



Fakulta elektrotechnická
Katedra elektroenergetiky a ekologie

DIZERTAČNÍ PRÁCE

Zvyšování účinnosti jaderného paliva použitím vyhořívajících absorbátorů

Autor práce: Ing. Martin Lovecký
Školitel: Doc. Ing. Radek Škoda, Ph.D.

Plzeň 2016

Abstrakt

Práce popisuje vývoj, validaci a použití výpočetního kódu $U_W B_1$, určeného pro rychlý výpočet vyhořívání jaderného paliva v oblasti výzkumu vyhořívajících absorbátorů. Míra účinnosti vyhořívajících absorbátorů ve formě prvků přírodního složení, nuklidů a jejich kombinace v palivu nebo jeho pokrytí je srovnána podle materiálové metriky oceňující vlastnosti vyhořívajících absorbátorů, především schopnost kompenzovat počáteční přebytek reaktivity, minimalizovat zbytkovou otravu a ovlivňovat reaktivitu paliva i pro vyšší vyhoření paliva. Závěrečná diskuze se zaměřuje na materiály vhodné pro vyhořívající absorbátory, z nichž lze kromě doposud studovaných materiálů B a vzácných zemin jmenovat především Li, Pa, Ir, In a Re. V případě Li je doporučeno jeho obohacování izotopem Li-6. Výsledky výzkumu jsou použitelné pro další technicko-ekonomické analýzy výběru příměsí materiálů jaderného paliva pro zvýšení jeho využití a bezpečnosti.

Klíčová slova

jaderné palivo, vyhořívající absorbátor, přebytek reaktivity, vyhořívání, $U_W B_1$

Abstract

Lovecký, Martin. *Increasing the efficiency of nuclear fuel using burnable absorbers [Zvyšování účinnosti jaderného paliva použitím vyhořívajících absorbátorů]*. Pilsen, 2016. Doctoral dissertation thesis (in Czech). University of West Bohemia. Faculty of Electrical Engineering. Department of Electric power engineering and Ecology. Supervisor: Radek Škoda

The thesis describes the development, validation and use of $U_W B_1$ code intended for fast calculation of nuclear fuel depletion in burnable absorber research. The degree of effectiveness of burnable absorbers in the form of natural abundance elements, nuclides and their combinations are compared on metric evaluating characteristic properties of burnable absorbers, namely the initial reactivity compensation, residual poisoning minimization and the influence of the fuel reactivity for higher fuel burnups. Final discussion focus on materials suitable for burnable absorbers and beside previously studied B and rare earth metals, Li, Pa, Ir, In and Re are recommended, as well as perspective of Li-6 enrichment. The research results are intended for the application in other technical-economical analyses of the selection of added materials in the nuclear fuel for increasing the fuel efficiency and safety.

Keywords

nuclear fuel, burnable absorber, reactivity excess, depletion, $U_W B_1$

Prohlášení

Předkládám tímto k posouzení a obhajobě dizertační práci, zpracovanou na závěr studia na Fakultě elektrotechnické Západočeské univerzity v Plzni.

Prohlašuji, že jsem svou práci vypracoval samostatně pod vedením vedoucího dizertační práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou všechny citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury na konci práce. Jako autor uvedené dizertační práce dále prohlašuji, že v souvislosti s vytvořením této práce jsem neporušil autorská práva třetích osob, zejména jsem nezasáhl nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a jsem si plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona č. 121/2000 Sb., včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení § 270 trestního zákona č. 40/2009 Sb.

Také prohlašuji, že veškerý software, použitý při řešení této dizertační práce, je legální.

V Plzni dne 25. srpna 2016

Ing. Martin Lovecký

.....

Podpis

Poděkování

Rád bych tímto poděkoval svému školiteli doc. Ing. Radku Škodovi, Ph.D., za vedení práce, konzultace a podporu při studiu a stážích.

Dále bych rád poděkoval kolegům ze ZČU v Plzni, především Ing. Janě Jiříčkové, Ph.D. a prof. Ing. Zdeňku Vostrackému, DrSc., za pomoc v začátcích studia a podporu během studia. Rád bych také poděkoval kolegům ze skupiny prof. Paul K. Chana, Ph.D. z Royal Military College of Canada za společnou práci na výpočtech s palivem CANDU a za čas strávený při stáži na jejich univerzitě. Stejně poděkování patří kolegům ze skupiny Cable Kurwitze, Ph.D. z Texas A&M University a kolegům ze skupiny prof. Vinoda Kumara Vermy z Guru Gobind Singh Indraprastha University. Za konzultace na téma Monte Carlo výpočtů bych rád poděkoval RNDr. Janu Kynclovi, CSc. z ÚJV Řež. Další díky patří mým kolegům z odboru Výpočty společnosti ŠKODA JS za podporu při studiu a řešení problému z oblasti jaderného inženýrství.

V poslední řadě bych rád poděkoval za podporu při studiu a pomoc při zpracování textu PhDr. Bc. Blance Gruberové, Ph.D.

Tato práce vznikla s podporou projektu Technologické agentury České republiky v rámci centra kompetence č. TE01020455 CANUT – Centrum pokročilých jaderných technologií.

Obsah

Seznam obrázků	ix
Seznam tabulek	xi
Seznam symbolů a zkratk	xii
1 Úvod	1
2 Současný stav vývoje	3
2.1 Jaderné palivo	3
2.2 Veličiny a rovnice popisující provoz paliva	4
2.3 Řešení Batemanových rovnic	8
2.4 Řešení transportní rovnice	10
2.5 Schéma vyhořívání	12
2.6 Knihovny jaderných dat	14
2.7 Výpočetní kódy	16
2.8 Vyhořívající absorbátory	17
2.9 Rešerše literatury	21
3 Cíle dizertační práce	30
4 Metodika řešení	32
4.1 Řešení Batemanových rovnic v $U_W B_1$	32
4.1.1 Přejíchodová matice	32
4.1.2 Hustota toku neutronů	35
4.1.3 Numerický model	36
4.2 Řešení transportní rovnice v $U_W B_1$	39
4.2.1 Monte Carlo simulace	39
4.2.2 Účinné průřezy	40
4.2.3 Jaderné reakce	43
4.2.4 Implicitní záchyt	45
4.2.5 Výběr nuklidu a reakce	46
4.2.6 Banka neutronů	47

4.2.7	Transport částic	48
4.2.8	Generátor náhodných čísel	49
4.3	Schéma vyhořívání 2sPC	51
4.3.1	První stupeň metody	52
4.3.2	Druhý stupeň metody	53
4.3.3	Algoritmus metody	54
4.4	Datové knihovny $U_W B_1$	56
4.4.1	Algebraické knihovny	56
4.4.2	Knihovna charakteristik nuklidů	56
4.4.3	Knihovny solveru inventáře	56
4.4.4	Knihovny Monte Carlo solveru	58
4.5	Vstup a výstup $U_W B_1$	60
4.5.1	Vstupní soubor $U_W B_1$	60
4.5.2	Výstupní soubor $U_W B_1$	64
4.6	Validace kódu $U_W B_1$	66
5	Přehled vlastních výsledků	74
5.1	Parametrická studie rychlým kódem $U_W B_1$	74
5.1.1	Výpočetní varianty	74
5.1.2	Absorpční schopnosti materiálů	76
5.1.3	Materiálová metrika MM6	82
5.1.4	Materiálová metrika MM9	92
5.1.5	Shluková analýza	94
5.2	Ověření vybraných variant kódem SERPENT	96
5.2.1	Palivová buňka	96
5.2.2	Palivový soubor	107
5.3	Shrnutí výsledků	109
6	Přínosy práce a směry dalšího výzkumu	111
7	Závěr	113
	Reference, použitá literatura	114
	Přílohy	122
A	Publikace autora	122
A.1	Články v impaktovaných časopisech	122
A.2	Články v recenzovaných časopisech	122
A.3	Příspěvky na mezinárodních konferencích	123
A.4	Příspěvky na studentských konferencích	124
A.5	Výzkumné zprávy mimo oblast dizertační práce	124

B	Vstupní a výstupní soubory $U_W B_1$	131
B.1	Vstupní soubor $U_W B_1$	131
B.2	Výstupní soubor $U_W B_1$	133
C	Materiálové metriky	137
C.1	Materiálová metrika MM6	137
C.2	Materiálová metrika MM9	161

Seznam obrázků

2.1	Aktivní zóna jaderného reaktoru.	4
2.2	Příklad účinného průřezu a hustoty toku neutronů v jaderném palivu.	6
2.3	Příklad štěpného spektra neutronů a výtěžku štěpných produktů.	15
2.4	Jednoduchý model vyhořívání paliva s vyhořívajícím absorbátorem.	18
2.5	Účinné průřezy nejpoužívanějších vyhořívajících absorbátorů.	20
2.6	Vyhořívání současného paliva VVER s vyhořívajícími absorbátory.	21
2.7	Vyhořívající absorbátory v literatuře.	22
4.1	Řídkost přechodové matice $U_W B_1$	36
4.2	Hustota toku neutronů PWR.	37
4.3	Účinné průřezy pro hlavní nuklidy (4308 grup $U_W B_1$).	41
4.4	Pohyb jednoho neutronu během simulace.	49
4.5	Místa srážek jedné generace neutronů.	50
4.6	Zrychlení transportního výpočtu při paralelizaci.	51
4.7	Diagram kódu $U_W B_1$	54
4.8	Validace $U_W B_1$ – geometrie výpočetních modelů.	67
4.9	Validace $U_W B_1$ – srovnání rychlosti kódů.	69
4.10	Validace $U_W B_1$ – koeficient násobení paliva CANDU.	70
4.11	Validace $U_W B_1$ – koeficient násobení paliva VVER.	71
4.12	Validace $U_W B_1$ – srovnání koncentrací nuklidů.	73
5.1	CANDU – vlastnosti prvků jako vyhořívajících absorbátorů při obsahu 1.0 wt%.	79
5.2	VVER – vlastnosti prvků jako vyhořívajících absorbátorů při obsahu 1.0 wt%.	80
5.3	SFR – vlastnosti prvků jako vyhořívajících absorbátorů při obsahu 1.0 wt%.	81
5.4	Definice parametrů pro metriku MM6.	85
5.5	Určení optimální pozice pro určení vah parametrů metriky MM6.	85
5.6	Parametry metriky MM6 pro palivo CANDU a VVER.	86
5.7	Metrika MM6 pro prvky VA v palivu CANDU.	87
5.8	Metrika MM6 pro prvky VA v palivu VVER.	88
5.9	Srovnání metriky MM6 podle typu paliva.	89

5.10	Metrika MM9 pro materiály vyhořívajících absorbátorů.	93
5.11	Vyhořívání paliva s 5 vybranými VA pro 25% kompenzaci reaktivity. . . .	99
5.12	Počátek vyhořívání paliva CANDU s 5 vybranými VA pro 25% kompenzaci reaktivity.	100
5.13	Počátek vyhořívání paliva VVER s 5 vybranými VA pro 25% kompenzaci reaktivity.	101
5.14	Vliv umístění VA v palivu nebo pokrytí na vyhořívání.	102
5.15	Vliv velikosti počáteční kompenzace na vyhořívání.	103
5.16	Počátek vyhořívání paliv VVER a CANDU s 10 vybranými nuklidy VA. . .	104
5.17	Počátek vyhořívání paliv VVER a CANDU s vybranými dvojicemi prvků VA.	105
5.18	Vyhořívání paliva SFR s vybranými dvojicemi prvků VA.	106
5.19	Kód SERPENT – geometrie výpočetních modelů.	108
5.20	Vliv přiblížení nekonečné mříže palivových buněk na vyhořívání.	108

Seznam tabulek

2.1	Eulerovo predikční schéma vyhořívání.	13
2.2	Eulerovo prediktor-korektor schéma vyhořívání.	14
2.3	Schéma vyhořívání EPC (extended predictor-corrector).	14
2.4	Neutronické parametry vybraných vyhořívajících absorbátorů.	27
4.1	Jaderné reakce uvažované pro přechodovou matici $U_W B_1$	34
4.2	Rozpadové módy uvažované pro $U_W B_1$	35
4.3	Parametry metody CRAM.	38
4.4	Energetická struktura $U_W B_1$	42
4.5	Absorpční reakce MT=101.	45
4.6	Číslování jaderných reakcí Monte Carlo solveru $U_W B_1$	47
4.7	Algoritmus schématu vyhořívání 2sPC.	55
4.8	Proměnné ve vstupním souboru $U_W B_1$	62
4.9	Popis vstupního souboru $U_W B_1$	63
4.10	Validace $U_W B_1$ – koeficient násobení čerstvého paliva.	72
5.1	Počet výpočetních variant fáze 2 parametrické úlohy vyhořívání paliva. . .	77
5.2	Počet výpočetních variant fáze 4 parametrické úlohy vyhořívání paliva. . .	78
5.3	Doplňkové parametry vzorce metriky MM6.	84
5.4	Metrika MM6 pro VA v palivu pro nejvhodnější kombinaci prvků.	90
5.5	Metrika MM6 pro VA v pokrytí pro nejvhodnější kombinaci prvků.	91
5.6	Metrika MM9 pro nejvhodnější materiály vyhořívajících absorbátorů. . . .	93
5.7	Shluková analýza prvků jako vyhořívajících absorbátorů	95
5.8	Kompenzace reaktivity 1.0 wt% VA v palivu VVER-5.0 na počátku a konci vyhořívání v modelu palivové buňky kódu SERPENT.	98
5.9	Vliv VA na teplotní koeficienty reaktivity paliva (F), chladiva (C), mode- rátoru (M) a dutinového koeficientu reaktivity.	107
5.10	Vliv VA na nevyrovnání výkonu v palivovém souboru.	108
C.1	Metrika MM6 pro dvojici prvků v palivu VVER-5.0 (řazení podle hmotnosti).137	
C.2	Metrika MM6 pro dvojici prvků v palivu VVER-5.0 (řazení podle hodnoty MM6).	145

C.3	Metrika MM6 pro dvojici prvků v pokrytí VVER-5.0 (řazení podle hmotnosti).	153
C.4	Metrika MM6 pro dvojici prvků v pokrytí VVER-5.0 (řazení podle hodnoty MM6).	156
C.5	Metrika MM9 pro vyhořívající absorbátory (prvky).	161
C.6	Metrika MM9 pro vyhořívající absorbátory (nuklidy).	161

Seznam symbolů a zkratek

at%	Atomová procenta.
AZ	Aktivní zóna.
BPRA	Burnable Poison Rod Assembly. Typ vyhořívajícího absorbátoru.
BWR	Boiling Water Reactor. Varný reaktor.
GFR	Gas Cooled Fast Reactor. Plynem chlazený rychlý reaktor.
HM	Heavy metal. Težký kov (U, Pu apod.).
IFBA	Integral Fuel Burnable Absorber. Typ vyhořívajícího absorbátoru.
LFR	Lead Cooled Fast Reactor. Olovem chlazený rychlý reaktor.
MC	Monte Carlo.
MOX	Mixed Oxide Fuel. Směsné uran-plutoniové oxidové palivo.
MTU	Metric Ton of Uranium. Tuna uranu.
PP	Palivový proutek.
PS	Palivový soubor.
PWR	Pressurized Water Reactor. Tlakovodní reaktor.
SFR	Sodium Cooled Fast Reactor. Sodíkem chlazený rychlý reaktor.
VA	Vyhořívající absorbátor.
WABA	Wet Annular Burnable Absorber. Typ vyhořívajícího absorbátoru.
wt%	Váhová procenta.
α	Teplotní koeficient reaktivity [K^{-1}].
λ	Přeměnová konstanta [s^{-1}].
ν	Multiplikace neutronů při štěpení [-].
ρ	Reaktivita [-].
σ	Mikroskopický účinný průřez [b].
Σ	Makroskopický účinný průřez [m^{-1}].
φ	Hustota toku neutronů [$m^{-2}s^{-1}$].
χ	Štěpné spektrum neutronů [-].
ψ	Úhlová hustota toku neutronů [$m^{-2}s^{-1}sr^{-1}$].
B	Vyhoření [MWd/MTU].
E	Energie [eV].
k_{eff}	Efektivní koeficient násobení [-].

N	Hustota jader [m^{-3}].
R	Reakční rychlost [$\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}$].
Z	Atomové číslo prvku [-].
ZAID	Číslo nuklidu [$10000Z + 10A + m$].

1

Úvod

Jaderné palivo představuje cenný zdroj energie, jehož výroba je spojena s vysokými technickými a ekonomickými požadavky. Během provozu jaderného reaktoru je v palivu štěpením aktinidů uvolňována tepelná energie a zároveň se v něm akumulují štěpné produkty, jejichž koncentrace se po určité době provozu zvýší natolik, že je potřeba palivo vyměnit. V zájmu provozovatelů jaderných elektráren je maximalizace doby provozu jaderného paliva v reaktoru.

Reaktivita jaderného paliva popisuje míru schopnosti udržovat štěpnou řetězovou reakci. Při kompenzaci počátečního přebytku reaktivity vyhořívajícími absorbátory dochází k nižšímu počtu štěpení jader uranu, neutrony jsou absorbovány ve vyhořívajícím absorbátoru. V průběhu provozu se snižuje koncentrace vyhořívajícího absorbátoru a reaktivita paliva se blíží ideálnímu konstantnímu průběhu. Jádra uranu, která nebyla z důvodu použití vyhořívajícího absorbátoru rozštěpena na počátku provozu, je možno rozštěpit v dalších fázích provozu paliva a tím se prodlužuje doba provozu jaderného reaktoru.

Většina energetických jaderných reaktorů využívá jako palivo obohacený uran ve formě keramického oxidu. Minimální obohacení je dáno neutronově-fyzikálními výpočty aktivní zóny reaktoru a pohybuje se okolo 3 wt%. Použitím vyššího obohacení je možné zvýšit dobu provozu paliva v reaktoru, konkrétní hodnota obohacení je výsledkem technicko-ekonomických analýz. V současnosti je všeobecně používaným limitem obohacení 5 wt%, stanoveným úzusem v počátcích využívání jaderné energie. Se zvyšujícími se nároky na bezpečnost jaderných elektráren klesají palivové náklady a uvažuje se o použití paliva s obohacením nad 5 wt%. V daleké budoucnosti se může obohacení blížit až ke 20 wt%, stanovené jako legislativní limit z důvodu proliferace jaderných zbraní. Vysokoobohacené palivo je na počátku svého provozu příliš výkonné, má přebytek reaktivity, který je z důvodu vyrovnání vývinu energie v reaktoru nutné snížit.

Počáteční přebytek reaktivity je možné kompenzovat absorpcími příměsí v palivu, absorbujícími část neutronů, které by jinak byly absorbovány jádry uranu a mohly by způsobit štěpení. Takové příměsí jsou během provozu reaktoru postupně absorbovány. V případě, že jejich absorpcí vznikají nuklidy s nízkou absorpční schopností a celkové absorpční schopnosti paliva se během ozařování snižují, jsou tyto příměsí označovány jako

vyhořívající absorbátory.

Typický tlakovodní jaderný reaktor je jako systém krátkodobě řízen regulačními tyčemi, dlouhodobá regulace je prováděna kyselinou boritou v chladivu a vyhořívajícími absorbátory v palivu. Maximální obsah kyseliny borité v chladivu je omezen požadavkem záporného teplotního koeficientu reaktivity, aby jaderný reaktor neměl vlastnosti systému s kladnou zpětnou vazbou. Vyhořívající absorbátory jako součást dlouhodobé regulace mají proto vliv i na jadernou bezpečnost.

Vyhořívajícími absorbátory civilních reaktorů jsou v současnosti sloučeniny bóru, gadolinia a erbia, které se používají především ve formě integrální části matrice paliva nebo tenké vrstvy nanesené na vnějším povrchu paliva. Pro vyšší obohacení paliva není použití těchto vyhořívajících absorbátorů optimální, protože velmi rychle vyhořívají.

Návrh designu vyhořívajícího absorbátoru je součástí komplexních analýz. Vyhořívající absorbátor je použit z důvodu prodloužení provozu paliva, kompenzace počátečního přebytku reaktivity pro paliva s vyšším obohacením a z důvodu dlouhodobé regulace jaderného reaktoru. Vyhořívající absorbátor jako příměs paliva je vhodné ocenit nejen z neutronově-fyzikálního hlediska, ale také z teplotního a mechanického hlediska. Příměs paliva může zvýšit jadernou bezpečnost, pokud zvýší teplovodivé vlastnosti paliva, nebo pokud sníží velikost fragmentů paliva a tím sníží tlak na pokrytí paliva. Vyhořívající absorbátor nemusí být pouze integrální součástí paliva, ale může být součástí jeho pokrytí ve formě příměsi nebo nanesené vrstvy.

Cílem dizertační práce je navrhnout materiály pro budoucí vyhořívající absorbátory primárně na základě neutronově-fyzikálních výpočtů. V přírodě se vyskytuje přes 80 prvků, tvořících přes 400 nuklidů, jadernými reakcemi je možné dále uměle vytvořit nestabilní nuklidy, kterých je přes 3000. Dostupná literatura se věnuje výpočtům s několika prvky především přírodního složení. Cílem dizertační práce je provést výpočty pro prvky, nuklidy a jejich kombinace pro různé typy jaderných reaktorů a analyzovat možnosti jejich použití v designu jaderného paliva. Na základě inženýrské metriky je oceněna míra účinnosti vyhořívajících absorbátorů, která bude sloužit pro další technicko-ekonomické analýzy.

Vzhledem k vysokému počtu výpočtů parametrické úlohy, definované pro splnění cílů dizertační práce, není možné použití standardních časově náročných výpočetních kódů. Proto je v první fázi řešení vytvořen výpočetní kód $U_W B_1$. Kód řeší Batemanovy rovnice izotopických změn jaderného paliva a transportní rovnici pro výpočet koeficientu násobení a hustoty toku neutronů v jaderném palivu v novém schématu vyhořívání metody 2sPC. Výpočetní kód $U_W B_1$ byl vyvinut s cílem rychlého výpočtu vyhořívání jaderného paliva s dostatečnou přesností, kterého je dosaženo zjednodušením v oblastech s malým vlivem na ocenění účinnosti vyhořívajících absorbátorů.

Vlastní řešení dizertační práce je provedeno ve třech krocích, které se vzájemně ovlivňují. V prvním kroku je vytvořen výpočetní aparát, v druhém kroku je validován na vybraných úlohách vůči standardním výpočetním kódům a v posledním kroku jsou provedeny výpočty a analýzy možných vyhořívajících absorbátorů.

2

Současný stav vývoje

Kapitola shrnuje problematiku neutronově-fyzikálního výpočtu vyhořívání jaderného paliva. Na začátku je popsána struktura jaderného paliva v aktivní zóně jaderného reaktoru, následuje výčet veličin a rovnic, které chování jaderného paliva popisují. V kapitole jsou dále uvedeny matematické přístupy k řešení popsaných rovnic, shrnuty jaderné reakce a jejich popis v knihovnách jaderných dat a představeny nejčastěji používané výpočetní kódy. V závěru kapitoly jsou uvedeny charakteristiky vyhořívajících absorbátorů a rešerše současné literatury k tématu.

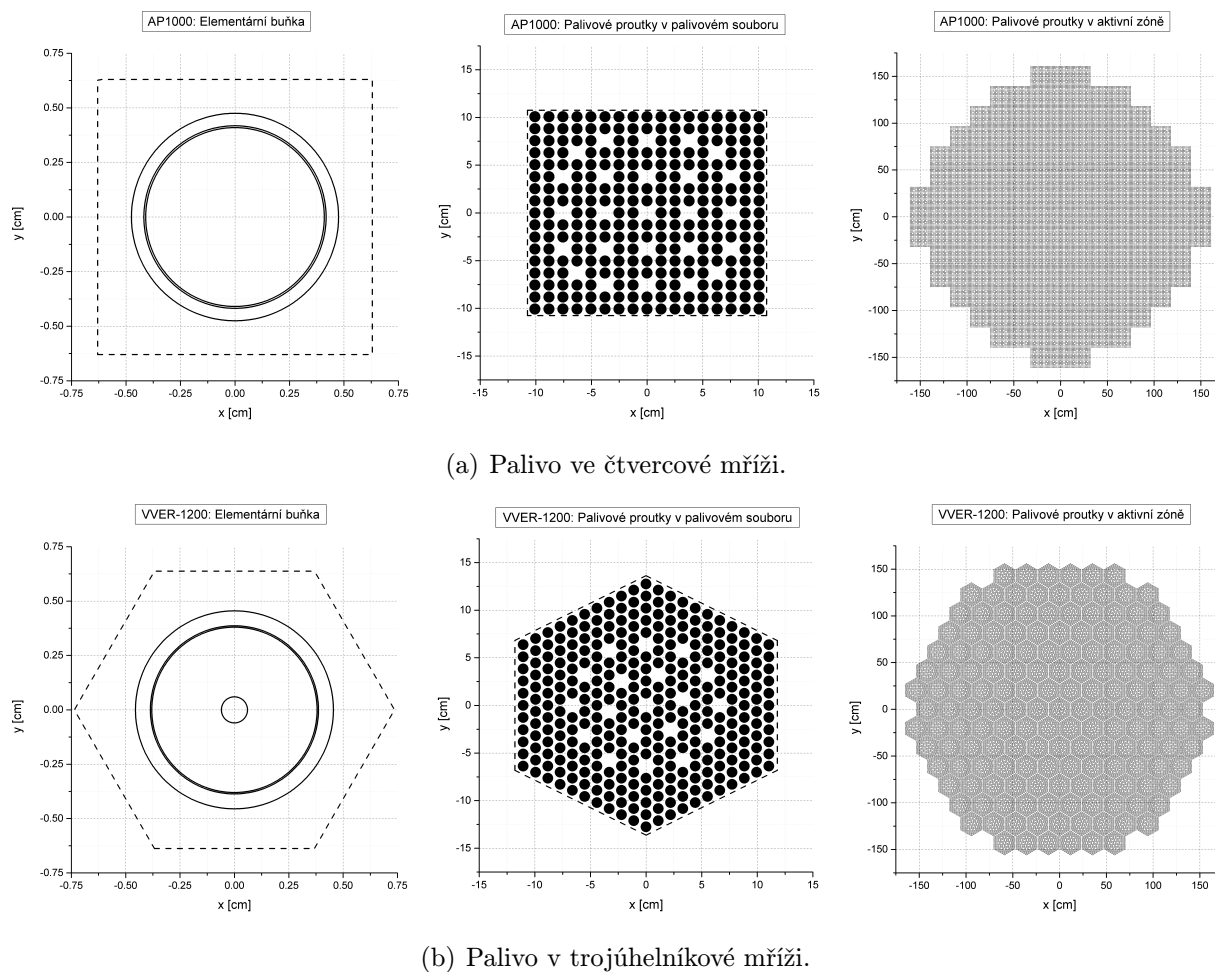
2.1 Jaderné palivo

Zdrojem energie v jaderných reaktorech jsou štěpné jaderné reakce, které probíhají v jaderném palivu při absorpci neutronu v těžkém jádru aktinidu. Při štěpení nejvyužívanějšího štěpného nuklidu U-235 dochází k uvolnění energie cca 200 MeV, která je nesena několika neutrony, dvěma lehčími nuklidy nazývanými štěpné produkty, elektrony β záření, fotony γ záření a neutriny.

Kinetická energie štěpných produktů tvoří přes 80 % uvolněné energie. Štěpné produkty představují těžce nabitá jádra a v jaderném palivu téměř okamžitě ztrácí ionizací okolní látky svoji kinetickou energii přeměnou na teplo. Zbylé produkty štěpení patří mezi neutrální částice, které reagují s okolním prostředím především jadernými reakcemi a energii ztrácejí absorpcí a rozptylem. Neutrony ze štěpení typicky prochází několika rozptylovými reakcemi, než jsou absorbovány v palivu a podle energie a jádra nuklidu, na kterém dojde k absorpci, mohou neutrony z původního jádra vytvořit nové jádro, nebo původní jádro rozštěpit. Tento opakovatelný proces vede k tvorbě dalších generací neutronů. Je-li počet neutronů v generacích konstantní, dochází ke kritické štěpné řetězové reakci, využívané v jaderné energetice.

Aktivní zóna jaderného reaktoru, ve které dochází ke štěpení, je sestavena z palivových souborů, které jsou tvořeny palivovými proutky. Elementární buňka aktivní zóny obsahuje oblasti paliva, pokrytí a chladiwa. Pro energetické jaderné reaktory v současnosti budované třetí generace je typická válcová geometrie paliva a pokrytí a čtvercová nebo troj-

úhelníková mříž palivových proutků. Většina energetických jaderných reaktorů provozuje obohacený uran ve formě keramického oxidu jako palivo, pokrytí se vyrábí ze sloučenin zirkonia a jako chladivo se používá voda. Výzkumné jaderné reaktory jsou konstruovány v široké paletě geometrie i materiálů, například české výzkumné reaktory VR-1 a LVR-15 mají čtvercové palivo z 20 wt% obohaceného uranu v hliníkové matici s hliníkovým pokrytím. Horizontální průřez aktivní zónou jaderného reaktoru je schématicky zobrazen na Obr. 2.1. Zobrazena je geometrie elementární buňky, palivového souboru a aktivní zóny pro čtvercové palivo reaktoru AP1000 a hexagonální palivo reaktoru VVER-1200.



Obr. 2.1: Aktivní zóna jaderného reaktoru.

2.2 Veličiny a rovnice popisující provoz paliva

Dvěma hlavními ději, které v jaderném reaktoru z neutronově-fyzikálního hlediska probíhají, jsou transport neutronů a izotopické změny v jaderném palivu [1], [2]. Výkon

jaderného reaktoru P [W] je určen vztahem

$$P = \sum_i E_{f,i} \Sigma_{f,i} \varphi_i V_i \quad (2.1)$$

kde $E_{f,i}$ [eV] značí energii ze štěpení v i -té prostorové oblasti aktivní zóny, $\Sigma_{f,i}$ [m^{-1}] makroskopický účinný průřez pro štěpení, φ_i [$\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$] hustotu toku neutronů a V_i [m^3] objem i -té prostorové oblasti aktivní zóny. V rovnici (2.1) vystupují veličiny makroskopický účinný průřez Σ a hustota toku neutronů φ . Mikroskopický a makroskopický účinný průřez jsou úzce spojené veličiny popisující vlastnosti prostředí, ve kterém probíhá transport neutronů, který je popsán hustotou toku neutronů.

Vyhoření B [MWd/MTU] je veličinou popisující energii získanou z jednotkové hmotnosti jaderného paliva m_U [MTU]. Vyhoření se vztahuje na jednotku hmotnosti uranu (nebo těžkého kovu, např. pro uran-plutoniová směsná paliva)

$$B = \frac{1}{m_U} \int_t P(t) dt \quad (2.2)$$

V současnosti je v českých jaderných reaktorech dosahováno vyhoření až 55000 MWd/MTU, tj. za 1 den je z 1 kg uranu produkována energie 55 MWd.

Podmínku pro udržení štěpné řetězové reakce a časově konstantní výkon jaderného reaktoru popisuje efektivní koeficient násobení k_{eff} [-]

$$k_{eff} = 1 \quad (2.3)$$

Efektivní koeficient násobení je definován jako podíl počtu neutronů ve dvou po sobě následujících neutronových generacích. V praxi je efektivní koeficient násobení často nahrazen reaktivitou ρ [-], definovanou vztahem

$$\rho = \frac{k_{eff} - 1}{k_{eff}} \quad (2.4)$$

Pro dynamiku reaktorů je důležitou veličinou teplotní koeficient reaktivity α [K^{-1}]

$$\alpha = \frac{\partial \rho}{\partial T} = \frac{\partial \rho}{\partial T_F} + \frac{\partial \rho}{\partial T_M} \quad (2.5)$$

složený z teplotního koeficientu paliva α_F a teplotního koeficientu moderátoru α_M . Pro bezpečný provoz reaktoru v kritickém stavu je požadován záporný teplotní koeficient reaktivity, navíc ve všech stavech reaktoru je požadován záporný i teplotní koeficient reaktivity moderátoru.

Mikroskopický účinný průřez σ [b] (dále jen účinný průřez) je mírou pravděpodobnosti interakce neutronu s jedním jádrem prostředí. Účinný průřez je funkcí energie neutronu $\sigma = \sigma(E)$ a popisuje jaderné reakce mezi jádrem a neutronem. Jaderné reakce je možné

rozdělit na 4 základní typy: pružný rozptyl, nepružný rozptyl, neštěpnou absorpci a štěpnou absorpci.¹ Účinný průřez je aditivní veličinou, může popisovat míru pravděpodobnosti pro skupinu reakcí.

Makroskopický účinný průřez Σ [m^{-1}] je mírou pravděpodobnosti interakce neutronu s jedním ze všech jader prostředí a je definován pro jaderné reakce shodné s mikroskopickým účinným průřezem. Makroskopický účinný průřez je roven mikroskopickému účinnému průřezu násobeném hustotou jader prostředí N [m^{-3}]

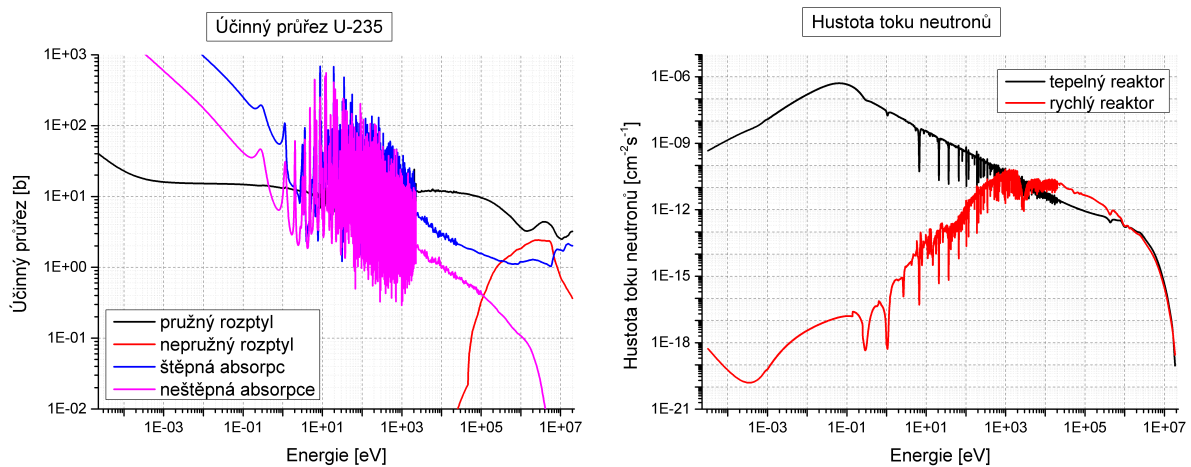
$$\Sigma = N \sigma \quad (2.6)$$

Makroskopický účinný průřez je aditivní veličinou, kromě skupiny jaderných reakcí může popisovat i skupinu jader prostředí.

Hustota toku neutronů φ [$\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$] představuje počet neutronů, které projdou kolmo jednotkovou plochou za jednotku času. Hustota toku neutronů φ je funkcí 3 prostorových proměnných, energetické a časové proměnné $\varphi = \varphi(\mathbf{r}, E, t)$ a určena je úhlovou integrací úhlové hustoty toku neutronů $\psi(\mathbf{r}, E, \Omega, t)$

$$\varphi(\mathbf{r}, E, t) = \int_{4\pi} \psi(\mathbf{r}, E, \Omega, t) d\Omega \quad (2.7)$$

Typický průběh základních účinných průřezů a hustoty toku neutronů v jaderném palivu je graficky proveden na Obr. 2.2.



Obr. 2.2: Příklad účinného průřezu a hustoty toku neutronů v jaderném palivu.

Transportní rovnice neutronů představuje bilanční rovnici neutronů a při jejím odvození je využíváno veličiny reakční rychlosti R [$\text{m}^{-3}\text{s}^{-1}$]

$$R = \int_E \Sigma(E) \varphi(E) dE \quad (2.8)$$

¹V literatuře se lze setkat s rozdílným formálním přístupem ke štěpení. Štěpení může tvořit vlastní skupinu reakcí, může být součástí absorpčních reakcí, nebo může být spolu s reakcemi (n,xn) součástí reakcí produkce neutronů.

Reakční rychlost popisuje rychlost, s jakou dochází k jaderným reakcím, pro štěpení byla využita i ve vztahu (2.1). V případě vztahu (2.8) je reakční rychlost definována jako počet jaderných reakcí popsanych účinným průřezem σ , ke kterým dojde vlivem hustoty toku neutronů φ za jednotku času v jednotce objemu. Pro účely izotopických změn paliva je bilance jader určována reakční rychlostí v celém objemu, tj. vztahem $R = \int_{E_j} \sigma(E) \varphi(E) dE$.

V jaderném palivu jsou generovány radioaktivní nuklidy, které procházejí přeměnami podle různých rozpadových schémat, např. α rozpad. Rychlost, s jakou dochází k přeměně mateřského jádra v dceřinné jádro, je určena přeměnovou (v literatuře též rozpadovou) konstantou λ [s⁻¹]. Přeměnová konstanta je spojena s poločasem přeměny (též rozpadu) $T_{1/2}$ [s] vztahem

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} \quad (2.9)$$

Transportní rovnice vyjadřuje zákon zachování neutronů v prostředí, kde neutrony vznikají, kde jsou rozptylovány a absorbovány. Transportní rovnice v násobícím prostředí má tvar

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) = & - \operatorname{div} [\boldsymbol{\Omega} \cdot \psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)] \\ & - \Sigma_t(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \\ & + \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\boldsymbol{\Omega}' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, t) \psi(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}', t) \\ & + S(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \end{aligned} \quad (2.10)$$

kde $\psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$ značí úhlovou hustotu toku částic, $\Sigma_t(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$ celkový makroskopický účinný průřez, $\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, t)$ diferenciální rozptylový makroskopický účinný průřez a S značí vnější a štěpný zdroj. Časová změna úhlové hustoty toku neutronů v rovnici (2.10) je rovna součtu úniku neutronů ze systému, absorpci neutronů vlivem jaderných reakcí, produkci z rozptylových reakcí a z vnějších a štěpných zdrojů. Zdroje neutronů ze štěpení jsou popsány vztahem

$$\begin{aligned} S(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) = & \frac{1}{k_{eff}} \sum_j \frac{\chi_j(E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \nu_j \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E', t) \varphi(\mathbf{r}, E, t) \\ & + \frac{1}{k_{eff}} \sum_k \frac{\chi_k(E)}{4\pi} \lambda_k N_k(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (2.11)$$

kde $\chi_j(E)$ značí štěpné spektrum j -tého štěpného nuklidu, ν_j multiplikaci neutronů při štěpení j -tého štěpného nuklidu, λ_k přeměnovou konstantu k -té skupiny prekurzorů zpóźděných neutronů a N_k jaderné hustoty prekurzorů. Štěpný zdroj je izotropní a je složen z promptní a zpóźděné složky.

Řešení transportní rovnice ve tvaru (2.10) je spojeno s problémy vysokého počtu proměnných (3 prostorové, 2 úhlové, 1 energetická, 1 časová) a s problémy závislosti makroskopických účinných průřezů obecně na všech proměnných. Makroskopický účinný průřez

jako součin hustoty jader a mikroskopického účinného průřezu je časově závislý, protože v jaderném palivu se mění koncentrace jader aktinidů i štěpných produktů, navíc mikroskopické účinné průřezy z důvodu Dopplerova efektu závisí na teplotě, která není časově konstantní. Analytické řešení transportní rovnice je možné pouze pro speciální případy, numerické řešení (2.10) není se současnou výpočetní technikou možné, proto se řeší stacionární tvar transportní rovnice spolu s Batemanovými rovnicemi, popisujícími izotopické změny jaderného paliva. Transportní rovnice a Batemanovy rovnice jsou řešeny postupně.

Batemanovy rovnice představují soustavu diferenciálních rovnic popisujících izotopické změny jaderného paliva, tj. změnu počtu jader jednotlivých nuklidů. Pro nuklid i platí vztah

$$\frac{d}{dt}N_i(t) = \sum_j l_{ij} \lambda_j N_j(t) + \varphi \sum_j f_{ij} \sigma_j N_j(t) - \lambda_i N_i(t) - \varphi \sigma_i N_i(t) \quad (2.12)$$

kde

$$\begin{aligned} \sum_j l_{ij} \lambda_j N_j(t) & \text{ vznik nuklidu } N_i \text{ přeměnou (rozpadem) nuklidu } N_j \\ \varphi \sum_j f_{ij} \sigma_j N_j(t) & \text{ vznik nuklidu } N_i \text{ jadernými reakcemi z nuklidu } N_j \\ -\lambda_i N_i(t) & \text{ zánik nuklidu } N_i \text{ přeměnou (rozpadem)} \\ -\varphi \sigma_i N_i(t) & \text{ zánik nuklidu } N_i \text{ jadernými reakcemi} \end{aligned}$$

Každý nuklid v průběhu provozu jaderného reaktoru může obecně vznikat a zanikat dvěma fyzikálními ději, radioaktivní přeměnou a neutronovými jadernými reakcemi. Batemanovy rovnice jsou řešeny v časovém intervalu, ve kterém je možné účinné průřezy považovat za konstantní. Po počáteční generaci štěpných produktů je typická šířka časového intervalu dána přírůstkem vyhoření cca 1000 MWd/MTU.

2.3 Řešení Batemanových rovnic

Batemanovy rovnice (2.12) lze řešit za předpokladu konstantních koeficientů, tj. účinné průřezy σ a hustota toku neutronů φ jsou v daném časovém intervalu neměnné.

Energetická proměnná je odstraněna použitím efektivních účinných průřezů $\bar{\sigma}$

$$\bar{\sigma} = \frac{\int \varphi(E) \sigma(E) dE}{\int \varphi(E) dE} \quad (2.13)$$

a jedinou proměnnou, která v Batemanových rovnicích vystupuje, je časová proměnná.

Prostorové a úhlové proměnné jsou odstraněny použitím hustoty toku neutronů φ integrované ve zvolené oblasti, kterou může být část palivového proutku, palivový proutek, skupina PP, palivový soubor apod. Při modelování vyhořívání je časté místo hustoty toku neutronů φ udávat tepelný výkon P , obě veličiny jsou spojeny obecným vztahem [3]

$$P = 1.6E-19 \sum_{ij} Q_{ij} N_i \sigma_{ij} \varphi \quad (2.14)$$

kde P [MW] je výkon, Q [MeV] využitelná energie, N [$\text{b}^{-1}\text{cm}^{-1}$] hustota jader, σ_{ij} [b] účinný průřez reakce j na jádře i a φ [$\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$] hustota toku neutronů. Vztah (2.14) v případě štěpení přechází ve zjednodušený vztah (2.1).

Šířka časového intervalu, na kterém jsou Batemanovy rovnice řešeny, je dána přesností určení účinných průřezů (2.13) a hustoty toku neutronů (2.14). Po zvolení dostatečně jemné prostorové sítě je šířka časového intervalu dána změnami hustoty toku neutronů jako funkce energie. Změnou inventáře nuklidů jaderného paliva dochází ke změně energetické závislosti hustoty toku neutronů, která pak vede ke změně efektivních účinných průřezů. Vliv na efektivní účinný průřez je znásoben efektem samostínění, kdy v místě rezonancí účinných průřezů výrazně klesá hustota toku neutronů a příspěvek k efektivnímu účinnému průřezu v oblasti rezonance je podstatně nižší, než v případě vážení účinného průřezu konstantní funkcí.

Batemanovy rovnice představují soustavu diferenciálních rovnic, počet rovnic je roven počtu řešených nuklidů, kterých je v nejnovější verzi knihovny jaderných dat 3820 [4]. Soustavu rovnic (2.12) lze přepsat na tvar

$$\frac{d\mathbf{N}(t)}{dt} = \mathbb{A} \mathbf{N}(t) \quad (2.15)$$

Efektivním způsobem řešení (2.15) je maticová exponenciální metoda [5], jejíž název pochází z obecného řešení skalární obdoby diferenciální rovnice prvního řádu. Řešení Batemanových rovnic tak přechází na určení maticové exponenciely ve vztahu

$$\mathbf{N}(t) = \exp(\mathbb{A}t) \mathbf{N}(0) \quad (2.16)$$

kde $\mathbf{N}(t)$ je vektor řešení (hustot nuklidů) v čase t s počáteční podmínkou $\mathbf{N}|_{t=0} = \mathbf{N}(0)$. Určení maticové exponenciely je obtížné z důvodu vlastností přechodové matice \mathbb{A} , která má vlastní čísla ve velmi širokém rozsahu hodnot (příčinou jsou radioaktivní nuklidy s velmi rozdílnými poločasy) a zároveň řada z nich má hodnoty ve velmi úzkém intervalu. Vlastnosti matice omezují možnosti stabilního a konvergentního numerického výpočtu pro plný systém rovnic [6], [7].

Maticová exponenciální metoda použitá v referenčním výpočetním kódu ORIGEN-S [3], vychází z Taylorova rozvoje exponenciely

$$\exp(\mathbb{A}t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\mathbb{A}t)^n}{n!} \quad (2.17)$$

která je implementována ve formě rekurzivního vztahu

$$\begin{aligned} \mathbf{N}(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{C}_n(t) \\ \mathbf{C}_0 &= \mathbf{N}(0) \\ \mathbf{C}_{n+1}(t) &= \frac{t}{n+1} \mathbb{A} \mathbf{C}_n(t) \end{aligned} \quad (2.18)$$

Numerický výpočet klasickými metodami pro řešení soustavy obecných diferenciálních rovnic, např. Gauss-Seidelovou nebo Eulerovou metodou, je pro Batemanovy rovnice zřídka využíván, protože rovnice jsou tzv. tuhé ("stiff") a numerické metody obtížně konvergují nebo vůbec nekonvergují.

Alternativním řešením k maticové exponenciální metodě je metoda lineárních řetězců² [8], [9], [5], [10]. Tato metoda je založena na analytickém řešení Batemanových rovnic (2.12) s počáteční podmínkou

$$\begin{aligned} i = 1 &\rightarrow N_i|_{t=0} = N_1(0) \\ i \neq 1 &\rightarrow N_i|_{t=0} = 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

kdy řešení nabývá tvar

$$N_i(t) = N_1(0) \left(\prod_{j=1}^{i-1} \frac{l_{j+1,j} \lambda_j + \varphi f_{j+1,j} \sigma_j}{\lambda_j + \varphi \sigma_j} \right) \cdot \left\{ \sum_{j=1}^i \frac{\prod_{k=1}^{i-1} (\lambda_k + \varphi \sigma_k)}{\prod_{k=1}^{i-1} [(\lambda_k + \varphi \sigma_k) - (\lambda_j + \varphi \sigma_j)]} \exp [- (\lambda_j + \varphi \sigma_j) t] \right\} \quad (2.20)$$

Analytické řešení (2.20) platí za předpokladu, že pouze první člen řetězce má nenulovou počáteční hustotu jader. Metoda lineárních řetězců vychází z řešení (2.20), které je použito na jednotlivé řetězce vytvořené z možných jaderných reakcí a radioaktivních přeměn s počátečním nenulovým nuklidem. Tento postup je proveden pro každý nuklid počátečního složení a superpozicí výsledků je získáno řešení původního problému (2.12).

Analytické řešení Batemanových rovnic nelze použít přímo na celý soubor řešených nuklidů, protože výraz $[(\lambda_k + \varphi \sigma_k) - (\lambda_j + \varphi \sigma_j)]$ ve jmenovateli sumy (2.12) může nabýt nuly, pokud budou efektivní přeměnové konstanty dvou nuklidů shodné. Tento problém lze odstranit použitím analytického řešení na menší soubor řešených nuklidů, nebo použitím obecnějšího řešení [10]. V obou případech může být numerické vyčíslení řešení často nestabilní, pokud se v řetězci vyskytují málo rozdílné efektivní přeměnové konstanty dvou nuklidů.

2.4 Řešení transportní rovnice

Transportní rovnice (2.10) popisuje neutronovou bilanci v prostředí, ve kterém dochází k transportu neutronů. Řešením transportní rovnice je úhlová hustota toku neutronů $\psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$ a efektivní koeficient násobení k_{eff} . Pro provoz jaderného reaktoru lze ze znalosti úhlové hustoty toku neutronů určit prostorovou distribuci výkonu, efektivní koeficient násobení musí být během provozu udržován jednotkový.

²V literatuře též TTA (transmutation trajectory analysis).

Výpočet vyhořívání jaderného paliva je složen z postupného řešení stacionární transportní rovnice ($\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}$) a Batemanových rovnic (t). Oba výpočty se navzájem ovlivňují. Výstupem stacionárního tvaru transportní rovnice (2.10) je hustota toku neutronů $\varphi(E)$, použitá pro výpočet efektivních účinných průřezů $\bar{\sigma}$ integrací přes energetickou proměnnou (2.13). Efektivní účinné průřezy jsou vstupem pro Batemanovy rovnice (2.12), jejichž řešením jsou hustoty jader nuklidů v jaderném palivu v dalším časovém intervalu, sloužící jako vstupní data pro další transportní výpočet.

Transportní rovnici lze řešit deterministickými nebo statistickými metodami. Deterministické metody jsou založeny na diskretizaci transportní rovnice, jsou náročné na operační paměť výpočetní techniky a přesně řeší zjednodušenou transportní rovnici (míra zjednodušení je dána mírou diskretizace). Statistické metody jsou aplikací metody Monte Carlo, jsou náročné na procesor výpočetní techniky, nezjednodušují transport neutronů, ale řešení je zatíženo statistickou chybou výpočtu.

Deterministické metody používají multigrupového formalismu pro energetickou diskretizaci transportní rovnice. Pro přesný popis rychlých změn účinných průřezů v oblasti rezonancí (energie cca 10 eV až 1 keV na Obr. 2.2) by bylo potřeba cca $1E+05$ bodů. Úhlová diskretizace se nejčastěji provádí metodou diskrétních ordinát, tzv. S_n metodou, která pro 2-D výpočty dělí prostor na $n(n+2)/2$ směrů a pro 3-D výpočty na $n(n+2)$ směrů. Dostatečně přesná S_{16} metoda rozděluje směrové úhly na síti 288 bodů. Prostorové dělení v rovině xy pro výpočet aktivní zóny vyžaduje pro každý palivový element (viz Obr. 2.1) síť cca 24 bodů, ve vertikálním směru (cca 4 m) je velikost sítě cca 70 bodů. Pro aktivní zónu AP1000, kde je 157 palivových souborů typu 17x17, je počet bodů prostorové sítě cca 76 milionů. Celkový počet bodů výpočetní sítě aktivní zóny AP1000 je $2.2E+15$ pro každý časový krok. Kvazistacionární řešení transportu neutronů v aktivní zóně proto současnou výpočetní technikou není možné, výpočetní schéma aktivní zóny se zjednodušuje úhlovou, prostorovou a energetickou diskretizací [2] ve dvou úrovních.

Výpočetní schéma aktivní zóny se současnou technikou provádí ve dvou úrovních, pro 1) palivový soubor a 2) aktivní zónu. Výpočtem vyhořívání palivového souboru pro 2-D geometrii a cca 200 energetických grup jsou s využitím transportní rovnice a Batemanových rovnic určeny charakteristiky palivového souboru, zejména difúzní koeficienty a dvougrupové účinné průřezy, v závislosti na vyhoření. Použití cca 200 energetických grup je podmíněno výpočtem rezonančního samostínění na modelu palivového elementu, výstupem jsou účinné průřezy pro transportní výpočet. Aktivní zóna je počítána zjednodušením transportní rovnice, tzv. difúzní rovnicí ve dvougrupovém přiblížení, energie je rozlišena na 2 grupy (tepelná a rychlá), 3-D prostorová síť počítá s jedním bodem pro palivový element v rovině xy. Difúzní rovnice je řešena diferenční nebo nodální metodou [2].

Statistické metody pro výpočet vyhořívání a výpočty aktivní zóny jaderného reaktoru nebyly v minulosti z důvodu výpočetní náročnosti využívány. Výjimkou jsou oblasti bezpečnostních výpočtů podkritičnosti a stínění, kde jsou statistické kódy standardní

metodou. S neustálým rozvojem výpočetní techniky se statistické metody začínají dále prosazovat, nejnověji např. ve Finsku [11] pro výpočty vyhořívání.

Statistická metoda Monte Carlo je založena na použití generátoru pseudonáhodných čísel při modelování fyzikálních dějů mezi neutrony a jádry prostředí. Transport neutronů simulací Monte Carlo je analogický fyzikálnímu vnímání daného problému. Život neutronu nebo jiné částice je simulován od jeho počátečního stavu (narození vlivem štěpení nebo sekundární emise) do konečného stavu (smrt z důvodu štěpení, absorpce nebo úniku ze systému). Četnost a průběh všech interakcí, kterými neutron během života projde, jsou náhodně simulovány na základě zákonů jaderné fyziky. Simulací dostatečně velkého počtu neutronů je možné získat veškeré informace o daném systému, např. efektivní koeficient násobení nebo hustota toku neutronů. Čím více výstupních veličin je požadováno, tím delší je výpočetní čas a pro velké systémy nemusí být Monte Carlo simulace v současnosti vhodná.

Monte Carlo simulace je pro řešení problému transportu neutronů vhodná z důvodu linearity Boltzmannovy transportní rovnice. Neutrony interagují pouze s jádry okolní látky, nereagují mezi sebou. Linearita procesu je navíc vhodná pro paralelizaci.

Návrh designu aktivní zóny se primárně provádí na 2-D výpočtu palivového souboru, pro návrh materiálového složení vyhořívajících absorbátorů je dostatečný 2-D výpočet palivového elementu, kde je možné využít Monte Carlo metody.

2.5 Schéma vyhořívání

Výpočet vyhořívání je popsán Batemanovými rovnicemi a transportní rovnicí, jejichž parametry jsou na sobě v každém časovém kroku závislé. Transportní rovnice ovlivňují Batemanovy rovnice změnou hustoty toku neutronů, vedoucí ke změně efektivních účinných průřezů a prvků přechodové matice Batemanových rovnic. Batemanovy rovnice vstupují do transportní rovnice přes změnu koncentrace nuklidů v oblastech, kde dochází k vyhořívání a změně inventáře.

Základní schéma vyhořívání, často nazývané explicitní Eulerovo³ schéma nebo Eulerovo predikční schéma [12], [10], je přímočaré spojení obou solverů v každém časovém intervalu vyhořívání, algoritmus je popsán v Tab. 2.1. Transportní rovnice je řešena s inventářem z počátku časového intervalu a změny v inventáři jsou řešeny za předpokladu konstantních efektivních účinných průřezů v celém časovém intervalu s hodnotami určenými na počátku časového intervalu. Výpočet vyhořívání s Eulerových schématem je podmíněně stabilní [12] a v případě příliš dlouhých časových intervalů může řešení problému vykazovat oscilace s neohrazenou amplitudou.

Eulerovo schéma vyhořívání je jednoduše implementovatelné, ale jedná se o aproxi-

³Matematicky se o Eulerovu metodu nejedná, protože jsou použity efektivní účinné průřezy z počátku intervalu a uvažovány konstantní v řešeném intervalu, namísto určení jejich derivace a uvažování změn během časového intervalu.

Tab. 2.1: Eulerovo predikční schéma vyhořívání.

Část	Solver	Algoritmus
		<i>FOR</i> ($i = 0..N-1$) <i>DO</i>
1	transport (N)	$\varphi_i(N_i)$
2	Bateman (N)	$N_{i+1}(\sigma_i, N_i)$
		<i>ENDDO</i>
	transport (1)	$\varphi_N(N_N)$

maci a častěji se využívá různých implementací metody prediktor-korektor ve schématu vyhořívání. I když tyto metody často vyžadují dvě transportní řešení pro každý časový interval, jsou přesnější než Eulerovo schéma a umožňují snížit délku časového intervalu o více než polovinu. Přestože užití metody prediktor-korektor zvyšuje přesnost výpočtu, výpočet vyhořívání stále vyžaduje relativně vysoký počet časových intervalů.

Metody prediktor-korektor jsou ve schématech vyhořívání aplikovány různými způsoby, liší se především umístěním stacionárního transportního výpočtu a způsobem aplikace metody prediktor-korektor při lineární interpolaci tří stavů v každém časovém intervalu vyhořívání (počátek, střed a konec intervalu).

Eulerovo prediktor-korektor schéma vyhořívání je nejčastějším způsobem implementace metody prediktor-korektor při výpočtech vyhořívání. V každém časovém intervalu vyhořívání jsou řešeny dvě transportní rovnice a dvě sady Batemanových rovnic. Po úvodním transportním výpočtu na počátku intervalu následuje prediktor – určení predikovaného inventáře na konci intervalu na základě stavu z počátku intervalu a poté transportní výpočet na konci intervalu s predikovaným inventářem. V druhé části výpočtu je zpřesněn inventář středováním dříve určených dat. První způsob implementace metody prediktor-korektor průměruje řešení transportních výpočtů, druhý způsob implementace středuje řešení výpočtů inventáře, viz popis algoritmů v Tab. 2.2. První způsob, používaný např. v kódu SERPENT, předpokládá, že efektivní účinné průřezy mají v řešeném časovém intervalu lineární závislost a pro určení stavu na konci intervalu jsou použity střední hodnoty efektivních účinných průřezů. Druhý způsob, používaný např. v kódech BGCORE, BUCAL1 a MCODE, předpokládá, že chyby v predikovaném inventáři jsou na úrovni chyb v korigovaném inventáři a při středování jsou odstraněny.

Poslední často užívané schéma vyhořívání EPC (extended predictor-corrector), nazývané také metoda středního bodu, používají např. kódy Monteburns, MCNPX a TRITON ze sady kódů SCALE, popis algoritmu viz Tab. 2.3. EPC schéma používá druhý transportní výpočet ve středu časového intervalu, který je použit pro určení inventáře na konci intervalu a představuje nejlepší odhad pro účinné průřezy v daném časovém intervalu vyhořívání.

Tab. 2.2: Eulerovo prediktor-korektor schéma vyhořívání.

Část	Solver	Algoritmus 1	Algoritmus 2
		$FOR(i = 0..N-1)DO$	$FOR(i = 0..N-1)DO$
1	transport (N)	$\varphi_i(N_i)$	$\varphi_i(N_i)$
2	Bateman (N)	$N_{i+1}^P(\sigma_i, N_i)$	$N_{i+1}^P(\sigma_i, N_i)$
3	transport (N)	$\varphi_{i+1}^P(N_{i+1}^P)$	$\varphi_{i+1}^P(N_{i+1}^P)$
4/5	—	$\sigma_{i+0.5} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1}^P)$	—
4/5	Bateman (N)	$N_{i+1}(\sigma_{i+0.5}, N_i)$	$N_{i+1}^C(\sigma_{i+1}^P, N_i)$
4/5	—	—	$N_{i+1} = \frac{1}{2}(N_{i+1}^P + N_{i+1}^C)$
		$ENDDO$	$ENDDO$
	transport (1)	$\varphi_N(N_N)$	$\varphi_N(N_N)$

Tab. 2.3: Schéma vyhořívání EPC (extended predictor-corrector).

Část	Solver	Algoritmus
	transport (1)	$\varphi_0(N_0)$
		$FOR(i = 0..N-1)DO$
1	—	$IF(i \geq 1)THEN \varphi_i = \frac{1}{2}(\varphi_{i-0.5}^P + \varphi_i^C)$
2	Bateman (N)	$N_{i+0.5}(\sigma_i, N_i)$
3	transport (N)	$\varphi_{i+0.5}^P(N_{i+0.5})$
4	Bateman (N)	$N_{i+1}^P(\sigma_{i+0.5}^P, N_{i+0.5})$
5	transport (N)	$\varphi_{i+1}^C(N_{i+1}^P)$
6	Bateman (N)	$N_{i+1}^C(\sigma_{i+1}^C, N_{i+0.5})$
7	—	$N_{i+1} = \frac{1}{2}(N_{i+1}^P + N_{i+1}^C)$
		$ENDDO$

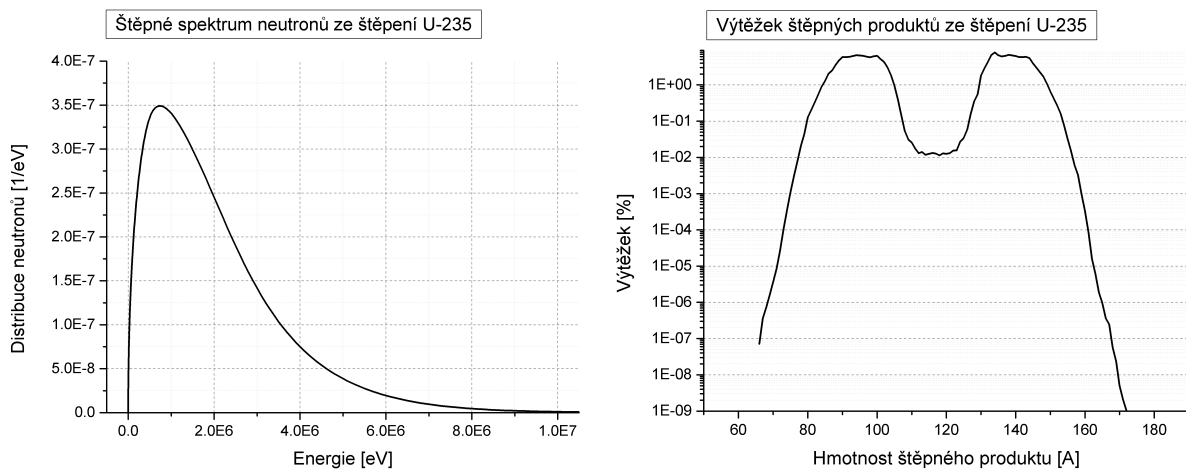
2.6 Knihovny jaderných dat

Interakce částic s jádry a charakteristické vlastnosti radioaktivních nuklidů jsou popsány zákony jaderné fyziky, které využívají množství fyzikálních konstant, označovaných jako jaderná data. Zdrojem jaderných dat jsou experimenty prováděné ve speciálních laboratořích, knihovny jsou neustále aktualizovány a rozšiřovány. Knihovny jaderných dat jsou uloženy v textovém formátu ENDF-6 [4] udávajícím pravidla a možné/doporučené matematické popisy jaderných dat, které musí experimentální data splňovat.

Knihovny jaderných dat se liší rozsahem nuklidů, incidentních částic a aplikačních oblastí. Pro výpočty vyhořívání jaderného paliva jsou z obecné knihovny použita data neutronové knihovny a rozpadové knihovny. Aktuální verze americké knihovny jaderných dat ENDF/B-VII.1 z roku 2011 obsahuje 423 nuklidů neutronové knihovny a 3820 nuklidů rozpadové knihovny.

V neutronové knihovně jsou uloženy především účinné průřezy. K dispozici je popis různých typů jaderných reakcí, pro vyhořívání a transport neutronů jsou nejdůležitějšími reakcemi pružný a nepružný rozptyl (n,n'), štěpení (n,f), vícenásobný rozptyl (n,xn) a absorpční reakce se ztrátou neutronu ($n,0n$), mezi které patří především radiační záchyt (n,γ) a reakce s tvorbou protonu (n,p), deuteronu (n,d), tritonu (n,t) a α částice (n,α). Spolu s účinnými průřezy jsou uložena data popisující energetické a úhlové rozdělení výstupních částic jaderných reakcí. Pro popis štěpení jsou navíc uložena data multiplikace neutronů $\nu(E)$ (průměrný počet neutronů, které vzniknou při štěpení), štěpné spektrum $\chi(E)$ (energetická distribuce neutronů vznikajících při štěpení, viz Obr. 2.3), a výtěžky štěpení $fpy(E)$ ("fission product yield", distribuce štěpných nuklidů vznikajících při štěpení, viz Obr. 2.3.⁴)

V rozpadové knihovně jsou uloženy hmotnosti nuklidů, přeměnové konstanty λ a rozpadová schémata nuklidů. Popis radioaktivního chování nuklidů je proveden tzv. rozpadovým schématem, které obsahuje možné radioaktivní přeměny (tzv. rozpadové módy) a jejich pravděpodobnosti (rozpadové podíly, "branching fractions"). Celkem je k dispozici 19 rozpadových módů, nejčastějšími módy jsou β^+ rozpad, β^- rozpad, α rozpad, izomerní konverze a beta zpožděná emise neutronu. Ze 3820 nuklidů rozpadové knihovny je 6 % nuklidů stabilních, 57 % nuklidů se rozpadá jediným rozpadovým módem, 31 % nuklidů se rozpadá dvěma rozpadovými módy a zbylých 6 % se rozpadá 3 až 5 rozpadovými módy. Počet rozpadových schémat neřeší počet dceřinných jader, které se pohybují od 1 (β rozpad) ke dvěma stům (spontánní štěpení).



Obr. 2.3: Příklad štěpného spektra neutronů a výtěžku štěpných produktů.

Mezi nejznámější a nejpoužívanější obecné knihovny jaderných dat patří americká knihovna ENDF/B-VII.1 (aktuální verze z roku 2011), evropská knihovna JEFF-3.2 (rok 2014), japonská knihovna JENDL-4.0 (rok 2010), ruské knihovny BROND-2.2 (rok 1993)

⁴Tzv. "velbloud", tj. při štěpení vzniká vysoký počet nuklidů, nejpravděpodobnější je vznik dvou nuklidů s váhou cca 1/3 a 2/3 váhy rozštěpeného aktinidu.

a RUSFOND-2010 (rok 2010) a čínská knihovna CENDL-3.1 (rok 2009). Příkladem speciální knihovny je reaktorově-dozimetrická knihovna IRDFF-v1.05 (rok 2014). Nejrozsaáhlejší knihovnou jaderných dat je knihovna TENDL-2014 (každoročně aktualizována), obsahující data i pro energie výrazně výše, než je typická reaktorová hranice 20 MeV, pro vyšší počet nuklidů i reakcí než ostatní knihovny jaderných dat – při tvorbě knihovny je kromě jiného využit kód TALYS simulující srážky částic.

Data z knihoven jaderných dat nelze přímo použít pro transportní kódy, převod do formátu vhodného pro výpočty je prováděn speciálními kódy, z nichž nejužívanější jsou NJOY [13], [14], PREPRO [15] a AMPX [16], [3].

2.7 Výpočetní kódy

Výpočet vyhořívání jaderného paliva je rozdělen na jednotlivé časové intervaly (kroky vyhořívání), ve kterých jsou řešeny Batemanovy rovnice, transportní rovnice a jejich vzájemné vztahy. Batemanovy rovnice jsou řešeny kódy pro výpočet inventáře, transportní rovnice transportními kódy a jejich vzájemný vztah řeší pomocné kódy.

Kódy pro výpočet inventáře jsou základem výpočtu vyhořívání a v případě, že je použito vhodně zvolených efektivních účinných průřezů, není potřeba transportního výpočtu pro určení inventáře paliva. Typickým kódem pro výpočet inventáře je kód ORIGEN, jehož nejpoužívanější verze ORIGEN-S je součástí sady kódů SCALE a verze ORIGEN2 je užívána mimo sadu SCALE a je doplňována různými transportními kódy.

Standardem v oblasti transportních kódů je Monte Carlo kód MCNP, který prošel dlouhým vývojem a pečlivou validací. Kód MCNP je součástí několika systémů pro výpočet vyhořívání, které využívají kód ORIGEN2 nebo externí procedury pro řešení Batemanových rovnic.

Výpočet vyhořívání v jaderném průmyslu je modelován sadou kódů SCALE a kódem MCNP z amerických laboratoří, britským kódem WIMS, ruskou sadou kódů KASKAD, francouzským kódem APOLLO, švédským kódem HELIOS a finským kódem SERPENT. Modulární systém SCALE počítá inventář paliva kódem ORIGEN-S, účinné průřezy pro ORIGEN-S lze použít předem připravené (sekvence kódů ORIGEN-ARP), nebo je počítat v rámci výpočtu vyhořívání sekvencí kódů TRITON. Sekvence TRITON řeší transportní rovnici 2-D deterministickým kódem NEWT nebo 3-D statistickým kódem KENO. Kódy WIMS, APOLLO, HELIOS a TVS ze sady KASKAD řeší transportní rovnici deterministickými způsoby (S_n metoda, metoda charakteristik), kód SERPENT řeší transportní rovnici Monte Carlo simulací, kód pro výpočet inventáře je součástí procedur uvedených transportních kódů. Kód MCNP využívá kódu pro výpočet inventáře CINDER pro modelování vyhořívání Monte Carlo simulací. Výčet dalších, méně často užívaných systémů pro výpočet inventáře, je proveden v práci [17].

2.8 Vyhořívající absorbátory

Jednoduchý model vyhořívání paliva s vyhořívajícím absorbátorem, jehož cílem je předložit typický průběh efektivního koeficientu násobení v průběhu vyhořívání, je popsán Batemanovými rovnicemi ve tvaru

$$\begin{aligned}
 \frac{dN_U(t)}{dt} &= -\sigma_U^t N_U(t) \varphi(t) \\
 \frac{dN_A(t)}{dt} &= -\sigma_A^t N_A(t) \varphi(t) \\
 \sigma_U^t N_U(t) \varphi(t) &= \sigma_U^t N_{U0} \varphi_0 \\
 N_U|_{t=0} &= N_{U0} \\
 N_A|_{t=0} &= N_{A0} \\
 \varphi(0) &= \varphi_0
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

kde N_U je hustota jader uranu s celkovým účinným průřezem σ_U^t , N_A hustota jader vyhořívajícího absorbátoru s celkovým účinným průřezem σ_A^t a $\varphi(t)$ je hustota toku neutronů. Pro stacionární reaktor platí vztah mezi výkonem a hustotou toku neutronů (2.1), tj. reakční rychlost na palivu je v čase konstantní. Jednoduchý model předpokládá, že palivo ve formě uranu i vyhořívající absorbátor se ze systému ztrácí vyhoříváním a jiné bilanční vztahy nejsou přítomné. V reálném modelu se množství paliva snižuje, zjednodušení modelu je v použití jediného nuklidu paliva. Ztrácení vyhořívajícího absorbátoru pouze vyhoříváním je zjednodušeným ekvivalentem základního požadavku na vyhořívající absorbátor, tj. aby konečný nuklid, který vznikne vyhoříváním VA, měl minimální/nulový účinný průřez.

