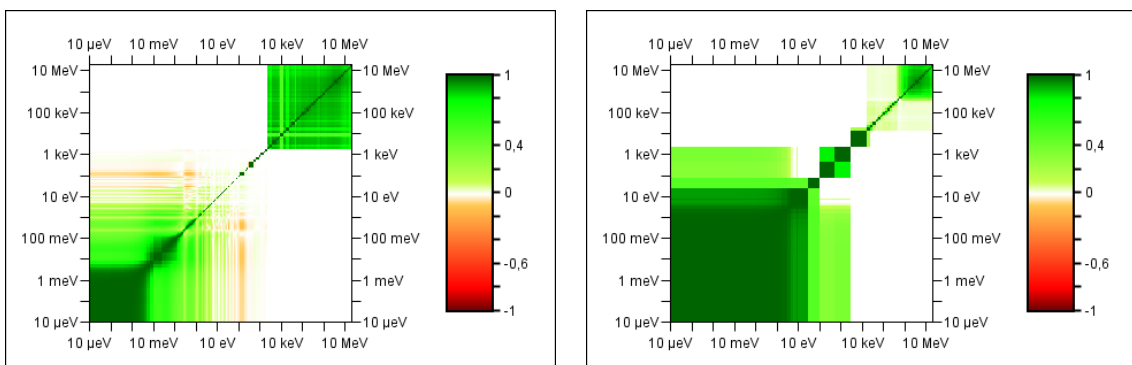
Obrázek 1.6.: Porovnání relativních směrodatných odchylek mikroskopických účinných průřezů pro reakci $^{235}\text{U}(n,f)$ z různých knihoven zhodnocených jaderných dat (vykresleno pomocí softwaru NEA JANIS)

Zatímco korelační matice obsahují relativní informace, v kovariančních maticích jsou uváděny hodnoty velice podobně avšak již absolutně. Jsou v nich tedy k nalezení hodnoty v jednotkách, které vyplývají z jednotek uváděných dat. Neexistuje však jednoduchá interpretace toho, co hodnoty v kovariančních maticích přesně znamenají, a pro jejich úplné pochopení je potřebná hlubší statistická analýza dané problematiky. Na grafech 1.7 a 1.8 jsou vykresleny korelační a kovarianční matice pro mikroskopické účinné průřezy již zmíněných reakcí $^{235}\text{U}(n,f)$ a $^{238}\text{U}(n,f)$. [18]

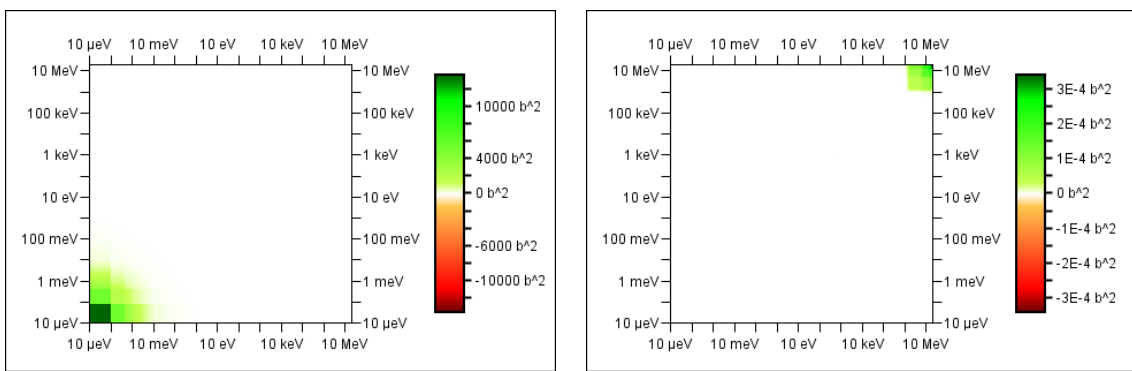
Na první pohled to vypadá, že kovarianční matice jsou z velké části prázdné, pravda je však taková, že hodnoty v bílé části matic jsou tak malé, že nejsou barevně výrazné. V tabulce 1.1 jsou tedy vybrané hodnoty z diagonál kovariančních matic vypsány pro větší přehlednost číselně. Jak bude možné vidět v podkapitole 1.4 nebo dále v kapitole 2, kovarianční matice jsou pro výpočetní programy, které jsou určeny k výpočtům a simulacím jaderných reakcí a transportu částic, nejdůležitějším výstupem co se týče nejistoty dat.

Tabulka 1.1.: Vybrané hodnoty z diagonály kovariančních matic mikroskopických účinných průřezů $^{235}\text{U}(n,f)$ a $^{238}\text{U}(n,f)$, jednotkou dat je kvadrát barnu (data z knihovny ENDF/B-VIII.0 a prohlížena pomocí softwaru NEA JANIS).

Energie n^0	100 μeV	10 meV	1 eV	1,5 keV	1,1 MeV	10 MeV
^{235}U	1,36E4	2,79E1	4,24E-1	1,33E-2	2,31E-4	5,43E-4
^{238}U	1,79E-9	8,95E-12	1,13E-13	8,57E-8	9,80E-8	1,81E-4



Obrázek 1.7.: Korelační matice pro mikroskopické účinné průřezy reakcí $^{235}\text{U}(n,f)$ (vlevo) a $^{238}\text{U}(n,f)$ (vpravo) (data z knihovny ENDF/B-VIII.0 a vykresleno pomocí softwaru NEA JANIS).



Obrázek 1.8.: Kovarianční matice pro mikroskopické účinné průřezy reakcí $^{235}\text{U}(n,f)$ (vlevo) a $^{238}\text{U}(n,f)$ (vpravo) (data z knihovny ENDF/B-VIII.0 a vykresleno pomocí softwaru NEA JANIS).

1.4. Příklad práce s nejistotami z kovariančních matic

V této podkapitole bude na příkladu výpočtu jednogrupového účinného průřezu ukázána jedna z možností práce s nejistotami s použitím kovariančních matic. Zde konkrétně je toto provedeno pro knihovnu balíku SCALE, což je balík výpočetních kódů důležitý pro tuto práci a blíže je popsán v další kapitole. Kovarianční matice ani účinné průřezy nejsou v knihovnách uloženy spojitě (jako funkce), nýbrž bodově. Pro výpočet jednogrupového účinného průřezu σ jsou zde použity buďto 56 nebo 252 grupové struktury dat σ^g . Jednogrupový účinný průřez je pak počítán pomocí rovnice:

$$\sigma = \sum_g \sigma^g w^g,$$

kde w^g je váhové spektrum pro lehkovodní reaktory, tedy funkce vyjadřující poměr mezi různými energiemi neutronů v lehkovodních reaktorech.

Dále jsou ukázány dvě hlavní možnosti vyjadřování nejistot z kovariančních matic. První způsob je nazván „s korelací“ a jedná se nejspíše o nejpreciznější způsob výpočtu. Zde je rozptyl pro jednogrupový mikroskopický účinný průřez odhadován následně:

$$var(\sigma) = \sum_{g'} \sum_g w^{g'} cov^{gg'}(\sigma) w^g,$$

kde $cov^{gg'}(\sigma)$ je hodnota z kovarianční matice z řádku g a sloupce g' . Při druhé možnosti výpočtu, která je nazvána „bez korelace“, se rozptyl počítá podle vzorce:

$$var(\sigma) = \sum_{g'} \sum_g w^{g'} var(\sigma^g) w^g,$$

kde $var(\sigma^g)$ jsou diagonální prvky kovarianční matice (z řádku g). Z porovnání těchto dvou přístupů je možné odhadnout důležitost energetické korelace, která většinou bývá důležitá s vyššími nejistotami [16]. V tabulce 1.2 se vyskytují vypočtené hodnoty účinných průřezů a jejich nejistot pro vybrané nuklidy, které jsou důležité pro neutronovou fyziku lehkodvodních reaktorů.

Tabulka 1.2.: Tabulka jednogrupových mikroskopických účinných průřezů a jejich nejistot pro vybrané důležité nuklidy lehkodvodních reaktorů. [16]

Nuklid	Typ reakce	Účinný průřez [barn]	Nejistota „s korelací“ [%]	Nejistota „bez korelace“ [%]
²³⁵ U	(n,f)	37,3	0,32	0,10
	(n,γ)	8,86	1,26	0,48
²³⁸ U	(n,f)	0,127	0,52	0,29
	(n,γ)	2,12	1,17	0,72
¹⁰ B	(n,α)	250	0,08	0,02
¹ H	rozptyl	12,1	0,20	0,04
	(n,γ)	0,0216	1,07	0,29
¹⁶ O	rozptyl	3,41	1,91	0,42
	(n,γ)	0,0000762	32,22	10,70

2. Balík výpočetních kódů SCALE

Balík SCALE (Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation, Balík výpočetních kódů pro analýzu a licenční hodnocení reaktorových systémů) je jak už z jeho názvu vyplývá modulární kódový systém pro standardizované počítačové analýzy určené pro licenční hodnocení. Je to sada simulačních a modelovacích kódů určených pro návrh jaderných zařízení a jejich bezpečnostní analýzu. Jeho první verze byla vydána v roce 1980 Národními laboratoři Oak Ridge (ORNL) a již od svého vydání byl SCALE používán regulačními, licenčními i výzkumnými institucemi. SCALE byl několikrát aktualizován a do balíku byly přidávány další kódy.

SCALE poskytuje kódy pro výpočty kritičnosti, fyziky jaderných reaktorů, radiačního stínění, aktivační analýzy, radioaktivního rozpadu nebo citlivostní analýzy a analýzy nejistot. SCALE využívá jak deterministické tak stochastické Monte Carlo transportní kódy. Součástí balíku SCALE jsou knihovny jaderných dat a také nástroje pro zpracování problémů vícegrupové nebo spojitě neutroniky (z energetického úhlu pohledu). Mezi další nástroje patří kódy pro výpočty s neutrony i gama zářením, dále kódy určené pro definování materiálů a další pomocné kódy. Pro uživatele je také vytvořeno uživatelské rozhraní Fulcrum, které zjednodušuje tvorbu vstupních souborů a je možné jeho prostřednictvím zobrazovat výsledky výpočtů a to i v grafické podobě. V tabulce 2.1 jsou prezentovány názvy jednotlivých kódů a také oblast jejich zájmu. [19]

Tabulka 2.1.: Základní přehled kódů z balíku SCALE a oblast jejich zájmu [19]

Oblast zájmu	Název kódu (knihovny)
Výpočty kritičnosti	CSAS5(6), STARBUCS, Sourcerer
Reaktorová fyzika	TRITON, Polaris
Radiační stínění	MAVRIC
Aktivační analýza, vyhořívání a rozpad	ORIGEN, ORIGAMI
Citlivostní analýza a analýza nejistot	TSUNAMI, Sampler
Specifikace materiálů a zpracování účinných průřezů	XSPProc, MCDancoff
Deterministické transportní kódy	XSDRNPM, NEWT, Denovo
Monte Carlo transportní kódy	KENO-V(VI), Monaco

2.1. Přehled kódů důležitých pro tuto práci

V této práci byly použity především tři výpočetní kódy. Pro počáteční výpočty, především pro určování koeficientu násobení, byl použit kód NEWT. Následně pro citlivostní analýzu a pro analýzu nejistot byly využity kódy TSUNAMI a Sampler.

2.1.1. NEWT

Pod zkratkou NEWT (New ESC-based Weighting Transport code) je v balíku SCALE možné najít vícegrupový transportní výpočetní kód, který je díky vyspělému rozdělávání geometrie do mříží používán pro 2-D neutronové transportní výpočty modelů s libovolnými geometriemi. Právě rozdělení modelu do mříže složené s libovolných mnohoúhelníku umožňuje výpočty i pro modely se zakřivenými nebo nepravidelnými povrchy. NEWT je určen pro výpočty neutronového toku, koeficientů násobení, geometrického a materiálového faktoru (buckling) nebo pro přípravu vážených mikroskopických účinných průřezů pro další výpočty.

Při používání balíku SCALE se často nepoužívá jen jednotlivých kódů, ale používají se dohromady. NEWT může být spouštěn například s kódem ORIGEN pro výpočty vyhořívání složitějších 2-D geometrií, nebo například s kódem TSUNAMI-2D, který je určený pro 2-D citlivostní analýzu a analýzu nejistot (viz dále). Předchůdcem kódu NEWT byl výpočetní kód CENTAUR.

Pro popis transportu neutronů je nutné řešit Boltzmannovu transportní rovnici popisující rovnováhu neutronů v systému:

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \sigma_t(\vec{r}, E) \cdot \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E),$$

kde $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ je úhlová hustota toku neutronů na pozici \vec{r} , ve směru $\vec{\Omega}$ a s energií E , $\sigma_t(\vec{r}, E)$ je celkový mikroskopický účinný průřez na pozici \vec{r} pro energii E . Q značí zdrojový člen, který je buďto ze štěpení, z rozptylu a nebo vnější neutronový zdroj.

Tuto rovnici pak řeší výpočetní kódy, které mohou být stochastické (s použitím metody Monte Carlo) nebo deterministické (přímé numerické výpočty). Výhodou stochastických metod je možnost výpočtu komplexních a složitých geometrií a získávání integrálních dat. Při potřebě získávat diferenciální data, mezi které patří například hustota toku neutronů v závislosti na prostoru a energii neutronů, však mohou být stochastické výpočty neefektivní, zdoluhavé a vedoucí k značným nepřesnostem. Pro výpočty diferenciálních dat jsou výhodnější deterministické kódy, mezi které patří i NEWT. Jak už bylo psáno dříve, kód NEWT se vypořádává se složitějšími geometriemi vhodným rozděláváním geometrie celého modelu do mříží. [19]

2.1.2. TSUNAMI

Modul TSUNAMI (Tools for Sensitivity and Uncertainty Analysis Methodology Implementation, Kód z balíku SCALE určený pro implementaci citlivostní analýzy a analýzy nejistot) zajišťuje pro bezpečnost reaktorů důležité výpočty citlivostí (vzhledem k různým parametrům - např. materiálové složení) a nejistot (vzhledem k nejistotám jaderných dat) koeficientu násobení. Ve spolupráci s dalšími kódy je možné provádět analýzu pro 1-D, 2-D i 3-D geometrie. [19]

Než bude popsáno fungování samotného TSUNAMI-2D je vhodné definovat citlivostní koeficient efektivního koeficientu násobení k_{eff} vzhledem k makroskopickému účinnému průřezu Σ_j^n , kde j značí příslušnou energetickou grupu a n příslušný nuklid. Citlivostní koeficient je dán vztahem:

$$S_{k,n} = \frac{\delta k_{eff}/k_{eff}}{\delta \Sigma_j^n / \Sigma_j^n},$$

kde se sčítá přes všechny energetické grupy j . Vzhledem k tomu, že mikroskopické účinné průřezy jsou brány pro jednotlivé energetické grupy konstantní, závisí změna makroskopického účinného průřezu pouze na změně atomové hustoty pro daný nuklid. [20]

Jelikož je TSUNAMI založeno na poruchové teorii prvního řádu, je po spuštění sekvence TSUNAMI-2D na začátku proveden pomocí kódu NEWT první přímý („forward“) výpočet. Poté je kód NEWT spuštěn znovu pro výpočet přidruženého („adjoint“) řešení neutronového toku. Následně je spuštěn modul SAMS (Sensitivity Analysis Module for SCALE, Modul pro citlivostní analýzu s balíkem SCALE), který oba výpočty porovná a spočítá citlivostní koeficienty pro jednotlivá jádra a nejistoty efektivního koeficientu násobení plynoucí z nejistot jaderných dat.

Metodika TSUNAMI však nemusí být pro všechny typy aplikací adekvátní a efektivní. Jedná se především o ty případy, kdy jsou pro výpočet výrazné i efekty druhého řádu (ne jen prvního), nebo v případech kdy výpočetní kód není schopen provést přidružený výpočet (to však není případ NEWT). Pro kontrolu správnosti výpočtu citlivostních koeficientů pomocí TSUNAMI-2D je možné spustit také sekvenci TSUNAMI-2DC, ta spouští NEWT pouze jednou pro prvotní výpočet a modul SAMS nespouští vůbec. Jeho použití pak bude vysvětleno v praktické části této práce. [19]

2.1.3. Sampler

Další možností citlivostní analýzy a analýzy nejistot pomocí balíku SCALE je použití kódu Sampler. Ten je založen na stochastické (Monte Carlo) metodě náhodného vzorkování vstupních parametrů a následné statistické analýze výstupních dat. Pro analýzu je typicky vhodné provést alespoň stovky výpočtů.

Vstupní parametry, které je možno náhodně vzorkovat, je možné rozdělit do tří kategorií. Za prvé jsou to jaderná data určená pro transportní výpočty, především tedy mikroskopické účinné průřezy, které jsou vzorkovány podle funkce hustoty pravděpodobnosti. Ta vychází z kovariančních dat knihovny jaderných dat SCALE. Druhou kategorií jsou data ohledně jaderné přeměny a vyhořívání, například data o produktech ze štěpení. Do třetí kategorie spadají parametry modelovaného systému, jako například atomové hustoty, teploty nebo rozměry.

V porovnání s kódem TSUNAMI, který je založen na poruchové teorii 1. řádu, má Sampler řadu výhod. Mezi hlavní přednosti patří potřeba jen prvního přímého řešení a ne druhotného přidruženého výpočtu. Na druhou stranu na rozdíl od TSUNAMI, Sampler pro každý výpočet vzorkuje a mění všechny požadované parametry najednou a ze statistické analýzy všech výpočtů pak není schopen určit citlivostní koeficienty pro jednotlivé nuklidy, ale jen celkovou nejistotu založenou na daných parametrech. [19]

2.2. Knihovna jaderných dat SCALE

Součástí balíku SCALE je kromě samotných výpočetních kódů také vlastní knihovna mikroskopických účinných průřezů pro výpočty transportních kódů. Pro analýzu nejistot a citlivostní analýzu SCALE poskytuje také knihovnu kovariančních dat, která obsahuje nejistoty mikroskopických účinných průřezů a korelace mezi nimi. Obě předešlé knihovny vycházejí především z knihovny jaderných dat ENDF/B-VII. Pro výpočty s kódy, kde je nutné brát v potaz také jadernou přeměnu, SCALE obsahuje dodatečné knihovny s daty ohledně rozpadu jader, štěpných produktů nebo rozpadových gama spekter.

