

**ZÁPADOČESKÁ UNIVERZITA V PLZNI
FAKULTA ELEKTROTECHNICKÁ**

KATEDRA ELEKTROENERGETIKY A EKOLOGIE

DIPLOMOVÁ PRÁCE

**Validace výpočetního kódu Serpent pro reaktory typu
VVER**

Originál (kopie) zadání BP/DP

Originál (kopie) zadání BP/DP

Abstrakt

Předkládaná práce se zabývá validací výpočetního kódu Serpent, který využívá metodu výpočtu Monte Carlo. Práce obsahuje stručný úvod do reaktorové fyziky a metodiky validace. Dále je představen samotný kód Serpent a jeho příkazy, metoda Monte Carlo a princip kritických výpočtů. Druhá část je zaměřena na experimenty z databáze ICSBEP pro reaktory VVER. Vybrané úlohy byly v Serpentu namodelovány a byl vypočítán koeficient násobení. Na modelovém příkladu bazénu skladování vyhořelého paliva byla demonstrována systematická chyba kódu.

Klíčová slova

Serpent, validace, koeficient násobení, ICSBEP, benchmark, systematická chyba.

Abstract

This diploma thesis deals with validation of computational code Serpent, which uses Monte Carlo method. The work contains brief introduction into reactor physics and validation methodology. Then is introduced Serpent and its basic commands, Monte Carlo method and principle of criticality calculations. Second part is focused on experiments from ICSBEP database for VVER reactors. Selected tasks were modeled in Serpent and multiplication factor was calculated. A systematic error of code was demonstrated on the model example of the spent fuel storage pool.

Key words

Serpent, validation, multiplication factor, ICSBEP, benchmark, systematic error

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracovala samostatně, s použitím odborné literatury a pramenů uvedených v seznamu, který je součástí této diplomové práce.

Dále prohlašuji, že veškerý software, použitý při řešení této diplomové práce, je legální.

.....
podpis

V Plzni dne 21.5.2018

Bc. Eva Vilímová

Poděkování

Tímto bych ráda poděkovala vedoucí diplomové práce Ing. Janě Jiříčkové, Ph.D za vedení práce a především Ing. Martinu Loveckému, Ph.D za věnovaný čas, trpělivost, ochotu při konzultacích a cenné profesionální rady a připomínky.

Obsah

Seznam symbolů a zkratk	10
Úvod	12
1 Úvod do fyziky reaktoru	13
1.1 NEUTRONOVÉ INTERAKCE	13
1.2 MIKROSKOPICKÝ ÚČINNÝ PRŮŘEZ.....	14
1.3 ŠTĚPNÁ ŘETĚZOVÁ REAKCE.....	16
1.3.1 Kritická podmínka reaktoru	19
2 Výpočetní kód Serpent	20
2.1 METODA MONTE CARLO.....	20
2.1.1 <i>k</i> -eigenvalue metoda.....	21
2.1.2 Statistika a přesnost odhadů metody Monte Carlo	21
2.2 PRINCIP KRITICKÝCH VÝPOČTŮ	22
2.2.1 Statistická chyba kritických výpočtů	23
2.3 PŘÍKAZY V KÓDU SERPENT	24
2.3.1 <i>Vnější povrch</i>	24
2.3.2 <i>Buňka</i>	26
2.3.3 <i>Palivový proutek</i>	27
2.3.4 <i>Mříž</i>	27
2.3.5 <i>Materiál</i>	28
2.3.6 <i>Další příkazy</i>	29
3 Validace softwaru	31
3.1 METODY ZKOUŠENÍ SOFTWARE	32
4 ICSBEP databáze a benchmarky	35
4.1 BENCHMARKOVÉ MODEL Y PRO REAKTORY VVER.....	36
4.1.1 <i>Maďarské experimenty</i>	37
4.1.2 <i>České experimenty</i>	37
4.1.3 <i>Ruské experimenty</i>	38
4.1.4 <i>Vybrané experimenty pro validaci kódu Serpent</i>	40
5 Validace výpočetního kódu Serpent	57
5.1 ZHODNOCENÍ VÝPOČTŮ	57
5.2 VÝPOČET KRITICNOSTI BAZÉNU SKLADOVÁNÍ VYHOŘELÉHO PALIVA	62

5.3 SHRNUÍ.....	65
Závěr.....	66
Seznam literatury a informačních zdrojů	68
Přílohy	1
A. Vstupní soubor pro kód Serpent - LCT 030, varianta 1.....	1
B. Vstupní soubor pro kód Serpent - BVP.....	9

Seznam symbolů a zkratk

ANSI-C.....	Jazyka C publikovaný pod hlavičkou ANSI.
ČSN	Česká technická norma.
DLC/MCUDAT.....	Knihovna jaderných dat projektu Monte Carlo Universal.
ENDF.....	Evaluated Nuclear Data File. Knihovna vyhodnocených jaderných dat.
ICSBEP.....	International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project.
IEEE	Institute of Electrical and Electronics Engineers. Institut pro elektrotechnické a elektronické inženýrství.
ISO/IEC	International Organization for Standardization/ International Electrotechnical Commission. Mezinárodní organizace pro normalizaci/ Mezinárodní elektrotechnická komise.
JEFF.....	Joint Evaluated Fission and Fusion. Evaluovaná jaderná data pro štěpení a fúzi.
JENDL.....	Japanese Evaluated Nuclear Data Library. Japonská knihovna vyhodnocených jaderných dat.
KENO	Výpočetní multigrupový Monte Carlo kód.
LCT.....	LEU-COMP-THERM, označení benchmarkové úlohy.
MAC OS X....	Operační systém pro počítače Apple Macintosh.
MCNP.....	Monte Carlo N-Particle. Výpočetní Monte Carlo kód.
MCU	Monte Carlo Universal. Výpočetní Monte Carlo kód
MeV	Megaelektronvolt.
MONK9A.....	Monte Carlo kód pro kritické analýzy.
UNIX	Operační systém.
USL.....	Upper subcritical limit. Horní limit podkritičnosti.
VVER	Vodo-vodní energetický reaktor.
f	Koeficient využití tepelných neutronů [-].
k_{∞}	Koeficient násobení v nekonečné soustavě [-].
k_{ef}	Efektivní koeficient násobení [-].
n	Počet neutronů.
p	Pravděpodobnost úniku rezonančnímu záchytu.
wt%	Váhová procenta.
α	Rozpad alfa.
β	Rozpad beta.
γ	Záření gama.
ε	Koeficient násobení rychlými neutrony [-].

- η Regenerační faktor [-].
- v Rychlost neutronů [m/s].
- σ Mikroskopický účinný průřez [b].
- φ Hustota toku neutronů [$\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$].

Úvod

V praxi je využíváno mnoho výpočetních kódů, nejen těch, které jsou určeny pro výpočty týkajících se jaderných reaktorů. Ale právě na kódy používané v jaderném inženýrství je třeba nahlížet se zvláštním kritickým pohledem. Jaderná energetika je velmi diskutované téma a veškeré činnosti v ní jsou velmi pozorně sledovány. Z toho důvodu je důležité, aby používaný výpočetní kód byl před jeho užíváním validován. Jelikož nás u provozování reaktorů zajímá hlavně bezpečnost, je velmi důležité používaný výpočetní kód znát a důvěřovat jeho výsledkům.

Tato práce se zaměřuje právě na validaci a seznámení se s kódem Serpent. Kód byl validován konkrétně pro reaktory typu VVER, které jsou provozovány v České republice. Důvodem je skutečnost, že validace tohoto typu ještě nebyla provedena. Jako nástroje validace Serpentu byly použity kritické výpočty, tedy výpočet koeficientu násobení.

Cílem práce je zjistit chování kódu Serpent s knihovnou jaderných dat JEFF-3.2 při výpočtech benchmarkových úloh, které vycházejí z konceptu reaktoru VVER, a aplikovat získanou systematickou chybu kódu na modelovém příkladě. Benchmarkové úlohy byly vybírány z mezinárodní databáze ICSBEP, která koncentruje experimenty různých druhů a slouží právě například pro validaci výpočetních kódů.

1 Úvod do fyziky reaktoru

Před pokročením k dalším kapitolám, které budou zaměřené na výpočetní kód Serpent a jeho validaci, by bylo vhodné uvést pár základních poznatků z reaktorové fyziky. Následující kapitola tedy obsahuje popis štěpné řetězové reakce, informace o základních interakcích neutronu s ostatními jádry v reaktoru a o mikroskopickém účinném průřezu.

1.1 Neutronové interakce

Okamžité neutrony, uvolněné při štěpení, mají střední energii okolo 2 MeV a pohybují se libovolným směrem do té doby, než se dostanou do blízkosti přítomných jader atomů nebo než uniknou ze systému a dále se již procesu interakcí neúčastní. Pokud se neutron dostane do blízkosti jádra tak, že na něj působí jaderné síly, dochází mezi neutronem a jádrem k srážce. [1] Většina interakcí (80-90 %) probíhá přes tzv. složené jádro, což znamená, že neutron je jádrem pohlčen a nukleonové číslo je oproti původnímu zvýšeno o 1. Složené jádro se nachází ve velmi nestabilním a excitovaném stavu. [2] Poté může nastat několik různých reakcí, a to: [1]

- Rozptyl neutronu, reakce (n, n) a (n, n') ,
- Absorpce neutronu, reakce (n, α) , (n, p) a (n, γ) ,
- Tříštvivé reakce, reakce (n, xn) .

Rozptyl neutronů

Při srážce neutronu s jádrem mohou nastat dva druhy rozptylů. Pružný a nepružný rozptyl.