Řešení soustavy rovnic (2.21) lze nalézt ve tvaru

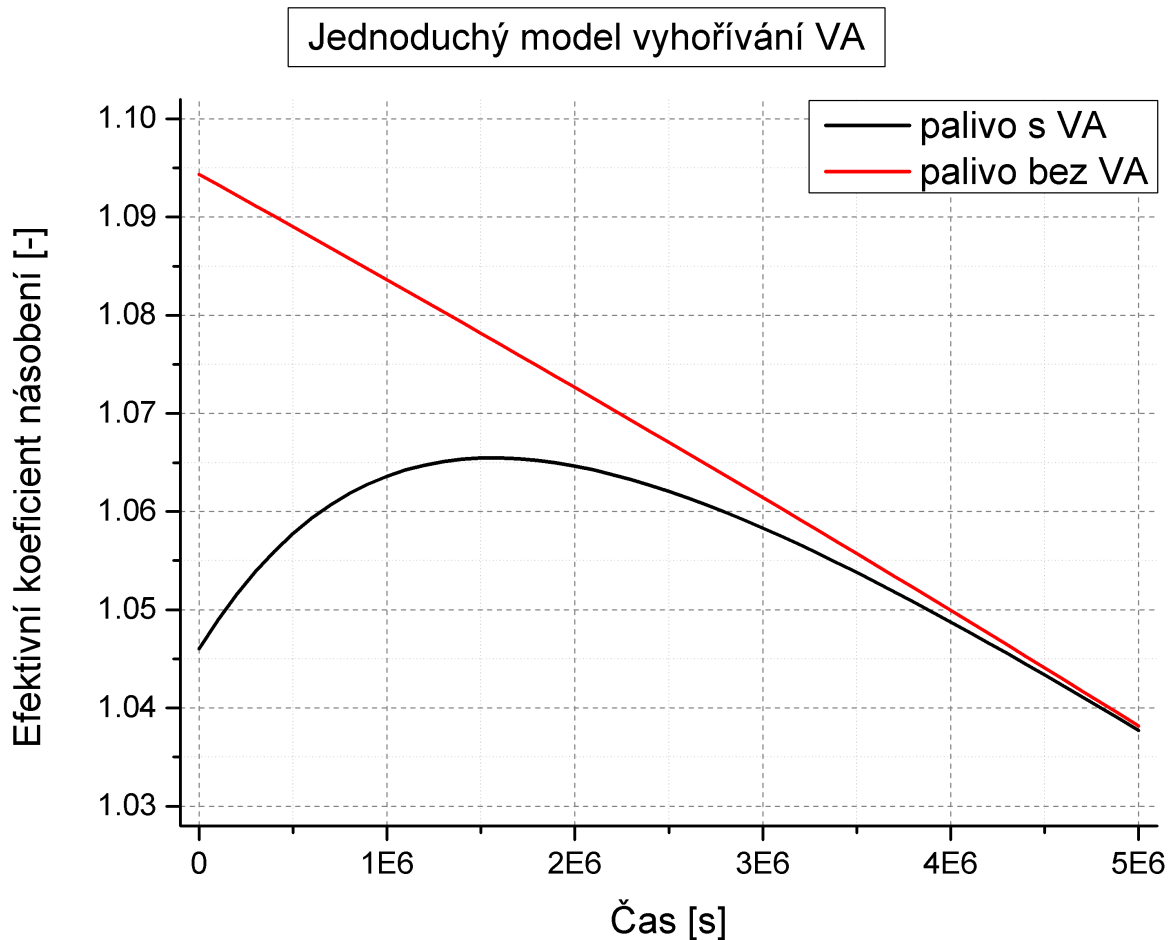
$$\begin{aligned}
 \varphi(t) &= \frac{\varphi_0}{(1 - \sigma_U^t \varphi_0 t)} \\
 N_U(t) &= N_{U0} (1 - \sigma_U^t \varphi_0 t) \\
 N_A(t) &= N_{A0} (1 - \sigma_U^t \varphi_0 t)^{\frac{\sigma_A^t}{\sigma_U^t}}
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

Typický průběh efektivního koeficientu násobení $k_{eff}(t)$ lze zjednodušit definicí $k_{eff}(t)$ jako podílu počtu neutronů ze štěpení a počtu absorbovaných neutronů

$$k_{eff}(t) = \frac{\nu \sigma_U^f N_U(t)}{\sigma_U^t N_U(t) + \sigma_A^t N_A(t) + \sigma_M^t N_M(t)} \tag{2.23}$$

kde index M značí moderátor systému. Grafický průběh $k_{eff}(t)$ podle předchozí rovnice pro palivo tepelných reaktorů s hodnotami pro tepelnou energii 0.0253 eV⁵ je zobrazen na Obr. 2.4.

⁵ $\varphi_0 = 3.0E+13 \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$, $\sigma_U^t = 699 \text{ b}$, $\sigma_A^t = 3.0E+04 \text{ b}$, $\sigma_U^f = 585 \text{ b}$, $\nu = 2.43$, $N_{U0} = 5.00E-03 \text{ b}^{-1}\text{cm}^{-1}$, $N_{A0} = 1.00E-05 \text{ b}^{-1}\text{cm}^{-1}$, $\Sigma_M = 3 \text{ cm}^{-1}$



Obr. 2.4: Jednoduchý model vyhořívání paliva s vyhořívajícím absorbátorem.

Vyhořívající absorbátor se primárně používá jako dlouhodobá regulace jaderného reaktoru, kdy je potřeba kompenzovat vysokou reaktivitu čerstvého paliva. Se zvyšujícím se obohacením paliva roste počáteční přebytek reaktivity, který lze bórovou regulací kompenzovat pouze do určité míry. Počáteční reaktivita je kompenzována vyhořívajícím absorbátorem, v průběhu vyhořívání se koncentrace VA snižuje a reaktivita paliva se na počátku vyhořívání zvyšuje, až dosáhne maxima a poté se reaktivita paliva s VA asymptoticky blíží reaktivitě paliva bez VA. Vyhořívající absorbátor by měl mít co nejvyšší účinný průřez. Konečné produkty vyhořívání VA představují dlouhodobou zápornou reaktivitu v palivu, proto by měly mít minimální účinný průřez. V případě nulového účinného průřezu produktů vyhořívání VA je po vyhoření VA reaktivita paliva s VA shodná s reaktivitou paliva bez VA. Kromě neutronických vlastností by měl VA mít i příznivé mechanické (tepelná vodivost) a chemické (kompatibilita s palivem) vlastnosti.

Kromě dlouhodobé regulace jaderného reaktoru může být vyhořívající absorbátor jediným prostředkem k zajištění záporného teplotního koeficientu reaktivity chladiva, například v případě lehkovodních reaktorů s kyselinou boritou v chladivu. V případě zvýšení teploty se snižuje hustota vody, její moderační schopnosti i reaktivita, ale zároveň se sni-

žuje koncentrace jader bóru v kyselině borité, snižují se absorpční schopnosti kyseliny borité i reaktivita. Při vysoké koncentraci kyseliny borité začíná převažovat druhý efekt, proto existuje maximální koncentrace kyseliny borité v chladivu a tím i její schopnosti kompenzovat počáteční reaktivitu paliva.

Vyhořívající absorbátory ovlivňují nevyrovnání výkonu v palivovém souboru, při návrhu designu palivového souboru s heterogenním rozložením vyhořívajícího absorbátoru musí být respektován limit maximálního relativního výkonu nejzatíženějšího proutku.

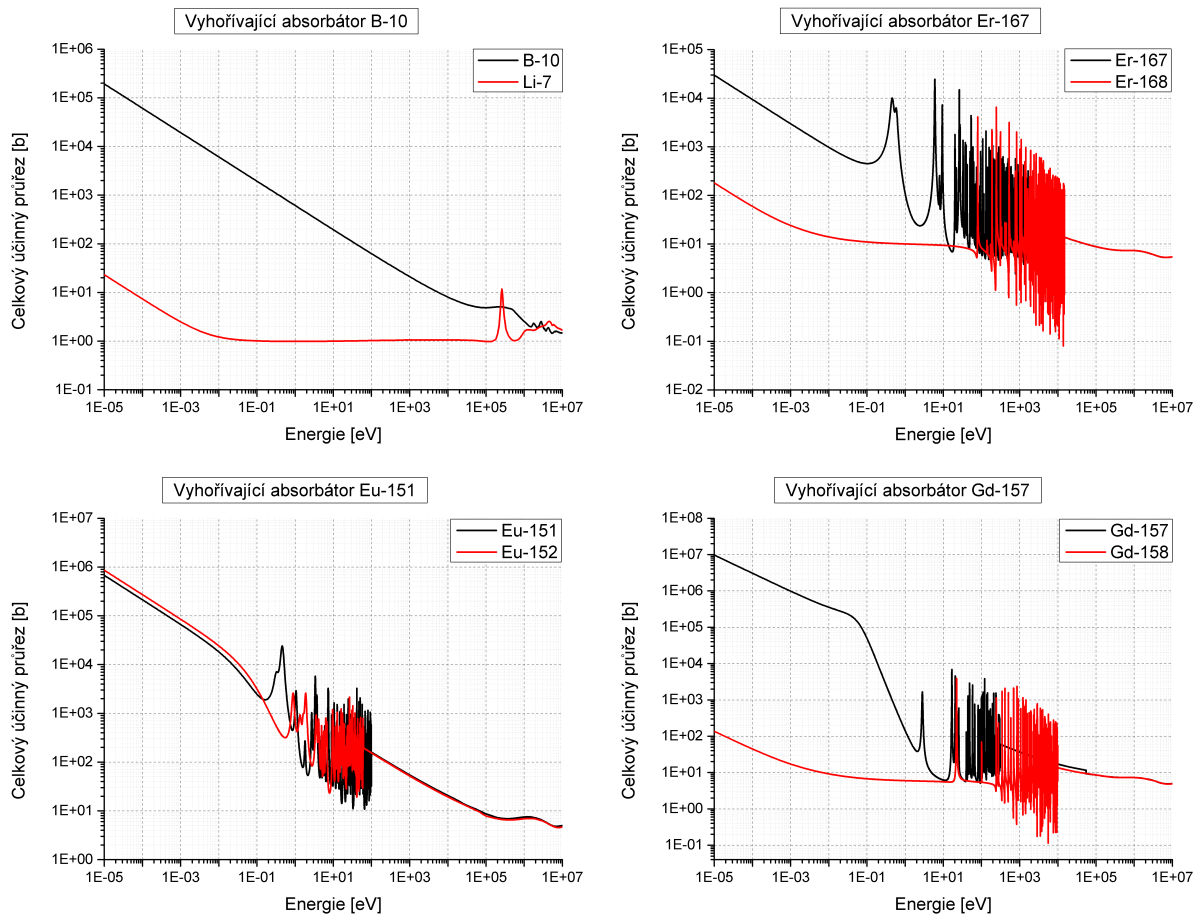
V současnosti se jako vyhořívající absorbátory používá bór, erbium, europium a gadolinium. Používají se v přírodním izotopickém složení, vyhořívající nuklidy jsou B-10, Er-167, Eu-151 a Gd-157, které prochází reakcemi



s účinnými průřezy graficky zobrazenými na Obr. 2.5. Vysoký rozdíl v účinných průřezech mezi VA a jeho prvním produktem vyhořívání znamená vysokou kompenzaci počátečního přebytku reaktivity, ale také může znamenat příliš vysokou rychlost vyhořívání. Z důvodu nižších rozdílů mezi účinnými průřezy Eu-151 a Eu-152 je rychlost vyhořívání europia malá a VA ovlivňuje reaktivitu paliva po delší dobu. Vliv na rychlost vyhořívání má koncentrace nuklidů VA závisící na jejich atomové hmotnosti, proto např. bór, který je o jeden řád lehčí než ostatní uvedené VA, je možné použít v nižším hmotnostním podílu než u ostatních VA.

Vliv na efektivitu VA v případě použití přírodního má i relativní zastoupení vyhořívajícího nuklidu. V případě bóru je obsah vyhořívajícího nuklidu B-10 pouze 19.9 at%, zbytek tvoří B-11 s nízkým účinným průřezem. V případě erbia je obsah vyhořívajícího nuklidu Er-167 22.9 at%, navíc je v přírodním složení přítomen nuklid Er-166 s obsahem 33.5 at%, ze kterého reakcí (n, γ) vzniká Er-167, tj. k vyhořívání erbia dochází částečně i se zpožděním. Obsah Eu-151 v přírodním europiu 47.8 at%, zbylých 52.2 at% připadá na Eu-153, který se rovněž chová jako VA, ale jeho účinný průřez je výrazně nižší než pro Eu-151. Gadolinium, používané jako VA pro reaktory typu VVER, má velmi vysoký účinný průřez a vyhořívá velmi rychle. V přírodním gadolinium je přítomno 14.8 at% nuklidu Gd-155 a 15.65 at% nuklidu Gd-157, oba se chovají jako VA, vyhoříváním slaběji absorbujícího nuklidu Gd-155 vzniká Gd-156 a poté i Gd-157, proto je pro přesný popis vyhořívání nutno použít plné soustavy Batemanových rovnic.

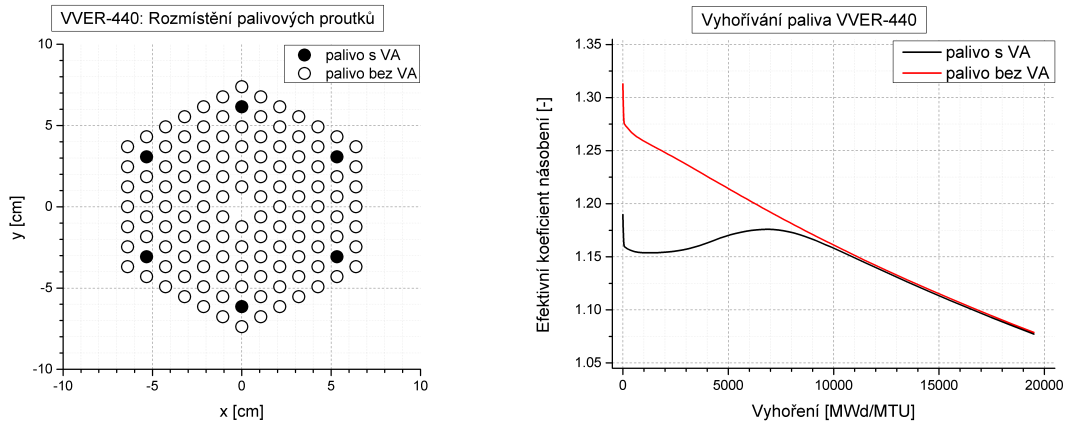
V českých reaktorech typu VVER se používá vyhořívajícího absorbátoru ruského designu ve formě Gd_2O_3 smíchaného s palivem UO_2 , alternativní americký design IFBA je založený na vrstvě ZrB_2 nastříkané na palivo. Podíl Gd_2O_3 v palivu s VA je 3.35 wt% pro VVER-440 a 5.0 wt% pro VVER-1000. Současné palivo VVER-440 typu Gd-2M+ má 6 palivových proutků s VA, často užívané palivo VVER-1000 typu TVSA-T P44G2



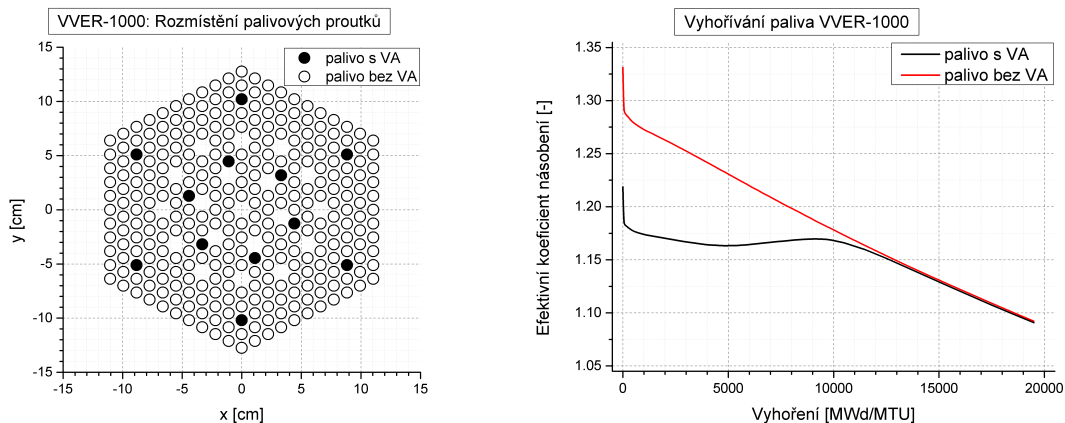
Obr. 2.5: Účinné průřezy nejpoužívanějších vyhořívajících absorbátorů.

má 12 palivových proutků s VA, rozložení palivových proutků s VA v geometrii palivového souboru včetně průběhu vyhořívání paliva je zobrazeno na Obr. 2.6. Hmotnostní podíl VA a jeho umístění je voleno tak, aby nevyrovnání výkonu bylo co nejnižší a aby se průběh k_{eff} na počátku vyhořívání blížil konstantnímu průběhu.

Vyhořívající absorbátory se používají v diskrétní a integrální formě. Diskrétní forma VA je tvořena proutky s VA, umístěných na pozicích místo palivových proutků, používaly se zejména v minulosti jako borosilikátové sklo s ocelovým pokrytím (absorbátor B-10), následované proutky z bórem v matrici $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-B}_4\text{C}$ a zirkoniovým pokrytím, označované jako BPRA ("Burnable Poison Rod Assembly"), později proutky s přidáním vnitřním pokrytím, kde se vytvořila vnitřní moderátorová dutina v proutku, označované jako WABA ("Wet Annular Burnable Absorber"). Integrální forma VA je tvořena absorbátorem smíchaným s palivem, nebo tenkou vrstvou absorbátoru nastříkanou na palivové proutky. Vyhořívající absorbátor v matrici paliva je nejčastěji používán ve formě oxidu gadolinia (reaktory typu VVER, reaktory firmy AREVA, varné reaktory) nebo erbia (reaktory typu RBMK, reaktory firmy Combustion Engineering). Tenká vrstva absorbátoru na povrchu palivových proutků je tvořena ZrB_2 (reaktory firmy Westinghouse). V rychlých reaktorech je používán vyhořívající absorbátor ve formě tenké vrstvy B_4C .



(a) Palivo VVER-440.



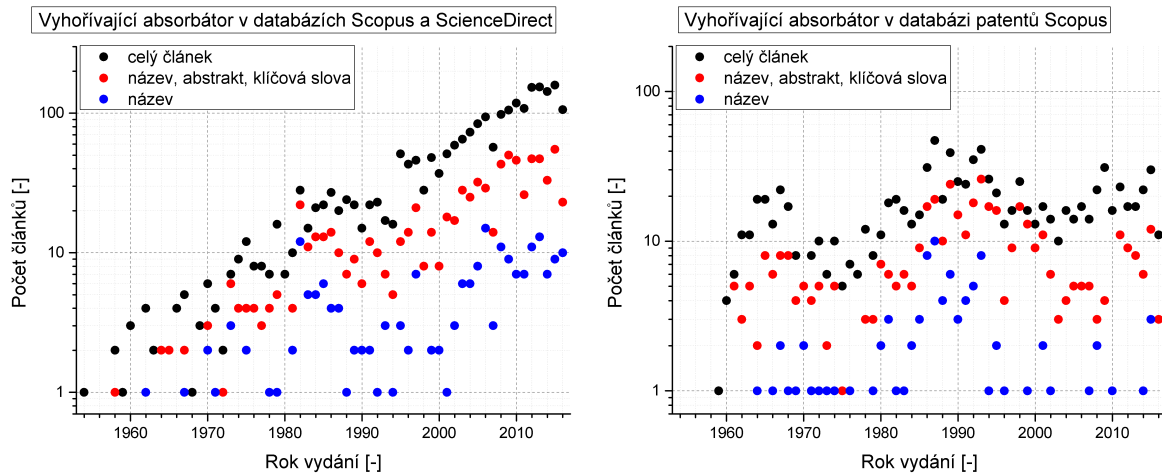
(b) Palivo VVER-1000.

Obr. 2.6: Vyhořívání současného paliva VVER s vyhořívajícími absorbátory.

2.9 Rešerše literatury

Vyhořívající absorbátory se v literatuře označují jako "burnable absorber", časté je také označení vyhořívající jed ("burnable poison"). Impaktované časopisy a sborníky z mezinárodních konferencí v oblasti jaderného inženýrství jsou obsaženy v online databázích Scopus a ScienceDirect, frekvence termínu vyhořívající absorbátor/jed v článcích a v patentech je graficky zobrazena na Obr. 2.7. Vyhořívající absorbátory se v energetických reaktorech využívají od poloviny 70. let 20. století, v souvislosti se zvyšujícím se obohacením paliva se i výzkum v oblasti vyhořívajících absorbátorů rozvíjí. Pro rešerši byly vybrány všechny články z databází Scopus a ScienceDirect, kde jsou VA obsaženy v názvu článku, abstraktu nebo klíčových slovech. Z vybraných 255 článků byl po přečtení abstraktů jejich výběr zúžen na 80 článků, z nichž po jejich přečtení byla provedena rešerše na základě 59 článků.

Výzkum vyhořívajících absorbátorů lze rozdělit na několik základních oblastí, které se vzájemně ovlivňují:



Obr. 2.7: Vyhořívající absorbátory v literatuře.

- výběr materiálu vyhořívajícího absorbátoru
- experimentální ověření vlastností vyhořívajícího absorbátoru (možnosti výroby, mechanické a teplotní charakteristiky, izotopické složení vyhořelého proutku s VA pro výpočty kritičnosti)
- design vyhořívajícího absorbátoru v palivovém proutku (diskrétní VA, integrální VA) nebo palivovém elementu (WABA)
- design vyhořívajícího absorbátoru v palivovém souboru (určení hmotnostního podílu VA, určení počtu PP s VA, obohacení PP v PS)
- optimalizace závazek aktivní zóny, kdy je cílem určení rozložení PS v AZ z inventáře PS v bazénu skladování a čerstvých PS a ověření dosažení bezpečnostních limitů během kampaně, může mít vliv na rozmístění VA

V současné době se používá VA ve formě sloučenin B, Er, Eu, Gd. Ruská úvaha z roku 1960 popisuje výhody vyhořívajících absorbátorů [18] a možné způsoby, jak VA v reaktorech využít, jako možné materiály vyhořívajících absorbátorů jsou vyjmenovány B, Hf, Eu, Gd, Sm, Cd a Hg. Studie, věnující se různým materiálům VA, si často vybírají prvky vzácných zemin. Ve studii [19] jsou uvažovány prvky vzácných zemin Gd, Sm, Er, Eu, Dy. Uvedeny jsou hlavní technické parametry VA včetně ceny (1997). Francouzská studie pro 18měsíční kampaně PWR s palivem 4.5 wt% doporučuje použití pouze Gd a Er, gadolinium jako heterogenní VA (ve 12/264 PP s obsahem 8.0 wt%) a erbium jako homogenní VA (s obsahem 0.5 wt%). V případě gadolinia je ukázáno, že počet PP ovlivňuje počáteční kompenzaci reaktivity a obsah VA ovlivňuje délku vyhořívání VA. Studie navrhuje optimalizaci VA ve formě kombinace Gd-155 a Eu-153. Článek vychází z disertační práce [20]. Vyhořívající absorbátor v oblasti vnitřního a vnějšího reflektoru grafitem moderovaného reaktoru je předmětem nizozemské studie [21]. Kandidátními materiály jsou B-10,

Cd-113, Sm-149, Eu-151, Gd-155, Gd-157, Dy-161, Dy-164, Er-167, Hf-177, výpočetně byl ověřen B-10. Korejská studie [22] vysokoteplotního reaktoru s hexagonálním palivem s obohacením 12.0 wt% uvažuje B, Gd, Er, Eu, Sm, Dy jako VA, který je umístěn v 6/216 palivových blocích. Chemické složení 1.55 wt% B_4C , 4.0 wt% Dy_2O_3 , 7.7 wt% Er_2O_3 , 0.75 wt% Eu_2O_3 , 2.0 wt% Gd_2C_3 , 2.0 wt% Gd_2O_3 , 1.5 wt% Sm_2O_3 bylo voleno tak, aby počáteční kompenzace reaktivity byla pro všechny VA shodná. Jako perspektivní materiály byly vybrány B_4C , Gd_2C_3 a Gd_2O_3 .

V ruském palivu, používaném na českých jaderných elektrárnách, se využívá Gd v palivu, výsledky výzkumu srovnávajícího alternativní design VA na bázi B-10 v nástřiku na palivu, nebo v mezeře palivo-pokrytí, jsou prezentované v [23] pro palivo RBMK a [24] pro palivo VVER. Výhodou bóru v nástřiku ZrB_2 na palivu oproti Gd_2O_3 v palivu je vyšší koeficient reaktivity při zvýšení teploty z důvodu rozdílného tvaru závislosti účinných průřezů B-10 a Gd-157 v tepelné oblasti.

Nově vyvinuté palivo CANFLEX [25] do kanadských reaktorů CANDU bude využívat Dy_2O_3 jako vyhořívající absorbátor. Korejská studie uvažuje v palivu CANFLEX vyhořívající absorbátory 6.5 wt% Dy_2O_3 , 11.0 wt% Er_2O_3 , 2.2 wt% Eu_2O_3 a 28.0 wt% HfO_2 . Preferovaným řešením pro palivo s obohacením uranu 0.9 wt% je erbium. Pokročilé těžkovodní reaktory v Indii [26] uvažují použití Dy_2O_3 jako vyhořívajícího absorbátoru, podobně jako nová paliva pro CANDU reaktory v Kanadě a Koreji.

Er a Eu jsou vhodnými vyhořívajícími materiály, jejich rozšíření brání především vyšší cena v porovnání s Gd. Neutronické parametry jsou vhodnější, Er i Eu vyhořívají s nižší rychlostí než Gd a lze je využít homogenně v rámci palivového souboru. Er jako VA je uvažováno pro weapon-grade plutoniové kuličkové palivo vysokoteplotních reaktorů [27] i pro palivo MOX v reaktorech RBMK [28], kde jsou uvažovány i další materiály (Er, Gd, Hf a Lu). Americká studie [29] kuličkového paliva QUADRISO pro vysokoteplotní reaktory uvažuje vyhořívající absorbátor Eu_2O_3 , v dřívějších studiích bylo uvažováno Er_2O_3 . Jiná americká studie [30] dochází ke shodným závěrům, doporučuje Eu_2O_3 , použití Er_2O_3 popisuje jako méně výhodné. Brazílská studie využití Er ve výzkumném reaktoru s palivem U-Mo-Al doporučuje obsah 0.25 wt% [31].

Rychle vyhořívající gadolinium je možné doplnit druhým prvkem s absorpčními účinky i pro vyšší vyhoření. V české studii [32] s palivem VVER-440 se uvažuje kombinace Gd+Er pro 6-letý palivový cyklus s palivem obohaceným až na 7.0 wt% U-235. V kanadské studii [33] je VA ve formě Gd+Eu v přírodním palivu CANDU umístěn v tenké grafitové vrstvě mezi palivem a pokrytím.

Studie dlouhodobého provozu lehkovodních reaktorů pro rozvojové země [34] s obohacením uranu 19.5 wt% a využitím erbia jako VA umožňuje bezpečný provoz až do vyhoření 100 GWd/MTU. Erbium je uvažováno v koncentraci 1.0 wt% Er-167, jako maximální koncentrace bez vlivu na tepelnou vodivost. Do budoucna je doporučena směs Er-166 a Er-167 z důvodu vyrovnanějšího průběhu koeficientů reaktivity vlivem přítomnosti Er-166. Geometrie palivového elementu je volena tak, aby koeficient násobení na začátku

a konci vyhořívání nabýval hodnoty 1.05. Erbium je citováno jako nejslibnější VA pro ruské RBMK a francouzské PWR reaktory.

Jako vyhořívající absorbátory je možné použít minoritní aktinidy. Studie BWR [35] se věnuje použitím minoritních aktinidů Np-237 a Am-241 jako příměsí paliva odolného vůči proliferaci. Tyto minoritní aktinidy zvyšují podíl Pu-238 v plutoniovém vektoru, navíc fungují jako vyhořívající absorbátory. Uvažováno je palivo s obohacením 4.95 wt% s příměsí 0.5 wt% NpO₂, 0.5 wt% AmO₂, nebo 0.25 wt% NpO₂ + 0.25 wt% AmO₂. Studie PWR [36] se věnuje použitím minoritních aktinidů Np-237 a Am-241 jako příměsí paliva odolného vůči proliferaci. Tyto minoritní aktinidy zvyšují podíl Pu-238 v plutoniovém vektoru, navíc fungují jako vyhořívající absorbátory. Uvažováno je palivo s obohacením 4.5 wt% s příměsí 0.12 wt% Np-237 a současným použitím 20 WABA proutků, nebo 0.12 wt% Am-241 a současným použitím 16 WABA proutků. Čínské výpočty [37] vyhořívání paliva MOX v reaktoru s vysokou hustotou toku neutronů se zaměřují na residuální množství aktinidů po 300 dnech ozařování paliv s příměsí minoritních aktinidů Np-237, Am-241, Am-243, Cm-244, Cm-245, fungujících jako VA.

Jaderná paliva určená pro likvidaci zásob plutonia z jaderných zbraní jsou uvažována ve formě inertního paliva PuO₂, ve kterém není obsažen uran. Jako vyhořívající absorbátor je uvažováno především erbium ve formě Er₂O₃, které bylo z hlediska kritičnosti ověřováno experimentálně ve Švýcarsku [38] a USA [39] a výpočetně ve Švýcarsku [40], Japonsku [41] Rusku [42]. Gadolinium je uvažováno v ruské studii [42]. Německá studie [43] odolnosti inertního paliva PuO₂ s kandidátními VA B, Eu, Er, Gd vůči proliferaci poukazuje na lepší vlastnosti Er vůči Gd z hlediska teplotních koeficientů reaktivity paliva i chladiwa.

Dalším materiálem, který je možné použít jako vyhořívajícího absorbátoru, i když to není jeho primární účel, je Tc-99. Cílem této příměsí jaderného paliva je jeho transmutace [44]. Homogenní rozmístění Tc-99 v palivu snižuje jeho reaktivitu příliš, ale v mezeře palivo-pokrytí se chová jako dobrý VA s možností snížit koncentraci kyseliny borité až o 500 ppm.

Vyhořívající absorbátor není nutné používat ve formě přírodního složení, ale je možné využít možnosti obohacování, v praxi zatím jen pro B-10. Laserovým obohacováním [45] nuklidů Gd-155 a Gd-157 v gadolinu bylo dosaženo obohacení 33 wt% Gd-155 a 24 wt% Gd-157, tj. cca dvojnásobek přírodní koncentrace. Obdobných výsledků jako zmíněná indická studie, tj. zvýšení obsahu vyhořívajících izotopů Gd z přírodních 30 wt% až na 70 wt%, bylo experimentálně dosaženo ve Finsku [46]. Korejská studie využití obohacených VA v PWR [47] shrnuje, že obohacený Gd-157 v palivovém proutku vyžaduje pouze 1.5 wt% Gd₂O₃, obohacené Er-167 je nanášeno v tenké 400 μm vrstvě ZrEr₂ na palivové peletce, obě varianty prodlužují délku palivové kampaně o 10 dní. Ve studii vyhořívajících absorbátorů pro vysokoteplotní reaktory s kuličkovým palivem [48] je uvažováno B₄C s čistým B-10 a Gd₂O₃. Korejská studie sodíkem chlazeného rychlého reaktoru [49] uvažuje B₄C jako vyhořívající absorbátor s obohacením 90 wt% B-10. Uvažováno je homogenní uspořádání VA (30 proutků VA bez paliva v PS obsahujícím 271 palivových

proutků) a heterogenní uspořádání VA (6 PS obsahuje pouze VA proutky bez paliva). Záporného koeficientu reaktivity sodíkového chladiwa je dosaženo pouze heterogenním uspořádáním VA. Japonská studie vysokoteplotního reaktoru [50] s hexagonálním pali-
vem s obohacením 20.0 wt% uvažuje B_4C (90 wt% B-10), Gd_2O_3 , Er_2O_3 , CdO jako VA. Optimalizovaný design paliva obsahuje $Gd_2O_3+B_4C$ nebo $CdO+B_4C$.

Materiál vyhořívajícího absorbátoru je součástí experimentálních analýz, které ověřují charakteristiky VA nebo charakteristiky paliva s VA, včetně validací výpočetních kódů. Německá studie [51] se věnuje gadolinium s nízkou koncentrací v palivu PWR. Z důvodu malé tepelné vodivosti gadolinia a limitů na teplotu paliva se palivové proutky s gadolinium obohacují na nižší hodnoty než ostatní PP v PS. Experimentálně je ověřeno, že do koncentrace 2.0 wt% Gd_2O_3 není nutné snižovat uvažované obohacení paliva a je možné využít 18měsíční kampaň s palivem 4.15 wt% a 12 gadoliniových proutcích v palivu 18x18 pro Siemens PWR.

Pro gadolinium ukázalo korejské experimentální měření [52] tepelné vodivosti práškově připravených pelet $Gd_xM_yO_z$ ($M=Ti, Zr, Al$) nejvyšší hodnoty pro $GdAlO_3$ a $Gd_xTi_yO_z$. Korejské experimenty [53] vlivu příměsi MnO na denzifikaci paliva UO_2 s 10.0 wt% Gd_2O_3 ukázaly, že 0.1 wt% MnO sníží teplotu slinování o více než 100 °C. Pro gadolinium a dysprosium ukázalo korejské experimentální měření [54] závislost tepelné vodivosti $Gd_xTi_yO_z$ a $Dy_xTi_yO_z$ na obsahu VA a stechiometrii sloučeniny. Stechiometrie 2-1-5 má nejnižší tepelnou vodivost, která dále klesá se zvyšujícím se obsahem VA. Japonská studie tepelné roztažnosti [55] a teploty tání [56] palivových pelet $UO_2-Gd_2O_3$ prokázaly malý vliv VA v palivu, pro maximální uvažovanou teplotu 2000 K a maximální obsah 10 wt% Gd_2O_3 je lineární tepelná roztažnost $UO_2-Gd_2O_3$ o 6.2 % vyšší než pro UO_2 a rozdíl v teplotě tání do 10 °C jsou pro vyhoření 30000 MWd/MTU na úrovni chyby měření.

Benchmarkové ověření rozdílů výpočtu a experimentu pro gadolinium [57] v palivu 17x17 PWR Monte Carlo kódem MCB ukazuje dobrou shodu v izotopickém složení Gd-156, Gd-158 a Gd-160, rozdíly do 10 % pro Gd-154 a Gd-157 a nad 10 % pro Gd-152 a Gd-155. Francouzský experimentální výzkum [58] v oblasti přípravy kovově-keramického paliva UO_2 s erbiem jako VA je doplněn validací [59] výpočetních kódů pro čerstvé palivo UO_2 s erbiem. Výsledkem japonských tepelně-mechanických experimentů [60] s palivem $(U,Er)O_2$ jsou vzorce pro mřížkový parametr, Youngův modul a tepelnou vodivost v závislosti na obsahu erbia v palivu.

Po výběru materiálu vyhořívajícího absorbátoru se provádí optimalizace designu palivového souboru. Jednou z možností je kombinace různých typů VA. Při validaci švýcarského transportního a difúzního kódu ELCOS [61] byla navržena kombinace dvou typů PP s VA (WABA a IFBA) v jednom PS. Modelování bóru je ukázáno jako výpočetně jednodušší než modelování gadolinia. Při vývoji amerického reaktoru IRIS [62] s obohacením 4.95 wt% je pro 36měsíční kampaň uvažován kombinovaný VA ve formě ZrB_2 (IFBA) a Er_2O_3 (IBA). Design spojuje výhody erbia (dlouhodobá kompenzace reaktivity, dobrý moderátorový koeficient reaktivity, malé nevyrovnání výkonu) a IFBA (žádná zbytková

reaktivita). Ekonomický model kombinovaného vyhořívajícího absorbátoru je výhodnější než standardní IFBA pro Westinghouse PWR. Rychlý výpočetní kód $U_W B_1$ lze využít pro efektivní výběr kombinace různých typů VA.

Vyhořívající absorbátory IFBA jsou tvořeny vrstvou VA nanesenou na palivovou peletu, další možností je VA v oblasti pokrytí. Experimenty v laboratoři Sandia [63] se zaměřily na nanesení vrstvy Gd nebo B na zirkoniové pokrytí pomocí pulzního iontového paprsku. Oba prvky nejsou v zirkoniu rozpustné a běžné způsoby pokrytí v prostředí AZ nevyhovují. Vrstva z gadolinia není z důvodu vysoké teplotní koroze použitelná, na rozdíl od oxidačně odolné bórové vrstvy. Nově se vrací možnost využití VA diskrétního typu, korejská studie popisuje VA typu BigT – burnable absorber integrated guide thimble [64]. Výpočetní kód $U_W B_1$ umožňuje výpočet vyhořívání s VA umístěným v palivu i v jeho pokrytí.

Optimalizace zavážení PS v AZ je úloha s vysokým počtem proměnných, každé řešení lze považovat pouze za nejlepší řešení s daným algoritmem v daném výpočetním čase. Lze využít jednoduché vzorce lineárního modelu reaktivity pro ocenění možnosti využití VA [65], složitější nelineární model optimalizace zavážecího schématu PWR na základě perturbační teorie ve vyhořívání [66], [67]. Optimalizaci umístění IFBA v PWR deterministickým algoritmem se věnuje [68], genetický algoritmus, jehož cílem je maximalizace vývinu energie v aktivní zóně, je popsán v [69]. Další možností je využití metody simulovaného ochlazování, pro PWR s VA viz [70], [71]. Při použití nových typů VA s homogenním rozložením podle výpočetního kódu $U_W B_1$ by bylo možné odstranit nutnost optimalizace umístění VA v PS a zvýšit efektivitu optimalizace zavážek AZ.

Studie Penn State University [72], navazující na disertační práci [73], se věnuje optimalizaci zavážek PWR. Genetickým algoritmem je ve dvou krocích řešena optimalizace rozmístění PS v AZ a VA Gd_2O_3 v PS. Optimalizace není prováděna simultánně, jen způsobů rozmístění PS v AZ je pro 1/8 AZ typu PWR je cca $1E26$. Následná studie Penn State University [74], se věnuje optimalizaci zavážek PWR s palivem $UO_2-Gd_2O_3$ s obohacením Gd-155 a Gd-157, včetně ekonomické kalkulace. Použití 100 wt% Gd-157 neumožňuje splnění limitů nevyrovnání výkonu PP, naproti tomu 100 wt% Gd-155 umožňuje splnění limitů a snížení hmotnosti gadolinia v AZ PWR z 31.1 kg na 2.7 kg.

Španělský model optimalizace zavážek a rozložení VA [75] nahrazuje genetický algoritmus neuronovými sítěmi, testovaným modelem je TMI-1. Íránský model optimalizace zavážek a rozložení VA [76] využívá neuronové sítě na modelu VVER-1000. Čínská optimalizace zavážek VVER [77] řeší dvoukrokově rozmístění PS v AZ a VA Gd_2O_3 v PS. Íránská výpočetní studie VVER-1000 s různým umístěním Gd_2O_3 v AZ [78] ukazuje, že rozdíly v požadované koncentraci H_3BO_3 v chladiivu jsou podstatně nižší než rozdíly v nevyrovnání výkonu.

Základní neutronické parametry vyhořívajících absorbátorů, které byly v literatuře uvažovány, jsou shrnuty v Tab. 2.4, data pochází z knihoven ENSDF a ENDF/B-VII.1. Kromě 9 vyhořívajících absorbátorů ve formě prvků s přírodním složením (B, Cd, Sm,

Eu, Gd, Dy, Er, Hf, Hg) lze jako VA použít Tc-99 a minoritní aktinidy Np-237, Am-241, Am-243 a Cm-244. S výjimkou málo hmotného B s absorpční reakcí (n,α) je dominantní absorpční reakcí (n,γ) . Minoritní aktinidy po radiačním záchytu přejdou v těžší izotop, jehož nejpravděpodobnější reakcí je štěpení. U některých VA existuje dominantní nuklid, který nese vlastnosti vyhořívajícího absorbátoru (B-10, Cd-113). Ostatní VA obvykle obsahují několik vyhořívajících nuklidů, jejichž schéma vyhořívání je rozdílné.

Vyhořívání B, Eu a Er je zajímavé z hlediska vzájemných přeměn mezi nuklidy vyhořívajícího elementu. V případě B je vyhořívající nuklid B-10 přeměněn na nuklid B-11 s nízkými účinnými průřezy. Vyhořívající nuklid Eu-151 se po dvojnásobné absorpci přemění na nuklid Eu-153, jehož účinný průřez v tepelné oblasti není zanedbatelný a lze jej rovněž považovat za vyhořívající nuklid (navíc s přírodním zastoupením 52 at%). Na rozdíl od B probíhá vyhořívání Eu ve dvou stupních (Eu-151, Eu-153), druhý stupeň je proti prvnímu částečně opožděn, protože část Eu-153 není v palivu přítomna na počátku provozu, ale až po přeměně z Eu-151. Er obsahuje, podobně jako Eu, kromě dominantního vyhořívajícího nuklidu (Er-167), další vyhořívající nuklid (Er-166 s přírodním zastoupením 33 at%). Nuklid Er-166 vyhořívá velmi pomalu, ale ihned se přeměňuje na Er-167, který vyhořívá podstatně rychleji. Z tohoto důvodu je vyhořívání Er ze tří vybraných vyhořívajících prvků nejpomalejší a přebytečná reaktivita je kompenzována do vyšších hodnot vyhoření.

Tab. 2.4: Neutronické parametry vybraných vyhořívajících absorbátorů.

VA [-]	Reakce [-]	Izotop [-]	Přír. složení [at%]	$\sigma_{0.0253eV}$ [b]	$\sigma_{0.625eV}$ [b]
B	(n,α)	10	19.80	3843.5	772.9
	(n,γ)	11	80.20	0.0	0.0
Cd		106	1.25	1.0	0.2
		108	0.89	0.9	0.2
		110	12.49	11.0	2.0
	(n,γ)	111	12.80	6.9	1.3
		112	24.13	2.2	0.4
		113	12.22	19969.3	531.3
		114	28.73	0.3	0.1
		116	7.49	0.1	0.0

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany					
VA [-]	Reakce [-]	Izotop [-]	Přír. složení [at%]	$\sigma_{0.0253eV}$ [b]	$\sigma_{0.625eV}$ [b]
		144	3.07	1.6	0.3
		147	14.99	57.0	11.8
		148	11.24	2.4	0.5
		149	13.82	40511.7	596.6
Sm	(n, γ)	150	7.38	100.0	18.2
		151	—	15142.2	330.9
		152	26.75	206.0	48.3
		153	—	420.1	114.3
		154	22.75	8.3	1.6
		151	47.81	9184.7	1599.4
		152	—	12795.8	339.7
		153	52.19	358.0	44.9
Eu	(n, γ)	154	—	1353.1	132.9
		155	—	3760.3	59340.3
		156	—	100.0	20.1
		157	—	110.8	14.5
		152	0.20	735.1	123.4
		153	—	22333.9	36.8
		154	2.18	85.2	10.9
		155	14.80	60737.1	124.7
Gd	(n, γ)	156	20.47	1.8	0.4
		157	15.65	252911.8	425.7
		158	24.84	2.2	0.5
		160	21.86	1.4	0.3
		156	0.06	33.1	10.3
		158	0.10	43.1	5.4
		160	2.34	56.0	16.2
Dy	(n, γ)	161	18.91	600.2	77.8
		162	25.51	194.0	49.1
		163	24.90	123.4	50.5
		164	28.18	2653.3	309.3
		162	0.14	18.9	4.0
		164	1.60	13.0	2.6
Er	(n, γ)	166	33.50	16.9	3.3
		167	22.87	649.8	3545.8
		168	26.98	2.7	0.6
		170	14.91	8.9	1.8
pokračování na další straně					

pokračování z předchozí strany					
VA [-]	Reakce [-]	Izotop [-]	Přír. složení [at%]	$\sigma_{0.0253eV}$ [b]	$\sigma_{0.625eV}$ [b]
		174	0.16	549.5	64.8
		176	5.26	21.4	4.8
Hf	(n, γ)	177	18.60	373.7	277.2
		178	27.28	83.9	19.3
		179	13.62	42.8	7.9
		180	35.08	13.1	2.6
		196	0.15	3078.2	360.8
		198	9.97	2.0	0.4
		199	16.87	2149.6	264.5
Hg	(n, γ)	200	23.10	1.4	0.3
		201	13.18	4.9	1.0
		202	29.86	5.0	1.0
		204	6.87	0.4	0.4
Tc-99	(n, γ)	99	—	20.0	4.8
Np-237	(n, γ)	237	—	175.4	64.2
	(n,f)	238	—	2201.3	407.6
Am-241	(n, γ)	241	—	684.2	983.6
	(n,f)	242	—	2094.9	505.2
Am-243	(n, γ)	243	—	80.4	41.9
	(n,f)	244	—	2300.3	559.0
Cm-244	(n, γ)	244	—	15.2	3.2
	(n,f)	245	—	2054.1	200.8

3

Cíle dizertační práce

Cílem dizertační práce je navrhnout materiály pro budoucí vyhořívající absorbatory primárně na základě neutronově-fyzikálních výpočtů. Cílem dizertační práce je provést výpočty pro prvky, nuklidy a jejich kombinace pro různé typy jaderných reaktorů a analyzovat možnosti jejich použití v designu jaderného paliva. Na základě vhodně zvolené metriky bude oceněna míra účinnosti vyhořívajících absorbatů, která může sloužit pro další technicko-ekonomické analýzy.

V současnosti se jako vyhořívající absorbatory používá především bór a gadolinium, začíná se prosazovat erbium a europium, plánováno je dysprosium. Dostupné studie uvažují jako vyhořívající absorbatory především prvky vzácných zemin, kromě výše uvedených (Eu, Gd, Dy, Er) je uvažováno Sm, dále prvky s vysokým absorpčním účinným průřezem Cd a Hf, a nakonec minoritní aktinidy Np a Am, které zároveň zvyšují odolnost jaderného paliva vůči proliferaci. V přírodě se vyskytuje přes 80 prvků, které je možné potenciálně využít jako vyhořívající absorbatory.

V některých případech se vyplatí obohatit přírodní bór vyhořívajícím nuklidem B-10 na 90 wt%, ostatní vyhořívající absorbatory se používají v přírodním složení, ve kterém jsou vyhořívající nuklidy zastoupeny typicky v desítkách wt%. Výpočty kombinací prvků a/nebo nuklidů mohou vyústit v optimalizovaný návrh VA obsahující nuklidy s různou rychlostí vyhořívání. Přírodní prvky jsou složeny z více než 400 nuklidů, jadernými reakcemi je možné dále uměle vytvořit přes 3000 nestabilních nuklidů s různými poločasy přeměny.

Současně používané typy VA jsou vhodné pro jaderná paliva tepelných reaktorů s obohacením uranu do 5 wt%, pro energetické reaktory s obohacením až do 20 wt% bude potřeba déle působících VA. Gadolinium jako v současnosti nejrozšířenější VA vyhořívá velmi rychle a pro nová paliva nemusí být optimální volbou.

Výzkum jaderných reaktorů se ubírá směrem k využití malých modulárních reaktorů, jejichž jaderné palivo má vydržet v provozu až několik desítek let bez výměny, podobně jako u reaktorů pro jaderné ponorky. Palivo je pro malé modulární reaktory klíčovou oblastí. Dlouhodobé kampaně lze navrhovat pouze s využitím adekvátního vyhořívajícího absorbatu.

Hlavní náplň dizertační práce je návrh, provedení a vyhodnocení parametrické úlohy ocenění míry účinnosti vyhořívajících absorbátorů v jaderném palivu. Vzhledem k vysokému počtu možných kombinací prvků a nuklidů a k uvažování více typů jaderného paliva není možné použití standardních časově náročných výpočetních kódů. Proto je v první fázi řešení vytvořen výpočetní kód $U_W B_1$. Kód řeší Batemanovy rovnice vyhořívání jaderného paliva a transportní rovnici pro výpočet koeficientu násobení a hustoty toku neutronů v jaderném palivu v novém schématu vyhořívání metody 2sPC. Výpočetní kód $U_W B_1$ je navrhován s cílem rychlého výpočtu s dostatečnou přesností, kterého je dosaženo zjednodušením v oblastech s malým vlivem na ocenění účinnosti vyhořívajících absorbátorů. V druhé fázi jsou vybrané varianty vyhořívajících absorbátorů výpočetně ověřeny standardním kódem (např. MCNP6, SCALE, SERPENT).

Vlastní řešení dizertační práce je provedeno ve třech krocích, které se vzájemně ovlivňují. V prvním kroku je vytvořen výpočetní aparát, v druhém kroku je validován na vybraných úlohách vůči standardním výpočetním kódům a v posledním kroku jsou provedeny výpočty a analýzy možných vyhořívajících absorbátorů.

4

Metodika řešení

Parametrická úloha výběru materiálu vyhořívajícího absorbátoru vyžaduje použití rychlého výpočetního kódu. Kapitola popisuje způsob, jakým pro tuto úlohu vytvořený výpočetní kód $U_W B_1$ řeší úlohu vyhořívání jaderného paliva. Popsán je způsob řešení Batemanových rovnic vyhořívání a transportní rovnice, vytvořeného schématu vyhořívání 2sPC a datových knihoven. Kapitola je zakončena popisem vstupního a výstupního souboru kódu a jeho validací vůči standardním kódům.

4.1 Řešení Batemanových rovnic v $U_W B_1$

Maticová forma Batemanových rovnic (2.15) má řešení tvaru (2.16)

$$\mathbf{N}(t) = \exp(\mathbb{A}t) \mathbf{N}(0) \quad (4.1)$$

kde $\mathbf{N}(t)$ je vektor řešení (hustot nuklidů) v čase t s počáteční podmínkou $\mathbf{N}|_{t=0} = \mathbf{N}(0)$. Řešení Batemanových rovnic je dáno exponenciálou přechodové matice \mathbb{A} , metoda je proto nazývána maticová exponenciální metoda. Přechodová matice \mathbb{A} je závislá na čase, protože hustota toku neutronů φ není v čase konstantní. Podmínkou řešení (4.1) jsou konstantní koeficienty matice \mathbb{A} , proto je celý výpočet časově diskretizován.

Problém řešení Batemanových rovnic obsahuje 3 základní oblasti. První oblastí je tvorba přechodové matice, jejíž prvky popisují míru přechodu z j -tého nuklidu na i -tý nuklid na základě fyzikálních dějů. Druhou oblastí je určení hustoty toku neutronů v jaderném palivu, která závisí na typu paliva a jeho aktuálním složení. Poslední oblastí je numerický model, protože i přes znalost tvaru řešení neexistuje obecný postup určení exponenciely matice.

4.1.1 Přechodová matice

Přechodová matice představuje maticové znázornění Batemanových rovnic vyhořívání. Prvek přechodové matice \mathbb{A}_{ij} popisuje rychlost přeměny j -tého nuklidu na i -tý nuklid.

Diagonální prvky přechodové matice, popisující zánik nuklidů, jsou v souladu s označením Batemanových rovnic (2.12) dány vztahy

$$A_{ii} = -\lambda_i - \sigma_i \varphi \quad (4.2)$$

kde λ_i [s^{-1}] je přeměnová konstanta, σ_i [b] účinný průřez zániku i -tého nuklidu (tj. suma účinných průřezů všech uvažovaných reakcí) a φ [$1.0E+24 \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$] hustota toku neutronů. Hustotu toku neutronů je nutno navýšit faktorem $1.0E+24$ z důvodu udávání účinných průřezů v barnech ($b=1.0E-24 \text{ cm}^2$). Protože hodnota diagonálního prvku přechodové matice závisí na hodnotě hustoty toku neutronů, je její hodnota uložena ve dvou souborech:

- `uwb1aiiuni.txt` popisuje radioaktivní přeměny, obsahuje záporné hodnoty přeměnové konstanty, hodnoty jsou univerzální pro všechna neutronová spektra
- `uwb1fijphi.txt` popisuje jaderné reakce pro všechny prvky přechodové matice, pro diagonální prvky obsahuje záporné hodnoty účinných průřezů, ve výpočtu nutné vynásobit hodnotou hustoty toku neutronů a sečíst s hodnotami z první části matice (soubor `uwb1aiiuni.txt`)

Nediagonální prvky přechodové matice, popisující přeměny mezi nuklidy, jsou dány vztahy

$$A_{ij} = l_{ij} \lambda_j + f_{ij} \sigma_j \varphi \quad (4.3)$$

kde λ_i [s^{-1}] je přeměnová konstanta, σ_j [b] účinný průřez přechodu z j -tého nuklidu na i -tý nuklid, φ [$1.0E+24\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$] hustota toku neutronů, l_{ij} a f_{ij} jsou podíly přechodu ij zahrnující rozpadové podíly, multiplikaci dceřinných jader a výtěžky štěpení. Obdobně jako u diagonálních prvků je nediagonální část přechodové matice rozdělena na dvě části, které jsou během výpočtu vyhořívání sečteny podle aktuální hodnoty hustoty toku neutronů:

- `uwb1aijuni.txt` popisuje radioaktivní přeměny, obsahuje hodnoty přeměnové konstanty násobené rozpadovým podílem, multiplikací, nebo výtěžkem spontánního štěpení
- `uwb1fijphi.txt` popisuje jaderné reakce pro všechny prvky přechodové matice, pro nediagonální prvky obsahuje hodnoty účinných průřezů přechodu z j -tého nuklidu na i -tý nuklid násobené výtěžkem štěpení nebo multiplicitou dceřinných částic, ve výpočtu nutné vynásobit hodnotou hustoty toku neutronů a sečíst s hodnotami z první části matice (soubor `uwb1aijuni.txt`)

Neutronová knihovna obsahuje 37 unikátních jaderných reakcí, které produkují nuklid nebo nuklidy. Ne všechny jaderné reakce jsou popsány účinnými průřezy, proto bylo pro $U_W B_1$ vybráno 30 jaderných reakcí, viz Tab. 4.1, číslo MT značí jaderné reakce ve formátu ENDF-6. Kromě 23 reakcí, které používá kód ORIGEN-S, je navíc uvažováno 7 reakcí $(n,n3\alpha)$, $(n,n2)$, $(n,n\alpha)$, $(n,t2\alpha)$, (n,pd) , (n,pt) a $(n,d\alpha)$.

Tab. 4.1: Jaderné reakce uvažované pro přechodovou matici $U_W B_1$.

i	MT	Reakce	Výstupní nuklid(y)	i	MT	Reakce	Výstupní nuklid(y)
1	4	(n,n)	A,Z,M+1	16	44	(n,n2p)	A-2,Z-2
2	16	(n,2n)	A-1,Z	17	45	(n,np α)	A-5,Z-3
3	17	(n,3n)	A-2,Z	18	102	(n, γ)	A+1,Z
4	18	(n,f)	ŠP	19	103	(n,p)	A,Z-1
5	22	(n,n α)	A-4,Z-2	20	104	(n,d)	A-1,Z-1
6	23	(n,n3 α)	A-12,Z-6	21	105	(n,t)	A-2,Z-1
7	24	(n,2n α)	A-5,Z-2	22	106	(n, ^3He)	A-2,Z-2
8	25	(n,3n α)	A-6,Z-2	23	107	(n, α)	A-3,Z-2
9	28	(n,np)	A-1,Z-1	24	108	(n,2 α)	A-7,Z-4
10	29	(n,n2 α)	A-8,Z-4	25	111	(n,2p)	A-1,Z-2
11	32	(n,nd)	A-2,Z-1	26	112	(n,p α)	A-4,Z-3
12	33	(n,nt)	A-3,Z-1	27	113	(n,t2 α)	A-10,Z-5
13	34	(n,n ^3He)	A-3,Z-2	28	115	(n,pd)	A-2,Z-2
14	37	(n,4n)	A-3,Z	29	116	(n,pt)	A-3,Z-2
15	41	(n,2np)	A-2,Z-1	30	117	(n,d α)	A-5,Z-3

Bodové účinné průřezy z knihovny POINT-2012 pro teploty 293 K až 1200 K jsou kolapsovány do jemné grupové struktury transportního solveru $U_W B_1$, v průběhu výpočtu jsou dále kolapsovány do formy efektivních účinných průřezů nezávislých na energii.

Radioaktivní přeměna nuklidů je popsána v rozpadové knihovně, která obsahuje 19 rozpadových módů, z nichž všechny jsou uvažovány v kódu $U_W B_1$, viz Tab. 4.2, číslo RTYP značí rozpadový mód ve formátu ENDF-6. Přechodová matice pro $U_W B_1$ byla připravena pro 3 skupiny přeměn – přeměny zahrnující unikátní výstupní nuklid (reziduum), přeměny z aktinidu na štěpné produkty při spontánním štěpení a přeměny zahrnující více výstupních nuklidů.

Přechodová matice má 3820 řádků a obsahuje pouze 1.35 % nenulových prvků, které jsou rozprostřeny v několika oblastech (viz Obr. 4.1), odkud jsou patrné jednotlivé přechody mezi nuklidy:

- prvky matice na diagonále popisují ztrátu nuklidů přeměnou nebo jadernými reakcemi, prvky matice na diagonále jsou záporné (na rozdíl od ostatních prvků matice)
- prvky matice v blízkosti diagonály popisují přeměnu a jaderné reakce s přechodem s malou/žádnou změnou atomového/nukleonového čísla (nejčastěji α rozpad, β rozpad, reakce (n, γ))
- nulové mezery mezi nenulovými prvky matice v blízkosti diagonály oddělují nuklidy různých prvků (nuklidy jsou v matici řazeny vzestupně podle hodnot ZAID)

Tab. 4.2: Rozpadové módy uvažované pro U_{WB_1} .

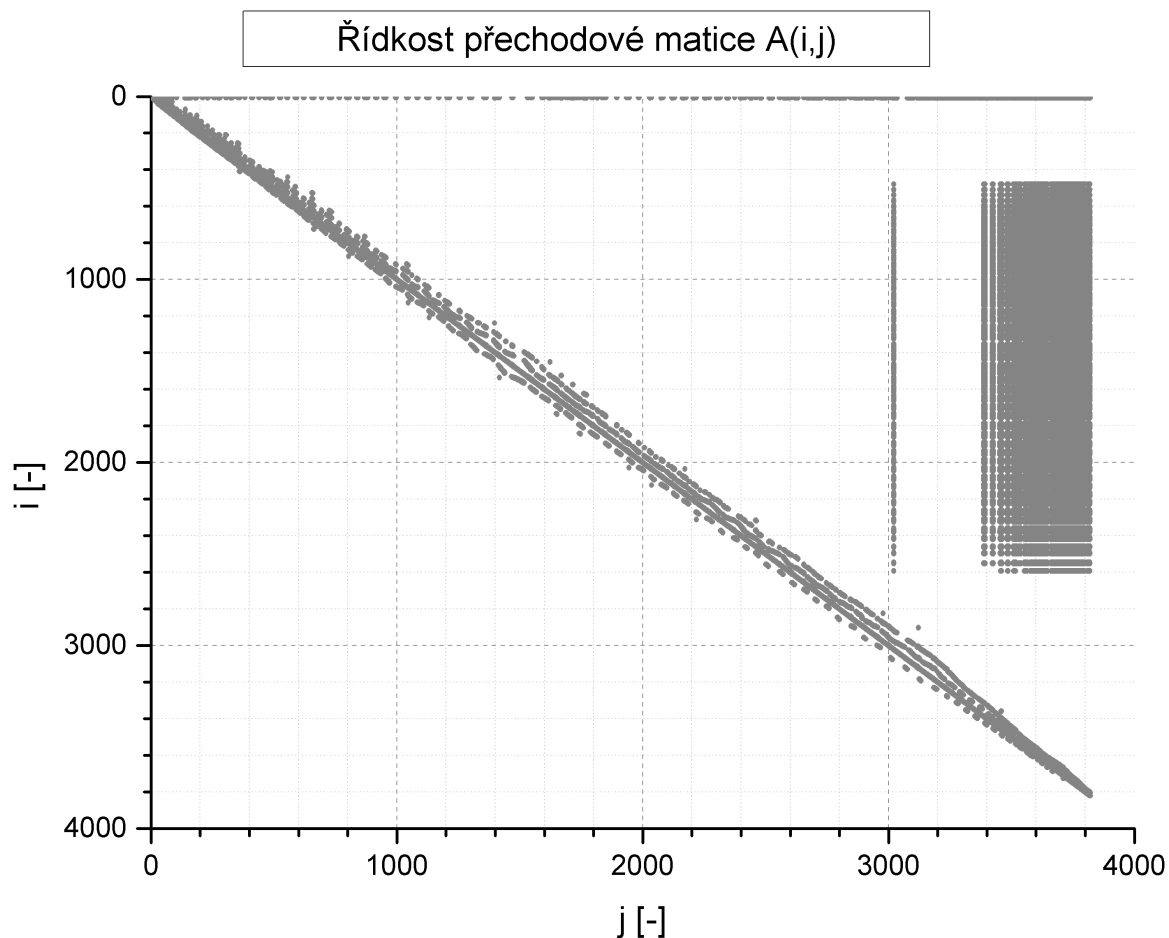
i	RTYP	Reakce	Výstupní nuklid
1	1.0	β rozpad	A,Z+1,m
2	2.0	elektronový záchyt a/nebo pozitronová emise	A,Z-1,m
3	3.0	izomerní přechod	A,Z,m-1
4	4.0	α rozpad	A-4,Z-2,m
5	5.0	neutronová emise	A-1,Z,m
6	6.0	spontánní štěpení	ŠP
7	7.0	protonová emise	A-1,Z-1,m
8	1.1	dvojitý β rozpad	A,Z+2,m
9	1.4	β rozpad následovaný α emisí	A-4,Z-1,m
10	1.5	β rozpad následovaný emisí 1 neutronu	A-1,Z+1,m
11	1.55	β rozpad následovaný emisí 2 neutronů	A-2,Z+1,m
12	1.555	β rozpad následovaný emisí 3 neutronů	A-3,Z+1,m
13	1.5555	β rozpad následovaný emisí 4 neutronů	A-4,Z+1,m
14	2.4	pozitronový rozpad následovaný α emisí	A-4,Z-3,m
15	2.6	pozitronový rozpad následovaný spontánním štěpením	ŠP dcery
16	2.7	pozitronový rozpad následovaný emisí 1 protonu	A-1,Z-2,m
17	2.77	pozitronový rozpad následovaný emisí 2 protonů	A-2,Z-3,m
18	5.5	dvojitá neutronová emise	A-2,Z,m
19	7.7	dvojitá protonová emise	A-2,Z-2,m

- prvky v 9. řádce popisují přechody s výstupem He-4, pro lehké nuklidy především reakce (n, α), pro těžké nuklidy především α rozpad
- prvky ve sloupcích na konci matice popisují štěpení, včetně spontánního štěpení (nejlehčí nuklid se spontánním štěpením Tl-180, výrazně lehčí než ostatní nuklidy se štěpením, má pravděpodobnost spontánního štěpení 1E-06)

4.1.2 Hustota toku neutronů

Energetická závislost hustoty toku neutronů $\varphi(E)$ pro kód U_{WB_1} je určena transportním Monte Carlo solverem pro každou oblast, ve které je požadován výpočet izotopických změn během vyhořívání. Spektrální tvar hustoty toku neutronů ovlivňuje hodnoty efektivních účinných průřezů. Závislost hustoty toku neutronů PWR na obohacení a na vyhoření (pro 5.0 wt% U-235/U) je graficky znázorněna na Obr. 4.2, závislost na obohacení je výraznější než závislost na vyhoření paliva. Se zvyšujícím se vyhořením roste koncentrace štěpných produktů a pro udržení konstantní výkonové hladiny musí hustota toku neutronů růst.

V každém časovém kroku vyhořívání se mění přechodová matice vlivem změn hustoty toku neutronů. Kromě celkové hustoty toku neutronů se mění i hodnoty efektivních



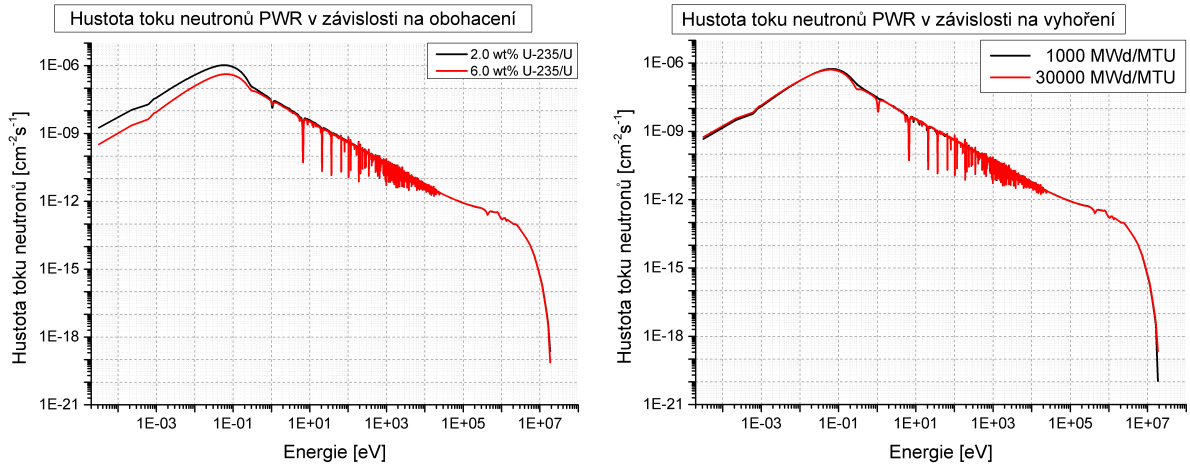
Obr. 4.1: Řídkost přechodové matice $U_W B_1$.

účinných průřezů, závisících na výkonu paliva v daném čase podle rovnice (2.14). Základním způsobem převodu výkonu paliva na celkovou hustotu toku neutronů je možnost „power depletion“, kde je přepočítání provedeno na základě hodnot využitelné energie (2.14). Alternativní způsob „flux depletion“ umožňuje určení celkové hustoty toku neutronů v nepalivové buňce (např. vyhořívající absorbátor v pokrytí) srovnáním relativní hustoty toku neutronů s palivovými oblastmi výpočetního modelu. Kód $U_W B_1$ umožňuje vybrat oblasti, ve kterých výpočet vyhořívání probíhat nebude, typicky v oblasti chladiva.

4.1.3 Numerický model

Ačkoliv je řešení Batemanových rovnic jednoduché, určení exponenciely matice (4.1) není triviální a používají se aproximativní techniky. Pro kód $U_W B_1$ byl zvolen výpočet exponenciely matice pomocí metody CRAM, jejíž použití ve výpočtech bylo publikováno finskými institucemi [5], [10], [79] a následně použito v kódu SERPENT. Metoda CRAM je dostatečně rychlá, přesná a stabilní.

Metoda CRAM (Chebyshev Rational Approximation Method) převádí exponencielu



Obr. 4.2: Hustota toku neutronů PWR.

na podíl dvou Čebyševových polynomů. Metoda CRAM řádu (k,k) aproximuje exponenciálu podílem polynomů ve tvaru

$$\exp(z) \approx \frac{P_k(z)}{Q_k(z)} = \alpha_0 + \sum_{i=1}^k \frac{\alpha_i}{z - \theta_i} = \alpha_0 + 2\operatorname{Re} \left[\sum_{i=1}^{k/2} \frac{\alpha_i}{z - \theta_i} \right] \quad (4.4)$$

Dostatečná přesnost určení hustot nuklidů ($1\text{E}-10$) a stabilita metody CRAM je [79] dosažena pro řád $(k,k)=(16,16)$ s parametry α a θ podle Tab. 4.3.

Pro přechodovou matici \mathbb{A}_{ij} a vektor koncentrací nuklidů $\mathbf{N}(t)$ má metoda CRAM tvar

$$\mathbf{N}(t) = \exp(\mathbb{A}_{ij} t) \mathbf{N}(0) = \alpha_0 \mathbf{N}(0) + 2\operatorname{Re} \left[\sum_{i=1}^{k/2} \alpha_i (\mathbb{A} t - \theta_i \mathbb{I})^{-1} \right] \mathbf{N}(0) \quad (4.5)$$

a převádí problém výpočtu exponenciely matice na výpočet 8 inverzních matic (pro CRAM řádu $(16,16)$).

Pro kód $U_W B_1$ byly aplikovány 2 různé možnosti výpočtu. První aplikací byl explicitní výpočet inverzních matic $(\mathbb{A} t + \theta_i \mathbb{I})^{-1}$ pomocí procedur ZGETRF a ZGETRI z algebraické knihovny BLAS/LAPACK v jazyce Fortran. Procedura ZGETRF převádí matici LU faktorizací podle vztahu $\mathbb{A} = \mathbb{P}\mathbb{L}\mathbb{U}$, kde \mathbb{L} je dolní trojúhelníková matice s jednotkovou diagonálou, \mathbb{U} horní trojúhelníková matice a \mathbb{P} permutační matice. Procedura ZGETRI počítá inverzní matici podle její LU faktorizace.

Procedury knihovny BLAS/LAPACK jsou aplikovatelné na obecnou matici. Z důvodu vysokého výpočetního času (cca 10 minut pro každý časový interval vyhořívání, požadováno cca 1 sekunda) nebyl model $U_W B_1$ s procedurami ZGETRF a ZGETRI provozován a bylo přistoupeno k vytvoření druhé možnosti výpočtu, využívající řídkosti přechodové matice.

Tab. 4.3: Parametry metody CRAM.

Parametr	Reálná část [-]	Imaginární část [-]
θ_1	-1.0843917078696988026d+01	+1.9277446167181652284d+01
θ_2	-5.2649713434426468895d+00	+1.6220221473167927305d+01
θ_3	+5.9481522689511774808d+00	+3.5874573620183222829d+00
θ_4	+3.5091036084149180974d+00	+8.4361989858843750826d+00
θ_5	+6.4161776990994341923d+00	+1.1941223933701386874d+00
θ_6	+1.4193758971856659786d+00	+1.0925363484496722585d+01
θ_7	+4.9931747377179963991d+00	+5.9968817136039422260d+00
θ_8	-1.4139284624888862114d+00	+1.3497725698892745389d+01
α_1	-5.0901521865224915650d-07	-2.4220017652852287970d-05
α_2	+2.1151742182466030907d-04	+4.3892969647380673918d-03
α_3	+1.1339775178483930527d+02	+1.0194721704215856450d+02
α_4	+1.5059585270023467528d+01	-5.7514052776421819979d+00
α_5	-6.4500878025539646595d+01	-2.2459440762652096056d+02
α_6	-1.4793007113557999718d+00	+1.7686588323782937906d+00
α_7	-6.2518392463207918892d+01	-1.1190391094283228480d+01
α_8	+4.1023136835410021273d-02	-1.5743466173455468191d-01
α_0	+2.1248537104952237488d-16	+0.0000000000000000000d+00

Druhá možnost výpočtu byla provedena s procedurami algebraické knihovny PARDISO a posléze MUMPS v jazyce Fortran, navíc bez explicitního výpočtu inverzní matice, ale pouze s řešením soustavy lineárních rovnic. Knihovny pro řídké matice jsou speciální algebraické knihovny, které vyžadují jiný formát ukládání matice a jiné postupy při výpočtech.

Iterační metody knihovny PARDISO se ukázaly jako nestabilní („stiff problem“), proto byla knihovna PARDISO nahrazena knihovnou MUMPS s přímým řešičem. Knihovna MUMPS byla vybrána, protože je rychlejší než alternativy (HSL ME48, SuperLU) s přímým řešičem. Časová náročnost výpočtů s řídkými maticemi je úměrná počtu nenulových prvků řídké matice, s knihovnou MUMPS bylo dosaženo požadované rychlosti pod 1 sekundu (cca 20 sekund pro 43 intervalů vyhořívání) i požadované přesnosti, shodné s výpočtem s obecnou knihovnou BLAS/LAPACK.

4.2 Řešení transportní rovnice v $U_W B_1$

Boltzmannova transportní rovnice v kódu $U_W B_1$ je řešena Monte Carlo solverem, který popisuje tzv. náhodnou procházku neutronu od místa jeho vzniku do místa jeho zániku. Během transportu je na základě generátoru náhodných čísel simulován průběh jaderných reakcí v místech kolize neutronu s jádru prostředí. Mezi jednotlivými kolizemi je modelován přímočarý transport neutronů, střední volná dráha je popsána rovněž pomocí generátoru náhodných čísel.