2.2.1. Knihovna mikroskopických účinných průřezů

Tuto knihovnu je možné rozdělit na dvě části. Jedna obsahuje vícegrupové diskrétní hodnoty mikroskopických účinných průřezů pro dané energetické intervaly, druhá pak obsahuje spojitě průběhy mikroskopických účinných průřezů. Obě tyto části jsou zpracovány kódem AMPX. Knihovny jsou dostupné pro neutronové a neutron-fotonové transportní výpočty. Zatímco vícegrupové knihovny jsou používány jak deterministickými transportními kódy (např. NEWT nebo Denovo) tak i stochastickými Monte Carlo transportními kódy (např. KENO nebo Monaco), spojitě knihovny jsou používány pouze stochastickými transportními kódy.

Všechna data v knihovnách pro verzi SCALE 6.2 a vyšší plynou z knihoven zhodnocených jaderných dat ENDF/B-VII.0 nebo ENDF/B-VII.1. Knihovna obsahuje data pro 417 nuklidů, což bez větších problémů pokrývá oblast zájmu pro reaktorové výpočty. Přesto se však při aplikacích najdou izotopy, jejichž data v knihovnách k dispozici nejsou. Příkladem je izotop kyslíku ^{18}O s přirozeným výskytem 0,2 %. Při

výpočtech s tímto izotopem SCALE vykazuje varovnou hlášku a nuklid bývá z výpočtů vynechán. Jelikož má tento izotop poměrně malý přirozený výskyt a stejně jako další izotopy kyslíku i poměrně malé mikroskopické účinné průřezy vzhledem k jiným nuklidům ve výpočtu, není jeho zanedbání zásadní problém.

Při výpočtech s knihovnamí spojených dat je možné je používat přímo bez úprav a jsou zpracovávány až transportními kódy. Vícegrupové knihovny jsou však uloženy ve tvaru nezávislém na dané počítané problematice, a proto se často upravují modulem XSProc například z důvodu samostínění.

Vícegrupové knihovny mají více struktur. Pro jemnější výpočty se používají 238 a 252 grupové struktury. Struktura s 238 energetickými grupami je starší a používá se především pro výpočty kritičnosti. Struktura s 252 energetickými grupami je novější, lépe popisuje oblast rezonancí a používá se pro bezpečnostní výpočty a pro výpočty reaktorové fyziky. Data k o něco hrubějším výpočtům poskytuje 56 grupová knihovna, která byla odvozena z 252 grupové struktury. Její použití je ve srovnání s 252 grupovou strukturou efektivnější a rychlejší a výsledky bývají i tak dostatečně přesné. Z 252 grupové struktury byla odvozena také testovací 8 grupová struktura používaná pro testování kódů a pro ověřování jejich reprodukovatelnosti. [19]

2.2.2. Knihovna kovariančních dat

Část dat kovarianční knihovny (asi pro 187 nuklidů) pochází z ENDF/B-VII.I, zdrojem zbytku dat asi pro 215 nuklidů je starší knihovna ENDF/B-VII.0. Oproti předchozím verzím SCALE je dnes poskytována knihovna kovariančních dat v 56 a 252 grupových strukturách, které jsou doporučovány pro všechny aplikace, starší 44 grupová struktura je pro kompatibilitu stále součástí knihovny SCALE, nedoporučuje se však již dále používat, protože je založena na starším způsobu zhodnocování nejistot jaderných dat.

Data, která poskytuje knihovna ENDF/B jsou považována jako velmi důvěryhodné („high-fidelity“). Tato data však nepokrývají všechny potřebné izotopy, proto byl vytvořen společný projekt za účelem tyto mezery v datech pokrýt. Data pocházející z tohoto projektu se nazývají málo důvěryhodné („low-fidelity“) a byla vytvořena institucemi: ORNL, Národními laboratořemi Brookhaven (BNL) a Národními laboratořemi Los Alamos (LANL). [21] [19]

Kovarianční data tří důležitých nuklidů pro reaktorové výpočty ^1H , ^{235}U a ^{239}Pu byla podrobena testům na modelech se známými předpokládanými nejistotami na efektivním koeficientu násobení k_{eff} . Výsledky však byly velice neuspokojivé. Střední hodnota nejistoty pro ^{235}U byla více než dvakrát větší, pro ^1H dokonce pětkrát větší, než bylo očekáváno. Proto byla kovarianční data pro tyto dva izotopy aktualizována a po předložení skupině ENDF/B přidána do databáze NNDC. Pro izotop ^{239}Pu byla zase vypočítána nejistota pro nízkoenergetické grupy nulová, ačkoliv by podle předpokladu měla mít hodnotu kolem 0,18 %. I zde poté došlo k aktualizaci kovariančních dat. [21]

3. Palivové soubory tlakovodních reaktorů VVER-1000

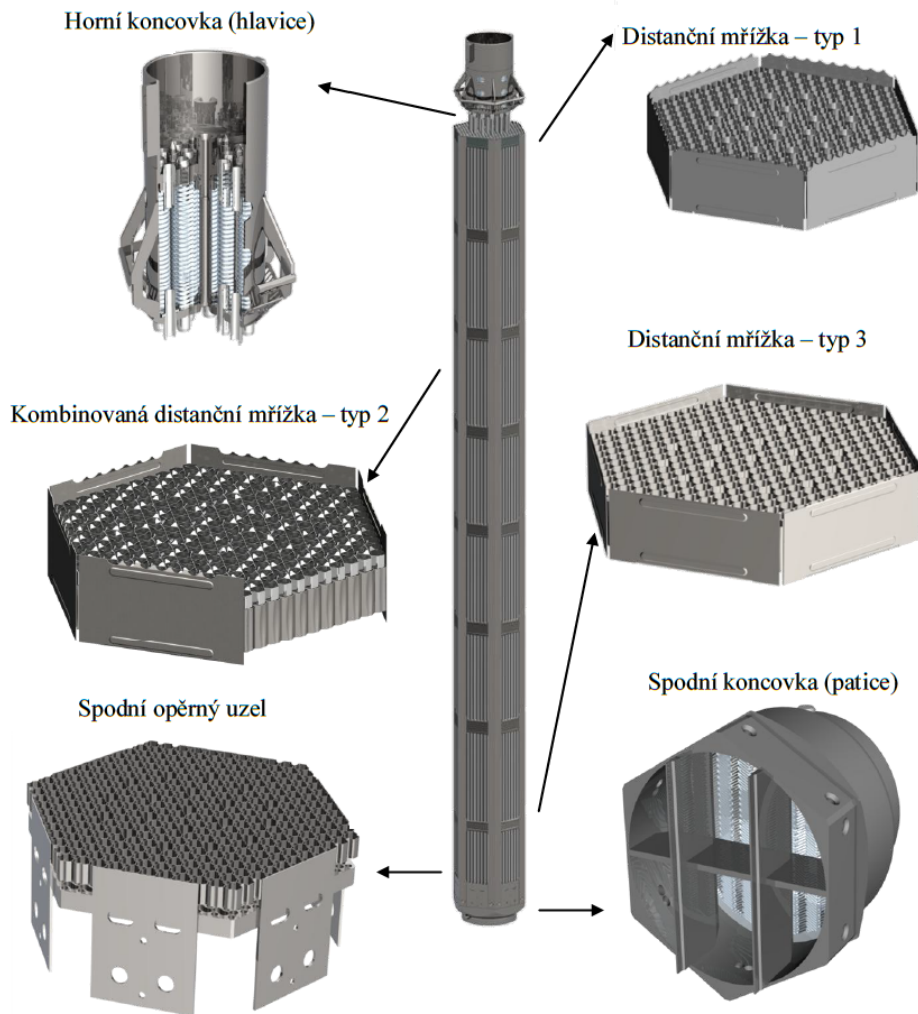
Tendence při vývoji jaderných reaktorů v 70. a 80. letech 20. století, které směřovaly k zvyšování jednotkového výkonu, daly vzniknout novému tlakovodního reaktoru východní koncepce typu VVER-1000 s tepelným výkonem 3000 MWt a tedy přibližně 1000 MWe. Na českém území začala stavba dvou reaktorů tohoto typu na konci 90. let 20. století. Během výstavby Elektrárny Temelín (ETE) převzala stavbu americká firma Westinghouse. V projektu poté došlo k celé řadě úprav, aby stavba lépe odpovídala západním normám a zvyklostem. Ze stejného důvodu bylo při první závazce použito palivo firmy Westinghouse typu VVANTAGE-6. Desetiletý kontrakt na dodávky paliva však v roce 2010 nebyl obnoven. Mezi důvody, které k tomu přispěly může být celá řada problémů s tímto palivem (prohýbaní a nedosedání klastrů). Do elektrárny tedy od roku 2010 dodává palivo ruská společnost TVEL. Zprvu se používalo palivo typu TVSA-T, nicméně při odstavování prvního bloku během roku 2014 došlo k potížím s neúplným zasunutím regulačních orgánů, a proto došlo k inovaci na palivo typu TVSA-T.mod.1 [22]. Z hlediska neutroniky se však stále jedná o stejné palivo. Od roku 2016 na druhém bloku probíhá postupná (po čtvrtinách) záměna na palivo typu TVSA-T.mod.2, kde už je možné sledovat změny v neutronice, termohydraulice, mechanice i termomechanice [23].

3.1. Konstrukce palivových souborů

V této kapitole je popsána konstrukce staršího typu palivového souboru TVSA-T.mod.1, který se v současnosti používá na prvním bloku ETE. Aktuálnější by byl popis konstrukce palivového souboru typu TVSA-T.mod.2, nicméně z důvodu určitého stupně citlivosti oficiálních dokumentů a nedostatku jiných zdrojů informací ohledně tohoto druhu paliva je od jeho popisu opuštěno.

Palivový soubor TVSA-T.mod.1 má šestiúhelníkový tvar a je 4570 mm dlouhý a 235 mm široký. Uvnitř něj se nachází 312 palivových proutků, 18 vodících a jedna centrální trubka. Dohromady soubor obsahuje 331 trubek a tedy jedna strana palivového šestiúhelníku odpovídá 11 trubkám. Palivový soubor je po celé výšce vyztužen úhelníky, které jsou svařeny s distančními mřížkami. Díky tomu je celá konstrukce daleko pevnější a během pětiletého provozu dochází jen k minimálnímu prohnutí, což zabezpečuje bezchybovou pohybu řídicích tyčí. Tato zpevněná konstrukce má však také své nevýhody jako například omezení příčného toku chladiva aktivní zónou nebo stínění neutronů. V palivovém souboru se nachází celkem osm distančních

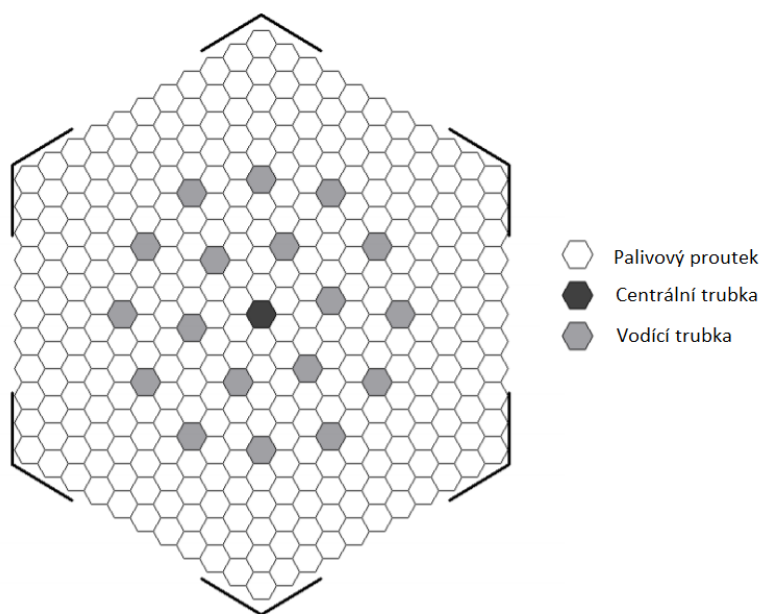
mřížek třech různých typů (jedna spodní, jedna vrchní a šest kombinovaných), které udržují palivové proutky na svých pozicích. Na spodní straně palivového souboru se nachází spodní koncovka (patice). Ta obsahuje debris filtr zabraňující vstupu částic větších než 2 mm do palivového souboru. Patice je spojena s úhelníky a ty jsou pak spojeny se spodním opěrným uzlem s tlumící mřížkou, která zabraňuje vibračnímu namáhání paliva [24][25]. Na vrchní straně je pak připevněna horní koncovka (hlavice). Ta se stejně jako patice podílí na plynulém odvodu respektive přívodu chladiva z a do palivového souboru. Obsahuje také pružinovou soustavu, distanční mříž a spojovací prvky [26]. Všechny tyto popsané části palivového souboru je možné vidět na obrázku 3.1.



Obrázek 3.1.: Palivový soubor TVSA-T.mod.1 a jeho konstrukční části [26]

Z hlediska neutronové analýzy je důležité popsat také palivové proutky a jejich rozložení v palivovém souboru. Palivový proutek je dlouhá trubka, která má uvnitř palivové pelety z oxidu uranitého UO_2 . Některé pelety obsahují navíc rozptýlenou směs oxidu gadolinia Gd_2O_3 jakožto vyhořívající absorbátor. Ten při skladování snižuje reaktivitu paliva a kompenzuje pak v průběhu kampaně úbytek paliva při jeho vyhořívání. Uvnitř pelet je úzká dutina (centrální otvor) vyplněná heliem. Helium

o tlaku 2 MPa se nachází také mezi peletou a pokrytím proutku, kde zlepšuje přestup tepla a díky svému tlaku a tedy menšímu rozdílu tlaků uvnitř a vně proutku přispívá k menšímu namáhání palivového pokrytí. To je z důvodu větší odolnosti vyrobeno ze speciální zirkoniové slitiny. Zirkonium má navíc velmi nízkou parazitní absorpci neutronů. Palivové proutky v souboru jsou od sebe vzdálené s určitou konstantní roztečí. Mezi nimi proudí chladivo v podobě lehké vody H_2O , která má zároveň roli moderátoru [24]. Do lehké vody bývá z důvodu regulace přidávána také kyselina boritá H_3BO_3 . Rozměry a další charakteristiky palivových proutků se nachází v tabulce 3.1. Jak již bylo napsáno výše, v souboru je umístěno 312 palivových proutků a 18 + 1 trubek (vodící + centrální). Jejich přesné rozložení v souboru je možné sledovat na obrázku 3.2.



Obrázek 3.2.: Rozložení palivových proutků v souboru - příčný řez [27]

Hlavním rozdílem novější paliva TVSA-T.mod.2. oproti staršímu TVSA-T.mod.1 je absence centrálního otvoru palivových pelet a jejich větší poloměr. Zároveň má novější palivo tenčí pokrytí a rozdílnou délku blanketů, tedy částí palivových proutků na horním a dolním okraji, které obsahují přírodní uran.

Tabulka 3.1.: Technické parametry palivových proutků paliva typu TVSA-T.mod.1 používané v ETE. [24][26]

Délka palivového proutku	3915 mm
Rozteč palivových proutků	12,75 mm
Vnější průměr palivového proutku	9,1 mm
Vnější průměr palivové pelety	7,6 mm
Průměr centrálního otvoru	1,2 mm
Délka pelety	9 - 12 mm
Tloušťka pokrytí	0,65 mm
Hustota pelety	10,4 až 10,7 g/cm ³
Materiál pokrytí	Slitina Zr-1%Nb

4. Příprava reprezentativního modelu palivových souborů a vstupních souborů pro výpočty s nástroji SCALE

4.1. Reprezentativní model palivových souborů

Na tvorbu modelu palivového souboru pro výpočty s kódy NEWT potažmo TSUNAMI-2D a Sampler je kladeno několik požadavků. Jelikož NEWT je transportní kód, který pracuje ve dvourozměrném prostoru, je nutné aby i model souboru byl ve 2-D. Jako model je tedy volen příčný průřez palivovým souborem, který má navíc z důvodu zanedbání osy v axiálním směru nekonečnou délku.

Pro návrh modelu je nutné definovat také vhodnou okrajovou podmínku v radiálním směru. Jelikož za palivovým souborem (pokud není u kraje reaktoru) obvykle následuje další palivový soubor, bylo by chybné předpokládat jen únik neutronů z palivového souboru. Okraje modelu jsou proto nastaveny zrcadlově, což znamená, že neutron, který se dostane na okraj modelu, je zrcadlově odražen zpět do modelu, jako by přicházel z palivového souboru za daným okrajem.

Model ani výpočty se nemusí úplně podobat reálnému palivovému souboru, nýbrž jde především o demonstrační výpočty koeficientu násobení a jeho citlivostní analýzu a analýzu nejistot. Palivový soubor je, jak již bylo popsáno, konstrukčně poměrně složitý. Proto jsou v modelu zanedbány například distanční mřížky nebo výstužné úhelníky. Geometrie palivového souboru je zjednodušena také s ohledem na zanedbatelný vliv helia na neutronové vlastnosti. Objem palivové pelety je tedy zvětšen na úkor centrálního otvoru a mezery mezi palivovou peletou a palivovým pokrytím. Úměrně tomu je snížena hustota UO_2 tak, aby zůstalo celkové množství štěpného materiálu konstantní. Dále je v modelu jako moderátor uvažována jen čistá lehká voda bez přidání kyseliny borité.