Pružný rozptyl (n, n)

Během elastické srážky mezi neutronem a jádrem dochází k zachování hybnosti a kinetické energie systému. Cílové jádro získává část kinetické energie, kterou neutron při srážce s ním ztratí. Pružný rozptyl může probíhat přes vzbuze složené jádro, tzv. rezonanční pružný rozptyl. V tomto případě je neutron absorbován, znovu emitován a jádro se vrátí do svého základního stavu. Není pravidlem, že je emitován stejný neutron, který byl jádrem pohlčen. Druhým a mnohonásobně častějším typem pružného rozptylu je potenciální pružný rozptyl. Lze v něm vidět analogii s kulečnickovými koulemi s neprostupným povrchem. Na rozdíl od kulečnicku, ve skutečnosti mezi neutronem a jádrem k dotyku nedochází. Pokud se neutron dostane do dostatečné blízkosti k jádru,

začnou na něj působit síly, které jej odrazí. Pružný rozptyl je využíván v tepelných reaktorech pro zpomalení neutronů na tepelnou energii, která je kolem 0,025 eV.[2, 3]

Nepružný rozptyl (n, n')

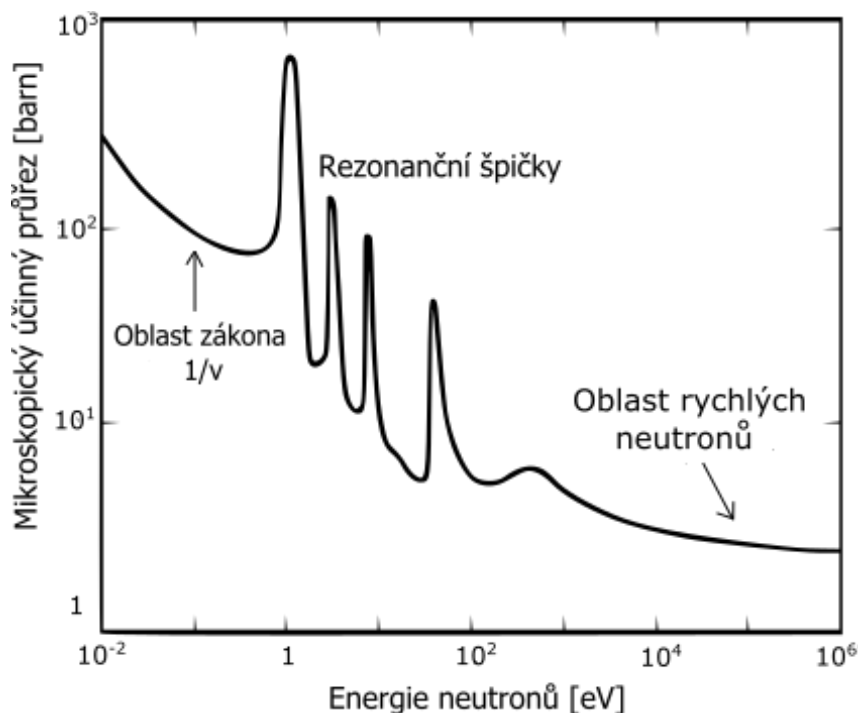
Nepružná srážka neutronu s jádrem způsobí, že je neutron jádrem pohlcen na velmi krátkou dobu a dojde k vytvoření složeného jádra. Neutron předá jádru určitou část své kinetické energie a jádro se tak dostává do excitovaného stavu. Jelikož je jádro v tomto excitovaném stavu nestabilní, dojde k vyloučení neutronu z jádra o nižší kinetické energii a jádro se vrací do základního stavu vyzářením energie v podobě gama záření. [2–4]

Absorpce neutronů

Jak již název napovídá, u tohoto druhu interakce dochází ke ztrátě neutronu, který by se mohl podílet na štěpné řetězové reakci. Po jeho pohlcení již není jádrem vyloučen a nukleonové číslo je tedy zvýšeno o 1. Výsledné složené jádro může být radioaktivní a dále se přeměňuje radioaktivním rozpadem. Různé absorpční reakce lze rozlišit podle druhu vyzářeného kvanta nebo hmotné částice. Existuje tzv. radiační záchyt (n, γ), kdy se jádro dostává z excitovaného stavu vyzářením gama záření. Absorpci, která je provázena emisí těžké nabitě alfa částice ${}^4_2\text{He}$ nebo protonu, se říká emise nabitě částice, reakce (n, α) a (n, p). Třetí absorpční reakcí, při které se však neutron neztrácí a pro reaktor nejdůležitější reakcí, je absorpce způsobující štěpení (n, f), které bude popsáno v kapitole 1.3. [2, 3]

1.2 Mikroskopický účinný průřez

U výše zmíněných interakcí neutronu a jádra není možné přesně určit, která interakce nastane. Vše je otázka pravděpodobnosti. Tuto pravděpodobnost vyjadřuje *mikroskopický účinný průřez* σ . Jedná se o míru pravděpodobnosti, že dojde k interakci mezi jádrem nacházejícím se v terčové ploše 1 m^2 a neutronem, který dopadá kolmo na tuto plochu [1]. Udává se v jednotce m^2 nebo barn. Platí, že $1 \text{ barn} = 10^{-28} \text{ m}^2$.



Obr. 1: Závislost mikroskopického účinného průřezu na kinetické energii neutronů [3]

Na (Obr. 1) je zobrazena typická závislost mikroskopického účinného průřezu na kinetické energii neutronu. Průběh můžeme rozdělit na tři oblasti. Oblast rychlých neutronů o velké energii cca $10^3 - 10^7$ eV, rezonanční oblast o energii $1 - 10^3$ eV a na oblast platnosti zákona $1/v$, oblast tepelných neutronů s energií do 1 eV.[1, 3]

Každý prvek má svůj charakteristický účinný průřez. Pravděpodobnost interakce je tedy závislá na druhu ostřelovaného jádra a kinetické energii neutronu. Čím více jader se bude v ostřelované ploše nacházet, tím větší je pravděpodobnost některé interakce. To vyjadřuje *makroskopický účinný průřez* Σ (Rov. 1).[1, 3]

$$\Sigma = N \cdot \sigma \quad (1)$$

kde:

Σ je makroskopický účinný průřez,

N je počet jader v jednotce objemu,

σ je mikroskopický účinný průřez.

Každá výše zmíněná interakce se charakterizuje svým mikroskopickým účinným průřezem. V základu je lze rozdělit na mikroskopický účinný průřez pro absorpci (Rov. 2) a pro rozptyl (Rov. 3): [1]

$$\sigma_a = \sigma_f + \sigma_r \quad (2)$$

$$\sigma_s = \sigma_e + \sigma_i \quad (3)$$

kde:

σ_f , σ_r , σ_e , σ_i jsou účinné průřezy pro štěpení, radiační záchyt, pružný a nepružný rozptyl,

σ_a , σ_s jsou účinné průřezy pro absorpci a rozptyl.

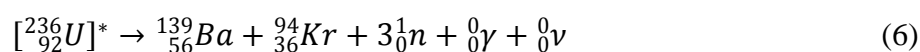
Celkový účinný průřez je pak (Rov. 4):

$$\sigma = \sigma_f + \sigma_r + \sigma_e + \sigma_i \quad (4)$$

Mikroskopické účinné průřezy jsou důležitou charakteristikou jednotlivých prvků. Makroskopické účinné průřezy pro rozptyl a absorpci jsou jedním z parametrů, které hrají důležitou roli při výběru moderátoru nebo absorbátoru.

1.3 Štěpná řetězová reakce

Štěpení představuje druh absorpční interakce, kdy po pohlcení tepelného neutronu jádrem, např. ^{235}U , dojde k jeho rozštěpení na nejčastěji dva menší odštěpky, uvolnění 2-3 neutronů a určitého množství energie. Existují izotopy štěpné a štěpitelné. Mezi štěpitelné izotopy patří například ^{238}U , pro jehož rozštěpení je potřeba, aby měl neutron daleko vyšší energii, než má tepelný (cca nad 1 MeV [1]). Naopak štěpné izotopy lze rozštěpit i tepelným neutronem a do této kategorie patří právě i ^{235}U . Jedna z možností štěpení jádra ^{235}U je vyjádřeno (Rov. 5 a 6).[1]



Na této skutečnosti je založena štěpná řetězová reakce. Aby se ovšem řetězová reakce udržela a po nějaké době neustala, je nutné, aby na každý zachycený neutron vznikl alespoň jeden nový. Tuto záležitost definuje tzv. *koeficient násobení k* (též multiplikační faktor). Právě pro sledování populace neutronů, tedy výpočtu koeficientu násobení, se využívají různé výpočetní kódy, jako např. kód Serpent. Obecně je koeficient násobení definován jako poměr určité generace neutronů ku generaci předchozí. (Rov. 7). Na jednu generaci je možné získat $k-1$ neutronů. Tato rovnice platí v nekonečně velkém reaktoru,

kde nedochází k úniku neutronů z aktivní zóny. Koeficient násobení se pak značí jako k_{∞} . [1, 2, 4–6]

$$k_{\infty} = \frac{n_i}{n_{i-1}} \quad (7)$$

Ve skutečném reaktoru vždy dochází k úniku neutronů, a proto byl zaveden tzv. *efektivní koeficient násobení* k_{ef} , který je vždy menší než k_{∞} a respektuje geometrii dané aktivní zóny.

Během života jedné generace neutronů se mohou neutrony ztrácet dvěma způsoby. Absorpcí v některém typu okolních jader nebo únikem ze soustavy. Život jedné generace začíná absorbováním tepelných neutronů v palivu (*Obr. 2 - blok 1*). Protože pravděpodobnost štěpné reakce je dána poměrem makroskopického účinného průřezu pro štěpení tepelnými neutrony a makroskopického účinného průřezu pro absorpci tepelných neutronů v palivu, nelze předpokládat, že všechny zachycené neutrony v palivu způsobí štěpení. Dochází tedy k určité ztrátě neutronů, které jsou zachyceny v palivu neštěpně (*Obr. 2 - blok 2*). Blok 3 a 4 na (*Obr. 2*) reprezentují neutrony zachycené štěpně, tedy vyvolávající štěpení paliva. Koeficient η , tzv. *regenerační faktor*, vyjadřuje průměrný počet rychlých neutronů uvolněných při štěpení zachycením jednoho tepelného neutronu v palivu (*Obr. 2 - blok 5*).