Monte Carlo solver v kódu $U_W B_1$ řeší transport neutronů ve 2-D geometrii regulární palivové buňky na základě metody ray-tracing s jadernými daty ENDF/B-VII.1 v jemné 4308-grupové energetické struktuře s možností využití paralelizace OpenMP. Vysoká rychlost Monte Carlo solveru je výsledkem zaměření vývoje kódu na minimalizaci využití procesoru i za cenu zvýšení nároků na operační paměť.

4.2.1 Monte Carlo simulace

Monte Carlo simulace je statistická metoda, kterou lze použít pro výpočty v různých aplikačních oblastech. Metoda je založena na použití generátoru náhodných čísel, statistických rozdělení a vhodného algoritmu pro výpočet daného problému. Například pro výpočet čísla π je generována dvojice náhodných čísel označujících souřadnice x , y a podle počtu bodů uvnitř (splňující podmínku $x^2 + y^2 < 1$) a je určeno číslo π ($4 \cdot$ počet bodů uvnitř kruhu / celkový počet bodů).

Transport neutronů simulací Monte Carlo je analogický fyzikálnímu vnímání daného problému. Život neutronu nebo jiné částice je simulován od jeho počátečního stavu (narození vlivem štěpení nebo sekundární emise) do konečného stavu (smrt z důvodu štěpení, absorpce nebo úniku ze systému). Četnost a průběh všech interakcí, kterými neutron během života projde, jsou náhodně simulovány na základě zákonů jaderné fyziky. Simulací dostatečně velkého počtu neutronů je možné získat veškeré informace o daném systému, např. efektivní koeficient násobení nebo hustota toku neutronů. Čím více výstupních veličin je požadováno, tím delší je výpočetní čas. Pro velké systémy nemusí být Monte Carlo simulace v současnosti vhodná (např. online monitoring provozu jaderných elektráren).

Monte Carlo simulace je pro řešení problému transportu neutronů vhodná z důvodu linearity Boltzmannovy transportní rovnice. Neutrony interagují pouze s jádru okolní látky, nereagují mezi sebou. Linearita procesu je navíc vhodná pro paralelizaci.

Interakce neutronů s jádru jsou popsány přímo na základě rovnic jaderné fyziky (např. pružný rozptyl podle zákona zachování energie a hybnosti) nebo jsou popsány jadernými daty získanými na základě experimentálních dat. Jaderná data ve formátu ENDF-6 popisují jaderné reakce, ale nejsou vhodná pro přímé použití v Monte Carlo simulaci, proto byla pro Monte Carlo solver vhodně upravena s cílem získat rychlý a přesný kód, bez ohledu na spotřebu operační paměti.

Život neutronů je simulován v procesu tzv. náhodné procházky, kdy jsou simulovány

jaderné reakce v místě srážek neutronů s jádru okolní látky. Mezi srážkami je uvažován přímočarý pohyb, vzdálenost mezi srážkami je dána vlastnostmi materiálu daného systému (účinné průřezy jaderných reakcí a z nich plynoucí střední volná dráha).

Výběr parametrů neutronové interakce je proveden vzorkováním pomocí náhodného čísla. Vzorkování je provedeno inverzní nebo rejekční metodou. Inverzní metodu pro výběr proměnné x z distribuce $f(x)$ lze použít za předpokladu, že je známa inverzní funkce ke kumulativní distribuční funkci $F(x)$. Náhodné číslo $0 \leq \text{RN} < 1$ je vytvořeno generátorem náhodných čísel a hodnota proměnné x je dána vztahem

$$F(x) = \text{RN} \Leftrightarrow x = F^{-1}(\text{RN}) \quad (4.6)$$

V případě, že kumulativní distribuční funkce není známa, nebo je výpočetně příliš nákladné ji určit, je použito rejekční metody. Ke známé pravděpodobnostní distribuční funkci $f(x)$ je přiřazena pravděpodobnostní distribuční funkce $g(x)$ tak, že $f(x) \leq g(x)$. Hodnota proměnné x je vzorkována z distribuce $g(x)$, poté je generováno další náhodné číslo $0 \leq \text{RN} < 1$ a hodnota proměnné x je akceptována, pokud

$$\text{RN} < \frac{f(x)}{g(x)} \quad (4.7)$$

V opačném případě je procedura opakována od začátku.

Jaderná data byla ve většině případů převedena do tabulární formy a poté uložena ve formě N ekvipravděpodobnostních intervalů tak, aby v každém intervalu $x_i < x < x_{i+1}$ platilo

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \frac{1}{N} \quad (4.8)$$

Součet pravděpodobností všech ekvipravděpodobnostních intervalů je jedna. Ve výpočtu je po generování náhodného čísla $0 \leq \text{RN} < 1$ určen interval podle celočíselné hodnoty $n = N\text{RN} + 1$ a poté je mezi hranicemi intervalu provedena lineární interpolace

$$x = x_i + (N\text{RN} - n)(x_{i+1} - x_i) \quad (4.9)$$

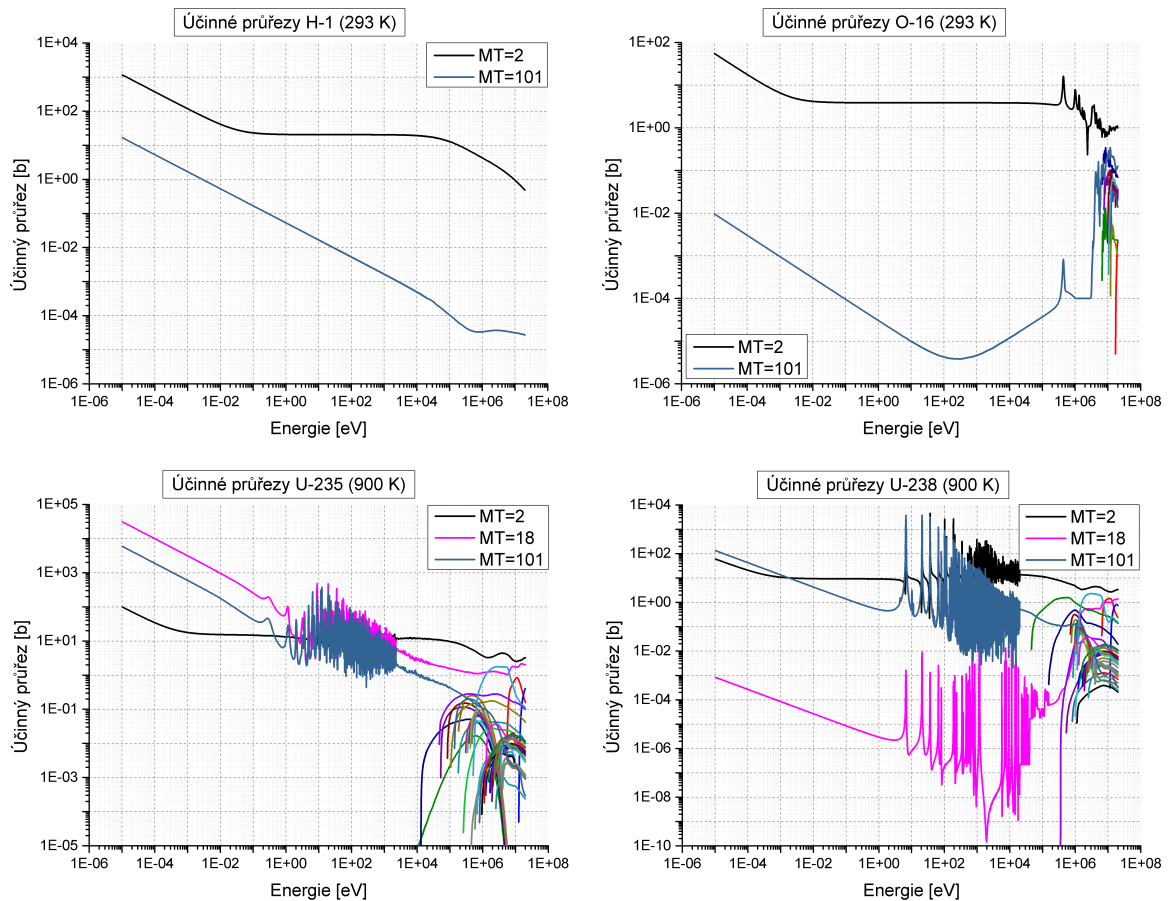
4.2.2 Účinné průřezy

Jaderné reakce jsou popsány účinnými průřezy, které představují míru pravděpodobnosti, že dojde k dané jaderné reakci. Účinné průřezy pro $U_W B_1$ byly použity z knihovny ENDF/B-VII.1, resp. POINT-2012, pro teploty 293 K (chladný stav), 600 K (typicky chladiivo a pokrytí), 900 K (palivo tepelných reaktorů) a 1200 K (palivo rychlých reaktorů). Účinné průřezy ENDF/B-VII.1 jsou uloženy ve formátu ENDF-6 pod číslem knihovny MF=3. Pro popis transportu neutronů je potřeba 46 různých reakcí, které lze rozdělit do následujících skupin:

1. pružný rozptyl (MT=2), při kterém dochází ke ztrátě energie neutronu

2. nepružný rozptyl do kontinua (MT=16, MT=17, MT=91), při kterém neutron ztrácí energii a mění se jeho váha
3. štěpení (MT=18), při kterém je ukončen transport neutronu jeho „smrtí“ a informace o štěpení je uložena do banky
4. nepružný rozptyl do diskretních stavů jádra (MT=51 až MT=90), při kterém dochází ke ztrátě energie neutronu, rozdílný popis reakce než při rozptylu do kontinua
5. suma reakcí s nulovým počtem neutronů na výstupu (MT=102 až MT=117, suma odpovídá číslu MT=101), při kterém je ukončen transport neutronu jeho „smrtí“

Účinné průřezy pro hlavní nuklidy jaderných paliv a moderátoru H-1, O-16, U-235 a U-238 v energetické struktuře $U_W B_1$ (4308 grup) jsou zobrazeny na Obr. 4.3.



Obr. 4.3: Účinné průřezy pro hlavní nuklidy (4308 grup $U_W B_1$).

Monte Carlo solver pro $U_W B_1$ popisuje bodový transport neutronů s grupovými knihovnamí účinných průřezů, přičemž je použito vysoké množství energetických grup, srovnatelné s počtem bodů v bodových knihovnách. Celkem je použito 4308 energetických grup, které byly navrženy podle počtu bodů popisujících celkový účinný průřez pro U-238.

Tab. 4.4: Energetická struktura U_{WB_1} .

Dolní hranice [eV]	Horní hranice [eV]	Počet grup [-]
1.00E-05	1.00E-04	91
1.00E-04	1.00E-03	100
1.00E-03	1.00E-02	99
1.00E-02	1.00E-01	84
1.00E-01	1.00E+00	100
1.00E+00	1.00E+01	100
1.00E+01	1.00E+02	391
1.00E+02	1.00E+03	663
1.00E+03	1.00E+04	1340
1.00E+04	2.00E+04	997
2.00E+04	1.00E+05	100
1.00E+05	1.00E+06	100
1.00E+06	1.00E+07	100
1.00E+07	2.00E+07	43

Energetická struktura je definována na dvou úrovních, na úrovni 14 intervalů a 4308 subintervalů. Celková energetická šíře 1E-05 eV až 20 MeV je rozdělena do 14 intervalů, které popisují jednotlivé řády energie. Navíc je přidána hranice 20 keV jako hranice mezi rozlišenými a nerozlišenými rezonancemi. V každém intervalu jsou subintervaly (grupy) určeny tak, aby měly stejnou šířku letargie, tj. stejnou logaritmickou energetickou šířku. Definice 4308 energetických grup je patrná z Tab. 4.4.

Výhodou použití dvou úrovní energetické struktury s ekvidistantními letargiemi je možnost určení hodnot účinných průřezů přímo pomocí jednoduchého vztahu, namísto hledání indexu grupy, který dané energii neutronu náleží. Tímto je transport neutronů značně urychlen. Nevýhodou je nutnost použití stejné energetické struktury pro všechny nuklidy a všechny reakce, tj. vyšší nároky na operační paměť (cca 2 GB RAM pro 423 nuklidů, 46 reakcí, 4308 grup a 3 materiály).

Index energetické grupy $eindex$ pro energii neutronu E je určen podle vztahu

$$eindex = 1 + \sum_{i=1}^{k-1} nsubgroup(i) + int \left(nsubgroup(k) \frac{\ln \frac{E}{ebound01(k)}}{\ln \frac{ebound02(k)}{ebound01(k)}} \right) \quad (4.10)$$

kde int značí operátor celočíselnosti, $nsubgroup(i)$ je počet grup v intervalu i (celkem 14 intervalů), k značí interval, ve kterém se nachází energie neutronu E , $ebound01(i)$ je dolní energetická hranice intervalu i a $ebound02(i)$ je horní energetická hranice intervalu i .

4.2.3 Jaderné reakce

Pružný rozptyl je ve formátu ENDF-6 popsán reakčním číslem $MT=2$. Jedná se o jadernou reakci, při níž v těžištvé soustavě nedochází k přenosu energie z částice na terč. Pro popis reakce byla z knihovny ENDF/B-VII.1 použita data úhlové distribuce, popisující úhel rozptylu v těžištvé soustavě. Tato data jsou tabelována v závislosti na energii neutronu před srážkou. Pro U_WB_1 byla data pro všechny nuklidy přepočítána pro stejné energie neutronů (76 energií, zaměřujících se především na oblast rychlých neutronů) – důvodem je zrychlení transportního výpočtu (na úkor operační paměti). Úhlová distribuce byla určena pro 20 ekvipravděpodobnostních intervalů, v knihovně U_WB_1 jsou uloženy horní hranice těchto intervalů.

Pružný rozptyl je při Monte Carlo simulaci modelován v závislosti na energii dopadajícího neutronu. Pro energie nad 0.1 eV (konzervativní teplota 1200 K) je předpokládáno, že terčový nuklid je v klidu. Pro energie pod hranicí 0.1 eV je uvažován tepelný pohyb terčových jader podle Maxwellova rozdělení rychlostí. Nuklid H-1, který má jako jediný hmotnost nižší než neutron (je tvořen protonem), je vždy popsán pomocí Maxwellova rozdělení, protože při rozptylu neutronu na atomu vodíku může dojít ke ztrátě veškeré energie neutronu.

Určení stavu neutronu po srážce, tj. určení jeho energie a směru pohybu (úhel v soustavě souřadnic), je v případě použití modelu volného plynu určeno rovnicemi vycházejícími ze zákona zachování energie a zákona zachování hybnosti. Při výpočtu je znám počáteční stav v laboratorní (LAB) soustavě, je proveden přechod do těžištvé (CM) soustavy, po kterém následuje určení stavu po srážce v CM soustavě a nakonec převod do LAB soustavy. Z důvodu použití zákona zachování hybnosti je v rovnicích počítáno s rychlostmi namísto s energiemi (úměrné kvadrátu rychlosti).

Nepružný rozptyl do kontinua pro transport neutronů představují 3 jaderné reakce, které jsou z hlediska jejich modelování v Monte Carlo simulaci srovnatelné a neliší se. Jedná se o jaderné reakce, při níž (na rozdíl od pružného rozptylu) v těžištvé soustavě dochází k přenosu energie z částice na terč. Reakce $(n,2n)$, popsána v reakčním čísle $MT=16$ formátu ENDF-6, představuje nepružný rozptyl neutronu s dvěma výstupními neutrony, tj. vícenásobný rozptyl. Více neutronů na výstupu reakce je v Monte Carlo simulaci modelováno jedním neutronem se zvýšenou váhou. Reakce $(n,3n)$, popsána v reakčním čísle $MT=17$, je analogická reakci $MT=16$, na výstupu jsou tři neutrony. Prahová energie reakce $(n,3n)$ je vyšší než u reakce $(n,2n)$. Nepružný rozptyl do kontinua, popsáný v reakčním čísle $MT=91$, představuje doplňující popis k nepružným rozptylům do diskretních stavů jádra ($MT=51$ až $MT=90$ pro první až 40. excitovaný stav), tj. integrální popis všech dalších diskretních stavů.

Nepružný rozptyl do kontinua je matematicky obtížně popsateľný a proto se používají knihovny úhlových distribucí a knihovny energetických distribucí pro určení stavu neutronu po srážce. Pro některé nuklidy je úhlová distribuce (knihovna $MF=4$) a energetická distribuce (knihovna $MF=5$) oddělena, pro některé nuklidy jsou jaderné reakce popsány

úhlově-energetickou distribucí (knihovna MF=6) a úhel a energie neutronu po srážce jsou vzájemně korelovány.

MC solver kódu $U_W B_1$ používá oddělené knihovny úhlových distribucí a knihovny energetických distribucí. Formát knihovny úhlových distribucí pro nepružný rozptyl do kontinua (MT=91) je shodný s formátem knihovny úhlových distribucí pro pružný rozptyl (MT=2), tj. použití 20 ekvipravděpodobnostních intervalů pro kosinus úhlu na síti 76 energií neutronů před srážkou. Jediným rozdílem mezi oběma knihovnami je souřadná soustava, ve které jsou kosiny úhlu rozptylu. V případě pružného rozptylu je úhlová knihovna použita pro CM soustavu, pro nepružný rozptyl pro LAB soustavu. Pro nepružný rozptyl reakcí (n, xn) pod MT=16 a MT=17 je uvažována izotropní distribuce úhlu rozptylu v LAB soustavě (reakce jsou buď izotropní, nebo se od izotropní reakce významně neliší). Knihovny úhlových distribucí pro nepružný rozptyl do kontinua (MT=91) pro dané nuklidy (423) a energie (76) obsahuje 4763 neizotropních distribucí, tj. 85 % reakcí je izotropních. Lehké nuklidy (moderátor) a těžké nuklidy (aktinidy) patří k nuklidům s izotropními distribucemi.

Pro modelování transportu neutronů je štěpení absorpční reakcí, při které končí simulace transportu dané částice „smrtí“. Do banky jsou uloženy informace o štěpení – souřadnice štěpení, počet štěpných neutronů a nuklid, na němž došlo ke štěpení. V další generaci je pak neutron „narozen“ na souřadnicích z banky, směr pohybu je dán izotropní distribucí (jedno náhodné číslo). Energetická distribuce štěpných neutronů χ je uložena v knihovně $U_W B_1$ obdobně jako pro nepružný rozptyl do kontinua, tj. pro 1000 ekvipravděpodobnostních intervalů. Pro každý aktinid je použito jednoho štěpného spektra, protože jeho závislost na energii neutronů způsobujících štěpení je zanedbatelná.

Nepružný rozptyl do diskretních stavů jádra je ve formátu ENDF-6 popsán reakčními čísly MT=51 (první excitovaný stav jádra) až MT=90 (40. excitovaný stav jádra). Jedná se o jaderné reakce, při níž (na rozdíl od pružného rozptylu) v těžišťové soustavě dochází k přenosu energie z částice na terč. Pro popis reakce byla z knihovny ENDF/B-VII.1 použita data úhlové distribuce, popisující úhel rozptylu v těžišťové soustavě. Data i knihovna $U_W B_1$ pro úhlovou distribuci jsou shodná jako v případě pružného rozptylu. Úhlová distribuce byla určena pro 20 ekvipravděpodobnostních intervalů, v knihovně $U_W B_1$ jsou uloženy horní hranice těchto intervalů.

Modelování nepružného rozptylu do diskretních stavů jádra je obdobné jako v případě pružného rozptylu, rozdíl je v zahrnutí ztráty energie neutronu v CM soustavě. Tato ztráta energie je rovna energii reakce Q . Pro energie nad 0.1 eV je nepružný rozptyl modelován za předpokladu, že terčový nuklid je v klidu. Nepružný rozptyl je prahovou reakcí a probíhá pouze pro energie neutronu nad prahovou reakcí, typicky v oblasti několika MeV (tj. model volného plynu pod 0.1 eV je zřídka simulován).

Pokud je jako reakce vybrána absorpce neutronu, je transport neutronu ukončen. Na rozdíl od štěpení nejsou uloženy žádné informace o způsobu absorpce. Jako absorpci neutronů je pro Monte Carlo solver chápána taková reakce, která na výstupu neprodu-

Tab. 4.5: Absorpční reakce MT=101.

Reakční číslo MT [-]	Popis reakce [-]
102	(z, γ)
103	(z,p)
104	(z,d)
105	(z,t)
106	(z,He3)
107	(z, α)
108	(z,2 α)
109	(z,3 α)
111	(z,2p)
112	(z,pa)
113	(z,t2 α)
114	(z,d2 α)
115	(z,pd)
116	(z,pt)
117	(z,d α)

kuje žádné neutrony. Z tohoto důvodu nejsou do absorpčních reakcí zahrnuty vícenásobné rozptyly (n,xn) ani štěpení (n,f). Knihovny formátu ENDF-6 mají absorpci neutronů uloženou pod reakčními čísly MT=102 až MT=117, viz Tabulka 4.5.

Knihovny formátu ENDF-6 mají absorpci neutronů uloženou pod reakčními čísly MT=102 až MT=117. Ve formátu ENDF-6 je definováno i reakční číslo MT=101 jako suma reakcí MT=102 až MT=117, ale v obecných knihovnách se z důvodu redundance MT=101 nepoužívá. Pro transport neutronů v kódu U_WB_1 je pro zjednodušení použito označení absorpčních reakcí jako MT=101. Z důvodu zrychlení výpočtu U_WB_1 není absorpce neutronů modelována ukončením transportu neutronů (analogová simulace), ale použitím metody implicitního záchytu (neanalogová simulace). Namísto přesného modelování fyzikálních dějů (analogová simulace) je použito změny váhy simulované částice v jakémkoliv bodě tak, aby střední hodnota váhy simulované částice v daném bodě byla zachována.

4.2.4 Implicitní záchyt

Implicitní záchyt je metoda, při které je před výběrem reakce snížena váha neutronu o pravděpodobnost absorpce. Takto je zachována střední váha neutronu. Pokud klesne váha neutronu pod zvolenou dolní mez, je provedena ruská ruleta a dochází k navýšení váhy částice nebo ke konci jejímu transportu ("smrt neutronu").

Váha neutronu je násobena pravděpodobností, že nedojde k absorpci. Mírou pravdě-

podobnosti je účinný průřez jaderné reakce. Vztah pro změnu váhy neutronu je následující

$$w = w \left(1 - \frac{\sigma_a}{\sigma_t} \right) \quad (4.11)$$

kde σ_a je účinný průřez absorpce (MT=101) a σ_t je celkový účinný průřez (suma MT=2,16-18,51-91,101, nebo sumární hodnota ukládaná v MT=1). Z uvedeného vztahu je zřejmé, že střední váha neutronu se nemění.

Ruská ruleta je aplikována v případě, že váha neutronu poklesne pod zvolenou mez. Hodnota této meze neovlivňuje výsledky výpočtů, pouze jejich statistickou přesnost, tj. výpočetní dobu. Monte Carlo solver pro U_{WB_1} používá hranice váhy 0.5 (zvoleno na základě testování paliva s vyhořívajícím absorbátorem v formě gadolinia). Po generování náhodného čísla $0 \leq RN < 1$ a určení pravděpodobnosti terminace neutronu $P = 1 - \frac{w}{w_S}$ je neutron s touto pravděpodobností terminován, nebo je jeho váha navýšena na váhu přežívajícího neutronu w_S .

$$\begin{aligned} RN \leq 1 - \frac{w}{w_S} &\Rightarrow w = 0 \\ RN > 1 - \frac{w}{w_S} &\Rightarrow w = w_S \end{aligned} \quad (4.12)$$

Monte Carlo solver pro U_{WB_1} používá váhu přežívajícího neutronu $w_S = 1.0$, stejnou jako je váha neutronu na začátku simulace. Váha neutronu před aplikování ruské rulety je w , střední váha neutronu po aplikování ruské rulety je shodná

$$\bar{w} = \left(1 - \frac{w}{w_S} \right) \cdot 0 + \left(\frac{w}{w_S} \right) \cdot w_S = w \quad (4.13)$$

4.2.5 Výběr nuklidu a reakce

Po určení místa srážky je pomocí náhodného čísla $0 \leq RN < 1$ určen v materiálu nuklid, na kterém srážka proběhne. Nuklid i je určen podle vztahu

$$\sum_{j=1}^{i-1} \Sigma_{tj} < RN \sum_{j=1}^N \Sigma_{tj} \leq \sum_{j=1}^i \Sigma_{tj}, \quad (4.14)$$

kde Σ_{tj} značí celkový makroskopický účinný průřez pro nuklid j v materiálu složeném z N nuklidů.

Po výběru nuklidu je implicitním záchytem modelována absorpce. Poté je zkontrolována váha neutronu a případně dojde k ruské ruletě. Následný výběr jaderné reakce probíhá analogicky výběru nuklidu rejekční metodou, na rozdíl od výběru nuklidu jsou použity účinné průřezy místo makroskopických účinných průřezů. Jaderná reakce i je určena podle vztahu

$$\sum_{j=1}^{i-1} \sigma_j < RN \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j \leq \sum_{j=1}^i \sigma_j, \quad (4.15)$$

Tab. 4.6: Číslování jaderných reakcí Monte Carlo solveru $U_W B_1$.

Reakční číslo MT [-]	Reakční číslo $U_W B_1$ [-]	Popis reakce [-]
2	1	(n,n)
16	2	(n,2n)
17	3	(n,3n)
18	4	(n,f)
51 až 90	5 až 44	(n,n')
91	45	(n,n')
101	46	(n,0n)

kde σ_j značí účinný průřez pro reakci j v číslování reakcí $U_W B_1$, $N = 46$ značí celkový počet jaderných reakcí Monte Carlo solveru $U_W B_1$, jejich výčet viz Tab. 4.6. Při výběru nuklidu není do kumulativní distribuční funkce započítána absorpční reakce MT=101, protože ta je modelována implicitním záchytem.

4.2.6 Banka neutronů

Banka neutronů slouží k přechodu od jedné neutronové generace k následující generaci. Do banky jsou uloženy informace o štěpení – souřadnice štěpení, počet štěpných neutronů a nuklid, na němž došlo ke štěpení. Velikost banky je shodná s počtem neutronů dané generace.

Do banky nejsou ukládány váhy neutronu, protože je u každého neutronu implicitně předpokládána jednotková váha. Pokud dojde k výběru štěpné reakce, je náhodným číslem určen celočíselný počet neutronů, který v daném místě vznikne. Tento počet je dán součinem multiplikace $\bar{\nu}$, závislé na aktinidu a energii neutronu, a váhy neutronu w , součin je téměř vždy vyšší než 1.0, protože minimální váha částice je 0.5 a typická hodnota $\bar{\nu}$ je 2.43 (minimální 1.53 a maximální 9.00). Typicky je simulován vyšší celočíselný počet vzniklých neutronů a do banky jsou v tomto případě kartézské souřadnice x, y a identifikace aktinidu uloženy na více pozicích. Z tohoto důvodu je váha neutronu vždy jednotková.

Efektivní koeficient násobení je dán střední hodnotou podílu počtu neutronů v bance dvou po sobě jdoucích generací. Pokud je systém podkritický, bude typickou situací stav, kdy na konci simulace neutronové generace nebudou zaplněny všechny pozice banky. Protože v další generaci je potřeba mít banku plnou, jsou náhodným výběrem ze zaplněných pozic tyto pozice postupně duplikovány do prázdných pozic. Toto je bez újmy na obecnosti, protože banka slouží pro přenos informací mezi generacemi a v případě simulování dostatečného počtu neutronů v jedné generaci je možné tyto hodnoty duplikovat, případně mazat. Pro určení hodnoty efektivního koeficientu násobení jsou použity počty zaplněných pozic před doplněním banky.

Pokud je systém nadkritický, bude typickou situací stav, kdy ještě před koncem simulace budou zaplněny všechny pozice banky. V tomto případě nejsou informace o štěpení

ukládány a jsou ztraceny, uchována je pouze informace o počtu neutronů, které se do banky nevejdou. Podobně jako pro podkritický stav je toto bez újmy na obecnosti a nedochází ke změně hodnoty efektivního koeficientu násobení.

4.2.7 Transport částic

Monte Carlo solver pro $U_W B_1$ řeší transport neutronů ve 2-D geometrii regulární palivové buňky jaderného reaktoru, která obsahuje libovolný počet koncentrických válců. Simulovány jsou jednotlivé po sobě jdoucí generace neutronů, v každé generaci neutronů je simulován určitý počet neutronů. Výstupní veličiny jsou počítány v průběhu transportu neutronů po ukončení simulace úvodních neutronů, tj. neutronové generace jsou rozděleny mezi neaktivní generace a aktivní generace. Definovány jsou parametry **npg**, **nsng** a **tnng**, kde **npg** je počet neutronů v generaci (neutrons per generation, typicky 10000), **nsng** je počet neaktivních generací (number of skipped neutron generations, typicky 5) a **tnng** celkový počet neutronových generací (total number of neutron generations, typicky 105).

Stav neutronu během transportu je definován proměnnými x, y, Ω, E, w , které popisují souřadnice neutronu v kartézské soustavě [cm], kosinus úhlu pohybu vůči 3-D soustavě souřadnic [-], energii neutronu [eV] a váhu neutronu [-]. Z důvodu zrychlení výpočtu jsou navíc pro definování stavu neutronu použity proměnné **rw_region** (materiálová oblast, ve které se neutron nachází), **rw_surface** (číslo povrchu, na které se neutron nachází, závisí na geometrii, nulové pro pozici neutronu uvnitř buňky geometrie) a **rw_eindex** (index energie v energetické struktuře). Proměnné popisují stav neutronu během náhodné procházky (random walk).

Souřadnice neutronu v kartézské soustavě x, y jsou pro neutrony první generace náhodně (generace dvou náhodných čísel) volena uvnitř paliva. Pro neutrony v dalších generacích jsou souřadnice x, y načteny z banky, kde jsou uloženy informace o neutronech, které předchozí generaci zakončily štěpením.

Simulace transportu neutronů se skládá ze dvou základních kroků, simulace jaderných reakcí a simulace pohybu mezi jadernými reakcemi (srážkami, kolizemi. . .). Mezi jednotlivými srážkami se částice pohybuje přímočarým pohybem (volná dráha). Vzdálenost mezi kolizemi je určena náhodným číslem RN a střední volnou dráhou $\lambda_t = \frac{1}{\Sigma_t}$ pro energii neutronu a materiál, v němž se neutron nachází podle vztahu

$$x = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln RN \quad (4.16)$$

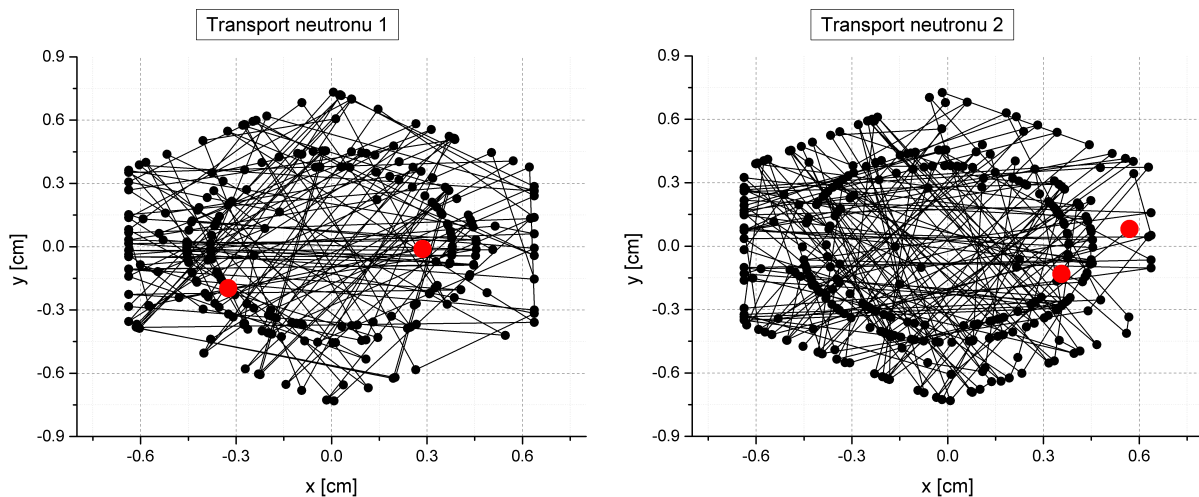
Pro určení volné dráhy neutronu je z důvodu zrychlení výpočtu na počátku výpočtu určen celkový makroskopický účinný průřez Σ_t pro všechny energie a materiálové oblasti výpočetního modelu.

Střední volná dráha v palivu a moderátoru je řádově centimetry, v pokrytí desítky centimetrů. Pokud je volná dráha určená Monte Carlo simulací vyšší než vzdálenost k nejbližšímu rozhraní dvou materiálů a končí v jiné materiálové oblasti, nelze předchozí rovnici

využít. Lze použít dva postupy, první je určení pravděpodobností ve vícevrstevnatém materiálu, ale z důvodu komplikovaných podmíněných pravděpodobností je použití výsledných rovnic ve výpočetním kódu neefektivní. Proto je pro $U_W B_1$ použit druhý postup, kdy je na rozhraní dvou materiálů znovu přepočítána volná dráha. Takto je neutron transportován mezi rozhraními různých materiálů až do doby, než volná dráha skončí uvnitř materiálu (proměnná neutronu `rw_surface` slouží k účelu identifikace, na kterém rozhraní/povrchu se neutron nachází a v proměnné `rw_region` je identifikován materiál, v němž probíhá transport).

Monte Carlo solver pro $U_W B_1$ modeluje 2-D geometrii regulární palivové buňky (nekoněčné mříže palivových proutků) ve 2 mřížích – čtvercové (parametr `lat=1`) a hexagonální (`lat=2`). V případě, že se během transportu neutron dostane na krajní povrch palivové buňky, je aplikována hraniční podmínka. Z možných hraničních podmínek používaných pro MC kódy (reflexní, bílá, periodická) je pro $U_W B_1$ zvolena periodická hraniční podmínka. Neutron, který se dostane na hranici, nemění svůj směr, ale změní souřadnice x, y tak, že se přesune na protilehlou stěnu pravidelné buňky (čtverec nebo hexagon).

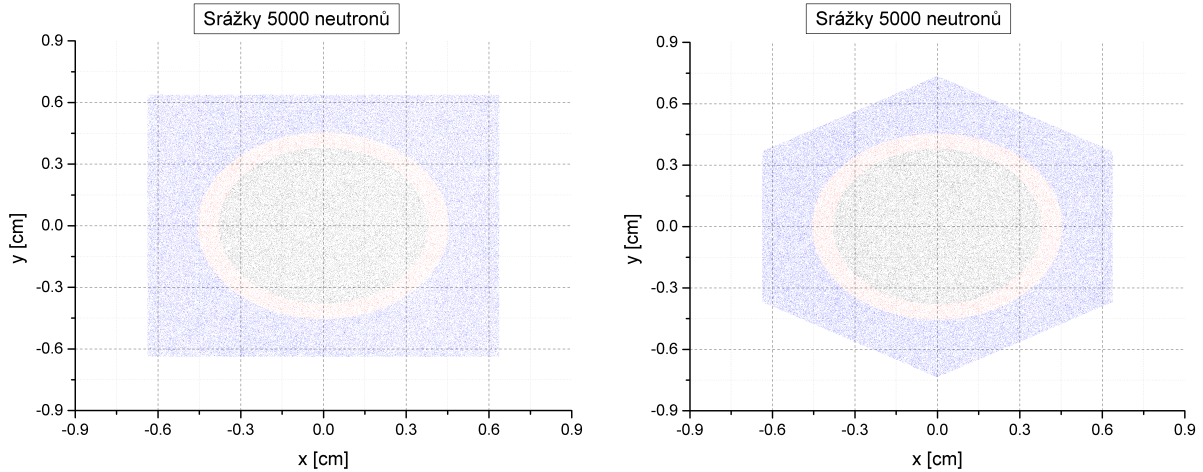
Na Obr. 4.4 je zobrazena simulace transportu prvních 2 neutronů pro testový příklad geometrie paliva VVER-1000 s obohacením 5.0 wt %. Červenou barvou jsou označeny počáteční a konečná pozice neutronu ("narození" a "smrt" neutronu). Porovnání obou typů mříží palivových buněk je provedeno na Obr. 4.5, vykreslena jsou místa kolizí první aktivní generace neutronů (každý graf obsahuje cca 150 tisíc bodů).



Obr. 4.4: Pohyb jednoho neutronu během simulace.

4.2.8 Generátor náhodných čísel

Náhodné číslo $0 \leq RN < 1$ je výstupem generátoru náhodných čísel. V souvislosti s Monte Carlo simulací je potřeba, aby generátor náhodných čísel měl velkou periodu, protože je simulováno několik milionů neutronů a každý neutron během svého transportu vyžaduje



Obr. 4.5: Místa srážek jedné generace neutronů.

náhodná čísla na určování střední volné dráhy, výběru nuklidu, výběru reakce a průběhu reakce.

Monte Carlo simulace umožňuje jednoduchou paralelizaci, simulace každého neutronu může probíhat na vlastním procesoru a najednou lze simulovat všechny neutrony v dané generaci. Protože každé náhodné číslo je určeno v závislosti na předchozím náhodném čísle, byl implementován vlastní generátor náhodných čísel, aby se zabránilo problémům s uchováním předchozí hodnoty pro každý procesor [80], [81], [82], [83], [84].

Lineární kongruentní generátor pro $U_W B_1$ je založen na parametrech ze článku [85]. Náhodné číslo S_{k+1} je generováno podle hodnoty předchozího náhodného čísla S_k podle vztahu

$$S_{k+1} = (g S_k + c) \bmod 2^M \quad (4.17)$$

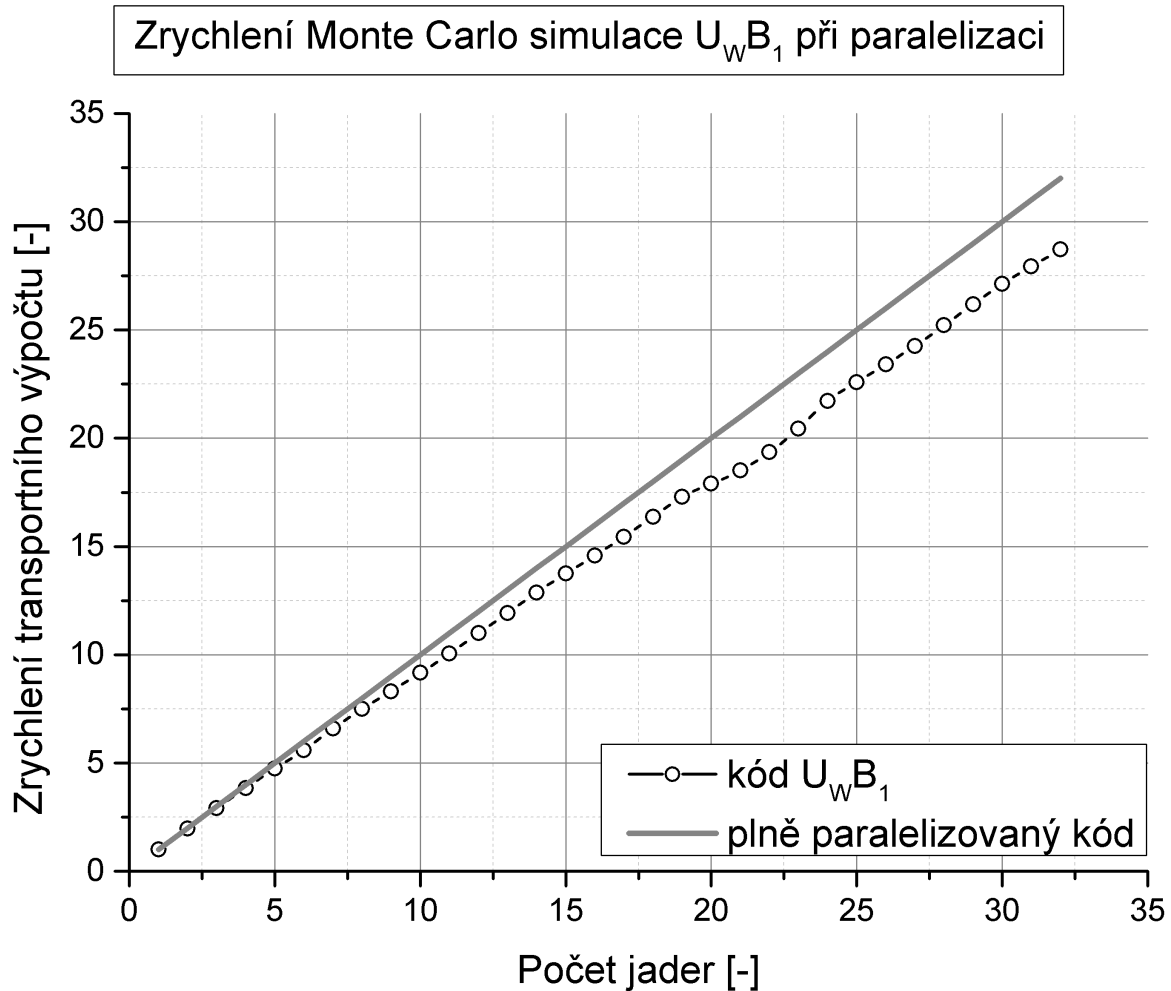
kde parametry g, c, M popisují sekvenci náhodných (přesněji pseudonáhodných) čísel. Počáteční seed $S_0 = 1$ je rovněž parametrem sekvence náhodných čísel. Parametry LCG pro $U_W B_1$ jsou následující

$$\begin{aligned} g &= 3512401965023503517 \\ c &= 0 \\ M &= 63 \end{aligned} \quad (4.18)$$

V případě paralelního výpočtu je předchozí hodnota náhodného čísla ukládána zvlášť pro každý procesor a je využito posunutí sekvence náhodných čísel (stride) podle vztahu

$$S_k = g^k S_0 + c \frac{g^k - 1}{g - 1} \bmod 2^M \quad (4.19)$$

Zrychlení transportního výpočtu při paralelizaci je výrazné a blíží se ideální rychlosti, viz Obr. 4.6, při využití typického čtyřjádrového procesoru je faktor zrychlení 3.85.



Obr. 4.6: Zrychlení transportního výpočtu při paralelizaci.

4.3 Schéma vyhořívání 2sPC

Vzájemné spojení solverů pro Batemanovy rovnice a pro transportní rovnici je v kódu $U_W B_1$ provedeno nově vyvinutým dvoustupňovým schématem vyhořívání 2sPC ("two-step predictor-corrector method"), ve kterém je metoda prediktor-korektor použita ve dvou stupních – proměnné pro oba typy řešených rovnic jsou určovány pro predikovaný i korigovaný stav.

Vývoj schématu vyhořívání 2sPC byl proveden na základě tří hlavních myšlenek:

1. Koeficient násobení neutronů během vyhořívání je požadovanou veličinou ve studiu vyhořívajících absorbátorů. Koeficient násobení může být odhadnut jednoduchým podílem produkce a absorpce neutronů bez nutnosti provádět výpočetně náročný transportní výpočet. Tento odhad není velmi přesný, ale chyba odhadu je lineárně závislá na vyhoření [A1].
2. Efektivní účinné průřezy vykazují hladký průběh v závislosti na vyhoření [A10].

Na základě znalosti efektivních účinných průřezů na počátku a na konci vyhořívání mohou být odhadnuty efektivní účinné průřezy v libovolném bodě v průběhu vyhořívání. Lineární závislost je přiblížením prvního stupně, vyšší stupeň přiblížení je možný na základě koncentrací nuklidů.

3. Implementace metody prediktor-korektor je různá, ale středování hustot toku neutronů (resp. efektivních účinných průřezů) nebo koncentrací nuklidů představuje základní charakteristiku těchto metod [86]. Z tohoto důvodu je metoda 2sPC založena na predikci a korekci efektivních účinných průřezů v prvním stupni schématu vyhořívání a na predikci a korekci koncentrací nuklidů v druhém stupni. Cílem metody 2sPC je minimalizovat počet transportních výpočtů v průběhu vyhořívání bez ohledu na počet výpočtů izotopických změn, jejichž výpočetní čas je v porovnání s transportní úlohou zanedbatelný. Jeden transportní výpočet je nutný pro určení stavu čerstvého paliva a jeho efektivních účinných průřezů. Odhad efektivních účinných průřezů na konci vyhořívání je proveden ve dvou výpočtech – predikční transportní výpočet a korigovaný transportní výpočet. Metoda 2sPC proto vyžaduje pouze tři transportní řešení v celém průběhu vyhořívání jaderného paliva.

4.3.1 První stupeň metody

První stupeň metody 2sPC spotřebuje hlavní část výpočetního času, protože obsahuje všechny tři transportní výpočty. Stupeň je rozdělen do tří částí – initial, predictor a corrector, v každé části je proveden jeden transportní výpočet.

Cílem prvního stupně je definovat stav modelu na počátku a na konci vyhořívání, tj. efektivní účinné průřezy σ_0, σ_N , koeficient násobení určený podle transportního výpočtu (horní index MC) a podle podílu produkce a absorpce neutronů (horní index EST) $k_0^{MC}, k_N^{MC}, k_0^{EST}, k_N^{EST}$ a složení paliva N_0, N_N . Predikované stavy jsou označeny horním indexem P, korigované stavy horním indexem C a časové kroky vyhořívání jsou popsány dolním indexem. Stav na konci vyhořívání je určen středováním predikovaného a korigovaného finálního stavu.

Batemanovy rovnice v druhé části výpočtu (predictor) jsou doplněny účinnými průřezy pro stav na počátku vyhořívání pro všechny časové intervaly vyhořívání, v třetí části výpočtu (corrector) jsou Batemanovy rovnice rovněž uvažovány konstantní v celém průběhu vyhořívání. V případě třetí části schématu vyhořívání jsou použity efektivní účinné průřezy z druhého transportního výpočtu.

V prvním stupni metody 2sPC je koeficient násobení určen dvěma způsoby, transportním výpočtem (MC) a odhadem podle produkční rovnice neutronů (EST) ve tvaru

$$k_i^{EST} = \frac{\sum_{j=1}^{423} N_{i,j} \sum_{k=1}^{30} \nu_k \sigma_{i,j,k}}{\sum_{j=1}^{423} N_{i,j} \sum_{k=1}^{30} \sigma_{i,j,k}} \quad (4.20)$$

která koeficient násobení odhaduje s chybou danou nezapočítáním prostorového rozložení proměnných. Proměnná ν_k představuje multiplikaci neutronů k -té reakce (0 pro absorpční

reakce, x pro reakce (n, xn) a ν pro štěpení), $N_{i,j}$ jadernou hustotu j -tého nuklidu v i -tém časovém intervalu vyhořívání a $\sigma_{i,j,k}$ efektivní účinný průřez pro dříve zmíněné indexy času, nuklidu a reakce.

Solver pro Batemanovy rovnice v kódu $U_W B_1$ řeší přeměnu 3820 nuklidů vlivem 30 jaderných reakcí metodou CRAM s pomocí algebraické knihovny MUMPS pro řídké matice. Monte Carlo solver pro transportní rovnici v kódu $U_W B_1$ řeší transport neutronů mezi 423 nuklidy na základě dat z knihovny jaderných dat ENDF/B-VII.1 pro 46 jaderných reakcí. Součástí kódu $U_W B_1$ jsou procedury pro kolapsování a převod dat mezi oběma solvery.

Odhad koeficientu násobení je proveden za předpokladu rozdílů oproti koeficientu násobení určeném transportním výpočtem závislých lineárně na vyhoření. Z tohoto důvodu je nutné určení koeficientu násobení podle transportního výpočtu na počátku i na konci vyhořívání.

4.3.2 Druhý stupeň metody

Druhý stupeň metody 2sPC je složen ze dvou částí – depletor a estimator. Depletor používá dvou výpočtů izotopických změn pro každý časový interval vyhořívání a pro každou oblast, kde dochází k vyhořívání. Cílem druhého stupně je určení inventáře a odhadu koeficientu násobení. Předpokládá se, že efektivní účinné průřezy mají stejný tvar závislosti na vyhoření jako tvar závislosti jaderné hustoty odpovídajících nuklidů na vyhoření. Z tohoto důvodu jsou efektivní účinné průřezy přepočítány před každým výpočtem izotopických změn. V případě, že je algoritmem určen negativní efektivní účinný průřez, interpolace podle koncentrace nuklidů je nahrazena lineární interpolací podle vyhoření B_i mezi počátečním vyhořením B_0 a konečným vyhořením B_N .

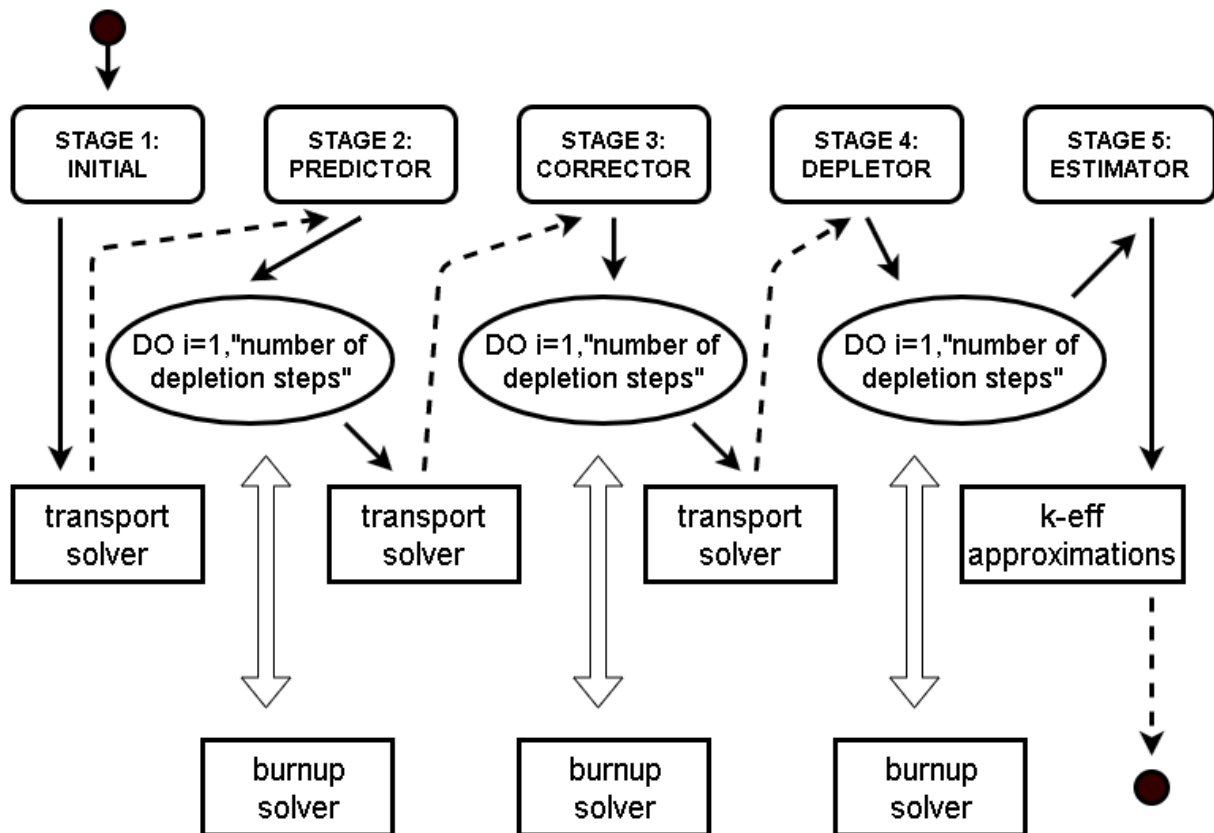
Efektivní účinné průřezy pro polovinu daného časového intervalu vyhořívání nejsou známy, protože koncentrace nuklidů z části depletor ještě nejsou k dispozici. Proto je pro každý časový interval vyhořívání použito metody prediktor-korektor a spolu s další metodou prediktor-korektor pro transportní výpočty dává název celému schématu vyhořívání. Predikované koncentrace nuklidů jsou určeny pomocí efektivních účinných průřezů na počátku intervalu, korigované koncentrace nuklidů jsou určeny na základě predikovaných efektivních účinných průřezů na konci intervalu. Pro zjednodušení není v Tab. 4.7 popisující algoritmus 2sPC provedeno rozlišení více prostorových oblastí, i když během výpočtu je toto rozlišení respektováno.

Při srovnání s Eulerovou metodou prediktor-korektor dochází při využití metody 2sPC ke zrychlení výpočtu cca o jeden řád, protože počet transportních výpočtů se snižuje z $2N + 1$ na 3, i když počet výpočtů inventáře stoupá z obvyklých $2N$ na $4N + 3$. Při zanedbatelné výpočetní náročnosti výpočtu inventáře je pro typický počet $N \approx 30$ zrychlení celého výpočtu vyhořívání až 20násobné.

Paralelizace ve schématu 2sPC je využita pouze při Monte Carlo simulaci, ostatní části výpočtu nejsou paralelizované z důvodu relativně malých dimenzí proměnných, jejichž paralelní integrace by nebyla příliš výhodná.

4.3.3 Algoritmus metody

Algoritmus schématu vyhořívání 2sPC je popsán v Tab. 4.7 a odpovídající vývojový diagram kódu $U_W B_1$ viz Obr. 4.7.



Obr. 4.7: Diagram kódu $U_W B_1$.

Tab. 4.7: Algoritmus schématu vyhořívání 2sPC.

Část	Název	Solver	Algoritmus
1	initial	transport (1)	$\varphi_0(N_0), k_0^{MC}, k_0^{EST}(\sigma_0, N_0), \sigma_0(N_0)$
		—	$FOR(i = 1..N)DO$
2	predictor	burnup (N)	$N_i^P(\sigma_0, N_{i-1}^P)$
		—	$ENDDO$
		transport (1)	$\varphi_N^P(N_N^P), k_N^{MC,P}, \sigma_N^P(N_N^P)$
		—	$FOR(i = 1..N)DO$
		burnup (N)	$N_i^C(\sigma_N^P, N_{i-1}^C)$
		—	$ENDDO$
3	corrector	transport (1)	$\varphi_N^C(N_N^C), k_N^{MC,C}, \sigma_N^C(N_N^C)$
		—	$k_N^{MC} = \frac{1}{2} (k_N^{MC,P} + k_N^{MC,C})$
		—	$N_N = \frac{1}{2} (N_N^P + N_N^C)$
		—	$\sigma_N = \frac{1}{2} (\sigma_N^P + \sigma_N^C)$
		—	$FOR(i = 1..N-1)DO$
		—	$\sigma_{i,j}^P = \sigma_{0,j} + (\sigma_{N,j} - \sigma_{0,j}) \frac{N_{i-1,j} - N_{0,j}}{N_{N,j} - N_{0,j}}, j = 1..423$
		—	$IF(\sigma_{i,j}^P \leq 0) THEN \sigma_{i,j}^P = \sigma_{0,j} + (\sigma_{N,j} - \sigma_{0,j}) \frac{B_i}{B_N}$
4	depletor	burnup (N)	$N_i^P(\sigma_i^P, N_{i-1}), k_i^{EST,P}(\sigma_i^P, N_i^P)$
		—	$\sigma_{i,j}^C = \sigma_{0,j} + (\sigma_{N,j} - \sigma_{0,j}) \frac{N_{i-1,j} - N_{0,j}}{N_{N,j} - N_{0,j}}, j = 1..423$
		—	$IF(\sigma_{i,j}^C \leq 0) THEN \sigma_{i,j}^C = \sigma_{0,j} + (\sigma_{N,j} - \sigma_{0,j}) \frac{B_i}{B_N}$
		burnup (N)	$N_i^C(\sigma_i^C, N_{i-1}), k_i^{EST,C}(\sigma_i^C, N_i^C)$
		—	$N_i = \frac{1}{2} (N_i^P + N_i^C)$
		—	$k_i^{EST} = \frac{1}{2} (k_i^{EST,P} + k_i^{EST,C})$
		—	$ENDDO$
		—	$FOR(i = 1..N-1)DO$
5	estimator	—	$k_i = k_i^{EST} \left[\frac{k_0^{MC}}{k_0^{EST}} + \frac{B_i}{B_N} \left(\frac{k_N^{MC}}{k_N^{EST}} - \frac{k_0^{MC}}{k_0^{EST}} \right) \right]$
		—	$ENDDO$

4.4 Datové knihovny $U_W B_1$

Datové knihovny kódu $U_W B_1$ obsahují především jaderná data – účinné průřezy, popis radioaktivních přeměn a charakteristiky nuklidů. Data byla vytvořena na základě dat z knihovny ENDF/B-VII.1, znalost detailů datových knihoven pro výpočet kódem není po uživateli požadována, protože procedury převodu do formátu použitým v kódu $U_W B_1$ nemá uživatel k dispozici. Všechny knihovny jsou uloženy v ASCII formátu a kódem $U_W B_1$ jsou čteny volným formátem jazyka Fortran 90.

4.4.1 Algebraické knihovny

Algebraické knihovny obsahují 5 z celkem 33 datových knihoven $U_W B_1$ a jsou využity v metodě CRAM při výpočtech inventáře maticovou exponenciálou, která je aproximována sumou inverzních matic. Lineární systém je popsán komplexní řádkou maticí, která je řešena algebraickými knihovnami BLAS a MUMPS. Knihovna BLAS je uložena v souboru `blas_LINUX.a`, kompilovaná z BLAS verze březen 2007. Knihovna MUMPS verze 4.10.0 z roku 2011 je uložena v souborech `libmpiseq.a`, `libmumps_common.a`, `libpord.a` and `libzmumps.a`. Knihovny byly testovány v operačním systému Ubuntu 13.10 virtuálně umístěném pod systémem Windows 7. V případě použití spouštěcího souboru `uwb1` namísto kompilace kódu před samotným výpočtem nejsou algebraické knihovny potřebné, protože jsou linkované ve spouštěcím souboru.

4.4.2 Knihovna charakteristik nuklidů

Knihovna charakteristik nuklidů je uložena v souboru `uwb1zaid0423to3820.txt`. Solver pro Batemanovy rovnice řeší 3820 nuklidů s daty o radioaktivní přeměně, transportní solver řeší 423 nuklidů s daty o neutronových jaderných reakcích. Každý nuklid má tři ID čísla – pozice v 423 nuklidech (první sloupec knihovny), pozice ve 3820 nuklidech (druhý sloupec knihovny) a ZAID číslo (třetí sloupec knihovny). ZAID číslo je určeno vztahem $ZAID=10000*Z+10*A+m$, např. pro U-235 je 922380 a pro Am-242m je popis 952421.

4.4.3 Knihovny solveru inventáře

Knihovny pro solver Batemanových rovnic obsahují 8 ze 33 datových knihoven. Účelem knihoven je numerické vyhodnocení přechodové matice použité v rovnicích změn inventáře. Přechodová matice je rozdělena na čtyři části, diagonální a nediagonální prvky pro spektrálně nezávislé a spektrálně závislé prvky matice.

Diagonální prvky přechodové matice reprezentují radioaktivní přeměnu a rychlost úbytku vlivem jaderných reakcí. Rozdělení na spektrálně nezávislé a závislé prvky matice je důsledek jejich závislosti na celkové hustotě toku neutronů, která se v průběhu výpočtu mění. Nediagonální prvky přechodové matice popisují přechod mezi dvěma nuklidy a jsou uloženy ve dvou skupinách, podobně jako diagonální prvky.

Knihovna `uwb1aiiuni.txt` obsahuje diagonální spektrálně nezávislé prvky přechodové matice popisující radioaktivní přeměny podle dat ENDF/B-VII.1. První řádek obsahuje popis knihovny, obdobně jsou na prvním řádku popsány všechny ostatní datové knihovny. Data knihovny jsou uložena ve třech sloupcích – dva sloupce popisu nuklidu a sloupec prvku přechodové matice s negativní hodnotou popisující rychlost úbytku nuklidu. Například řádka Cs-137

```
1799 551370 -7.30203E-10
```

popisuje nuklid Cs-137 s přechodovou konstantou $7.30203E-10 \text{ s}^{-1}$ (poločas přeměny lehce přes 30 let).

Knihovna `uwb1fijphi.txt` obsahuje nediagonální spektrálně závislé prvky přechodové matice popisující úbytek vlivem jaderných reakcí. Před samotnými daty je uložen počet prvků knihoven Fij (107331). Data v knihovně popisují i -tý a j -tý nuklid pomocí pozice ve skupině 423 a 3820 nuklidů a ZAID čísla, pátý sloupec obsahuje hodnotu prvku matice F_{ij} , která obsahuje podíl přechodu mezi oběma nuklidy, popisující radioaktivní rozpad, multiplicitu dceřinných produktů a výtěžky štěpení. Poslední sedmý sloupec popisuje pozici reakce ve výpočtech vyhořívání (celkem 30 reakcí). Prvek přechodové matice A_{ij} popisuje rychlost přeměny z j -tého nuklidu na i -tý nuklid. Prvek přechodové matice A_{ij} je určen součtem všech nuklidů a všech reakcí, které vedou ke tvorbě i -tého nuklidu podle vztahu $A_{ij} = \varphi \sum_{km} F_{ij} \sigma_{km}$. Například řádek

```
3519 3518 922390 922380 1.00000E+00 365 18
```

popisuje radiační záchyt $U-238(n,\gamma)U-239$ který vede ke tvorbě Pu-239. Dalším příkladem je řádka

```
1799 3514 551370 922350 5.99988E-04 362 4
```

popisující štěpení U-235 a tvorbu Cs-137 s nezávislým výtěžkem štěpení $5.99988E-04$.

Knihovny `uwb1deplxscom0293k.txt`, `uwb1deplxscom0600k.txt`, `uwb1deplxscom0900k.txt`, `uwb1deplxscom1200k.txt` obsahují data účinných průřezů pro 30 reakcí v solveru pro Batemanovy rovnice pro 423 nuklidů, které mají informace o účinných průřezech. Data jsou uložena pro 4 dopplerovsky rozšířené teploty 293 K až 1200 K v energetické struktuře Monte Carlo solveru (4308 grup) pro účely kolapsování s hustotou toku neutronů. Data jsou uložena v komprimovaném formátu, aby se odstranilo čtení velkých bloků nulových hodnot proměnných. Při výpočtu kódem `UwB1` jsou proměnné uloženy v nekomprimovaném formátu pro rychlejší zpracování v operační paměti. Data jsou uložena v blocích pro jednotlivé nuklidy, blok začíná popisem nuklidu a počtem nenulových reakcí a je následován řádky pro jednotlivé reakce – v prvních dvou sloupcích identifikace reakce, dále pozice první energetické grupy s nenulovým účinným průřezem a celkový počet nenulových grup. Například popis U-235

```
362 922350 6
1 4 2101 2208 1.20700E-07 ...
2 16 4239 70 3.40753E-03 ...
```

```

3  17  4279    30  5.00382E-05 ...
4  18    1  4308  3.11441E+04 ...
14 37  4303    6  5.14348E-05 ...
18 102    1  4308  5.91243E+03 ...

```

ukazuje, že je uloženo 6 reakcí, z nichž dvě reakce (štěpení a radiační záchyt) pokrývají všech 4308 grup a mají výrazně vyšší účinné průřezy.

Knihovna `uwb1aijuni.txt` obsahuje nediagonální spektrálně nezávislé elementy přechodové matice popisující radioaktivní přeměny. Formát je obdobný jako pro diagonální prvky matice. Například popis Cs-137

```

1846 1799 561370 551370 3.87048E-11
1847 1799 561371 551370 6.91498E-10

```

ukazuje, že Cs-137 se rozpadá na Ba-137 s efektivní přeměnovou konstantou $3.87048E-11$ s^{-1} a na metastabilní Ba-137m s efektivní přeměnovou konstantou $6.91498E-10$ s^{-1} .

Knihovna `uwb1qvalues4depl.txt` obsahuje hodnoty využitelné energie (Q-value), které jsou využity při převodu z výkonu paliva na celkovou hustotu toku neutronů. Data jsou uložena pro všech 30 reakcí solveru. Typické hodnoty využitelné energie jsou okolo 200 MeV pro štěpení (reakce 4/30) a 5 MeV pro radiační záchyt (reakce 18/30), které jsou dominantní v nepalivových regionech (např. pokrytí paliva). Následuje příklad pro U-235.

```

362 922350 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 1.93405E+08 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00
0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00
0.00000E+00 0.00000E+00 6.54520E+06 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00
0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00

```

4.4.4 Knihovny Monte Carlo solveru

Knihovny Monte Carlo solveru jsou uloženy v 19 z 33 datových knihoven. Účelem knihovny je dodat data pro Monte Carlo simulaci. Uložena jsou data 423 nuklidů a 46 jaderných reakcí z knihovny ENDF/B-VII.1. Reakce jsou v kódu $U_W B_1$ rozděleny do 5 skupin – pružný rozptyl ($U_W B_1$ reakční číslo 1), nepružný rozptyl do kontinua (reakce 2, 3 a 45), štěpení (reakce 4), nepružný rozptyl do diskretních stavů (reakce 5 až 44) a absorpce (reakce 46).

Knihovna `uwb1angular02.txt` obsahuje úhlové rozdělení pružného rozptylu. Kosinus úhlu rozptylu v CM soustavě je uložen pro 76 vybraných hodnot energií a 21 hodnot popisující hranice 20 ekvipravděpodobnostních buněk. Například první datová řádka úhlové distribuce

```

1.00000E-05 -9.00000E-01 -8.00000E-01 -7.00000E-01 -6.00000E-01 -5.00000E-01 -4.00000E-01 -3.00000E-01
-2.00000E-01 -1.00000E-01 0.00000E+00 1.00000E-01 2.00000E-01 3.00000E-01 4.00000E-01 5.00000E-01
6.00000E-01 7.00000E-01 8.00000E-01 9.00000E-01 1.00000E+00

```

popisuje izotropní rozptyl H-1 pro energii $1.0E-05$ eV. Knihovna je uložena v nekomprimovaném formátu, tj. izotropní rozptyl není explicitně rozlišen.

Knihovna `uwb1angular51t90.txt` obsahuje data úhlového rozdělení nepružného rozptylu do diskretních stavů, data jsou shodná s předchozí knihovnou, vzhledem k vysokému počtu reakcí a vysokému počtu izotropních rozptylů (88 % počtu reakcí) jsou data uložena v komprimovaném formátu, který má dvě části. V první části je pro každou ze 40 rozptylových reakcí uložena pozice dat v druhé části knihovny, přičemž nulová pozice označuje izotropní reakci. Například pro Mo-98 popis v první části

```
1.00000E+06  3288  17273    0    0    0    0    0    0    0    0    0
      0    0    0    0    0    0    0    0    0    0    0    0
      0    0    0    0    0    0    0    0    0    0    0    0
      0    0    0    0
```

ukazuje, že úhlová distribuce rozptylu pro 1.0 MeV je neizotropní pouze pro první dvě rozptylové reakce (reakce MT=51 a MT=52), data jsou uložena na pozicích 3288 a 17273 následovně:

```
3288 -9.33983E-01 -8.62969E-01 -7.84958E-01 -6.99950E-01 -6.06947E-01 -5.04180E-01 -3.91954E-01 -2.69893
      E-01 -1.37752E-01  3.76228E-07  1.37752E-01  2.69893E-01  3.91954E-01  5.04180E-01  6.06947E-01
      6.99950E-01  7.84958E-01  8.62969E-01  9.33983E-01  1.00000E+00
17273 -8.88006E-01 -7.80010E-01 -6.74013E-01 -5.71014E-01 -4.71014E-01 -3.71544E-01 -2.74013E-01 -1.77011
      E-01 -8.10095E-02  1.39930E-02  1.08996E-01  2.04486E-01  3.00000E-01  3.96002E-01  4.93003E-01
      5.90531E-01  6.90005E-01  7.91004E-01  8.94003E-01  1.00000E+00
```

Knihovna `uwb1angular91.txt` obsahuje úhlové rozdělení nepružného rozptylu do kontinua, formát knihovny je shodný s předchozí knihovnou, ale hodnoty kosinu úhlu jsou uloženy pro LAB soustavu, na rozdíl od CM soustavy v ostatních knihovnách. Komprimovaný formát je využit z důvodu dominance izotropních reakcí (85 % počtu reakcí).

Knihovny `uwb1chi16.txt`, `uwb1chi17.txt`, `uwb1chi18.txt` a `uwb1chi91.txt` popisují energetickou distribuci sekundárních částic pro reakce (n,2n), (n,3n), (n,f) a nepružný rozptyl do kontinua. Energetická distribuce sekundárních částic je uložena na fixní síti 1000 ekvipravděpodobnostních bodů. Knihovny jsou rozděleny do dvou částí. V první části je popsána energetická síť primárních neutronů, v druhé části jsou uložena samotná data. Například pro U-238 a (n,2n) reakci je v první části uložena informace o energiích 7 MeV a 20 MeV, mezi kterými je ve výpočtech uvažována lineární interpolace

```
365  922380  7.00000E+06  2.00000E+07
```

Druhá část dat pro zmíněnou reakci obsahuje data pro jemnou síť ekvipravděpodobnostních buněk

```
365  922380  4.05420E+03  ...  8.18500E+05
365  922380  1.59240E+04  ...  1.36640E+07
```

kde jsou pro vstupní energii neutronu 7 MeV uloženy hranice buněk mezi 4 keV a 819 keV a pro 20 MeV jsou hranice od 159 keV do 1366 keV.

Knihovny `uwb1maxwell10293k.txt` až `uwb1maxwell11200k.txt` obsahují data Maxwell-Boltzmannovy distribuce pro tepelný rozptyl lehkých jader, v aktuální verzi kódu `UWB1` už nejsou během výpočtu data využita.

Knihovna `uwb1nmass.txt` obsahuje hmotnosti nuklidů, které jsou využity k určení hmotnosti štěpného materiálu, výkonové distribuce a zejména k popisu rozptylu neutronů, kde je důležitá relativní hmotnost nuklidu vůči neutronu. Datová řádka pro H-1

```
1 10010 9.99167E-01
```

popisuje, že nuklid H-1 (proton) je méně hmotný než neutron.

Knihovna `uwb1nubar.txt` obsahuje multiplicitu neutronů při štěpení pro 40 hodnot energií štěpného neutronu. Například řádka U-235

```
922350 2.43670E+00 .. 5.20985E+00
```

ukazuje, že při štěpení U-235 vzniká 2.44 až 5.21 neutronu v závislosti na energii.

Knihovna `uwb1qvalues4mc.txt` obsahuje využitelné energie (Q-value) pro reakce MC solveru a až na výčet reakcí je formát shodný s knihovnou `uwb1qvalues4depl.txt`.

Knihovny `uwb1xscom0293k.txt`, `uwb1xscom0600k.txt`, `uwb1xscom0900k.txt` a `uwb1xscom1200k.txt` obsahují účinné průřezy transportních reakcí. Data jsou uložena v komprimovaném formátu shodném s formátem analogických knihoven pro solver pro Batemanovy rovnice.

4.5 Vstup a výstup $U_W B_1$

Kód $U_W B_1$, napsaný v jazyce Fortran 90, čte v textovém vstupním souboru numerická (integer a real) nebo textová data, vše ve volném formátu s libovolným způsobem zápisu a libovolnými oddělovači. Komentáře v řádce následující za vstupními daty jsou během výpočtu přeskočeny. Výstupní soubor je zapisován v pevném formátu ve struktuře volené tak, aby bylo možné jej strojově dále zpracovat. Detailní popis kódu $U_W B_1$ z uživatelského pohledu je shrnut v manuálu [87].

4.5.1 Vstupní soubor $U_W B_1$

Vstupní soubor je rozdělen do řádků podle Tab. 4.8, žádné volné řádky nejsou povoleny. Struktura souboru je v tabulce popsána proměnnými tak, jak se objevují ve vstupním souboru. Proměnné typu integer, double real a character*200 jsou čteny volným formátem, detailní popis vstupních proměnných je shrnut v Tab. 4.9.