Pro výpočty byly nakonec vytvořeny celkem tři odlišné modely palivových souborů, které byly používány při palivových kampaních na ETE. Jedná se o soubory s označením A40, P44G6 a P47E18. Z jejich označení je možné pozorovat, v čem se liší a jaké mají vlastnosti. První písmeno v označení říká zdali je soubor profilován, tedy jestli jsou po jeho okrajích palivové proutky s vyšším obohacením než ve zbytku souboru, nebo nikoliv. P je profilovaný palivový soubor a A je neprofilovaný palivový

soubor. Další dvojice čísel značí obohacení paliva. Písmeno a číslo na konci označení vyjadřuje rozmístění a počet proutků s vyhořívajícím absorbátorem Gd_2O_3 . Přesné složení jednotlivých palivových souborů lze vyčíst z tabulky 4.1 a rozložení palivových proutků v souboru je možné sledovat na obrázku 4.1. [28]

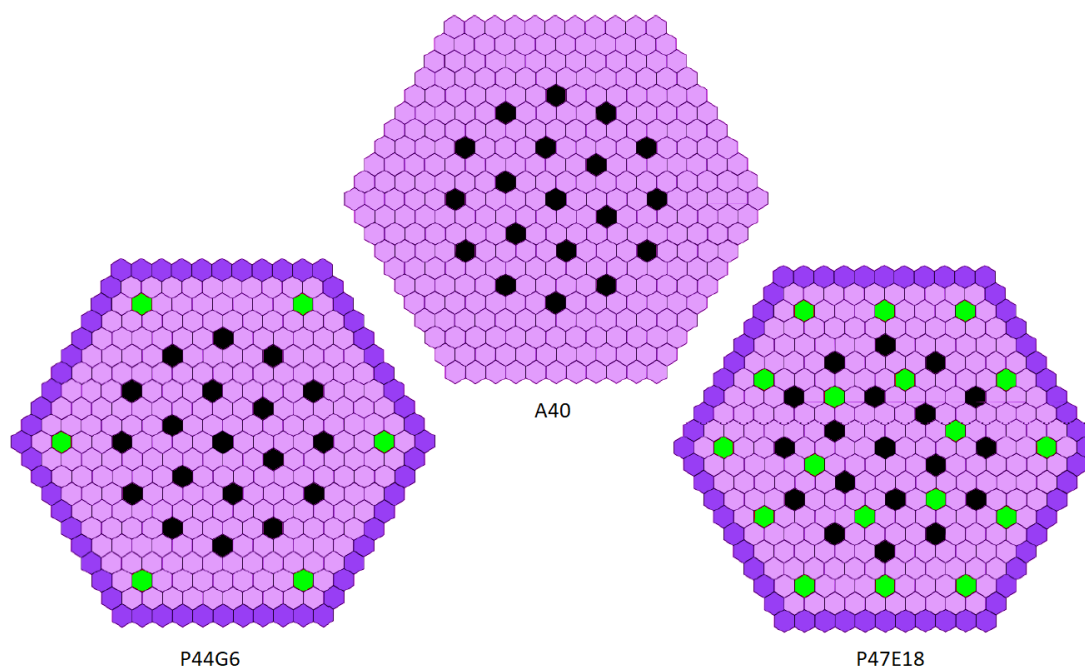
Z úhlu pohledu rozměrů palivových proutků, jejich rozteče apod. odpovídá model tabulce 3.1. Pro materiál pokrytí palivových proutků byla zvolena slitina E110 a pro centrální a vodící trubky byla zvolena slitina E635. Složení těchto slitin je shrnuto v tabulce 4.2.

Tabulka 4.1.: Popis vybraných palivových souborů A40, P44G6 a P47E18 pro tvorbu modelu. [28]

Označení souboru	Obhacení paliva		Proutky s Gd_2O_3
	Na periferii	Uvnitř	Počet / obohacení proutku / hmotnostní zastoupení Gd_2O_3
A40	4 %		bez vyhořívajícího absorbátoru
P44G6	4 %	4,4 %	6 / 3,6 % / 5 %
P47E18	4,4 %	4,7 %	18 / 3,6 % / 5 %

Tabulka 4.2.: Složení konstrukčních zirkoniových slitin E110 a E635 použitých v modelu palivového souboru. [29]

Název slitiny	Hmotnostní zlomky elementů slitiny
E110	Zr - 99 %, Nb - 1 %
E635	Zr - 94,6 %, Fe - 3 %, Sn - 1,2 %, Nb - 1 %, ...



Obrázek 4.1.: Rozložení palivových proutků ve vybraných modelech (černá - vodící a centrální trubka, zelená - palivový proutek s vyhořívajícím absorbátorem 5 % Gd_2O_3 , tmavě a světle fialová - palivové proutky s vyšším obohacením na periferii a nižším uvnitř) [28]

4.2. Vstupní soubory pro výpočty s kódy balíku SCALE

Vstupní soubor pro výpočet s kódem NEWT je stejně jako pro další kódy z balíku SCALE možné tvořit pomocí uživatelského rozhraní Fulcrum. Jeho použití usnadňuje dodržení syntaxe jednotlivých bloků vstupního souboru, dále je také nápomocný při definování materiálů použitých v modelu a jejich důležitých parametrů. V neposlední řadě Fulcrum kontroluje chyby ve vstupním souboru a to dříve než je vstup spuštěn výpočetním kódem.

Vytvořené vstupní soubory pro výpočet s kódem NEWT všech tří palivových souborů jsou k nalezení v příloze A. Jsou v nich definovány geometrie, materiálová složení a další parametry výpočtu, odpovídající popisu reprezentativního modelu v této kapitole. Pro výpočty jsou použity 56 i 252 grupové knihovny zhodnocených jaderných dat.

Pro výpočet s kódem TSUNAMI-2D byl vytvořen vstupní soubor, který se liší od toho pro výpočet s kódem NEWT jen v několika málo ohledech. Většina bloků vstupního souboru je tedy totožná se vstupem pro výpočet s kódem NEWT. Vzor vstupního souboru pro všechny palivové soubory, kde jsou vyznačeny části korespondující se vstupy pro kód NEWT šipkou (\rightarrow), je možné sledovat na následujícím obrázku.

```
=tsunami-2d parm=centrm
S/U analyza_NazebSouboru_56g
v7.1-56n

--> bloky "comp" a "celldata"
viz vstup pro NEWT

read sams
nohtml
makeimp
prtimp
coverx=56groupcov7.1
newt
end sams

read model
VVER-1000_A40

read parm
saveangflx=yes
nazim=3
npolar=2
end parm

--> bloky "materials", "geometry",
"array" a "bounds"
viz vstup pro NEWT

end model
end
```

Obrázek 4.2.: Vzor vstupního souboru pro výpočty s kódem TSUNAMI-2D.

Základní parametry pro výpočet kódem TSUNAMI, jako například volba knihovny kovariančních dat, jsou definovány v bloku „sams“. V bloku „parm“ jsou načteny parametry pro jednotlivé výpočty kódem NEWT. Další bloky věnující se definici použitých materiálů a samostínění („comp“ a „celldata“) jsou totožné se vstupem pro NEWT. Stejně tak jsou totožné bloky zabývající se geometrií modelu a hraniční podmínkou („materials“, „geometry“, „array“ a „bounds“).

Vstupní soubor pro analýzu nejistot plynoucích z jaderných dat kódem Sampler je opět rozšířený vstup pro NEWT, obdobně jako v případě pro kód TSUNAMI. Ukázka vstupu pro kterýkoliv z palivových souborů je prezentována na obrázku 4.3. V prvním bloku vstupního souboru („parameters“) jsou definovány parametry, kterými se Sampler řídí. Zde je postupně definováno, že bude počítáno 100 krát a tedy bude vytvořeno 100 vzorků s různými výslednými koeficienty násobení. Dále je definována použitá knihovna dat a nakonec to, že budou podle kovariančních matic náhodně

měněny pouze mikroskopické účinné průřezy a ne jiné parametry. Dále v bloku „case“ je určeno, které výpočty bude Sampler vytvářet. Do tohoto bloku je vložen kompletní vstupní soubor, který byl použit při výpočtu s kódem NEWT. Nakonec celého souboru je v bloku „response“ uvedeno, kterou hodnotu z výstupního souboru jednotlivých výpočtů pomocí kódu NEWT má následně Sampler zpracovávat. Zde je tedy načítána hodnota koeficientu násobení.

```

=sampler
read parameters
n_samples=100
library="v7.1-56n"
perturb_xs = yes
end parameters

read case [NazevSouboru]
sequence=
—> zde je vlozen kompletni vstupni soubor
    pouzity pri vypoctu pomoci kodu NEWT

end sequence
end case

read response [keff]
type = grep
regexp = "k-eff =[:space:]]+ :scale.number:"
regexp = ":scale.number:"
end response

end

```

Obrázek 4.3.: Vzor vstupního souboru pro analýzu nejistot s kódem Sampler.

Pro analýzu nejistoty koeficientu násobení palivových souborů vlivem nejistot jiných vstupních parametrů než mikroskopických účinných průřezů byly vytvořeny odlišné vstupní soubory. Jejich popis se nachází v podkapitole 5.4. a jejich přesná podoba na obrázcích v příloze A.

5. Výpočty charakteristik, citlivostí a nejistot palivových souborů reaktoru VVER-1000

Tato kapitola je výstupem praktické části této bakalářské práce. Jsou zde popsány citlivostní výpočty, výpočty nejistot a dalších parametrů vybraných palivových souborů A40, P44G6 a P47E18 používaných v reaktorech typu VVER-1000, jejich kartogramy, materiálová složení a rozměry viz obrázky 4.1 a tabulky 3.1, 4.1 a 4.2. Všechny výpočty byly provedeny pomocí kódů z balíku SCALE.

5.1. Výpočet základních charakteristik palivových souborů

Základní charakteristiky tří vybraných palivových souborů byly počítány pomocí 2-D transportního kódu NEWT. Při výpočtech není uvažováno vyhoření a všechny prezentované výsledky popisují stacionární stav s čerstvým palivem. V důsledku zrcadlové podmínky v radiálním směru neunikají z palivových souborů žádné neutrony a tedy je efektivní koeficient násobení k_{eff} roven tomu v nekonečném prostředí k_{∞} . Proto mezi nimi dále v této práci nebude rozlišováno a bude používán pouze souhrnný termín koeficient násobení. Kromě koeficientu násobení mohou být prostřednictvím kódu NEWT vypočteny také jednotlivé složky z rovnice čtyř součinitelů, tedy koeficient násobení rychlými neutrony, pravděpodobnost úniku rezonančnímu záchytu, koeficient využití tepelných neutronů a regenerační faktor. Hodnoty všech těchto parametrů vybraných palivových souborů je možné vyčíst z výstupních souborů výpočtu a jsou shrnuty v následujících tabulkách 5.1 a 5.2.

Tabulka 5.1.: Tabulka koeficientů násobení pro palivové soubory A40, P44G6 a P47E18 při výpočtu s kódem NEWT a 252 nebo 56 grupovou strukturou dat.

Název palivového souboru	Počet grup v knihovně	Koeficient násobení
A40	56	1,38412136
A40	252	1,38390652
P44G6	56	1,33878738
P44G6	252	1,33843133
P47E18	56	1,24239248
P47E18	252	1,24175519

Tabulka 5.2.: Tabulka jednotlivých parametrů z rovnice čtyř součinitelů pro palivové soubory A40, P44G6 a P47E18 při výpočtu s kódem NEWT a 252 nebo 56 grupovou strukturou dat.

Název souboru	Počet grup v knihovně	Koeficient násobení rychlými neutrony (ϵ)	Pravděpodobnost úniku rezonančnímu záchytu (p)	Koeficient využití tepelných neutronů (f)	Regenerační faktor (η)
A40	56	1,273175	0,616039	0,940109	1,877149
A40	252	1,273416	0,615823	0,940079	1,877224
P44G6	56	1,301947	0,607610	0,945412	1,790079
P44G6	252	1,302303	0,607296	0,945385	1,790089
P47E18	56	1,349178	0,598469	0,951923	1,616389
P47E18	252	1,349780	0,597949	0,951903	1,616277

V průběhu výpočtu kód NEWT provede celkem 11 iterací pro výpočet koeficientu násobení. Pokud by po těchto iteracích nedošlo ke konvergenci s požadovanou přesností, kód by přestal pracovat a vypsal by chybovou hlášku. Z výstupních souborů, kde jsou jednotlivé iterace dobře popsány však vyplývá, že už během páté iterace si je výsledek v porovnání s tím konečným rovný až do řádu 10^{-5} .

Co se týče samotných výsledných koeficientů násobení, lze z tabulky 5.1 vyčíst, že při použití 252 grupové struktury dat jsou oproti 56 grupové struktuře nižší, nicméně nikterak výrazně. Rozdíly jsou v řádu desítek pcm. Zároveň je možné pozorovat, že nejvyšší koeficient násobení vychází pro palivový soubor A40, ten má sice nejnížší obohacení, ale neobsahuje palivové proutky s vyhořívajícím absorbátorem. Naopak nejnížšího koeficientu násobení dosahuje palivový soubor P47E18, který má sice palivo se středním obohacením 4,58 % (palivové proutky s obohacením 4,4 % a 4,7 %), ale obsahuje také 18 palivových proutků s vyhořívajícím absorbátorem. Hodnota koeficientu násobení pro palivový soubor P44G6 se středním obohacením 4,31 % (palivové proutky s obohacením 4 % a 4,4 %) a šesti palivovými proutky s Gd_2O_3 se pohybuje mezi hodnotami pro oba předchozí.

Na hodnotách v tabulce 5.2 lze také pozorovat rozdílné vlastnosti jednotlivých souborů. Koeficient násobení rychlými neutrony (ϵ) je nejnížší pro soubor A40 a nejvyšší pro P47E18, je tedy patrné, že se postupně zvyšuje se zvyšujícím se obohacením paliva. Pravděpodobnost úniku rezonančnímu záchytu (p) i regenerační faktor (η) klesá se zvyšujícím se podílem palivových proutků s vyhořívajícím absorbátorem. Koeficient využití tepelných neutronů (f) je nejnížší pro soubor A40 a nejvyšší pro soubor P47E18. Na to může mít vliv jak rostoucí počet proutků s Gd_2O_3 , které přispívají k absorpci neutronů v palivu, ale také vyšší obohacením a tedy vyšším podíl ^{235}U , který má v oblasti tepelných neutronů vyšší mikroskopický účinný průřez pro absorpci než ^{238}U .

5.2. Analýza nejistot koeficientu násobení palivových souborů kódy TSUNAMI a Sampler

Jedním z hlavních úkolů této práce bylo provést analýzu nejistot koeficientu násobení plynoucí z jaderných pro vybrané palivové soubory reaktoru VVER-1000. K této analýze je možné přistoupit dvěma způsoby. První možností je použít kód TSUNAMI (v případě této práce konkrétně TSUNAMI-2D), který je založen na principu poruchové teorie prvního řádu a na dvou výpočtech (přímý výpočet hustoty toku neutronů a výpočet sdružených toků), které jsou následně porovnány modulem SAMS. Jeho fungování bylo nastíněno v 2. kapitole. Výstupem je pak celková nejistota koeficientu násobení způsobená jadernými daty a také relativní příspěvky k celkové nejistotě pocházející z jednotlivých reakcí na jádrech modelu.

Druhou možností analýzy nejistoty způsobné jadernými daty je výpočet pomocí kódu Sampler. Ten vytváří velké množství jednotlivých výpočtů s pozměněnými vstupními parametry. V tomto případě jsou podle kovariančních knihoven v každém výpočtu měněny mikroskopické účinné průřezy pro všechny reakce, které jsou v daném modelu uvažovány. Z jednoduché statistické analýzy množiny výsledků koeficientů násobení je pak možné určit celkovou nejistotu koeficientu násobení vzhledem k nejistotám zhodnocených jaderných dat.

5.2.1. Výsledky analýzy nejistot koeficientu násobení

V první řadě budou pro všechny tři vybrané palivové soubory prezentovány celkové nejistoty koeficientu násobení plynoucí z nejistot jaderných dat. Jejich hodnoty vypočtené kódy TSUNAMI-2D a Sampler jsou prezentovány v tabulkách 5.3 a 5.4.

Z tabulek výsledných hodnot vyplývá, že celková nejistota koeficientů násobení způsobná jadernými daty se pro vybrané palivové soubory pohybuje v rozmezí 0,51 % až 0,57 %. Při výpočtech pomocí kódu TSUNAMI-2D se hodnoty této nejistoty pro jednotlivé soubory příliš neliší, zatímco pro výpočty kódem Sampler již lze pozorovat v jejich hodnotách rozdíly. Stále to jsou však rozdíly malé v řádu desítek pcm. Příčinou pro rozdíly výsledků mezi těmito kódy může být buďto odlišná metoda výpočtu, nebo ze statistického úhlu pohledu malý počet jednotlivých výpočtů kódem Sampler, který by se musel pro přesnější analýzu zvětšit. Celkově je však možné říci, že shoda mezi oběma způsoby výpočtu je uspokojivá. V tabulce 5.4 jsou prezentovány také hodnoty koeficientu násobení bez perturbace, které vyjadřují hodnotu vypočteného koeficientu násobení bez pozměňování mikroskopických účinných průřezů. Tato hodnota se zdá být pro všechny palivové soubory nižší než střední vypočtená hodnota koeficientu násobení, nicméně odchylka mezi těmito dvěma hodnotami se pohybuje na úrovni desítek pcm.

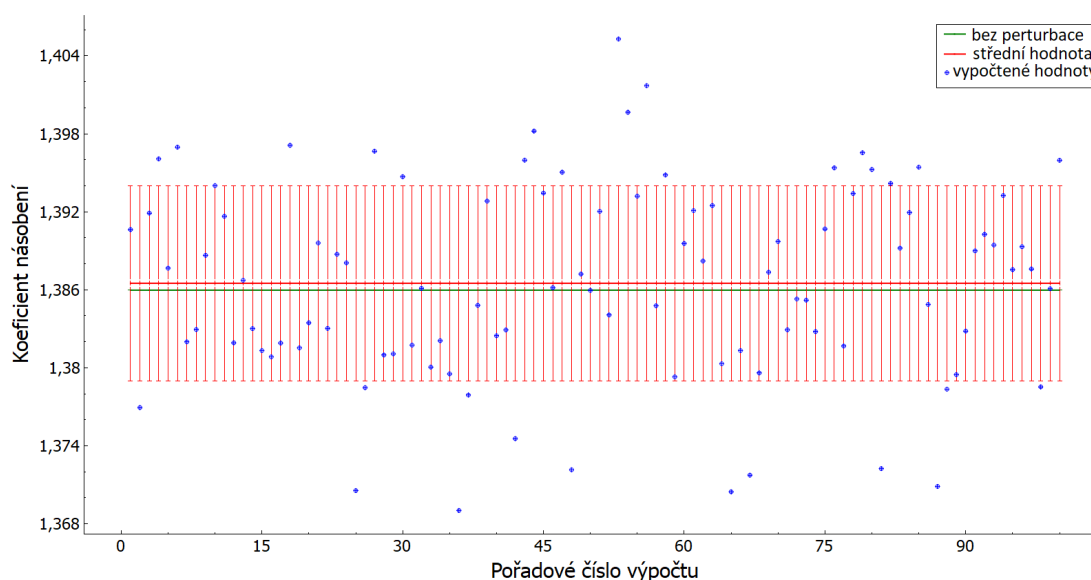
Tabulka 5.3.: Tabulka hodnot týkajících se nejistot koeficientu násobení plynoucí z jaderných dat z výpočtu kódem TSUNAMI-2D.