Mají-li rychlé neutrony během zpomalování dostatečnou energii (nad 1 MeV [1, 2]), mohou způsobit štěpení ^{238}U (*Obr. 2 - blok 6*). Dochází tak ke zvýšení počtu rychlých neutronů. Tento jev popisuje *koeficient násobení rychlými neutrony* ε a je definován jako poměr celkového počtu rychlých neutronů vznikajících při štěpení neutrony všech energií, k počtu rychlých neutronů uvolněných při štěpení tepelnými neutrony (*Obr. 2 - blok 7*). V tepelném reaktoru jsou ale potřeba neutrony o tepelné energii. Rychlé neutrony je nutné zpomalit pomocí moderátoru. Ještě než jsou neutrony zpomaleny, některé rychlé neutrony uniknou ze soustavy (*Obr. 2 - blok 8*).

Než neutrony dosáhnou tepelné energie, musí přejít přes rezonanční oblast pro absorpci jader ^{238}U (*Obr. 2 - blok 9*), kde je vysoká pravděpodobnost, že budou pohlceny (*Obr. 2 - blok 10*). *Pravděpodobnost úniku rezonančnímu záchytu* vyjadřuje koeficient p . Zbylé nezachycené neutrony (*Obr. 2 - blok 11*) jsou dále zpomalovány. Než ale tepelné neutrony začnou štěpit ^{235}U , uniknou některé ze soustavy vlivem difúze a některé mohou být absorbované v jiném materiálu, než je palivo (*Obr. 2 blok 12-16*).

To, kolik tepelných neutronů přispívá k neutronové bilanci lze vyjádřit *koeficientem využití tepelných neutronů* f . Je to poměr počtu tepelných neutronů pohlcených v palivu k celkovému počtu pohlcených tepelných neutronů. Cyklus se uzavírá tím, že neutrony zpomalené na tepelnou energii, které žádným výše popsaným způsobem neunikly ze soustavy, jsou pohlceny palivem a následně dochází ke štěpení (Obr. 2 - blok 1).[1, 2, 5]

Výše definované čtyři koeficienty popisující jednu generaci neutronů. Pomocí nich lze sestavit tzv. vzorec čtyř koeficientů (Rov. 8):

$$k_{\infty} = \frac{n_i}{n_{i-1}} = \frac{n\eta\epsilon p f}{n} = \eta\epsilon p f \quad (8)$$

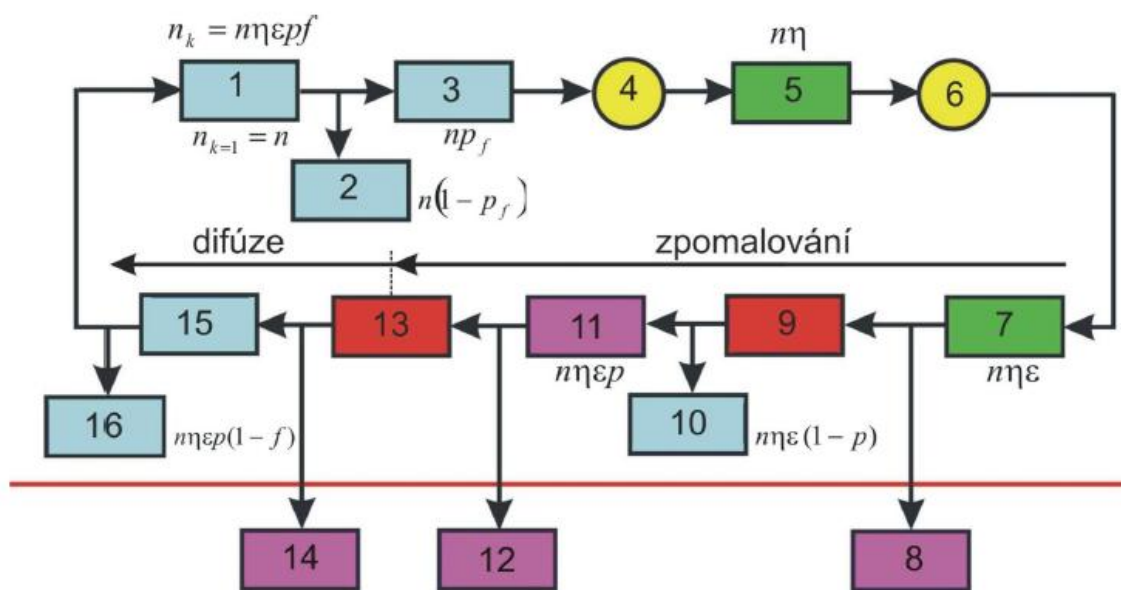
Jak bylo zmíněno, během jedné generace neutronů dochází i k únikům ze soustavy při zpomalování a vlivem difúze. Tyto úniky lze vyjádřit pravděpodobnostmi a výše uvedený efektivní koeficient násobení pak lze psát jako (Rov. 9):[1, 2, 5]

$$k_{ef} = P_1 P_2 k_{\infty} \quad (9)$$

kde:

P_1 je pravděpodobnost, že neutrony neuniknou ze soustavy během zpomalování,

P_2 je pravděpodobnost, že neutrony neuniknou ze soustavy během difúze.



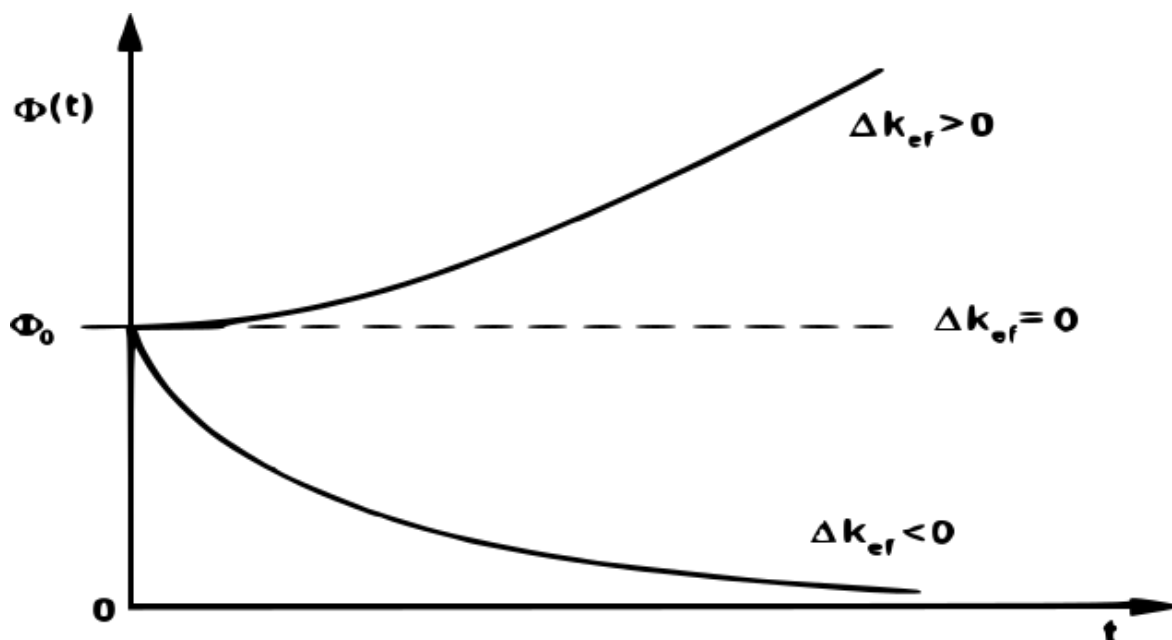
Obr. 2: Blokové schéma cyklu jedné generace neutronů [1]

1.3.1 Kritická podmínka reaktoru

Při návrhu aktivní zóny je důležitý právě výpočet k_{ef} . Je-li splněna tzv. kritická podmínka reaktoru (Rov. 10), je pak: [1, 2, 4, 5]

$$k_{ef} = 1 \quad (10)$$

Znamená to, že rozměry reaktoru a parametry aktivní zóny jsou takové, že se v něm štěpná řetězová reakce samočinně udrží. Hustota toku neutronů, tudíž i výkon, je tedy konstantní (Obr. 3). Není-li tato podmínka dodržena a $k_{ef} < 1$, je stav reaktoru tzv. podkritický, štěpná řetězová reakce se sama neudrží a zastavuje se. Naopak v situaci, kdy $k_{ef} > 1$, je reaktor tzv. nadkritický a jeho výkon velmi strmě narůstá. Pokud by se tento stav nezměnil, hrozí, že nebude možné štěpnou řetězovou reakci dál řídit. [1, 4]



Obr. 3: Časová závislost hustoty neutronového toku v konečné násobící soustavě [1]

2 Výpočetní kód Serpent

Kód Serpent byl vyvinut VTT Centrem technického výzkumu ve Finsku v roce 2004. V dnešní době již existuje druhá verze kódu - Serpent 2. Je využíván v reaktorové fyzice při výpočtech palivového cyklu nebo kritických výpočtech. Dále je využíván pro multi-fyzikální simulace, výpočet dávky záření z transportu neutronů a fotonů, při výpočtech stínění nebo jako nástroj pro výzkum jaderné fúze. Kód je napsán ve standardním jazyce ANSI-C. Hlavně byl vyvinut pro operační systém Linux, ale lze jej zkompileovat i na MAC OS X nebo v prostředí UNIX.[7]

2.1 Metoda Monte Carlo

Kód Serpent je založený na metodě Monte Carlo. Metoda Monte Carlo vychází z teorie pravděpodobnosti a matematické statistiky. Byla formulována vědeckými pracovníky Johnem von Neumannem a Stanislavem Ulamem ve Spojených státech amerických, kteří zkoumali chování neutronů při průletu různými materiály. Bez metody Monte Carlo bylo velmi obtížné stanovit, kolik neutronů projde například nádrží vody. Neumann a Ulam využili k řešení tzv. „historie života neutronů“ princip kola rulety. Odtud získala metoda svůj název Monte Carlo.