Vstupní soubor je rozdělen do tří základních bloků popisujících vyhořívání jaderného paliva. V prvním bloku jsou definována všechna vstupní data s výjimkou materiálových složení. Druhý blok je použit pro výčet datových knihoven a s výjimkou výběru teploty knihoven účinných průřezů zůstává beze změn. Poslední blok obsahuje materiálové složení všech oblastí na počátku vyhořívání.

První řádka vstupního souboru obsahuje popis řešeného problému a je zkopírována do výstupního souboru. Druhá řádka obsahuje počet jader (`pr1_threads`), která budou využita v Monte Carlo simulaci.

Transportní solver vyžaduje parametry Monte Carlo simulace, geometrii a materiálová data, aby byla určena hustota toku neutronů v geometrických regionech. Parametry Monte Carlo jsou počet neutronů v generaci (**npg**), počet neaktivních generací (**nsng**) a celkový počet generací (**tnng**). Z důvodu omezení geometrie na 2-D model regulární palivové buňky není požadován vysoký počet neutronů.

Geometrie je popsána na čtyřech řádcích. Geometrické rozměry [cm] jsou dány poloměry koncentrických válců (**rccregion**) a polovinou rozteče palivové buňky (**hpitch**), následuje počet koncentrických válců (**n_ccregion**), které definují celkový počet geometrických regionů (**n_ccregion+1**), poslední region je oblast mezi válcem s největším poloměrem a hraničními rovinami mříže čtvercového (**lat=1**) nebo trojúhelníkového (**lat=2**) typu s periodickou hraniční podmínkou.

Materiálové složení, použité v obou solvech $U_W B_1$, je čteno od řádky 36 až do konce vstupního souboru. Materiálové složení je vyžadováno v každém geometrickém regionu, i když je materiál použit ve více regionech. Pro každý region je definován počet nuklidů a jejich jaderné hustoty [at/bcm]. Na řádku s jadernou hustotou je identifikace nuklidu provedena třemi čísly (pozice v transportní knihovně, pozice v knihovně inventáře, ZAIID číslo), které jsou pro každý nuklid unikátní a jejichž seznam je uložen v datové knihovně **uwb1zaid0423to3820.txt**.

Solver pro Batemanovy rovnice vyžaduje výkonovou historii vyhořívání a výčet regionů, ve kterých je povolena změna koncentrace nuklidů. Pro každý časový krok/interval vyhořívání (**idepl**) jsou parametry výkon paliva [MW/MTU] (**depl_power(idepl)**) a doba [d] ozařování (**depl_time(idepl)**). Integrál výkonu a času určuje vyhoření paliva. Počáteční hmotnost těžkého kovu je pro každý geometrický region určena kódem. Pro každý region je možné provést vyhořívání podle výkonu (**depl_type=1**, regiony se štěpným materiálem), podle hustoty toku neutronů (**depl_type=2**, regiony bez štěpného materiálu), nebo vyhořívání neprovádět (**depl_type=0**). Výkon paliva je celkovým výkonem paliva ve všech geometrických regionech, relativní výkony jsou určeny kódem. Pokud je počet intervalů vyhořívání nulový, je proveden pouze jeden transportní výpočet s čerstvým palivem.

Datové knihovny jsou vyjmenovány na řádcích 14 až 35 a většina je nezávislá na výpočetním modelu, výjimkou jsou data v řádcích 14-16, 29-30 a 34-35. Cesta k datovým knihovnám (**folderpath**) je použita k lokalizaci dat. Protože jsou účinné průřezy závislé na teplotě, mohou být ve výpočtech použity různé sady účinných průřezů. Uživatel má možnost zvolit dvě sady transportních knihoven a dvě sady knihoven inventáře a vybrat, ke kterým geometrickým regionům přiřadit první (**reg_libtype=1**) a druhou (**reg_libtype=2**) knihovnu. K dispozici jsou teploty 293 K až 1200 K. Teplotní efekty zahrnují především dopplerovské rozšíření a tepelný pohyb jader, první efekt je součástí datových knihoven, druhý efekt je popsán kódem při výpočtu na základě teplot [K] jednotlivých geometrických regionů (**maxwell_kelvin**) na řádce 15.

Tab. 4.8: Proměnné ve vstupním souboru $U_W B_1$.

Řádek	Proměnná	Typ	Část pro uživatele
1	caselabel	character*200	libovolné
2	prl_threads	integer*4	MC
3	npg	integer*4	MC
4	nsng	integer*4	MC
5	tnng	integer*4	MC
6	n_ccregion	integer*4	geometrie
7	rccregion(n_ccregion)	real*8	geometrie
8	hpitch	real*8	geometrie
9	lat	integer*4	geometrie
10	idepl	integer*4	vyhořívání
11	depl_power(idepl)	real*8	vyhořívání
12	depl_time(idepl)	real*8	vyhořívání
13	depl_type(n_ccregion+1)	integer*4	vyhořívání
14	reg_libtype(n_ccregion+1)	integer*4	knihovna
15	maxwell_kelvin(n_ccregion+1)	real*8	knihovna
16	folderpath	character*200	knihovna
17	libpath(1)	character*200	—
18	libpath(2)	character*200	—
19	libpath(3)	character*200	—
20	libpath(4)	character*200	—
21	libpath(5)	character*200	—
22	libpath(6)	character*200	—
23	libpath(7)	character*200	—
24	libpath(8)	character*200	—
25	libpath(9)	character*200	—
26	libpath(10)	character*200	—
27	libpath(11)	character*200	—
28	libpath(12)	character*200	—
29	libpath(13)	character*200	knihovna
30	libpath(14)	character*200	knihovna
31	libpath(15)	character*200	—
32	libpath(16)	character*200	—
33	libpath(17)	character*200	—
34	libpath(18)	character*200	knihovna
35	libpath(19)	character*200	knihovna
36	libpath(20)	character*200	—
37+	n_nucl(n_ccregion+1)	integer*4	materiál
37++	pos0423_nucl(sum(n_nucl)),	integer*4,	materiál
	pos3820_nucl(sum(n_nucl)),	integer*4,	
	zaid_nucl(sum(n_nucl)),	integer*4,	
	ndens_nucl(sum(n_nucl))	real*8	

Tab. 4.9: Popis vstupního souboru $U_W B_1$.

Řádek	Popis	Část pro uživatele
1	case label	libovolné
2	number of CPU threads	MC
3	number of neutrons per generation	MC
4	number of skipped neutron generations	MC
5	total number of neutron generations	MC
6	number of concentric cylinder regions	geometrie
7	concentric cylinder region radii (cm)	geometrie
8	half pitch (cm)	geometrie
9	lattice type (1=square, 2=hexagonal)	geometrie
10	number of depletion intervals	vyhořívání
11	irradiation power (MW/MTU)	vyhořívání
12	irradiation days (d)	vyhořívání
13	regions depletion (0=no depletion, 1=power depletion, 2=flux depletion)	vyhořívání
14	regions transport/burnup libraries position (1 or 2)	knihovna
15	regions maxwell temperatures	knihovna
16	folder with uwbl libraries	knihovna
17	position of transport nuclides in depletion nuclides	—
18	nuclide mass relative to neutron	—
19	qvalues for inelastic reactions	—
20	xs_n2n chi data library	—
21	xs_n3n chi data library	—
22	xs_fission chi data library	—
23	xs_inelastic_continuum chi data library	—
24	nubar data library	—
25	xs_elastic angular distribution data library	—
26	xs_inelastic_discrete angular distribution data library	—
27	xs_inelastic_continuum angular distribution data library	—
28	energy grid for xs data	—
29	xs data library no1	knihovna
30	xs data library no2	knihovna
31	transition matrix Aii, universal flux-independent part	—
32	transition data Fij, part of Aij, case-flux-dependent part	—
33	transition matrix Aij, universal flux-independent part	—
34	cross section library for depletion reactions no1	knihovna
35	cross section library for depletion reactions no2	knihovna
36	recoverable energy library for depletion reactions	—
37+	number of nuclides in regions	materiál
37++	nuclear densities in regions (at/bcm)	materiál

4.5.2 Výstupní soubor $U_W B_1$

Výstup v terminálu informuje uživatele, jaký krok schématu vyhořívání 2sPC je právě řešen, výstupní data jsou zapisována na konci jednotlivých částí výpočtů, většina na samotném konci výpočtu. Výstup výpočtu v částech predictor a corrector je potlačen. [87]

Transportní solver je volán třikrát – na počátku vyhoření (krok vyhoření 0) a pro predikovaný a korigovaný stav na konci vyhořívání (krok vyhoření `idepl`). Následující příklad výstupu transportního solveru ukazuje detaily výpočtu koeficientu násobení a detailní hustotu toku neutronů ve všech 4308 energetických grupách (zde je výstup pro přehlednost zkrácen třemi tečkami). Koeficient násobení je vypsán pro každou simulovanou generaci včetně střední hodnoty a její neurčitosti.

```
transport calculation for depletion step  0 / 43
k-eff values during MC simulation:      1.34170 ... 1.32330 1.32780
k-eff averages during MC simulation:     0.00000 ... 1.33608 1.33599
k-eff uncertainty during MC simulation:   0.00000 ... 0.00083 0.00083
final k-eff:    1.33599 0.00083
energy grid:
neutron flux in region  1: 0.00000E+00 ... 4.69510E-06 6.58765E-06 ... 0.00000E+00
neutron flux in region  2: 0.00000E+00 ... 1.00517E-05 1.04392E-05 ... 0.00000E+00
neutron flux in region  3: 0.00000E+00 ... 2.03434E-05 2.00261E-05 ... 0.00000E+00
```

Solver pro Batemanovy rovnice vypisuje počáteční koncentrace nuklidů pro počáteční stav a pro stav na konci každého časového intervalu vyhořívání během části depletor schématu 2sPC. Vypsáno je vyhoření paliva, následované identifikací nuklidů a výpisem jejich jaderných hustot ve všech geometrických regionech. Následuje příklad posledního výpisu solveru.

```
depletion calculation for depletion step 43 / 43
fuel burnup: 50000.0 Mwd/MTU
nuclide positions:          1 ...      86 ...      1799 ...      3514 ...      3820
zaid identifiers:          10010 ...    80160 ...    551370 ...    922350 ...    1112720
region 1 inventory:        9.33969E-07 ... 4.60565E-02 ... 1.05221E-04 ... 1.04559E-04 ... 0.00000E+00
region 2 inventory:        0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00
region 3 inventory:        5.01551E-02 ... 2.50775E-02 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00
```

Výstupní soubor je zakončen výpisem části estimator schématu 2sPC, kde je shrnut průběh koeficientu násobení v průběhu vyhořívání.

```
burnup (Mwd/MTU) k-eff (-)
      0.00  1.33599
     40.00  1.31685
     80.00  1.31320
    120.00  1.31215
    160.00  1.31130
    200.00  1.31054
    400.00  1.30826
    600.00  1.30625
    800.00  1.30467
```

1000.00	1.30324
1500.00	1.30041
2000.00	1.29657
2500.00	1.29234
3000.00	1.28782
3500.00	1.28307
4000.00	1.27816
4500.00	1.27312
5000.00	1.26801
5500.00	1.26284
6000.00	1.25766
6500.00	1.25247
7000.00	1.24729
7500.00	1.24213
8000.00	1.23700
8500.00	1.23191
9000.00	1.22686
9500.00	1.22186
10000.00	1.21690
12500.00	1.19820
15000.00	1.17511
17500.00	1.15309
20000.00	1.13202
22500.00	1.11220
25000.00	1.09352
27500.00	1.07380
30000.00	1.05298
32500.00	1.03396
35000.00	1.01699
37500.00	1.00159
40000.00	0.98737
42500.00	0.97435
45000.00	0.96229
47500.00	0.95107
50000.00	0.94068

4.6 Validace kódu U_WB_1

Srovnání výsledků vyhořívání jaderného paliva CANDU, VVER a SFR pro různé složení a obohacení paliva bylo provedeno mezi testovaným kódem U_WB_1 a standardními kódy KENO-VI a NEWT ze sady SCALE-6.1.3, SERPENT 1.1.19 a MCNP6.1 s knihovnami jaderných dat ENDF/B-VII, dodávanými společně s kódy. Kódy SERPENT a MCNP6 jsou založené na metodě Monte Carlo s bodovými účinnými průřezy, kód KENO-VI je rychlý multigrupový Monte Carlo kód a obdobně jako deterministický S_n kód NEWT počítá vyhořívání v sekvenci s kódem ORIGEN-S.

Hlavní veličinou, která má vliv na ocenění efektivity využití vyhořívajícího absorbátoru, je průběh koeficientu násobení během vyhořívání. Srovnávány byly dále koncentrace všech 423 nuklidů v jaderném palivu, které přímo ovlivňují reaktivitu paliva.

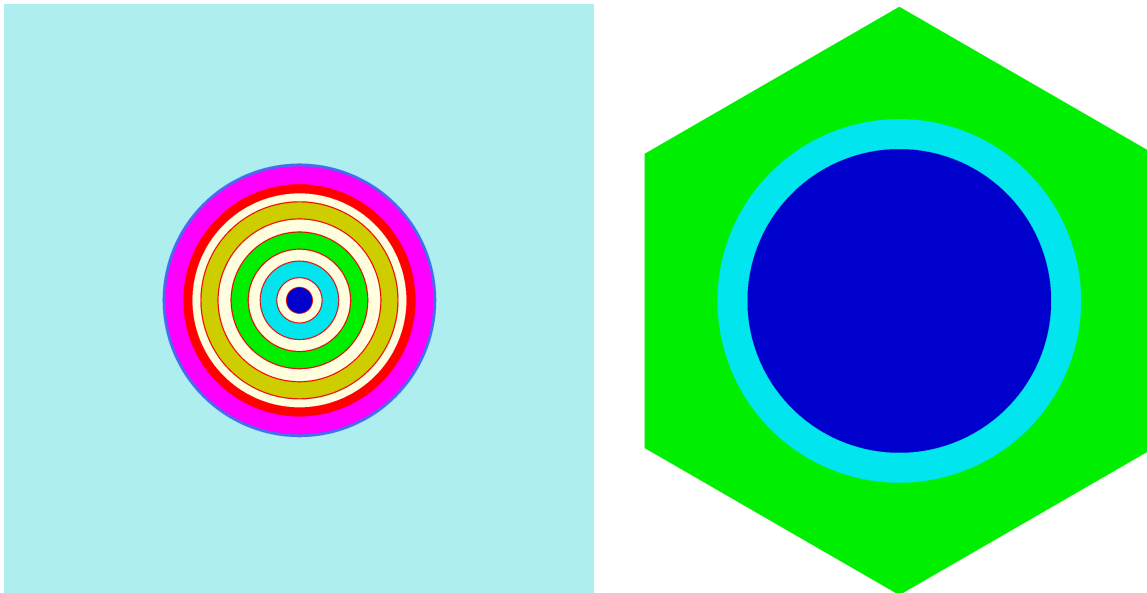
Detailní srovnání dalších veličin, celkové hustoty toku neutronů, energetické závislosti hustoty toku neutronů a efektivních účinných průřezů, bylo provedeno pro palivo CANDU ve článku [A3] se závěrem, že výpočet vyhořívání paliva CANDU s a bez vyhořívajícího absorbátoru kódem U_WB_1 zachycuje ve sledovaných parametrech chování paliva, i když se sníženou přesností. Výhodou kódu je však výrazně kratší výpočetní doba, kód U_WB_1 je o cca 1 řád rychlejší než kódy KENO-VI, NEWT a SERPENT, vůči kódu MCNP6 je rychlost o více než 2 řády vyšší.

Výpočet vyhořívání byl validován na 9 modelech – palivo CANDU s přírodním uranem a s obohacením 0.8, 1.0 a 2.0 wt% U-235, palivo VVER s obohacením 5.0, 6.0, 8.0 a 10.0 wt% U-235 a palivo SFR s obohacením 20.0 wt% U-235. Pro každý typ paliva bylo kromě případu bez VA oceněno vyhořívání s obsahem tří VA kompenzující 25 % počátečního přebytku reaktivity (s přesností na dvě platné cifry podle kódu MCNP6) a pro vybrané VA s 50%, 75% a 100% kompenzací reaktivity. Případy umístění VA do pokrytí byly rovněž analyzovány. Grafické znázornění výpočetních modelů viz Obr. 4.8.

Jako vyhořívající absorbátory byly vybrány Am-241 jako zástupce minoritních aktinidů, B jako typický dobrý VA s malou atomovou hmotností a jeden kov vzácných zemin (Eu), které jsou často jako VA uvažovány. VA jsou uvažovány homogenně rozložené v palivovém souboru, proto je možné ocenit vyhořívání na jednodušším modelu palivové buňky (s výjimkou paliva CANDU se specifickou geometrií).

Model paliva CANDU vychází ze současného palivového souboru s 37 palivovými elementy, homogenizace skupin palivových proutků pro kód U_WB_1 má zanedbatelný vliv (0.00100) na koeficient násobení během vyhořívání. Palivo je umístěno v pokrytí ze slitiny Zircaloy-4 chlazené těžkou vodou s čistotou 99.11 wt% a hustotou 0.8179 g/cm^3 při teplotě 561 K. Palivový soubor je umístěn v tlakovodním kanálu ze slitiny Zr2.5Nb, která je tepelně-izolační vrstvou CO_2 oddělena od kanálu kalandrie ze slitiny Zircaloy-2 a těžkovodního moderátoru s čistotou 99.97 wt% a hustotou 1.08699 g/cm^3 při teplotě 339 K. Palivo je vyhoříváno na výkonu 32.908 MW/MTU do vyhoření 10000 MWd/MTU, charakteristického pro neobohacené palivo.

Model paliva VVER odpovídá současnému palivu typu VVER-1000 s trojúhelníkovou



(a) Homogenizovaný palivový soubor CANDU.

(b) Regulární mříž paliv VVER a SFR.

Obr. 4.8: Validace U_{WB1} – geometrie výpočetních modelů.

mříží. Palivo UO_2 je pokryto zirkoniovou slitinou E-110 a chlazeno lehkovodním moderátorem s typickou hustotou 0.7167 g/cm^3 a teplotou 578 K. Palivo s výkonem 40 MW/MTU je vyhoříváno do typického vyhoření 50000 MWd/MTU .

Model paliva SFR vychází z paliva ruského reaktoru BN-600, trojúhelníková mříž palivových proutků je obdobná palivu VVER. Palivo s obohacením 20 wt% je chlazeno sodíkem a pokryto nikl-chromovou ocelí ChS-68. Typický výkon paliva SFR je 130 MW/MTU , výpočetní vyhoření je 150000 MWd/MTU .

Srovnání průběhu koeficientu násobení v závislosti na vyhoření pro vybrané varianty paliv CANDU a VVER viz Obr. 4.10 a Obr. 4.11, rozdíly mezi kódy pro ostatní varianty jsou na obdobné úrovni s podobnými závislostmi během vyhořívání. Pro všechny analyzované varianty je srovnání koeficientu násobení na počátku vyhořívání shrnuto v Tab. 4.10.

Jako referenční kód, se kterým jsou ostatní kódy srovnávány, byl vybrán kód SERPENT. Kromě teoreticky nejvíce přesného popisu transportu neutronů metodou Monte Carlo byl kód SERPENT vybrán i z důvodu výrazně nižší výpočetní doby než u průmyslového standardu MCNP6. Kód SERPENT při srovnání několika výpočetních kódů pro těžkovodní palivo ve článku [A3] predikuje průběh koeficientu násobení během vyhořívání v oblasti střední hodnoty mezi použitými kódy, extrémních minimálních a maximálních hodnot u kódu SERPENT není dosahováno a proto lze kód pro výpočty vyhořívání označit jako referenční kód. Srovnání kódů MCNP a SERPENT ukazuje dobrou shodu obou kódů i pro další typy jaderných paliv pro širokou sadu proměnných v neutronově-fyzikálním výpočtu palivového souboru [88].

Vyhořívání paliva CANDU je charakterizováno dvěma efekty – počátečním transi-entem a plutoniovým píkem. V prvních hodinách vyhořívání jsou rychle akumulovány

krátkodobé štěpné produkty s vysokými absorpčními účinnými průřezy, které výrazně snižují reaktivitu paliva a zároveň přináší teplotní skok po vložení čerstvého paliva do aktivní zóny při kontinuálním způsobu zavážení paliva. Plutoniový pík je výsledkem použití přírodního uranu, dochází k výrazné tvorbě Pu-239 radiačním záchytem na U-238, který během prvního měsíce vyhořívání postupně zvyšuje reaktivitu až do bodu, kdy je efekt potlačen vlivem neustálé akumulace štěpných produktů.

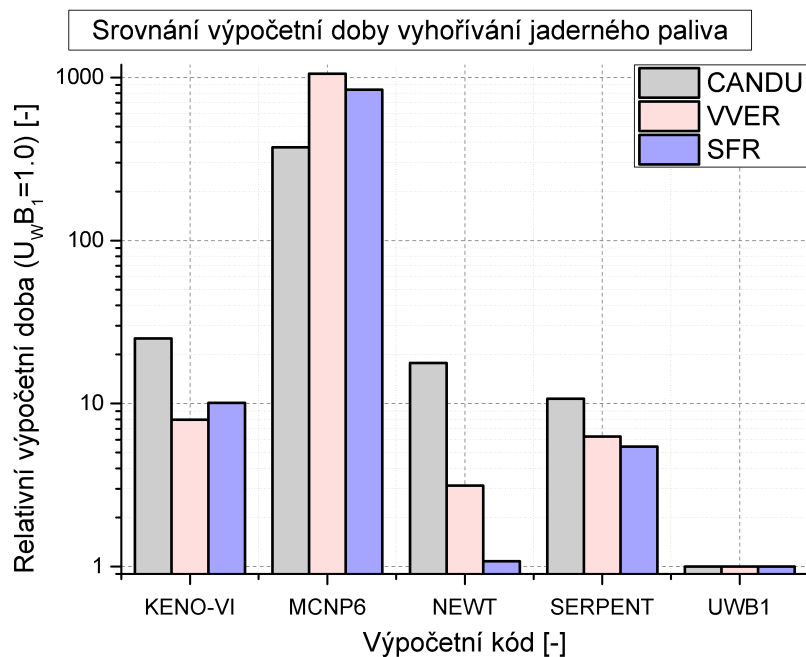
Kód $U_W B_1$ oba efekty vyhořívání paliva CANDU zachycuje, rozdíl v koeficientu násobení mezi referenčním kódem SERPENT a ostatními kódy je typicky na úrovni řádově 0.001, ale v některých bodech vyhořívání stoupá mírně nad 0.01. Pro kód $U_W B_1$ je důležité, že závislost rozdílu koeficientu násobení mezi $U_W B_1$ a referenčním kódem má stejný tvar pro palivo bez vyhořívajícího absorbátoru i pro palivo s různými VA. Protože v parametrické úloze výběru VA materiálu je podstatný vzájemný rozdíl reaktivity paliva s VA a paliva bez VA, jsou chyby kódu $U_W B_1$ akceptovatelné.

Vyhořívání paliv VVER a SFR je kódem $U_W B_1$ predikováno obdobným způsobem jako pro palivo CANDU, chyby mezi kódem $U_W B_1$ a referenčním kódem dosazují až 0.02 s málo výraznou závislostí na vyhoření a typu VA. Na rozdíl od paliva CANDU nedochází u obohaceného uranu k tvorbě plutoniového píku.

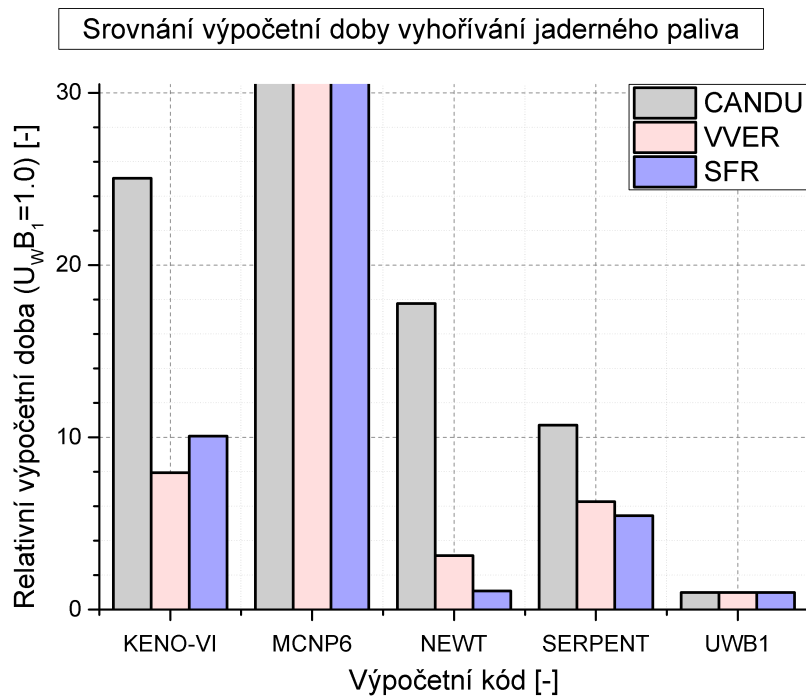
Střední hodnota rozdílu koeficientu násobení mezi kódy KENO-VI, NEWT, MCNP6 a SERPENT se pohybuje okolo 0.003, pro kód $U_W B_1$ je trojnásobná vůči kódu SERPENT a dvojnásobná vůči ostatním kódům.

Srovnání koncentrací všech 423 nuklidů z knihovny účinných průřezů ENDF/B-VII.1 bylo provedeno pro kódy $U_W B_1$, NEWT (deterministický kód) a SERPENT (statistický kód). Rozdíly ve vypočtených koncentracích nuklidů mohou být i několikanásobné, viz Obr. 4.12 pro vyhoření ve středu uvažované škály, vliv těchto nuklidů na reaktivitu paliva většinou není výrazný. Kód $U_W B_1$ predikuje koncentrace nuklidů s typickou přesností řádově desítky procent.

Při použití kódu $U_W B_1$ pro parametrickou úlohu výběru vyhořívajícího absorbátoru lze, za předpokladu následného ověření vybraných variant state-of-art kódem, akceptovat sníženou přesnost kódu. Výhodou kódu $U_W B_1$ je výrazně vyšší rychlost, která je graficky srovnána na Obr. 4.9. Kódy KENO-VI, NEWT a SERPENT vyžadují obdobný výpočetní čas, kód MCNP6 je cca o 1 řád pomalejší, kód $U_W B_1$ naopak o řád rychlejší. Rychlost výpočtu závisí výrazně na typu paliva, pro těžkovodní moderátor a palivo rychlých reaktorů je rychlost výpočtu vyhořívání několikanásobně nižší.

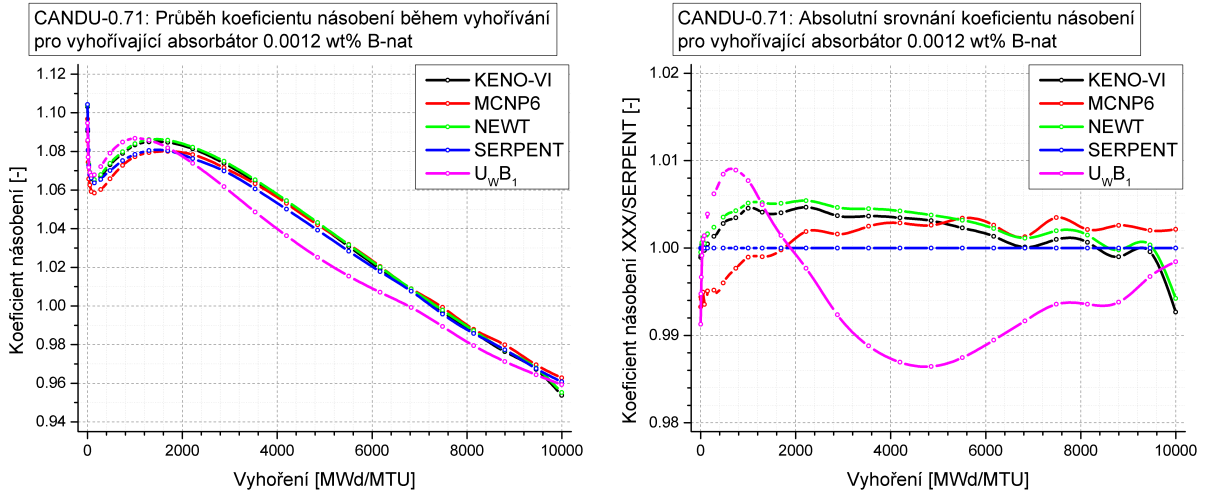


(a) Kompletní srovnání na logaritmické škále.

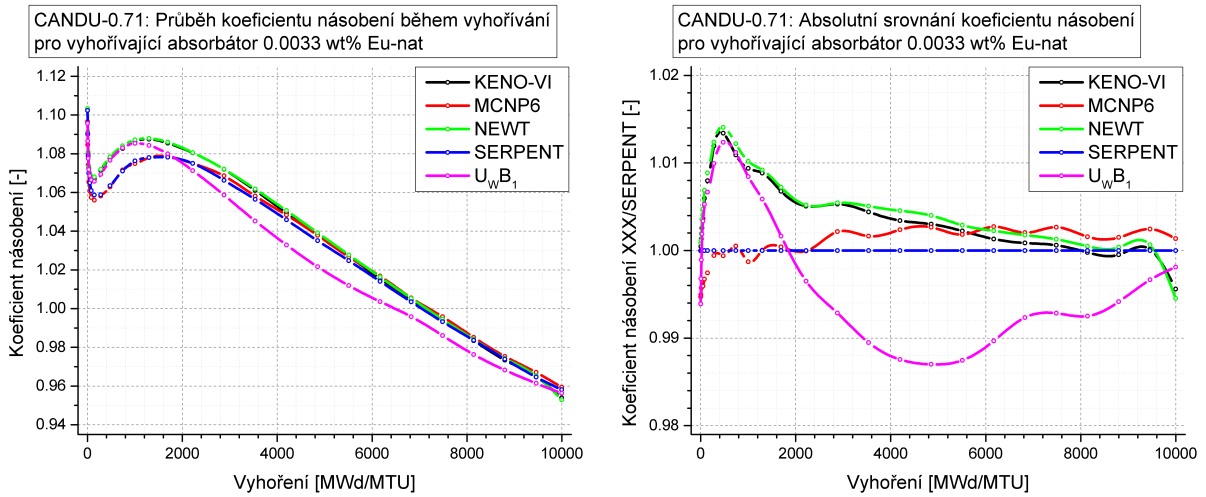


(b) Detail srovnání na lineární škále.

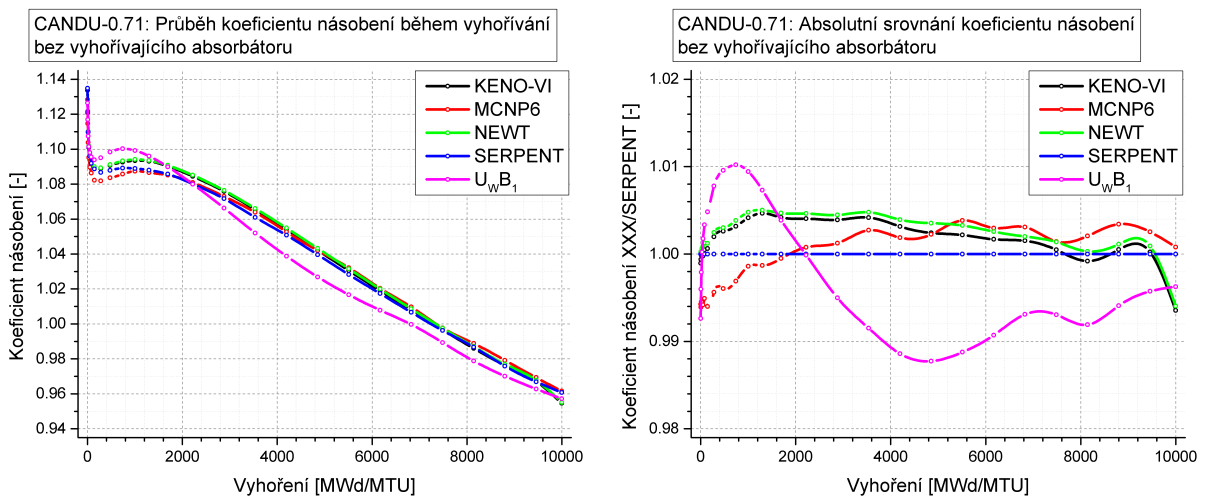
Obr. 4.9: Validace U_{WB1} – srovnání rychlosti kódů.



(a) Palivo s vyhořívajícím absorbátorem B-nat kompenzujícím 25 % reaktivity.

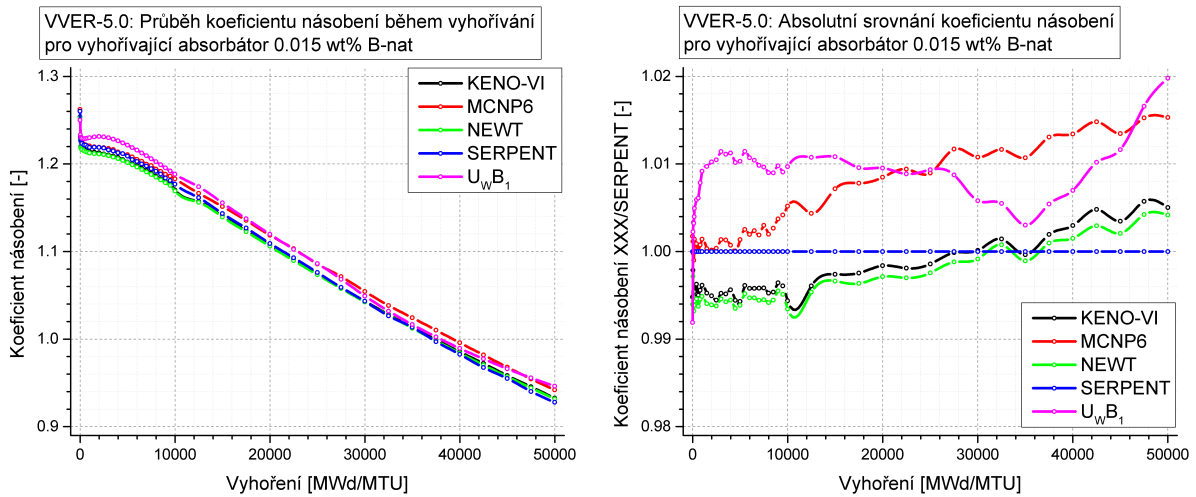


(b) Palivo s vyhořívajícím absorbátorem Eu-nat kompenzujícím 25 % reaktivity.

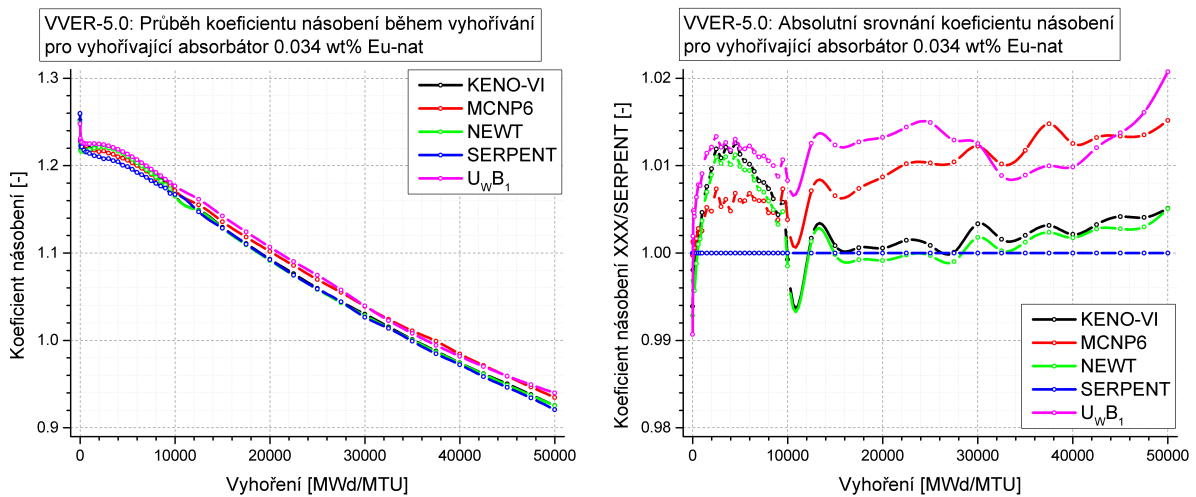


(c) Palivo bez vyhořívajícího absorbátoru.

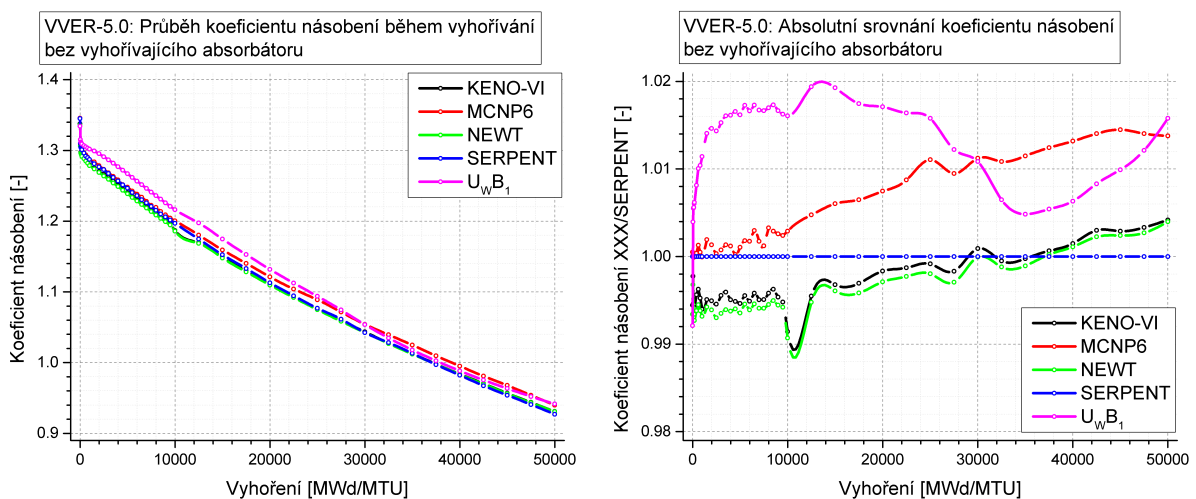
Obr. 4.10: Validace U_{WB_1} – koeficient násobení paliva CANDU.



(a) Palivo s vyhořívajícím absorbtóřem B-nat kompenzujícím 25 % reaktivity.



(b) Palivo s vyhořívajícím absorbtóřem Eu-nat kompenzujícím 25 % reaktivity.

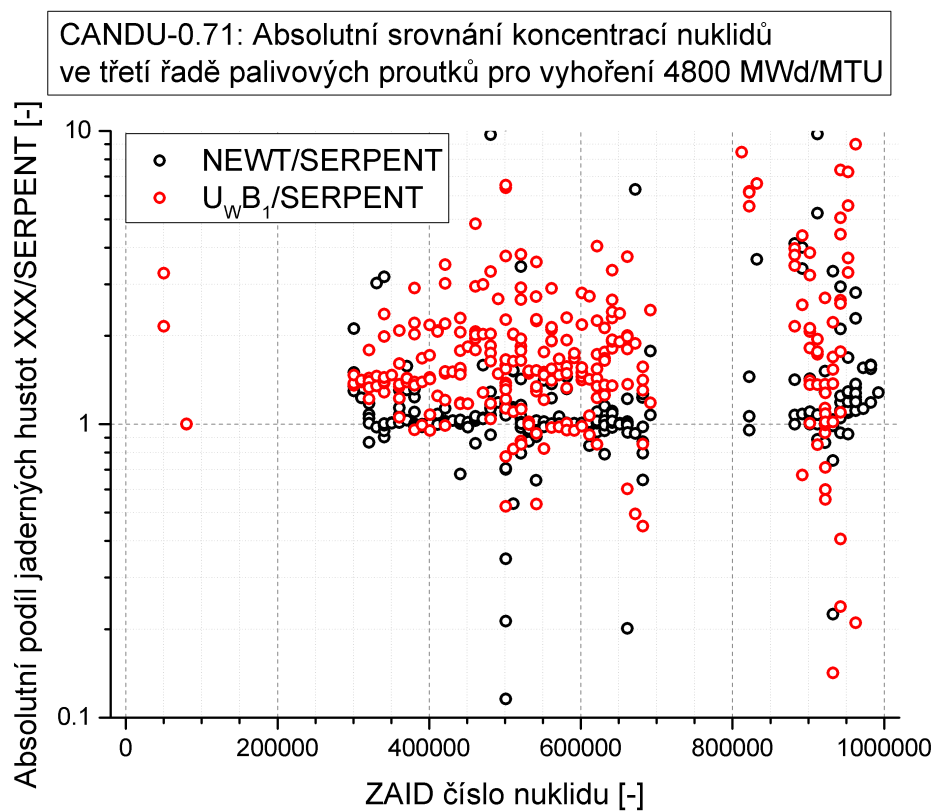


(c) Palivo bez vyhořívajícího absorbtóřů.

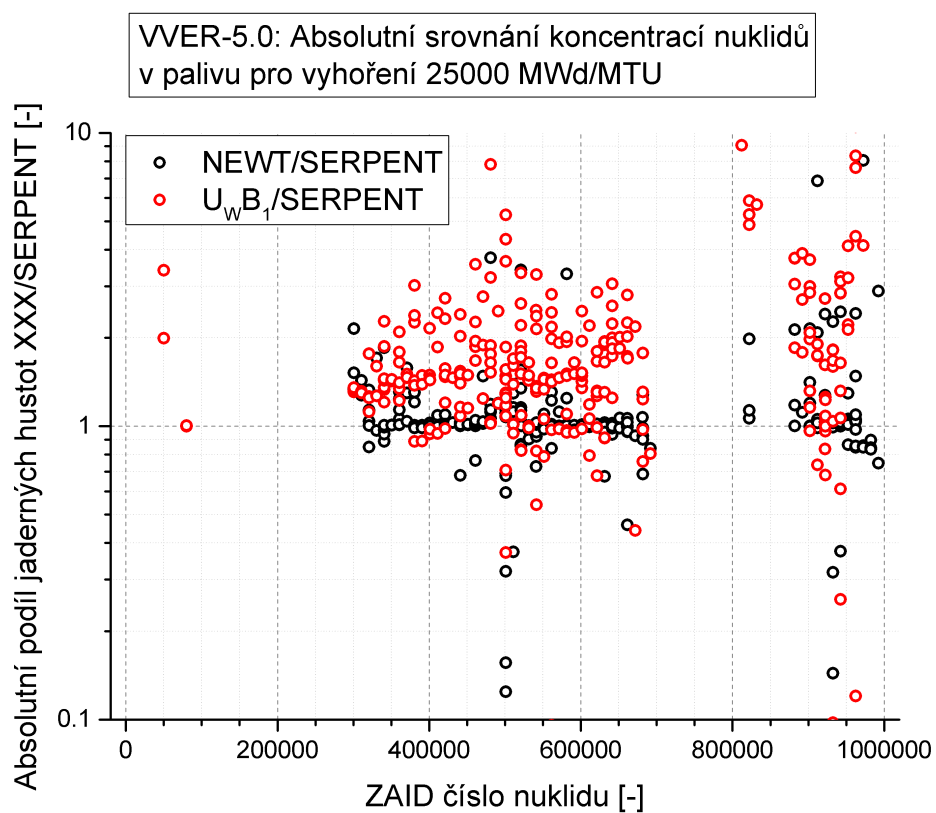
Obr. 4.11: Validace U_{WB1} – koeficient násobení paliva VVER.

Tab. 4.10: Validace U_{WB_1} – koeficient násobení čerstvého paliva.

Palivo	VA	Obsah VA [wt%]	Koeficient násobení [-]				U_{WB_1}
			KENO-VI	MCNP6	NEWT	SERPENT	
CANDU-0.71	Am-241	0.023	1.10569	1.09695	1.10674	1.10870	1.09571
CANDU-0.8	Am-241	0.034	1.14334	1.13216	1.14390	1.14608	1.13072
CANDU-1.0	Am-241	0.054	1.21237	1.19971	1.21364	1.21653	1.19780
CANDU-2.0	Am-241	0.14	1.39050	1.37179	1.39114	1.39352	1.36859
VVER-5.0	Am-241	0.15	1.25945	1.25740	1.25882	1.26767	1.24513
VVER-6.0	Am-241	0.18	1.28482	1.28179	1.28405	1.29253	1.26944
VVER-8.0	Am-241	0.23	1.32254	1.31784	1.32138	1.32835	1.30651
VVER-10.0	Am-241	0.29	1.34539	1.33939	1.34360	1.35146	1.32915
SFR-20.0	Am-241	4.7	1.27457	1.27184	1.27441	1.27221	1.26287
CANDU-0.71	B-nat	0.0012	1.10308	1.09682	1.10374	1.10427	1.09465
CANDU-0.8	B-nat	0.0018	1.13819	1.13304	1.13930	1.13948	1.13013
CANDU-1.0	B-nat	0.0029	1.20558	1.20023	1.20689	1.20552	1.19779
CANDU-2.0	B-nat	0.008	1.37637	1.37100	1.37747	1.37417	1.37019
VVER-5.0	B-nat	0.015	1.25359	1.26233	1.25255	1.26015	1.24992
VVER-6.0	B-nat	0.019	1.27796	1.28460	1.27665	1.28436	1.27356
VVER-8.0	B-nat	0.028	1.30753	1.31680	1.30694	1.31341	1.30481
VVER-10.0	B-nat	0.036	1.33261	1.33896	1.33129	1.33899	1.32933
SFR-20.0	B-nat	0.49	1.27386	1.27321	1.27428	1.27109	1.26463
CANDU-0.71	Eu-nat	0.0033	1.10235	1.09654	1.10333	1.10238	1.09566
CANDU-0.8	Eu-nat	0.0048	1.13848	1.13341	1.14002	1.13839	1.13221
CANDU-1.0	Eu-nat	0.0079	1.20517	1.20045	1.20653	1.20313	1.19808
CANDU-2.0	Eu-nat	0.022	1.37464	1.36826	1.37500	1.36776	1.36608
VVER-5.0	Eu-nat	0.034	1.25189	1.25928	1.25056	1.25958	1.24784
VVER-6.0	Eu-nat	0.042	1.27632	1.28253	1.27466	1.28216	1.27250
VVER-8.0	Eu-nat	0.058	1.30834	1.31627	1.30748	1.31450	1.30426
VVER-10.0	Eu-nat	0.074	1.33132	1.33746	1.33004	1.33696	1.32784
SFR-20.0	Eu-nat	1.5	1.27363	1.27284	1.27426	1.27184	1.26518
CANDU-0.71	—	0	1.13364	1.12833	1.13488	1.13484	1.12646
CANDU-0.8	—	0	1.18272	1.17679	1.18416	1.18291	1.17527
CANDU-1.0	—	0	1.27317	1.26559	1.27316	1.27196	1.26346
CANDU-2.0	—	0	1.50092	1.49431	1.50215	1.49680	1.49295
VVER-5.0	—	0	1.33749	1.34565	1.33608	1.34496	1.33435
VVER-6.0	—	0	1.36937	1.37629	1.36791	1.37697	1.36461
VVER-8.0	—	0	1.41321	1.42086	1.41141	1.42011	1.40741
VVER-10.0	—	0	1.44271	1.45027	1.44071	1.44930	1.43884
SFR-20.0	—	0	1.36415	1.36322	1.36442	1.35985	1.35383
VVER-5.0	Am-241 (pokrytí)	0.052	1.26243	1.26021	1.26089	1.27000	1.24621
VVER-5.0	B-nat (pokrytí)	0.11	1.25008	1.25801	1.24927	1.25792	1.24746
VVER-5.0	Eu-nat (pokrytí)	0.5	1.25446	1.26093	1.25310	1.26239	1.25061
VVER-5.0	Eu-nat	0.034	1.25189	1.25928	1.25056	1.25958	1.24784
VVER-5.0	Eu-nat	0.075	1.16500	1.17260	1.16382	1.17073	1.16147
VVER-5.0	Eu-nat	0.12	1.08712	1.09162	1.08432	1.09105	1.08153
VVER-5.0	Eu-nat	0.18	0.99847	1.00352	0.99731	1.00362	0.99474
Střední hodnota XXX/SERPENT			0.99739	0.99701	0.99715	1.00000	0.99113



(a) Palivo CANDU-0.71 v polovině vyhoření.



(b) Palivo VVER-5.0 v polovině vyhoření.

Obr. 4.12: Validace $U_W B_1$ – srovnání koncentrací nuklidů.

5

Přehled vlastních výsledků

Cílem výzkumu vyhořívajících absorbátorů je provedení výpočtů a analýz možných materiálů. První dva kroky výzkumu, vytvoření výpočetního aparátu a jeho validace, byly popsány v předchozí kapitole. Součástí této kapitoly je poslední krok – výpočty a analýzy materiálů použitelných jako vyhořívající absorbátory. Kapitola je rozdělena do dvou hlavních částí, kterými jsou parametrická studie rychlým kódem U_WB_1 a ověření vybraných variant referenčním kódem SERPENT. Na závěr jsou shrnuty hlavní výsledky výzkumu.

5.1 Parametrická studie rychlým kódem U_WB_1

Rychlým výpočetním kódem U_WB_1 byl proveden výpočet vyhořívání jaderných paliv CANDU, VVER a SFR pro různé varianty využití materiálů jako vyhořívajících absorbátorů s cílem porovnat průběh koeficientu násobení během vyhořívání a kvantitativně ocenit efekt různých materiálů jako vyhořívajících absorbátorů pomocí předem definované metriky.

5.1.1 Výpočetní varianty

Pro modely výpočetní studie byly zvoleny těžkovodní palivo CANDU, lehkovodní palivo VVER a palivo rychlého reaktoru typu SFR. Výsledky výpočtů pro palivo typu VVER lze kvalitativně přijmout i pro západní typy PWR, obdobně dobrý vyhořívající absorbátor pro rychlý reaktor chlazený sodíkem bude s mírnými modifikacemi vhodný i pro ostatní typy rychlých reaktorů.

Pro palivo CANDU a VVER bylo kromě očekávaného obohacení paliva, které je 0.71 wt% U-235 pro přírodní uran kanadského paliva a 5.0 wt% U-235 pro ruské palivo, uvažováno i zvýšení obohacení paliva. Zvolena byla síť obohacení 0.71, 0.8, 1.0 a 2.0 wt% U-235 pro CANDU a 5.0, 6.0, 8.0 a 10.0 wt % pro palivo VVER, spolu s obohacením rychlého reaktoru 20.0 wt% U-235 tak je téměř rovnoměrně pokryta celá oblast legislativně povoleného 20% obohacení uranu pro energetické reaktory LEU.

Celkem 9 variant paliva je definováno na 3 typech geometrií, vzájemné rozdíly mezi palivy stejného typu geometrie nebyly uvažovány, tj. např. výkon paliva CANDU bez ohledu na obohacení byl uvažován 32.908 MW/MTU, obdobně 40 MW/MTU pro palivo VVER, pro které byla uvažována typická střední koncentrace bóru v chladivu 600 ppm pro všechny počítané varianty. Detailní geometrie paliv, shodná s geometrií v kapitole validace U_{WB1} , je v souladu se současně provozovanými palivy CANDU s 37 elementy a palivy VVER typu VVER-1000.

Vyhořívání paliva CANDU bylo počítáno do vyhoření 21000 MWd/MTU, paliva VVER do vyhoření 50000 MWd/MTU a paliva SFR do vyhoření 150000 MWd/MTU tak, aby byl pokryt interval vyhoření, ve kterém má VA vliv. Počet kroků vyhořívání byl volen 43, 44 a 75 s jemnějším dělením na počátku vyhořívání pro zachycení výraznějších změn. Na počátku vyhořívání paliv VVER a SFR jsou voleny kroky 40 MWd/MTU, poté 200 MWd/MTU a přes 1000 MWd/MTU na maximální krok 2500 MWd/MTU pro vyhoření nad 10000 MWd/MTU. V případě paliva CANDU jsou kroky vyhoření voleny třikrát jemněji.

Vyšší obohacení paliva má vliv na vyšší požadavek počáteční kompenzace reaktivity, nutný obsah VA je vyšší a některé materiály nemají dostatečné absorpční schopnosti, aby bylo možné dosáhnout zvolenou úroveň počáteční kompenzace reaktivity i při velmi vysokém váhovém podílu VA. Jako hranice váhového podílu VA byla zvolena hodnota 50 wt%, materiály vyžadující vysoký obsah v palivu se nechovají jako vhodné VA a volba maximálního podílu VA na výsledky analýz nemá vliv.

Vyšší obohacení paliva CANDU a VVER přináší požadavek na nové materiály VA, protože stávající materiály jsou na hranici svých možností. V palivu CANDU se v současnosti žádný VA nepoužívá a nové návrhy počítají s dvojicí prvků Gd+Eu [33], které lze, na rozdíl od lehkovodních paliv, použít homogenně ve všech palivových proutcích. V palivu VVER se rovněž používá Gd jako VA, který je ale nutné použít heterogenně pouze v několika palivových proutcích, čímž se deformuje nevyrovnání výkonu v palivu. Současný obsah VA až 8.0 wt% Gd_2O_3 už má nezanedbatelný vliv na termomechanické vlastnosti paliva $UO_2-Gd_2O_3$ a nelze jej zvyšovat, navíc je vyhořívání Gd příliš rychlé.

Prostorové umístění VA bylo uvažováno homogenně v palivu a homogenně v pokrytí. Heterogenní rozložení pouze ve vybraných proutcích palivového souboru nebylo uvažováno. Důvodem je kromě problémů se současným heterogenním umístěním VA cíl parametrické studie, kterým je poskytnout srovnání materiálů jako VA ve formě využitelné i pro další analýzy návrhu designu paliva. Mezi těmito analýzami mohou být například příměsi pro zvýšení tepelné vodivosti, příměsi pro snížení velikosti zrn ozářeného keramického paliva, příměsi pro zlepšení vlastností interakce palivo-pokrytí při havarijních situacích apod. Tyto analýzy vychází z předpokladu, že daný materiál bude přítomen ve všech proutcích paliva.

Velikost počáteční kompenzace byla v parametrické úloze zvolena pro tři úrovně – kompenzace 25 % počátečního přebytku reaktivity, kompenzace 50 % počátečního pře-

bytku reaktivity a kompenzace při použití 1.0 wt% VA (varianty jsou v legendách obrázků označeny jako rc25, rc50 a wt01). První varianta byla zvolena na základě předpokládaného snížení počátečního přebytku reaktivity pro současná paliva CANDU a VVER – kompenzace 25% počátečního přebytku reaktivity snižuje koeficient násobení na hodnoty po odeznění počátečního transientu paliva CANDU a rovněž představuje obvyklé snížení reaktivity pro palivo VVER, které je vzhledem ke kampaňovému způsobu zavážení méně citlivé na přesnou volbu počáteční kompenzace. Poslední varianta přidání 1.0 wt% VA byla zvolena pro srovnání prvků a nuklidů s malými absorpčními schopnostmi, které sníží reaktivitu méně než o 25 % počátečního přebytku.

Materiály jako vyhořívající absorbátory byly voleny ze všech v přírodě se vyskytujících prvků a všech nuklidů v knihovně jaderných dat ENDF/B-VII.1, celkem 84 prvků $1 \leq Z \leq 92$ s výjimkou radioaktivních prvků 43, 61 a 84-89 a 423 nuklidů od H-1 až po Fm-255.

Parametrická úloha byla navržena a provedena ve 4 fázích:

1. Určení obsahu VA pro kompenzaci 25 % a 50 % počátečního přebytku reaktivity na základě výpočtů kritičnosti pro všechna uvažovaná paliva, umístění VA (palivo, pokrytí), všechny prvky a nuklidy (celkový počet 273780 variant).
2. Výpočet vyhořívání pro varianty z fáze 1, kde je obsah VA pod 50 %, a pro varianty s pevným obsahem 1.0 wt% VA. Celkový počet variant 16035 byl mezi jednotlivými palivy rozdělen podle Tab. 5.1. Obecně platí, že s vyšším obohacením a přemístěním VA z regionu paliva do pokrytí se počet přípustných variant snižuje.
3. Opakování fáze 1 pro kompenzaci 50 % za předpokladu využití dvojice prvků. Váhový podíl prvního prvku z varianty 25% kompenzace fáze 1 je doplněn určením váhového podílu druhého prvku tak, aby celková kompenzace počáteční reaktivity byla 50 %. Uvažovány pouze varianty palivo-palivo a pokrytí-pokrytí. Na matici atomových čísel Z_{ij} byly uvažovány pouze varianty $i < j$ pro odstranění duplicit. Celkový počet 283125 variant.
4. Výpočet vyhořívání dvojice prvků pro 50 % počátečního přebytku reaktivity. Celkový počet variant 18875, pro jednotlivá paliva viz Tab. 5.2.

Celkově tedy bylo srovnáno 591815 variant, což je ojedinělé. Celý výpočet s využitím rychlosti U_{WB_1} zabral jen 10978 hodin na počítači s procesorem Intel Core i7-3630QM.

5.1.2 Absorpční schopnosti materiálů

Výpočty provedené pro kompenzaci reaktivity odpovídající obsahu 1.0 wt% vyhořívajícího absorbátoru byly provedeny s cílem porovnat i málo účinné absorbátory. Absorpční vlastnosti materiálů a potenciál jejich využití jako vyhořívajících absorbátorů lze ocenit právě schopností kompenzace reaktivity při jejich malém množství jako příměsi v palivu.

Tab. 5.1: Počet výpočetních variant fáze 2 parametrické úlohy vyhořívání paliva.

Palivo	Typ VA	Kompenzace 25 % ρ		Kompenzace 50 % ρ		1.0 wt% VA	
		palivo	pokrytí	palivo	pokrytí	palivo	pokrytí
CANDU-0.71	prvek	77	55	53	29	84	84
CANDU-0.8	prvek	75	54	42	25	84	84
CANDU-1.0	prvek	64	41	39	21	84	84
CANDU-2.0	prvek	45	25	23	9	84	84
VVER-5.0	prvek	47	34	27	22	84	84
VVER-6.0	prvek	41	33	22	11	84	84
VVER-8.0	prvek	38	27	21	16	84	84
VVER-10.0	prvek	36	25	20	13	84	84
SFR-20.0	prvek	49	20	12	5	84	84
CANDU-0.71	nuklid	375	260	269	148	423	423
CANDU-0.8	nuklid	356	235	201	115	423	423
CANDU-1.0	nuklid	293	168	173	84	423	423
CANDU-2.0	nuklid	197	100	120	55	423	423
VVER-5.0	nuklid	241	161	138	84	423	423
VVER-6.0	nuklid	210	146	123	77	423	423
VVER-8.0	nuklid	198	134	105	71	423	423
VVER-10.0	nuklid	175	125	98	60	423	423
SFR-20.0	nuklid	210	94	79	35	423	423

Bez podrobnější analýzy, jak rychle absorbátor vyhořívá, lze absorpční schopnosti ocenit účinným průřezem pro absorpci.

Efektivní účinný průřez pro absorpci prvků, středovaný pro daný typ paliva podle energetické závislosti hustoty toku neutronů, je pro paliva CANDU-0.71, VVER-5.0 a SFR-20.0 porovnán na Obr. 5.1, Obr. 5.2 a Obr. 5.3. V grafech jsou dále srovnány jaderné hustoty a makroskopické účinné průřezy (součin účinného průřezu a jaderné hustoty) všech prvků a je oceněna míra podílu nuklidu s nejvyšším efektivním (mikroskopickým) účinným průřezem na makroskopickém účinném průřezu.

Jaderná hustota lehkých materiálů, typicky Li a B, je vlivem jejich nižší molární hmotnosti pro daný hmotnostní podíl VA v palivu výrazně vyšší, proto jsou tyto materiály i při nižších efektivních účinných průřezích dobrými absorbátory, protože v transportní rovnici vystupují makroskopické účinné průřezy. Vysokých makroskopických účinných průřezů dosahují středně těžké prvky, typicky prvky vzácných zemin. Obohacení a použití moderátoru má vliv na schopnosti absorpce, většina materiálů má výrazně vyšší tepelné účinné průřezy, proto jsou pro palivo SFR efektivní účinné průřezy cca o řád nižší, rozdíly mezi palivy CANDU a VVER jsou nižší.

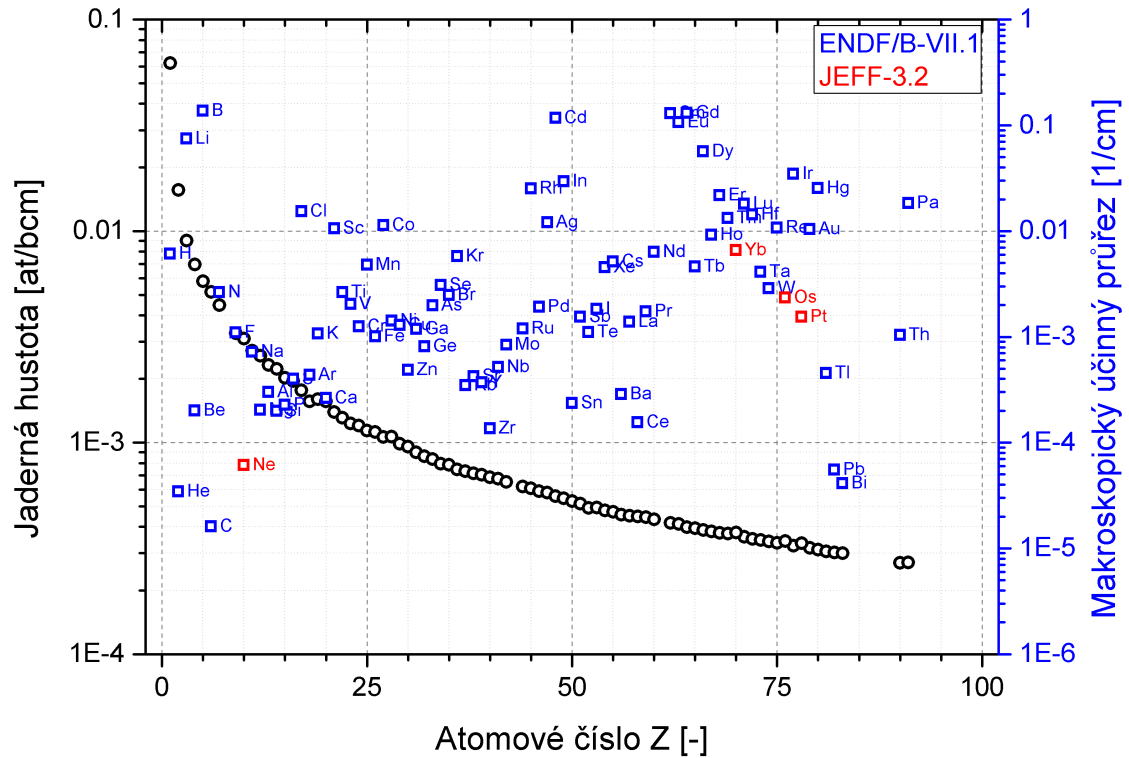
Přítomnost nuklidu s vysokým absorpčním účinným průřezem má pro prvek s přírodním složením různý vliv na celkový makroskopický účinný průřez. Například nuklidy He-3, Li-6 a Cd-113 tvoří více než 99 % veškeré absorpční schopnosti svého prvku, ale jejich

Tab. 5.2: Počet výpočetních variant fáze 4 parametrické úlohy vyhořívání paliva.

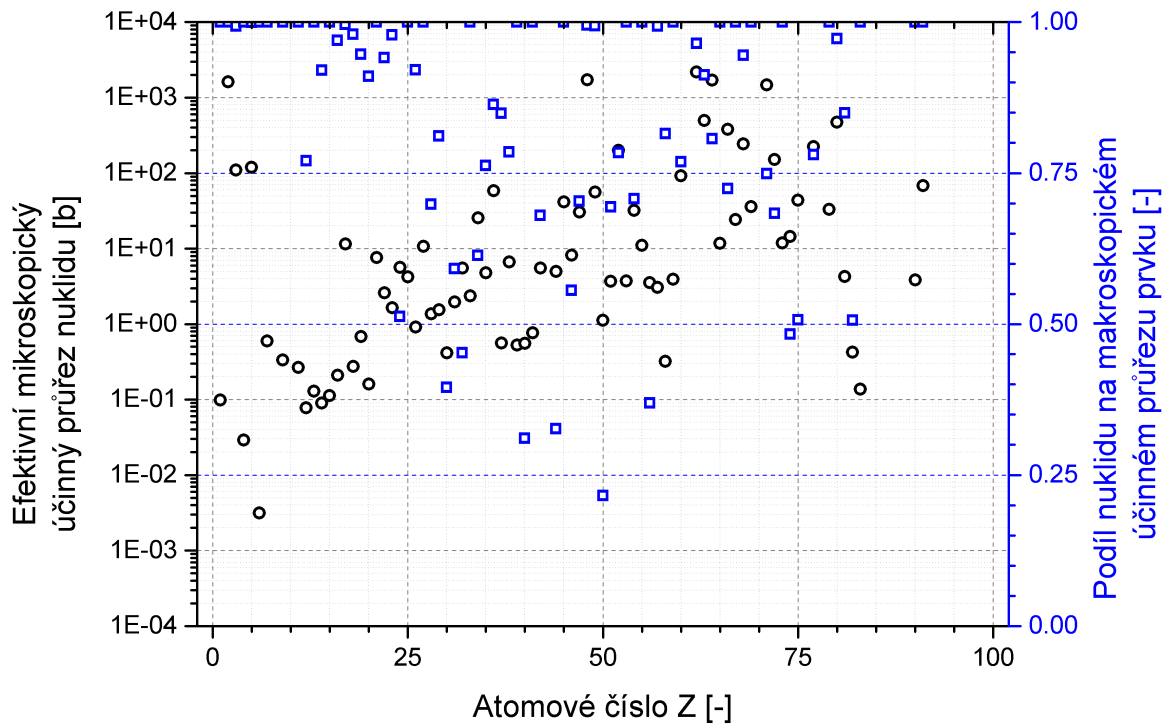
Palivo	VA v palivu	VA v pokrytí
CANDU-0.71	1483	2926
CANDU-0.8	1405	2775
CANDU-1.0	762	2016
CANDU-2.0	282	989
VVER-5.0	550	1081
VVER-6.0	482	820
VVER-8.0	350	703
VVER-10.0	290	630
SFR-20.0	155	1176

podíl v přírodě je pouze 1.4E-4, 7.6 a 12.2 at%. Pro tyto prvky je případné obohacení absorpčních nuklidů velmi dobrou cestou ke zvýšení jejich efektivity. Nižší efektivita obohacení, i když stále výhodná, je pro B-10 a Gd-157 s přírodním obsahem 19.8 a 15.6 at% a podílem na makroskopickém účinném průřezu 99.9 a 80.7 %.