Název souboru	A40	P44G6	P47E18
Koeficient násobení z přímého výpočtu	1,38465	1,33924	1,24266
Směrodatná odchylka	0,00782	0,00749	0,00699
Nejistota koeficientu násobení způsobená jadernými daty	0,565 %	0,559 %	0,563 %

Tabulka 5.4.: Tabulka hodnot týkajících se nejistot koeficientu násobení plynoucí z jaderných dat z výpočtu kódem Sampler.

Název souboru	A40	P44G6	P47E18
Střední hodnota koeficientu násobení	1,38650	1,34175	1,24631
Směrodatná odchylka	0,00751	0,00708	0,00641
Nejistota koeficientu násobení způsobená jadernými daty	0,542 %	0,528 %	0,514 %
Koeficient násobení bez perturbace	1,38597	1,34124	1,24584
Odchylka střední hodnoty a hodnoty bez perturbace koeficientu násobení	0,0382 %	0,0380 %	0,0377 %

Pro prezentaci způsobu výpočtu kódem Sampler je na následujícím grafu 5.1 vykresleno všech 100 výpočtů koeficientu násobení pro palivový soubor A40 spolu se střední hodnotou koeficientu násobení a jeho hodnotou při výpočtu bez perturbace. Dále je vykreslena také směrodatná odchylka koeficientu násobení. Grafy pro další palivové soubory jsou k nalezení v příloze B.



Obrázek 5.1.: Graf výpočtu směrodatné odchylky koeficientu násobení palivového souboru A40 pomocí 100 vzorků výpočtu kódem Sampler. Je vykreslena hodnota koeficientu násobení bez perturbace a jeho střední hodnota spolu se směrodatnou odchylkou a jednotlivými vypočtenými hodnotami.

Na rozdíl od kódu Sampler, který je schopen ze statistické analýzy určit jen celkovou nejistotu koeficientu násobení způsobenou jadernými daty, kód TSUNAMI-2D ve svých výstupní souborem poskytuje i další informace týkající se nejistoty koeficientu násobení z důvodu nejistoty jaderných dat. Kód TSUNAMI-2D například díky analýze jednotlivých kovariančních matic prezentuje také relativní příspěvky k nejistotě plynoucí z jaderných dat jednotlivě pro všechny izotopy a reakce, ke kterým v modelu dochází. Prostřednictvím těchto výsledků je možné určit pro které izotopy a reakce na nich vznikají největší nejistoty koeficientu násobení. Ve výstupním souboru, který je možné sledovat na následujícím obrázku 5.2, jsou prezentovány vybrané nejvýznamnější reakce a nejistoty z nich plynoucí pro všechny palivové soubory.

kovarianční matice mezi reakcemi:		relativní příspěvky k celkové nejistotě koeficientu násobení plynoucí z jaderných dat:			
izotop a reakce	x	izotop a reakce	A40	P44G6	P47E18
u-235 nubar		u-235 nubar	3.4657E-01	3.4410E-01	3.3984E-01
u-238 (n,gama)		u-238 (n,gama)	3.1297E-01	2.9711E-01	2.7827E-01
u-235 chi		u-235 chi	1.5286E-01	1.6254E-01	1.8531E-01
u-235 (n,gama)		u-235 (n,gama)	1.8580E-01	1.6254E-01	1.6908E-01
u-238 (n,n')		u-238 (n,n')	1.0236E-01	1.1074E-01	1.3014E-01
u-235 štěpení		u-235 (n,gama)	1.0903E-01	1.1067E-01	1.1358E-01
u-235 štěpení		u-235 štěpení	8.4298E-02	9.0858E-02	1.0572E-01
gd-157 (n,gama)		gd-157 (n,gama)	-----	2.6858E-02	8.0032E-02
u-238 nubar		u-238 nubar	6.7741E-02	6.9723E-02	7.4790E-02
u-238 pružný		u-238 (n,gama)	4.2648E-02	4.1635E-02	4.0123E-02
h-1 (n,gama)		h-1 (n,gama)	5.0485E-02	4.5627E-02	3.9479E-02
gd-155 (n,gama)		gd-155 (n,gama)	-----	1.1097E-02	3.3403E-02
u-238 chi		u-238 chi	2.3928E-02	2.6212E-02	3.2031E-02
zr-91 (n,gama)		zr-91 (n,gama)	3.8720E-02	3.5832E-02	3.2020E-02
zr-92 (n,gama)		zr-92 (n,gama)	3.1964E-02	2.8984E-02	2.5008E-02
u-238 pružný		u-238 pružný	2.0645E-02	2.0301E-02	1.9875E-02
u-238 štěpení		u-238 štěpení	1.4621E-02	1.5534E-02	1.7775E-02
h-1 pružný		h-1 pružný	1.7511E-02	1.6242E-02	1.2957E-02
u-238 (n,n')		u-238 pružný	-9.3711E-03	-9.9514E-03	-1.1729E-02
zr-90 (n,gama)		zr-90 (n,gama)	1.1856E-02	1.1790E-02	1.1671E-02
u-235 štěpení		u-238 (n,gama)	-1.0097E-02	-1.0646E-02	-1.1642E-02
u-235 štěpení		u-238 štěpení	7.8514E-03	8.7075E-03	1.0385E-02
o-16 pružný		o-16 pružný	1.0955E-02	1.0081E-02	9.8783E-03
nb-93 (n,gama)		nb-93 (n,gama)	1.0123E-02	9.7980E-03	9.3178E-03
o-16 (n,alfa)		o-16 (n,alfa)	8.4754E-03	8.5219E-03	8.6360E-03

Obrázek 5.2.: Upravený a přeložený výstupní soubor kódu TSUNAMI-2D z výpočtů nejistot koeficientu násobení z důvodu nejistot jaderných dat uchovávaných v kovariančních maticích. Termín „nubar“ značí střední hodnotu počtu neutronů emitovaných ze štěpení a „chi“ značí spektrum neutronů ze štěpení. Seřazeno podle velikostí odchylek pro palivový soubor P47E18.

Z prezentovaných dat je patrné, že k celkové nejistotě koeficientu násobení nejvýznamněji přispívají reakce na izotopech uranu ^{235}U a ^{238}U . Vůbec nejpatrnější nejistoty koeficientu násobení plynou z nejistot střední hodnoty počtu neutronů emitovaných ze štěpení ^{235}U a dále reakce radiačního záchytu na ^{238}U . Následují nejistoty plynoucí z dalších reakcí na těchto obou přítomných izotopech uranu, například radiační záchyt nebo spektrum neutronů ze štěpení ^{235}U . Nejistoty koeficientu násobení jsou však způsobeny i nejistotami reakcí dalších přítomných izotopů. Příkladem může být reakce radiačního záchytu na izotopu gadolinia ^{157}Gd a ^{155}Gd . Nejistota

z těchto reakcí plynoucí je přibližně o řád nižší než nejistoty plynoucí z nejvýznamnějších reakcí na ^{235}U a ^{238}U . Na rozdíl od ostatních nejistot, kde se rozdíly pro jednotlivé soubory liší obvykle maximálně kolem 15 %, v případě nejistot z reakcí s gadoliniem toto neplatí. Pro gadolinium je pravidlem, že nejistota z něj plynoucí koreluje s množstvím obsaženého gadolinia v modelu. Pro soubor A40 bez vyhořívajícího absorbátoru je logicky nulová. Pro soubor P478E18 je asi třikrát vyšší než pro P44G6, což odpovídá tomu, že první zmíněný soubor obsahuje třikrát více palivových proutků s vyhořívajícím absorbátorem Gd_2O_3 .

Co se týče konstrukčních materiálů, tak nejvyššími přispěvateli k celkové nejistotě palivového souboru patří reakce radiačního zachytu na izotopech zirkonia ^{91}Zr a ^{92}Zr . Hodnota nejistoty pro tyto reakce je stejně jako hodnota pro reakce na gadolinium asi o řád nižší než nejvýznamnější nejistoty. Obdobně je na tom také nejistota z reakce radiačního zachytu na vodíku ^1H . Hodnoty nejistoty z reakcí na kyslíku ^{16}O , který se vyskytuje jak v moderátoru v podobě lehké vody tak v palivu v podobě UO_2 nebo Gd_2O_3 , například pro reakci (n,alfa) nebo pružný rozptyl, se pohybují asi o dva řády níže než nejvýznamnější nejistoty plynoucí z reakcí na izotopech uranu.

5.3. Citlivostní analýza koeficientu násobení palivových souborů kódem TSUNAMI

Analýza citlivostí koeficientů násobení palivových souborů A40, P44G6 a P47E18 je dalším předmětem, kterým se tato práce zabývá. Výstupem jsou především citlivostní koeficienty, které vyjadřují jak se relativně změní koeficient násobení při relativní změně makroskopického účinného průřezu, respektive při relativní změně atomové hustoty a zachování konstantních mikroskopických účinných průřezů. Korrectní definice se nachází v druhé kapitole. Kód TSUNAMI-2D počítá citlivostní koeficienty v jednom výpočtu spolu nejistotami plynoucí z jaderných dat. Jeden vstupní soubor, který byl popsán v předchozí kapitole, je tedy použit pro analýzu nejistot i citlivostí.

5.3.1. Výsledky citlivostní analýzy koeficientu násobení

Ve výstupním souboru z výpočtu kódem TSUNAMI-2D jsou uváděny citlivostní koeficienty pro všechny definované materiály, například pro palivo, moderátor nebo konstrukční materiály. Tyto hodnoty jsou k nalezení v tabulce 5.5. Součástí výstupního souboru jsou také hodnoty citlivostních koeficientů pro všechny jednotlivé uvažované izotopy. V tabulkách 5.6 a 5.7 jsou prezentovány tyto hodnoty pro nejvýznamnější izotopy, tedy pro izotopy uranu ^{235}U a ^{238}U a také vodík ^1H . Citlivostní koeficienty pro všechny další nuklidy použité v tomto modelu jsou minimálně o dva řády nižší, a proto nejsou tolik důležité.

Tabulka 5.5.: Citlivostní koeficienty koeficientu násobení palivových souborů A40, P44G6 a P47E18 pro jednotlivé materiály.

Název souboru	A40	P44G6	P47E18
Palivo s obohacením 4%	-0,09540	-0,00997	
Palivo s obohacením 4,4%		-0,04584	-0,00110
Palivo s obohacením 4,7%			0,02168
Palivo s vyhořívajícím absorbátorem		-0,00976	-0,02837
Moderátor H ₂ O	0,13894	0,13986	0,13294
Palivové pokrytí E110	-0,01323	-0,01248	-0,01170
Pokrytí centrální a vodících trubek E635	-0,00188	-0,001845	-0,00173

Z tabulky 5.5 vyplývá, že mezi změnou koeficientu násobení a změnou atomové hustoty materiálu platí přímá úměrnost pouze v případě moderátoru (lehké vody) a v případě palivového souboru P47E18 také paliva s vyšším obohacením. V ostatních případech platí mezi změnou koeficientu násobení a atomové hustoty materiálů nepřímá úměra. Toto je logický závěr v případě pokrytí, kdy se zvýšením atomové hustoty jen zvyšuje stínění neutronů a tedy koeficient násobení musí nutně klesat. V případě paliv, kde také platí nepřímá úměra, je to způsobeno nejspíše tím, že zvýšení atomové hustoty ²³⁸U negativně převáží pozitivní účinky zvýšení atomové hustoty ²³⁵U. Jak již bylo napsáno, výjimkou je palivo s obohacením 4,7 % palivového souboru P47E18.

Tabulka 5.6.: Citlivostní koeficienty koeficientu násobení palivových souborů A40, P44G6 a P47E18 pro vybrané nejvýznamnější izotopy.

Název souboru	A40	P44G6	P47E18
¹ H	0,14094	0,14162	0,13462
²³⁵ U	0,12318	0,14932	0,20843
²³⁸ U	-0,21057	-0,19798	-0,18121

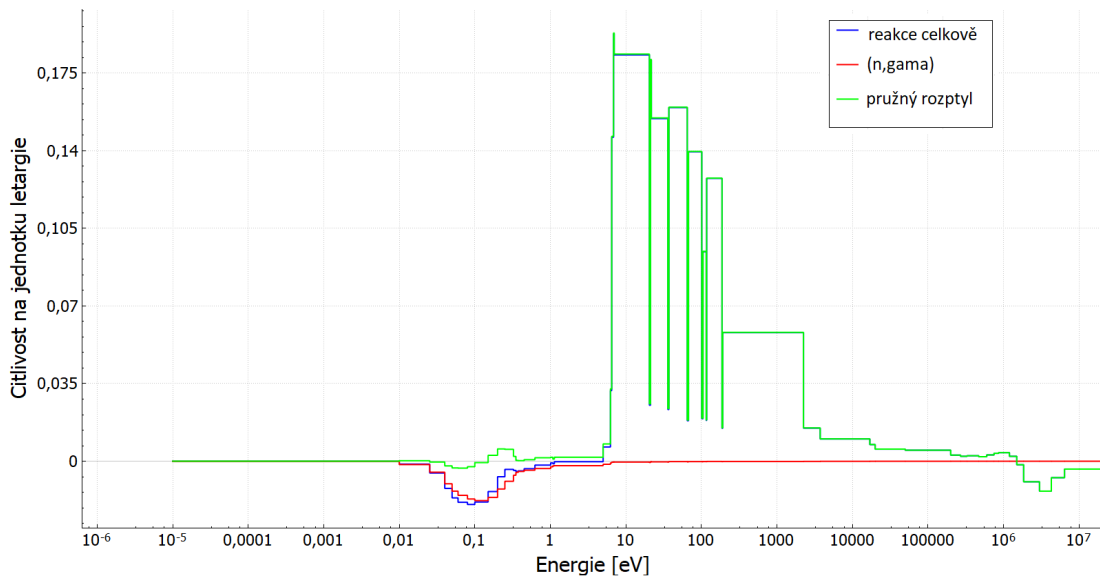
Tabulka 5.7.: Citlivostní koeficienty koeficientu násobení palivových souborů P44G6 a P47E18 pro izotopy uranu, které jsou rozděleny podle pozice palivového proutku v palivovém souboru, respektive podle jeho složení.

Název souboru	P44G6	P47E18
²³⁵ U - na periferii (nižší obohacení)	0,03058	0,03814
²³⁵ U - vnitřní (vyšší obohacení)	0,11681	0,16380
²³⁵ U - s vyhořívajícím absorbátorem	0,00193	0,00649
²³⁸ U - na periferii (nižší obohacení)	-0,03899	-0,03773
²³⁸ U - vnitřní (vyšší obohacení)	-0,15653	-0,13619
²³⁸ U - s vyhořívajícím absorbátorem	-0,00246	-0,00729

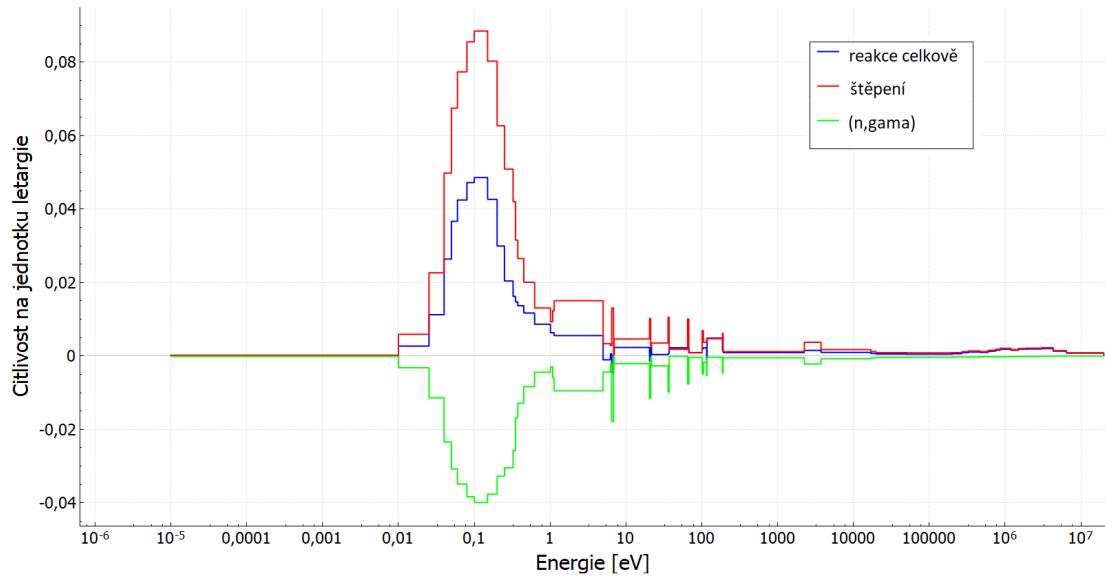
To jak změna atomové hustoty pro jednotlivé nuklidy přispívá ke změně koeficientu násobení je možné sledovat v tabulce 5.6. Zvýšení atomové hustoty vodíku ¹H se na změně koeficientu násobení projevuje pozitivně, z důvodu vyšší moderace neutronů

a zvýšení vodo-uranového poměru. Pro vodík není sledován podstatný rozdíl mezi citlivostmi pro různé palivové soubory. Co se týče izotopů uranu tak je logické, že citlivostní koeficient pro uran ^{235}U je z důvodu většího počtu štěpení v palivu kladný a pro ^{238}U je z opačného důvodu záporný. U těchto izotopů je již možné sledovat podstatnější rozdíly mezi jednotlivými palivovými soubory. Důvodem těchto rozdílů jsou z největší pravděpodobnosti rozdílné průměrné hodnoty obohacení paliva. V tabulce 5.7 je pak možné sledovat citlivosti pro izotopy uranu rozdělené podle pozice palivového proutku v palivovém souboru, respektive podle jeho složení.