Právě pomocí rulety simulovali pohyb neutronů ve vodě. Bylo tak možné předpovědět jejich trajektorii. Vycházeli z předpokladu, že náhodný jev, kdy bude neutron pohlcen při srážce s atomem vodíku, nastane průměrně jednou za sto srážek. Na kole rulety, rozděleném na sto dílků, byl vyznačen jeden jako "pohlcení neutronu atomem vodíku". Zbytek dílků znamenal, že neutron putuje dál. Jestliže se tedy kolo rulety zastavilo právě na onom jednom označeném políčku, byl život neutronu považován za ukončený. V ostatních případech byla pomocí dalšího kola rulety náhodně určena rychlost neutronu po srážce, pomocí dalšího kola směr, trajektorie atd. Simulace „historie života neutronu“ je prováděna, dokud není pohlcen, nebo dokud neztratí příliš mnoho energie, že po vylétnutí z nádrže není pro experiment zajímavý, anebo dokud neprojde nádrží bez újmy. Při provedení velkého počtu simulací lze získat poměrně přesný přehled o tom, kolik neutronů nádrží s vodou prošlo. [8, 9]

Úspěšnost výpočtu metodou Monte Carlo na počítači je dána: [9]

- Kvalitou generátoru náhodných, resp. pseudonáhodných čísel,
- Výběrem racionálního algoritmu výpočtu,

- Počtem iterací,
- Kontrolou přesnosti získaného výsledku.

2.1.1 k-eigenvalue metoda

Serpent používá defaultně k výpočtu koeficientu násobení metodu *k-eigenvalue*. Simulace probíhá v cyklech, ve kterých jsou sledovány jednotlivé historie neutronů. Rozložení zdroje neutronů je dáno předchozím cyklem. Kvůli tomu, že během výpočtu se může velikost zdroje neutronů měnit, jsou neutrony po každém cyklu buď přidány, nebo odebrány. Počáteční odhad rozložení zdroje může být nepřesný a může se tak prodloužit doba konvergence. V kódu je proto nutné určit, kolik počátečních cyklů bude neaktivních a kolik zbylých cyklů bude aktivních.

2.1.2 Statistika a přesnost odhadů metody Monte Carlo

Metoda Monte Carlo je numerická metoda využívající modelování pomocí náhodných veličin a statistického odhadu jejich charakteristik. Odhadovaný výsledek se většinou udává jako průměr jednotlivých odhadů získaných opakováním simulace. Serpent využívá Monte Carlo *k-eigenvalue* výpočet, kde jsou právě jednotlivé odhady získány z hodnot, které jsou zaznamenávány během aktivních cyklů [10].

V Serpentu se vytváří tzv. dávkový odhad. Po proběhnutí výpočtů jedné dávky, je tento dílčí odhad k_{ef} prezentován jako odhad *i*-tého cyklu (iterace) [11]. Výsledný odhad výpočtu je průměr, udávaný jako (rov. 11): [11, 12]

$$\overline{k_{ef}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n k_{efi} \quad (11)$$

kde *n* je počet historií neutronů a k_{efi} je odhad *i*-té dávky. Přesnost výsledku pak určuje směrodatná odchylka průměru definovaná podle (rov. 12): [11, 12]

$$\sigma_{\overline{k_{ef}}} = \left(\frac{n}{n-1}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (k_{efi} - \overline{k_{ef}})^2\right)^{\frac{1}{2}} \quad (12)$$

Směrodatnou odchylku průměru lze vyjádřit i pomocí intervalu spolehlivosti. Aby bylo možné určit tento interval, je nutné znát rozložení pravděpodobnosti. Podle centrální limitní věty, jestliže se počet simulovaných historií neutronů *n* blíží nekonečnu, pravděpodobnostní funkce se blíží k normálnímu rozdělení. Nyní je možné snadno určit spolehlivostní interval. Velikost intervalu 1σ určuje, že výsledný odhad $\overline{k_{ef}}$ leží v intervalu $(-\sigma, \sigma)$ s 68% pravděpodobností. Protože směrodatná odchylka klesá úměrně s $1/\sqrt{n}$, lze při

dostatečně velkém počtu n dosáhnout skutečnosti, že výsledný odhad k_{ef} bude velmi blízko kolem skutečné očekávané hodnoty, kterou chceme odhadnout. [10, 11]

Zvýšením počtu neutronů na jeden cyklus se ovšem prodlužuje výpočetní čas [8, 10, 12]. Pro přesný a spolehlivý výsledek k_{ef} je doporučeno použít 10.000 a více neutronů/cyklus. Pro rozsáhlé 3D reaktory nebo sklady je pak vhodné použít 100.000 a více či dokonce 1.000.000 neutronů/cyklus. [14]

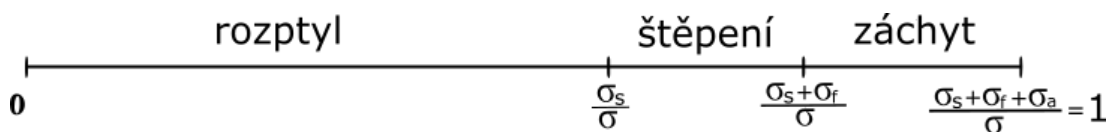
Metoda Monte Carlo během prvních několika desítek iterací konverguje k výsledné hodnotě. Je proto důležité první konvergující iterace vynechat, aby nedošlo k zatížení výsledku velkým zkreslením. S tím souvisí počet iterací celého výpočtu, který musí díky tomu být dostatečně velký. Pro rychlou konvergenci je nutný dobrý odhad počátečního zdroje neutronů. Bodový zdroj konverguje nejpomaleji, naopak rovnoměrně rozložený zdroj konverguje nejrychleji. [12–14]

2.2 Princip kritických výpočtů

Princip kritických výpočtů metodou Monte Carlo vychází v podstatě z jednoduché myšlenky, kterou je počítání, kolik neutronů

- Opustí systém,
- Je absorbováno,
- Je produkováno při štěpení.

Ve výpočtech jsou uvažovány celé generace (dávky) neutronů. Výpočet začíná s počátečním zdrojem, který emituje n neutronů. Ty opustí zdroj a jsou sledovány, dokud nedojde k jejich prvnímu střetnutí s jiným atomem. Sledování cesty jednoho neutronu je označováno jako jedna "historie". V jedné generaci je tedy sledováno n historií. Jak již bylo popsáno v kapitole 1, mohou nastat tři odlišné interakce: rozptyl, záchyt nebo neutron způsobí štěpení paliva. V tomto momentě hrají významnou roli jednotlivé účinné průřezy. Ve výpočtu je nyní generováno náhodné číslo z intervalu $x \in (0,1)$ a zkoumá se, do které části intervalu padne (Obr. 4).

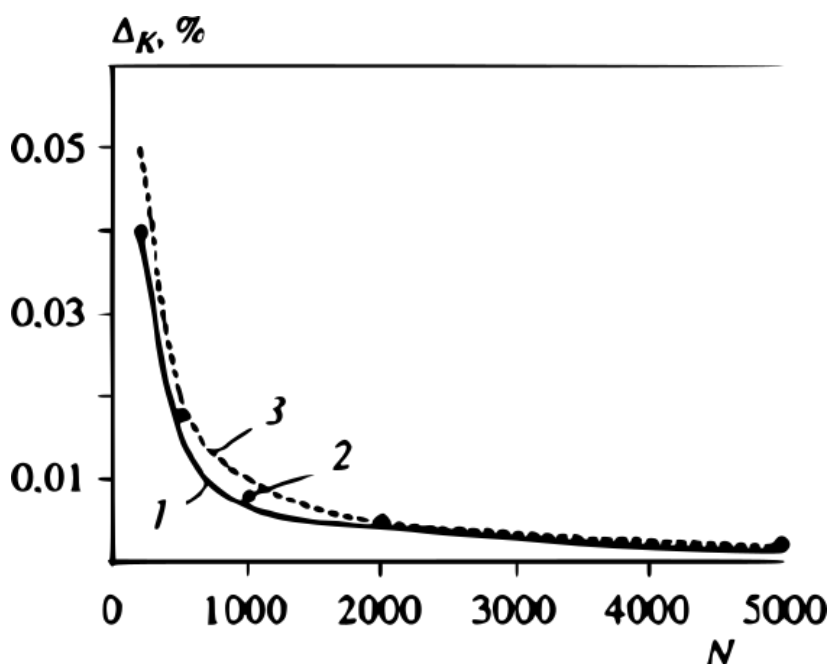


Obr. 4: Určení typu interakce neutronu náhodným číslem podle jednotlivých účinných průřezů [11]

Pokud náhodné číslo určí záchyt, sledování neutronu je ukončeno a dál se s ním již nepočítá. Když náhodné číslo určí, že nastane rozptyl, je neutron sledován na nové cestě k další srážce. Poté se proces s náhodným generováním čísla opakuje. Jaký typ rozptylu nastane a jakou bude mít neutron energii, je čistě náhodný proces. V případě, že náhodné číslo určí štěpení jádra, je sledování neutronu ukončeno. V tomto případě jsou ovšem na jeho místě generovány nové 2-3 neutrony, jako produkty štěpení, a ty jsou opět sledovány. Celý proces je opakován, dokud není všech n neutronů absorbováno neštěpně, neunikly ze systému nebo dokud nezpůsobí štěpení. Dokončené sledování všech n částic jedné generace lze interpretovat jako jednu výpočtovou iteraci. Koeficient násobení je počítán pro každý dílčí cyklus. Konečná hodnota k_{ef} je střední hodnota všech dílčích k_{efi} , doprovázená spolehlivostním intervalem. [12, 13]

2.2.1 Statistická chyba kritických výpočtů

Analýzy [14, 15] ukazují, že při zvolení dostatečného počtu neutronů v jedné generaci, tedy $n \geq 1000$, lze získat spolehlivý odhad koeficientu násobení k_{eff} . Statistická chyba Δk_{eff} poté nepřekročí hranici 0.01% (Obr. 5).