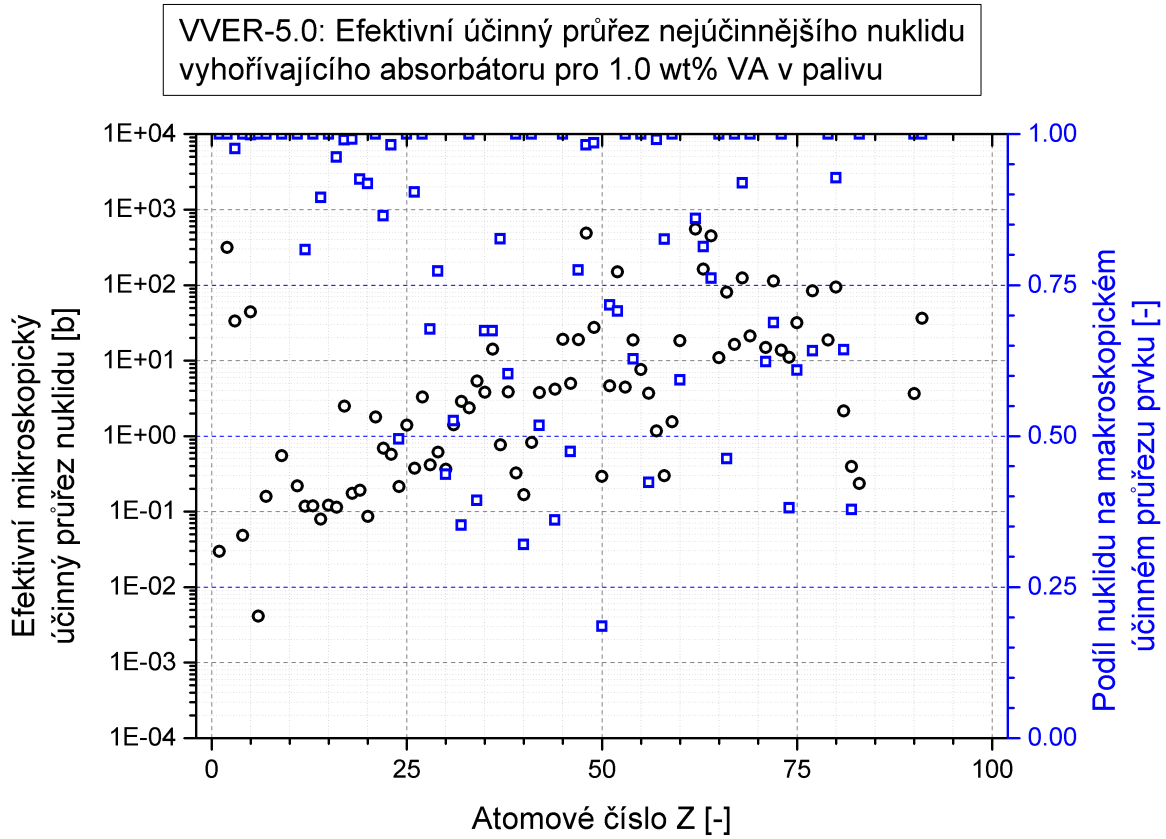
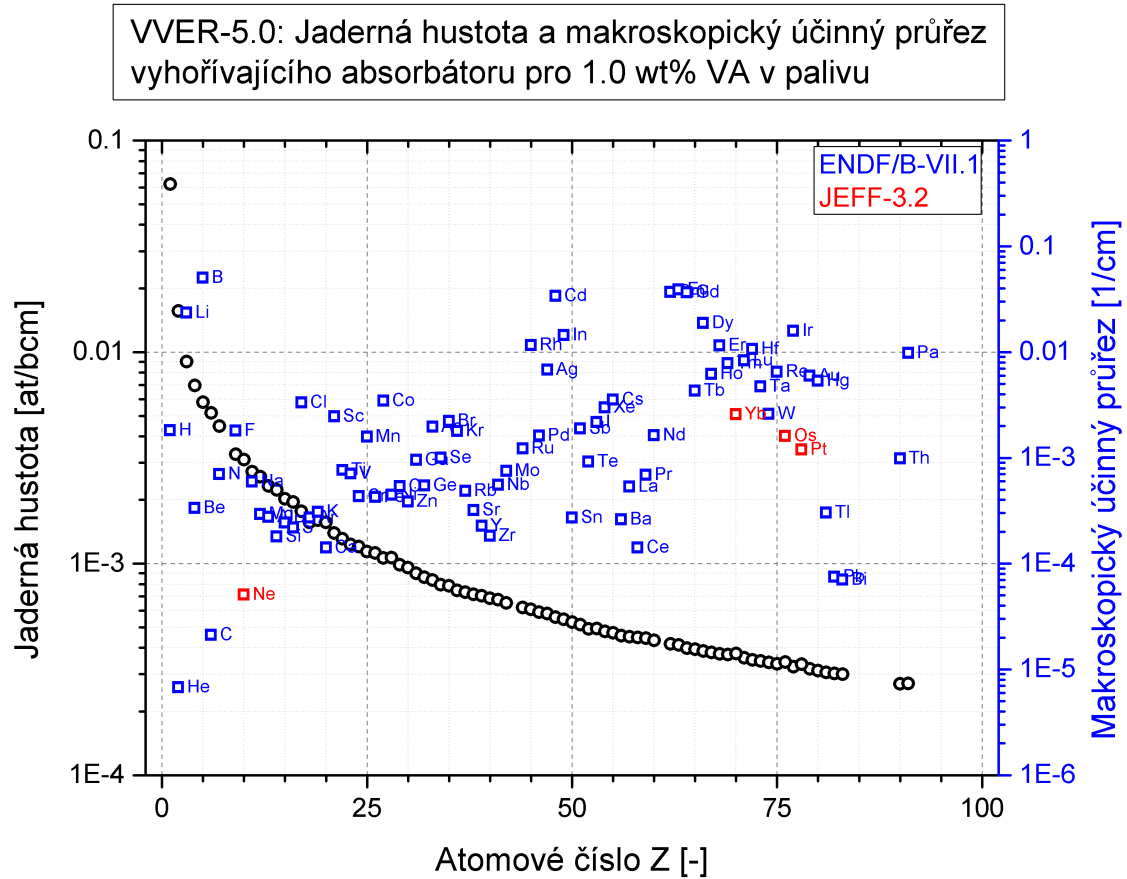
CANDU-0.71: Jaderná hustota a makroskopický účinný průřez vyhořívajícího absorbátoru pro 1.0 wt% VA v palivu



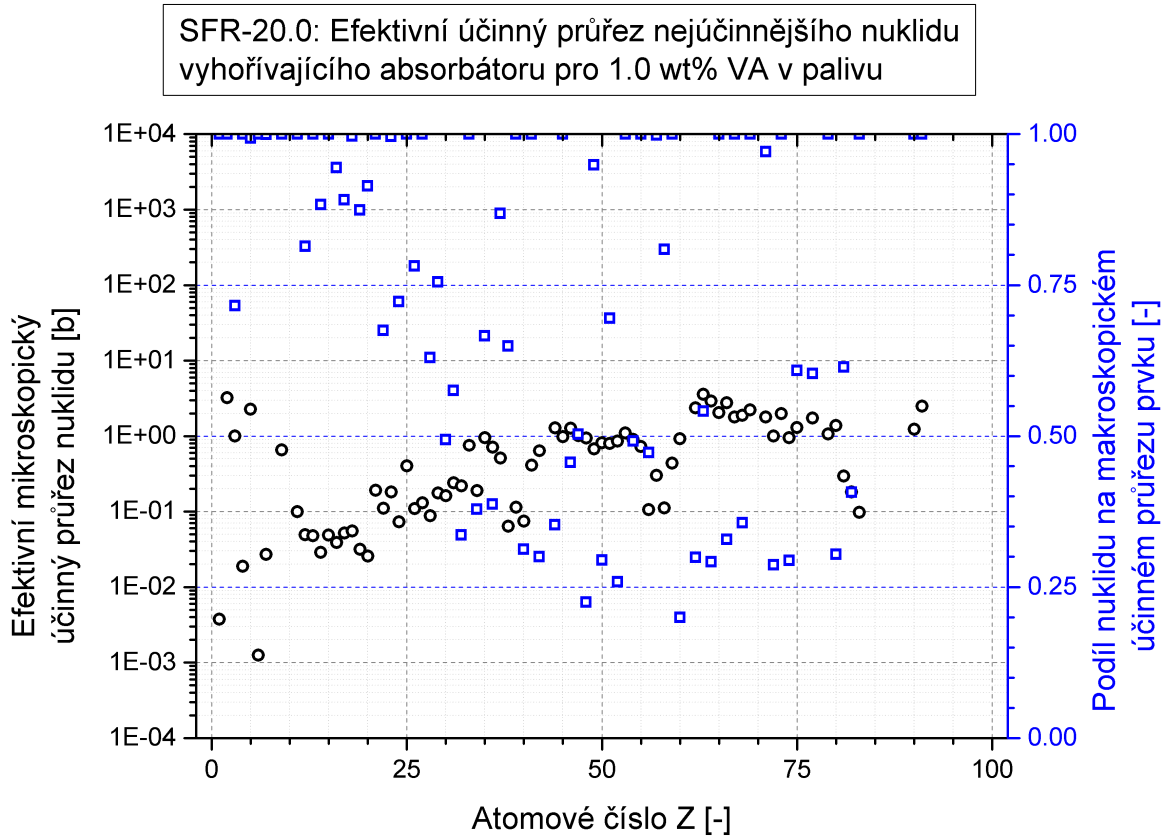
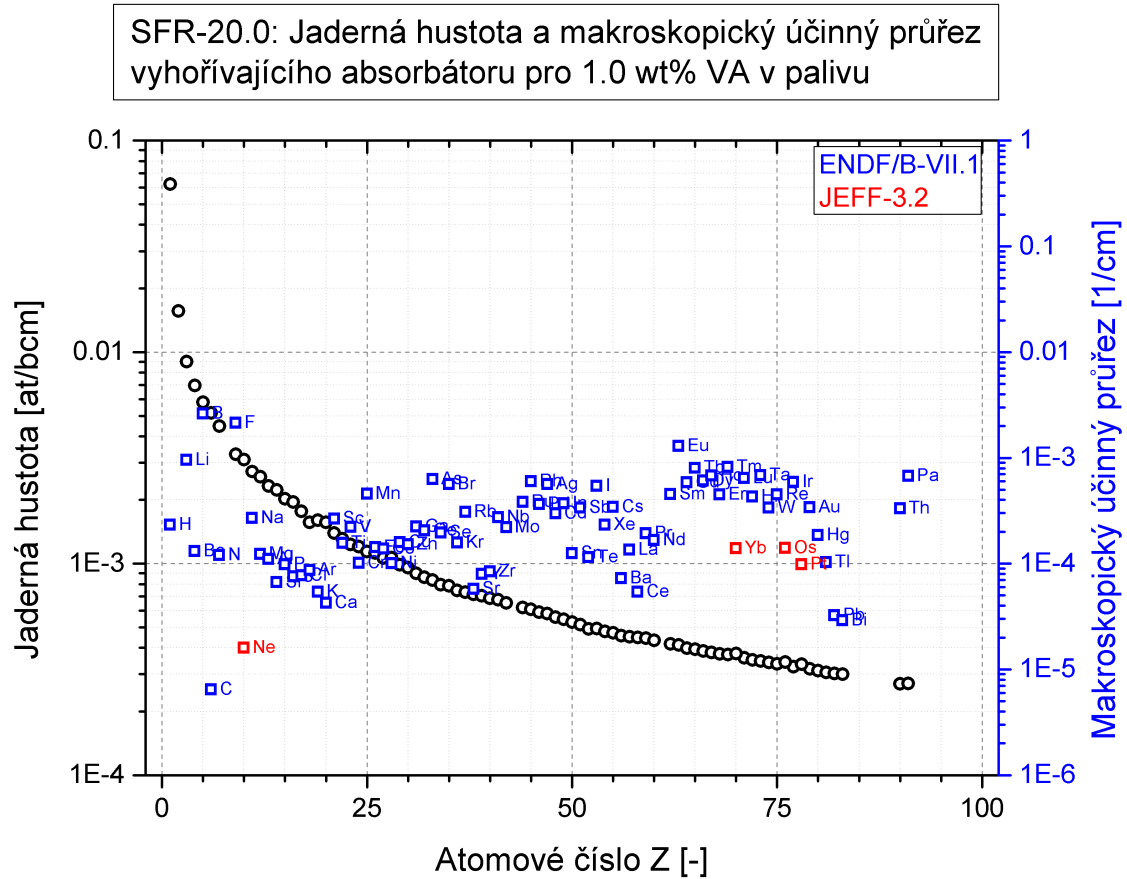
CANDU-0.71: Efektivní účinný průřez nejúčinnějšího nuklidu vyhořívajícího absorbátoru pro 1.0 wt% VA v palivu



Obr. 5.1: CANDU – vlastnosti prvků jako vyhořívajících absorbátorů při obsahu 1.0 wt%.



Obr. 5.2: VVER – vlastnosti prvků jako vyhořívajících absorbátorů při obsahu 1.0 wt%.



Obr. 5.3: SFR – vlastnosti prvků jako vyhořívajících absorbátorů při obsahu 1.0 wt%.

5.1.3 Materiálová metrika MM6

Vyhořívající absorbátory ovlivňují vyhořívání paliva v celém jeho průběhu, pro kvantitativní ocenění vlivu VA byl zvolen přístup přes inženýrskou metriku. Na základě analýzy výpočtů a v návaznosti na dříve prezentované metriky, např. [A9], byla navržena 6parametrická materiálová metrika MM6. Ideální vyhořívající absorbátor maximalizuje hodnotu metriky. Na rozdíl od jednoparametrických metrik umožňuje víceparametrická metrika srovnání VA podle více na sobě nezávislých vlastností, důležité jsou především schopnost absorpce VA a schopnost vyhořívát rychleji než samotné palivo. Nezávislost parametrů byla analyzována grafickým srovnáním a statistickými testy pro 15 různých parametrů, z nichž bylo vybráno 6 nezávislých parametrů pro metriku MM6.

Cílem 6parametrické metriky je srovnat materiály na základě 6 vybraných vlastností, které byly vybrány tak, aby nebyly ve vzájemné korelaci. Každá z vlastností je popsána parametrem p_i následovně:

- Počáteční kompenzace reaktivity. V případě variant předem zvolené kompenzace nemá vliv, projeví se pro varianty s obsahem 1.0 wt% VA. Požadovanou vlastností VA je co nejvyšší kompenzace reaktivity. Pro koeficient násobení čerstvého paliva bez VA (k_0) a s VA ($k_{0,VA}$) je parametr určen vztahem

$$p_1 = k_{0,VA} - k_0 \quad (5.1)$$

- Zbytková otrava. V průběhu vyhořívání se reaktivita vázaná VA snižuje a pro ideální VA je reaktivita na konci vyhořívání shodná jako v případě paliva bez VA. Požadována je minimalizace zbytkové otravy, jejíž vliv se dá alternativně ocenit snížením vyhoření při použití VA. Pro maximální uvažované vyhoření B_{max} je parametr určen vztahem

$$p_2 = k_{B_{max}} - k_{B_{max},VA} \quad (5.2)$$

- Vzdálenost křivek reaktivity paliva s VA a bez VA. Vzdálenost vyčíslena jako plocha vyhoření mezi koeficientem násobení obou variant. Za předpokladů parametrické úlohy, že se srovnávají varianty s pevně danou počáteční kompenzací reaktivity a zvýšení reaktivity při přidání VA nezvyšuje reaktivitu paliva při jeho vyhořívání, je požadována minimalizace vzdálenosti obou křivek, která zaručí, že reaktivita paliva se bude snižovat co nejnižší rychlostí. Parametr je dán vztahem

$$p_3 = \int_0^{B_{max}} k_{VA} dB - \int_0^{B_{max}} k dB \quad (5.3)$$

- Plocha nadkritičnosti během vyhořívání. Obdobně jako předchozí parametr je integrováno vyhoření s koeficientem násobení, pro parametr p_4 je integrována pouze

nadkritická část a není prováděn rozdíl mezi palivem s VA a bez VA. Ideální VA maximalizuje plochu nadkritičnosti, aby zároveň maximalizoval vyhoření při dosažení $k = 1$ a zaručoval minimální rychlost vyhořívání.

$$p_4 = \int_0^{Bmax} k_{VA} dB \Big|_{k>1} \quad (5.4)$$

- Rychlost vyhořívání VA. Ideální VA vyhořívá konstantní rychlostí s nulovou zbytkovou otravou. Nejvhodnější způsob, jak ocenit rychlost vyhořívání VA pro typické průběhy vyhořívání uvažovaných paliv, je porovnání reaktivity vázané VA ve zvoleném bodě vyhoření s počáteční reaktivitou vázanou VA. Zvolena byla čtvrtina vyhoření s cílem minimalizovat vzdálenost od 50 % reaktivity vázané VA, kdy při konstantní rychlosti vyhořívání VA bude ideální VA ovlivňovat reaktivitu paliva až do poloviny jeho vyhoření. Parametr p_5 je podle zmíněné úvahy dán vztahem

$$p_5 = \left| \frac{k_{0.25Bmax} - k_{0.25Bmax,VA}}{k_0 - k_{0,VA}} - 0.5 \right| \quad (5.5)$$

- Zvýšení reaktivity paliva s VA během vyhořívání. Cílem parametru je penalizovat nežádoucí chování, kdy v případě použití VA v první části vyhoření dochází k růstu reaktivity. V případě homogenního umístění VA k tomuto jevu většinou nedochází, pokud ano, je efekt oceněn minimalizací hodnoty vyhoření v době dosažení maximálního koeficientu násobení $kmax$ podle vztahu

$$p_6 = B \Big|_{k=kmax} \quad (5.6)$$

Parametry metriky MM6 jsou graficky znázorněny na Obr. 5.4. Metrika MM6 je definována jako součet relativních hodnot parametrů p_i podle vztahu

$$MM6 = \sum_{i=1}^6 w_i \left(m_i - n_i \frac{p_i - p_{i,min}}{p_{i,max} - p_{i,min}} \right) \quad (5.7)$$

kde w_i je relativní váha parametru p_i , $p_{i,min}$ a $p_{i,max}$ slouží k převodu absolutní hodnoty parametru p_i na relativní hodnotu a celočíselné koeficienty m_i a n_i ovlivňují minimalizaci nebo maximalizaci parametru p_i .

Parametry m_i a n_i jsou pro maximalizaci parametrů p_i voleny (0;-1), pro jeho minimalizaci platí (1,1). Po započtení záporných tvarů parametrů p_1 a p_3 při požadavku maximalizace parametrů p_3 a p_4 a minimalizaci ostatních parametrů jsou požadované hodnoty shrnuty v Tab. 5.3.

Váhy w_i byly určeny na základě srovnání závislosti reaktivity vázané VA ve čtvrtině vyhoření a zbytkové otravy podle Obr. 5.5. Ideální VA s maximalizací prvního a minimalizací druhého parametru je umístěn v loketním bodě v grafu s minimalizací absolutní hodnoty druhé derivace. Pro tento VA byly určeny relativní parametry p_i a zvoleny váhy w_i tak, aby pro tento VA mělo všech 6 parametrů stejnou váhu při ocenění metriky MM6.

Tab. 5.3: Doplnkové parametry vzorce metriky MM6.

i	w_i	m_i	n_i
1	0.08	1	1
1	0.33	1	1
1	0.08	0	-1
1	0.20	0	-1
1	0.24	1	1
1	0.06	0	1

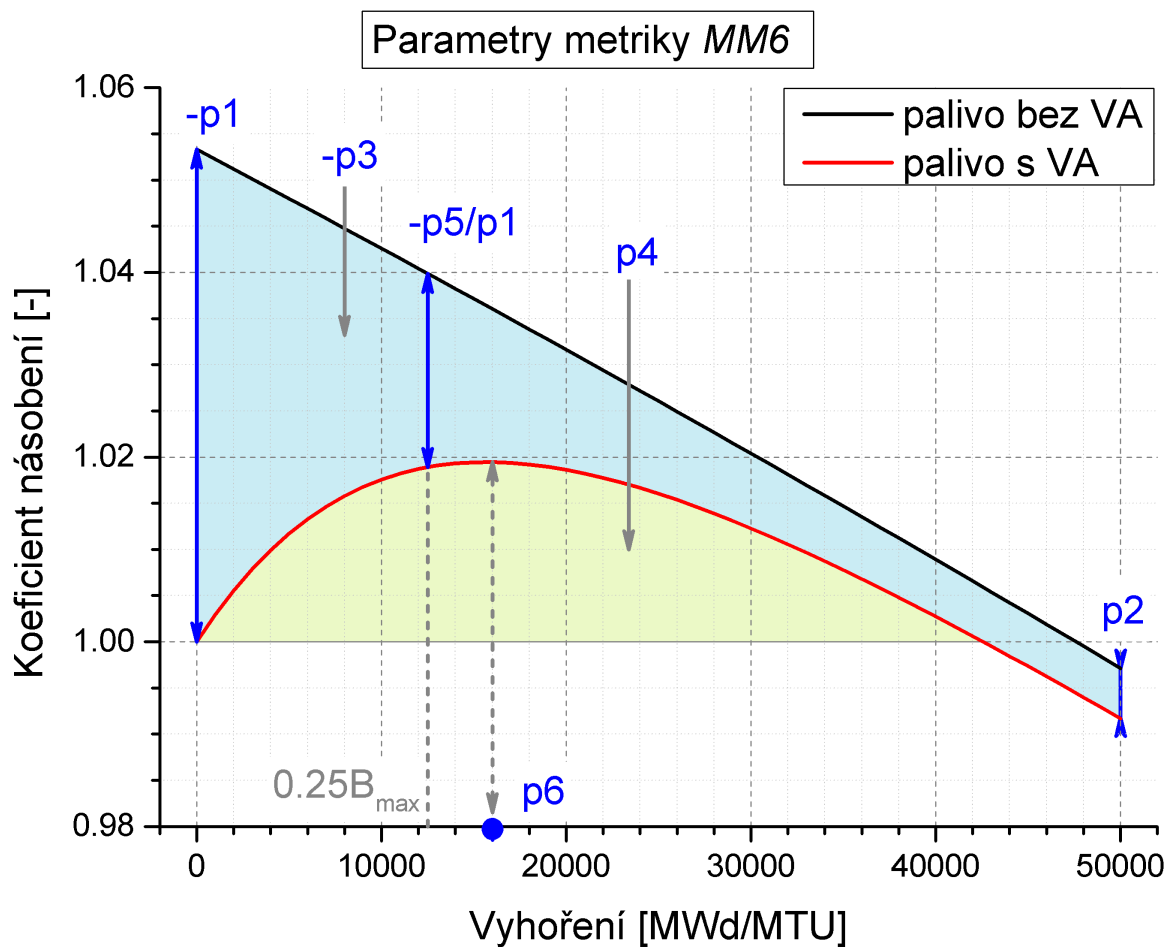
Extrémní hodnoty relativních parametrů p_i byly sníženy logaritmickou funkcí. Pro relativní parametr p_i (označeno pro zjednodušení c_i) pak platí

$$\begin{aligned}
 c_i < 0 : c_i &\rightarrow -\ln(1 + |c_i|) \\
 0 < c_i < 1 : c_i &\rightarrow c_i \\
 c_i > 1 : c_i &\rightarrow 1 + \ln(c_i)
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

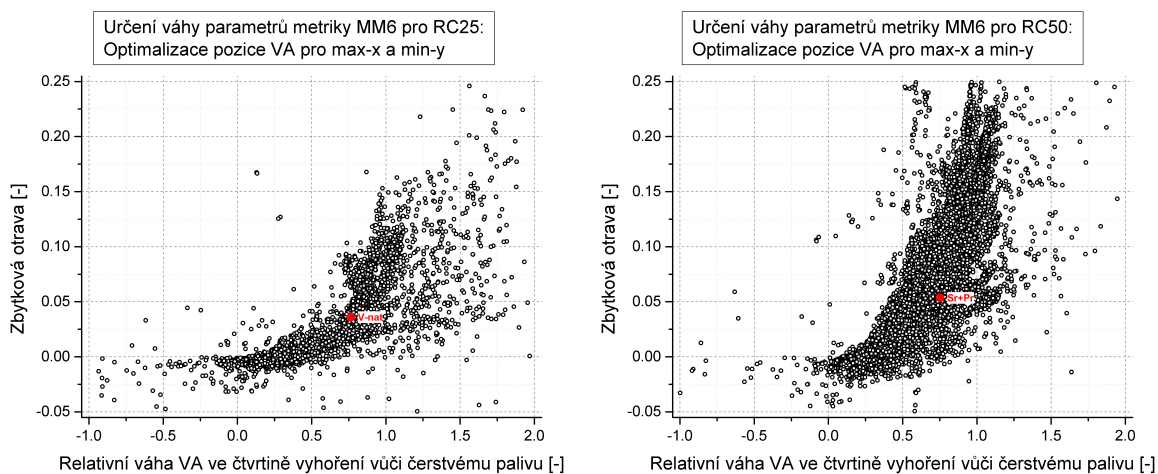
Hodnoty parametrů p_2 až p_5 , které ovlivňují celkovou hodnotu metriky MM6, jsou pro vybrané varianty (paliva CANDU-0.71 a VVER-5.0, VA v palivu, kompenzace 25 % počáteční reaktivity) srovnány na Obr. 5.6. Ze srovnání je patrné, že jako vyhořívající absorbátory lze ve všech parametrech identifikovat materiály Li, B, vzácné zeminy, Th a Pa.

Srovnání výsledných hodnot materiálové metriky MM6 pro paliva CANDU a VVER při kompenzaci 25 % a 50 % počáteční reaktivity při umístění VA v palivu jsou pro prvky znázorněny na Obr. 5.7 a Obr. 5.8. Umístění VA v pokrytí vede k nižší efektivitě, ale stejným kvalitativním výsledkům jako pro zobrazené varianty. Metrika MM6 pro palivo CANDU dosahuje vyšších hodnot než pro palivo VVER, nejnižší hodnoty platí pro palivo SFR, viz Obr. 5.9. Pro palivo CANDU je proto nejvíce možností, jaký VA zvolit, požadovaný obsah VA je nižší než pro více obohacená paliva.

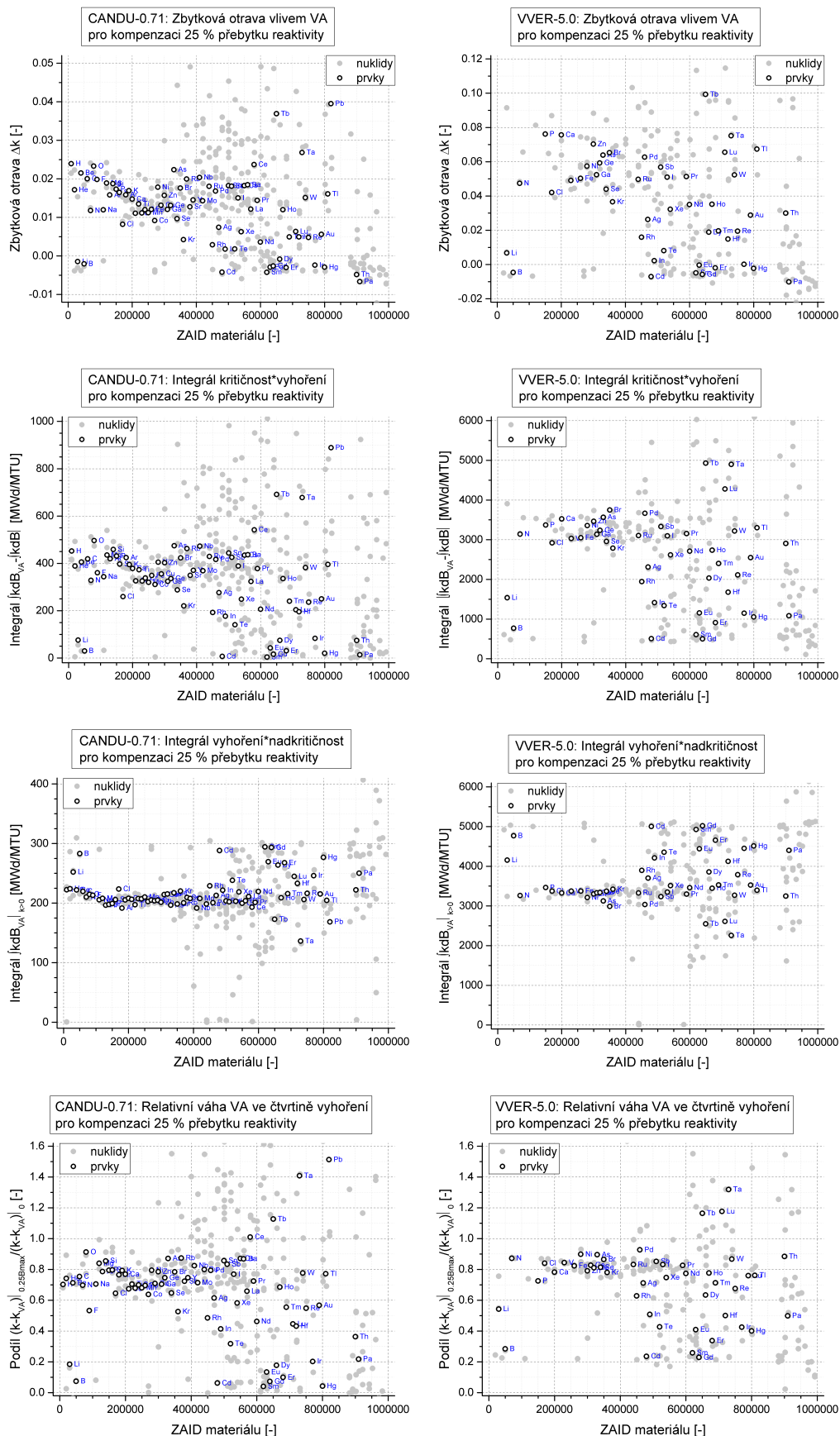
Srovnání metriky MM6 pro varianty z fáze 4 parametrické úlohy pro dvojici prvků (Tab. 5.4 a Tab. 5.5) pro 30 nevhodnějších VA pro každý ze 3 základních typů paliva ukazuje, že maximalizace metriky MM6 je dosaženo pro kombinaci jednoho dominantního prvku (Sm nebo Pa) a jakéhokoliv ze skupiny dobrých VA, identifikovaných ve fázi 2 obecně jako prvky Li, B, vzácné zeminy, Th a Pa. Detailní srovnání dvojice prvků a jejich metriky MM6 pro palivo VVER-5.0 s VA v palivu i pokrytí je uvedeno v příloze práce.



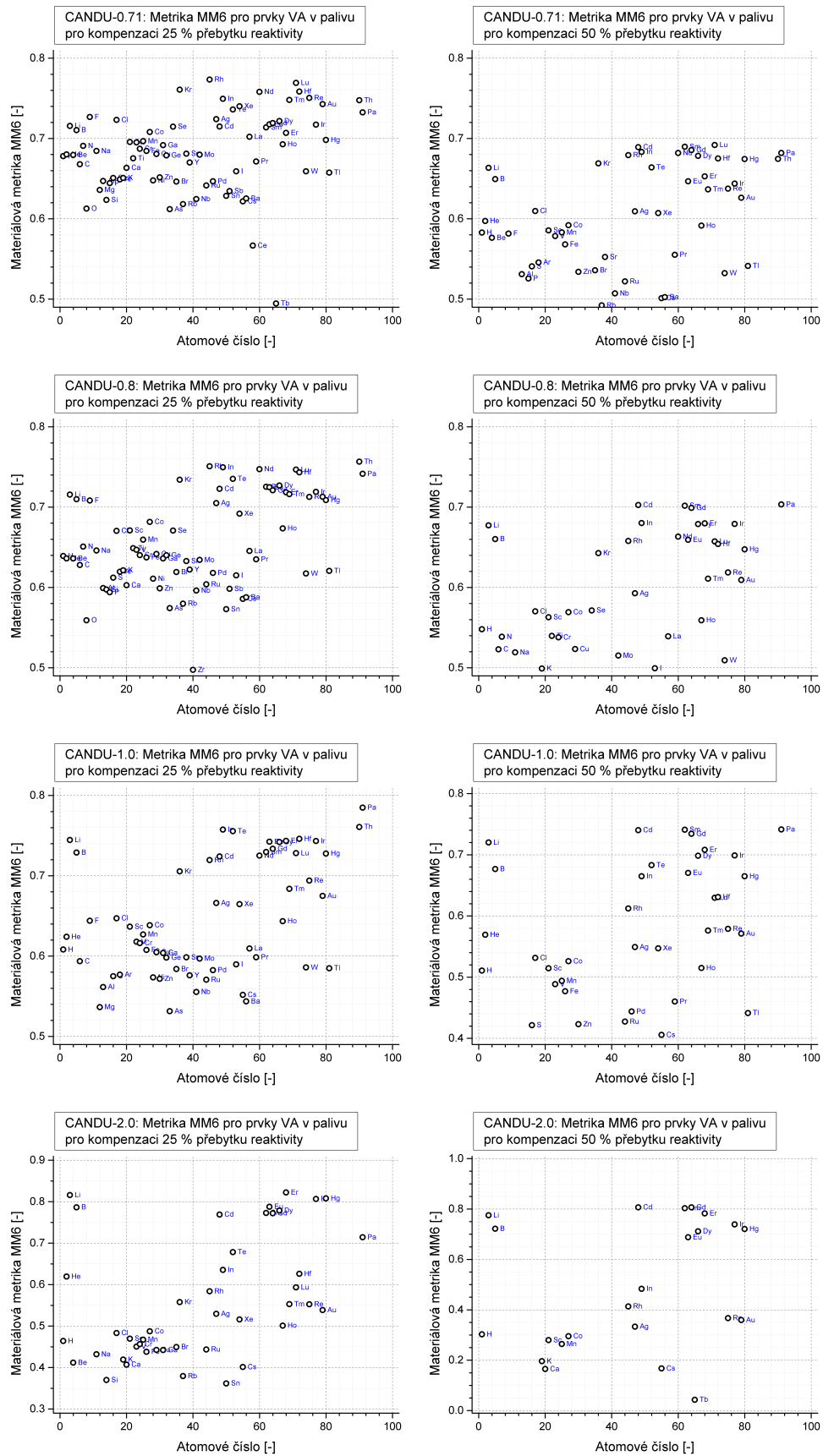
Obr. 5.4: Definice parametrů pro metriku MM6.



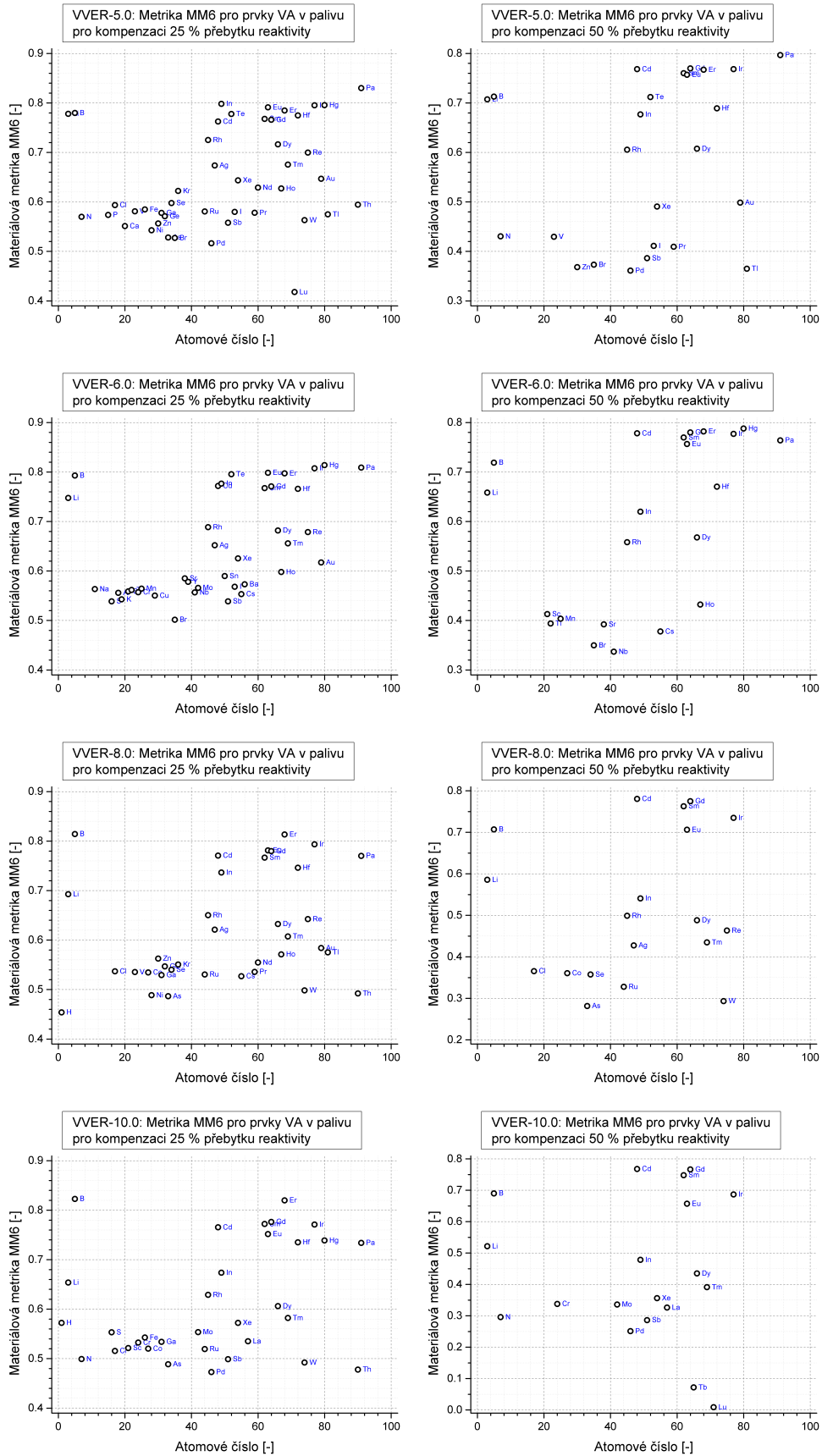
Obr. 5.5: Určení optimální pozice pro určení vah parametrů metriky MM6.



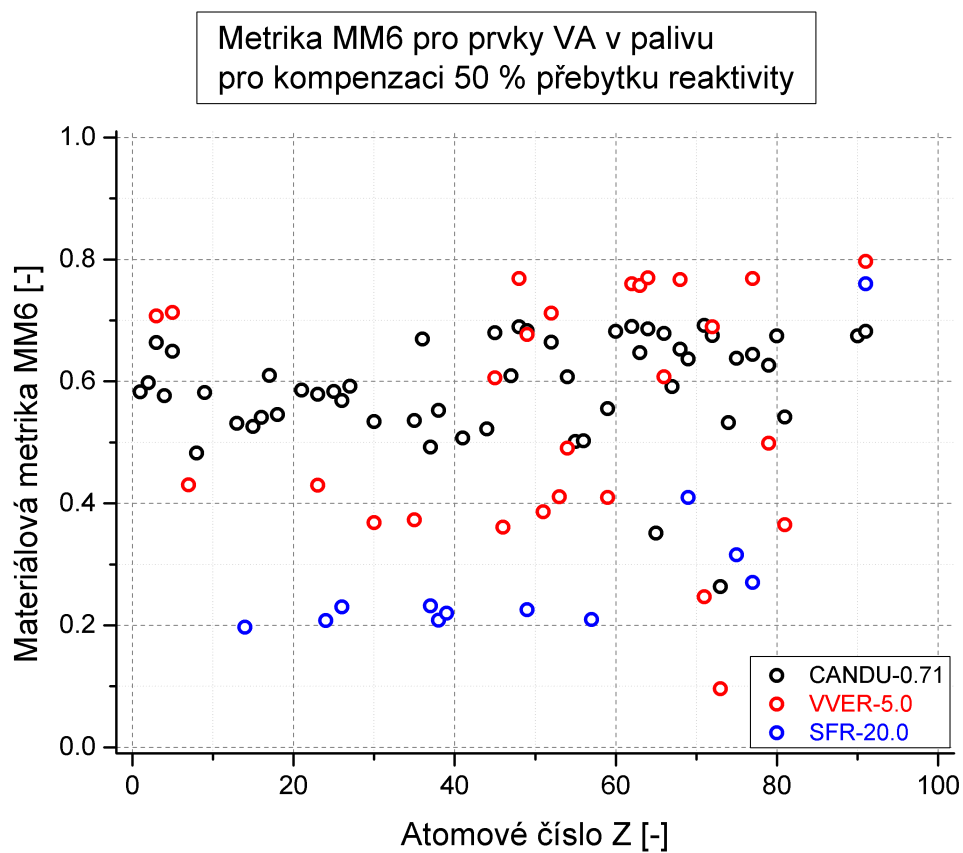
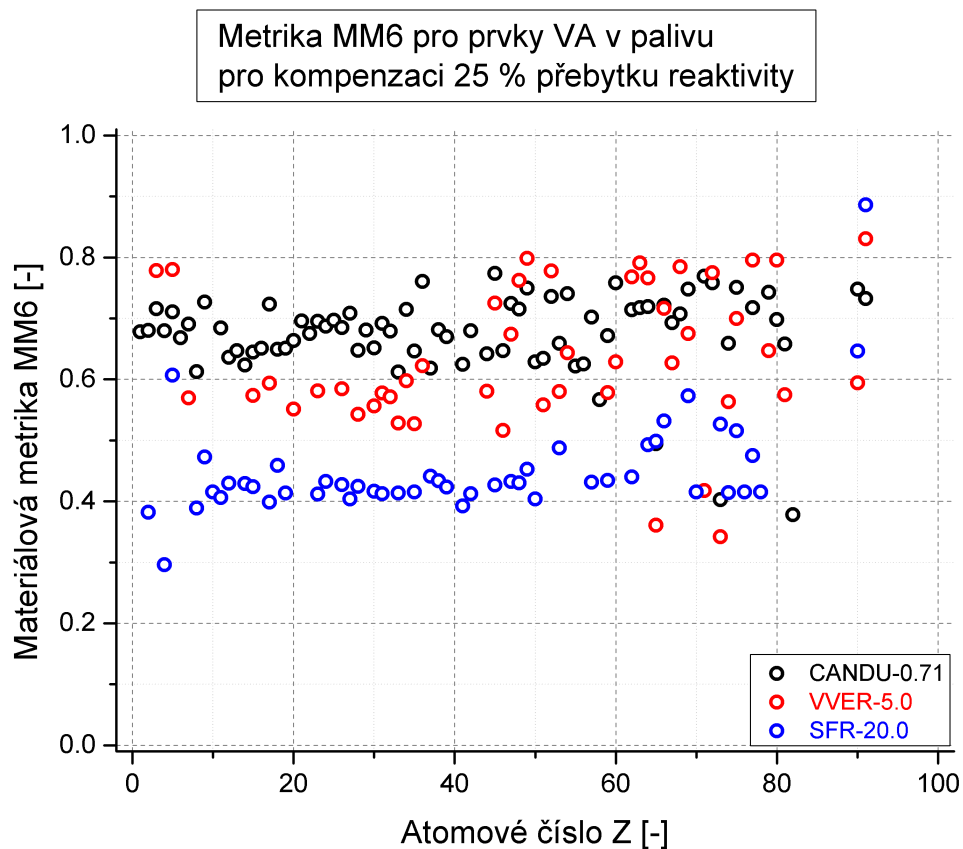
Obr. 5.6: Parametry metriky MM6 pro palivo CANDU a VVER.



Obr. 5.7: Metrika MM6 pro prvky VA v palivu CANDU.



Obr. 5.8: Metrika MM6 pro prvky VA v palivu VVER.



Obr. 5.9: Srovnání metriky MM6 podle typu paliva.

Tab. 5.4: Metrika MM6 pro VA v palivu pro nevhodnější kombinaci prvků.

CANDU-0.71		VVER-5.0		SFR-20.0	
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Cs+Sm	0.70696	B+Pa	0.79723	Th+Pa	0.75801
Ge+Sm	0.70596	Hg+Pa	0.79559	B+Pa	0.71967
Ag+Sm	0.70591	Er+Pa	0.79277	Tm+Pa	0.69361
Sb+Sm	0.70534	Ir+Pa	0.78987	Ta+Pa	0.66770
Zn+Sm	0.70468	Eu+Pa	0.78933	Dy+Pa	0.66265
Kr+Sm	0.70421	In+Pa	0.78580	Re+Pa	0.64767
Ca+Sm	0.70413	Gd+Pa	0.78247	La+Pa	0.64126
S+Sm	0.70359	Cd+Pa	0.77885	Tb+Pa	0.64016
Rh+Sm	0.70354	B+Hg	0.77834	Gd+Pa	0.63541
Cr+Sm	0.70341	Sm+Pa	0.77666	Sr+Pa	0.63152
Se+Sm	0.70322	B+Ir	0.77631	Fe+Pa	0.62855
Cl+Sm	0.70305	Te+Pa	0.77521	I+Pa	0.62710
P+Sm	0.70288	B+In	0.77267	Y+Pa	0.61775
Sc+Sm	0.70262	Er+Hg	0.77235	Ir+Pa	0.60976
Y+Sm	0.70245	Ir+Hg	0.77173	Ar+Pa	0.59693
Mo+Sm	0.70223	In+Hg	0.77019	Sm+Pa	0.59368
Pd+Sm	0.70210	Li+Pa	0.76909	F+Pa	0.59277
Xe+Sm	0.70199	Eu+Hg	0.76821	Rb+Pa	0.58427
Cu+Sm	0.70197	Er+Ir	0.76781	In+Pa	0.58279
Mg+Gd	0.70196	Cd+Sm	0.76710	Pr+Pa	0.58092
Sr+Sm	0.70189	In+Er	0.76663	Ag+Pa	0.57784
Ni+Sm	0.70188	In+Ir	0.76614	Cd+Pa	0.57453
Ce+Gd	0.70182	Sm+Gd	0.76398	Cr+Pa	0.56849
Ga+Sm	0.70179	Cd+Gd	0.76367	W+Pa	0.56833
I+Sm	0.70174	Hf+Pa	0.76324	Mo+Pa	0.56485
As+Sm	0.70167	Li+B	0.76247	Rh+Pa	0.56435
V+Sm	0.70149	Eu+Ir	0.76220	Br+Pa	0.56428
Rh+Gd	0.70148	Li+Hg	0.76061	Si+Pa	0.56313
Ce+Sm	0.70118	Eu+Er	0.76053	As+Pa	0.56139
V+Cd	0.70117	In+Eu	0.76045	Mg+Pa	0.55903

Tab. 5.5: Metrika MM6 pro VA v pokrytí pro nejvhodnější kombinaci prvků.

CANDU-0.71		VVER-5.0		SFR-20.0	
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
In+Pa	0.70300	Gd+Pa	0.80594	Tm+Pa	0.76521
H+Gd	0.70234	Sm+Pa	0.80182	Ta+Pa	0.74352
Sc+Sm	0.69944	Cd+Pa	0.79796	Re+Pa	0.73604
K+Sm	0.69807	B+Pa	0.79113	Dy+Pa	0.73597
Kr+Pa	0.69789	Hg+Pa	0.78478	B+Pa	0.73469
Mo+Cd	0.69773	Er+Pa	0.78359	Tb+Pa	0.71995
Eu+Pa	0.69705	In+Hg	0.78179	I+Pa	0.70189
Sm+Tm	0.69662	B+In	0.78043	Gd+Pa	0.70081
Cd+Pa	0.69638	Ir+Hg	0.77930	Ir+Pa	0.69098
Mn+Sm	0.69595	Eu+Hg	0.77859	Sm+Pa	0.66128
Nd+Pa	0.69548	Er+Hg	0.77848	In+Pa	0.65724
N+Sm	0.69499	In+Ir	0.77753	Hf+Pa	0.65173
Sm+Pa	0.69487	In+Er	0.77603	Cd+Pa	0.63701
La+Sm	0.69473	Er+Ir	0.77555	Au+Pa	0.63535
Gd+Pa	0.69447	In+Eu	0.77436	Br+Pa	0.63242
Fe+Gd	0.69444	Li+Hg	0.77386	Ag+Pa	0.62727
Ti+Cd	0.69434	Li+B	0.77340	Rh+Pa	0.61402
Fe+Sm	0.69433	Cd+Sm	0.77302	As+Pa	0.61214
Cs+Sm	0.69426	Eu+Ir	0.77297	B+Tm	0.58447
B+Pa	0.69419	Cd+Gd	0.77021	Dy+Tm	0.57359
Lu+Pa	0.69407	Sm+Gd	0.77003	Tm+Ta	0.56694
Cs+Gd	0.69396	Li+Ir	0.76984	Tb+Tm	0.53556
Cl+Sm	0.69393	Li+In	0.76875	Tm+Re	0.53054
Ag+Cd	0.69364	Te+Ir	0.76738	Gd+Tm	0.52567
N+Cd	0.69354	Te+Pa	0.76723	Dy+Ta	0.52339
Sc+Cd	0.69328	Te+Hg	0.76708	B+Dy	0.52238
Cd+Cs	0.69312	Li+Eu	0.76672	I+Tm	0.51847
Na+Cd	0.69307	In+Sm	0.76455	B+Ta	0.51772
Cu+Cd	0.69305	Li+Er	0.76450	B+Re	0.50073
Ru+Sm	0.69298	B+Te	0.76346	He+Pa	0.49563

5.1.4 Materiálová metrika MM9

Srovnání metriky MM6 pro varianty z fáze 2 parametrické úlohy, kde jsou uvažovány prvky a nuklidy materiálů pro různé varianty výpočtů, vede k podobným výsledkům. Z tohoto důvodu byla na základě 6parametrické materiálové metriky MM6 definována 9parametrická metrika MM9 doplněním tří parametrů:

- Umístění VA. Uvažováno umístění VA v palivu a pokrytí.
- Obohacení a typ paliva. Uvažováno 9 typů paliv CANDU-0.71, CANDU-0.8, CANDU-1.0, CANDU-2.0, VVER-5.0, VVER-6.0, VVER-8.0, VVER-10.0 a SFR-20.0.
- Velikost počáteční kompenzace reaktivity. Uvažovány varianty rc25, rc50 a wt01 – kompenzace 25 % reaktivity, kompenzace 50 % reaktivity a kompenzace pro obsah 1.0 wt% VA.

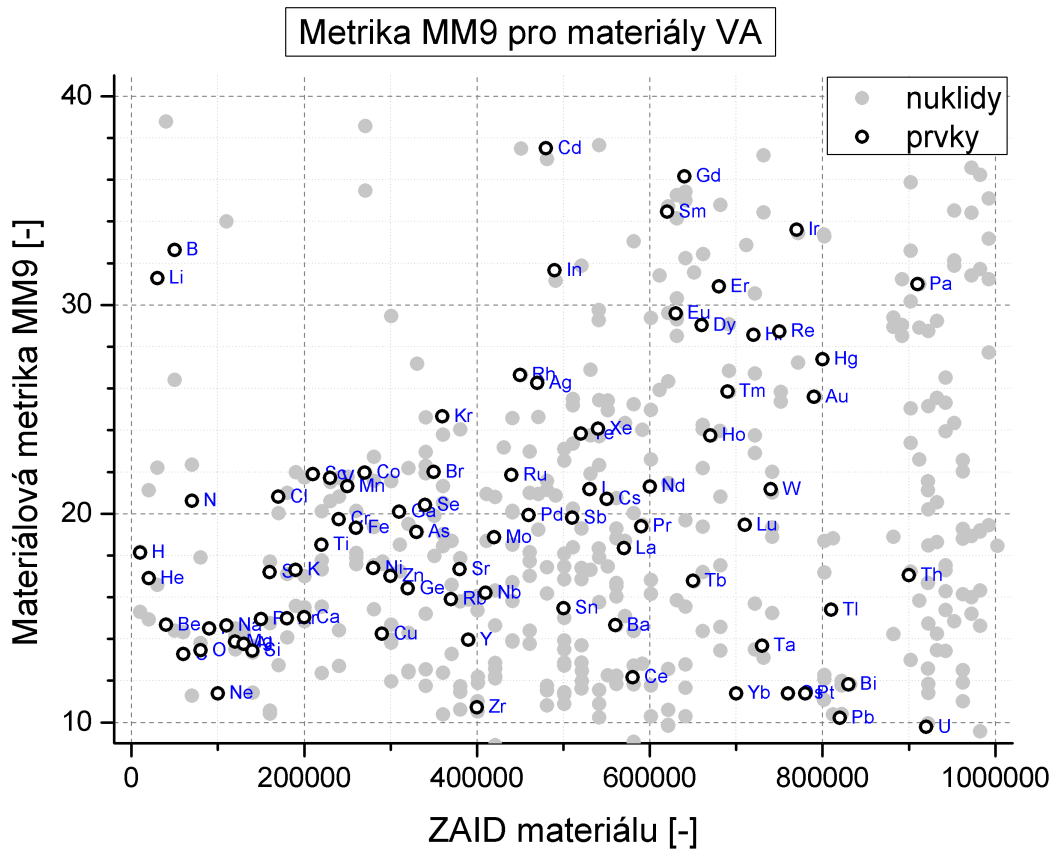
9parametrická metrika MM9 je určena jako součet hodnot 6parametrické metriky MM6 pro všechny uvažované varianty dalších 3 parametrů umístění, obohacení a kompenzace reaktivity podle vztahu

$$MM9 = \sum_{\substack{i \in \text{palivo, pokrytí} \\ j \in \text{CANDU, VVER, SFR} \\ k \in \text{rc25, rc50, wt01}}} MM6_{ijk} \quad (5.9)$$

Výsledné hodnoty metriky MM9, jako výsledky parametrické studie, jsou shrnuty na Obr. 5.10. Výběr 30 nejvhodnějších prvků VA a 30 nejvhodnějších nuklidů VA seřazeně podle metriky MM9 viz Tab. 5.6, pro všechny prvky a nuklidy je metrika MM9 součástí přílohy práce.

Optimálním prvkem, použitelným jako vyhořívající absorbátor pro všechny uvažované výpočetní varianty, je Cd, následované Gd, Sm, Ir a B. Z hlediska materiálů, kterým doposud nebyl věnován výzkum, lze jmenovat především Ir, In, Li a Re.

Optimální nuklidy, použitelné jako VA, by neměly mít krátký poločas přeměny. Pro tři nejvhodnější nuklidy je poločas přeměny v řádu desítek dní (Pm-148 41d, Be-7 53d, Co-58m 71d) a doporučit je jako VA nelze. Ze stabilních nuklidů jsou jako optimální VA označeny materiály typu Cd-113, Gd-157, Eu-155, Er-169 a Sm-149, které jsou součástí optimálních prvků VA, jako závěr srovnání nuklidů lze doporučit možnost obohacování prvků vybranými nuklidy.



Obr. 5.10: Metrika MM9 pro materiály vyhořívajících absorbátorů.

Tab. 5.6: Metrika MM9 pro nejvhodnější materiály vyhořívajících absorbátorů.

ID	MM9	ID	MM9	ID	MM9	ID	MM9
Cd	37.499	Ag	26.263	Pm-148	74.699	Er-167	34.786
Gd	36.160	Tm	25.857	Be-7	38.791	Sm-149	34.723
Sm	34.463	Au	25.596	Co-58m	38.575	Am-242	34.524
Ir	33.603	Kr	24.655	Xe-135	37.657	Ta-180	34.429
B	32.632	Xe	24.067	Rh-105	37.480	Bk-245	34.417
In	31.658	Te	23.827	Ta-182	37.167	Eu-154	34.145
Li	31.284	Ho	23.753	Cd-113	36.992	Na-22	33.992
Pa	30.990	Br	21.993	Bk-249	36.573	Ir-191	33.433
Er	30.878	Co	21.971	Cf-250	36.235	Hg-196	33.363
Eu	29.594	Sc	21.897	Th-231	35.866	Hg-199	33.285
Dy	29.031	Ru	21.853	Co-58	35.479	Es-251	33.164
Re	28.735	V	21.721	Gd-157	35.420	Ce-139	33.041
Hf	28.573	Mn	21.315	Eu-155	35.259	Lu-176	32.859
Hg	27.398	Nd	21.308	Es-254	35.103	Th-233	32.591
Rh	26.643	I	21.174	Gd-155	35.002	Dy-164	32.441

5.1.5 Shluková analýza

Shluková analýza je soubor statistických metod, jejichž cílem je identifikace skupin objektů podle charakteristik objektů. Jako objekty byly zvoleny prvky VA v palivech CANDU-0.71 a VVER-5.0 s 25% počáteční kompenzací reaktivity a jako charakteristiky parametry p_i materiálové metriky MM6.

Shluková analýza vytváří vzájemné vzdálenosti mezi jednotlivými objekty a v postupných krocích tyto objekty řadí ke shlukům. V každém kroku je vybrán objekt a nejbližší shluk objektu a jsou sloučeny v nový shluk. Dvoukroková shluková analýza v prvním kroku objekty hierarchicky shlukuje, v závislosti na počtu shluků je určena vzdálenost mezi shluky. Grafickým znázorněním závislosti vzdálenosti shluků na počtu shluků vzniká křivka tvaru lidské ruky a podle pravidla lokte je určen optimální počet shluků. V druhém kroku je provedeno nehierarchické shlukování s daným počtem shluků. Detailní popis shlukové analýzy je popsán v Kap. 8 příručky [89].

Pro paliva CANDU a VVER byly prvky VA shlukovou analýzou rozděleny do 4 shluků, pro palivo SFR do 3 shluků. Doplněním dvou shluků (prvky, které nemají absorpční schopnosti pro dosažení požadované kompenzace reaktivity, a radioaktivní prvky) byly prvky VA rozděleny do 6 shluků/skupin, viz Tab. 5.7. Na základě středních vlastností jednotlivých skupin a hodnoty metriky MM6 lze VA rozdělit do následujících skupin:

- vyhořívající absorbátory s rychlým vyhoříváním (skupina 1)
- vyhořívající absorbátory s pomalým vyhoříváním (skupina 2)
- absorbující prvky bez výrazné vlastnosti vyhořívání (skupina 3)
- absorbující prvky nevyhořívající (skupina 4)
- velmi slabě absorbující prvky (skupina 5)
- radioaktivní prvky (skupina 6)

Prvky jsou rozděleny do skupin podle 2 základních vlastností VA – schopnosti vyhořívát a schopnosti absorbovat. Skupina 4 patří k relativně dobrým absorbátorům, ale během vyhořívání se reaktivita vázaná prvkem nemění, případně se nežádoucím způsobem zvyšuje.

Tab. 5.7: Shluková analýza prvků jako vyhořívajících absorbátorů

Skupina	CANDU-0.71	VVER-5.0
1	Li, B, Cd, Sm, Eu, Gd, Dy, Er, Ir, Hg, Pa	Cd, Sm, Gd
2	Cl, Co, Se, Kr, Rh, Ag, In, Te, Xe, Nd, Tm, Lu, Hf, Re, Au, Th	Li, B, Rh, In, Te, Eu, Dy, Er, Hf, Re, Ir, Hg, Pa
3	H, He, Be, C, N, F, Na, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Cu, Ga, Ge, Sr, Y, Mo, La, Pr, Ho	Cl, V, Fe, Ga, Se, Kr, Ru, Ag, I, Xe, Pr, Nd, Ho, Tm, Au, Th
4	O, Mg, Al, Si, P, S, Ar, K, Ca, Ni, Zn, As, Br, Rb, Nb, Ru, Pd, Sn, Sb, I, Cs, Ba, Ce, Tb, Ta, W, Tl, Pb	N, P, Ca, Ni, Zn, Ge, As, Br, Pd, Sb, Tb, Lu, Ta, W, Tl
5	Ne, Zr, Yb, Os, Pt, Bi, U	H, He, Be, C, O, F, Ne, Na, Mg, Al, Si, S, Ar, K, Sc, Ti, Cr, Mn, Co, Cu, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Sn, Cs, Ba, La, Ce, Yb, Os, Pt, Pb, Bi, U
6	Tc, Pm, Po, At, Rn, Fr, Ra, Ac	Tc, Pm, Po, At, Rn, Fr, Ra, Ac

5.2 Ověření vybraných variant kódem SERPENT

Kód SERPENT byl vybrán jako referenční kód z hlediska přesnosti i výpočetní doby, v rámci validace U_{WB1} byly výsledky kódu často v oblasti mezi ostatními kódy a rovněž výpočetní doba, např. oproti MCNP6, je přijatelná. Na základě parametrické úlohy byly vybrány výpočetní varianty s nejvyššími hodnotami materiálových metrik MM6 a MM9 a byly provedeny výpočty vyhořívání palivové buňky. Na detailním modelu palivového souboru bylo ověřeno, že chyba v přiblížení palivové buňky je přijatelná a byly oceněny doplňující neutronické vlastnosti vyhořívajících absorbátorů, které v parametrické úloze, pro svůj malý vliv na výběr materiálů, nebyly řešeny.

5.2.1 Palivová buňka

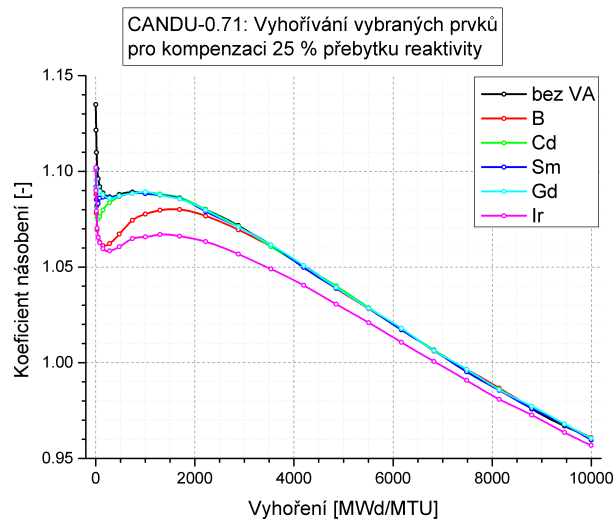
Výpočty vyhořívání na úrovni palivové buňky byly provedeny pro optimální varianty VA z pohledu metrik MM6 a MM9 pro všechny typické varianty z parametrické úlohy analyzované kódem U_{WB1} . V případě, že závislost vyšetřovaného vlivu nebyla kódem U_{WB1} určena výrazná, byly přepočítány pouze některé výpočetní varianty, typicky pouze palivo CANDU-0.71 ze 4 uvažovaných typů paliva CANDU, obdobně pro VVER-5.0, často umístění VA pouze v palivu namísto pokrytí a uvažování pouze prvků namísto nuklidů. Výpočet byl proveden pro 6 skupin výpočtů:

- Vliv prvků na kompenzaci reaktivity pro 1.0 wt% VA v palivu, viz Tab. 5.8. Porovnány jsou váhy VA na počátku a na konci vyhořívání pro VVER-5.0. Uvažovaný obsah je pro nejvíce absorbující prvky příliš vysoký a rozdíl koeficientu násobení na počátku vyhořívání přesahuje více než polovinu z $k_0 = 1.345$. Podle srovnání kompenzace počátečního přebytku reaktivity lze v prvním přiblížení určit, zda daný prvek je dobrý absorbátor (vysoká počáteční kompenzace) a zda při vyhořívání paliva absorbátor vyhořívá (kompenzace na konci vyhoření je nižší než na počátku).
- Vliv obohacení, viz Obr. 5.11, Obr. 5.12 a Obr. 5.13. Rozdíly mezi výběrem 5 optimálních prvků B, Cd, Sm, Gd a Ir pro paliva CANDU a VVER nejsou kvalitativní povahy, Cd, Sm a Gd vyhořívají velmi rychle, během prvních cca 5 % vyhoření, B a Ir vyhořívají podstatně déle, v případě B dochází k výraznější tvorbě plutoniového píku pro palivo CANDU. Palivo SFR se chová odlišně, rychle vyhořívající absorbatory Cd, Sm a Gd prakticky nevyhořívají, B a Ir vyhořívá velmi pomalu, vhodný je především B.
- Vliv umístění, viz Obr. 5.14. Umístění VA v palivu nebo pokrytí má na průběh reaktivity paliva zanedbatelný vliv na úrovni statistické chyby výpočtu. Rozdíl je především v nutném obsahu VA (vyšší v pokrytí) a volba umístění je na dalších analýzách (např. chemická kompatibilita materiálu s maticí paliva).

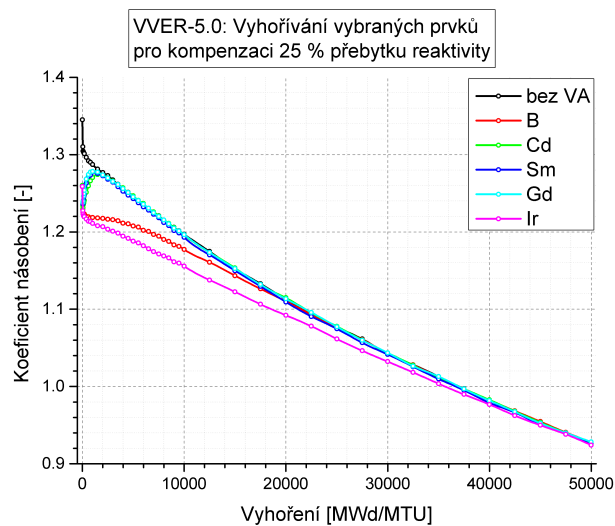
- Vliv kompenzace reaktivity, viz Obr. 5.15. Srovnání kompenzace 25 % a 50 % pro rychle vyhořívající Cd, Sm a Gd ukazuje, že lze velmi mírně zvýšit časový účinek kompenzace reaktivity, ale za cenu nežádoucího zvyšování reaktivity v počátku vyhořívání. Pomalu vyhořívající absorbátory B a Ir mají obdobně dobrý průběh vyhořívání pro obě hodnoty kompenzace.
- Vliv nuklidů, viz Obr. 5.16. Kromě nuklidů kopírující chování svých prvků jsou vhodnými materiály minoritní aktinidy, např. Bk-249 a Cf-250, pro svou vzácnost však praktického využití nemají. Výrazné jsou rozdíly mezi Be-7 pro paliva CANDU a VVER z důvodu poločasu přeměny Be-7. U paliva CANDU, které je ozařováno 5x kratší dobu, se projeví výrazněji.
- Vliv dvojice nuklidů, viz Obr. 5.17 a Obr. 5.18. Z vybraných variant 10 dvojic prvků podle hodnot metriky MM6 lze usuzovat na velmi dobrý průběh vyhořívání téměř všech variant, po počátečním transientu je koeficient násobení těchto variant téměř konstantní. V případě paliv VVER a SFR s obsahem Pa už se jedná o částečný přechod k thoriovému cyklu.

Tab. 5.8: Kompenzace reaktivity 1.0 wt% VA v palivu VVER-5.0 na počátku (B_0) a konci vyhořívání (B_{50} , 50000 MWd/MTU) v modelu palivové buňky kódu SERPENT.

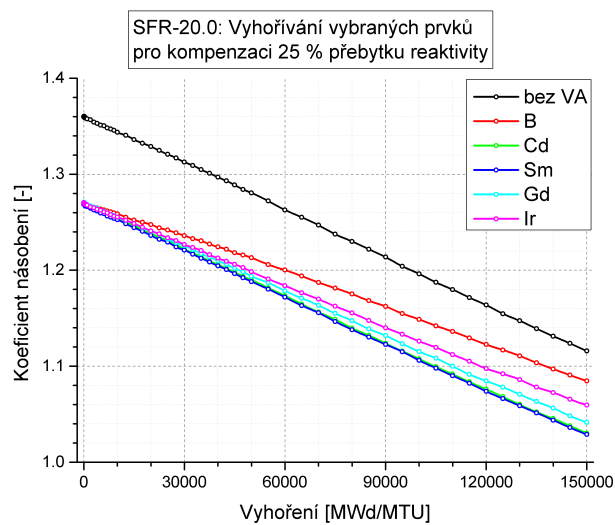
Prvek	$k - k_{VA}$ [-]		Prvek	$k - k_{VA}$ [-]		Prvek	$k - k_{VA}$ [-]	
	B_0	B_{50}		B_0	B_{50}		B_0	B_{50}
1-H	-0.0224	0.0013	29-Cu	0.0059	0.0039	58-Ce	-0.0001	0.0002
2-He	0.0032	0.0047	30-Zn	0.0037	0.0013	59-Pr	0.0094	0.0049
3-Li	0.5099	0.0574	31-Ga	0.0154	0.0083	60-Nd	0.0336	0.0127
4-Be	-0.0006	0.0013	32-Ge	0.0037	0.0028	62-Sm	0.7917	0.1100
5-B	0.9734	-0.0331	33-As	0.0276	0.0206	63-Eu	0.7967	0.1554
6-C	0.0021	0.0004	34-Se	0.0161	0.0077	64-Gd	0.8064	0.0126
7-N	0.0182	0.0091	35-Br	0.0329	0.0229	65-Tb	0.0804	0.0963
8-O	0.0002	0.0009	36-Kr	0.0355	0.0141	66-Dy	0.4057	0.1220
9-F	-0.0002	0.0013	37-Rb	0.0039	0.0018	67-Ho	0.1196	0.0548
10-Ne	0.0023	-0.0002	38-Sr	0.0042	0.0027	68-Er	0.2476	0.0102
11-Na	0.0028	0.0013	39-Y	0.0011	0.0004	69-Tm	0.1628	0.0732
12-Mg	0.0000	0.0001	40-Zr	0.0008	0.0007	70-Yb	0.0532	0.0324
13-Al	0.0010	0.0019	41-Nb	0.0050	0.0033	71-Lu	0.1705	0.1324
14-Si	0.0002	0.0017	42-Mo	0.0094	0.0059	72-Hf	0.2191	0.0393
15-P	0.0005	0.0012	44-Ru	0.0179	0.0114	73-Ta	0.0876	0.0784
16-S	0.0026	0.0019	45-Rh	0.2611	0.0653	74-W	0.0439	0.0271
17-Cl	0.0775	0.0333	46-Pd	0.0271	0.0206	75-Re	0.1324	0.0320
18-Ar	0.0001	0.0013	47-Ag	0.1372	0.0465	76-Os	0.0309	0.0181
19-K	0.0063	0.0041	48-Cd	0.7597	0.0032	77-Ir	0.3401	0.0179
20-Ca	0.0018	0.0011	49-In	0.3180	0.0624	78-Pt	0.0234	0.0104
21-Sc	0.0520	0.0232	50-Sn	0.0027	0.0019	79-Au	0.1234	0.0437
22-Ti	0.0115	0.0048	51-Sb	0.0308	0.0207	80-Hg	0.1211	0.0022
23-V	0.0074	0.0056	52-Te	0.0177	0.0012	81-Tl	0.0032	0.0011
24-Cr	0.0047	0.0024	53-I	0.0340	0.0198	82-Pb	-0.0005	0.0002
25-Mn	0.0258	0.0137	54-Xe	0.0584	0.0198	83-Bi	-0.0012	-0.0001
26-Fe	0.0053	0.0026	55-Cs	0.0684	0.0353	90-Th	0.0115	0.0012
27-Co	0.0751	0.0336	56-Ba	0.0024	0.0021	91-Pa	0.2095	-0.0214
28-Ni	0.0081	0.0043	57-La	0.0076	0.0039	92-U	0.0008	0.0026



(a) Palivo CANDU.

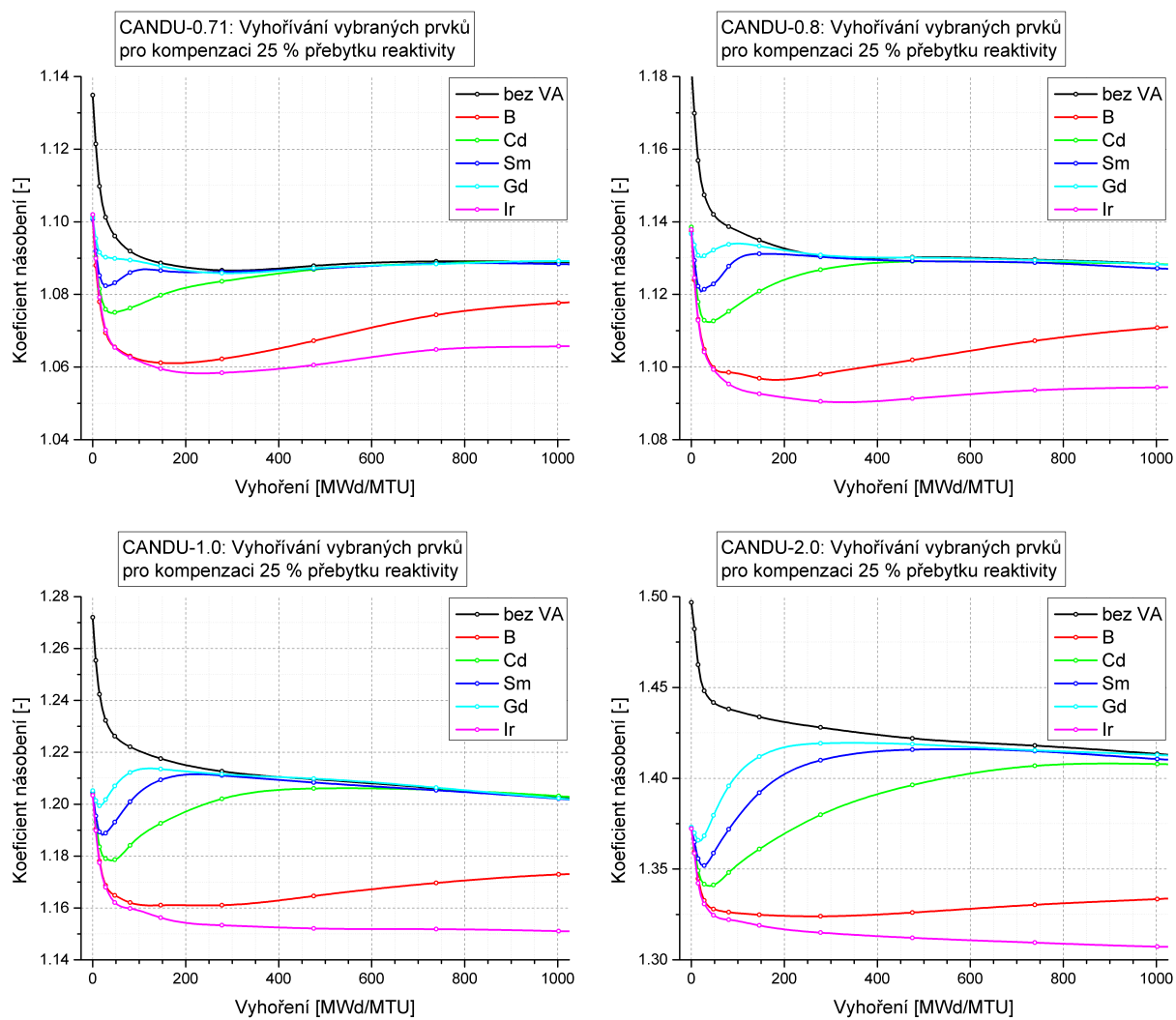


(b) Palivo VVER.