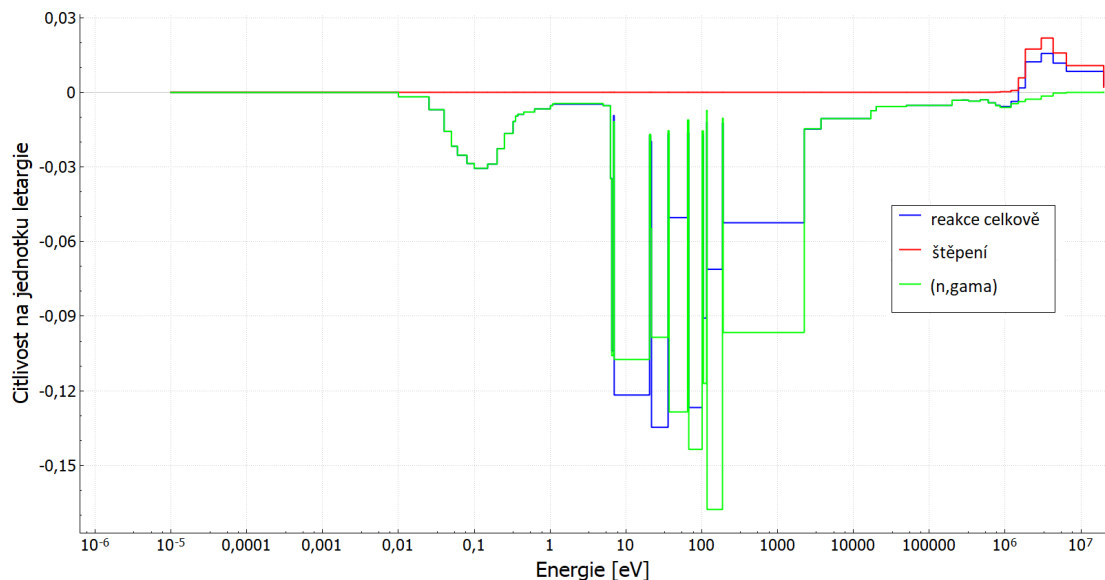
Kromě jednotlivých hodnot citlivostních koeficientů patří mezi výstupní soubory také data vyjadřující citlivosti koeficientu násobení pro všechny reakce, ke kterým na jednotlivých izotopech dochází v závislosti na energii nalétávajícího neutronu. Vznikají tedy spektra, ze kterých je možné vyčíst konkrétní energetické oblasti, jenž jsou pro citlivost koeficientu násobení pro dané reakce nejvýznamnější, ať už v kladném, či záporném smyslu. Z důvodu určité normalizace spektra jsou uváděny citlivosti na jednotku letargie v závislosti na energii neutronu. V grafech 5.3, 5.4 a 5.5 jsou tato data vykreslena pro palivový soubor A40 pro nevýznamnější reakce na izotopech ^{235}U , ^{238}U a ^1H . Pro zbylé dva palivové soubory jsou grafy umístěny v příloze B, data pro jednotlivé soubory se však příliš neliší. Dále je možné v grafu 5.6 sledovat spektrum citlivosti koeficientu násobení pro reakci (n,gama) na gadoliniu ^{157}Gd v palivových souborech P44G6 a P47E18.



Obrázek 5.3.: Spektrum citlivostí koeficientu násobení palivového souboru A40 pro nejvýznamnější reakce na izotopu ^1H . Data vypočtena kódem TSUNAMI-2D a vykreslena pomocí uživatelského rozhraní Fulcrum.



Obrázek 5.4.: Spektrum citlivostí koeficientu násobení palivového souboru A40 pro nejvýznamnější reakce na izotopu ^{235}U . Data vypočtena kódem TSUNAMI-2D a vykreslena pomocí uživatelského rozhraní Fulcrum.

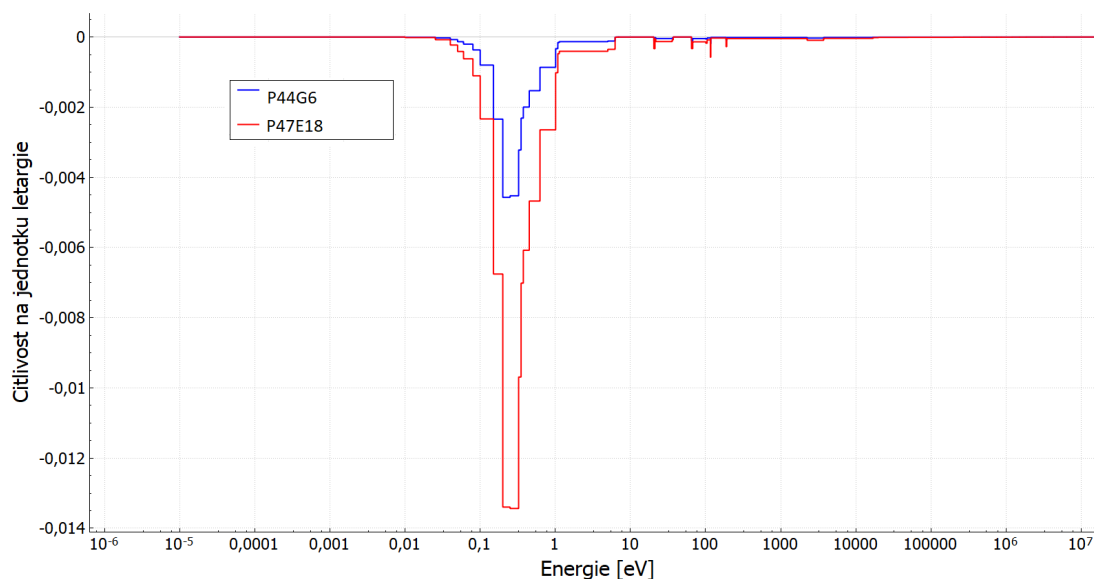


Obrázek 5.5.: Spektrum citlivostí koeficientu násobení palivového souboru A40 pro nejvýznamnější reakce na izotopu ^{238}U . Data vypočtena kódem TSUNAMI-2D a vykreslena pomocí uživatelského rozhraní Fulcrum.

Co se týče spektra citlivostí pro reakce na izotopu ^1H , tak nejzřetelnější je pozitivní vliv pružného rozptylu v oblasti rezonancí, kde dochází k zpomalování neutronů. Naopak negativní vliv má reakce radičního záchytu na ^1H v oblasti tepelných neutronů. Oproti vlivu pružného rozptylu je však tato méně výrazná. V případě izotopu ^{235}U přispívají k celkové citlivosti koeficientu násobení především dvě reakce - štěpení (pozitivní vliv) a rezonanční záchyt (n,gama) (negativní vliv). Reakce jsou proti

sobě téměř symetrické, jen citlivost z reakce (n,gama) dosahuje nižších absolutních hodnot. Reakce začínají mít vliv v oblasti rezonancí, nejvýznamnější je však oblast tepelných neutronů, kde dochází k podstatné části štěpení. Celková citlivost pro izotop uranu ^{235}U je kladná. Stejně jako pro ^{235}U jsou i v případě izotopu ^{238}U z hlediska citlivostí nejpodstatnější reakce štěpení a radiační záchyt, nicméně v tomto případě je zaměněná jejich významnost. Reakce štěpení ^{238}U přispívá k celkové citlivosti kladně jen poměrně málo v oblasti rychlých neutronů nad energií asi 1 MeV. V rezonanční oblasti má pak velice významný negativní vliv reakce (n,gama). Ta se pak projevuje také v oblasti tepelných neutronů, kde se podílí na snižování hodnoty regeneračního faktoru.

I přesto, že celkový citlivostní koeficient pro ^{157}Gd nedosahuje hodnot pro izotopy ^{235}U , ^{238}U a ^1H , je pro ilustraci vykresleno také spektrum citlivostí pro reakci (n,gama) na izotopu ^{157}Gd , jakožto nejvýznamnější reakce z pohledu vyhořívajícího absorbátoru. Tato reakce má na koeficient násobení dle očekávání negativní vliv a projevuje se především v oblasti tepelných neutronů pro energie od 0,01 do 1 eV. Tvar spektra pro tuto reakci je obdobný pro oba palivové soubory P44G6 a P47E18, ale pro P47E18 dosahuje asi třikrát vyšších hodnot. Toto odpovídá skutečnosti, že v souboru P47E18 je třikrát více palivových proutků s vyhořívajícím absorbátorem.



Obrázek 5.6.: Spektrum citlivostí koeficientu násobení palivových souborů P44G6 a P47E18 pro reakce (n,gama) na izotopu ^{157}Gd . Data vypočtena kódem TSUNAMI-2D a vykreslena pomocí uživatelského rozhraní Fulcrum.

5.3.2. Kontrola správnosti citlivostních koeficientů vypočtených kódem TSUNAMI-2D

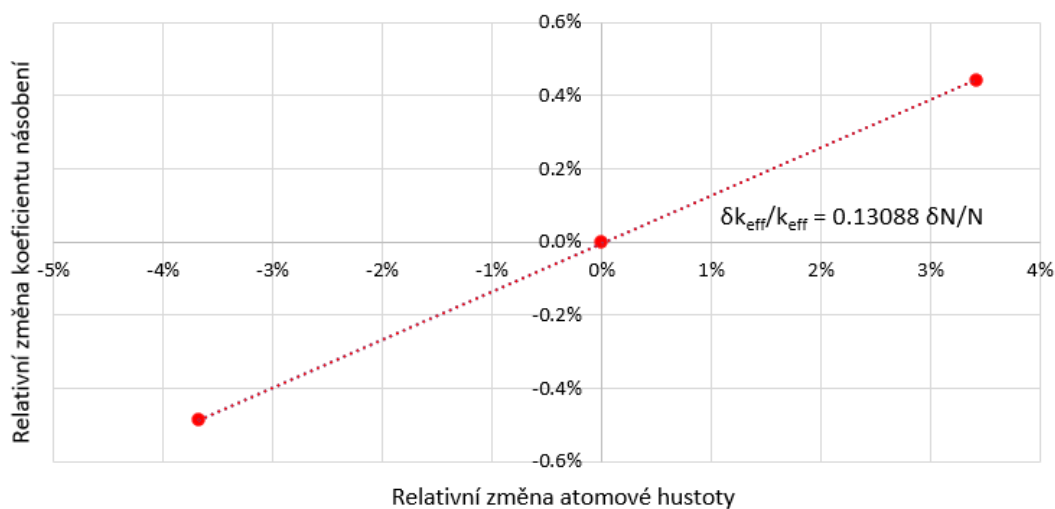
Při výpočtu citlivostních koeficientů kódem TSUNAMI-2D je v manuálu k balíku SCALE [19] doporučováno provést kontrolu, zdali vypočtené hodnoty odpovídají reálnému chování modelu. Tato kontrola se provádí pomocí výpočetního kódu

TSUNAMI-2DC, který provede jen jeden výpočet koeficientu násobení. Ve vstupním souboru je však postupně pro všechny kontrolované izotopy manuálně měněna atomová hustota tak, aby se podle vypočteného citlivostního koeficientu zvýšil respektive snížil koeficient násobení o 0,5 %. Nová změněná atomová hustota N_n pro daný izotop n je daná následujícím vztahem, který je odvozen z definice citlivostního koeficientu $S_{k,n}$:

$$N_n = N_{0,n} \left(1 \pm \frac{0,005}{S_{k,n}} \right),$$

kde $N_{0,n}$ je nezměněná referenční atomová hustota. Ve vstupním souboru je tedy nutné definovat materiály pomocí atomových hustot jednotlivých izotopů, nikoliv podle celkové hustoty materiálu a hmotnostních zlomků jednotlivých izotopů, jak tomu bylo v případě předešlých vstupních souborů.

Je tedy provedeno celkem sedm výpočtů kódem TSUNAMI-2DC. Jeden referenční bez pozměněných atomových hustot, tedy i koeficientu násobení, a dále pro každý ze tří nejvýznamnějších izotopů dva výpočty s patřičně sníženou či zvýšenou atomovou hustotou. Z obdržných koeficientů násobení závislých na dané změně atomové hustoty je možné vypočítat citlivostní koeficienty pro jednotlivé nuklidy a porovnat je s těmi původními z kódu TSUNAMI-2D, zdali korelují nebo ne. V tabulce 5.8 je možné sledovat původní a pozměněné atomové hustoty pro izotop vodíku ^1H spolu s vypočtenými koeficienty násobení. Do grafu 5.7 je pak vynesena závislost relativní změny atomové hustoty na relativní změně koeficientu násobení. Jednotlivé body grafu jsou pak metodou nejmenších čtverců proloženy přímkou. Z předpisu pro tuto přímku je pak možné vyčíst citlivostní koeficient. Tento proces je pak proveden i pro další izotopy. V tabulce 5.9 je možné sledovat porovnání hodnot citlivostních koeficientů z TSUNAMI-2D a z kontrolního výpočtu pomocí TSUNAMI-2DC.



Obrázek 5.7.: Graf závislosti relativní změny atomové hustoty ^1H na relativní změně koeficientu násobení palivového souboru A40. Tři body grafu jsou lineárně aproximovány podle rovnice nacházející se v grafu, ze které je možné vyčíst vypočtený citlivostní koeficient.

Tabulka 5.8.: Tabulka hodnot atomových hustot ^1H a výsledných koeficientů násobení pro kontrolních výpočty s TSUNAMI-2DC.

Druh výpočtu	Atomová hustota ^1H	Koeficient násobení
Referenční výpočet	0,048498	1,38465852
Výpočet pro dosažení $+0,5\%$ k_{eff}	0,050219	1,39079806
Výpočet pro dosažení $-0,5\%$ k_{eff}	0,046777	1,37792532

Tabulka 5.9.: Tabulka citlivostních koeficientů koeficientu násobení palivového souboru A40 vypočtených kódem TSUNAMI-2D a kontrolním kódem TSUNAMI-2DC s použitím 56 grupové knihovny dat.

Nuklid	TSUNAMI-2D	TSUNAMI-2DC	Odchylka
^{235}U	0,12318	0,12214	-0,85 %
^{238}U	-0,21057	-0,18196	-13,59 %
^1H	0,14094	0,13088	-7,14 %

Uvádí se, že odchylka citlivostních koeficientů z TSUNAMI-2D a -2DC by neměla být vyšší než 5 %, odchylka nižší je považována za uspokojivou. Jak lze z tabulky 5.9 vidět, odchylka nedosahuje ani hodnoty 1 % pro uran ^{235}U . Důvodem jsou nejspíše kvalitnější zhodnocená jaderná data, než pro zbylé dva izotopy. Pro vodík ^1H má odchylka hodnotu -7,14 %, pro uran ^{238}U dosahuje hodnoty dokonce -13,59 %.

Dané odchylky výrazně přesahují požadovanou maximální hodnotu, proto jsou navrženy tři změny pro model palivového souboru A40, které by mohly pomoci tyto odchylky snížit. První možností je použít místo 56 grupových knihoven dat kvalitnější a podrobnější 252 grupové knihovny dat.

Před popisem dalších možností je nutné okomentovat skutečnost, že během všech předešlých výpočtů je palivo definováno jako jeden materiál. Získané parametry jsou tedy střední hodnotou přes celý jeho objem. Proto obě další možnosti vylepšení výsledků zahrnují rozdělení paliva při definování na dva materiály. V prvním případě je rozděleno palivo podle toho, jestli se nachází v proutcích na periferii, nebo v proutcích uvnitř palivového souboru. V palivu na periferii je totiž dosahováno rozdílných hustot toku neutronů pro různé energie, což způsobuje odlišné chování narozdíl od paliva uvnitř souboru. V druhém případě je dělena přímo palivová peleta na vnitřní a vnější část, přičemž pro každou je znovu definován odlišný materiál. Toto rozdělení by mohlo pomoci z toho důvodu, že kvůli samostínění dochází k odlišnému vyhořívání ve vnitřní a vnější části palivové pelety. Poloměr vnitřní části palivové pelety je volen 2,7 mm, vnější část pak tvoří zbylé mezikruží.

Je tedy provedeno znovu sedm výpočtů v případě modelu s 252 grupovou knihovnou dat, v případě dělení paliva je provedeno výpočtů 11, protože oba izotopy uranu jsou definovány dvakrát pro každou myšlenou oblast paliva zvlášť. Z výpočtů je znovu možné určit citlivostní koeficienty a porovnat je s těmi původními z výpočtu pomocí TSUNAMI-2D. Jednotlivé výsledky a porovnání hodnot se nachází v tabulce 5.10.

Tabulka 5.10.: Tabulka citlivostních koeficientů koeficientu násobení palivového souboru A40 vypočtených kódem TSUNAMI-2D a kontrolním kódem TSUNAMI-2DC pro 4 druhy výpočtu (A - 56 grupová knihovna dat, B - 252 grupová knihovna dat, C - dělení palivových proutků na část na periférii a vnitřní, D - dělení palivových pelet na vnitřní a vnější část).

Izotop a výpočet	TSUNAMI-2D	TSUNAMI-2DC	Odchylka
^{235}U - A	0,12318	0,12214	-0,85 %
^{235}U - B	0,12277	0,12247	-0,25 %
^{235}U - C	0,12318	0,12253	-0,53 %
^{235}U - D	0,12312	0,12228	-0,68 %
^{238}U - A	-0,21057	-0,18196	-13,59 %
^{238}U - B	-0,20281	-0,18239	-10,07 %
^{238}U - C	-0,21057	-0,18239	-13,38 %
^{238}U - D	-0,21072	-0,18230	-13,49 %
^1H - A	0,14094	0,13088	-7,14 %
^1H - B	0,13852	0,13132	-5,19 %
^1H - C	0,14094	0,13103	-7,03 %
^1H - D	0,14098	0,13106	-7,04 %

Z prezentovaných výsledků je patrné, že k vylepšení důvěryhodnosti citlivostních koeficientů, nejvýrazněji pomohlo použití 252 grupové knihovny dat a to jak mikroskopických účinných průřezů tak kovariančních matic. Odchylka výsledků pro ^1H byla snížena na požadovanou úroveň 5 %. Odchylka pro izotop ^{238}U byla snížena asi o tři procentní body, pořád však výrazně převyšuje požadovanou maximální hodnotu. Výrazné je snížení odchylky také pro ^{235}U z -0,85 % na -0,25 %. Příspěvek na snížení odchylek má také dělení paliva do dvou různých segmentů. V tomto případě jsou však odchylky sníženy maximálně v desetinách procentních bodů. Dělení do radiálních segmentům má význam spíše při vyhořívání a při použití paliva s gadoliniem. Pro výraznější zlepšení výsledků a snížení odchylek by bylo nejspíše vhodné rozdělit palivo do daleko většího počtu segmentů. Takto podrobné výpočty však sahají za rozsah této práce a je možné se jim věnovat dále v následujících studentských pracích.