Obr. 5: Závislost statistické chyby Δk_{eff} na počtu neutronů v jedné generaci [20]

2.3 Příkazy v kódu Serpent

Jednotlivé příkazy se sdružují do bloků tzv. cards (česky karet). Každá karta má své specifické označení a nezáleží na jejich pořadí. Karta s příkazy končí tam, kde začíná karta jiná.

Serpent využívá geometrie založené na tzv. universech. To spočívá v tom, že geometrie je rozdělena do jednotlivých oddělených vrstev, které jsou konstruovány nezávisle na sobě. Jednotlivé vrstvy jsou potom vnořeny jedna do druhé. Tento přístup je značnou výhodou, protože komplexní geometrii lze rozdělit na malé části, se kterými se poté lépe pracuje. Princip universů lze demonstrovat na aktivní zóně reaktoru. Nejvyšší úroveň představují jednotlivé palivové proutky, které jsou složeny z palivových pelet, pokrytí a obklopeny chladičem. Proutky jsou definovány ve svém vlastním universu. Druhou úroveň představuje uspořádání jednotlivých proutků do pravidelné mříže, také ve svém vlastním universu. Další vrstvou mohou být různé podpůrné konstrukce aktivní zóny, různé kanály, radiální nebo axiální reflektory a tlaková nádoba.

Základní stavební jednotka pro Serpent je buňka. Každá buňka je ohraničena povrchy a vyplněna homogenním materiálem, prázdňem nebo jiným universem.

Všechny následující příkazy byly použity pro tvorbu modelů v této práci. [16]

2.3.1 Vnější povrch

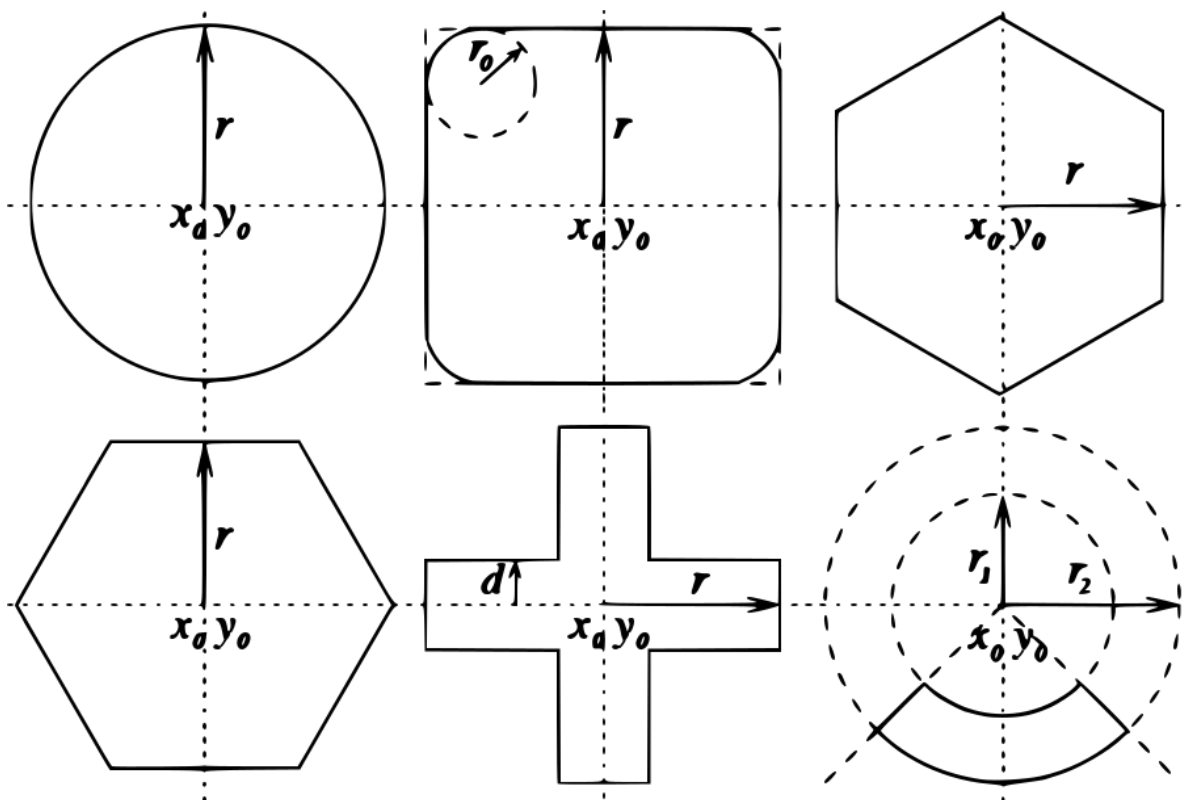
Pro vytvoření určité geometrie z buněk, je nejprve nutné stanovit jejich jednotlivé hranice. Základní struktury lze tvořit pomocí 20 různých povrchů, viz *Tabulka 1*.

Pro rovinu značí parametry x_0 , y_0 a z_0 vzdálenosti od počátku. Naopak u koule, krychle a válcových povrchů tyto parametry představují souřadnici středu povrchu. Poloměr je u těchto objektů definován parametrem r . Parametr r_0 určuje poloměr zaoblení hran, z_1 a z_2 pak definují spodní a horní podstavu válce. Tyto tři parametry však nejsou povinné.

Tabulka 1: Seznam vnějších povrchů a jejich parametry [16]

Typ	Popis	Parametry
<i>inf</i>	Veškerý prostor	-
<i>px</i>	Rovina kolmá na osu x	x_0
<i>py</i>	Rovina kolmá na osu y	y_0
<i>pz</i>	Rovina kolmá na osu z	z_0
<i>sph</i>	Koule	x_0, y_0, z_0, r
<i>cylx</i>	Válec rovnoběžný s osou x	y_0, z_0, r, x_1, x_2
<i>cyly</i>	Válec rovnoběžný s osou y	x_0, z_0, r, y_1, y_2
<i>cylz nebo cyl</i>	Válec rovnoběžný s osou z	x_0, y_0, r, z_1, z_2
<i>sqc</i>	Čtvercový válec rovnoběžný s osou z	x_0, y_0, r, r_0
<i>cube</i>	Krychle	x_0, y_0, z_0, r
<i>cuboid</i>	Kvádr	$x_1, x_2, y_1, y_2, z_1, z_2$
<i>hexxc</i>	Šestihranný válec rovnoběžný s osou z, typ x	x_0, y_0, r, r_0
<i>hexyc</i>	Šestihranný válec rovnoběžný s osou z, typ y	x_0, y_0, r, r_0
<i>hexxprism</i>	Šestihranný kvádr rovnoběžný s osou z, typ x	x_0, y_0, r, z_1, z_2
<i>hexyprism</i>	Šestihranný kvádr rovnoběžný s osou z, typ y	x_0, y_0, r, z_1, z_2
<i>cross</i>	Válec ve tvaru kříže rovnoběžný s osou z	$x_0, y_0, r_1, r_2, \theta_1, \theta_2$
<i>conx</i>	Kužel v ose x	x_0, y_0, z_0, r, h
<i>cony</i>	Kužel v ose y	x_0, y_0, z_0, r, h
<i>conz nebo cone</i>	Kužel v ose z	x_0, y_0, z_0, r, h
<i>dode</i>	Dvanáctihřanný válec rovnoběžný s osou z	x_0, y_0, r_1, r_2
<i>octa</i>	Osmihřanný válec rovnoběžný s osou z	x_0, y_0, r_1, r_2
<i>plane</i>	Základní rovina	A, B, C, D
<i>quadratic</i>	Základní kvadratický povrch	A, B, C, D, E, F, G, H, J, K

Pro správné definování buněk je důležité rozlišovat, zda se daná buňka nachází uvnitř nebo vně povrchu. To je jednoduše rozlišeno použitím znaménka "-". Negativní označení povrchu naznačuje, že se buňka nachází uvnitř struktury. Na následujícím obrázku jsou zobrazeny příklady vnějších povrchů a význam jednotlivých parametrů.



Obr. 6: Základní vnější povrchy a jejich parametry [17]

Syntaxe karty povrchů je následující:

```
surf <id> <type> <param 1> <param 2>...
```

kde $\langle id \rangle$ je identifikace povrchu,
 $\langle type \rangle$ je typ povrchu (viz *Tabulka 1*),
 $\langle param 1 \rangle \langle param 2 \rangle \dots$ jsou parametry povrchu.

2.3.2 Buňka

Jednotlivé povrchy ohraničují regiony, které se v Serpentu nazývají buňkami. Každá buňka je vázána k pozitivní nebo negativní straně povrchu, který jí obklopuje. Starší verze Serpentu, na rozdíl od kódu MCNP a dalších Monte Carlo kódů, dokázala zacházet jen s průsečíky hraničních povrchů. To znamená, že neutron se nachází uvnitř buňky tehdy a jen tehdy, když se nachází na stejné straně všech hraničních povrchů. Serpent 2 již ale umí zacházet i se sjednocením. Zápis této karty vypadá následovně:

```
cell <name> <u0> <mat> <surf 1> <surf 2>...
```

kde $\langle name \rangle$ je název buňky,
 $\langle u0 \rangle$ je univers, do kterého buňka patří,

`<mat>` je materiál buňky,
`<surf 1> <surf 2>...` jsou hraniční povrchy.

Parametr `<mat>` může mít několik podob. Mimo přímého definování materiálu, který se v místě buňky nachází, je možné použít další tři varianty zápisu. Pokud jsme již v oblasti, která pro výpočet není důležitá a není součástí geometrie, použije se výraz *outside*. Má-li být buňka prázdná, lze pro tuto situaci použít výraz *void*. Jestliže se nacházíme v takovém místě geometrie, ve kterém má buňka obsahovat další universe, například palivový proutek, použije se příkaz *fill* a název příslušného universu.