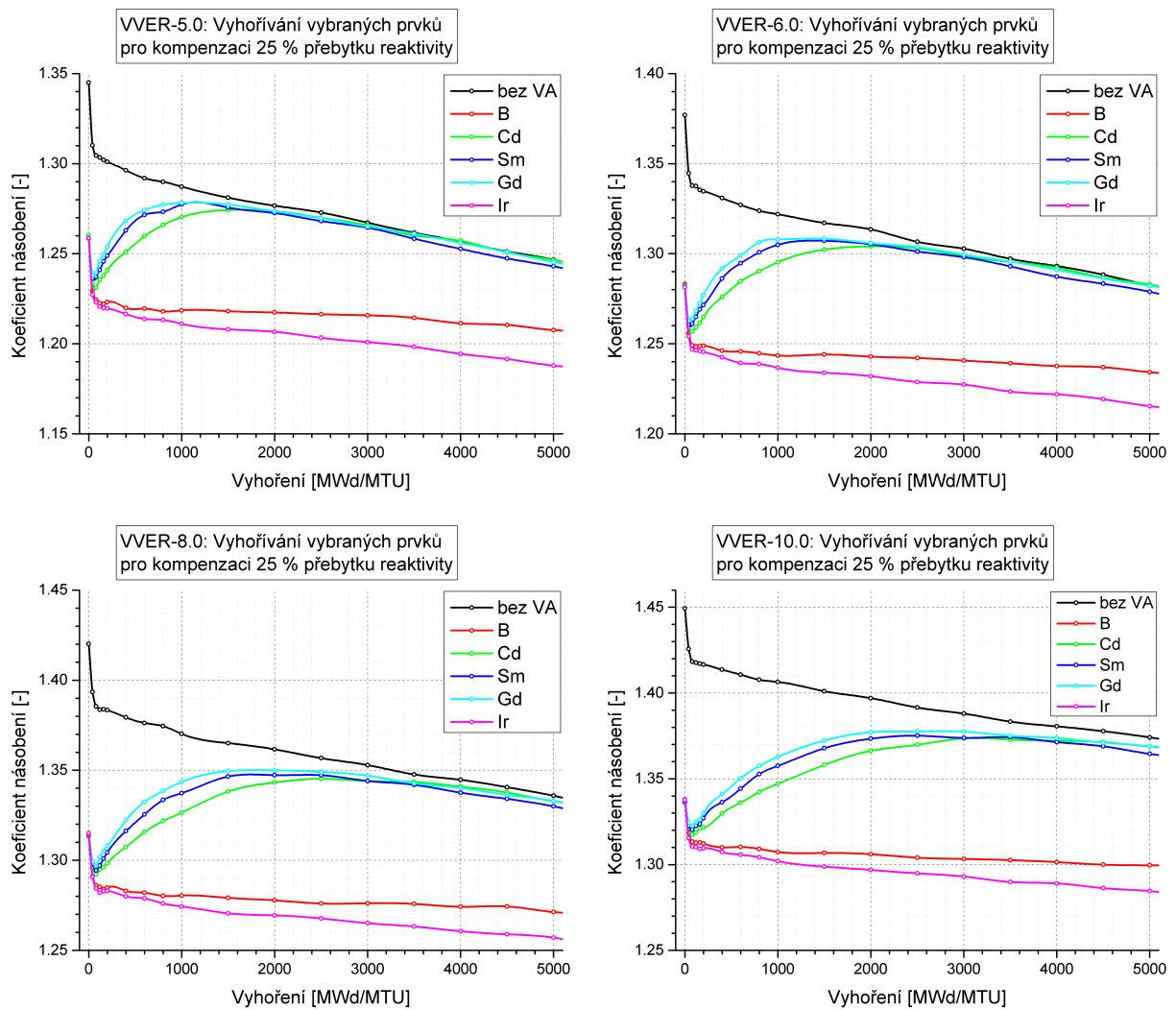


(c) Palivo SFR.

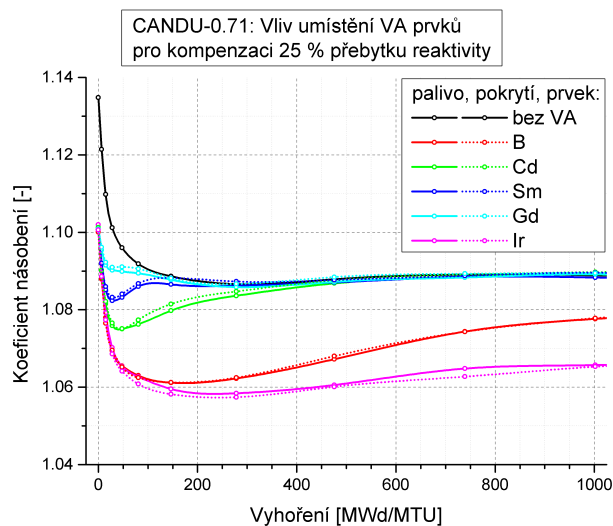
Obr. 5.11: Vyhořívání paliva s 5 vybranými VA pro 25% kompenzaci reaktivity.



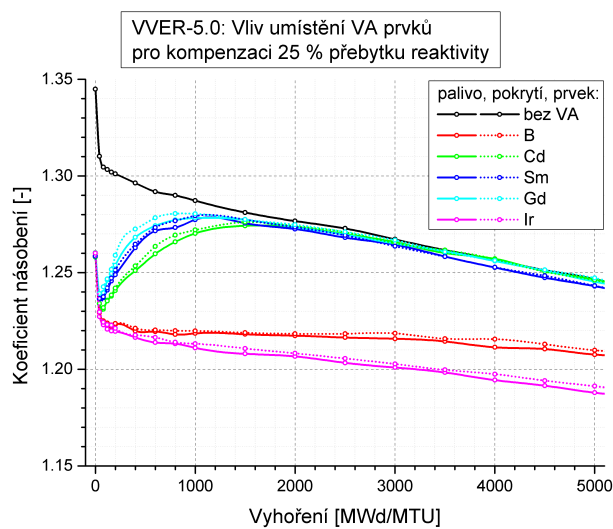
Obr. 5.12: Počátek vyhořívání paliva CANDU s 5 vybranými VA pro 25% kompenzaci reaktivity.



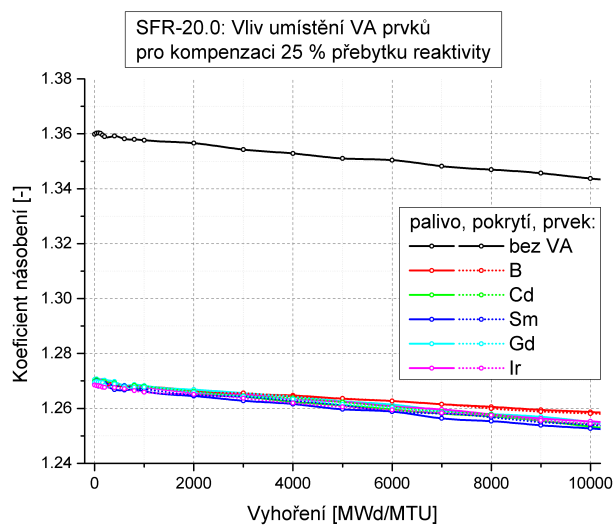
Obr. 5.13: Počátek vyhořívání paliva VVER s 5 vybranými VA pro 25% kompenzaci reaktivity.



(a) Palivo CANDU.

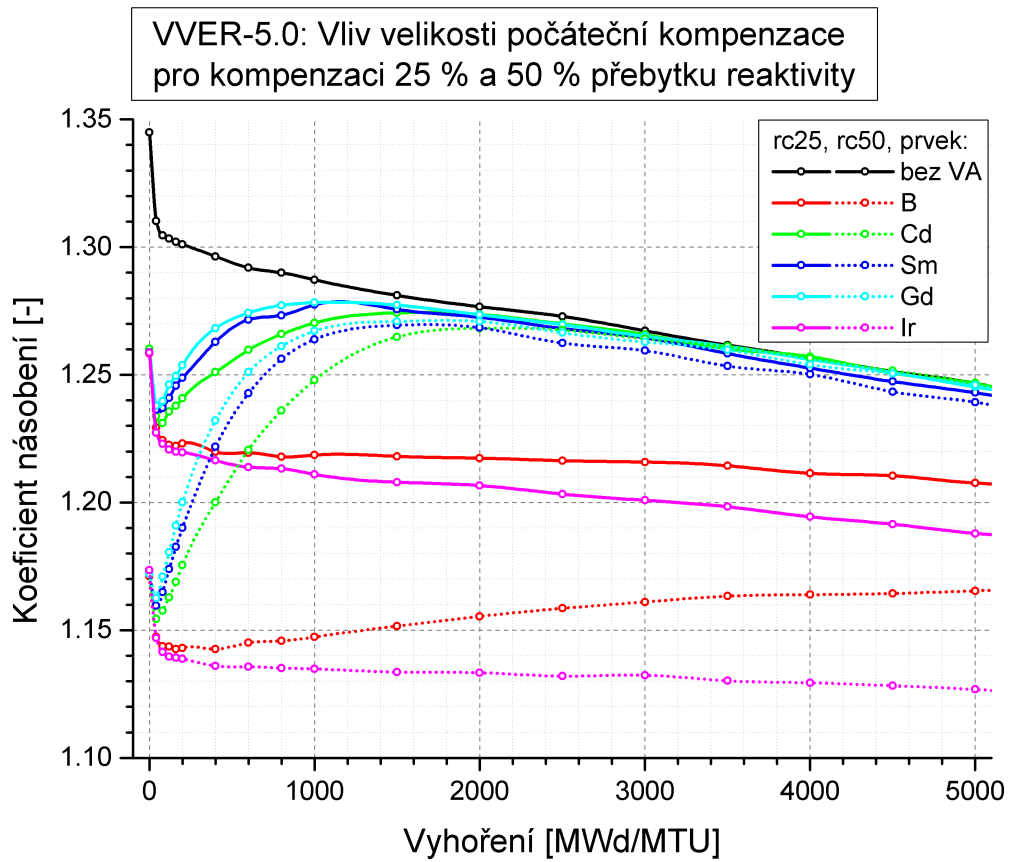
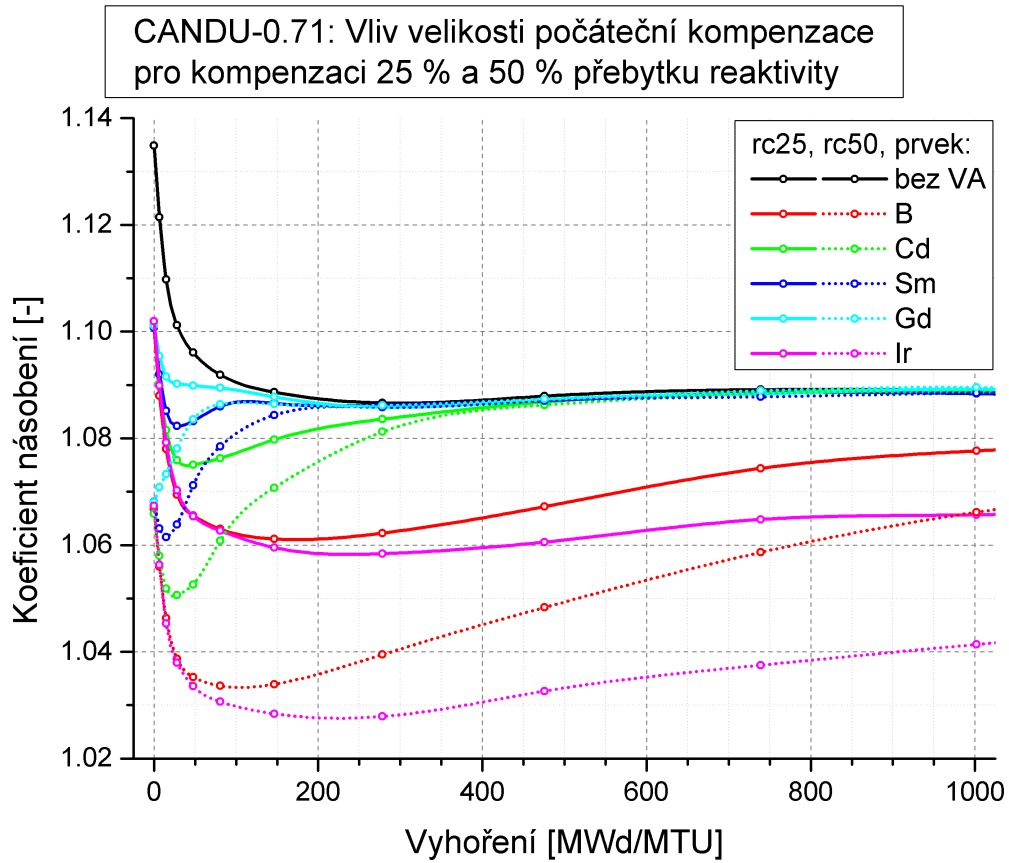


(b) Palivo VVER.

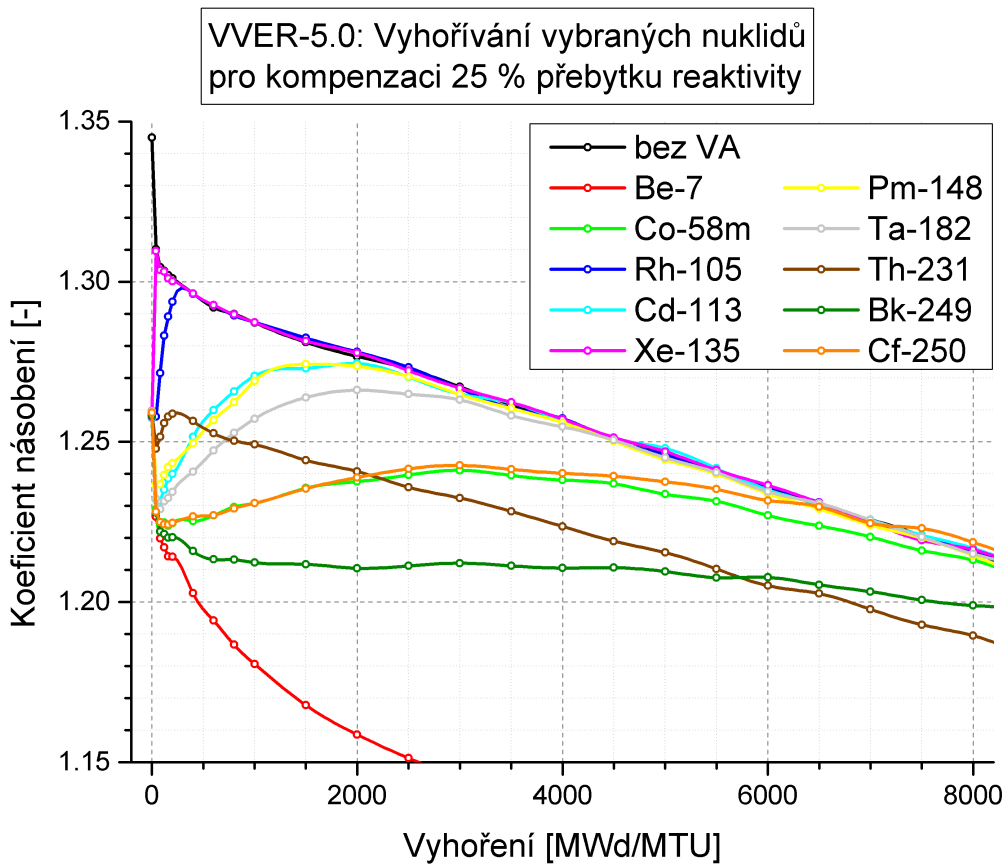
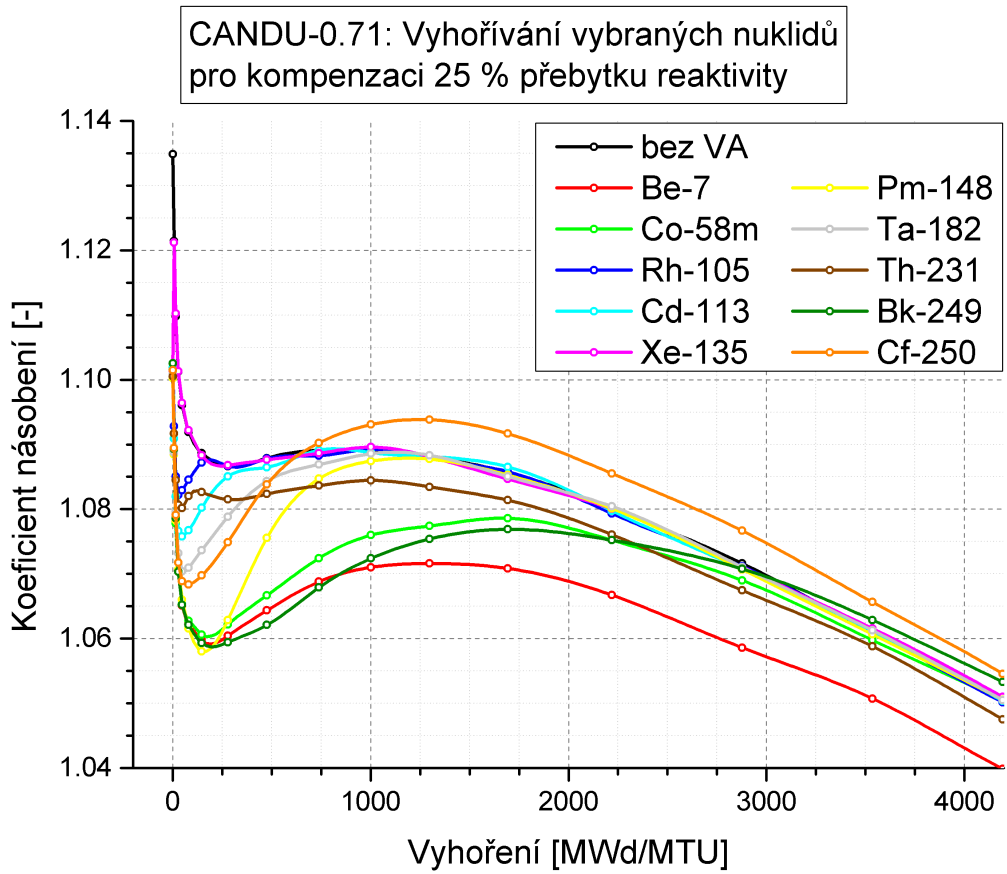


(c) Palivo SFR.

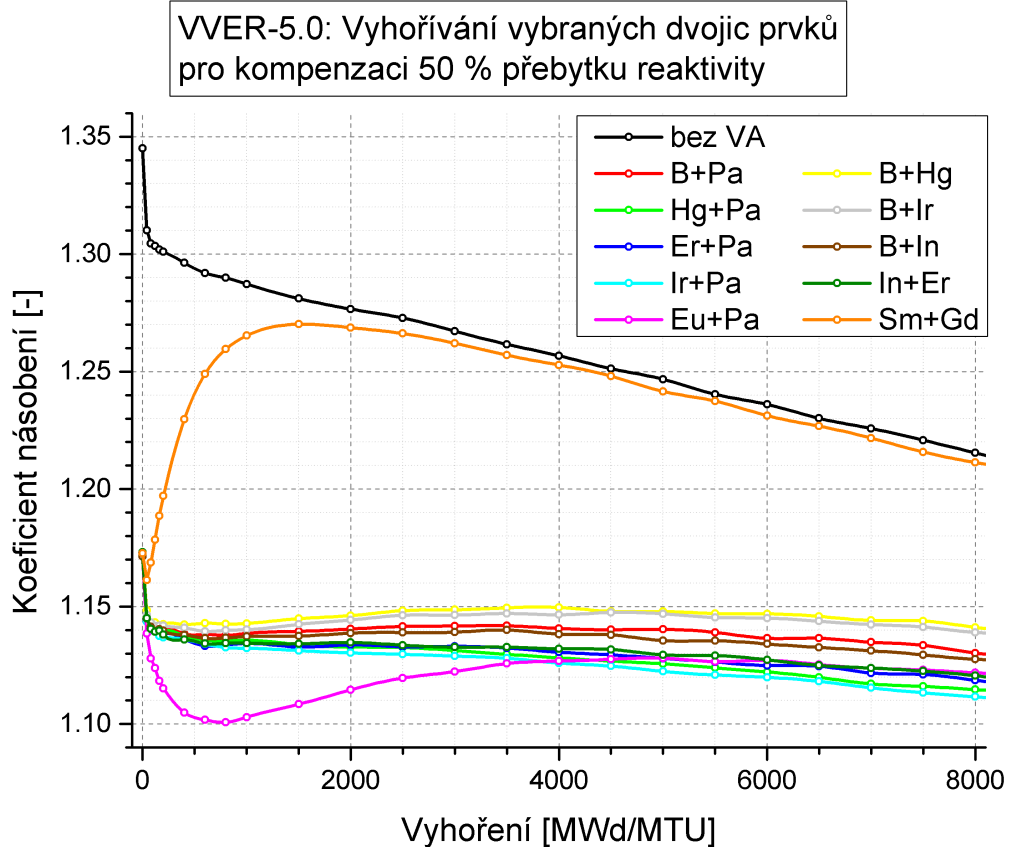
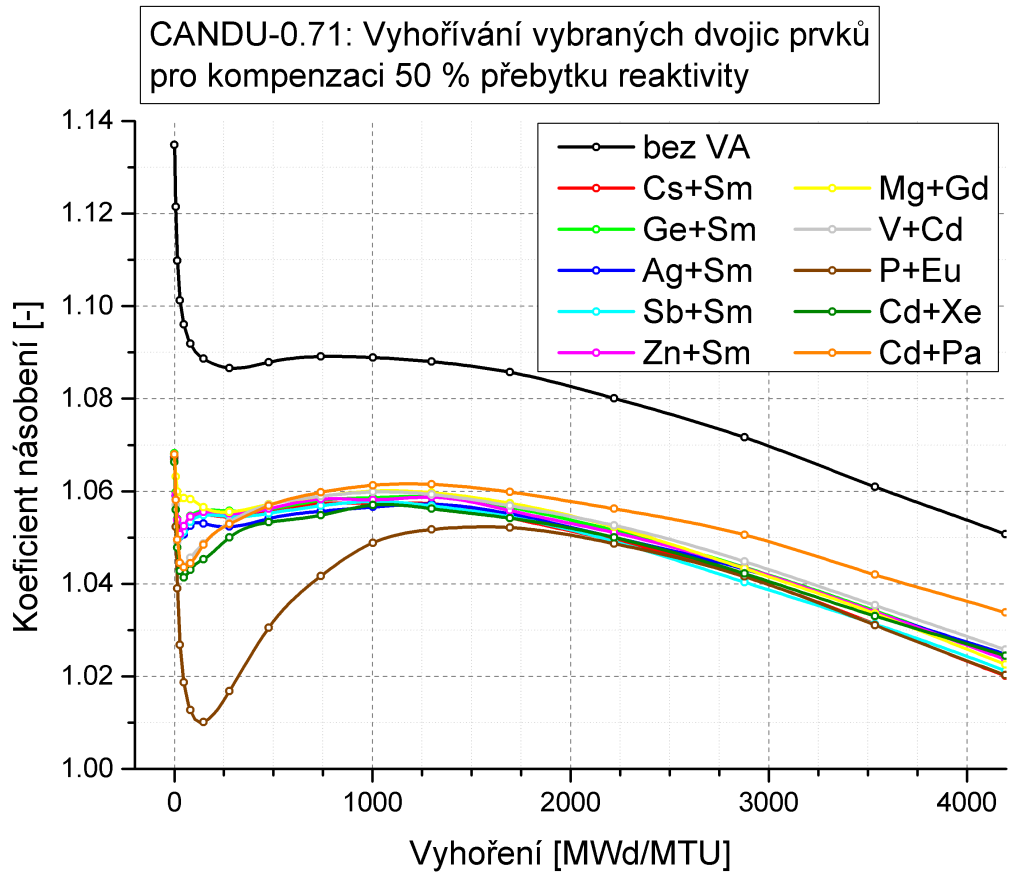
Obr. 5.14: Vliv umístění VA v palivo nebo pokrytí na vyhořívání.



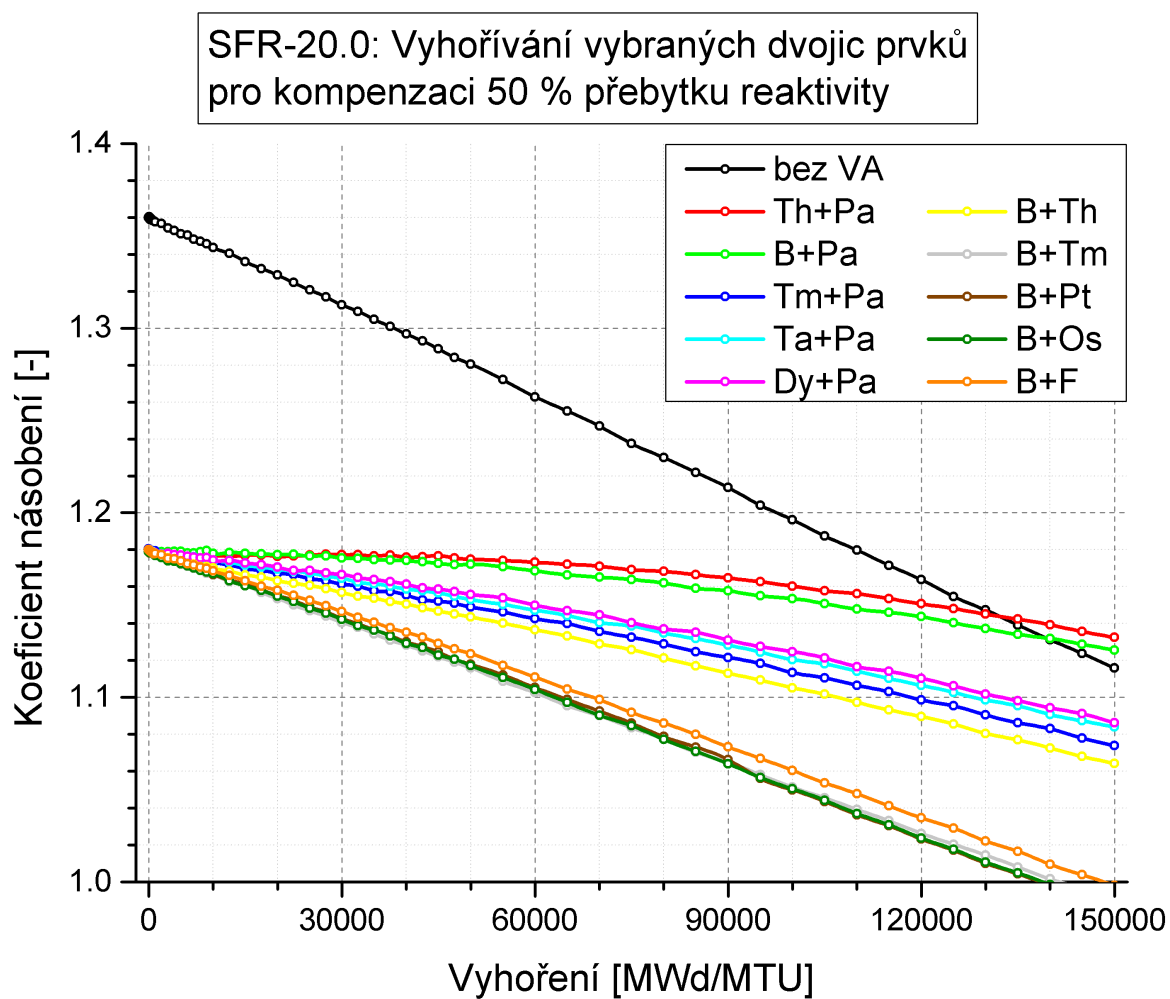
Obr. 5.15: Vliv velikosti počáteční kompenzace na vyhořívání.



Obr. 5.16: Počátek vyhořívání paliv VVER a CANDU s 10 vybranými nuklidy VA.



Obr. 5.17: Počátek vyhořívání paliv VVER a CANDU s vybranými dvojicemi prvků VA.



Obr. 5.18: Vyhořívání paliva SFR s vybranými dvojicemi prvků VA.

5.2.2 Palivový soubor

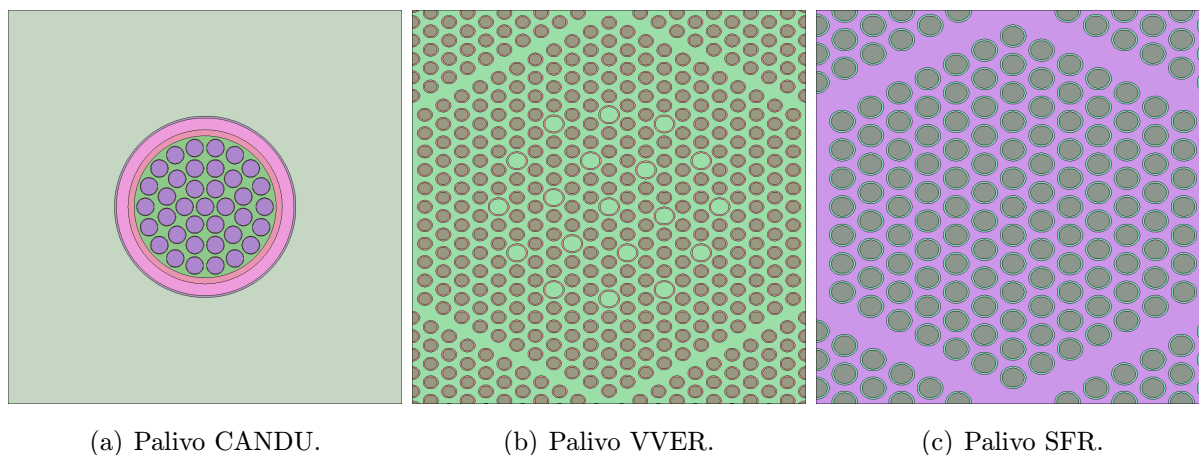
Na detailním modelu palivového souboru s geometrií podle Obr. 5.19 bylo ověřeno (Obr. 5.20), že vliv přiblížení nekonečné mříže palivových buněk na vyhořívání je malý, srovnatelný s úrovní rozdílů mezi výpočetními kódy, navíc téměř bez závislosti na vyhoření.

Kromě kompenzace počátečního přebytku reaktivity má použití vyhořívajícího absorbátoru vliv na koeficienty reaktivity. Pro palivo CANDU lze použitím VA odstranit kladný dutinový koeficient reaktivity [25], v případě paliva VVER lze při využití VA snížit potřebný obsah kyseliny borité v chladivu a zachovat jeho záporný teplotní koeficient reaktivity. Srovnání základních koeficientů reaktivity (teplotní v palivu, chladivu a moderátor a dutinový při snížení objemu chladiva) jsou uvedeny v Tab. 5.9. Žádná výrazná závislost použití VA nebyla určena. V případě Cd v palivu CANDU se výrazně mění poměry mezi teplotními koeficienty chladiva a moderátoru.

Nevyrovnaní paliva v palivovém souboru při použití homogenně umístěného VA se použitím VA mění velmi málo, vliv je pozitivní i negativní (Tab. 5.10), oproti použití heterogenně umístěného VA je nevyrovnaní výrazně nižší [A12]. V průběhu vyhořívání se nevyrovnaní snižuje, konzervativně tedy stačí vyšetřovat čerstvé palivo.

Tab. 5.9: Vliv VA na teplotní koeficienty reaktivity paliva (F), chladiva (C), moderátoru (M) a dutinového koeficientu reaktivity.

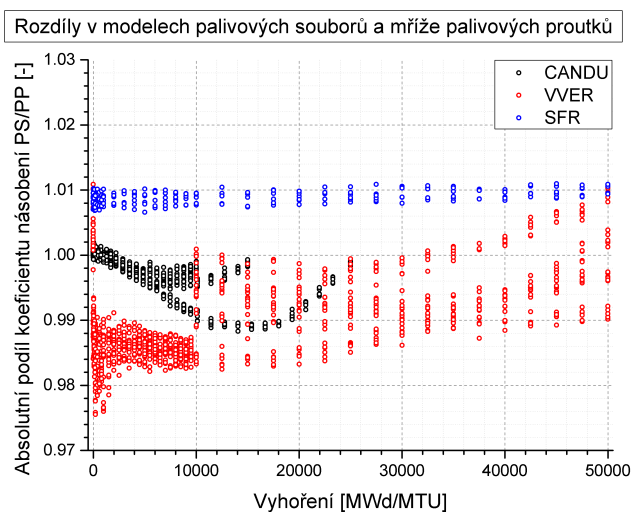
Palivo [-]	VA [-]	$\frac{\delta_F \rho}{\delta T}$ [$10^{-5} K^{-1}$]	$\frac{\delta_C \rho}{\delta T}$ [$10^{-5} K^{-1}$]	$\frac{\delta_M \rho}{\delta T}$ [$10^{-5} K^{-1}$]	$\frac{\delta \rho}{\delta \Delta V}$ [$10^{-5} \%^{-1}$]
CANDU-0.71	bez VA	-0.49	4.72	0.00	17.56
CANDU-0.71	B	-0.61	5.30	-0.56	31.77
CANDU-0.71	Cd	-0.87	12.66	-9.15	25.87
CANDU-0.71	Sm	-1.01	1.68	-10.10	15.97
CANDU-0.71	Gd	-0.92	8.04	-6.52	13.86
CANDU-0.71	Ir	-0.94	7.78	-4.59	20.28
VVER-5.0	bez VA	-1.91	—	-19.02	—
VVER-5.0	B	-1.96	—	-19.25	—
VVER-5.0	Cd	-2.10	—	-24.56	—
VVER-5.0	Sm	-1.87	—	-14.93	—
VVER-5.0	Gd	-1.87	—	-8.11	—
VVER-5.0	Ir	-2.27	—	-31.48	—
SFR-20.0	bez VA	-0.55	-0.11	—	20.26
SFR-20.0	B	-0.58	1.34	—	22.15
SFR-20.0	Cd	-0.48	-0.76	—	22.63
SFR-20.0	Sm	-0.12	0.89	—	31.96
SFR-20.0	Gd	-0.43	0.86	—	30.09
SFR-20.0	Ir	-0.51	0.56	—	35.83



(a) Palivo CANDU.

(b) Palivo VVER.

(c) Palivo SFR.

Obr. 5.19: Kód SERPENT – geometrie výpočetních modelů.**Obr. 5.20:** Vliv přiblížení nekonečné mříže palivových buněk na vyhořívání.**Tab. 5.10:** Vliv VA na nevyrovnání výkonu v palivovém souboru.

Palivo	Relativní výkon nejzatíženějšího PP v PS vůči střednímu PP [-]					
	bez VA	B	Cd	Sm	Gd	Ir
CANDU-0.71	1.1400	1.1435	1.1436	1.1440	1.1431	1.1423
CANDU-0.8	1.1488	1.1530	1.1536	1.1538	1.1529	1.1528
CANDU-1.0	1.1664	1.1743	1.1744	1.1745	1.1741	1.1727
CANDU-2.0	1.2457	1.2623	1.2645	1.2645	1.2606	1.2594
VVER-5.0	1.0619	1.0672	1.0679	1.0664	1.0615	1.0655
VVER-6.0	1.0688	1.0706	1.0725	1.0728	1.0716	1.0702
VVER-8.0	1.0781	1.0801	1.0814	1.0806	1.0798	1.0829
VVER-10.0	1.0837	1.0855	1.0871	1.0856	1.0864	1.0863
SFR-20.0	1.0032	1.0032	1.0038	1.0028	1.0033	1.0030

5.3 Shrnutí výsledků

Výzkum materiálů použitelných jako vyhořívající absorbátory byl proveden ve třech krocích – vytvoření výpočetního aparátu (kód U_WB_1), validace výpočetního aparátu a provedení parametrické úlohy výběru materiálu VA. Výpočty parametrické úlohy byly provedeny kódem U_WB_1 , vybrané varianty byly ověřeny referenčním kódem SERPENT.

Prostorové umístění VA bylo uvažováno v palivu a v pokrytí homogenně v celém palivovém souboru, aby bylo možné vybraného materiálu VA použít ve všech palivových proutcích v dalších analýzách návrhu designu paliva (příměsi pro zvýšení tepelné vodivosti, příměsi pro snížení velikosti zrn ozářeného keramického paliva, příměsi pro zlepšení vlastností interakce palivo-pokrytí při havarijních situacích apod.). Srovnány byly materiály ve formě prvků, nuklidů a dvojice prvků pro kompenzace 25 a 50 % počátečního přebytku reaktivity a kompenzaci při použití 1.0 wt% VA.

6parametrická materiálová metrika MM6 byla použita pro kvalitativní ocenění vhodnosti materiálů jako VA. Maximalizace inženýrské metriky MM6 je dosaženo při ideálních vlastnostech VA: schopnosti kompenzovat počáteční přebytek reaktivity, minimalizovat zbytkovou otravu, udržovat nadkritický stav a ovlivňovat reaktivitu paliva do vyšších hodnot vyhoření paliva. Pro globální srovnání VA bez ohledu na obohacení a typ paliva, umístění VA a kompenzaci reaktivity byly materiály porovnány na základě 9parametrické metriky MM9, určené součtem dílčích metrik MM6.

Paliva CANDU a VVER se z hlediska volby vyhořívajících absorbátorů chovají velmi podobně, výsledky lze kvantitativně rozšířit i na další typy paliv, například pro západní reaktory PWR. Vyšší obohacení paliva má vliv na vyšší požadavek počáteční kompenzace reaktivity, nutný obsah VA je vyšší a některé materiály nemají dostatečné absorpční schopnosti, aby bylo možné dosáhnout zvolenou úroveň počáteční kompenzace reaktivity i při velmi vysokém váhovém podílu VA. Palivem s nejširšími možnostmi využití VA je současné palivo CANDU s přírodním uranem, kde se doposud VA nepoužívá.

Absorpční vlastnosti materiálů a potenciál jejich využití jako vyhořívajících absorbátorů lze ocenit schopností kompenzace reaktivity při jejich malém množství jako příměsi v palivu (zvoleno 1.0 wt% VA). Ze srovnání je patrná výhoda lehkých materiálů s nízkou molární hmotností (typicky Li a B), kde stačí nižší efektivní účinné průřezy oproti těžkým materiálům pro dosažení stejné schopnosti absorpce. Pro palivo SFR jsou efektivní účinné průřezy cca o řád nižší než pro moderovaná paliva CANDU a VVER, výběr VA pro rychlé reaktory je výrazně náročnější.

Obohacování prvků s cílem zvýšit podíl vybraných VA nuklidů se v současnosti využívá u B-10 a experimentálně je ověřeno pro Gd-155 a Gd-157. Dalšími materiály, pro které je obohacení nuklidů snadnou cestou ke zvýšení jejich atraktivity jako VA, jsou Li a Cd s malým podílem nuklidů tvořících prakticky veškerou absorpční schopnost prvku (7.6 at% Li-6, 12.2 at% Cd-113). Především obohacování Li-6 by mohlo být ekonomicky výhodné, protože spotřeba Li stoupá z důvodu využití pro akumulaci energie v bateriích a obohacování Li je uvažováno pro blankety fúzních reaktorů.

Umístění VA v pokrytí vede k nižší efektivitě (nutný vyšší podíl VA), ale stejným kvalitativním výsledkům jako umístění v palivu, volba umístění je na dalších analýzách (např. chemická kompatibilita s matricí paliva).

Srovnání kompenzace 25 % a 50 % pro rychle vyhořívající Cd, Sm a Gd ukazuje, že lze velmi mírně zvýšit časový účinek kompenzace reaktivity, ale za cenu nežádoucího zvyšování reaktivity v počátku vyhořívání. Pomalu vyhořívající absorbátory B a Ir mají obdobně dobrý průběh vyhořívání pro obě hodnoty kompenzace.

Metrika MM6 pro palivo CANDU dosahuje vyšších hodnot než pro palivo VVER, nejnižší hodnoty platí pro palivo SFR. Palivo SFR se chová odlišně, rychle vyhořívající absorbátory (Cd, Sm, Gd) prakticky nevyhořívají, pomalu vyhořívající absorbátory (B, Ir) vyhořívají velmi pomalu, vhodný je především B.

Optimálním prvkem, použitelným jako vyhořívající absorbátor pro všechny uvažované výpočetní varianty podle metriky MM9 (globálně bez ohledu na typ paliva), je Cd, následované Gd, Sm, Ir a B. Z hlediska výborných VA materiálů, kterým doposud nebyl věnován výzkum, lze jmenovat především Ir, In, Li a Re.

Jako dobré vyhořívající absorbátory lze ve všech parametrech metriky MM6 (pro daný typ paliva) identifikovat materiály Li, B, vzácné zeminy, Th a Pa. Z dalších materiálů jsou výhodné Ir, In, Re, Hf a Hg.

Optimální nuklidy, použitelné jako VA, by neměly mít krátký poločas přeměny. Pro tři nejvhodnější nuklidy je poločas přeměny v řádu desítek dní (Pm-148 41d, Be-7 53d, Co-58m 71d) a doporučit je jako VA nelze. Ze stabilních nuklidů jsou jako optimální VA označeny materiály typu Cd-113, Gd-157, Eu-155, Er-169 a Sm-149, které jsou součástí optimálních prvků VA, jako závěr srovnání nuklidů lze doporučit dříve zmíněnou možnost obohacování prvků vybranými nuklidy. Kromě nuklidů kopírující chování svých prvků jsou vhodnými materiály minoritní aktinidy, např. Bk-249 a Cf-250, které však pro svou vzácnost praktického využití nemají.

Vybrané varianty nejvýhodnějších 10 dvojic prvků podle hodnot metriky MM6 mají velmi dobrý průběh vyhořívání, po počátečním transientu je koeficient násobení těchto variant téměř konstantní. V případě paliv VVER a SFR s obsahem Pa už se však jedná o částečný přechod k thoriovému cyklu.

Na základě shlukové analýzy byly prvky VA rozděleny do 6 skupin: 1) vyhořívající absorbátory s rychlým vyhoříváním, 2) vyhořívající absorbátory s pomalým vyhoříváním, 3) absorbující prvky bez výrazné vlastnosti vyhořívání, 4) absorbující prvky nevyhořívající, 5) velmi slabě absorbující prvky a 6) radioaktivní prvky. Prvky jsou rozděleny do skupin podle 2 základních vlastností VA – schopnosti vyhořívát a schopnosti absorbovat.

Referenčním kódem SERPENT bylo na detailním modelu palivového souboru ověřeno, že chyba v přiblížení palivové buňky je přijatelná a byly oceněny doplňující neutronické vlastnosti vyhořívajících absorbátorů – koeficienty reaktivity a nevyrovnání výkonu paliva. Žádná výrazná závislost použití vybraných VA (B, Cd, Sm, Gd, Ir) nebyla určena, homogenní VA má na koeficienty reaktivity a nevyrovnání výkonu malý vliv.

6

Přínosy práce a směry dalšího výzkumu

Hlavním přínosem dizertační práce je vytvoření kódu $U_W B_1$ a komplexní parametrická analýza materiálů vyhořívajících absorbátorů.

Výpočetní kód $U_W B_1$ je určen pro vyhořívání jaderného paliva a lze ho využít nejen pro analýzy vyhořívajících absorbátorů. Kód využívá solver pro řešení Batemanových rovnic metodou CRAM a Monte Carlo solver pro řešení transportní rovnice, které jsou navzájem spojeny novým schématem vyhořívání 2sPC. V současnosti je podporována libovolná 2-D palivová buňka popsána koncentrickými válcovými plochami ve čtvercové nebo trojúhelníkové mříži, kód byl testován na palivech CANDU, LWR a SFR.

Hlavní výhodou kódu $U_W B_1$ je o 1 až 2 řády vyšší rychlost výpočtu než u standardních kódů, která je vhodná k parametrickým úlohám. Kód je schopen určit inventář paliva a průběh koeficientu násobení během vyhořívání. Koeficient násobení může být využit pro výpočty designu paliva. Znalost inventáře paliva je použitelná pro určení veličin vycházejících z inventáře paliva, např. zbytkový výkon, radiační zdroje, aktivity apod.

Druhým přínosem práce je komplexní parametrická analýza materiálů vyhořívajících absorbátorů. Srovnány byly prvky, nuklidy a kombinace prvků umístěné v palivu nebo jeho pokrytí pro různé obohacení paliv CANDU, VVER a SFR. Výsledky výzkumu jsou použitelné pro další technicko-ekonomické analýzy výběru příměsí materiálů jaderného paliva pro zvýšení jeho využití a bezpečnosti. Budoucí výzkum podpořený experimenty pro ověření designu má potenciál návrhu nových typů jaderných paliv.

Výzkum navazující na dizertační práci lze rozdělit do dvou oblastí – další vývoj výpočetního kódu $U_W B_1$ a využití získaných výsledků v dalších technicko-ekonomických analýzách.

Kód $U_W B_1$, navržený pro výzkum vyhořívajících absorbátorů, je možné dále upravit zpřesněním výpočetních metod a rozšířením možností využití kódu. Monte Carlo solver pro transportní rovnici je v současnosti omezen na 2-D model palivové buňky, popis jaderných reakcí je určován ve 3-D a možný přechod na 3-D geometrii palivového souboru by umožnil přesnější výpočty pro paliva, kde má axiální souřadnice významný vliv (např.

varné reaktory).

Schéma vyhořívání 2sPC, navržené pro kód $U_W B_1$, je možné dále zpřesnit s využitím poznatků získaných při validaci kódu. Vliv počátečního transientu při vyhořívání může být popsán dalším transportním výpočtem, ale bez dalších úprav by se výpočetní doba zvýšila. Jedním ze způsobů, jak zvýšit efektivitu Monte Carlo výpočtu, je využití sdružené transportní úlohy pro identifikaci významných reakcí ovlivňujících vyhořívání jaderného paliva.

Paralelizace Monte Carlo solveru $U_W B_1$ zvýšila jeho atraktivitu pro standardní výpočetní techniku, další možností, jak ji využít, je převod části procedur na grafickou kartu. V první fázi by bylo vhodné ověřit možnost převodu generátoru náhodných čísel na grafickou kartu, bez kterého nemá využití grafické karty smysl.

Z pohledu uživatele kód $U_W B_1$ neobsahuje grafické rozhraní, které by mohlo pomoci s tvorbou vstupního souboru a zobrazením výstupních dat. V rámci grafického rozhraní by bylo možné přidat procedury pro výpočet jaderných hustot nuklidů paliva.

Postupný vývoj kódu $U_W B_1$ vyžaduje změny v oblastech, ve kterých bylo použito vyšší míry zjednodušení matematických vztahů nebo fyzikálních dějů, vedoucí k rozdílům mezi $U_W B_1$ a standardními kódy. Při implementování jakékoliv změny je důležité zachovat vysokou rychlost kódu $U_W B_1$, která je jeho hlavní výhodou.

Výsledky parametrické úlohy materiálů použitelných jako vyhořívající absorbátory lze využít v dalších technicko-ekonomických analýzách, protože návrh designu jaderného paliva vyžaduje interdisciplinární přístup. Jakákoliv příměs v jaderném palivu nebo jeho pokrytí může přinést využití i jako vyhořívajícího absorbátoru, vhodné je tyto vlastnosti optimalizovat. Jeden materiál tak může např. primárně sloužit ke zvýšení tepelné vodivosti paliva, ale může mít zároveň vlastnosti vyhořívajícího absorbátoru, případně může zvyšovat bezpečnost při havarijních situacích. Základním požadavkem je chemická kompatibilita příměsi a paliva.

Jedním z perspektivních materiálů bylo určeno Li, jehož izotop Li-6 nese vlastnosti vyhořívajícího absorbátoru, ale má malý podíl v přírodním Li, pouze 7.6 at%. Obohacování Li-6 by mohlo být ekonomicky výhodné, protože spotřeba Li stoupá z důvodu využití pro akumulaci energie v bateriích a obohacování Li je uvažováno pro blankety fúzních reaktorů. Odpadní Li-7 s minimálním vlivem na chemické reakce lze využít v bateriích a snížit cenu obohacování Li. Jedním ze směrů výzkumu by proto mohlo být experimentální ověření obohacování Li-6.

7

Závěr

Dizertační práce je věnována výzkumu v oblasti vyhořívajících absorbátorů. Cílem práce je navrhnout materiály pro budoucí vyhořívající absorbatory primárně na základě neutronově-fyzikálních výpočtů. Analýza všech možných kombinací prvků a nuklidů není v dostupné literatuře provedena.

Motivací pro nové materiály vyhořívajících absorbátorů je posun vývoje jaderných paliv k typům s vyšším vyhořením, vyšší rezistencí vůči havarijním situacím a využití malých modulárních reaktorů, jejichž jaderné palivo má vydržet v provozu až několik desítek let bez výměny, čehož lze dosáhnout pouze s využitím adekvátního vyhořívajícího absorbátoru.

Výzkum materiálů použitelných jako vyhořívající absorbatory byl proveden ve třech krocích – vytvoření výpočetního aparátu (kód $U_W B_1$), validace výpočetního aparátu a provedení parametrické úlohy výběru materiálu vyhořívajícího absorbátoru.

Kód $U_W B_1$ pro rychlý výpočet vyhořívání jaderného paliva je složen ze solveru pro Batemanovy rovnice s využitím metody CRAM, Monte Carlo solveru pro řešení transportní rovnice a schématu vyhořívání 2sPC pro zrychlení výpočtů dvoukrokovou metodou prediktor-korektor. Rychlost kódu $U_W B_1$ je o 1 až 2 řády vyšší než u standardních kódů.

Míra účinnosti vyhořívajících absorbátorů ve formě prvků přírodního složení, nuklidů a jejich kombinace v palivu nebo jeho pokrytí je srovnána podle 6parametrické materiálové metriky MM6 oceňující vlastnosti vyhořívajících absorbátorů, především schopnost kompenzovat počáteční přebytek reaktivity, minimalizovat zbytkovou otravu a ovlivňovat reaktivitu paliva i pro vyšší vyhoření paliva.

Závěrečná diskuze se zaměřuje na materiály vhodných vyhořívajících absorbátorů, z nichž lze kromě doposud studovaných materiálů B a vzácných zemin jmenovat především Li, Pa, Ir, In, Re, Hf a Hg. V případě Li je doporučeno jeho obohacování izotopem Li-6.

Přínosem dizertační práce je vytvoření kódu $U_W B_1$ a komplexní parametrická analýza materiálů vyhořívajících absorbátorů. Výsledky výzkumu jsou použitelné pro další technicko-ekonomické analýzy výběru příměsí materiálů jaderného paliva pro zvýšení jeho využití a bezpečnosti. Budoucí výzkum podpořený experimenty pro ověření designu má potenciál návrhu nových typů jaderných paliv.

Literatura

- [1] REUSS, P. *Neutron Physics*. Les Ulis: EDP Sciences, 2008.
- [2] LEWIS, E. E. a MILLER, W. F. *Computational Methods of Neutron Transport*. La Grange Park: American Nuclear Society, 1993.
- [3] *SCALE: A Comprehensive Modeling and Simulation Suite for Nuclear Safety Analysis and Design*. ORNL/TM-2005/39, Version 6.1, June 2011. Available from Radiation Safety Information Computational Center at Oak Ridge National Laboratory as CCC-785.
- [4] HERMAN, M. a TRKOV, A. *ENDF-6 Formats Manual. Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files ENDF/B-VI and ENDF/B-VII*. CSWEG Document ENDF-102, Report BNL-90365-2009 Rev. 1, 2009.
- [5] ISOTALO, A. E. a AARNIO, P. A. Comparison of depletion algorithms for large systems of nuclides. *Annals of Nuclear Energy*. 2011, **38**(2-3), 261-268.
- [6] MOLER, C. a VAN LOAN, C. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix. *Society of Industrial and Applied Mathematics*. 1978, **20**(4), 801-836.
- [7] MOLER, C. a VAN LOAN, C. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later. *Society of Industrial and Applied Mathematics Review* 2003, **45**(1), 3-49.
- [8] CETNAR, J. General solution of Bateman equations for nuclear transmutations. *Annals of Nuclear Energy*. 2006, **33**(7), 640–645.
- [9] THOMAS, G. F. a BARBER, D. H. Stiffness in radioactive decay chains. *Annals of Nuclear Energy*. 1994, **21**(5), 309–320.
- [10] ISOTALO, A. E. *Computational Methods for Burnup Calculations with Monte Carlo Neutronics*. Helsinki, 2013. Dizertační práce. Aalto University. School of Science. Department of Applied Physics.
- [11] LEPPÄNEN, J. *Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code*. Espoo, 2007. Dizertační práce. Helsinki University of Technology. Department of Engineering Physics and Mathematics.

- [12] KOTLYAR, D. a SHWAGERAUS, E. On the use of predictor–corrector method for coupled Monte Carlo burnup codes. *Annals of Nuclear Energy*. 2013, **58**, 228–237.
- [13] KATOVSKÝ, K. *Modelový výpočet blanketu transmutačních systémů s důrazem na jaderná data a knihovny účinných průřezů*. Praha, 2001. Diplomová práce. České vysoké učení technické v Praze. Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská. Katedra reaktorů.
- [14] VERBOOMEN, B. a HAECK, W. *ALEPH-DLG 1.1.0: Creating Cross Section Libraries for MCNP(X) and ALEPH*. SCK-CEN-BLG-1002 Rev. 0, Belgian Nuclear Research Centre, Mol, Belgie, 2006. [cit. 2010-02-19] Dostupné z: <http://www.nea.fr/html/dbprog/Njoy/Aleph.pdf>.
- [15] CULLEN, D. E. *POINT2012: ENDF/B-VII.1 Final Temperature Dependent Cross Section Library*. LLNL-TR-534938, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, USA, 2012.
- [16] GREENE, N. M. a DUNN, M. E. *The AMPX-2000 Operating System for Producing Continuous Energy and Multi-Group Cross-Sections from Basic Data Libraries using the ENDF/B-6 Formats*. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, USA, 2001.
- [17] LOVECKÝ, M. *Výpočet inventáře palivové kazety*. Praha, 2010. Výzkumný úkol. České vysoké učení technické v Praze. Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská. Katedra reaktorů.
- [18] VOLKOV, V. S., LUKYANOV, A. S., CHAPKUNOV, V. V., SHEVYAKOV, V. P. a YAMNIKOV, V. S. Use of Burnable Poisons in Nuclear Reactors. *Atomic Energy*. 1961, **11**(2), 109-125.
- [19] ASOU, M. a PORTA, J. Prospects for poisoning reactor cores of the future. *Nuclear Engineering and Design*. 1997, **168**(1-3), 261-270.
- [20] ASOU, M. *Rare earth as burnable absorber for length cycle studies for the PWR's*. Paříž, 1995. Dizertační práce. Université Paris-Sud Orsay. Departement d'Electronique et d'Instrumentation Nucleaire.
- [21] VAN DAM, H. Long-term control of excess reactivity by burnable poison in reflector regions. *Annals of Nuclear Energy*. 2000, **27**(1), 63-69.
- [22] JO, Ch. K., KIM, Y. a NOH, J. M. Burnable poison for reactivity management in a very high temperature reactor. *Annals of Nuclear Energy*. 2009, **36**(3), 298–304.
- [23] DAVYDOVA, G. B., KVATOR, V. M. a FEDOSOV, A. M. The Use of Burnable Poison in RBMK Reactors. *Atomic Energy* 1991, **71**(4), 344-345.

- [24] PAVLOV, V. I., SIDORENKO, V. D. a POZDNYAKOV, N. I. Effectiveness of Using Burnable Absorbers in a VVER-1000. *Atomic Energy* 1992, **73**(6), 466-470.
- [25] ROH, G., KIM, Y. a CHO, N. Z. Improvement of power coefficient by using burnable poison in the CANDU reactor. *Nuclear Engineering and Design*. 2011, **241**(5), 1565–1578.
- [26] KANNAN, U. a GANESAN, S. Dysprosium as a resonance absorber and its effect on the coolant void reactivity in Advanced Heavy Water Reactor (AHWR). *Annals of Nuclear Energy*. 2010, **37**(2), 270–276.
- [27] KODOCHIGOV, N., SUKHAREV, Y., MAROVA, E., PONOMAREV-STEPNOY, N., GLUSHKOV, E. a FOMICHENKO, P. Neutronic features of the GT-MHR reactor. *Nuclear Engineering and Design*. 2003, **37**(2-3), 161–171.
- [28] BALYGIN, A. A., BURLAKOV, E. V., KRAYUSHKIN, A. V., NOVIKOV, V. G., TISHKIN, Y. A. a FEDOSOV, A. M. Use of Mixed Uranium-Plutonium Fuel with Different Burnable Absorbers in RBMK Reactors. *Atomic Energy*. 1999, **86**(3), 161-165.
- [29] TALAMO, A., POUCHON, M. A. a VENNERI, F. Alternative configurations for the QUADRISO fuel design concept. *Journal of Nuclear Materials*. 2009, **383**(3), 264–266.
- [30] TALAMO, A. A novel concept of QUADRISO particles. Part II: Utilization for excess reactivity control. *Journal of Nuclear Materials*. 2010, **240**(7), 1919–1927.
- [31] MUNIZ, R., DOS SANTOS, A., YAMAGUCHI, M., ROSSI, P., DOMINGOS, D., MURA, L. a TEXEIRA, A. Neutronic analysis of a U–Mo–Al fuel and europium as burnable poison. *Annals of Nuclear Energy*. 2016, **92**(7), 46–51.
- [32] HERALTOVÁ, L. Possibility of implementation of 6-year fuel cycle at NPP with VVER-440 reactor. *Nuclear Engineering and Design*. 2015, **295**, 40–47.
- [33] CHAN, P. K., PAQUETTE, S. a BONIN, H. W. Variation of burnable neutron absorbers in a heavy water-moderated fuel lattice: A potential to improve CANDU reactor operating margins. *Nuclear Technology*. 2015, **191**(1), 1-14.
- [34] BARCHEVTSEV, V., NINOKATA, H. a ARTISYUK, V. Potential to approach the long-life core in a light water reactor with uranium oxide fuel. *Annals of Nuclear Energy*. 2015, **29**(5), 595–608.
- [35] CHANG, G. S. Enhancing BWR proliferation resistance fuel with minor actinides. *Journal of Nuclear Materials*. 2009, **385**(1), 157–160.

- [36] RONEN, Y., GOLYAND, L. a SHWAGERAUS, E. The potential use of Am-241 as proliferation resistant burnable poison in PWRs. *Annals of Nuclear Energy*. 2010, **37**(2), 201–207.
- [37] LIU, B., HU, W., WANG, K., HUANG, L., OUYANG, X., TU, J. a ZHU, Y. Transmutation of MA in the high flux thermal reactor. *Journal of Nuclear Materials*. 2013, **437**(1-3), 95–101.
- [38] PARATTE, J. M., CHAWLA, R., FRÜH, R., JONEJA, O. P., PELLONI, S. a PRA-LONG, C. Validation efforts for the neutronics of a plutonium-erbium-zirconium oxide inert matrix light water reactor fuel. *Journal of Nuclear Materials*. 1999, **274**(1-2), 120–126.
- [39] HOLLIDAY, K., HARTMANN, T. a CZERWINSKI, K. Synthesis and characterization of zirconia–magnesia inert matrix fuel: Ce homolog studies. *Journal of Nuclear Materials*. 2009, **392**(3), 487–493.
- [40] STANCULESCU, A., KASEMEYER, U., PARATTE, J. M. a CHAWLA, R. Conceptual studies for pressurised water reactor cores employing plutonium-erbium-zirconium oxide inert matrix fuel assemblies. *Journal of Nuclear Materials*. 1999, **274**(1-2), 146–152.
- [41] AKIE, H., SUGO, Y. a OKAWA, R. Core burnup calculation and accidents analyses of a pressurized water reactor partially loaded with rock-like oxide fuel. *Journal of Nuclear Materials*. 2003, **319**, 166–172.
- [42] BARANAEV, Y. D., POPOV, V. V., SHARAPOV, V. N. a TROYANOV, V. M. The feasibility of employing inert matrix ceramic fuels in a Russian light water reactor. *Journal of Nuclear Materials*. 2003, **319**, 154–158.
- [43] PISTNER, C., LIEBERT, W. a FUJARA, F. Neutronics calculations on the impact of burnable poisons to safety and non-proliferation aspects of inert matrix fuel. *Journal of Nuclear Materials*. 2006, **352**(1-3), 268–275.
- [44] LIU, B., HUANG, L., TU, J., LIU, F., CAO, Q., JIA, R., LI, X. a CAI, J. Technetium transmutation in thin layer coating on PWR fuel rods. *Progress in Nuclear Energy*. 2015, **85**, 375–383.
- [45] SANKARI, M., SURYANARAYANA, M. V. a GANGADHARAN, S. Isotope selective excitation of Gd-155 and Gd-157 isotopes from $^9\text{D}_{2-6}$ states using broadband lasers. *Journal of Nuclear Materials*. 1999, **264**(1-2), 122–132.
- [46] SANTALA, M. I. K., DAAVITILA, A. S., LAURANTO, H. M. a SALOMAA, R. R. E. Odd-isotope enrichment studies of Gd by double resonance laser-ionization for

- the production of burnable nuclear reactor poison. *Applied Physics B*. 1997, **64**(3), 339-347.
- [47] CHOE, J., SHIN, H. CH. a LEE, D. New burnable absorber for long-cycle low boron operation of PWRs. *Annals of Nuclear Energy*. 2016, **88**, 272–279.
- [48] KLOOSTERMAN, J. L. Application of boron and gadolinium burnable poison particles in UO_2 and PuO_2 fuels in HTRs. *Annals of Nuclear Energy*. 2003, **30**(17), 1807–1819.
- [49] KIM, Y. N., KIM, J. K. a PARK, W. S. A study on improvement of sodium cooled TRU burner design using burnable poison. *Progress in Nuclear Energy*. 2005, **47**(1), 361-368.
- [50] OBARA, T. a ONOE, T. Flattening of burnup reactivity in long-life prismatic HTGR by particle type burnable poisons. *Annals of Nuclear Energy*. 2013, **57**, 216–220.
- [51] SCHLIECK, M., BERGER, H.-D. a NEUFERT, A. Optimized gadolinia concepts for advanced in-core fuel management in PWRs. *Nuclear Engineering and Design*. 2001, **205**(1-2), 191–198.
- [52] KIM, H. S., JOUNG, Ch. Y., LEE, B. H., KIM, S. H. a SOHN, D. S. Characteristics of $\text{Gd}_x\text{M}_y\text{O}_z$ ($M = \text{Ti, Zr or Al}$) as a burnable absorber. *Journal of Nuclear Materials*. 2008, **372**(2-3), 340–349.
- [53] RHEE, Y. W., KIM, K. S. a SONG, K. W. Densification kinetics of MnO-doped UO_2 -10 wt% Gd_2O_3 compact. *Thermochimica Acta*. 2007, **455**(1-2), 80–85.
- [54] LEE, B. H., KIM, H. S., LEE, S. H. a SOHN, D. S. Measurement of the thermal properties of gadolinium and dysprosium titanate. *Thermochimica Acta*. 2007, **455**(1-2), 100–104.
- [55] UNE, K. Thermal Expansion of UO_2 - Gd_2O_3 Fuel Pellets. *Journal of Nuclear Science and Technology*. 1989, **23**(11), 1020-1022.
- [56] YAMANOUCHI, S., TACHIBANA, T., TSUKUI, K. a OGUMA, M. Melting Temperature of Irradiated UO_2 and UO_2 -2wt% Gd_2O_3 Fuel Pellets up to Burnup of about 30 GWd/tU. *Journal of Nuclear Science and Technology*. 1988, **25**(6), 528-533.
- [57] OETTINGEN, M. a CETNAR, J. Validation of gadolinium burnout using PWR benchmark specification. *Nuclear Engineering and Design*. 2014, **273**, 359–366.
- [58] COULON, J. P., ALLONCLE, R., FILY, A., CHARTIER, F., SALMON, M. a TABARANT, M. Dissolution and analysis of erbium doped cermet fuels. *Progress in Nuclear Energy*. 2001, **38**(3-4), 431-434.

- [59] PORTA, J., BALDI, S., CHAUVIN, J. P. a FOUGERAS, P. Qualification of the neutronic efficiency of erbium at zero burnup. *Progress in Nuclear Energy*. 2001, **38**(3-4), 355-358.
- [60] YAMANAKA, S., KUROSAKI, K., KATAYAMA, M., ADACHI, J., UNO, M., KUROISHI, T. a YAMASAKI, M. Thermal and mechanical properties of (U,Er)O₂. *Journal of Nuclear Materials*. 2009, **389**(1), 115–118.
- [61] GALPERIN, A., GRIMM, P. a RAIZES, V. Modelling and verification of the PWR burnable poison designs by ELCOS code system. *Annals of Nuclear Energy*. 1995, **22**(5), 317-325.
- [62] FRANCESCHINI, F. a PETROVIC, B. Fuel with advanced burnable absorbers design for the IRIS reactor core: Combined Erbia and IFBA. *Annals of Nuclear Energy*. 2009, **36**(8), 1201–1207.
- [63] RENK, T. J., SRIDHARAN, K., HARRINGTON, S. P., JOHNSON, A. K. a LAHODA, E. Incorporation of gadolinium and boron into Zirconium alloy: Surface alloying of immiscible materials using an intense pulsed ion beam. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2010, **268**(17-18), 2666–2678.
- [64] YU, H., YAHYA, M. S. a KIM, Y. A Reduced-Boron OPR1000 Core Based on the BigT Burnable Absorber. *Nuclear Engineering and Technology*. 2016, **48**(2), 318-329.
- [65] PARKS, G. T. A piecewise linear reactivity fuel-cycle model. *Annals of Nuclear Energy*. 1989, **16**(8), 417–422.
- [66] ZAVALJEVSKI, N. Optimization in low leakage PWRs. *Annals of Nuclear Energy*. 1990, **17**(4), 217–220.
- [67] ESPINOSA-PAREDES, G. a GUZMÁN, J. R. Reactor physics analysis for the design of nuclear fuel lattices with burnable poisons. *Nuclear Engineering and Design*. 2011, **241**(12), 5039–5054.
- [68] HAIBACH, B. V. a FELTUS, M. A. A study on the optimization of integral fuel burnable absorbers using deterministic methods. *Annals of Nuclear Energy*. 1997, **24**(11), 835-846.
- [69] HAIBACH, B. V. a FELTUS, M. A. A study on the optimization of integral fuel burnable absorbers using the genetic algorithm based CIGARO fuel management system. *Annals of Nuclear Energy*. 1997, **24**(6), 439-448.
- [70] MAHELRS, Y. P. Core loading pattern optimization based on simulated annealing and successive linear programming. *Annals of Nuclear Energy*. 1995, **22**(1), 29-37.

- [71] ROGERS, T., RAGUSA, J., SCHULTZ, S. a CLAIR, R. Optimization of PWR fuel assembly radial enrichment and burnable poison location based on adaptive simulated annealing. *Nuclear Engineering and Design*. 2009, **239**(6), 1019–1029.
- [72] ALIM, F., IVANOV, K. a LEVINE, S. H. New genetic algorithms (GA) to optimize PWR reactors Part III: The Haling power depletion method for in-core fuel management analysis. *Annals of Nuclear Energy*. 2008, **35**(1), 121–131.
- [73] YILMAZ, S. Multi level optimization of burnable poison utilization for advanced PWR fuel management. University Park, 2005. Dizertační práce. Pennsylvania State University. Department of Mechanical and Nuclear Engineering
- [74] YILMAZ, S., IVANOV, K., LEVINE, S. a MAHGEREFTEH, M. Development of enriched Gd-155 and Gd-157 burnable poison designs for a PWR core. *Annals of Nuclear Energy*. 2006, **33**(5), 439–445.
- [75] GOZALVEZ, J. M., YILMAZ, S., ALIM, F., IVANOV, K. a LEVINE, S. Sensitivity study on determining an efficient set of fuel assembly parameters in training data for designing of neural networks in hybrid genetic algorithms. *Annals of Nuclear Energy*. 2006, **33**(5), 457–465.
- [76] KHOSHVAL, F. a FADAEI, A. Application of a hybrid method based on the combination of genetic algorithm and Hopfield neural network for burnable poison placement. *Annals of Nuclear Energy*. 2012, **47**, 62–68.
- [77] DAI, Ch., WEI, X. TAI, Y. a ZHAO, F. The optimum design of power distribution for pressurized water reactor. *Annals of Nuclear Energy*. 2012, **50**, 126–132.
- [78] FADAEI, A. H. Investigation of burnable poisons effects in reactor core design. *Annals of Nuclear Energy*. 2011, **38**(10), 2238–2246.
- [79] PUSA, M. a LEPPÄNEN, J. Computing the Matrix Exponential in Burnup Calculations. *Nuclear Science and Engineering*. 2010, **164**, 140–150.
- [80] BROWN, F. B. *The MCNP5 Random Number Generator*. Los Alamos National Laboratory report LA-UR-02-3782, Rev. 0, 2002.
- [81] BROWN, F. B. *The MCNP5 Random Number Generator*. Los Alamos National Laboratory report LA-UR-07-7961, Rev. 0, 2006.
- [82] TENEKECIOGLU K. *Progresses in Parallel Random Number Generators*. Ankara, 2005. Dizertační práce. Middle East Technical University.
- [83] RIPLEY, B. D. Thoughts on pseudorandom numbers. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 1990, **31**(1), 153–163.

- [84] RUMMUKAINEN, K. *Monte Carlo simulations in physics*. Department of physical sciences, University of Oulu. [cit. 2014-01-07] Dostupné z: http://www.helsinki.fi/~rummukai/lectures/montecarlo_oulu/lectures/mc_notes1.pdf.
- [85] L'ECUYER, P. Tables of Linear Congruential Generators of Different Sizes and Good Lattice Structure. *Mathematics of Computation*. 1999, **225**(68), 249-260.
- [86] DUFEK, J., KOTLYAR, D., SHWAGERAUS, E. a LËPPANEN, J. Numerical stability of the predictor–corrector method in Monte Carlo burnup calculations of critical reactors. *Annals of Nuclear Energy*. 2013, **56**, 34–38.
- [87] LOVECKÝ, M. *U_{WB1} User's Manual*. Plzeň, 2015. Západečeská univerzita v Plzni. Fakulta elektrotechnická.
- [88] LEPPÄNEN, J. On the use of the continuous-energy Monte Carlo method for lattice physics applications. In: *Proceedings of 2009 International Nuclear Atlantic Conference - INAC 2009, 27 September - 2 October 2009, Rio de Janeiro, Brazil*.
- [89] TAN, P.-N., STEINBACH, M. a KUMAR, V. *Introduction to Data Mining*. New York: Pearson, 2005.

Příloha A

Publikace autora

A.1 Články v impaktovaných časopisech

- [A1] LOVECKÝ, M., PITERKA, L., PREHRADNÝ, J. a ŠKODA, R. $U_W B_1$ – Fast nuclear fuel depletion code. *Annals of Nuclear Energy*. 2014, **71**, 333-339.
- [A2] LOVECKÝ, M., JIŘIČKOVÁ, J. a ŠKODA, R. Monte Carlo solver for $U_W B_1$ nuclear fuel depletion code. *Annals of Nuclear Energy*. 2015, **85**, 778–787.
- [A3] LOVECKÝ, M., ŠKODA, R., HUSSEIN, M., SONG, J. a CHAN, P. The Application of $U_W B_1$ Nuclear Fuel Depletion Code on a CANDU Fuel Bundle. *Progress in Nuclear Energy*. 2016, **90**, 127-139.