Na všech výsledcích z kontroly citlivostních koeficientů koeficientu násobení je možné si povšimnout, že citlivosti z kódu TSUNAMI-2D jsou vždy vyšší než v případě kontrolního výpočtu s TSUNAMI-2DC. Jelikož jsou citlivostní koeficienty počítány především z důvodu bezpečnosti, je vhodné, že výsledky z TSUNAMI-2D jsou konzervativnější a bezpečnostně přísnější. V opačném případě, kdyby byly výsledky méně přísné, nebylo by možné výsledky aplikovat na reálné situace.

5.4. Další analýzy nejistot palivových souborů kódem Sampler

Kód Sampler byl v této práci použit zatím pouze pro vzorkování mikroskopických účinných průřezů podle dat z kovariančních matic jakožto vstupních parametrů. Měnění mikroskopických účinných průřezů je však možné vypnout a náhodně vzorkovat jiné vstupní parametry podle vlastních definovaných rozdělení pravděpodobnosti a tak sledovat vliv jejich nejistot na koeficient násobení. V této podkapitole bude tedy zkoumán vliv nejistot obohacení paliva a dále rozměru palivové pelety na celkovou nejistotu koeficientu násobení palivového souboru A40.

Pro oba výpočty byly vytvořeny nové vstupní soubory, které se od již vytvořených vstupních souborů pro kód Sampler a výpočet nejistoty koeficientu násobení z důvodu nejistoty dat liší v několika aspektech. Jednak je v bloku parametrů pro výpočet vypnuto náhodné měnění mikroskopických účinných průřezů. Dále jsou v bloku „case“ nahrazeny všechny parametry, které jsou požadovány náhodně měnit, výrazem „#{NazevParametru}“. Nakonec vstupního souboru je pak v bloku „variable“ definováno pravděpodobnostní rozdělení pro dané měněné vstupní parametry. Výpis těchto dvou vstupních kódů je možné dohledat na obrázcích v příloze A.

Pravděpodobnostní rozdělení pro obohacení i rozměry palivové pelety je inspirováno výrobními tolerancemi z [30] a [31]. Směrodatné odchylky pravděpodobnostních rozdělení pro měněné parametry jsou voleny tak, aby byly rovny uváděným limitům. Aby nebyly měněny parametry víc než limity dovolují, jsou nastaveny také krajní hodnoty, které nejsou při vzorkování překročeny. V tabulce 5.11 jsou shrnuty vytvořené pravděpodobnostní rozdělení a jejich parametry použité pro výpočet.

Pro oba druhy měnění vstupních parametrů je provedeno 100 výpočtů kódem NEWT, ze kterých Sampler načítá jednotlivé koeficienty násobení a jednoduchou statistickou analýzou jsou pak vypočteny střední hodnoty koeficientu násobení a jejich směrodatné odchylky. Vypočtené hodnoty jsou prezentovány v tabulce 5.12. V grafech 5.8 a 5.9 je pak možné sledovat pro oba druhy výpočtu jednotlivé vypočtené hodnoty koeficientu násobení, jeho střední hodnotu a směrodatnou odchylku.

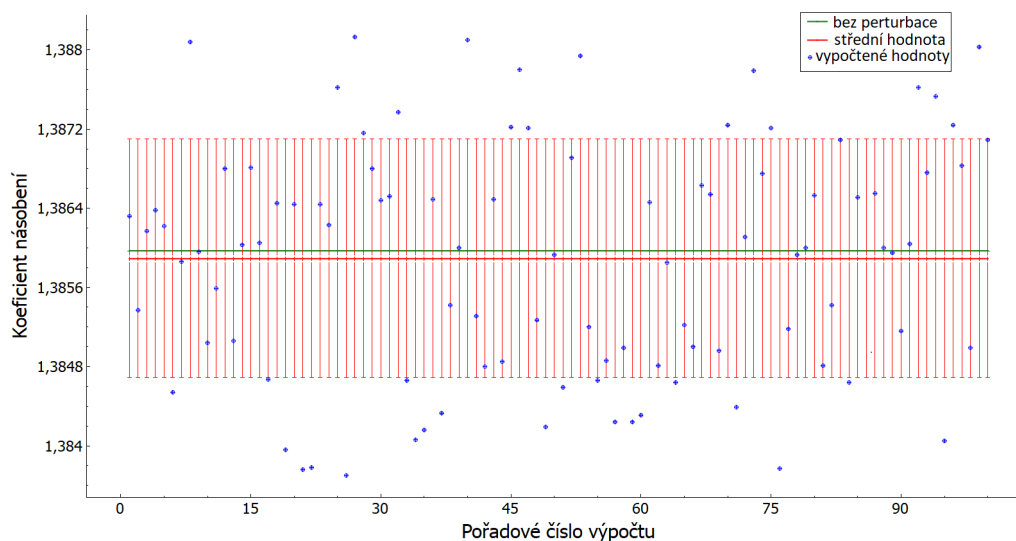
Zatímco nejistota koeficientu násobení plynoucí z nejistot jaderných dat činila asi 0,5 %, v případě neurčitostí obohacení paliva respektive rozměrů palivové pelety jsou nejistoty řádově nižší - 0,087 % respektive 0,027 %. Vliv těchto nejistot je i tak nutné brát v potaz, především z toho důvodu, že nejistoty se v reálném modelu kombinují. V navazujících studentských pracích je možné provést s kódem Sampler výpočty i pro další rozměrové nejistoty, například rozměry pokrytí paliva, a další parametry, jako například atomové hustoty nebo teploty materiálů. Mohla by být spuštěna také analýza, kde by byly měněny všechny parametry zároveň spolu s mikroskopickými účinnými průřezy a byla by tak vypočtena celková nejistota koeficientu násobení palivového souboru.

Tabulka 5.11.: Limity a pravděpodobnostní rozdělení volené pro analýzu nejistot koeficientu násobení plynoucí z nejistot obohacení paliva a rozměrů palivové pelety palivového souboru A40 pomocí kódu Sampler.

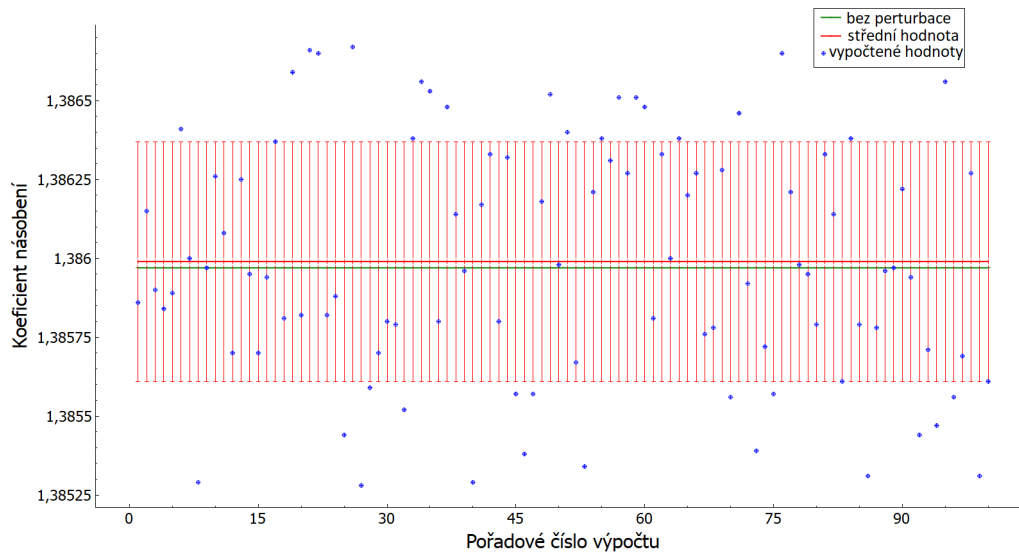
Měněný parametr	Obohacení paliva ^{235}U	Poloměr palivové pelety
Nominální hodnota	4 %	3,8 mm
Limit parametru	0,05 %	0,01 mm
Druh pravděpodobnostního rozdělení	Normální	Normální
Směrodatná odchylka pro rozdělení	0,05 %	0,01 mm
Maximální dovolená hodnota	4,05 %	3,81 mm
Minimální dovolená hodnota	3,95 %	3,79 mm

Tabulka 5.12.: Tabulka hodnot výpočtu nejistot koeficientu násobení palivového souboru A40 vlivem nejistot v obohacení paliva nebo poloměru palivové pelety, vypočteno metodou Monte Carlo kódem Sampler.

Měněný parametr	Obohacení paliva ^{235}U	Poloměr palivové pelety
Střední hodnota koeficientu násobení	1,38589	1,38599
Směrodatná odchylka	0,0012	0,00038
Nejistota koeficientu násobení	0,087 %	0,027 %



Obrázek 5.8.: Graf výpočtu nejistoty koeficientu násobení palivového souboru A40 vlivem nejistot obohacení paliva pomocí 100 vzorků výpočtu kódem Sampler. Je vykreslena hodnota koeficientu násobení bez perturbace (bez změněných parametrů) a jeho střední hodnota spolu se směrodatnou odchylkou a jednotlivými vypočtenými hodnotami.



Obrázek 5.9.: Graf výpočtu nejistoty koeficientu násobení palivového souboru A40 vlivem nejistoty rozměru palivové pelety pomocí 100 vzorků výpočtu kódem Sampler. Je vykreslena hodnota koeficientu násobení bez perturbace (bez změněných parametrů) a jeho střední hodnota spolu se směrodatnou odchylkou a jednotlivými vypočtenými hodnotami.

Závěr

V této bakalářské práci byly postupně provedeny všechny kroky z pokynů pro vypracování v zadání bakalářské práce. V první části se nachází popis procesu zhodnocování jaderných dat a ukládání těchto dat do knihoven v patřičném formátu. Jsou objasněny problémy, ke kterým během procesu zhodnocování dochází a které se pak projevují na nejistotách jaderných dat. V práci se nachází také porovnání jednotlivých knihoven zhodnocených jaderných dat a to jak z hlediska kvantity dat tak i z hlediska kvality dat či způsobu zhodnocování. Prezentován je také způsob ukládání nejistot těchto dat do knihoven pomocí kovariančních a korelačních matic a na jednoduchém příkladu je pak předvedena možnost použití těchto matic pro výpočet nejistoty dat. Dále byl v práci představen balík výpočetních kódů SCALE s důrazem na 2-D neutronový transportní výpočetní kód NEWT a také kódy pro citlivostní analýzu a analýzu nejistot TSUNAMI (deterministický přístup) a Sampler (stochastický - Monte Carlo přístup). Jednotlivé kódy z balíku SCALE nepoužívají přímo knihovny zhodnocených jaderných dat, pouze z nich vycházejí. V práci jsou tedy představeny také knihovny jaderných dat SCALE a to jak v spojitě tak v diskrétní grupové podobě.

Jako zástupce tlakovodního reaktoru byl vybrán reaktor typu VVER-1000, který se nachází například na obou blocích Jaderné elektrárny Temelín. V práci je popsána geometrie, rozměry a také materiálové složení palivových souborů těchto reaktorů. Následně byly vybrány tři konkrétní palivové soubory A40, P44G6 a P47E18, které se liší zejména středním obohacením paliva a také množstvím vyhořívajícího absorbátoru Gd_2O_3 ve vybraných palivových proutcích. Pro všechny palivové soubory byly vytvořeny reprezentativní 2-D modely s řadou zjednodušujících předpokladů pro následné výpočty pomocí kódů z balíku SCALE.

V poslední kapitole byly popsány výsledky výpočtů provedených v rámci bakalářské práce. Na začátek byl popsán postup výpočtu základních charakteristik palivových souborů, tedy jejich koeficientů násobení a dále jednotlivých parametrů z rovnice čtyř součinitelů. Výpočty byly provedeny jak pro 56 tak i 252 grupovou strukturu knihovny jaderných dat, výsledky se však příliš nelišily. Následovala analýza nejistot koeficientu násobení plynoucí z nejistot jaderných dat. Pro oba druhy výpočtu pomocí kódu TSUNAMI-2D i Sampler a pro všechny palivové soubory se pohybovala nejistota na úrovni 0,5 %. Tyto výsledky se zdají být důvěryhodné právě proto, že obdobné hodnoty byly obdrženy z kódů využívající deterministické i stochastické metody.

V další části byla provedena citlivostní analýza koeficientu násobení, byl tedy zkoumán vliv změny atomové hustoty materiálů i jednotlivých izotopů na změnu koefi-

cientu násobení palivových souborů. V případě souboru A40 byla podle doporučení z manuálu pro SCALE [19] provedena také kontrola vypočtených citlivostních koeficientů pro vybrané nejvýznamnější izotopy. Jelikož se však v případě některých izotopů výpočty z kontroly s těmi původními lišily až na úrovni desítek procent, byly navrženy tři metody pro zlepšení původních vypočtených hodnot. První metoda byla založena na použití 252 grupové struktury dat narozdíl od 56 grupové struktury použité v původním výpočtu. Další dvě metody spočívaly v dělení paliva při definici materiálů do více oblastí. Zatímco poslední dvě metody přinesly jen zanedbatelná zlepšení, výrazně lepších hodnot bylo dosaženo v případě použití 252 grupové struktury dat. Výsledky pro některé izotopy však stále nejsou uspokojivé. Zde se nabízí možnost pro navazující studentské práce, kde by byly provedeny výpočty s použitím 252 grupové struktury dat a zároveň s daleko podrobnějším rozdělením paliva do více oblastí. Odchylka mezi původním a kontrolním výpočtem by se pak mohla dostat na požadovanou maximální úroveň pro všechny důležité izotopy.

Nakonec praktické části byl představen další způsob použití stochastického výpočetního kódu Sampler pro analýzu nejistot neplynoucí však z nejistot zhodnocených jaderných dat, nýbrž z nejistot v obohacení paliva a v rozměrech palivových pelet. Nejistoty koeficientu násobení se pro oba druhy výpočtu pohybovaly o řád níže než v případě nejistot koeficientu násobení způsobené jadernými daty. V navazujících studentských pracích je možné se zabývat také dalšími nejistotami palivových souborů plynoucí z jiných rozměrových nejistot, nebo například z nejistot v teplotách a dalších parametrech. Navíc může být proveden jeden stochastický výpočet, kde by byly všechny tyto nejistoty společně s nejistotami z jaderných dat a byl by tedy obdržena celková nejistota koeficientu násobení palivových souborů. Dále by mohly být použity pro palivové soubory složitější modely, které by zahrnovaly i další konstrukční komponenty, nebo by mohl být model definován ve 3-D a bylo by tak možné sledovat charakteristiky i jejich nejistoty a citlivost pro reálný příklad palivového souboru, ve kterém by bylo nutné započítávat také například méně obohacené blankety na koncích palivových souborů. Poslední možností, kterou je možné se dále zabývat, je uvažování nestacionárního výpočtu, kde by bylo nutné uvažovat také s vyhoříváním paliva.

Bibliografie

- [1] P. Talou. *Nuclear Reactors, Evaluations, Library Development*. Los Alamos National Laboratory, USA, 2014.
- [2] IAEA National Nuclear Data Service. *EXFOR - Experimental Nuclear Reaction Data*. [online]. [cit. 2021-07-05]. Dostupné z: <https://www-nds.iaea.org/exfor/>.
- [3] F.G. Kondev et al. *Nubase 2020*. Chinese Physics C45, 030001, 2021.
- [4] J. Rataj. *Interakce neutronů*. Praha, 2021. Podklad k autorově přednášce „Experimentální neutronová fyzika“.
- [5] J. Frýbort, L. Frýbortová a M. Štefánik. *Neutronové interakce*. Praha, 2019. Podklad k autorově přednášce „Základy fyziky jaderných reaktorů 1“.
- [6] NNDC. *ENDF/B-VII.1 Evaluated Nuclear Data Library*. [online]. [cit. 2021-03-21]. Dostupné z: <https://www.nndc.bnl.gov/endl/b7.1/>.
- [7] NNDC. *ENDF/B-VIII.0 Evaluated Nuclear Data Library*. [online]. [cit. 2021-03-21]. Dostupné z: <https://www.nndc.bnl.gov/endl/b8.0/>.
- [8] NEA. *JEFF-3.3*. [online]. [cit. 2021-03-21]. Dostupné z: <https://www.oecd-neo.org/dbdata/jeff/jeff33/index.html>.
- [9] JAEA Nuclear Data Center. *JENDL-4.0*. [online]. [cit. 2021-03-21]. Dostupné z: <https://www.nndc.jaea.go.jp/jendl/j40/j40.html>.
- [10] PSI. *TALYS-based evaluated nuclear data library*. [online]. [cit. 2021-03-21]. Dostupné z: https://tendl.web.psi.ch/tendl_2019/tendl2019.html.
- [11] SSCRF a ROSATOM. *New version of neutron evaluated data library BROND-3.1*. [online]. [cit. 2021-03-21]. Dostupné z <https://www.vant.ippe.ru/en/year2016/2/neutron-constants/1150-5.html>.
- [12] NEA. *CENDL-3.1 - The Chinese Evaluated Nuclear Data Library*. [online]. [cit. 2021-03-21]. Dostupné z: https://www.oecd-neo.org/dbforms/data/eva/evatapes/cendl_31/.
- [13] A. Trkov, M. Herman a D.A. Brown. *ENDF-6 Formats Manual*. NNDC, CSEWG, Brookhaven National Laboratory, USA, 2018.
- [14] R. Capote¹, D.L. Smith² a A. Trkov³. *Nuclear data evaluation methodology including estimates of covariances*. 1-Nuclear Data Section, IAEA, Austria, 2-Nuclear Engineering Division, Argonne National Laboratory, USA, 3-Jozef Stefan Institute, Slovenia, 2010.
- [15] D. Baye a P. Descouvemont. *Scholarpedia. The R-matrix theory in nuclear and atomic physics*. [online]. Belgie [cit. 2021-03-14]. Dostupné z: http://www.scholarpedia.org/article/The_R-matrix_theory_in_nuclear_and_atomic_physics.