2.3.3 Palivový proutek

Pomocí této karty lze jednoduše definovat palivový proutek jako několik vnořených vrstev, které jsou řazeny vzestupně. Kód pak jednotlivé vrstvy vytváří jako válcové plochy. Pokud je rozměr zadán kladně, je tím myšlen absolutní poloměr. V případě záporného rozměru se rozumí tloušťka materiálu. Místo definice materiálu lze také použít příkaz *fill* pro vložení dalšího universu.

Syntaxe karty palivového proutku:

```
pin <id>
<mat 1> <r1>
<mat 2> <r2>
...
<mat n>
```

kde `<id>` je identifikace pinu (universe),
`<mat 1> <mat 2>...` jsou materiály,
`<r1> <r2>...` jsou vnější poloměry materiálových regionů.

2.3.4 Mříž

Mříž představuje speciální universe, který je tvořen pravidelným uspořádáním dalších universů, například palivových proutků. Serpent má osm typů mříží: čtvercová, dvě šestiúhelníkové mříže, kruhové pole clusterů, tři nekonečné 3D mříže naplněné jedním universem a tzv. vertikální zásobník. Pro reaktory VVER se používá šestiúhelníková mříž, viz (*Obr. 5*) (typ č. 2 ve směru osy x, typ č. 3 ve směru osy y), která má následující zápis:

```
lat <u0> <type> <x0> <y0> <nx> <ny> <p>
```

kde `<u0>` je universe mříže,

`<type>` je typ mříže,
`<x0>` je x-ová souřadnice počátku mříže,
`<y0>` je y-ová souřadnice počátku mříže,
`<nx>` je počet prvků v ose x,
`<ny>` je počet prvků v ose y,
`<p>` je rozteč proutků.

2.3.5 Materiál

Další důležitou kartou při vytváření geometrie je karta materiálů. Materiály tvoří výplně jednotlivých buněk a jsou tvořeny výčtem všech nuklidů, které obsahují. Všechny nuklidy jsou propojeny s knihovnou účinných průřezů. Označení nuklidů není striktně definované a mohou užívat různých aliasů, ale obvyklá konvence v označení je:

`<Z><A>.<id>`

kde

- `<Z>` je prvek Z,
- `<A>` je izotopové hmotnostní číslo (tři číslice),
- `<id>` je identifikační číslo v knihovně účinných průřezů.

Pro ^{238}U má pak označení tvar "92238.03c", kde koncovka .03c odkazuje v knihovně účinných průřezů na data vyhodnocená pro teplotu 300 K.

Syntaxe výsledné materiálové karty:

```

mat <name> <dens> [<options>]
<iso 1> <frac 1>
<iso 2> <frac 2>
...

```

kde

- `<name>` název materiálu,
- `<dens>` je hustota,
- `<options>` je parametr volby, závisí na řešeném případě,
- `<iso 1> <iso 2>...` jsou názvy nuklidů,
- `<frac 1> <frac 2>...` jsou odpovídající podíly (hmotnostní nebo atomové).

Hustota a podíl nuklidů mohou být zadány buď v hmotnostních, nebo atomových hodnotách. Kladná hodnota definuje atomovou hustotu, resp. atomový podíl, záporná klasickou hustotu, resp. hmotnostní podíl. Pokud se místo parametru hustota použije příkaz

sum, je hodnota vypočítána z izotopového složení. Kartu lze ještě doplnit o parametr *rgb*, pomocí kterého lze materiálu přiřadit konkrétní požadovanou barvu, která se zobrazí v grafickém výstupu. V případě, že nebude parametr *rgb* použit, přiřadí Serpent barvu materiálu náhodně.

2.3.6 Další příkazy

Pro zadávání dalších parametrů týkajících se výpočtu je možné použít příkaz *set*.

```
set <param> <value 1> <value 2>...
```

kde <param> je název parametru,

<value 1> <value 2>... jsou hodnoty parametru.

Ke spuštění výpočtu je vyžadováno nastavení ještě několika parametrů. Například velikosti neutronové populace, počet cyklů výpočtu a počet neaktivních cyklů, kdy výpočetní metoda konverguje. To zajišťuje příkaz *set pop*:

```
set pop <npop> <cycles> <skip>
```

kde <npop> je počet neutronů na jeden cyklus,

<cycles> je počet aktivních cyklů,

<skip> je počet neaktivních cyklů.

Dále je nutné Serpentu definovat cestu ke knihovně účinných průřezů a ke knihovně účinných průřezů pro pružný rozptyl. To zajišťuje příkaz:

```
set acelib "<file>"
```

kde <file> je cesta k souboru, který obsahuje odkazy na ACE soubory v adresáři knihovny účinných průřezů.

a příkaz:

```
therm <thname> <lib>
```

kde <thname> je název knihovny,

<lib> je identifikátor.

V určitém případě je výhodné použít příkazy *set bc* a *set usym*. Pomocí prvního lze nastavit hraniční podmínky buněk. Defaultně je nastavená tzv. „černá hranice“, což znamená, že dostane-li se neutron z buňky do prostoru definovaného jako *outside*, již se s ním nepočítá. Další možností je nastavit hraniční podmínky tak, že neutrony jsou buď odraženy zpět do geometrie, nebo je neutron přesunut na protější povrch. Druhým příkazem si lze usnadnit práci při zadávání prvků do rozměrných mříží. Není potřeba pak

vyplňovat celý obrazec pinů, ale stačí vyplnit například 1/6 a použít příkaz *set usym* s příslušnými parametry. Serpent poté dokáže symetricky zkopírovat částečný obsah mříže a vytvořit tak mříž kompletní.

Ke kontrole geometrie modelu je vhodné použít příkaz *plot*, který vytvoří obrázek ve formátu PNG. Výhodou tisku geometrie je, že Serpent zobrazuje chyby v geometrii zelenou nebo červenou barvou a prázdné regiony černou. K využití tohoto příkazu je ale nutné mít grafickou knihovnu zkompilevanou se zdrojovým kódem. Syntaxe příkazu je následující:

```
plot <or> <nx> <ny> [<p> <min1> <max1> <min2> <max2>]
```

kde <or> je orientace roviny, ve které je prováděn tisk geometrie,

<nx> je šířka v pixelech,

<ny> je výška v pixelech,

<p> je pozice na ose kolmé k rovině tisku,

<min1> je minimum první souřadnice,

<max1> je maximum první souřadnice,

<min2> je minimum druhé souřadnice,

<max2> je maximum druhé souřadnice.

Orientace roviny tisku je definovaná:

1. yz - kolmá na osu x
2. xz - kolmá na osu y
3. xy - kolmá na osu z

3 Validace softwaru

Vývoj softwaru není kompletní bez důkladného testování a ověření, že je v souladu se specifikacemi a že splňuje svůj zamýšlený cíl. Toto testování a ověřování si je možné představit jako potvrzení kvality softwaru. Dříve prováděli testování přímo samotní softwaroví inženýři v rámci životního cyklu softwaru. Jelikož se ale zvýšila komplexnost softwarů, nebylo již možné tímto způsobem kódy dále testovat. Z validace softwaru se tak stalo samostatné odvětví, které pohlíží na celý životní cyklus softwaru. Mnohdy je vykonávána společností zcela nezávislou na jeho vývoji. Ve spoustě případů se jedná o společnost provádějící certifikaci, protože proces validace je jednou z jejích hlavních podpůrných součástí. [17]

Validace je úzce spojena s verifikací, a proto se tyto pojmy také často zaměňují. Podle slovníku IEEE [18] je verifikace:

„Proces hodnocení systému nebo komponent, který určuje, zda produkty dané vývojové fáze splňují podmínky uložené na začátku této fáze.“

Naopak validace je pak podle slovníku IEEE:

„Proces hodnocení systému nebo součásti během nebo na konci procesu vývoje za účelem zjištění, zda vyhovuje specifikovaným požadavkům.“

Podobnou definici lze najít v normě ČSN EN ISO/IEC 17025:2001 [19]:

„Validace je potvrzení přezkoušením a poskytnutím objektivního důkazu, že jsou jednotlivé požadavky na specifické zamýšlené použití splněny.“

Jinými slovy verifikace demonstruje, že výstup jedné fáze odpovídá příslušnému vstupu této fáze, aniž by ověřovala, zda je výstup správný. Jednoduše zajišťuje, že produkt splňuje plány vývojářů. Verifikací nedochází k odhalení chyb, které vyplývají z nesprávně zadaného vstupu. Tyto chyby se pak mohou šířit v pozdějších fázích vývojového cyklu. Samotná verifikace je tedy nedostatečný nástroj pro ověření softwaru a validace je tedy nezbytná pro kontrolu problémů se specifikací, prokázání funkčnosti systému a ověření, že produkt, tak jak je stanoven, splňuje zamýšlené cíle a využití. [17, 20, 21]

Postup validace spočívá v [22]:

- Provedení validačního experimentu,

- Komplexním prověření experimentu (analytické a technické znaky produktu, použitelnost v praxi, zajištění kvality),
- Zdokumentování všech potřebných údajů,
- Rozhodnutí, že je produkt pro daný účel vhodný.

Výstupem validace je validační zpráva, která by měla obsahovat:

- Cíl, vymezení aplikace validovaného softwaru,
- Popis softwaru,
- Výběr prověřovaných parametrů a způsob jejich určení,
- Popis experimentu,
- Statistické postupy,
- Výsledky, zhodnocení výsledků,
- Použitelnost v praxi,
- Návrh postupu řízení jakosti,
- Kritéria pro revalidaci metody,
- Postupy odhadu nejistoty měření,
- Souhrn a závěry,
- Autoři validační studie, schválení.