A.2 Články v recenzovaných časopisech

- [A4] LOVECKÝ, M., PITERKA, L., PREHRADNÝ, J. a ŠKODA, R. Výpočetní kód $U_W B_1$ pro vyhořívání jaderného paliva. *Bezpečnost jaderné energie*. 2014, **22**(11/12), 359-361.
- [A5] LOVECKÝ, M., JIŘIČKOVÁ, J. a ŠKODA, R. Assessment of Burnable Absorber Fuel Design by $U_W B_1$ Depletion Code. *Acta Polytechnica CTU Proceedings 4 (2016), Šimáně 2016 - Czech-Slovak Student Conference on Nuclear Engineering*. 2016. (in press)
- [A6] LOVECKÝ, M., JIŘIČKOVÁ, J. a ŠKODA, R. Assessment of Burnable Absorber Fuel Design by $U_W B_1$ Depletion Code. *Bezpečnost jaderné energie*. 2016, **24**. (in press)

A.3 Příspěvky na mezinárodních konferencích

- [A7] LOVECKÝ, M., PITERKA, L., PREHRADNÝ, J. a ŠKODA, R. Multigroup Energy Structure for BA Fuel Depletion Analysis. In: *Proceedings of the twenty-third Symposium of AER. 30 September — 4 October 2013, Štrbské Pleso, Slovakia*. ISBN 978-963-7351-21-1, ISBN 978-963-7351-21-8.
- [A8] LOVECKÝ, M., PITERKA, L., PREHRADNÝ, J. a ŠKODA, R. Comparison of Burnable Absorber Elements for VVER Nuclear Fuel. In: *Proceedings of the International Conference VVER2013 Experience and Perspectives after Fukushima. 11-13 November 2013, Prague, Czech Republic*. ISBN 978-80-260-5279-1.
- [A9] LOVECKÝ, M., PREHRADNÝ, J. a ŠKODA, R. Burnable absorber selection with U_{WB1} depletion code. In: *Proceedings of the 2014 22nd International Conference on Nuclear Engineering. 7-11 July 2014, Prague, Czech Republic*. ISBN 978-0-7918-4589-9.
- [A10] PREHRADNÝ, J., LOVECKÝ, M. a ŠKODA, R. Burnable Absorber Comparison Between VVER, PWR and SFR With U_{WB1} and SERPENT Codes. In: *Proceedings of the 2014 22nd International Conference on Nuclear Engineering. 7-11 July 2014, Prague, Czech Republic*. ISBN 978-0-7918-4589-9.
- [A11] LOVECKÝ, M., PREHRADNÝ, J. a ŠKODA, R. Monte Carlo Solver for U_{WB1} Fast Depletion Code. In: *Proceedings of the 2015 23rd International Conference on Nuclear Engineering. 17-21 May 2015, Chiba, Japan*.
- [A12] PREHRADNÝ, J., LOVECKÝ, M. a ŠKODA, R. Rare Earth Oxides as Burnable Absorber for VVER Nuclear Fuel. In: *Proceedings of the 2015 23rd International Conference on Nuclear Engineering. 17-21 May 2015, Chiba, Japan*.
- [A13] LOVECKÝ, M., ŠKODA, R., HUSSEIN, M., SONG, J. a CHAN, P. Burnable Absorbers in CANDU Fuel Bundle Depletion with U_{WB1} Code. In: *Proceedings of the 7th International Conference on Modelling and Simulation in Nuclear Science and Engineering (ICMSNSE 2015). 18-21 October 2015, Ottawa, Ontario, Canada*. ISBN 978-1-926773-20-9.
- [A14] LOVECKÝ, M. a ŠKODA, R. Use of 2sPC Depletion Scheme in U_{WB1} Nuclear Fuel Depletion Code for the Assessment of Burnable Absorber Fuel Design. In: *Proceedings of PHYSOR 2016: Unifying Theory and Experiments in the 21st Century. 1-5 May 2016, Sun Valley, Idaho, USA*. ISBN 978-0-89448-762-2.

A.4 Příspěvky na studentských konferencích

- [A15] LOVECKÝ, M., PITERKA, L., PREHRADNÝ, J. a ŠKODA, R. Výpočetní kód $U_W B_1$ pro vyhořívání jaderného paliva. In: *Sborník 13. Mikulášského setkání. 4-6 December 2013, Brno, Czech Republic*. ISBN 978-80-02-02513-9.
- [A16] LOVECKÝ, M., PREHRADNÝ, J. a ŠKODA, R. Monte Carlo simulace ve výpočetním kódu $U_W B_1$. In: *Sborník 14. Mikulášského setkání. 3-5 December 2014, Brno, Czech Republic*. ISBN 978-80-02-02599-3.
- [A17] LOVECKÝ, M., PREHRADNÝ, J. a ŠKODA, R. Monte Carlo simulation in $U_W B_1$ depletion code. In: *Proceedings of European Nuclear Young Generation Forum 2015. 22-26 June 2015, Paris, France*.
- [A18] LOVECKÝ, M. a ŠKODA, R. Vyhořívání paliva CANDU výpočetním kódem $U_W B_1$. In: *Sborník 15. Mikulášského setkání. 2-4 December 2015, Brno, Czech Republic*.
- [A19] LOVECKÝ, M., JIŘIČKOVÁ, J. a ŠKODA, R. Assessment of Burnable Absorber Fuel Design by $U_W B_1$ Depletion Code. In: *Šimáně 2016: Česko-slovenská studentská konference jaderného inženýrství. 12-13 May 2016, Prague, Czech Republic*.

A.5 Výzkumné zprávy mimo oblast dizertační práce

- [A20] SMUTNÝ, V., LOVECKÝ, M. a KODL, P. *Výpočty zdrojů tepla, ověření radiační ochrany a TH analýzy chlazení bazénu vyhořelého paliva ETE na výkonu 104 %*. Plzeň, 2011. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14061/Dok Rev. 2.
- [A21] KODL, P., DOSTÁL, M., KRUPAŘ, P. a LOVECKÝ, M. *DPS 3.(4).02.03 - Stabilitní ukládací mříž - termohydraulický výpočet. Kompaktní skladovací mříže BSVP EMO34*. Plzeň, 2011. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 13257/Dok Rev. 3.
- [A22] KODL, P. a LOVECKÝ, M. *BSVP ETE, Výkonová křivka tepelného výměníku TG11,12,13W01*. Plzeň, 2011. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14259/Dok Rev. 0.
- [A23] LOVECKÝ, M. a ŠAŠEK, M. *Výpočet časového průběhu zbytkového výkonu po rychlém odstavení reaktoru EDU-3 v 25. cyklu*. Plzeň, 2011. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14286/Dok Rev. 0.
- [A24] LOVECKÝ, M. *Kompaktní skladovací mříž ZAJE sekce 3, 4. Výpočet stínění*. Plzeň, 2012. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 12842/Dok Rev. 0.
- [A25] LOVECKÝ, M. *Výpočet zbytkového výkonu BSVP EDU pro palivo Gd-2M na výkonu 1444 MW*. Plzeň, 2012. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14545/Dok Rev. 0.

- [A26] KONEČNÁ, A., LOVECKÝ, M. a SMUTNÝ, V. *Výpočet stínění Kontejneru 440/84 E*. Plzeň, 2012. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14516/Dok Rev. 0.
- [A27] LOVECKÝ, M. *Porovnání výsledků výpočtů inventáře vyhořelého paliva kódem ORIGEN-S s experimenty*. Plzeň, 2012. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14561/Dok Rev. 0.
- [A28] LOVECKÝ, M. *Určení systematické chyby kódů KENO-VI a MCNP5 při výpočtech kritičnosti*. Plzeň, 2012. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14562/Dok Rev. 0.
- [A29] LOVECKÝ, M. *Výpočet inventáře vyhořelého paliva Gd-2M na výkonu 1444 MW*. Plzeň, 2012. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14644/Dok Rev. 0.
- [A30] LOVECKÝ, M. a ŠAŠEK, M. *OPOS - Optimalizace plnění obalového souboru*. Plzeň, 2012. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14700/Dok Rev. 0.
- [A31] MIKOLÁŠ, P., ŠVARNÝ, J. a LOVECKÝ, M. *Obalový soubor pro přepravu a skladování CASTOR 440/84M pro palivo typu Gd-2M. Výpočet podkritičnosti*. Plzeň, 2012. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 13664/Dok Rev. 2.
- [A32] LOVECKÝ, M. *Podkritičnost nových typů jaderného paliva v systémech skladování EDU*. Plzeň, 2012. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14811/Dok Rev. 0.
- [A33] LOVECKÝ, M. *Zbytkový výkon nových typů jaderného paliva v systémech skladování EDU*. Plzeň, 2012. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14800/Dok Rev. 0.
- [A34] LOVECKÝ, M. *Charakteristiky použitého jaderného paliva VVANTAGE6 a TVSA-T v BSVP ETE*. Plzeň, 2012. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14799/Dok Rev. 0.
- [A35] KRÝSL, V., RAZÝM, V. ŠŮSTEK, J., KODL, P. a LOVECKÝ, M. *Modernizace aplikací makrokódu MOBY-DICK*. Plzeň, 2012. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 12416/Dok Rev. 4.
- [A36] LOVECKÝ, M. *Výpočet stínění obalového souboru CASTOR-440/84M s palivem 3.82, přepravní konfigurace*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14882/Dok Rev. 0, 1.
- [A37] LOVECKÝ, M. *Výpočet stínění obalového souboru CASTOR-440/84M s palivem 3.82, skladovací konfigurace*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14883/Dok Rev. 0, 1.
- [A38] MIKOLÁŠ, P., ŠVARNÝ, J. a LOVECKÝ, M. *Obalový soubor pro přepravu a skladování CASTOR 440/84M pro PS s palivem typu Gd-1, Gd-2 a Gd-2+*. Výpočet podkritičnosti. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15053/Dok Rev. 0.

- [A39] LOVECKÝ, M. *Výpočet stínění obalového souboru CASTOR-440/84M s palivem Gd-1, Gd-2 a Gd-2+, přepravní konfigurace*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14998/Dok Rev. 0.
- [A40] LOVECKÝ, M. *Výpočet stínění obalového souboru CASTOR-440/84M s palivem Gd-1, Gd-2 a Gd-2+, skladovací konfigurace*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14999/Dok Rev. 0.
- [A41] LOVECKÝ, M. a ŠAŠEK, M. *Radioaktivní obsah obalového souboru CASTOR-440/84M s palivem Gd-1, Gd-2 a Gd-2+*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15000/Dok Rev. 0.
- [A42] LOVECKÝ, M. *Aktivace konstrukčních materiálů obalového souboru CASTOR-440/84M s palivem Gd-1, Gd-2 a Gd-2+*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15114/Dok Rev. 0.
- [A43] LOVECKÝ, M. *Výpočet stínění BSVP EDU s palivem Gd-2M*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15150/Dok Rev. 0.
- [A44] LOVECKÝ, M., MIKOLÁŠ, P. a ŠVARNÝ, J. *Podkritičnost uzlů skladování paliva EDU s palivem Gd-2M+*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15180/Dok Rev. 0.
- [A45] MIKOLÁŠ, P., FAZEKAŠOVÁ, Z., ŠAŠEK, M., ŠVARNÝ, J., KRÝSL, V., SMUTNÝ, V., LOVECKÝ, M. a KONEČNÁ, A. *Změna části PpBZ pro zavedení paliva Gd-2M+. 4.3 Jaderné charakteristiky*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15136/Dok Rev. 0.
- [A46] KRÝSL, V., RAZÝM, V. ŠŮSTEK, J., KODL, P. a LOVECKÝ, M. *Modernizace aplikací makrokódu MOBY-DICK*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 12416/Dok Rev. 5.
- [A47] LOVECKÝ, M. a KODL, P. *Zbytkový výkon a tepelné bilance BSVP EDU pro palivo Gd-2M+ a výkon 1444 MW*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15213/Dok Rev. 0.
- [A48] LOVECKÝ, M. *Zpřesněný model pole ionizujícího záření (VVER 440) - projekt CANUT*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15164/Dok Rev. 0.
- [A49] LOVECKÝ, M. *Fyzikální výpočet modernizovaného koše kontejneru (VVER 440 - projekt CANUT)*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15165/Dok Rev. 0.
- [A50] LOVECKÝ, M. *Fyzikální výpočet koše kontejneru (VVER 1000) - projekt CANUT*. Plzeň, 2013. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15166/Dok Rev. 0.

- [A51] LOVECKÝ, M., HEP, J., KONEČNÁ, A. a MIKOLÁŠ, P. *Výpočet radiační situace kolem kapslí odstřižených z MCA*. Plzeň, 2014. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15474/Dok Rev. 0.
- [A52] LOVECKÝ, M. *Výpočet stínění souboru CASTOR-440/84M s palivem Gd-1, Gd-2 a Gd-2+, přepravní konfigurace*. Plzeň, 2014. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14998/Dok Rev. 1.
- [A53] LOVECKÝ, M. *Výpočet stínění obalového souboru CASTOR-440/84M s palivem Gd-1, Gd-2 a Gd-2+, skladovací konfigurace*. Plzeň, 2014. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 14999/Dok Rev. 1.
- [A54] LOVECKÝ, M. a ŠAŠEK, M. *Radioaktivní obsah obalového souboru CASTOR-440/84M s palivem Gd-1, Gd-2 a Gd-2+*. Plzeň, 2014. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15000/Dok Rev. 1.
- [A55] LOVECKÝ, M. *Ukládací obalový soubor pro hlubinné úložiště. Výpočet inventáře pro palivo Gd-2M*. Plzeň, 2014. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15514/Dok Rev. 0.
- [A56] LOVECKÝ, M. *Ukládací obalový soubor pro hlubinné úložiště. Výpočet podkritičnosti pro palivo Gd-2M*. Plzeň, 2014. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15515/Dok Rev. 0.
- [A57] LOVECKÝ, M. *Ukládací obalový soubor pro hlubinné úložiště. Výpočet stínění pro palivo Gd-2M*. Plzeň, 2014. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15516/Dok Rev. 0.
- [A58] LOVECKÝ, M. *Výpočty dávkových příkonů nad hladinou vody v BSVP EDU*. Plzeň, 2014. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15704/Dok Rev. 0.
- [A59] LOVECKÝ, M. *Metodika zavážení obalového souboru CASTOR-440/84M kódem OPOS*. Plzeň, 2014. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15706/Dok Rev. 0.
- [A60] KRÝSL, V., RAZÝM, V. ŠŮSTEK, J., KODL, P. a LOVECKÝ, M. *Modernizace aplikací makrokódu MOBY-DICK*. Plzeň, 2014. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 12416/Dok Rev. 6.
- [A61] LOVECKÝ, M. *Porovnání výpočtů stínění kódem MCNP6 s experimenty*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15984/Dok Rev. 0.
- [A62] LOVECKÝ, M. *Porovnání výpočtů inventáře vyhořelého paliva kódem MCNP6 s experimenty*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15985/Dok Rev. 0.
- [A63] LOVECKÝ, M. *Určení systematické chyby kódu MCNP6 při výpočtech kritičnosti*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15986/Dok Rev. 0.
- [A64] LOVECKÝ, M. *Ukládací obalový soubor pro hlubinné úložiště. Výpočet inventáře pro palivo VVER-440*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15987/Dok Rev. 0.

- [A65] LOVECKÝ, M. *Ukládací obalový soubor pro hlubinné úložiště. Výpočet inventáře pro palivo VVER-1000*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15988/Dok Rev. 0.
- [A66] LOVECKÝ, M. *Ukládací obalový soubor pro hlubinné úložiště. Výpočet inventáře pro palivo AP-1000 a EPR-1600*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15989/Dok Rev. 0.
- [A67] LOVECKÝ, M. *Průkaz podkritičnosti OS pro přepravu a skladování ŠKODA 1000/19*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15996/Dok Rev. 0.
- [A68] LOVECKÝ, M. *Životnost kompaktních mříží EDU z hlediska vyhořívání bóru*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16044/Dok Rev. 0.
- [A69] LOVECKÝ, M. *Kód OPOS verze 1.02 pro zavážení obalového souboru CASTOR-440/84M*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16001/Dok Rev. 0.
- [A70] LOVECKÝ, M. *OPOS GUI - Grafické rozhraní pro kód OPOS verze 1.02*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16108/Dok Rev. 0.
- [A71] LOVECKÝ, M. a SPRINZL, D. *Popis inventáře OS pro přepravu a skladování ŠKODA 1000/19*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16000/Dok Rev. 0.
- [A72] LOVECKÝ, M. *Průkaz stínění - skladování OS pro přepravu a skladování ŠKODA 1000/19*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15997/Dok Rev. 0.
- [A73] LOVECKÝ, M. *Průkaz stínění - přeprava OS pro přepravu a skladování ŠKODA 1000/19*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15998/Dok Rev. 0.
- [A74] LOVECKÝ, M. *Ukládací obalový soubor pro hlubinné úložiště. Výpočet podkritičnosti pro palivo VVER-440*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15990/Dok Rev. 0.
- [A75] LOVECKÝ, M. *Ukládací obalový soubor pro hlubinné úložiště. Výpočet podkritičnosti pro palivo VVER-1000*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15991/Dok Rev. 0.
- [A76] LOVECKÝ, M. *Ukládací obalový soubor pro hlubinné úložiště. Výpočet podkritičnosti pro palivo AP-1000 a EPR-1600*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15992/Dok Rev. 0.
- [A77] LOVECKÝ, M. *Ukládací obalový soubor pro hlubinné úložiště. Výpočet stínění pro palivo VVER-440*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15993/Dok Rev. 0.
- [A78] LOVECKÝ, M. *Ukládací a obalový soubor pro hlubinné úložiště. Výpočet stínění pro palivo VVER-1000*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15994/Dok Rev. 0.

- [A79] LOVECKÝ, M. *Ukládací a obalový soubor pro hlubinné úložiště. Výpočet stínění pro palivo AP-1000 a EPR-1600*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15995/Dok Rev. 0.
- [A80] LOVECKÝ, M. *Průkaz podkritičnosti OS pro přepravu a skladování ŠKODA 1000/19*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15996/Dok Rev. 1.
- [A81] LOVECKÝ, M. *Aktivace konstrukčních materiálů OS pro přepravu a skladování ŠKODA 1000/19*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 15999/Dok Rev. 0.
- [A82] KRÝSL, V., RAZÝM, V. ŠŮSTEK, J., KODL, P. a LOVECKÝ, M. *Modernizace aplikací makrokódu MOBY-DICK*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 12416/Dok Rev. 7.
- [A83] LOVECKÝ, M. a KRÝSL, V. *Upřesnění axiálních okrajových podmínek VVER-440 pro palivo GD-2M+ kódem MCNP6 a definice gama matic pro makrokód MOBY-DICK*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16200/Dok Rev. 0.
- [A84] LOVECKÝ, M. *Výpočty dávkových příkonů nad hladinou vody v BSVP EDU pro palivo GD-2M+*. Plzeň, 2015. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16199/Dok Rev. 0.
- [A85] LOVECKÝ, M. *Systematická chyba kódu MCNP6 při výpočtech kritičnosti paliva HEU*. Plzeň, 2016. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16398/Dok Rev. 0.
- [A86] LOVECKÝ, M. *Výpočet inventáře OS ŠKODA MNSR*. Plzeň, 2016. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16400/Dok Rev. 0.
- [A87] LOVECKÝ, M. *Výpočet podkritičnosti OS ŠKODA MNSR*. Plzeň, 2016. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16399/Dok Rev. 0.
- [A88] LOVECKÝ, M. *Radiační zdroje v místnosti A314 EMO34*. Plzeň, 2016. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16490/Dok Rev. 0.
- [A89] LOVECKÝ, M. *Kód OPOS verze 1.03 pro zavážení obalového souboru CASTOR-440/84M*. Plzeň, 2016. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16001/Dok Rev. 1.
- [A90] LOVECKÝ, M. *Výpočet podkritičnosti OS ŠKODA MNSR*. Plzeň, 2016. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16399/Dok Rev. 1.
- [A91] LOVECKÝ, M. *Ověření podkritičnosti ve skladu čerstvého a vyhořelého paliva TVSA-T.mod.2 na ETE*. Plzeň, 2016. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16500/Dok Rev. 0.
- [A92] LOVECKÝ, M. *Zbytkový výkon a radiační ochrana uzlů skladování paliva TVSA-T.mod.2 na ETE*. Plzeň, 2016. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16555/Dok Rev. 0.

- [A93] LOVECKÝ, M., KRÝSL, V. a VIMPEL, J. *Axiální okrajové podmínky 4-grupového modelu VVER-440 pro palivo Gd-2M+ podle kódu MCNP6*. Plzeň, 2016. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16700/Dok Rev. 0.
- [A94] LOVECKÝ, M. *Výpočet izodóz okolo BSVP EDU v úrovni podlahy postamentu*. Plzeň, 2016. Zpráva ŠKODA JS a. s. Ae 16702/Dok Rev. 0.

Příloha B

Vstupní a výstupní soubory $U_W B_1$

Vyhořívání je kódem $U_W B_1$ modelováno řešením Batemanových rovnic metodou CRAM. Vstupní soubor obsahuje informace o jaderném palivu v čerstvém stavu (celkový počet řešených nuklidů, použité spektrum, počet nuklidů, hustoty jader nuklidů) a informace o časovém průběhu vyhořívání (počet intervalů vyhořívání, hustota toku neutronů a čas). Výstupní soubor tabulárního tvaru tvoří hustoty jader všech řešených nuklidů, jejichž ZAID čísla jsou součástí prvního sloupce a čas v průběhu vyhořívání označuje první řádek.

Transport je $U_W B_1$ Monte Carlo solverem modelován statisticky. Vstup obsahuje numerické parametry Monte Carlo výpočtu (počet simulovaných neutronů a jejich distribuce mezi generacemi), geometrii palivového elementu, soubory s daty popisujícími jaderné reakce, složení paliva, pokrytí a moderátoru (počet nuklidů, jejich pořadí v knihovnách účinných průřezů, jejich pořadí v rozpadové knihovně, jejich ZAID čísla a hustoty jader). Výstupní soubor obsahuje průběh koeficientu násobení v průběhu neaktivní simulace (hodnoty k_{eff}) a aktivní simulace (hodnoty k_{eff} , střední hodnoty a směrodatné odchylky), výslednou hodnotu k_{eff} a energetickou závislost hustoty toku neutronů $\varphi(E)$ v materiálech palivového elementu v grupové struktuře $U_W B_1$.

Z důvodu přehlednosti jsou dlouhé sekvence čísel nahrazeny tečkami (...).

B.1 Vstupní soubor $U_W B_1$

```
1 uwbl vver50 depletion test
2 4 prl_threads - number of threads
3 10000 npg - number of neutrons per generation
4 5 nsng - number of skipped neutron generations
5 105 tmng - total number of neutron generations
6 2 n_ccregion - number of concentric cylinder regions
7 0.38 0.455 rccregion - concentric cylinder region radii
8 0.6375 hpitch - half pitch
9 2 lat - lattice type (1=square, 2=hexagonal)
10 43 idepl - number of depletion intervals
```

```

11  4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01
    4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01
    E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01
    4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000
    E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01 4.00000E+01
    depl_power - irradiation power
12  1.00000E+00 2.00000E+00 3.00000E+00 4.00000E+00 5.00000E+00 1.00000E+01 1.50000E+01 2.00000E+01 2.50000E+01
    3.75000E+01 5.00000E+01 6.25000E+01 7.50000E+01 8.75000E+01 1.00000E+02 1.12500E+02 1.25000E+02 1.37500
    E+02 1.50000E+02 1.62500E+02 1.75000E+02 1.87500E+02 2.00000E+02 2.12500E+02 2.25000E+02 2.37500E+02
    2.50000E+02 3.12500E+02 3.75000E+02 4.37500E+02 5.00000E+02 5.62500E+02 6.25000E+02 6.87500E+02 7.50000
    E+02 8.12500E+02 8.75000E+02 9.37500E+02 1.00000E+03 1.06250E+03 1.12500E+03 1.18750E+03 1.25000E+03
    depl_time - irradiation days
13  1 0 0          depl_type - regions depletion (0=no depletion, 1=power depletion, 2=flux
    depletion)
14  1 2 2          reg_libtype - regions transport/burnup libraries position
15  900.0 625.0 578.0 maxwell_kelvin - regions maxwell temperatures
16  "/home/lovecky/uwb1libs/" folder with uwb1 libraries
17  uwb1zaid0423to3820.txt position of transport nuclides in depletion nuclides
18  uwb1nmass.txt   nuclide mass relative to neutron
19  uwb1qvalues4mc.txt qvalues for inelastic reactions
20  uwb1chi16.txt   xs_n2n chi data library
21  uwb1chi17.txt   xs_n3n chi data library
22  uwb1chi18.txt   xs_fission chi data library
23  uwb1chi91.txt   xs_inelastic_continuum chi data library
24  uwb1nubar.txt   nubar data library
25  uwb1angular02.txt xs_elastic angular distribution data library
26  uwb1angular51t90.txt xs_inelastic_discrete angular distribution data library
27  uwb1angular91.txt xs_inelastic_continuum angular distribution data library
28  uwb1egrid.txt   energy grid for xs data
29  uwb1xscom0900k.txt xs data library no1
30  uwb1xscom0600k.txt xs data library no2
31  uwb1aiiuni.txt  transition matrix Aii, universal flux-independent part
32  uwb1fijphi.txt  transition data  Fij, part of Aij, case-flux-dependent part
33  uwb1aijuni.txt  transition matrix Aij, universal flux-independent part
34  uwb1deplxscom0900k.txt cross section library for depletion reactions no1
35  uwb1deplxscom0600k.txt cross section library for depletion reactions no2
36  uwb1qvalues4depl.txt recoverable energy library for depletion reactions
37  4                number of nuclides in region 1 (fuel)
38  12               number of nuclides in region 2 (clad)
39  4                number of nuclides in region 3 (mod)
40  15  86  80160 4.60685E-02 nuclear densities in region 1 (fuel)
41  16  87  80170 1.75478E-05
42  362 3514 922350 1.16848E-03
43  365 3518 922380 2.19207E-02
44  117 1039 400900 2.19170E-02 nuclear densities in region 2 (clad)
45  118 1041 400910 4.77956E-03
46  119 1042 400920 7.30565E-03
47  121 1044 400940 7.40363E-03

```

```

48 123 1046 400960 1.19276E-03
49 124 1081 410930 4.22623E-04
50 304 2594 721740 1.05594E-08
51 305 2596 721760 3.47139E-07
52 306 2597 721770 1.22753E-06
53 307 2600 721780 1.80037E-06
54 308 2603 721790 8.98867E-07
55 309 2606 721800 2.31514E-06
56 1 1 10010 5.01551E-02 nuclear densities in region 3 (mod)
57 10 41 50100 4.98826E-06
58 11 42 50110 2.00784E-05
59 15 86 80160 2.50775E-02
60 eof

```

B.2 Výstupní soubor $U_W B_1$

```

1 uwb1 vver50 depletion test
2
3
4 22.40 sec: stage 1/5 initial started
5
6 transport calculation for depletion step 0 / 43
7 k-eff values during MC simulation: 1.34170 ... 1.32330 1.32780
8 k-eff averages during MC simulation: 0.00000 ... 1.33608 1.33599
9 k-eff uncertainty during MC simulation: 0.00000 ... 0.00083 0.00083
10 final k-eff: 1.33599 0.00083
11 energy grid: 1.02563E-05 ... 1.00000E-03 1.02353E-03 ... 2.00000E+07
12 neutron flux in region 1: 0.00000E+00 ... 4.69510E-06 6.58765E-06 ... 0.00000E+00
13 neutron flux in region 2: 0.00000E+00 ... 1.00517E-05 1.04392E-05 ... 0.00000E+00
14 neutron flux in region 3: 0.00000E+00 ... 2.03434E-05 2.00261E-05 ... 0.00000E+00
15 193.04 sec: transport calculation finished
16
17
18 197.75 sec: stage 2/5 predictor started
19
20 transport calculation for depletion step 43 / 43
21 k-eff values during MC simulation: 0.94350 ... 0.93660 0.95390
22 k-eff averages during MC simulation: 0.00000 ... 0.94503 0.94512
23 k-eff uncertainty during MC simulation: 0.00000 ... 0.00106 0.00105
24 final k-eff: 0.94512 0.00105
25 energy grid: 1.02563E-05 ... 1.00000E-03 1.02353E-03 ... 2.00000E+07
26 neutron flux in region 1: 0.00000E+00 ... 6.73808E-06 1.12955E-05 ... 0.00000E+00
27 neutron flux in region 2: 0.00000E+00 ... 7.12558E-06 1.22184E-05 ... 0.00000E+00
28 neutron flux in region 3: 0.00000E+00 ... 1.90548E-05 2.69895E-05 ... 0.00000E+00
29 794.79 sec: transport calculation finished
30
31
32 799.65 sec: stage 3/5 corrector started

```

```

33
34 transport calculation for depletion step  43 / 43
35 k-eff values during MC simulation:      0.92700 ... 0.93650 0.94620
36 k-eff averages during MC simulation:    0.00000 ... 0.93613 0.93623
37 k-eff uncertainty during MC simulation:  0.00000 ... 0.00106 0.00106
38 final k-eff:      0.93623 0.00106
39 energy grid:      1.02563E-05 ... 1.00000E-03 1.02353E-03 ... 2.00000E+07
40 neutron flux in region  1:      0.00000E+00 ... 6.78414E-06 1.00690E-05 ... 0.00000E+00
41 neutron flux in region  2:      0.00000E+00 ... 1.22838E-05 1.18613E-05 ... 0.00000E+00
42 neutron flux in region  3:      0.00000E+00 ... 2.02328E-05 2.07305E-05 ... 0.00000E+00
43   1394.27 sec: transport calculation finished
44
45
46   1399.12 sec: stage 4/5 depletor started
47
48 depletion calculation for depletion step  0 / 43
49 fuel burnup:      0.0 Mwd/MTU
50 nuclide positions:      1 ...      86 ...      1799 ...      3514 ...      3820
51 zaid identifiers:      10010 ...      80160 ...      551370 ...      922350 ...      1112720
52 region  1 inventory:    0.00000E+00 ... 4.60685E-02 ... 0.00000E+00 ... 1.16848E-03 ... 0.00000E+00
53 region  2 inventory:    0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00
54 region  3 inventory:    5.01551E-02 ... 2.50775E-02 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00
55   1399.12 sec: depletion calculation finished
56
57 depletion calculation for depletion step  1 / 43
58 fuel burnup:      40.0 Mwd/MTU
59 nuclide positions:      1 ...      86 ...      1799 ...      3514 ...      3820
60 zaid identifiers:      10010 ...      80160 ...      551370 ...      922350 ...      1112720
61 region  1 inventory:    2.10500E-11 ... 4.60685E-02 ... 9.09818E-08 ... 1.16673E-03 ... 0.00000E+00
62 region  2 inventory:    0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00
63 region  3 inventory:    5.01551E-02 ... 2.50775E-02 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00
64   1401.72 sec: depletion calculation finished
65
66 depletion calculation for depletion step  2 / 43
67 fuel burnup:      80.0 Mwd/MTU
68 nuclide positions:      1 ...      86 ...      1799 ...      3514 ...      3820
69 zaid identifiers:      10010 ...      80160 ...      551370 ...      922350 ...      1112720
70 region  1 inventory:    4.21121E-11 ... 4.60685E-02 ... 1.82106E-07 ... 1.16499E-03 ... 0.00000E+00
71 region  2 inventory:    0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00
72 region  3 inventory:    5.01551E-02 ... 2.50775E-02 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00
73   1404.44 sec: depletion calculation finished
...
426 depletion calculation for depletion step  42 / 43
427 fuel burnup:      47500.0 Mwd/MTU
428 nuclide positions:      1 ...      86 ...      1799 ...      3514 ...      3820
429 zaid identifiers:      10010 ...      80160 ...      551370 ...      922350 ...      1112720
430 region  1 inventory:    8.27882E-07 ... 4.60573E-02 ... 1.00366E-04 ... 1.22109E-04 ... 0.00000E+00
431 region  2 inventory:    0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00

```



```

432 region 3 inventory:      5.01551E-02 ... 2.50775E-02 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00
433 1513.95 sec: depletion calculation finished
434
435 depletion calculation for depletion step 43 / 43
436 fuel burnup: 50000.0 Mwd/MTU
437 nuclide positions:      1 ...      86 ...      1799 ...      3514 ...      3820
438 zaid identifiers:      10010 ...      80160 ...      551370 ...      922350 ...      1112720
439 region 1 inventory:      9.33969E-07 ... 4.60565E-02 ... 1.05221E-04 ... 1.04559E-04 ... 0.00000E+00
440 region 2 inventory:      0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00
441 region 3 inventory:      5.01551E-02 ... 2.50775E-02 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00 ... 0.00000E+00
442 1516.57 sec: depletion calculation finished
443
444
445 1516.58 sec: stage 5/5 estimator started
446
447 1516.58 sec: final k-eff table:
448 burnup (Mwd/MTU) k-eff (-)
449      0.00  1.33599
450      40.00 1.31685
451      80.00 1.31320
452     120.00 1.31215
453     160.00 1.31130
454     200.00 1.31054
455     400.00 1.30826
456     600.00 1.30625
457     800.00 1.30467
458    1000.00 1.30324
459    1500.00 1.30041
460    2000.00 1.29657
461    2500.00 1.29234
462    3000.00 1.28782
463    3500.00 1.28307
464    4000.00 1.27816
465    4500.00 1.27312
466    5000.00 1.26801
467    5500.00 1.26284
468    6000.00 1.25766
469    6500.00 1.25247
470    7000.00 1.24729
471    7500.00 1.24213
472    8000.00 1.23700
473    8500.00 1.23191
474    9000.00 1.22686
475    9500.00 1.22186
476   10000.00 1.21690
477   12500.00 1.19820
478   15000.00 1.17511
479   17500.00 1.15309

```

480	20000.00	1.13202	
481	22500.00	1.11220	
482	25000.00	1.09352	
483	27500.00	1.07380	
484	30000.00	1.05298	
485	32500.00	1.03396	
486	35000.00	1.01699	
487	37500.00	1.00159	
488	40000.00	0.98737	
489	42500.00	0.97435	
490	45000.00	0.96229	
491	47500.00	0.95107	
492	50000.00	0.94068	
493	1516.59 sec: calculation finished / 584.80 sec: wall clock time		

Příloha C

Materiálové metriky

6parametrická materiálová metrika MM6 pro palivo VVER-5.0 je pro vyhořívající absorbatory v palivu shrnuta v Tab. C.1 pro řazení podle hmotnosti a v Tab. C.2 pro řazení podle hodnoty MM6. Pro umístění VA v pokrytí je metrika MM6 shrnuta v Tab. C.3 a Tab. C.4. Srovnání 9parametrické materiálové metriky MM9 pro prvky viz Tab. C.5, pro nuklidy Tab. C.6.

C.1 Materiálová metrika MM6

Tab. C.1: Metrika MM6 pro dvojici prvků v palivu VVER-5.0 (řazení podle hmotnosti).

ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
H+Li	0.42355	Ca+In	0.58029	As+Tl	0.38415	Sb+Ir	0.56091
H+B	0.33038	Ca+Sb	0.37412	As+Th	0.41365	Sb+Au	0.45830
H+N	0.26599	Ca+Te	0.58122	As+Pa	0.57403	Sb+Hg	0.57490
H+P	0.23604	Ca+I	0.38411	Se+Br	0.41017	Sb+Tl	0.40393
H+Cl	0.28570	Ca+Xe	0.45152	Se+Kr	0.46656	Sb+Th	0.43003
H+Ca	0.24855	Ca+Pr	0.37744	Se+Ru	0.43284	Sb+Pa	0.56541
H+V	0.26354	Ca+Nd	0.44427	Se+Rh	0.54100	Te+I	0.57500
H+Fe	0.25551	Ca+Sm	0.65222	Se+Pd	0.39783	Te+Xe	0.63918
H+Ni	0.23929	Ca+Eu	0.63043	Se+Ag	0.50680	Te+Pr	0.58105
H+Zn	0.23606	Ca+Gd	0.64817	Se+Cd	0.67503	Te+Nd	0.62395
H+Ga	0.25148	Ca+Tb	0.21245	Se+In	0.60389	Te+Sm	0.73968
H+Ge	0.24539	Ca+Dy	0.53032	Se+Sb	0.41692	Te+Eu	0.74514
H+As	0.24010	Ca+Ho	0.43145	Se+Te	0.59592	Te+Gd	0.73490
H+Se	0.27390	Ca+Er	0.66277	Se+I	0.43608	Te+Tb	0.40439
H+Br	0.25960	Ca+Tm	0.48527	Se+Xe	0.48862	Te+Dy	0.69369
H+Kr	0.31150	Ca+Lu	0.29574	Se+Pr	0.43504	Te+Ho	0.61076

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
H+Ru	0.26229	Ca+Hf	0.56364	Se+Nd	0.47928	Te+Er	0.75047
H+Rh	0.35964	Ca+Ta	0.18590	Se+Sm	0.67174	Te+Tm	0.66291
H+Pd	0.25156	Ca+W	0.37093	Se+Eu	0.62917	Te+Lu	0.45741
H+Ag	0.32697	Ca+Re	0.49246	Se+Gd	0.68159	Te+Hf	0.71378
H+Cd	0.37237	Ca+Ir	0.62944	Se+Tb	0.28930	Te+Ta	0.40103
H+In	0.40894	Ca+Au	0.45973	Se+Dy	0.53906	Te+W	0.56816
H+Sb	0.27578	Ca+Hg	0.64979	Se+Ho	0.47786	Te+Re	0.64741
H+Te	0.36427	Ca+Tl	0.36667	Se+Er	0.65006	Te+Ir	0.74875
H+I	0.27494	Ca+Th	0.40994	Se+Tm	0.51625	Te+Au	0.63933
H+Xe	0.30872	Ca+Pa	0.61925	Se+Lu	0.33732	Te+Hg	0.75617
H+Pr	0.26066	V+Fe	0.42411	Se+Hf	0.58121	Te+Tl	0.60980
H+Nd	0.33122	V+Ni	0.40042	Se+Ta	0.28884	Te+Th	0.61603
H+Sm	0.36961	V+Zn	0.40770	Se+W	0.42283	Te+Pa	0.77521
H+Eu	0.32928	V+Ga	0.41739	Se+Re	0.53302	I+Xe	0.46481
H+Gd	0.37141	V+Ge	0.41486	Se+Ir	0.63078	I+Pr	0.41936
H+Tb	0.21705	V+As	0.39111	Se+Au	0.49520	I+Nd	0.45628
H+Dy	0.40027	V+Se	0.43972	Se+Hg	0.64187	I+Sm	0.60922
H+Ho	0.29592	V+Br	0.39499	Se+Tl	0.44078	I+Eu	0.57546
H+Er	0.33370	V+Kr	0.45931	Se+Th	0.47367	I+Gd	0.61339
H+Tm	0.34111	V+Ru	0.42166	Se+Pa	0.63384	I+Tb	0.28952
H+Lu	0.37362	V+Rh	0.52823	Br+Kr	0.43151	I+Dy	0.50582
H+Hf	0.39517	V+Pd	0.38734	Br+Ru	0.40186	I+Ho	0.45678
H+Ta	0.06902	V+Ag	0.49218	Br+Rh	0.49208	I+Er	0.59991
H+W	0.26832	V+Cd	0.66989	Br+Pd	0.36146	I+Tm	0.49515
H+Re	0.33105	V+In	0.58830	Br+Ag	0.46338	I+Lu	0.33234
H+Ir	0.41432	V+Sb	0.40677	Br+Cd	0.60000	I+Hf	0.54300
H+Au	0.32888	V+Te	0.58360	Br+In	0.54598	I+Ta	0.28880
H+Hg	0.33831	V+I	0.42155	Br+Sb	0.37987	I+W	0.41586
H+Tl	0.24167	V+Xe	0.47276	Br+Te	0.54321	I+Re	0.50446
H+Th	0.17856	V+Pr	0.41638	Br+I	0.39771	I+Ir	0.58529
H+Pa	0.45404	V+Nd	0.46901	Br+Xe	0.44798	I+Au	0.46993
Li+B	0.76247	V+Sm	0.65385	Br+Pr	0.39532	I+Hg	0.58315
Li+N	0.55604	V+Eu	0.61989	Br+Nd	0.43491	I+Tl	0.42170
Li+P	0.64110	V+Gd	0.66602	Br+Sm	0.59185	I+Th	0.44703
Li+Cl	0.56932	V+Tb	0.27857	Br+Eu	0.56295	I+Pa	0.57961
Li+Ca	0.59800	V+Dy	0.52974	Br+Gd	0.60332	Xe+Pr	0.46484
Li+V	0.56683	V+Ho	0.46292	Br+Tb	0.27162	Xe+Nd	0.51384

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Li+Fe	0.58194	V+Er	0.63916	Br+Dy	0.48565	Xe+Sm	0.70508
Li+Ni	0.54476	V+Tm	0.50206	Br+Ho	0.43645	Xe+Eu	0.66346
Li+Zn	0.59332	V+Lu	0.32637	Br+Er	0.57731	Xe+Gd	0.70560
Li+Ga	0.56522	V+Hf	0.57023	Br+Tm	0.47469	Xe+Tb	0.31504
Li+Ge	0.57444	V+Ta	0.27002	Br+Lu	0.30970	Xe+Dy	0.57332
Li+As	0.51881	V+W	0.40937	Br+Hf	0.52642	Xe+Ho	0.50377
Li+Se	0.56812	V+Re	0.51695	Br+Ta	0.26445	Xe+Er	0.68739
Li+Br	0.52782	V+Ir	0.62049	Br+W	0.38798	Xe+Tm	0.54652
Li+Kr	0.59005	V+Au	0.48314	Br+Re	0.48735	Xe+Lu	0.36447
Li+Ru	0.55869	V+Hg	0.62699	Br+Ir	0.56110	Xe+Hf	0.61449
Li+Rh	0.66296	V+Tl	0.41522	Br+Au	0.45502	Xe+Ta	0.30271
Li+Pd	0.51617	V+Th	0.45529	Br+Hg	0.57284	Xe+W	0.45189
Li+Ag	0.63128	V+Pa	0.62672	Br+Tl	0.39574	Xe+Re	0.56602
Li+Cd	0.74176	Fe+Ni	0.40401	Br+Th	0.42482	Xe+Ir	0.66677
Li+In	0.73552	Fe+Zn	0.39814	Br+Pa	0.56573	Xe+Au	0.52202
Li+Sb	0.53581	Fe+Ga	0.41611	Kr+Ru	0.45661	Xe+Hg	0.67303
Li+Te	0.74037	Fe+Ge	0.41035	Kr+Rh	0.55913	Xe+Tl	0.47826
Li+I	0.55117	Fe+As	0.38477	Kr+Pd	0.41996	Xe+Th	0.50908
Li+Xe	0.60515	Fe+Se	0.43876	Kr+Ag	0.53015	Xe+Pa	0.66892
Li+Pr	0.56438	Fe+Br	0.39678	Kr+Cd	0.69063	Pr+Nd	0.46186
Li+Nd	0.59293	Fe+Kr	0.45991	Kr+In	0.61974	Pr+Sm	0.64418
Li+Sm	0.74507	Fe+Ru	0.41549	Kr+Sb	0.43515	Pr+Eu	0.60541
Li+Eu	0.75167	Fe+Rh	0.52258	Kr+Te	0.61343	Pr+Gd	0.66219
Li+Gd	0.74830	Fe+Pd	0.38232	Kr+I	0.45068	Pr+Tb	0.26911
Li+Tb	0.38829	Fe+Ag	0.49304	Kr+Xe	0.50017	Pr+Dy	0.52026
Li+Dy	0.65971	Fe+Cd	0.66994	Kr+Pr	0.45323	Pr+Ho	0.44907
Li+Ho	0.58621	Fe+In	0.58876	Kr+Nd	0.49042	Pr+Er	0.63366
Li+Er	0.75753	Fe+Sb	0.39852	Kr+Sm	0.68475	Pr+Tm	0.49733
Li+Tm	0.64038	Fe+Te	0.58097	Kr+Eu	0.64231	Pr+Lu	0.32236
Li+Lu	0.43526	Fe+I	0.41216	Kr+Gd	0.69384	Pr+Hf	0.56123
Li+Hf	0.70897	Fe+Xe	0.46876	Kr+Tb	0.30520	Pr+Ta	0.25959
Li+Ta	0.37550	Fe+Pr	0.41461	Kr+Dy	0.55607	Pr+W	0.40264
Li+W	0.53665	Fe+Nd	0.46856	Kr+Ho	0.48611	Pr+Re	0.51469
Li+Re	0.65453	Fe+Sm	0.66286	Kr+Er	0.66448	Pr+Ir	0.60963
Li+Ir	0.75516	Fe+Eu	0.61408	Kr+Tm	0.53462	Pr+Au	0.47243
Li+Au	0.60612	Fe+Gd	0.66914	Kr+Lu	0.34760	Pr+Hg	0.62169
Li+Hg	0.76061	Fe+Tb	0.26886	Kr+Hf	0.59613	Pr+Tl	0.40335

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Li+Tl	0.60471	Fe+Dy	0.53029	Kr+Ta	0.30033	Pr+Th	0.44399
Li+Th	0.61057	Fe+Ho	0.46370	Kr+W	0.44950	Pr+Pa	0.61587
Li+Pa	0.76909	Fe+Er	0.64285	Kr+Re	0.54668	Nd+Sm	0.69065
B+N	0.63640	Fe+Tm	0.50617	Kr+Ir	0.64427	Nd+Eu	0.65223
B+P	0.69539	Fe+Lu	0.32544	Kr+Au	0.51030	Nd+Gd	0.69974
B+Cl	0.64443	Fe+Hf	0.56781	Kr+Hg	0.65239	Nd+Tb	0.30232
B+Ca	0.67759	Fe+Ta	0.25984	Kr+Tl	0.46074	Nd+Dy	0.56212
B+V	0.64544	Fe+W	0.40971	Kr+Th	0.49338	Nd+Ho	0.49371
B+Fe	0.67779	Fe+Re	0.51780	Kr+Pa	0.64623	Nd+Er	0.67518
B+Ni	0.63061	Fe+Ir	0.61938	Ru+Rh	0.51991	Nd+Tm	0.54025
B+Zn	0.68093	Fe+Au	0.48156	Ru+Pd	0.38777	Nd+Lu	0.35916
B+Ga	0.64301	Fe+Hg	0.63411	Ru+Ag	0.49197	Nd+Hf	0.60256
B+Ge	0.66643	Fe+Tl	0.40788	Ru+Cd	0.65973	Nd+Ta	0.29143
B+As	0.59694	Fe+Th	0.45180	Ru+In	0.58379	Nd+W	0.43879
B+Se	0.66037	Fe+Pa	0.62141	Ru+Sb	0.40192	Nd+Re	0.55645
B+Br	0.60733	Ni+Zn	0.37752	Ru+Te	0.58297	Nd+Ir	0.66105
B+Kr	0.66236	Ni+Ga	0.39552	Ru+I	0.41949	Nd+Au	0.51836
B+Ru	0.64352	Ni+Ge	0.38494	Ru+Xe	0.46908	Nd+Hg	0.66432
B+Rh	0.73976	Ni+As	0.36400	Ru+Pr	0.41526	Nd+Tl	0.47087
B+Pd	0.59785	Ni+Se	0.41705	Ru+Nd	0.46257	Nd+Th	0.50464
B+Ag	0.71414	Ni+Br	0.37437	Ru+Sm	0.65256	Nd+Pa	0.65636
B+Cd	0.75398	Ni+Kr	0.43055	Ru+Eu	0.61256	Sm+Eu	0.74354
B+In	0.77267	Ni+Ru	0.39511	Ru+Gd	0.65859	Sm+Gd	0.76398
B+Sb	0.61849	Ni+Rh	0.50240	Ru+Tb	0.26881	Sm+Tb	0.54873
B+Te	0.75406	Ni+Pd	0.36022	Ru+Dy	0.52741	Sm+Dy	0.72707
B+I	0.64023	Ni+Ag	0.47289	Ru+Ho	0.45317	Sm+Ho	0.70922
B+Xe	0.68902	Ni+Cd	0.63851	Ru+Er	0.63166	Sm+Er	0.75059
B+Pr	0.64030	Ni+In	0.56155	Ru+Tm	0.50133	Sm+Tm	0.73519
B+Nd	0.67423	Ni+Sb	0.37503	Ru+Lu	0.32324	Sm+Lu	0.58343
B+Sm	0.74515	Ni+Te	0.55219	Ru+Hf	0.56492	Sm+Hf	0.73408
B+Eu	0.70816	Ni+I	0.39211	Ru+Ta	0.26224	Sm+Ta	0.55883
B+Gd	0.75163	Ni+Xe	0.44455	Ru+W	0.40256	Sm+W	0.67835
B+Tb	0.44761	Ni+Pr	0.39287	Ru+Re	0.50905	Sm+Re	0.73508
B+Dy	0.73216	Ni+Nd	0.44505	Ru+Ir	0.61389	Sm+Ir	0.75678
B+Ho	0.66789	Ni+Sm	0.62700	Ru+Au	0.47559	Sm+Au	0.71891
B+Er	0.71134	Ni+Eu	0.58935	Ru+Hg	0.62612	Sm+Hg	0.76026
B+Tm	0.72044	Ni+Gd	0.64074	Ru+Tl	0.42046	Sm+Tl	0.69334

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
B+Lu	0.50252	Ni+Tb	0.25188	Ru+Th	0.45330	Sm+Th	0.73028
B+Hf	0.73807	Ni+Dy	0.50061	Ru+Pa	0.61516	Sm+Pa	0.77666
B+Ta	0.45195	Ni+Ho	0.43662	Rh+Pd	0.47824	Eu+Gd	0.74011
B+W	0.61637	Ni+Er	0.61162	Rh+Ag	0.59108	Eu+Tb	0.42501
B+Re	0.73641	Ni+Tm	0.47700	Rh+Cd	0.72519	Eu+Dy	0.70406
B+Ir	0.77631	Ni+Lu	0.30885	Rh+In	0.67308	Eu+Ho	0.62780
B+Au	0.68895	Ni+Hf	0.54011	Rh+Sb	0.49805	Eu+Er	0.76053
B+Hg	0.77834	Ni+Ta	0.24497	Rh+Te	0.70067	Eu+Tm	0.67980
B+Tl	0.68446	Ni+W	0.38337	Rh+I	0.51316	Eu+Lu	0.47773
B+Th	0.67767	Ni+Re	0.49072	Rh+Xe	0.56618	Eu+Hf	0.73274
B+Pa	0.79723	Ni+Ir	0.58536	Rh+Pr	0.51459	Eu+Ta	0.42345
N+P	0.42645	Ni+Au	0.45398	Rh+Nd	0.56338	Eu+W	0.57855
N+Cl	0.44180	Ni+Hg	0.60161	Rh+Sm	0.72443	Eu+Re	0.69562
N+Ca	0.41497	Ni+Tl	0.38561	Rh+Eu	0.72287	Eu+Ir	0.76220
N+V	0.42406	Ni+Th	0.43109	Rh+Gd	0.72601	Eu+Au	0.64504
N+Fe	0.42288	Ni+Pa	0.59246	Rh+Tb	0.35142	Eu+Hg	0.76821
N+Ni	0.40204	Zn+Ga	0.38969	Rh+Dy	0.61715	Eu+Tl	0.64479
N+Zn	0.41081	Zn+Ge	0.38101	Rh+Ho	0.55500	Eu+Th	0.64016
N+Ga	0.41410	Zn+As	0.35217	Rh+Er	0.73792	Eu+Pa	0.78933
N+Ge	0.41223	Zn+Se	0.41389	Rh+Tm	0.60466	Gd+Tb	0.52667
N+As	0.38804	Zn+Br	0.37198	Rh+Lu	0.40863	Gd+Dy	0.72780
N+Se	0.43923	Zn+Kr	0.44271	Rh+Hf	0.66140	Gd+Ho	0.70247
N+Br	0.39915	Zn+Ru	0.39347	Rh+Ta	0.35290	Gd+Er	0.74863
N+Kr	0.45197	Zn+Rh	0.52195	Rh+W	0.50340	Gd+Tm	0.73016
N+Ru	0.41843	Zn+Pd	0.36450	Rh+Re	0.61634	Gd+Lu	0.56749
N+Rh	0.52894	Zn+Ag	0.47794	Rh+Ir	0.72068	Gd+Hf	0.72508
N+Pd	0.37739	Zn+Cd	0.66738	Rh+Au	0.57372	Gd+Ta	0.53893
N+Ag	0.49594	Zn+In	0.59165	Rh+Hg	0.72920	Gd+W	0.67140
N+Cd	0.66216	Zn+Sb	0.38134	Rh+Tl	0.53309	Gd+Re	0.73003
N+In	0.58797	Zn+Te	0.59461	Rh+Th	0.55786	Gd+Ir	0.75188
N+Sb	0.40019	Zn+I	0.39232	Rh+Pa	0.72342	Gd+Au	0.71171
N+Te	0.58667	Zn+Xe	0.45878	Pd+Ag	0.46666	Gd+Hg	0.75591
N+I	0.41420	Zn+Pr	0.39187	Pd+Cd	0.60686	Gd+Tl	0.68922
N+Xe	0.46899	Zn+Nd	0.44821	Pd+In	0.54234	Gd+Th	0.73088
N+Pr	0.41914	Zn+Sm	0.66790	Pd+Sb	0.36404	Gd+Pa	0.78247
N+Nd	0.46433	Zn+Eu	0.64129	Pd+Te	0.53560	Tb+Dy	0.37553
N+Sm	0.65146	Zn+Gd	0.66748	Pd+I	0.38173	Tb+Ho	0.31418

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
N+Eu	0.61422	Zn+Tb	0.21908	Pd+Xe	0.43631	Tb+Er	0.46396
N+Gd	0.65961	Zn+Dy	0.53438	Pd+Pr	0.38152	Tb+Tm	0.35919
N+Tb	0.26874	Zn+Ho	0.43905	Pd+Nd	0.42765	Tb+Lu	0.19710
N+Dy	0.52199	Zn+Er	0.67213	Pd+Sm	0.60453	Tb+Hf	0.40423
N+Ho	0.45793	Zn+Tm	0.49268	Pd+Eu	0.56261	Tb+Ta	0.15224
N+Er	0.63520	Zn+Lu	0.30000	Pd+Gd	0.61362	Tb+W	0.26738
N+Tm	0.50652	Zn+Hf	0.57696	Pd+Tb	0.24200	Tb+Re	0.36543
N+Lu	0.32058	Zn+Ta	0.19285	Pd+Dy	0.48090	Tb+Ir	0.44762
N+Hf	0.56221	Zn+W	0.37743	Pd+Ho	0.41861	Tb+Au	0.33762
N+Ta	0.27005	Zn+Re	0.50847	Pd+Er	0.58770	Tb+Hg	0.45545
N+W	0.40229	Zn+Ir	0.63933	Pd+Tm	0.46541	Tb+Tl	0.26883
N+Re	0.51344	Zn+Au	0.45798	Pd+Lu	0.29303	Tb+Th	0.30666
N+Ir	0.61396	Zn+Hg	0.66554	Pd+Hf	0.51706	Tb+Pa	0.46143
N+Au	0.47251	Zn+Tl	0.38497	Pd+Ta	0.24407	Dy+Ho	0.55434
N+Hg	0.62478	Zn+Th	0.42534	Pd+W	0.37356	Dy+Er	0.73113
N+Tl	0.42198	Zn+Pa	0.63865	Pd+Re	0.47475	Dy+Tm	0.59533
N+Th	0.45453	Ga+Ge	0.40753	Pd+Ir	0.56945	Dy+Lu	0.39951
N+Pa	0.62090	Ga+As	0.38421	Pd+Au	0.44590	Dy+Hf	0.66867
P+Cl	0.39787	Ga+Se	0.43434	Pd+Hg	0.57651	Dy+Ta	0.34482
P+Ca	0.35580	Ga+Br	0.39280	Pd+Tl	0.37821	Dy+W	0.49350
P+V	0.38184	Ga+Kr	0.44799	Pd+Th	0.41537	Dy+Re	0.61221
P+Fe	0.37469	Ga+Ru	0.41427	Pd+Pa	0.56504	Dy+Ir	0.71807
P+Ni	0.35816	Ga+Rh	0.51953	Ag+Cd	0.71933	Dy+Au	0.55739
P+Zn	0.36588	Ga+Pd	0.38179	Ag+In	0.65921	Dy+Hg	0.72948
P+Ga	0.37674	Ga+Ag	0.48693	Ag+Sb	0.46343	Dy+Tl	0.55000
P+Ge	0.37037	Ga+Cd	0.65593	Ag+Te	0.66036	Dy+Th	0.56328
P+As	0.34123	Ga+In	0.58265	Ag+I	0.48748	Dy+Pa	0.72010
P+Se	0.39765	Ga+Sb	0.40242	Ag+Xe	0.54146	Ho+Er	0.67158
P+Br	0.36216	Ga+Te	0.58152	Ag+Pr	0.48643	Ho+Tm	0.51795
P+Kr	0.42523	Ga+I	0.41826	Ag+Nd	0.53155	Ho+Lu	0.35124
P+Ru	0.38162	Ga+Xe	0.47075	Ag+Sm	0.71800	Ho+Hf	0.59917
P+Rh	0.49381	Ga+Pr	0.41488	Ag+Eu	0.68632	Ho+Ta	0.28324
P+Pd	0.35170	Ga+Nd	0.45502	Ag+Gd	0.71852	Ho+W	0.43470
P+Ag	0.45267	Ga+Sm	0.64796	Ag+Tb	0.32936	Ho+Re	0.54779
P+Cd	0.62216	Ga+Eu	0.61069	Ag+Dy	0.59312	Ho+Ir	0.65441
P+In	0.56356	Ga+Gd	0.65220	Ag+Ho	0.52761	Ho+Au	0.51280
P+Sb	0.37453	Ga+Tb	0.26275	Ag+Er	0.71765	Ho+Hg	0.65828

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
P+Te	0.54685	Ga+Dy	0.52558	Ag+Tm	0.57048	Ho+Tl	0.46211
P+I	0.38607	Ga+Ho	0.44830	Ag+Lu	0.38092	Ho+Th	0.49717
P+Xe	0.44101	Ga+Er	0.63199	Ag+Hf	0.64379	Ho+Pa	0.64990
P+Pr	0.37230	Ga+Tm	0.49470	Ag+Ta	0.31093	Er+Tm	0.69838
P+Nd	0.43032	Ga+Lu	0.32577	Ag+W	0.47309	Er+Lu	0.48973
P+Sm	0.62358	Ga+Hf	0.55882	Ag+Re	0.58383	Er+Hf	0.73340
P+Eu	0.60137	Ga+Ta	0.25688	Ag+Ir	0.69167	Er+Ta	0.43008
P+Gd	0.61713	Ga+W	0.40708	Ag+Au	0.51640	Er+W	0.59081
P+Tb	0.24637	Ga+Re	0.51330	Ag+Hg	0.70272	Er+Re	0.71814
P+Dy	0.52131	Ga+Ir	0.60526	Ag+Tl	0.50323	Er+Ir	0.76781
P+Ho	0.42624	Ga+Au	0.47535	Ag+Th	0.52623	Er+Au	0.66331
P+Er	0.62465	Ga+Hg	0.62038	Ag+Pa	0.69537	Er+Hg	0.77235
P+Tm	0.47273	Ga+Tl	0.41215	Cd+In	0.75082	Er+Tl	0.66732
P+Lu	0.32063	Ga+Th	0.44543	Cd+Sb	0.61865	Er+Th	0.66002
P+Hf	0.53729	Ga+Pa	0.61248	Cd+Te	0.73806	Er+Pa	0.79277
P+Ta	0.20244	Ge+As	0.37880	Cd+I	0.63607	Tm+Lu	0.39822
P+W	0.37641	Ge+Se	0.42416	Cd+Xe	0.68679	Tm+Hf	0.63927
P+Re	0.47301	Ge+Br	0.38850	Cd+Pr	0.64673	Tm+Ta	0.31494
P+Ir	0.59365	Ge+Kr	0.44196	Cd+Nd	0.67716	Tm+W	0.47099
P+Au	0.45759	Ge+Ru	0.40649	Cd+Sm	0.76710	Tm+Re	0.59602
P+Hg	0.62151	Ge+Rh	0.50974	Cd+Eu	0.74166	Tm+Ir	0.68980
P+Tl	0.36773	Ge+Pd	0.37006	Cd+Gd	0.76367	Tm+Au	0.55245
P+Th	0.39527	Ge+Ag	0.47893	Cd+Tb	0.46547	Tm+Hg	0.70319
P+Pa	0.57763	Ge+Cd	0.65235	Cd+Dy	0.71828	Tm+Tl	0.51048
Cl+Ca	0.42674	Ge+In	0.57171	Cd+Ho	0.67301	Tm+Th	0.54163
Cl+V	0.44321	Ge+Sb	0.38860	Cd+Er	0.74610	Tm+Pa	0.69401
Cl+Fe	0.44499	Ge+Te	0.56411	Cd+Tm	0.72519	Lu+Hf	0.46764
Cl+Ni	0.42121	Ge+I	0.40871	Cd+Lu	0.50378	Lu+Ta	0.18341
Cl+Zn	0.43044	Ge+Xe	0.46042	Cd+Hf	0.71916	Lu+W	0.32342
Cl+Ga	0.43326	Ge+Pr	0.40055	Cd+Ta	0.46895	Lu+Re	0.41296
Cl+Ge	0.43035	Ge+Nd	0.45300	Cd+W	0.62190	Lu+Ir	0.50603
Cl+As	0.40654	Ge+Sm	0.64742	Cd+Re	0.72458	Lu+Au	0.37973
Cl+Se	0.45511	Ge+Eu	0.59973	Cd+Ir	0.75443	Lu+Hg	0.50993
Cl+Br	0.41353	Ge+Gd	0.65414	Cd+Au	0.69301	Lu+Tl	0.32437
Cl+Kr	0.47633	Ge+Tb	0.26898	Cd+Hg	0.75702	Lu+Th	0.37564
Cl+Ru	0.42980	Ge+Dy	0.51357	Cd+Tl	0.67533	Lu+Pa	0.51417
Cl+Rh	0.54350	Ge+Ho	0.44732	Cd+Th	0.68845	Hf+Ta	0.38401

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Cl+Pd	0.40024	Ge+Er	0.62025	Cd+Pa	0.77885	Hf+W	0.54002
Cl+Ag	0.50763	Ge+Tm	0.48830	In+Sb	0.55877	Hf+Re	0.65052
Cl+Cd	0.68101	Ge+Lu	0.32072	In+Te	0.74643	Hf+Ir	0.74232
Cl+In	0.60692	Ge+Hf	0.55238	In+I	0.57746	Hf+Au	0.60988
Cl+Sb	0.41760	Ge+Ta	0.24905	In+Xe	0.63636	Hf+Hg	0.74483
Cl+Te	0.59764	Ge+W	0.40098	In+Pr	0.57890	Hf+Tl	0.57277
Cl+I	0.43173	Ge+Re	0.49982	In+Nd	0.62601	Hf+Th	0.59201
Cl+Xe	0.48689	Ge+Ir	0.59622	In+Sm	0.75296	Hf+Pa	0.76324
Cl+Pr	0.43655	Ge+Au	0.47378	In+Eu	0.76045	Ta+W	0.27020
Cl+Nd	0.48002	Ge+Hg	0.61196	In+Gd	0.75542	Ta+Re	0.36895
Cl+Sm	0.67547	Ge+Tl	0.39377	In+Tb	0.41368	Ta+Ir	0.45510
Cl+Eu	0.63043	Ge+Th	0.43390	In+Dy	0.68482	Ta+Au	0.33255
Cl+Gd	0.68217	Ge+Pa	0.60336	In+Ho	0.61501	Ta+Hg	0.46514
Cl+Tb	0.28232	As+Se	0.40864	In+Er	0.76663	Ta+Tl	0.24657
Cl+Dy	0.53926	As+Br	0.36484	In+Tm	0.66648	Ta+Th	0.31753
Cl+Ho	0.47571	As+Kr	0.42404	In+Lu	0.46940	Ta+Pa	0.46447
Cl+Er	0.65797	As+Ru	0.37987	In+Hf	0.73200	W+Re	0.50040
Cl+Tm	0.52178	As+Rh	0.49398	In+Ta	0.41691	W+Ir	0.60554
Cl+Lu	0.33776	As+Pd	0.35188	In+W	0.57097	W+Au	0.46707
Cl+Hf	0.58363	As+Ag	0.46277	In+Re	0.67959	W+Hg	0.60806
Cl+Ta	0.27838	As+Cd	0.61587	In+Ir	0.76614	W+Tl	0.41379
Cl+W	0.42044	As+In	0.54528	In+Au	0.64272	W+Th	0.43942
Cl+Re	0.53361	As+Sb	0.36699	In+Hg	0.77019	W+Pa	0.60359
Cl+Ir	0.63530	As+Te	0.54588	In+Tl	0.60640	Re+Ir	0.70989
Cl+Au	0.49177	As+I	0.38382	In+Th	0.62041	Re+Au	0.56404
Cl+Hg	0.64262	As+Xe	0.43877	In+Pa	0.78580	Re+Hg	0.72318
Cl+Tl	0.43803	As+Pr	0.38457	Sb+Te	0.54447	Re+Tl	0.52305
Cl+Th	0.47532	As+Nd	0.43000	Sb+I	0.40054	Re+Th	0.54782
Cl+Pa	0.64757	As+Sm	0.60574	Sb+Xe	0.44467	Re+Pa	0.71404
Ca+V	0.38239	As+Eu	0.56904	Sb+Pr	0.39985	Ir+Au	0.65326
Ca+Fe	0.38899	As+Gd	0.61943	Sb+Nd	0.43773	Ir+Hg	0.77173
Ca+Ni	0.36003	As+Tb	0.24102	Sb+Sm	0.59488	Ir+Tl	0.64653
Ca+Zn	0.37263	As+Dy	0.49386	Sb+Eu	0.56208	Ir+Th	0.64081
Ca+Ga	0.38516	As+Ho	0.42446	Sb+Gd	0.59727	Ir+Pa	0.78987
Ca+Ge	0.37188	As+Er	0.59924	Sb+Tb	0.27781	Au+Hg	0.68644
Ca+As	0.35150	As+Tm	0.47208	Sb+Dy	0.49126	Au+Tl	0.48500
Ca+Se	0.40586	As+Lu	0.30008	Sb+Ho	0.43942	Au+Th	0.51575

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Ca+Br	0.36754	As+Hf	0.52661	Sb+Er	0.57689	Au+Pa	0.67422
Ca+Kr	0.43321	As+Ta	0.24489	Sb+Tm	0.47192	Hg+Tl	0.68303
Ca+Ru	0.38744	As+W	0.37192	Sb+Lu	0.31931	Hg+Th	0.65734
Ca+Rh	0.51196	As+Re	0.47977	Sb+Hf	0.52799	Hg+Pa	0.79559
Ca+Pd	0.35189	As+Ir	0.57505	Sb+Ta	0.26227	Tl+Th	0.43062
Ca+Ag	0.46729	As+Au	0.44285	Sb+W	0.39066	Tl+Pa	0.64672
Ca+Cd	0.65195	As+Hg	0.58278	Sb+Re	0.48263	Th+Pa	0.65314

Tab. C.2: Metrika MM6 pro dvojici prvků v palivu VVER-5.0 (řazení podle hodnoty MM6).

ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
B+Pa	0.79723	Se+Ir	0.63078	Ga+Re	0.51330	As+Th	0.41365
Hg+Pa	0.79559	B+Ni	0.63061	Rh+I	0.51316	Cl+Br	0.41353
Er+Pa	0.79277	Cl+Eu	0.63043	Ho+Au	0.51280	Lu+Re	0.41296
Ir+Pa	0.78987	Ca+Eu	0.63043	Ca+Rh	0.51196	N+Ge	0.41223
Eu+Pa	0.78933	Ca+Ir	0.62944	Tm+Tl	0.51048	Fe+I	0.41216
In+Pa	0.78580	Se+Eu	0.62917	Kr+Au	0.51030	Ga+Tl	0.41215
Gd+Pa	0.78247	Eu+Ho	0.62780	Lu+Hg	0.50993	N+Zn	0.41081
Cd+Pa	0.77885	Ni+Sm	0.62700	Ge+Rh	0.50974	Fe+Ge	0.41035
B+Hg	0.77834	V+Hg	0.62699	Xe+Th	0.50908	Se+Br	0.41017
Sm+Pa	0.77666	V+Pa	0.62672	Ru+Re	0.50905	Ca+Th	0.40994
B+Ir	0.77631	Ru+Hg	0.62612	Zn+Re	0.50847	Fe+W	0.40971
Te+Pa	0.77521	In+Nd	0.62601	Cl+Ag	0.50763	V+W	0.40937
B+In	0.77267	N+Hg	0.62478	Se+Ag	0.50680	H+In	0.40894
Er+Hg	0.77235	P+Er	0.62465	N+Tm	0.50652	Ge+I	0.40871
Ir+Hg	0.77173	Te+Nd	0.62395	Fe+Tm	0.50617	As+Se	0.40864
In+Hg	0.77019	P+Sm	0.62358	Lu+Ir	0.50603	Rh+Lu	0.40863
Li+Pa	0.76909	P+Cd	0.62216	I+Dy	0.50582	Fe+Tl	0.40788
Eu+Hg	0.76821	Cd+W	0.62190	Nd+Th	0.50464	V+Zn	0.40770
Er+Ir	0.76781	Pr+Hg	0.62169	I+Re	0.50446	Ga+Ge	0.40753
Cd+Sm	0.76710	P+Hg	0.62151	Cd+Lu	0.50378	Ga+W	0.40708
In+Er	0.76663	Fe+Pa	0.62141	Xe+Ho	0.50377	V+Sb	0.40677
In+Ir	0.76614	N+Pa	0.62090	Rh+W	0.50340	Cl+As	0.40654
Sm+Gd	0.76398	V+Ir	0.62049	Ag+Tl	0.50323	Ge+Ru	0.40649
Cd+Gd	0.76367	In+Th	0.62041	B+Lu	0.50252	Ca+Se	0.40586
Hf+Pa	0.76324	Ga+Hg	0.62038	Ni+Rh	0.50240	Te+Tb	0.40439

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Li+B	0.76247	Ge+Er	0.62025	V+Tm	0.50206	Tb+Hf	0.40423
Eu+Ir	0.76220	V+Eu	0.61989	Ru+Tm	0.50133	Fe+Ni	0.40401
Li+Hg	0.76061	Kr+In	0.61974	Ni+Dy	0.50061	Sb+Tl	0.40393
Eu+Er	0.76053	As+Gd	0.61943	W+Re	0.50040	Pr+Tl	0.40335
In+Eu	0.76045	Fe+Ir	0.61938	Kr+Xe	0.50017	Pr+W	0.40264
Sm+Hg	0.76026	Ca+Pa	0.61925	Ge+Re	0.49982	Ru+W	0.40256
Li+Er	0.75753	Cd+Sb	0.61865	Rh+Sb	0.49805	Ga+Sb	0.40242
Cd+Hg	0.75702	B+Sb	0.61849	Pr+Tm	0.49733	N+W	0.40229
Sm+Ir	0.75678	Rh+Dy	0.61715	Ho+Th	0.49717	N+Ni	0.40204
Te+Hg	0.75617	P+Gd	0.61713	N+Ag	0.49594	Ru+Sb	0.40192
Gd+Hg	0.75591	B+W	0.61637	Se+Au	0.49520	Br+Ru	0.40186
In+Gd	0.75542	Rh+Re	0.61634	I+Tm	0.49515	Te+Ta	0.40103
Li+Ir	0.75516	Te+Th	0.61603	Ga+Tm	0.49470	Ge+W	0.40098
Cd+Ir	0.75443	As+Cd	0.61587	As+Rh	0.49398	Ge+Pr	0.40055
B+Te	0.75406	Pr+Pa	0.61587	As+Dy	0.49386	Sb+I	0.40054
B+Cd	0.75398	Ru+Pa	0.61516	P+Rh	0.49381	V+Ni	0.40042
In+Sm	0.75296	In+Ho	0.61501	Nd+Ho	0.49371	H+Dy	0.40027
Gd+Ir	0.75188	Xe+Hf	0.61449	Dy+W	0.49350	Cl+Pd	0.40024
Li+Eu	0.75167	N+Eu	0.61422	Kr+Th	0.49338	N+Sb	0.40019
B+Gd	0.75163	Fe+Eu	0.61408	Fe+Ag	0.49304	Sb+Pr	0.39985
Cd+In	0.75082	N+Ir	0.61396	Zn+Tm	0.49268	Dy+Lu	0.39951
Sm+Er	0.75059	Ru+Ir	0.61389	Ca+Re	0.49246	N+Br	0.39915
Te+Er	0.75047	Pd+Gd	0.61362	V+Ag	0.49218	Fe+Sb	0.39852
Te+Ir	0.74875	Kr+Te	0.61343	Br+Rh	0.49208	Tm+Lu	0.39822
Gd+Er	0.74863	I+Gd	0.61339	Ru+Ag	0.49197	Fe+Zn	0.39814
Li+Gd	0.74830	Ru+Eu	0.61256	Cl+Au	0.49177	P+Cl	0.39787
In+Te	0.74643	Ga+Pa	0.61248	Sb+Dy	0.49126	Se+Pd	0.39783
Cd+Er	0.74610	Dy+Re	0.61221	Ni+Re	0.49072	Br+I	0.39771
B+Sm	0.74515	Ge+Hg	0.61196	Kr+Nd	0.49042	P+Se	0.39765
Te+Eu	0.74514	Ni+Er	0.61162	Er+Lu	0.48973	Fe+Br	0.39678
Li+Sm	0.74507	Te+Ho	0.61076	Se+Xe	0.48862	Br+Tl	0.39574
Hf+Hg	0.74483	Ga+Eu	0.61069	Ge+Tm	0.48830	Ni+Ga	0.39552
Sm+Eu	0.74354	Li+Th	0.61057	Ag+I	0.48748	Br+Pr	0.39532
Hf+Ir	0.74232	Hf+Au	0.60988	Br+Re	0.48735	P+Th	0.39527
Li+Cd	0.74176	Te+Tl	0.60980	Ga+Ag	0.48693	H+Hf	0.39517
Cd+Eu	0.74166	Pr+Ir	0.60963	Cl+Xe	0.48689	Ni+Ru	0.39511
Li+Te	0.74037	I+Sm	0.60922	Ag+Pr	0.48643	V+Br	0.39499

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Eu+Gd	0.74011	W+Hg	0.60806	Kr+Ho	0.48611	Ge+Tl	0.39377
B+Rh	0.73976	B+Br	0.60733	Br+Dy	0.48565	Zn+Ru	0.39347
Te+Sm	0.73968	Cl+In	0.60692	Ca+Tm	0.48527	Ni+Pr	0.39287
B+Hf	0.73807	Pd+Cd	0.60686	Au+Tl	0.48500	Ga+Br	0.39280
Cd+Te	0.73806	In+Tl	0.60640	V+Au	0.48314	Zn+I	0.39232
Rh+Er	0.73792	Li+Au	0.60612	Sb+Re	0.48263	Ni+I	0.39211
B+Re	0.73641	As+Sm	0.60574	Fe+Au	0.48156	Zn+Pr	0.39187
Li+In	0.73552	W+Ir	0.60554	Pd+Dy	0.48090	V+As	0.39111
Sm+Tm	0.73519	Pr+Eu	0.60541	Cl+Nd	0.48002	Sb+W	0.39066
Sm+Re	0.73508	Ga+Ir	0.60526	As+Re	0.47977	Zn+Ga	0.38969
Te+Gd	0.73490	Li+Xe	0.60515	Se+Nd	0.47928	Ca+Fe	0.38899
Sm+Hf	0.73408	Li+Tl	0.60471	Ge+Ag	0.47893	Ge+Sb	0.38860
Er+Hf	0.73340	Rh+Tm	0.60466	Xe+Tl	0.47826	Ge+Br	0.38850
Eu+Hf	0.73274	Pd+Sm	0.60453	Rh+Pd	0.47824	Li+Tb	0.38829
B+Dy	0.73216	Se+In	0.60389	Zn+Ag	0.47794	N+As	0.38804
In+Hf	0.73200	W+Pa	0.60359	Se+Ho	0.47786	Br+W	0.38798
Dy+Er	0.73113	Ge+Pa	0.60336	Eu+Lu	0.47773	Ru+Pd	0.38777
Gd+Th	0.73088	Br+Gd	0.60332	Ni+Tm	0.47700	Ca+Ru	0.38744
Sm+Th	0.73028	Nd+Hf	0.60256	Cl+Kr	0.47633	V+Pd	0.38734
Gd+Tm	0.73016	Ni+Hg	0.60161	Cl+Ho	0.47571	P+I	0.38607
Gd+Re	0.73003	P+Eu	0.60137	Ru+Au	0.47559	Ni+Tl	0.38561
Dy+Hg	0.72948	Br+Cd	0.60000	Ga+Au	0.47535	Ca+Ga	0.38516
Rh+Hg	0.72920	I+Er	0.59991	Cl+Th	0.47532	Zn+Tl	0.38497
Gd+Dy	0.72780	Ge+Eu	0.59973	Pd+Re	0.47475	Ni+Ge	0.38494
Sm+Dy	0.72707	As+Er	0.59924	Br+Tm	0.47469	Fe+As	0.38477
Rh+Gd	0.72601	Ho+Hf	0.59917	Ge+Au	0.47378	As+Pr	0.38457
Rh+Cd	0.72519	Li+Ca	0.59800	Se+Th	0.47367	Ga+As	0.38421
Cd+Tm	0.72519	B+Pd	0.59785	Ag+W	0.47309	As+Tl	0.38415
Gd+Hf	0.72508	Cl+Te	0.59764	P+Re	0.47301	Ca+I	0.38411
Cd+Re	0.72458	Sb+Gd	0.59727	Ni+Ag	0.47289	Hf+Ta	0.38401
Rh+Sm	0.72443	B+As	0.59694	V+Xe	0.47276	As+I	0.38382
Rh+Pa	0.72342	Ge+Ir	0.59622	P+Tm	0.47273	Ni+W	0.38337
Re+Hg	0.72318	Kr+Hf	0.59613	N+Au	0.47251	Ca+V	0.38239
Rh+Eu	0.72287	Tm+Re	0.59602	Pr+Au	0.47243	Fe+Pd	0.38232
Rh+Ir	0.72068	Se+Te	0.59592	As+Tm	0.47208	P+V	0.38184
B+Tm	0.72044	Dy+Tm	0.59533	Sb+Tm	0.47192	Ga+Pd	0.38179
Dy+Pa	0.72010	Sb+Sm	0.59488	Tm+W	0.47099	Pd+I	0.38173

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Ag+Cd	0.71933	Zn+Te	0.59461	Nd+Tl	0.47087	P+Ru	0.38162
Cd+Hf	0.71916	P+Ir	0.59365	Ga+Xe	0.47075	Pd+Pr	0.38152
Sm+Au	0.71891	Li+Zn	0.59332	I+Au	0.46993	Zn+Sb	0.38134
Ag+Gd	0.71852	Ag+Dy	0.59312	In+Lu	0.46940	Zn+Ge	0.38101
Cd+Dy	0.71828	Li+Nd	0.59293	Ru+Xe	0.46908	Ag+Lu	0.38092
Er+Re	0.71814	Ni+Pa	0.59246	V+Nd	0.46901	As+Ru	0.37987
Dy+Ir	0.71807	Hf+Th	0.59201	N+Xe	0.46899	Br+Sb	0.37987
Ag+Sm	0.71800	Br+Sm	0.59185	Cd+Ta	0.46895	Lu+Au	0.37973
Ag+Er	0.71765	Zn+In	0.59165	Fe+Xe	0.46876	Ge+As	0.37880
B+Ag	0.71414	Rh+Ag	0.59108	Fe+Nd	0.46856	Pd+Tl	0.37821
Re+Pa	0.71404	Er+W	0.59081	Lu+Hf	0.46764	Ni+Zn	0.37752
Te+Hf	0.71378	Li+Kr	0.59005	Ca+Ag	0.46729	Ca+Pr	0.37744
Gd+Au	0.71171	Ni+Eu	0.58935	W+Au	0.46707	Zn+W	0.37743
B+Er	0.71134	Fe+In	0.58876	Pd+Ag	0.46666	N+Pd	0.37739
Re+Ir	0.70989	V+In	0.58830	Se+Kr	0.46656	P+Ga	0.37674
Sm+Ho	0.70922	N+In	0.58797	Cd+Tb	0.46547	P+W	0.37641
Li+Hf	0.70897	Pd+Er	0.58770	Pd+Tm	0.46541	Lu+Th	0.37564
B+Eu	0.70816	N+Te	0.58667	Ta+Hg	0.46514	Tb+Dy	0.37553
Xe+Gd	0.70560	Li+Ho	0.58621	Xe+Pr	0.46484	Li+Ta	0.37550
Xe+Sm	0.70508	Ni+Ir	0.58536	I+Xe	0.46481	Ni+Sb	0.37503
Eu+Dy	0.70406	I+Ir	0.58529	Ta+Pa	0.46447	P+Fe	0.37469
Tm+Hg	0.70319	Ag+Re	0.58383	N+Nd	0.46433	P+Sb	0.37453
Ag+Hg	0.70272	Ru+In	0.58379	Tb+Er	0.46396	Ni+Br	0.37437
Gd+Ho	0.70247	Cl+Hf	0.58363	Fe+Ho	0.46370	Ca+Sb	0.37412
Rh+Te	0.70067	V+Te	0.58360	Ag+Sb	0.46343	H+Lu	0.37362
Nd+Gd	0.69974	Sm+Lu	0.58343	Br+Ag	0.46338	Pd+W	0.37356
Er+Tm	0.69838	I+Hg	0.58315	V+Ho	0.46292	Ca+Zn	0.37263
Eu+Re	0.69562	Ru+Te	0.58297	As+Ag	0.46277	H+Cd	0.37237
B+P	0.69539	As+Hg	0.58278	Ru+Nd	0.46257	P+Pr	0.37230
Ag+Pa	0.69537	Ga+In	0.58265	Ho+Tl	0.46211	Zn+Br	0.37198
Tm+Pa	0.69401	Li+Fe	0.58194	Pr+Nd	0.46186	As+W	0.37192
Kr+Gd	0.69384	Ga+Te	0.58152	Tb+Pa	0.46143	Ca+Ge	0.37188
Te+Dy	0.69369	Ca+Te	0.58122	Kr+Tl	0.46074	H+Gd	0.37141
Sm+Tl	0.69334	Se+Hf	0.58121	Ge+Xe	0.46042	Ca+W	0.37093
Cd+Au	0.69301	Te+Pr	0.58105	Fe+Kr	0.45991	P+Ge	0.37037
Ag+Ir	0.69167	Fe+Te	0.58097	Ca+Au	0.45973	Ge+Pd	0.37006
Nd+Sm	0.69065	Ca+In	0.58029	V+Kr	0.45931	H+Sm	0.36961

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Kr+Cd	0.69063	I+Pa	0.57961	Zn+Xe	0.45878	Ta+Re	0.36895
Tm+Ir	0.68980	In+Pr	0.57890	Sb+Au	0.45830	P+Tl	0.36773
Gd+Tl	0.68922	Eu+W	0.57855	Zn+Au	0.45798	Ca+Br	0.36754
B+Xe	0.68902	P+Pa	0.57763	N+Ho	0.45793	As+Sb	0.36699
B+Au	0.68895	In+I	0.57746	P+Au	0.45759	Ca+Tl	0.36667
Cd+Th	0.68845	Br+Er	0.57731	Te+Lu	0.45741	P+Zn	0.36588
Xe+Er	0.68739	Zn+Hf	0.57696	I+Ho	0.45678	Tb+Re	0.36543
Cd+Xe	0.68679	Sb+Er	0.57689	Kr+Ru	0.45661	As+Br	0.36484
Au+Hg	0.68644	Pd+Hg	0.57651	I+Nd	0.45628	Zn+Pd	0.36450
Ag+Eu	0.68632	I+Eu	0.57546	Tb+Hg	0.45545	Xe+Lu	0.36447
In+Dy	0.68482	As+Ir	0.57505	V+Th	0.45529	H+Te	0.36427
Kr+Sm	0.68475	Te+I	0.57500	Cl+Se	0.45511	Pd+Sb	0.36404
B+Tl	0.68446	Sb+Hg	0.57490	Ta+Ir	0.45510	Ni+As	0.36400
Hg+Tl	0.68303	Li+Ge	0.57444	Ga+Nd	0.45502	P+Br	0.36216
Cl+Gd	0.68217	As+Pa	0.57403	Br+Au	0.45502	Br+Pd	0.36146
Se+Gd	0.68159	Rh+Au	0.57372	N+Th	0.45453	Ni+Pd	0.36022
Cl+Cd	0.68101	Xe+Dy	0.57332	H+Pa	0.45404	Ca+Ni	0.36003
B+Zn	0.68093	Br+Hg	0.57284	Ni+Au	0.45398	H+Rh	0.35964
Eu+Tm	0.67980	Hf+Tl	0.57277	Ru+Th	0.45330	Tb+Tm	0.35919
In+Re	0.67959	Ge+In	0.57171	Kr+Pr	0.45323	Nd+Lu	0.35916
Sm+W	0.67835	In+W	0.57097	Ru+Ho	0.45317	P+Ni	0.35816
B+Fe	0.67779	Ag+Tm	0.57048	Ge+Nd	0.45300	P+Ca	0.35580
B+Th	0.67767	V+Hf	0.57023	P+Ag	0.45267	Rh+Ta	0.35290
B+Ca	0.67759	Pd+Ir	0.56945	N+Kr	0.45197	Zn+As	0.35217
Cd+Nd	0.67716	Li+Cl	0.56932	B+Ta	0.45195	Ca+Pd	0.35189
Cl+Sm	0.67547	As+Eu	0.56904	Xe+W	0.45189	As+Pd	0.35188
Cd+Tl	0.67533	Te+W	0.56816	Fe+Th	0.45180	P+Pd	0.35170
Nd+Er	0.67518	Li+Se	0.56812	Ca+Xe	0.45152	Ca+As	0.35150
Se+Cd	0.67503	Fe+Hf	0.56781	Kr+I	0.45068	Rh+Tb	0.35142
B+Nd	0.67423	Gd+Lu	0.56749	Kr+W	0.44950	Ho+Lu	0.35124
Au+Pa	0.67422	Li+V	0.56683	Pr+Ho	0.44907	Kr+Lu	0.34760
Rh+In	0.67308	Rh+Xe	0.56618	Ga+Ho	0.44830	Dy+Ta	0.34482
Xe+Hg	0.67303	Xe+Re	0.56602	Zn+Nd	0.44821	P+As	0.34123
Cd+Ho	0.67301	Br+Pa	0.56573	Ga+Kr	0.44799	H+Tm	0.34111
Zn+Er	0.67213	Sb+Pa	0.56541	Br+Xe	0.44798	H+Hg	0.33831
Se+Sm	0.67174	Li+Ga	0.56522	Tb+Ir	0.44762	Cl+Lu	0.33776
Ho+Er	0.67158	Pd+Pa	0.56504	B+Tb	0.44761	Tb+Au	0.33762

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Gd+W	0.67140	Ru+Hf	0.56492	Ge+Ho	0.44732	Se+Lu	0.33732
Fe+Cd	0.66994	Li+Pr	0.56438	I+Th	0.44703	H+Er	0.33370
V+Cd	0.66989	Ge+Te	0.56411	Pd+Au	0.44590	Ta+Au	0.33255
Fe+Gd	0.66914	Re+Au	0.56404	Ga+Th	0.44543	I+Lu	0.33234
Xe+Pa	0.66892	Ca+Hf	0.56364	Ni+Nd	0.44505	H+Nd	0.33122
Dy+Hf	0.66867	P+In	0.56356	Cl+Fe	0.44499	H+Re	0.33105
Zn+Sm	0.66790	Rh+Nd	0.56338	Sb+Xe	0.44467	H+B	0.33038
B+Ho	0.66789	Dy+Th	0.56328	Ni+Xe	0.44455	Ag+Tb	0.32936
Zn+Gd	0.66748	Br+Eu	0.56295	Ca+Nd	0.44427	H+Eu	0.32928
Zn+Cd	0.66738	Pd+Eu	0.56261	Pr+Th	0.44399	H+Au	0.32888
Er+Tl	0.66732	N+Hf	0.56221	Cl+V	0.44321	H+Ag	0.32697
Xe+Ir	0.66677	Nd+Dy	0.56212	As+Au	0.44285	V+Lu	0.32637
In+Tm	0.66648	Sb+Eu	0.56208	Zn+Kr	0.44271	Ga+Lu	0.32577
B+Ge	0.66643	Ni+In	0.56155	Ge+Kr	0.44196	Fe+Lu	0.32544
V+Gd	0.66602	Pr+Hf	0.56123	N+Cl	0.44180	Lu+Tl	0.32437
Zn+Hg	0.66554	Br+Ir	0.56110	P+Xe	0.44101	Lu+W	0.32342
Kr+Er	0.66448	Sb+Ir	0.56091	Se+Tl	0.44078	Ru+Lu	0.32324
Nd+Hg	0.66432	Kr+Rh	0.55913	V+Se	0.43972	Pr+Lu	0.32236
Xe+Eu	0.66346	Sm+Ta	0.55883	Sb+Ho	0.43942	Ge+Lu	0.32072
Er+Au	0.66331	Ga+Hf	0.55882	W+Th	0.43942	P+Lu	0.32063
Li+Rh	0.66296	In+Sb	0.55877	N+Se	0.43923	N+Lu	0.32058
Te+Tm	0.66291	Li+Ru	0.55869	Zn+Ho	0.43905	Sb+Lu	0.31931
Fe+Sm	0.66286	Rh+Th	0.55786	Nd+W	0.43879	Ta+Th	0.31753
Ca+Er	0.66277	Dy+Au	0.55739	As+Xe	0.43877	Xe+Tb	0.31504
B+Kr	0.66236	Nd+Re	0.55645	Fe+Se	0.43876	Tm+Ta	0.31494
Pr+Gd	0.66219	Kr+Dy	0.55607	Cl+Tl	0.43803	Tb+Ho	0.31418
N+Cd	0.66216	Li+N	0.55604	Sb+Nd	0.43773	H+Kr	0.31150
Rh+Hf	0.66140	Rh+Ho	0.55500	Ni+Ho	0.43662	Ag+Ta	0.31093
Nd+Ir	0.66105	Dy+Ho	0.55434	Cl+Pr	0.43655	Br+Lu	0.30970
B+Se	0.66037	Tm+Au	0.55245	Br+Ho	0.43645	Ni+Lu	0.30885
Ag+Te	0.66036	Ge+Hf	0.55238	Pd+Xe	0.43631	H+Xe	0.30872
Er+Th	0.66002	Ni+Te	0.55219	Se+I	0.43608	Tb+Th	0.30666
Ru+Cd	0.65973	Li+I	0.55117	Li+Lu	0.43526	Kr+Tb	0.30520
Li+Dy	0.65971	Dy+Tl	0.55000	Kr+Sb	0.43515	Xe+Ta	0.30271
N+Gd	0.65961	Sm+Tb	0.54873	Se+Pr	0.43504	Nd+Tb	0.30232
Ag+In	0.65921	Re+Th	0.54782	Br+Nd	0.43491	Kr+Ta	0.30033
Ru+Gd	0.65859	Ho+Re	0.54779	Ho+W	0.43470	As+Lu	0.30008

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Ho+Hg	0.65828	P+Te	0.54685	Ga+Se	0.43434	Zn+Lu	0.30000
Cl+Er	0.65797	Kr+Re	0.54668	Ge+Th	0.43390	H+Ho	0.29592
Hg+Th	0.65734	Xe+Tm	0.54652	Cl+Ga	0.43326	Ca+Lu	0.29574
Nd+Pa	0.65636	Br+In	0.54598	Ca+Kr	0.43321	Pd+Lu	0.29303
Ga+Cd	0.65593	As+Te	0.54588	Se+Ru	0.43284	Nd+Ta	0.29143
Li+Re	0.65453	As+In	0.54528	Cl+I	0.43173	I+Tb	0.28952
Ho+Ir	0.65441	Li+Ni	0.54476	Br+Kr	0.43151	Se+Tb	0.28930
Ge+Gd	0.65414	Sb+Te	0.54447	Ca+Ho	0.43145	Se+Ta	0.28884
V+Sm	0.65385	Cl+Rh	0.54350	Ni+Th	0.43109	I+Ta	0.28880
Ir+Au	0.65326	Br+Te	0.54321	Tl+Th	0.43062	H+Cl	0.28570
Th+Pa	0.65314	I+Hf	0.54300	Ni+Kr	0.43055	Ho+Ta	0.28324
Ru+Sm	0.65256	Pd+In	0.54234	Cl+Zn	0.43044	Cl+Tb	0.28232
Kr+Hg	0.65239	Tm+Th	0.54163	Cl+Ge	0.43035	V+Tb	0.27857
Ge+Cd	0.65235	Ag+Xe	0.54146	P+Nd	0.43032	Cl+Ta	0.27838
Nd+Eu	0.65223	Se+Rh	0.54100	Er+Ta	0.43008	Sb+Tb	0.27781
Ca+Sm	0.65222	Nd+Tm	0.54025	Sb+Th	0.43003	H+Sb	0.27578
Ga+Gd	0.65220	Ni+Hf	0.54011	As+Nd	0.43000	H+I	0.27494
Ca+Cd	0.65195	Hf+W	0.54002	Cl+Ru	0.42980	H+Se	0.27390
N+Sm	0.65146	Cl+Dy	0.53926	Pd+Nd	0.42765	Br+Tb	0.27162
Hf+Re	0.65052	Se+Dy	0.53906	Cl+Ca	0.42674	Ta+W	0.27020
Se+Er	0.65006	Gd+Ta	0.53893	N+P	0.42645	N+Ta	0.27005
Ho+Pa	0.64990	P+Hf	0.53729	P+Ho	0.42624	V+Ta	0.27002
Ca+Hg	0.64979	Li+W	0.53665	Zn+Th	0.42534	Pr+Tb	0.26911
Ca+Gd	0.64817	Li+Sb	0.53581	P+Kr	0.42523	Ge+Tb	0.26898
Ga+Sm	0.64796	Pd+Te	0.53560	Eu+Tb	0.42501	Fe+Tb	0.26886
Cl+Pa	0.64757	Kr+Tm	0.53462	Br+Th	0.42482	Tb+Tl	0.26883
Ge+Sm	0.64742	Zn+Dy	0.53438	As+Ho	0.42446	Ru+Tb	0.26881
Te+Re	0.64741	Cl+Re	0.53361	Ge+Se	0.42416	N+Tb	0.26874
Cd+Pr	0.64673	Rh+Tl	0.53309	V+Fe	0.42411	H+W	0.26832
Tl+Pa	0.64672	Se+Re	0.53302	N+V	0.42406	Tb+W	0.26738
Ir+Tl	0.64653	Ag+Nd	0.53155	As+Kr	0.42404	H+N	0.26599
Kr+Pa	0.64623	Ca+Dy	0.53032	H+Li	0.42355	Br+Ta	0.26445
B+V	0.64544	Fe+Dy	0.53029	Eu+Ta	0.42345	H+V	0.26354
Eu+Au	0.64504	Kr+Ag	0.53015	N+Fe	0.42288	Ga+Tb	0.26275
Eu+Tl	0.64479	V+Dy	0.52974	Se+W	0.42283	H+Ru	0.26229
B+Cl	0.64443	N+Rh	0.52894	N+Tl	0.42198	Sb+Ta	0.26227
Kr+Ir	0.64427	V+Rh	0.52823	I+Tl	0.42170	Ru+Ta	0.26224

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Pr+Sm	0.64418	Sb+Hf	0.52799	V+Ru	0.42166	H+Pr	0.26066
Ag+Hf	0.64379	Li+Br	0.52782	V+I	0.42155	Fe+Ta	0.25984
B+Ru	0.64352	Ag+Ho	0.52761	Cl+Ni	0.42121	H+Br	0.25960
B+Ga	0.64301	Ru+Dy	0.52741	Ru+Tl	0.42046	Pr+Ta	0.25959
Fe+Er	0.64285	Gd+Tb	0.52667	Cl+W	0.42044	Ga+Ta	0.25688
In+Au	0.64272	As+Hf	0.52661	Kr+Pd	0.41996	H+Fe	0.25551
Cl+Hg	0.64262	Br+Hf	0.52642	Ru+I	0.41949	Ni+Tb	0.25188
Kr+Eu	0.64231	Ag+Th	0.52623	I+Pr	0.41936	H+Pd	0.25156
Se+Hg	0.64187	Ga+Dy	0.52558	N+Pr	0.41914	H+Ga	0.25148
Zn+Eu	0.64129	Re+Tl	0.52305	Pd+Ho	0.41861	Ge+Ta	0.24905
Li+P	0.64110	Fe+Rh	0.52258	N+Ru	0.41843	H+Ca	0.24855
Ir+Th	0.64081	Xe+Au	0.52202	Ga+I	0.41826	Ta+Tl	0.24657
Ni+Gd	0.64074	N+Dy	0.52199	Cl+Sb	0.41760	P+Tb	0.24637
Li+Tm	0.64038	Zn+Rh	0.52195	V+Ga	0.41739	H+Ge	0.24539
B+Pr	0.64030	Cl+Tm	0.52178	Ni+Se	0.41705	Ni+Ta	0.24497
B+I	0.64023	P+Dy	0.52131	Se+Sb	0.41692	As+Ta	0.24489
Eu+Th	0.64016	Pr+Dy	0.52026	In+Ta	0.41691	Pd+Ta	0.24407
Zn+Ir	0.63933	Ru+Rh	0.51991	V+Pr	0.41638	Pd+Tb	0.24200
Te+Au	0.63933	Ga+Rh	0.51953	Fe+Ga	0.41611	H+Tl	0.24167
Tm+Hf	0.63927	Li+As	0.51881	I+W	0.41586	As+Tb	0.24102
Te+Xe	0.63918	Nd+Au	0.51836	Fe+Ru	0.41549	H+As	0.24010
V+Er	0.63916	Ho+Tm	0.51795	Pd+Th	0.41537	H+Ni	0.23929
Zn+Pa	0.63865	Fe+Re	0.51780	Ru+Pr	0.41526	H+Zn	0.23606
Ni+Cd	0.63851	Pd+Hf	0.51706	V+Tl	0.41522	H+P	0.23604
B+N	0.63640	V+Re	0.51695	N+Ca	0.41497	Zn+Tb	0.21908
In+Xe	0.63636	Ag+Au	0.51640	Ga+Pr	0.41488	H+Tb	0.21705
Cd+I	0.63607	Se+Tm	0.51625	V+Ge	0.41486	Ca+Tb	0.21245
Cl+Ir	0.63530	Li+Pd	0.51617	Fe+Pr	0.41461	P+Ta	0.20244
N+Er	0.63520	Au+Th	0.51575	H+Ir	0.41432	Tb+Lu	0.19710
Fe+Hg	0.63411	Pr+Re	0.51469	Ga+Ru	0.41427	Zn+Ta	0.19285
Se+Pa	0.63384	Rh+Pr	0.51459	N+I	0.41420	Ca+Ta	0.18590
Pr+Er	0.63366	Lu+Pa	0.51417	N+Ga	0.41410	Lu+Ta	0.18341
Ga+Er	0.63199	Xe+Nd	0.51384	Zn+Se	0.41389	H+Th	0.17856
Ru+Er	0.63166	Ge+Dy	0.51357	W+Tl	0.41379	Tb+Ta	0.15224
Li+Ag	0.63128	N+Re	0.51344	In+Tb	0.41368	H+Ta	0.06902

Tab. C.3: Metrika MM6 pro dvojici prvků v pokrytí VVER-5.0 (řazení podle hmotnosti).

ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
H+Li	0.09990	Sc+Hf	0.59731	Kr+Ag	0.55281	Cs+Nd	0.48279
H+B	0.05301	Sc+Ta	0.28753	Kr+Cd	0.70506	Cs+Sm	0.65433
H+N	-0.03105	Sc+W	0.42770	Kr+In	0.65990	Cs+Eu	0.62773
H+Sc	0.04979	Sc+Re	0.55279	Kr+Te	0.65160	Cs+Gd	0.67000
H+Co	0.05948	Sc+Ir	0.64244	Kr+Cs	0.47002	Cs+Tb	0.25731
H+Se	0.06248	Sc+Au	0.51630	Kr+Nd	0.52127	Cs+Dy	0.54248
H+Kr	0.11266	Sc+Hg	0.65618	Kr+Sm	0.70800	Cs+Ho	0.46314
H+Rh	0.12221	Sc+Pa	0.59196	Kr+Eu	0.67775	Cs+Er	0.64114
H+Ag	0.09348	Ti+Co	0.45835	Kr+Gd	0.70707	Cs+Hf	0.57793
H+Cd	0.12843	Ti+As	0.39721	Kr+Tb	0.28170	Cs+Ta	0.27637
H+In	0.13207	Ti+Se	0.45631	Kr+Dy	0.58454	Cs+W	0.40961
H+Cs	0.02285	Ti+Kr	0.47772	Kr+Ho	0.51320	Cs+Re	0.53621
H+Nd	0.10072	Ti+Ru	0.43236	Kr+Er	0.69292	Cs+Ir	0.62676
H+Sm	0.12471	Ti+Rh	0.55883	Kr+Hf	0.62301	Cs+Au	0.49298
H+Eu	0.10746	Ti+Ag	0.51917	Kr+Ta	0.30875	Cs+Hg	0.63769
H+Gd	0.12492	Ti+Cd	0.68274	Kr+W	0.44679	Cs+Pa	0.56347
H+Tb	-0.14723	Ti+In	0.61555	Kr+Re	0.58506	Nd+Sm	0.71201
H+Dy	0.06228	Ti+Te	0.61452	Kr+Ir	0.67694	Nd+Eu	0.68291
H+Ho	0.06534	Ti+Cs	0.43436	Kr+Au	0.54171	Nd+Gd	0.71467
H+Er	0.08440	Ti+Nd	0.48827	Kr+Hg	0.68955	Nd+Tb	0.28690
H+Hf	0.08984	Ti+Sm	0.67098	Kr+Pa	0.61868	Nd+Dy	0.59685
H+Ta	-0.06786	Ti+Eu	0.63731	Ru+Rh	0.54695	Nd+Ho	0.52141
H+W	0.03634	Ti+Gd	0.68508	Ru+Ag	0.51094	Nd+Er	0.70143
H+Re	0.10641	Ti+Tb	0.25972	Ru+Cd	0.66837	Nd+Hf	0.64309
H+Ir	0.09228	Ti+Dy	0.54987	Ru+In	0.61588	Nd+Ta	0.30334
H+Au	0.10970	Ti+Ho	0.47877	Ru+Te	0.60387	Nd+W	0.45660
H+Hg	0.07615	Ti+Er	0.65778	Ru+Cs	0.42500	Nd+Re	0.59708
H+Pa	-0.09098	Ti+Hf	0.59218	Ru+Nd	0.47858	Nd+Ir	0.68930
Li+B	0.77340	Ti+Ta	0.27701	Ru+Sm	0.66284	Nd+Au	0.54642
Li+N	0.55152	Ti+W	0.41755	Ru+Eu	0.62686	Nd+Hg	0.69823
Li+Sc	0.57672	Ti+Re	0.54372	Ru+Gd	0.67097	Nd+Pa	0.61552
Li+Ti	0.57058	Ti+Ir	0.63858	Ru+Tb	0.25084	Sm+Eu	0.73887
Li+Co	0.59168	Ti+Au	0.50993	Ru+Dy	0.54410	Sm+Gd	0.77003
Li+As	0.52010	Ti+Hg	0.65076	Ru+Ho	0.47234	Sm+Tb	0.41352
Li+Se	0.58324	Ti+Pa	0.58281	Ru+Er	0.65000	Sm+Dy	0.72034

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Li+Kr	0.61912	Co+As	0.41453	Ru+Hf	0.58679	Sm+Ho	0.67451
Li+Ru	0.56899	Co+Se	0.47238	Ru+Ta	0.26572	Sm+Er	0.74368
Li+Rh	0.71208	Co+Kr	0.49329	Ru+W	0.41425	Sm+Hf	0.72280
Li+Ag	0.67182	Co+Ru	0.44843	Ru+Re	0.54155	Sm+Ta	0.46388
Li+Cd	0.75586	Co+Rh	0.55856	Ru+Ir	0.62746	Sm+W	0.61356
Li+In	0.76875	Co+Ag	0.52426	Ru+Au	0.49793	Sm+Re	0.73135
Li+Te	0.75299	Co+Cd	0.66782	Ru+Hg	0.64409	Sm+Ir	0.74854
Li+Cs	0.56577	Co+In	0.61837	Ru+Pa	0.58070	Sm+Au	0.71605
Li+Nd	0.62360	Co+Te	0.61702	Rh+Ag	0.62936	Sm+Hg	0.74949
Li+Sm	0.75480	Co+Cs	0.44602	Rh+Cd	0.73528	Sm+Pa	0.80182
Li+Eu	0.76672	Co+Nd	0.49597	Rh+In	0.73177	Eu+Gd	0.74501
Li+Gd	0.75455	Co+Sm	0.66313	Rh+Te	0.73953	Eu+Tb	0.38833
Li+Tb	0.35959	Co+Eu	0.63178	Rh+Cs	0.52740	Eu+Dy	0.74119
Li+Dy	0.70623	Co+Gd	0.67741	Rh+Nd	0.59532	Eu+Ho	0.64842
Li+Ho	0.62342	Co+Tb	0.28316	Rh+Sm	0.73759	Eu+Er	0.71140
Li+Er	0.76450	Co+Dy	0.55294	Rh+Eu	0.75165	Eu+Hf	0.74281
Li+Hf	0.73763	Co+Ho	0.49169	Rh+Gd	0.74045	Eu+Ta	0.41589
Li+Ta	0.38682	Co+Er	0.64376	Rh+Tb	0.33013	Eu+W	0.58405
Li+W	0.55300	Co+Hf	0.59342	Rh+Dy	0.67178	Eu+Re	0.73823
Li+Re	0.70557	Co+Ta	0.30921	Rh+Ho	0.58416	Eu+Ir	0.77297
Li+Ir	0.76984	Co+W	0.43373	Rh+Er	0.75064	Eu+Au	0.68519
Li+Au	0.65906	Co+Re	0.54932	Rh+Hf	0.70249	Eu+Hg	0.77859
Li+Hg	0.77386	Co+Ir	0.62993	Rh+Ta	0.36755	Eu+Pa	0.74951
Li+Pa	0.70928	Co+Au	0.51856	Rh+W	0.51645	Gd+Tb	0.42804
B+N	0.62700	Co+Hg	0.64660	Rh+Re	0.66618	Gd+Dy	0.72516
B+Sc	0.64578	Co+Pa	0.58420	Rh+Ir	0.75068	Gd+Ho	0.69261
B+Ti	0.63241	Ni+As	0.35987	Rh+Au	0.61797	Gd+Er	0.74470
B+Co	0.65576	Ni+Se	0.41789	Rh+Hg	0.75450	Gd+Hf	0.72696
B+As	0.58514	Ni+Kr	0.44724	Rh+Pa	0.66890	Gd+Ta	0.47745
B+Se	0.65634	Ni+Ru	0.39787	Ag+Cd	0.72861	Gd+W	0.62337
B+Kr	0.68554	Ni+Rh	0.51042	Ag+In	0.70877	Gd+Re	0.73239
B+Ru	0.63825	Ni+Ag	0.48169	Ag+Te	0.70166	Gd+Ir	0.75370
B+Rh	0.75287	Ni+Cd	0.63557	Ag+Cs	0.48982	Gd+Au	0.72065
B+Ag	0.73417	Ni+In	0.57682	Ag+Nd	0.56020	Gd+Hg	0.75446
B+Cd	0.75421	Ni+Te	0.57280	Ag+Sm	0.72437	Gd+Pa	0.80594
B+In	0.78043	Ni+Cs	0.39951	Ag+Eu	0.72683	Tb+Dy	0.33317
B+Te	0.76346	Ni+Nd	0.44927	Ag+Gd	0.72436	Tb+Ho	0.29062

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
B+Cs	0.64329	Ni+Sm	0.62937	Ag+Tb	0.31422	Tb+Er	0.40366
B+Nd	0.68869	Ni+Eu	0.59757	Ag+Dy	0.62472	Tb+Hf	0.35910
B+Sm	0.74262	Ni+Gd	0.63440	Ag+Ho	0.55220	Tb+Ta	0.13526
B+Eu	0.71613	Ni+Tb	0.23398	Ag+Er	0.73794	Tb+W	0.23349
B+Gd	0.74583	Ni+Dy	0.50924	Ag+Hf	0.67508	Tb+Re	0.32400
B+Tb	0.43942	Ni+Ho	0.44672	Ag+Ta	0.32995	Tb+Ir	0.39712
B+Dy	0.74387	Ni+Er	0.61303	Ag+W	0.48370	Tb+Au	0.30603
B+Ho	0.69299	Ni+Hf	0.54805	Ag+Re	0.62725	Tb+Hg	0.39820
B+Er	0.71717	Ni+Ta	0.25035	Ag+Ir	0.72633	Tb+Pa	0.39227
B+Hf	0.74791	Ni+W	0.37984	Ag+Au	0.55111	Dy+Ho	0.58359
B+Ta	0.45798	Ni+Re	0.50729	Ag+Hg	0.73925	Dy+Er	0.74300
B+W	0.61803	Ni+Ir	0.59420	Ag+Pa	0.63425	Dy+Hf	0.70607
B+Re	0.74844	Ni+Au	0.47304	Cd+In	0.76134	Dy+Ta	0.34911
B+Ir	0.72111	Ni+Hg	0.60557	Cd+Te	0.74616	Dy+W	0.50962
B+Au	0.72993	Ni+Pa	0.56124	Cd+Cs	0.66827	Dy+Re	0.65780
B+Hg	0.72280	As+Se	0.41314	Cd+Nd	0.70996	Dy+Ir	0.74504
B+Pa	0.79113	As+Kr	0.43169	Cd+Sm	0.77302	Dy+Au	0.60086
N+Sc	0.43948	As+Ru	0.38862	Cd+Eu	0.74595	Dy+Hg	0.75060
N+Ti	0.42788	As+Rh	0.49663	Cd+Gd	0.77021	Dy+Pa	0.66831
N+Co	0.44605	As+Ag	0.46958	Cd+Tb	0.47808	Ho+Er	0.69989
N+As	0.38525	As+Cd	0.60769	Cd+Dy	0.73012	Ho+Hf	0.63225
N+Se	0.44505	As+In	0.55068	Cd+Ho	0.70855	Ho+Ta	0.29165
N+Kr	0.46834	As+Te	0.55182	Cd+Er	0.75534	Ho+W	0.44953
N+Ru	0.42173	As+Cs	0.38929	Cd+Hf	0.73493	Ho+Re	0.59134
N+Rh	0.54663	As+Nd	0.44265	Cd+Ta	0.54590	Ho+Ir	0.68441
N+Ag	0.50924	As+Sm	0.60029	Cd+W	0.65547	Ho+Au	0.53992
N+Cd	0.67030	As+Eu	0.57274	Cd+Re	0.74116	Ho+Hg	0.69609
N+In	0.61304	As+Gd	0.61756	Cd+Ir	0.75641	Ho+Pa	0.60060
N+Te	0.60620	As+Tb	0.22038	Cd+Au	0.72549	Er+Hf	0.74186
N+Cs	0.42012	As+Dy	0.49273	Cd+Hg	0.75774	Er+Ta	0.44045
N+Nd	0.47525	As+Ho	0.42616	Cd+Pa	0.79796	Er+W	0.60614
N+Sm	0.65893	As+Er	0.58756	In+Te	0.76152	Er+Re	0.74374
N+Eu	0.62864	As+Hf	0.52599	In+Cs	0.59202	Er+Ir	0.77555
N+Gd	0.66942	As+Ta	0.25032	In+Nd	0.65964	Er+Au	0.70430
N+Tb	0.25255	As+W	0.38011	In+Sm	0.76455	Er+Hg	0.77848
N+Dy	0.54102	As+Re	0.49284	In+Eu	0.77436	Er+Pa	0.78359
N+Ho	0.46816	As+Ir	0.57271	In+Gd	0.76057	Hf+Ta	0.39084

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
N+Er	0.64382	As+Au	0.45245	In+Tb	0.38150	Hf+W	0.54519
N+Hf	0.58258	As+Hg	0.58392	In+Dy	0.72989	Hf+Re	0.69279
N+Ta	0.26254	As+Pa	0.53641	In+Ho	0.63798	Hf+Ir	0.74868
N+W	0.40455	Se+Kr	0.49530	In+Er	0.77603	Hf+Au	0.64868
N+Re	0.54471	Se+Ru	0.44530	In+Hf	0.74820	Hf+Hg	0.75283
N+Ir	0.63241	Se+Rh	0.57069	In+Ta	0.41546	Hf+Pa	0.71704
N+Au	0.49780	Se+Ag	0.53667	In+W	0.57465	Ta+W	0.25489
N+Hg	0.64174	Se+Cd	0.69189	In+Re	0.72938	Ta+Re	0.34371
N+Pa	0.52953	Se+In	0.63392	In+Ir	0.77753	Ta+Ir	0.40576
Sc+Ti	0.45026	Se+Te	0.62578	In+Au	0.67552	Ta+Au	0.31574
Sc+Co	0.46790	Se+Cs	0.44254	In+Hg	0.78179	Ta+Hg	0.41799
Sc+As	0.39867	Se+Nd	0.50138	In+Pa	0.73547	Ta+Pa	0.34579
Sc+Se	0.46348	Se+Sm	0.68335	Te+Cs	0.58987	W+Re	0.51926
Sc+Kr	0.48754	Se+Eu	0.64980	Te+Nd	0.65706	W+Ir	0.59746
Sc+Ru	0.44538	Se+Gd	0.69076	Te+Sm	0.74286	W+Au	0.48111
Sc+Rh	0.56095	Se+Tb	0.27172	Te+Eu	0.75955	W+Hg	0.61069
Sc+Ag	0.52506	Se+Dy	0.56831	Te+Gd	0.74547	W+Pa	0.54279
Sc+Cd	0.68335	Se+Ho	0.49447	Te+Tb	0.38130	Re+Ir	0.75219
Sc+In	0.62210	Se+Er	0.66688	Te+Dy	0.73066	Re+Au	0.61313
Sc+Te	0.62214	Se+Hf	0.60355	Te+Ho	0.64378	Re+Hg	0.75606
Sc+Cs	0.43797	Se+Ta	0.29716	Te+Er	0.76198	Re+Pa	0.65643
Sc+Nd	0.49497	Se+W	0.43357	Te+Hf	0.73027	Ir+Au	0.69022
Sc+Sm	0.67795	Se+Re	0.56055	Te+Ta	0.41619	Ir+Hg	0.77930
Sc+Eu	0.64541	Se+Ir	0.65502	Te+W	0.56997	Ir+Pa	0.75326
Sc+Gd	0.68743	Se+Au	0.52041	Te+Re	0.70116	Au+Hg	0.72555
Sc+Tb	0.26310	Se+Hg	0.66270	Te+Ir	0.76738	Au+Pa	0.61580
Sc+Dy	0.55855	Se+Pa	0.59245	Te+Au	0.67549	Hg+Pa	0.78478
Sc+Ho	0.48749	Kr+Ru	0.46599	Te+Hg	0.76708		
Sc+Er	0.66147	Kr+Rh	0.59634	Te+Pa	0.76723		

Tab. C.4: Metrika MM6 pro dvojici prvků v pokrytí VVER-5.0 (řazení podle hodnoty MM6).

ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Gd+Pa	0.80594	Nd+Hg	0.69823	Sc+Hf	0.59731	Cs+Ho	0.46314
Sm+Pa	0.80182	Ho+Hg	0.69609	Nd+Re	0.59708	Ti+Co	0.45835
Cd+Pa	0.79796	B+Ho	0.69299	Nd+Dy	0.59685	B+Ta	0.45798

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
B+Pa	0.79113	Kr+Er	0.69292	Kr+Rh	0.59634	Nd+W	0.45660
Hg+Pa	0.78478	Hf+Re	0.69279	Rh+Nd	0.59532	Ti+Se	0.45631
Er+Pa	0.78359	Gd+Ho	0.69261	Ni+Ir	0.59420	As+Au	0.45245
In+Hg	0.78179	Se+Cd	0.69189	Co+Hf	0.59342	Sc+Ti	0.45026
B+In	0.78043	Se+Gd	0.69076	Se+Pa	0.59245	Ho+W	0.44953
Ir+Hg	0.77930	Ir+Au	0.69022	Ti+Hf	0.59218	Ni+Nd	0.44927
Eu+Hg	0.77859	Kr+Hg	0.68955	In+Cs	0.59202	Co+Ru	0.44843
Er+Hg	0.77848	Nd+Ir	0.68930	Sc+Pa	0.59196	Ni+Kr	0.44724
In+Ir	0.77753	B+Nd	0.68869	Li+Co	0.59168	Kr+W	0.44679
In+Er	0.77603	Sc+Gd	0.68743	Ho+Re	0.59134	Ni+Ho	0.44672
Er+Ir	0.77555	B+Kr	0.68554	Te+Cs	0.58987	N+Co	0.44605
In+Eu	0.77436	Eu+Au	0.68519	As+Er	0.58756	Co+Cs	0.44602
Li+Hg	0.77386	Ti+Gd	0.68508	Ru+Hf	0.58679	Sc+Ru	0.44538
Li+B	0.77340	Ho+Ir	0.68441	B+As	0.58514	Se+Ru	0.44530
Cd+Sm	0.77302	Sc+Cd	0.68335	Kr+Re	0.58506	N+Se	0.44505
Eu+Ir	0.77297	Se+Sm	0.68335	Kr+Dy	0.58454	As+Nd	0.44265
Cd+Gd	0.77021	Nd+Eu	0.68291	Co+Pa	0.58420	Se+Cs	0.44254
Sm+Gd	0.77003	Ti+Cd	0.68274	Rh+Ho	0.58416	Er+Ta	0.44045
Li+Ir	0.76984	Sc+Sm	0.67795	Eu+W	0.58405	N+Sc	0.43948
Li+In	0.76875	Kr+Eu	0.67775	As+Hg	0.58392	B+Tb	0.43942
Te+Ir	0.76738	Co+Gd	0.67741	Dy+Ho	0.58359	Sc+Cs	0.43797
Te+Pa	0.76723	Kr+Ir	0.67694	Li+Se	0.58324	Ti+Cs	0.43436
Te+Hg	0.76708	In+Au	0.67552	Ti+Pa	0.58281	Co+W	0.43373
Li+Eu	0.76672	Te+Au	0.67549	N+Hf	0.58258	Se+W	0.43357
In+Sm	0.76455	Ag+Hf	0.67508	Ru+Pa	0.58070	Ti+Ru	0.43236
Li+Er	0.76450	Sm+Ho	0.67451	Cs+Hf	0.57793	As+Kr	0.43169
B+Te	0.76346	Li+Ag	0.67182	Ni+In	0.57682	Gd+Tb	0.42804
Te+Er	0.76198	Rh+Dy	0.67178	Li+Sc	0.57672	N+Ti	0.42788
In+Te	0.76152	Ti+Sm	0.67098	In+W	0.57465	Sc+W	0.42770
Cd+In	0.76134	Ru+Gd	0.67097	Ni+Te	0.57280	As+Ho	0.42616
In+Gd	0.76057	N+Cd	0.67030	As+Eu	0.57274	Ru+Cs	0.42500
Te+Eu	0.75955	Cs+Gd	0.67000	As+Ir	0.57271	N+Ru	0.42173
Cd+Hg	0.75774	N+Gd	0.66942	Se+Rh	0.57069	N+Cs	0.42012
Cd+Ir	0.75641	Rh+Pa	0.66890	Li+Ti	0.57058	Ta+Hg	0.41799
Re+Hg	0.75606	Ru+Cd	0.66837	Te+W	0.56997	Ni+Se	0.41789
Li+Cd	0.75586	Dy+Pa	0.66831	Li+Ru	0.56899	Ti+W	0.41755
Cd+Er	0.75534	Cd+Cs	0.66827	Se+Dy	0.56831	Te+Ta	0.41619

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Li+Sm	0.75480	Co+Cd	0.66782	Li+Cs	0.56577	Eu+Ta	0.41589
Li+Gd	0.75455	Se+Er	0.66688	Cs+Pa	0.56347	In+Ta	0.41546
Rh+Hg	0.75450	Rh+Re	0.66618	Ni+Pa	0.56124	Co+As	0.41453
Gd+Hg	0.75446	Co+Sm	0.66313	Sc+Rh	0.56095	Ru+W	0.41425
B+Cd	0.75421	Ru+Sm	0.66284	Se+Re	0.56055	Sm+Tb	0.41352
Gd+Ir	0.75370	Se+Hg	0.66270	Ag+Nd	0.56020	As+Se	0.41314
Ir+Pa	0.75326	Sc+Er	0.66147	Ti+Rh	0.55883	Cs+W	0.40961
Li+Te	0.75299	Kr+In	0.65990	Co+Rh	0.55856	Ta+Ir	0.40576
B+Rh	0.75287	In+Nd	0.65964	Sc+Dy	0.55855	N+W	0.40455
Hf+Hg	0.75283	Li+Au	0.65906	Li+W	0.55300	Tb+Er	0.40366
Re+Ir	0.75219	N+Sm	0.65893	Co+Dy	0.55294	Ni+Cs	0.39951
Rh+Eu	0.75165	Dy+Re	0.65780	Kr+Ag	0.55281	Sc+As	0.39867
Rh+Ir	0.75068	Ti+Er	0.65778	Sc+Re	0.55279	Tb+Hg	0.39820
Rh+Er	0.75064	Te+Nd	0.65706	Ag+Ho	0.55220	Ni+Ru	0.39787
Dy+Hg	0.75060	Re+Pa	0.65643	As+Te	0.55182	Ti+As	0.39721
Eu+Pa	0.74951	B+Se	0.65634	Li+N	0.55152	Tb+Ir	0.39712
Sm+Hg	0.74949	Sc+Hg	0.65618	Ag+Au	0.55111	Tb+Pa	0.39227
Hf+Ir	0.74868	B+Co	0.65576	As+In	0.55068	Hf+Ta	0.39084
Sm+Ir	0.74854	Cd+W	0.65547	Ti+Dy	0.54987	As+Cs	0.38929
B+Re	0.74844	Se+Ir	0.65502	Co+Re	0.54932	As+Ru	0.38862
In+Hf	0.74820	Cs+Sm	0.65433	Ni+Hf	0.54805	Eu+Tb	0.38833
B+Hf	0.74791	Kr+Te	0.65160	Ru+Rh	0.54695	Li+Ta	0.38682
Cd+Te	0.74616	Ti+Hg	0.65076	N+Rh	0.54663	N+As	0.38525
Cd+Eu	0.74595	Ru+Er	0.65000	Nd+Au	0.54642	In+Tb	0.38150
B+Gd	0.74583	Se+Eu	0.64980	Cd+Ta	0.54590	Te+Tb	0.38130
Te+Gd	0.74547	Hf+Au	0.64868	Hf+W	0.54519	As+W	0.38011
Dy+Ir	0.74504	Eu+Ho	0.64842	N+Re	0.54471	Ni+W	0.37984
Eu+Gd	0.74501	Co+Hg	0.64660	Ru+Dy	0.54410	Rh+Ta	0.36755
Gd+Er	0.74470	B+Sc	0.64578	Ti+Re	0.54372	Ni+As	0.35987
B+Dy	0.74387	Sc+Eu	0.64541	W+Pa	0.54279	Li+Tb	0.35959
Er+Re	0.74374	Ru+Hg	0.64409	Cs+Dy	0.54248	Tb+Hf	0.35910
Sm+Er	0.74368	N+Er	0.64382	Kr+Au	0.54171	Dy+Ta	0.34911
Dy+Er	0.74300	Te+Ho	0.64378	Ru+Re	0.54155	Ta+Pa	0.34579
Te+Sm	0.74286	Co+Er	0.64376	N+Dy	0.54102	Ta+Re	0.34371
Eu+Hf	0.74281	B+Cs	0.64329	Ho+Au	0.53992	Tb+Dy	0.33317
B+Sm	0.74262	Nd+Hf	0.64309	Se+Ag	0.53667	Rh+Tb	0.33013
Er+Hf	0.74186	Sc+Ir	0.64244	As+Pa	0.53641	Ag+Ta	0.32995

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
Eu+Dy	0.74119	N+Hg	0.64174	Cs+Re	0.53621	Tb+Re	0.32400
Cd+Re	0.74116	Cs+Er	0.64114	N+Pa	0.52953	Ta+Au	0.31574
Rh+Gd	0.74045	Ti+Ir	0.63858	Rh+Cs	0.52740	Ag+Tb	0.31422
Rh+Te	0.73953	B+Ru	0.63825	As+Hf	0.52599	Co+Ta	0.30921
Ag+Hg	0.73925	In+Ho	0.63798	Sc+Ag	0.52506	Kr+Ta	0.30875
Sm+Eu	0.73887	Cs+Hg	0.63769	Co+Ag	0.52426	Tb+Au	0.30603
Eu+Re	0.73823	Ti+Eu	0.63731	Nd+Ho	0.52141	Nd+Ta	0.30334
Ag+Er	0.73794	Ni+Cd	0.63557	Kr+Nd	0.52127	Se+Ta	0.29716
Li+Hf	0.73763	Ni+Gd	0.63440	Se+Au	0.52041	Ho+Ta	0.29165
Rh+Sm	0.73759	Ag+Pa	0.63425	Li+As	0.52010	Tb+Ho	0.29062
In+Pa	0.73547	Se+In	0.63392	W+Re	0.51926	Sc+Ta	0.28753
Rh+Cd	0.73528	B+Ti	0.63241	Ti+Ag	0.51917	Nd+Tb	0.28690
Cd+Hf	0.73493	N+Ir	0.63241	Co+Au	0.51856	Co+Tb	0.28316
B+Ag	0.73417	Ho+Hf	0.63225	Rh+W	0.51645	Kr+Tb	0.28170
Gd+Re	0.73239	Co+Eu	0.63178	Sc+Au	0.51630	Ti+Ta	0.27701
Rh+In	0.73177	Co+Ir	0.62993	Kr+Ho	0.51320	Cs+Ta	0.27637
Sm+Re	0.73135	Ni+Sm	0.62937	Ru+Ag	0.51094	Se+Tb	0.27172
Te+Dy	0.73066	Rh+Ag	0.62936	Ni+Rh	0.51042	Ru+Ta	0.26572
Te+Hf	0.73027	N+Eu	0.62864	Ti+Au	0.50993	Sc+Tb	0.26310
Cd+Dy	0.73012	Cs+Eu	0.62773	Dy+W	0.50962	N+Ta	0.26254
B+Au	0.72993	Ru+Ir	0.62746	N+Ag	0.50924	Ti+Tb	0.25972
In+Dy	0.72989	Ag+Re	0.62725	Ni+Dy	0.50924	Cs+Tb	0.25731
In+Re	0.72938	B+N	0.62700	Ni+Re	0.50729	Ta+W	0.25489
Ag+Cd	0.72861	Ru+Eu	0.62686	Se+Nd	0.50138	N+Tb	0.25255
Gd+Hf	0.72696	Cs+Ir	0.62676	Ru+Au	0.49793	Ru+Tb	0.25084
Ag+Eu	0.72683	Se+Te	0.62578	N+Au	0.49780	Ni+Ta	0.25035
Ag+Ir	0.72633	Ag+Dy	0.62472	As+Rh	0.49663	As+Ta	0.25032
Au+Hg	0.72555	Li+Nd	0.62360	Co+Nd	0.49597	Ni+Tb	0.23398
Cd+Au	0.72549	Li+Ho	0.62342	Se+Kr	0.49530	Tb+W	0.23349
Gd+Dy	0.72516	Gd+W	0.62337	Sc+Nd	0.49497	As+Tb	0.22038
Ag+Sm	0.72437	Kr+Hf	0.62301	Se+Ho	0.49447	Tb+Ta	0.13526
Ag+Gd	0.72436	Sc+Te	0.62214	Co+Kr	0.49329	H+In	0.13207
B+Hg	0.72280	Sc+In	0.62210	Cs+Au	0.49298	H+Cd	0.12843
Sm+Hf	0.72280	Li+Kr	0.61912	As+Re	0.49284	H+Gd	0.12492
B+Ir	0.72111	Kr+Pa	0.61868	As+Dy	0.49273	H+Sm	0.12471
Gd+Au	0.72065	Co+In	0.61837	Co+Ho	0.49169	H+Rh	0.12221
Sm+Dy	0.72034	B+W	0.61803	Ag+Cs	0.48982	H+Kr	0.11266

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6	ID	MM6
B+Er	0.71717	Rh+Au	0.61797	Ti+Nd	0.48827	H+Au	0.10970
Hf+Pa	0.71704	As+Gd	0.61756	Sc+Kr	0.48754	H+Eu	0.10746
B+Eu	0.71613	Co+Te	0.61702	Sc+Ho	0.48749	H+Re	0.10641
Sm+Au	0.71605	Ru+In	0.61588	Ag+W	0.48370	H+Nd	0.10072
Nd+Gd	0.71467	Au+Pa	0.61580	Cs+Nd	0.48279	H+Li	0.09990
Li+Rh	0.71208	Ti+In	0.61555	Ni+Ag	0.48169	H+Ag	0.09348
Nd+Sm	0.71201	Nd+Pa	0.61552	W+Au	0.48111	H+Ir	0.09228
Eu+Er	0.71140	Ti+Te	0.61452	Ti+Ho	0.47877	H+Hf	0.08984
Cd+Nd	0.70996	Sm+W	0.61356	Ru+Nd	0.47858	H+Er	0.08440
Li+Pa	0.70928	Re+Au	0.61313	Cd+Tb	0.47808	H+Hg	0.07615
Ag+In	0.70877	N+In	0.61304	Ti+Kr	0.47772	H+Ho	0.06534
Cd+Ho	0.70855	Ni+Er	0.61303	Gd+Ta	0.47745	H+Se	0.06248
Kr+Sm	0.70800	W+Hg	0.61069	N+Nd	0.47525	H+Dy	0.06228
Kr+Gd	0.70707	As+Cd	0.60769	Ni+Au	0.47304	H+Co	0.05948
Li+Dy	0.70623	N+Te	0.60620	Co+Se	0.47238	H+B	0.05301
Dy+Hf	0.70607	Er+W	0.60614	Ru+Ho	0.47234	H+Sc	0.04979
Li+Re	0.70557	Ni+Hg	0.60557	Kr+Cs	0.47002	H+W	0.03634
Kr+Cd	0.70506	Ru+Te	0.60387	As+Ag	0.46958	H+Cs	0.02285
Er+Au	0.70430	Se+Hf	0.60355	N+Kr	0.46834	H+N	-0.03105
Rh+Hf	0.70249	Dy+Au	0.60086	N+Ho	0.46816	H+Ta	-0.06786
Ag+Te	0.70166	Ho+Pa	0.60060	Sc+Co	0.46790	H+Pa	-0.09098
Nd+Er	0.70143	As+Sm	0.60029	Kr+Ru	0.46599	H+Tb	-0.14723
Te+Re	0.70116	Ni+Eu	0.59757	Sm+Ta	0.46388		
Ho+Er	0.69989	W+Ir	0.59746	Sc+Se	0.46348		

C.2 Materiálová metrika MM9

Tab. C.5: Metrika MM9 pro vyhořívající absorbátory (prvky).

ID	MM9	ID	MM9	ID	MM9	ID	MM9
H	18.136	Cr	19.738	Ag	26.263	Yb	11.391
He	16.910	Mn	21.315	Cd	37.499	Lu	19.458
Li	31.284	Fe	19.321	In	31.658	Hf	28.573
Be	14.677	Co	21.971	Sn	15.478	Ta	13.676
B	32.632	Ni	17.388	Sb	19.802	W	21.168
C	13.269	Cu	14.246	Te	23.827	Re	28.735
N	20.622	Zn	17.012	I	21.174	Os	11.391
O	13.448	Ga	20.100	Xe	24.067	Ir	33.603
F	14.508	Ge	16.419	Cs	20.712	Pt	11.391
Ne	11.391	As	19.131	Ba	14.657	Au	25.596
Na	14.645	Se	20.409	La	18.344	Hg	27.398
Mg	13.867	Br	21.993	Ce	12.162	Tl	15.394
Al	13.762	Kr	24.655	Pr	19.399	Pb	10.217
Si	13.444	Rb	15.907	Nd	21.308	Bi	11.821
P	14.958	Sr	17.341	Pm	0.000	Po	0.000
S	17.199	Y	13.954	Sm	34.463	At	0.000
Cl	20.805	Zr	10.729	Eu	29.594	Rn	0.000
Ar	14.985	Nb	16.206	Gd	36.160	Fr	0.000
K	17.309	Mo	18.862	Tb	16.784	Ra	0.000
Ca	15.036	Tc	0.000	Dy	29.031	Ac	0.000
Sc	21.897	Ru	21.853	Ho	23.753	Th	17.051
Ti	18.512	Rh	26.643	Er	30.878	Pa	30.990
V	21.721	Pd	19.926	Tm	25.857	U	9.778

Tab. C.6: Metrika MM9 pro vyhořívající absorbátory (nuklidy).

ID	MM9	ID	MM9	ID	MM9	ID	MM9
H-1	18.165	Rb-87	13.273	Xe-133	25.443	Re-187	25.358
H-2	15.294	Sr-84	17.858	Xe-134	10.243	Ir-191	33.433
H-3	-32.638	Sr-86	15.803	Xe-135	37.657	Ir-193	27.234
He-3	21.118	Sr-87	24.038	Xe-136	10.881	Au-197	25.596
He-4	14.923	Sr-88	11.724	Cs-133	20.712	Hg-196	33.363
Li-6	22.191	Sr-89	10.614	Cs-134	25.421	Hg-198	11.082
Li-7	16.582	Sr-90	11.468	Cs-135	17.472	Hg-199	33.285

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM9	ID	MM9	ID	MM9	ID	MM9
Be-7	38.791	Y-89	13.954	Cs-136	24.944	Hg-200	12.078
Be-9	14.677	Y-90	15.883	Cs-137	12.253	Hg-201	18.690
B-10	26.404	Y-91	15.978	Ba-130	20.736	Hg-202	17.186
B-11	14.399	Zr-90	11.002	Ba-132	18.812	Hg-204	12.269
C-12	14.317	Zr-91	16.054	Ba-133	16.669	Tl-203	18.817
N-14	22.337	Zr-92	10.526	Ba-134	16.524	Tl-205	10.377
N-15	11.275	Zr-93	15.357	Ba-135	19.293	Pb-204	11.766
O-16	13.807	Zr-94	12.179	Ba-136	12.240	Pb-206	11.805
O-17	17.904	Zr-95	0.952	Ba-137	16.038	Pb-207	10.406
F-19	14.508	Zr-96	11.894	Ba-138	11.844	Pb-208	11.976
Na-22	33.992	Nb-93	16.206	Ba-140	14.650	Bi-209	11.821
Na-23	14.645	Nb-94	20.946	La-138	24.346	Ra-223	29.397
Mg-24	14.131	Nb-95	18.700	La-139	18.694	Ra-224	18.895
Mg-25	14.492	Mo-92	12.214	La-140	15.097	Ra-225	28.936
Mg-26	13.496	Mo-94	12.114	Ce-136	20.027	Ra-226	14.233
Al-27	14.382	Mo-95	20.788	Ce-138	14.369	Ac-225	28.510
Si-28	13.647	Mo-96	14.639	Ce-139	33.041	Ac-226	31.230
Si-29	13.349	Mo-97	16.318	Ce-140	11.815	Ac-227	29.034
Si-30	11.419	Mo-98	12.570	Ce-141	25.237	Th-227	30.174
P-31	14.958	Mo-99	8.914	Ce-142	12.717	Th-228	25.043
S-32	14.754	Mo-100	12.845	Ce-143	-12.811	Th-229	23.380
S-33	17.697	Tc-99	23.171	Ce-144	9.063	Th-230	12.982
S-34	10.556	Ru-96	16.710	Pr-141	19.461	Th-231	35.866
S-36	10.413	Ru-98	20.062	Pr-142	24.007	Th-232	17.222
Cl-35	20.024	Ru-99	24.567	Pr-143	12.810	Th-233	32.591
Cl-37	12.738	Ru-100	18.518	Nd-142	16.826	Th-234	0.467
Ar-36	20.994	Ru-101	20.129	Nd-143	24.975	Pa-229	28.914
Ar-38	17.105	Ru-102	15.804	Nd-144	16.154	Pa-230	7.592
Ar-40	14.066	Ru-103	-13.240	Nd-145	22.603	Pa-231	30.986
K-39	15.577	Ru-104	13.862	Nd-146	11.765	Pa-232	15.827
K-40	21.991	Ru-105	-7.177	Nd-147	29.372	Pa-233	22.591
K-41	17.268	Ru-106	13.926	Nd-148	10.290	U-230	21.113
Ca-40	14.840	Rh-103	26.643	Nd-150	7.604	U-231	9.957
Ca-42	15.284	Rh-105	37.480	Pm-147	25.913	U-232	12.569
Ca-43	21.725	Pd-102	17.716	Pm-148	74.699	U-233	16.672
Ca-44	17.004	Pd-104	17.016	Pm-148m	0.000	U-234	21.547
Ca-46	14.995	Pd-105	22.979	Pm-149	31.412	U-235	14.739

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM9	ID	MM9	ID	MM9	ID	MM9
Ca-48	15.507	Pd-106	14.391	Pm-151	6.643	U-236	11.414
Sc-45	21.897	Pd-107	20.996	Sm-144	12.556	U-237	25.147
Ti-46	15.543	Pd-108	18.146	Sm-147	26.328	U-238	11.843
Ti-47	17.325	Pd-110	13.761	Sm-148	9.873	U-239	20.207
Ti-48	20.121	Ag-107	20.945	Sm-149	34.723	U-240	18.475
Ti-49	17.764	Ag-109	24.622	Sm-150	5.946	U-241	28.750
Ti-50	12.360	Ag-110m	0.000	Sm-151	29.615	Np-234	14.243
V-50	20.601	Ag-111	19.233	Sm-152	10.602	Np-235	29.232
V-51	21.510	Cd-106	16.177	Sm-153	21.464	Np-236	18.632
Cr-50	21.705	Cd-108	17.433	Sm-154	9.835	Np-237	20.548
Cr-52	14.401	Cd-110	21.568	Eu-151	29.301	Np-238	13.456
Cr-53	20.808	Cd-111	21.130	Eu-152	30.308	Np-239	25.545
Cr-54	12.704	Cd-112	11.754	Eu-153	15.842	Pu-236	16.275
Mn-55	21.768	Cd-113	36.992	Eu-154	34.145	Pu-237	13.424
Fe-54	17.573	Cd-114	11.538	Eu-155	35.259	Pu-238	25.312
Fe-56	20.137	Cd-115m	0.000	Eu-156	29.538	Pu-239	15.389
Fe-57	18.114	Cd-116	10.811	Eu-157	28.509	Pu-240	26.511
Fe-58	17.882	In-113	20.860	Gd-152	19.688	Pu-241	17.529
Co-58	35.479	In-115	31.150	Gd-153	32.240	Pu-242	17.290
Co-58m	38.575	Sn-112	16.864	Gd-154	12.771	Pu-243	6.887
Co-59	21.971	Sn-113	15.011	Gd-155	35.002	Pu-244	7.861
Ni-58	17.526	Sn-114	12.719	Gd-156	10.282	Pu-246	23.948
Ni-59	21.563	Sn-115	23.103	Gd-157	35.420	Am-240	14.843
Ni-60	17.521	Sn-116	13.492	Gd-158	15.541	Am-241	31.875
Ni-61	19.364	Sn-117	17.472	Gd-160	11.663	Am-242	34.524
Ni-62	22.720	Sn-118	13.918	Tb-159	16.755	Am-242m	0.000
Ni-64	15.417	Sn-119	18.081	Tb-160	31.556	Am-243	24.330
Cu-63	17.601	Sn-120	11.342	Dy-156	24.254	Am-244	32.134
Cu-65	17.710	Sn-122	10.880	Dy-158	22.173	Am-244m	0.000
Zn-64	14.674	Sn-123	22.540	Dy-160	14.367	Cm-240	3.649
Zn-65	29.461	Sn-124	12.865	Dy-161	24.043	Cm-241	11.014
Zn-66	13.820	Sn-125	2.115	Dy-162	19.379	Cm-242	4.981
Zn-67	21.545	Sn-126	11.447	Dy-163	17.197	Cm-243	18.790
Zn-68	13.956	Sb-121	20.238	Dy-164	32.441	Cm-244	22.562
Zn-70	11.972	Sb-123	18.377	Ho-165	23.753	Cm-245	19.267
Ga-69	17.230	Sb-124	25.482	Ho-166m	0.000	Cm-246	12.506
Ga-71	18.511	Sb-125	23.354	Er-162	23.963	Cm-247	16.133

pokračování na další straně

pokračování z předchozí strany							
ID	MM9	ID	MM9	ID	MM9	ID	MM9
Ge-70	19.507	Sb-126	25.176	Er-164	20.818	Cm-248	7.420
Ge-72	14.293	Te-120	16.854	Er-166	13.435	Cm-249	11.912
Ge-73	22.177	Te-122	11.618	Er-167	34.786	Cm-250	22.014
Ge-74	12.471	Te-123	31.882	Er-168	14.567	Bk-245	34.417
Ge-76	12.391	Te-124	19.292	Er-170	17.525	Bk-246	15.209
As-74	27.190	Te-125	17.390	Tm-168	29.063	Bk-247	31.402
As-75	19.131	Te-126	12.855	Tm-169	25.830	Bk-248	18.925
Se-74	22.946	Te-127m	0.000	Tm-170	26.847	Bk-249	36.573
Se-76	21.922	Te-128	13.693	Lu-175	6.261	Bk-250	15.996
Se-Ir	22.296	Te-129m	0.000	Lu-176	32.859	Cf-246	9.566
Se-78	15.209	Te-130	11.974	Hf-174	26.710	Cf-248	31.720
Se-79	24.605	Te-132	12.472	Hf-176	13.491	Cf-249	19.200
Se-80	12.544	I-127	21.174	Hf-177	30.541	Cf-250	36.235
Se-82	11.746	I-129	21.913	Hf-178	22.906	Cf-251	19.132
Br-79	19.896	I-130	23.743	Hf-179	23.752	Cf-252	14.625
Br-81	17.976	I-131	17.301	Hf-180	15.684	Cf-253	16.317
Kr-78	21.309	I-135	26.900	Ta-180	34.429	Cf-254	5.621
Kr-80	20.512	Xe-123	29.761	Ta-181	13.102	Es-251	33.164
Kr-82	19.006	Xe-124	29.273	Ta-182	37.167	Es-252	19.444
Kr-83	23.790	Xe-126	18.325	W-180	18.894	Es-253	27.722
Kr-84	12.377	Xe-128	17.901	W-182	21.009	Es-254	35.103
Kr-85	18.437	Xe-129	22.321	W-183	21.996	Es-254m	0.000
Kr-86	10.379	Xe-130	15.751	W-184	15.233	Es-255	31.224
Rb-85	16.585	Xe-131	23.706	W-186	19.334	Fm-255	18.457
Rb-86	18.695	Xe-132	11.558	Re-185	25.824		