- [16] W. Wieselquist et al. *Overview of Nuclear Data Uncertainty in Scale and Application to Light Water Reactor Uncertainty Analysis*. Oak Ridge National Laboratory, U.S. NRC, USA, 2018.
- [17] WIKIPEDIA. *Correlation and dependence*. [online]. [cit. 2021-03-16]. Dostupné z: https://en.wikipedia.org/wiki/Correlation_and_dependence.
- [18] WIKIPEDIA. *Covariance*. [online]. [cit. 2021-03-16]. Dostupné z: <https://en.wikipedia.org/wiki/Covariance>.
- [19] W.A. Wieselquist, R.A. Lefebvre a M.A. Jessee. *SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.4*. Oak Ridge National Laboratory, 2020.
- [20] G. Radulescu, D.E. Mueller a J.C. Wagner. *Sensitivity and Uncertainty Analysis of Commercial Reactor Criticals for Burnup Credit*. Oak Ridge National Laboratory, U.S. NRC, USA, 2018.
- [21] M.L. Marshall W.J. and Williams et al. *Development And Testing Of Neutron Cross-Section Covariance Data For Scale 6.2, Conference Paper*. Oak Ridge National Laboratory a Department of Nuclear Engineering University of Tennessee, USA, 2015.
- [22] Státní úřad pro jadernou bezpečnost. *Jaderná elektrárna Temelín. Sledování stavu paliva*. [online]. Praha [cit. 2020-12-08]. Dostupné z: <https://www.sujb.cz/jaderna-bezpecnost/jaderna-zarizeni/jaderna-elektrarna-temelin/sledovani-stavu-paliva/>.
- [23] M. Kuna. *Dotaz ohledně poskytnutí informací k bakalářské práci*. [elektronická pošta]. Adresát: celardom@fjfi.cvut.cz. 8.12.2020 [cit. 2020-12-08].
- [24] M. Sedlák. *Citlivostní analýza vlivu výrobních nepřesností na reaktivitu jaderného paliva*. Brno, 2016. Bakalářská práce.
- [25] T. Klíma. *CFD modelování proudění v palivovém souboru v aktivní zóně jaderného reaktoru*. Plzeň, 2017. Diplomová práce.
- [26] O.B. Samojlov et al. *TVSA-T fuel assembly for 'Temelin' NPP Main results of design and safety analyses Trends of development*. International topical meeting on VVER-2010 - experience a perspectives, Česká republika, 2010.
- [27] ČEZ A.S. *Předprovozní bezpečnostní zpráva 1,2 - revize 1: Díl 4*. Temelín, 2011. Interní dokument ČEZ a.s.
- [28] M. Kuna. *Optimalizace palivových cyklu jaderné elektrárny Temelín*. Praha, 2012. Výzkumný úkol.
- [29] V. Novikov et al. *Some Results on the Properties Investigations of Zirconium Alloys for WWER-1000 Fuel Cladding*. JSC VNIINM a JSC TVEL, Moscow, Russian Federation, 2011.
- [30] K. Ivanov et al. *Benchmarks for uncertainty analysis in modelling (UAM) for the design, operation and safety analysis of LWRs: Volume I: Specification and Support Data for Neutronics Cases (Phase I)*. [online]. [cit. 2016-05-16]. Dostupné z: <http://www.oecd.org/officialdocuments/publicdisplaydocumentpdf/?cote=NEA/NSC/DOC%282013%297docLanguage=En>.
- [31] V. Krýsl et al. *'MIDICORE' VVER-1000 core periphery power distribution benchmark proposal*. ŠKODA JS a. s., 2010.

A. Příloha: Vstupní soubory

```

=t-xsec parm=( )
Palivo VVER-1000_A40_56g
v7.1-56n

read comp
  uo2 1 den=9.905 1.0 850
      92238 96
      92235 4 end

  h2o 11 den=0.7255 1.0 580 end

  wtptE110 21 6.5 2
           41000 1.0
           40000 99.0
           1.0 580.0
           end
  wtptE635 24 6.5 4
           40000 94.8
           41000 1.0
           50000 1.2
           26000 3.0
           1.0 580.0
           end

end comp

read celldata
latticecell triangpitch
pitch=1.275 11
fuel=0.78 1
cladd=0.91 21 end
end celldata
end

=newt
Vypocet souboru

read parm
drawit=yes
echo=yes
inners=3
epsilon=1e-3
converge=mix
cmfd=3
xycmfd=11
timed=yes
xnlib=44
prtflux=no
nazim=3
npolar=2
end parm

read materials
mix=1 pn=1 com='palivo 4%U235' end
mix=11 pn=2 com='moderator lehka H20' end
mix=21 pn=1 com='pokryti E110' end
mix=24 pn=1 com='pokryti E635' end
end materials

read geometry
'palivovy prutek 4% obohaceni
unit 1
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.455
cylinder 30 0.39
media 1 1 30

media 21 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'vodici trubka
unit 8
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.63
cylinder 30 0.545
media 11 1 30
media 24 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'centralni trubka
unit 9
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.6375
cylinder 30 0.5375
media 11 1 30
media 24 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

global unit 100
rhexprism 101 11.8
array 1 101 place 11 11 0 0
media 11 1 101
boundary 101 44 44
end geometry

read array
ara=1
typ=shexagonal
nux=21
nuy=21
fill
0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0
0 0 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 0 0 0
0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0
0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 0
1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0
1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 9 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 0
0 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0
0 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0
0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0
0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0
0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0
0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0
end fill
end array
read bounds
all=refl
end bounds
end

```

Obrázek A.1.: Vstupní soubor pro výpočet charakteristických hodnot palivového souboru A40 s kódem NEWT.

```

=t-xsec parm=( )
Palivo VVER-1000_P44G6_56g
v7.1-56n

read alias
$palivo 1 2 3 end
$moderator 11 12 13 end
$pokryti 21 22 23 end
end alias

read comp
uo2 1 den=9.905 1.0 850
    92238 95.6
    92235 4.4 end

uo2 2 den=9.905 1.0 850
    92238 96
    92235 4 end

uo2 3 den=9.905 0.95 850
    92238 96.4
    92235 3.6 end

gd2o3 3 den=6.86 0.05 850 end

h2o $moderator den=0.7255 1.0 580 end

wtptE110 $pokryti 6.5 2
    41000 1.0
    40000 99.0
    1.0 580.0
    end
wtptE635 24 6.5 4
    40000 94.8
    41000 1.0
    50000 1.2
    26000 3.0
    1.0 580.0
    end
end comp

read celldata
latticecell triangpitch
pitch=1.275 $moderator
fueld=0.78 $palivo
cladd=0.91 $pokryti end
end celldata
end

=newt
Vypocet souboru

read parm
drawit=yes
echo=yes
inners=3
epsilon=1e-3
converge=mix
cmfd=3
xycmfd=11
timed=yes
xnlib=44
prtflux=no
nazim=3
npolar=2
end parm

read materials
mix=1 pn=1 com='palivo 4,4%U235' end
mix=2 pn=1 com='palivo 4%U235' end
mix=3 pn=1 com='palivo s 5%Gd203' end
mix=11 pn=2 com='moderator lehka H20' end
mix=21 pn=1 com='pokryti E110' end
mix=24 pn=1 com='pokryti E635' end
end materials

read geometry
'palivovy proutek 4,4% obohaceni
unit 1
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.455
cylinder 30 0.39
media 1 1 30

media 21 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'palivovy proutek 4% obohaceni
unit 2
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.455
cylinder 30 0.39
media 2 1 30
media 21 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'palivovy proutek 3,6% obohaceni a 5% Gd2O3
unit 3
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.455
cylinder 30 0.39
media 3 1 30
media 21 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'vodici trubka
unit 8
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.63
cylinder 30 0.545
media 11 1 30
media 24 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'centralni trubka
unit 9
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.6375
cylinder 30 0.5375
media 11 1 30
media 24 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

global unit 100
rhexp Prism 101 11.8
array 1 101 place 11 11 0 0
media 11 1 101
boundary 101 44 44
end geometry

read array
ara=1
typ=hexagonal
nux=21
nuy=21
fill
0 0 0 0 0 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 2 1 3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 3 1 2 0 0 0 0 0
0 0 0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0 0 0
0 0 0 2 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0
0 0 2 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 2 0 0 0
0 0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0
0 2 1 1 1 8 1 1 1 8 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 2 0 0 0
0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 2 0 0
2 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0
2 1 3 1 1 8 1 1 1 1 9 1 1 1 1 8 1 1 3 1 2
2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 2 0
0 2 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0
0 2 1 1 1 8 1 1 1 1 8 1 1 1 8 1 1 1 1 2 0 0
0 0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0
0 0 2 1 1 1 1 8 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 2 0 0 0
0 0 0 2 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0
0 0 0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0 0
0 0 0 0 2 1 3 1 1 1 1 1 1 1 3 1 2 0 0 0 0
0 0 0 0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 0 0 0 0 0
end fill
end array
read bounds
all=refl
end bounds
end

```

Obrázek A.2.: Vstupní soubor pro výpočet charakteristických hodnot palivového souboru P44G6 s kódem NEWT

```

=t-xsec parm=( )
Palivo VVER-1000_P47E18_56g
v7.1-56n

read alias
$palivo 1 2 3 end
$moderator 11 12 13 end
$pokryti 21 22 23 end
end alias

read comp
uo2 1 den=9.905 1.0 850
    92238 95.3
    92235 4.7 end

uo2 2 den=9.905 1.0 850
    92238 95.6
    92235 4.4 end

uo2 3 den=9.905 0.95 850
    92238 96.4
    92235 3.6 end

gd2o3 3 den=6.86 0.05 850 end

h2o $moderator den=0.7255 1.0 580 end

wtptE110 $pokryti 6.5 2
    41000 1.0
    40000 99.0
    1.0 580.0
    end
wtptE635 24 6.5 4
    40000 94.8
    41000 1.0
    50000 1.2
    26000 3.0
    1.0 580.0
    end
end comp

read celldata
latticecell triangpitch
pitch=1.275 $moderator
fueld=0.78 $palivo
cladd=0.91 $pokryti end
end celldata
end

=newt
Vypocet souboru

read parm
drawit=yes
echo=yes
inners=3
epsilon=1e-3
converge=mix
cmfd=3
xycmfd=11
timed=yes
xnlib=44
prtflux=yes
nazim=3
npolar=2
end parm

read materials
mix=1 pn=1 com='palivo 4,7%U235' end
mix=2 pn=1 com='palivo 4,4%U235' end
mix=3 pn=1 com='palivo s 5%Gd203' end
mix=11 pn=2 com='moderator lehka H20' end
mix=21 pn=1 com='pokryti E110' end
mix=24 pn=1 com='pokryti E635' end
end materials

read geometry
'palivovy prutek 4,7% obohaceni
unit 1
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.455
cylinder 30 0.39
media 1 1 30

media 21 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'palivovy prutek 4,4% obohaceni
unit 2
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.455
cylinder 30 0.39
media 2 1 30
media 21 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'palivovy prutek 3,6% obohaceni a 5% Gd2O3
unit 3
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.455
cylinder 30 0.39
media 3 1 30
media 21 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'vodici trubka
unit 8
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.63
cylinder 30 0.545
media 11 1 30
media 24 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'centralni trubka
unit 9
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.6375
cylinder 30 0.5375
media 11 1 30
media 24 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

global unit 100
rhexprism 101 11.8
array 1 101 place 11 11 0 0
media 11 1 101
boundary 101 44 44
end geometry

read array
ara=1
typ=hexagonal
nux=21
nuy=21
fill
0 0 0 0 0 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 2 1 3 1 1 1 1 3 1 1 1 1 3 1 1 2 0 0 0 0 0
0 0 0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0 0 0
0 0 0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0 0
0 0 2 1 1 1 1 8 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0 0
0 0 2 1 3 1 1 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 1 3 1 2 0 0 0
0 2 1 1 1 8 1 3 1 8 1 1 1 1 1 8 1 1 1 2 0 0 0
0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 2 0
2 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 1 2 0
2 1 3 1 1 8 1 1 1 1 9 1 1 1 1 8 1 1 3 1 2
2 1 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 2 0
0 2 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0
0 2 1 1 1 8 1 1 1 1 8 1 3 1 8 1 1 1 1 2 0 0
0 0 2 1 3 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 1 1 3 1 2 0 0
0 0 2 1 1 1 1 8 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 2 0 0 0
0 0 0 2 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0
0 0 0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0 0
0 0 0 0 2 1 3 1 1 1 3 1 1 1 3 1 2 0 0 0 0
0 0 0 0 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 0 0 0 0
0 0 0 0 0 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 0 0 0 0 0
end fill
end array
read bounds
all=refl
end bounds
end

```

Obrázek A.3.: Vstupní soubor pro výpočet charakteristických hodnot palivového souboru P47E18 s kódem NEWT

```

=sampler

read parameters
n_samples=100
library="v7.1-56n"
perturb_xs = no
perturb_geometry = yes
end parameters

read case[A40]
sequence=t-xsec parm=( )
Palivo VVER=1000_A40_56g
v7.1-56n

read comp
uo2 1 den=10.433 1.0 850
    92238 #{obohaceni8}
    92235 #{obohaceni5} end

h2o 11 den=0.7255 1.0 580 end

he 31 den=0.001132 1.0 850.0 end

wtptE110 21 6.5 2
    41000 1.0
    40000 99.0
    1.0 580.0
    end
wtptE635 24 6.5 4
    40000 94.8
    41000 1.0
    50000 1.2
    26000 3.0
    1.0 580.0
    end

end comp

read celldata
latticecell triangpitch
pitch=1.275 11
fuel=0.76 1
gapd=0.78 31
cladd=0.91 21 end
end celldata
end sequence

sequence=newt
Vypocet souboru

read parm
drawit=no
echo=yes
inners=3
epsilon=le-3
converge=mix
cmfd=3
xycmfd=11
timed=yes
xplib=44
prtflux=no
nazim=3
npolar=2
end parm

read materials
mix=1 pn=1 com='palivo 4%U235' end
mix=11 pn=2 com='moderator lehka H20' end
mix=21 pn=1 com='pokryti E110' end
mix=24 pn=1 com='pokryti E635' end
mix=31 pn=1 com='helium' end
end materials

read geometry
'palivovy proutek 4% obohaceni
unit 1
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.455
cylinder 30 0.39
cylinder 40 0.38
media 1 1 40
media 31 1 30 -40
media 21 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'vodici trubka
unit 8
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.63
cylinder 30 0.545
media 11 1 30
media 24 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'centralni trubka
unit 9
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.6375
cylinder 30 0.5375
media 11 1 30
media 24 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

global unit 100
rhexprism 101 11.8
array 1 101 place 11 11 0 0
media 11 1 101
boundary 101 44 44
end geometry

read array
ara=1
typ=shexagonal
nux=21
nuy=21
fill
0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0
0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0
0 0 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0
0 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0
0 1 1 1 1 8 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0
0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0
1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0
1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 9 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0
0 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0
0 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 0 0
0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0
0 0 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0
0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0
0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0
    end fill
end array

read bounds
all=refl
end bounds
end sequence
end case

read variable[obohaceni5]
distribution=normal
value=4
stddev=0.05
minimum=3.95
maximum=4.05
cases=A40 end
end variable

read variable[obohaceni8]
distribution=expression
expression="100-obohaceni5"
cases=A40 end
end variable

read response[keff]
type = grep
regex = "k-eff =[:space:]]+ : scale . number:"
regex = ": scale . number:"
end response

end