U validace výpočetních kódů pro kritické výpočty by měla validační zpráva obsahovat také limit podkritičnosti a její odůvodnění. [23]

3.1 Metody zkoušení softwaru

Existuje mnoho validačních technik. V zásadě je lze rozdělit do dvou skupin, a to na statickou a dynamickou analýzu.

Statické testování

Smyslem statického zkoušení je zkontrolovat správnost a přehlednost samotného kódu. Testování zahrnuje například kontrolu toku dat, správnost syntaxe, nebo zda program správně zachází s daty a paměť. Statické testování je prováděno následujícím postupem: [17, 24]

- Kontrola kódu a jeho úplnosti,
- Kontrola přehlednosti zdrojového kódu,
- Vyhledání toku dat v programu a kontrola jeho oddělení od ostatních částí programu,
- Kontrola modularity a modulů,
- Kontrola ošetření výjimek a nestandardních situací v programu,
- Testování vhodnosti,
- Kontrola zabezpečení.

Dynamické testování

Během dynamické analýzy je ověřována funkčnost a stabilita programu. Pro dynamické testování jsou vybrány zkušební případy, tvořeny zkušebními daty, pomocí kterých se hodnotí výsledky zkoušení. Dynamické testování lze provádět třemi způsoby: [17, 24]

Funkční testování – Tento způsob testování zahrnuje identifikaci a testování všech funkcí systému. Funkční testování si je možné představit jako testování tzv. *black-boxu*, kdy je zkoumána funkčnost aplikace bez pozorování vnitřních struktur. Jde o testování bez znalosti implementace softwaru.

Strukturální testování – U tohoto typu testování je již známa implementace systému a jedná se o tzv. *white-box* testování. Jsou využívány takové testovací případy, které zkoumají určitou vnitřní vlastnost systému.

Náhodné testování – Při náhodném testování jsou volně vybírány testovací případy, a tak je možné odhalit chyby, které by nebyly zachyceny při jiném systematickém testování.

Postup dynamického testování je následující: [24]

- Identifikace binární verze programu,
- Předvedení typického použití programu,
- Kontrola všech větví a cyklů programu alespoň jedním průchodem,
- Oddělené vyhodnocení co nejširší množiny vstupů a kontrola výstupů,

- Vyvolání kritických situací,
- Posouzení shodnosti dokumentace programu se skutečným stavem.

4 ICSBEP databáze a benchmarky

International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project (ICSBEP) [25] byl založen v roce 1992 Ministerstvem energetiky Spojených států amerických. Oficiální činnost začala až v roce 1995 prostřednictvím společnosti *Organization for Economic Cooperation and Development* (OECD) - *Nuclear Energy Agency* (NEA). V dnešní době na projektu spolupracují zástupci mnoha evropských či asijských zemí. Účelem ICSBEP je identifikovat, vyhodnotit, ověřit a formálně zdokumentovat mezinárodní soubor kritických a podkritických benchmarkových dat tak, aby je bylo možné jednoduše použít pro validaci výpočetních nástrojů nebo knihoven účinných průřezů. Práce ICSBEP zahrnuje kromě výše zmíněného také:

- Kvantifikaci celkové nejistoty pomocí různých druhů citlivostní analýzy,
- Sestavení dat podle standardizovaného formátu,
- Provedení výpočtů každého experimentu standardními kódy pro kritické výpočty.

Vše je koncentrováno v mezinárodní příručce *International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments* (ICSBEP Handbook). Příručka je poskytována ve formátu PDF a experimenty jsou v ní kategorizovány podle:

- Štěpného média (plutonium, vysoce obohacený uran, středně a různě obohacený uran, nízko obohacený uran, ^{233}U , mix plutonia a uranu a speciální izotopové systémy),
- Formy štěpného materiálu (kov, směs, roztok nebo různé systémy),
- Použitého rozsahu energie neutronů (rychlé, střední, tepelné nebo smíšené spektrum).

Příručka obsahuje experimenty z různých zařízení po celém světě a je rozčleněná do 9 svazků.

- Plutoniové systémy,
- Vysoce obohacené uranové systémy,
- Středně a různě obohacené uranové systémy,
- Nízko obohacené, přírodní nebo ochuzené uranové systémy,

- Systémy s ^{233}U ,
- Plutonium-uranové systémy,
- Speciální izotopové systémy,
- Benchmarky stínění/ kritické alarmy,
- Základní fyzikální měření.

Jak již bylo zmíněno, každý svazek je ještě zvlášť rozdělen, podle formy štěpného materiálu na kov, směr, roztok a smíšené. Tyto kategorie jsou dále rozděleny podle energetického spektra neutronů. Díky tomuto kategorizování, je možné jednotlivé experimenty snadno rozlišit. Pro označení experimentů se totiž používá standardizovaný popis v následujícím formátu:

(Štěpný materiál)-(Fyzikální forma)-(Spektrum)-(Trojčíferné identifikační číslo)

Tabulka 2: Identifikační prvky a jejich význam

Štěpný materiál	Fyzikální forma	Spektrum
Plutonium PU	Kov MET	Rychlé FAST
Vysoce obohacený uran HEU	Směs COM	Střední energie INTER
Středně obohacený uran IEU	Roztok SOL	Tepelné THERM
Nízko obohacený uran LEU	Různé MISC	Různé MIXED
^{233}U U233		
Plutonium-uran MIX		
Speciální izotopy SPEC		

Pro vysoce obohacený uranový roztok štěpený tepelnými neutrony bude tedy identifikace ve tvaru HEU-SOL-THERM-001.

4.1 Benchmarkové modely pro reaktory VVER

Podle slovníku IEEE softwarového inženýrství [18] je benchmark test, který lze využít ke srovnání systémů nebo komponent mezi sebou nebo se standardem. Jelikož reaktory typu VVER pracují s nízko obohaceným uranovým palivem, lze experimenty vybírat pouze ze čtvrtého svazku příručky ICSBEP. Varianty modelů VVER pocházejí ze tří zemí, a to Maďarska, Ruska a České republiky.

4.1.1 Maďarské experimenty

LEU-COMP-THERM-015 (Část 1) a LEU-COMP-THERM-036 (Část 2) [25]

Část 1

Jedná se o experimenty vytvořené na maďarském výzkumném reaktoru nulového výkonu ZR-6, provozovaném v *Central Research Institute for Physics of the Hungarian Academy of Sciences*. Aktivní zóna je v reaktoru ve vnitřním válcovém otevřeném tanku a je upevněna ve spodní a horní kotvící mříži, mezi nimiž jsou 4 vertikální podpory. Tyto evaluace obsahují celkem 165 konfigurací aktivní zóny. Obsahují 80 pravidelných mříží, 47 mříží s jedním narušením pravidelnosti, 9 aktivních zón s imitacemi palivové tyče a 29 aktivních zón s kombinací dvou předchozích variant. Kritičnost byla dosahována změnou hladiny moderátoru, čímž je lehká voda nebo kyselina boritá rozpuštěná v lehké vodě. Rozteč palivových proutků v mříži se v těchto experimentech měnila v rozpětí 1.1 cm až 1.9 cm. Bylo použito palivo s trojím obohacením: 1.6 %, 3.6 % a 4.4 %. Experimentální hodnota k_{ef} je 1.

Část 2

Druhá část je zaměřena na experimenty s VVER mříží se zvětšeným průměrem palivových tyčí na 13.6 mm. Konfigurace aktivních zón lze rozdělit do následujících skupin: pravidelná mříž palivových tyčí a mříž s narušením pravidelnosti moderovaná lehkou vodou nebo lehkou vodou s kyselinou boritou, pravidelná mříž obklopená vodou a tyčemi z korozivzdorné oceli, mříž narušená absorpčními tyčemi obsahující gadolinium, mříž imitující úložiště použitého paliva a mříže imitující palivové klastry. Celkem se jedná o 69 konfigurací. Rozteč mříže typu VVER je 1.27 cm a obohacení paliva 3.6 %. Obohacení palivových tyčí se zvětšeným průměrem je 2.0 % a 2.4 % s roztečí 1.9 cm nebo 2.6 cm. Benchmarková hodnota k_{ef} je 1 s technologickou nejistotou v rozmezí 0.001 až 0.005.

4.1.2 České experimenty

LEU-COMP-THERM-086 [25]

Tyto experimenty byly vytvořeny na experimentálním reaktoru nulového výkonu LR-0 v Řeži. Celkem jde o 10 experimentů, které byly akceptovány mezi benchmarky. Kritičnosti je dosahováno výškou hladiny moderátoru, kterým je demineralizovaná voda

s danou koncentrací kyseliny borité. Aktivní zóna je složena ze šesti stejně obohacených (3.6 % nebo 4.4 %) palivových souborů, které obklopují centrální soubor. Ten byl postupně substituován (obohacení 2.0, 3.0, 3.3, 3.6 a 4.4 %). Každý palivový soubor obsahuje 312 palivových proutků s roztečí 1.275 cm, 18 vodicích trubek a jednu centrální instrumentační trubku. Experimentální hodnota k_{ef} je 1. Výpočet byl proveden metodou Monte Carlo kódem MCNP4A s knihovnou účinných průřezů ENDF/B-VI (60.c).

LEU-COMP-THERM-087 [25]

Benchmark LCT 087 vznikl rovněž v Řeži na experimentálním reaktoru LR-0. Tentokrát jde o 25 benchmarků s palivem pro reaktor VVER-440 s obohacením 3.6 %, obklopující centrální palivový soubor s obohacením buď 3.6 %, nebo 4.4 %. Rozteč mezi jednotlivými soubory byla během experimentu měněna, a to z hodnoty 18 cm na 18.5 cm, 19 cm, 19.25 cm a 19.5 cm. Experimentální hodnota k_{ef} je 1. Pro výpočet byl použit opět kód MCNP4A s knihovnou účinných průřezů ENDF/B-VI (60.c).