```

Obrázek A.4.: Vstupní soubor pro výpočet nejistot koeficientu násobení palivového souboru A40 v závislosti na nejistotách obohacení paliva.

```

=sampler

read parameters
n_samples=100
library="v7.1-56n"
perturb_xs = no
perturb_geometry = yes
end parameters

read case[A40]
sequence=t-xsec parm=( )
Palivo VVER-1000_A40_56g
v7.1-56n

read comp
  uo2 1 den=10.433 1.0 850
      92238 96
      92235 4 end

  h2o 11 den=0.7255 1.0 580 end

  he 31 den=0.001132 1.0 850.0 end

  wtptE110 21 6.5 2
           41000 1.0
           40000 99.0
           1.0 580.0
           end
  wtptE635 24 6.5 4
           40000 94.8
           41000 1.0
           50000 1.2
           26000 3.0
           1.0 580.0
           end
end comp

read celldata
latticecell triangpitch
pitch=1.275 11
fuelr=#{rozmer} 1
gapr=0.39 31
cladr=0.455 21 end
end celldata
end sequence

sequence=newt
Vypocet souboru

read parm
drawit=no
echo=yes
inners=3
epsilon=1e-3
converge=mix
cmfd=3
xycmfd=11
timed=yes
xplib=44
prtflux=no
nazim=3
npolar=2
cell_tol=1.0e-8
end parm

read materials
mix=1 pn=1 com='palivo 4%U235' end
mix=11 pn=2 com='moderator lehka H20' end
mix=21 pn=1 com='pokryti E110' end
mix=24 pn=1 com='pokryti E635' end
mix=31 pn=1 com='helium' end
end materials

read geometry
'palivovy proutek 4% obohaceni
unit 1
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.455
cylinder 30 0.39
cylinder 40 #{rozmer}
media 1 1 40
media 31 1 30 -40

media 21 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'vodici trubka
unit 8
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.63
cylinder 30 0.545
media 11 1 30
media 24 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

'centralni trubka
unit 9
hexprism 10 0.6375
cylinder 20 0.6375
cylinder 30 0.5375
media 11 1 30
media 24 1 20 -30
media 11 1 10 -20
boundary 10

global unit 100
rhexprism 101 11.8
array 1 101 place 11 11 0 0
media 11 1 101
boundary 101 44 44
end geometry

read array
ara=1
typ=shexagonal
nux=21
nuy=21
fill
0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0
0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0
0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0
1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0
1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 9 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 0
0 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0
0 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 0 0
0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0
0 0 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0
0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 8 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0
0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0
end fill
end array

read bounds
all=refl
end bounds
end sequence
end case

read variable[rozmer]
distribution=normal
value=0.38
stddev=0.001
minimum=0.379
maximum=0.381
cases=A40 end
end variable

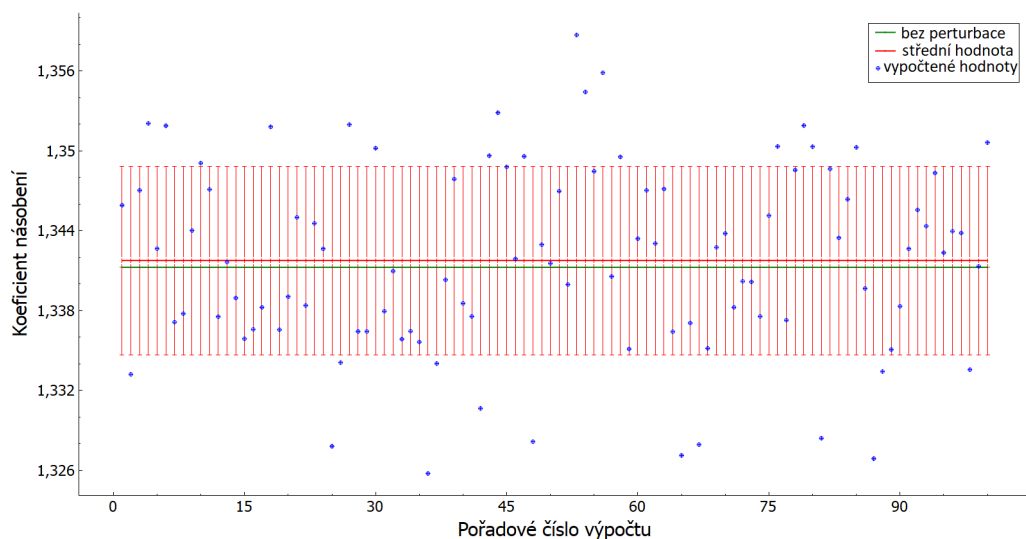
read response[keff]
type = grep
regexp = "k-eff =[:space:]]+: scale.number:"
regexp = ": scale.number:"
end response

end

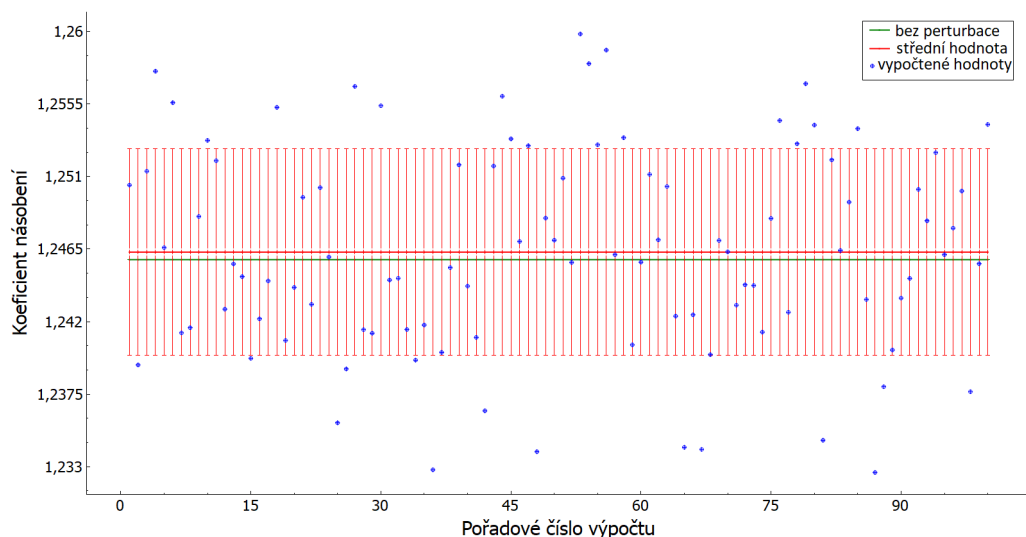
```

Obrázek A.5.: Vstupní soubor pro výpočet nejistoty koeficientu násobení palivového souboru A40 v závislosti na nejistotách rozměru palivové pelety.

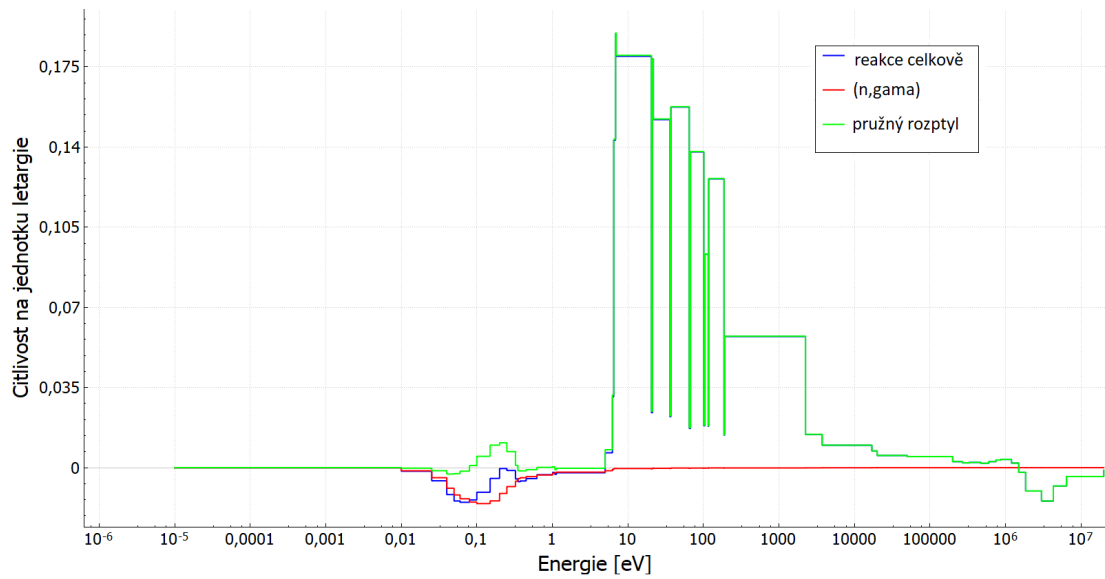
B. Příloha: Grafy



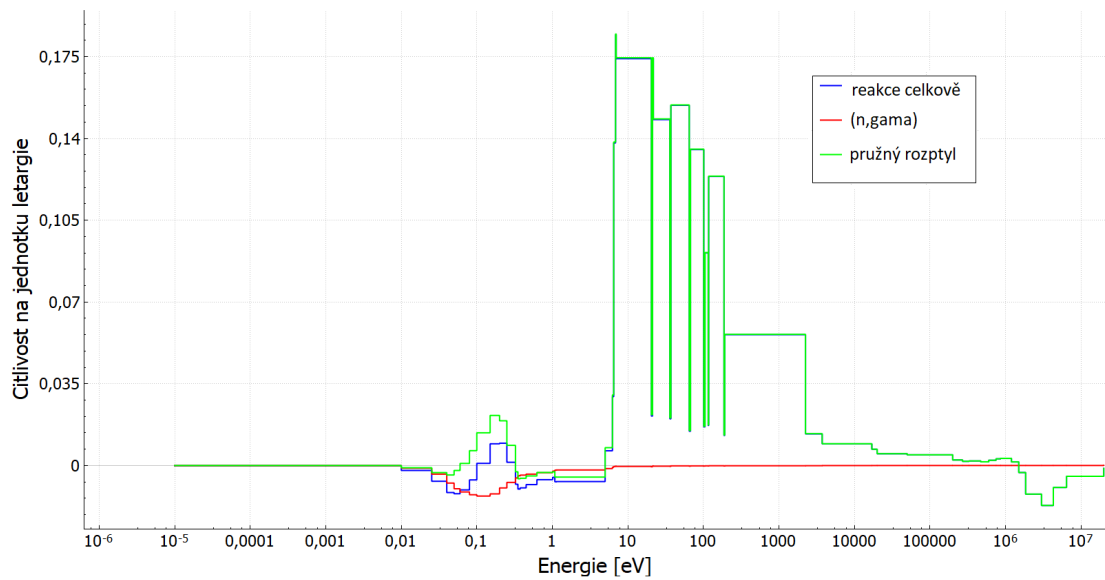
Obrázek B.1.: Graf výpočtu směrodatné odchytky koeficientu násobení palivového souboru P44G6 pomocí 100 vzorků výpočtu kódem Sampler. Je vykreslena hodnota koeficientu násobení bez perturbace a jeho střední hodnota spolu se směrodatnou odchylkou a jednotlivými vypočtenými hodnotami.



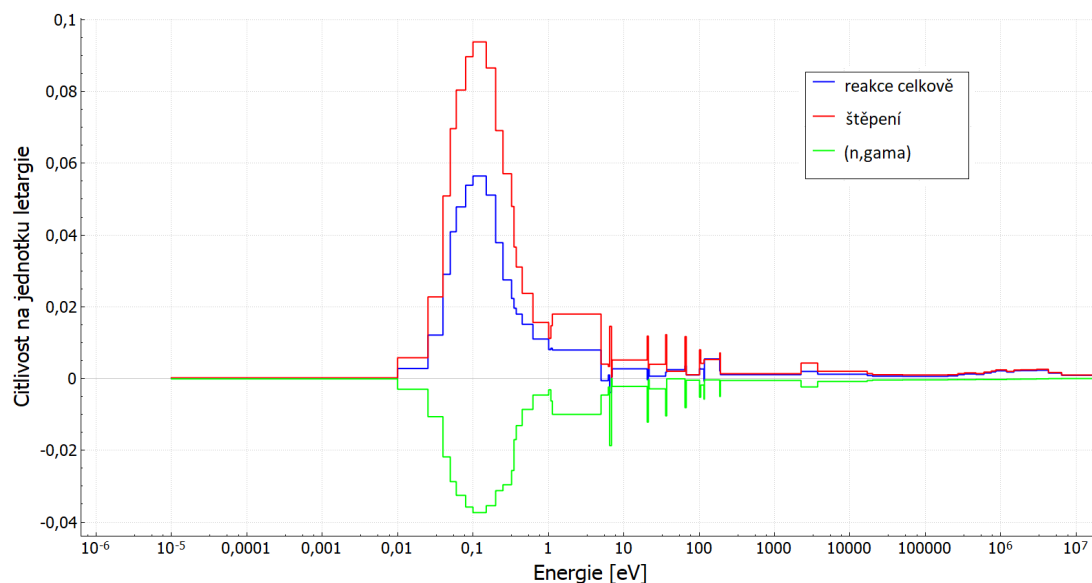
Obrázek B.2.: Graf výpočtu směrodatné odchytky koeficientu násobení palivového souboru P47E18 pomocí 100 vzorků výpočtu kódem Sampler. Je vykreslena hodnota koeficientu násobení bez perturbace a jeho střední hodnota spolu se směrodatnou odchylkou a jednotlivými vypočtenými hodnotami.



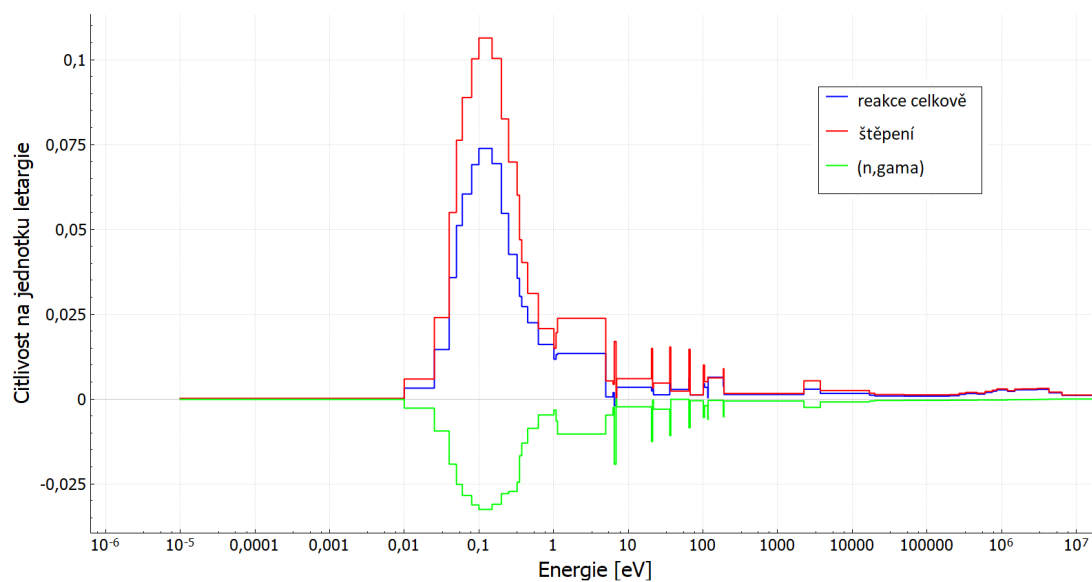
Obrázek B.3.: Spektrum citlivostí koeficientu násobení palivového souboru P44G6 pro nejvýznamnější reakce na izotopu ^1H . Data vypočtena kódem TSUNAMI-2D a vykreslena pomocí uživatelského rozhraní Fulcrum.



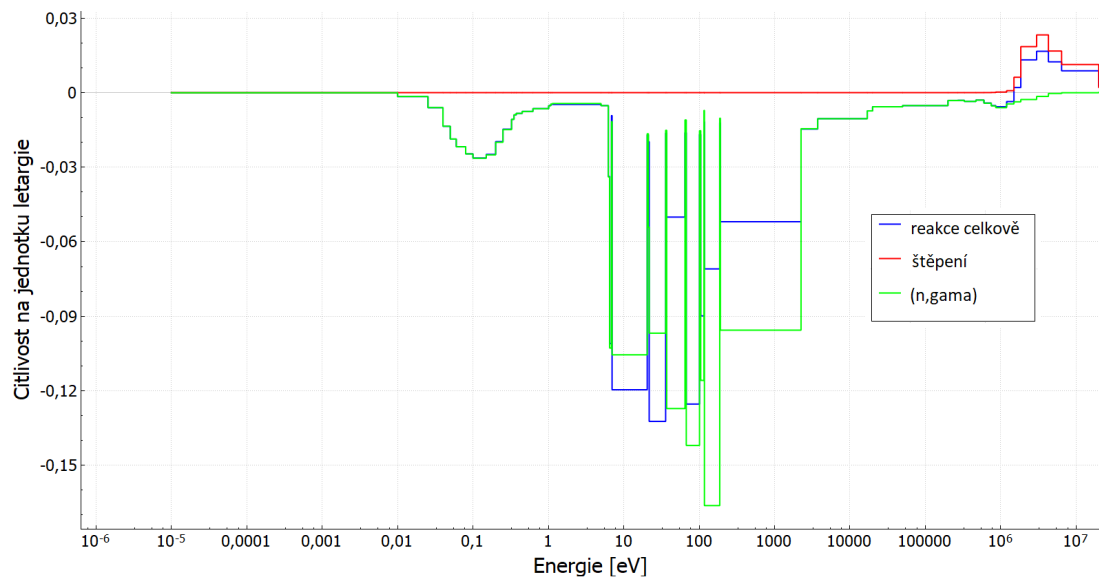
Obrázek B.4.: Spektrum citlivostí koeficientu násobení palivového souboru P47E18 pro nejvýznamnější reakce na izotopu ^1H . Data vypočtena kódem TSUNAMI-2D a vykreslena pomocí uživatelského rozhraní Fulcrum.



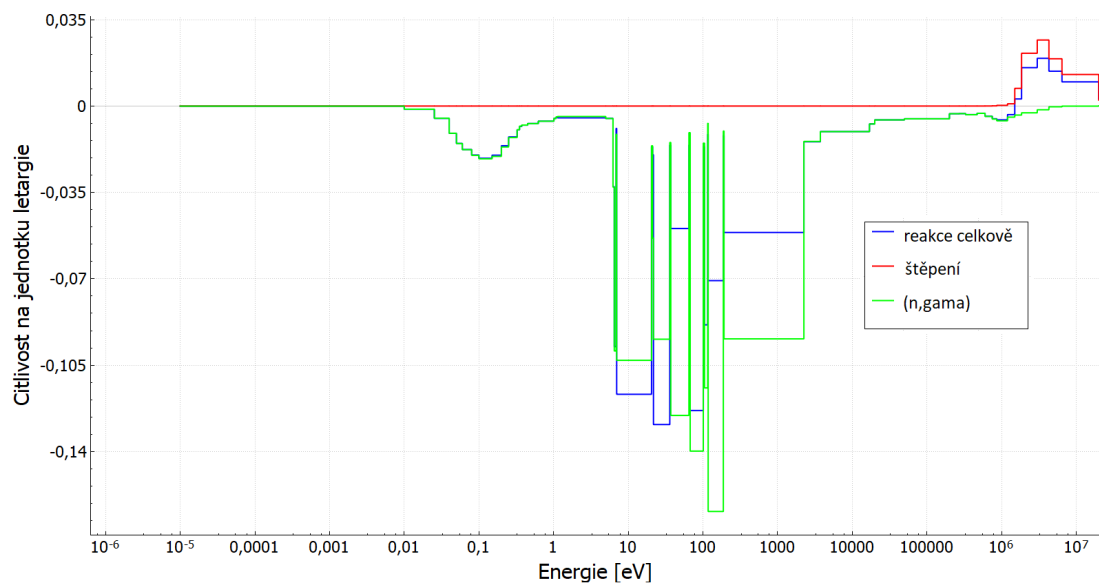
Obrázek B.5.: Spektrum citlivostí koeficientu násobení palivového souboru P44G6 pro nejvýznamnější reakce na izotopu ^{235}U . Data vypočtena kódem TSUNAMI-2D a vykreslena pomocí uživatelského rozhraní Fulcrum.



Obrázek B.6.: Spektrum citlivostí koeficientu násobení palivového souboru P47E18 pro nejvýznamnější reakce na izotopu ^{235}U . Data vypočtena kódem TSUNAMI-2D a vykreslena pomocí uživatelského rozhraní Fulcrum.



Obrázek B.7.: Spektrum citlivostí koeficientu násobení palivového souboru P44G6 pro nejvýznamnější reakce na izotopu ^{238}U . Data vypočtena kódem TSUNAMI-2D a vykreslena pomocí uživatelského rozhraní Fulcrum.



Obrázek B.8.: Spektrum citlivostí koeficientu násobení palivového souboru P44G6 pro nejvýznamnější reakce na izotopu ^{238}U . Data vypočtena kódem TSUNAMI-2D a vykreslena pomocí uživatelského rozhraní Fulcrum.