4.1.3 Ruské experimenty

Všechny ruské experimenty pro reaktory VVER byly vytvořeny na kritických souborech SF-9 a P, které patří pod *National Research Center "Kurchatov Institute"*. Modely mají společný způsob dosahování kritičnosti, a to změnou hladiny moderátoru, čímž je pro všechny experimenty lehká voda. Všechna uspořádání obsahují řídicí tyče nad aktivní zónou. Experimenty provedené na reaktoru P mají aktivní zónu v otevřeném válcovém tanku z nerezové oceli (Ruský standard 12X18H10T), uchycenou horní a spodní kotvící mříží. Výška tanku je 5613 mm. Pro zajištění pravidelného rozestupu proutků byla, kromě jednoho modelu (LCT 061), použita střední distanční mříž. Mezi horní a spodní mříží je rozmístěno 6 vertikálních podpor. Experimenty vytvořené na kritickém zařízení SF-9 se liší výškou nerezového tanku, která je 3700 mm, a absencí střední distanční mříže.

LEU-COMP-THERM-030 [25]

Experimenty jsou vytvořené na kritickém souboru SF-9 a jejich cílem je získat kritické parametry typického VVER souboru při různých kritických rozměrech aktivní zóny (tj. při různé kritické hladině moderátoru a tedy při různých délkách suchých palivových tyčí nad hladinou moderátoru). Obohacení paliva je v tomto případě 3.5 % a rozteč palivových proutků je 12.7 mm. Celkem bylo vytvořeno 12 benchmarkových konfigurací s různým počtem palivových tyčí. Experimentální hodnota k_{ef} je 1. Benchmarková hodnota k_{ef} pro všech 12 variant byla stanovena na 1.0006 ± 0.0018 (1σ).

LEU-COMP-THERM-053 [25]

Tento benchmark vznikl rovněž na zařízení SF-9, se stejným účelem jako v předchozím případě. Tentokrát bylo použito palivo se 4.4% obohacením ^{235}U se stejnou roztečí proutků, a to 12.7 mm. Benchmark obsahuje celkem 14 variant. Experimentální hodnota k_{ef} je 1. Benchmarková hodnota k_{ef} pro všechny konfigurace je 1.0005 ± 0.0016 (1σ).

LEU-COMP-THERM-061 [25]

Účelem těchto osmi experimentů, které vznikly na kritickém souboru P, bylo vyšetřit hodnotu absorpčních tyčí pro reaktory VVER-1000 (absorpční tyče z karbidu bóru, hafniové a dysprosiové absorbátory) a vliv poklesu hustoty moderátoru na koeficient násobení modelů buněk palivových souborů VVER-1000, který je důležitý pro bezpečnostní analýzy skladování použitého paliva (2 experimenty). Bylo použito palivo s obohacením 4.4 % a roztečí 12.7 mm. Hodnota k_{ef} stanovená experimentálně je opět 1. Hodnota k_{ef} určená jako benchmarková je rovna 1.0005 ± 0.0023 .

LEU-COMP-THERM-064 [25]

Benchmark LCT 064 byl vytvořen na kritickém zařízení SF-9. Celkem obsahuje 7 konfigurací s šestiúhelníkovou mříží s roztečí 12.7 mm a palivem obohaceným na 2.4 % ^{235}U . Důvodem k vytvoření tohoto benchmarku je, stejně jako pro předchozí, získat kritické parametry pro různé rozměry aktivní zóny. Nejmenší počet palivových tyčí je pro tento experiment 1021, největší pak 1897. Benchmarková hodnota koeficientu násobení je 1.0009 ± 0.0028 (1σ).

LEU-COMP-THERM-070 [25]

Další benchmark z kritického zařízení P obsahuje 12 variací s šestiúhelníkovou mříží s roztečí 11.0 mm a palivem obohaceným na 6.5 % ^{235}U . Cílem tohoto experimentu bylo získat kritické parametry relativně těsné mříže typu VVER s relativně vysoce obohaceným palivem. Bylo zvoleno vyšší obohacení a menší rozteč, než jaké je typické pro reaktory VVER, jelikož poměr atomové hustoty vodíku a uranu této mříže při pokojové teplotě je téměř stejný jako v aktivní zóně VVER při provozní teplotě. Koeficient násobení je pro tento benchmark stanoven na hodnotu 1.0004 ± 0.0016 .

LEU-COMP-THERM-075 [25]

V tomto benchmarku je vyšetřován vliv narušení pravidelnosti palivové mříže substitucí palivových proutků bórovým absorbátorem nebo prázdnou pozicí. Experimenty obsahují měření kritické hladiny moderátoru jako funkce pozice bórového absorbátoru a prázdných pozic. Rozteč mříže je 11.0 mm a obohacení paliva 6.5 %. Celkem bylo na kritickém zařízení P vytvořeno 6 variant experimentů. Všechny varianty, kromě varianty 3, jsou kritické a experimentální hodnota k_{ef} je 1. Varianta 3 je podkritická s $0.27\beta_{ef} = 0.00255$. Benchmarková hodnota k_{ef} 1.0004 ± 0.0017 .

LEU-COMP-THERM-085 [25]

Těchto 13 modelů, vytvořených na SF-9, zkoumá kritickou výšku hladiny moderátoru jako funkci počtu palivových tyčí v šestiúhelníkové mříži typu VVER s roztečí 12.7 mm a palivem s 6.5% obohacením. První konfigurace čítá 1189 palivových proutků a třináctá 445 proutků. Koeficient násobení benchmarku je 1.0004 ± 0.0014 .

LEU-COMP-THERM-094 [25]

S 11 druhy aktivních zón tento benchmark zkoumá opět kritické parametry relativně těsné dvou-regionální VVER mříže při různých kritických rozměrech aktivní zóny. První region je palivo s obohacením 4.4 % ^{235}U , druhý je palivo s obohacením 6.5 % ^{235}U . Benchmarková hodnota k_{ef} je 1.0004 ± 0.0013 (1σ).

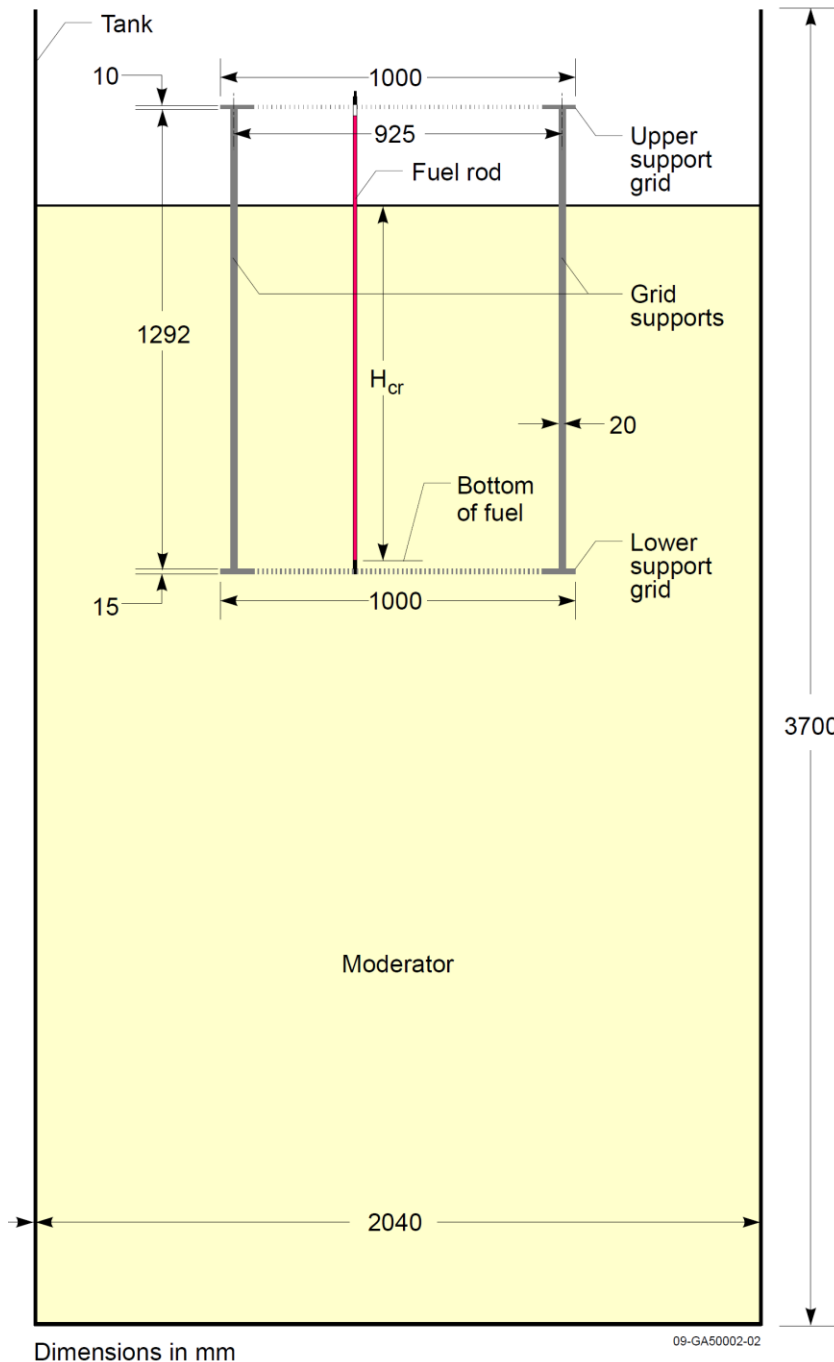
4.1.4 Vybrané experimenty pro validaci kódu Serpent

Za účelem validace kódu Serpent pro reaktory VVER byly v této práci vybrány tři ruské benchmarky. Benchmarky byly vybrány tak, aby byl široký rozsah obohacení. Nejnižší hodnota obohacení byla zvolena 2.4 % a nejvyšší pak 6.5 %. Celkem tak pro záměr této práce vzniklo 30 modelů, pro které byl následně vypočítán koeficient násobení.

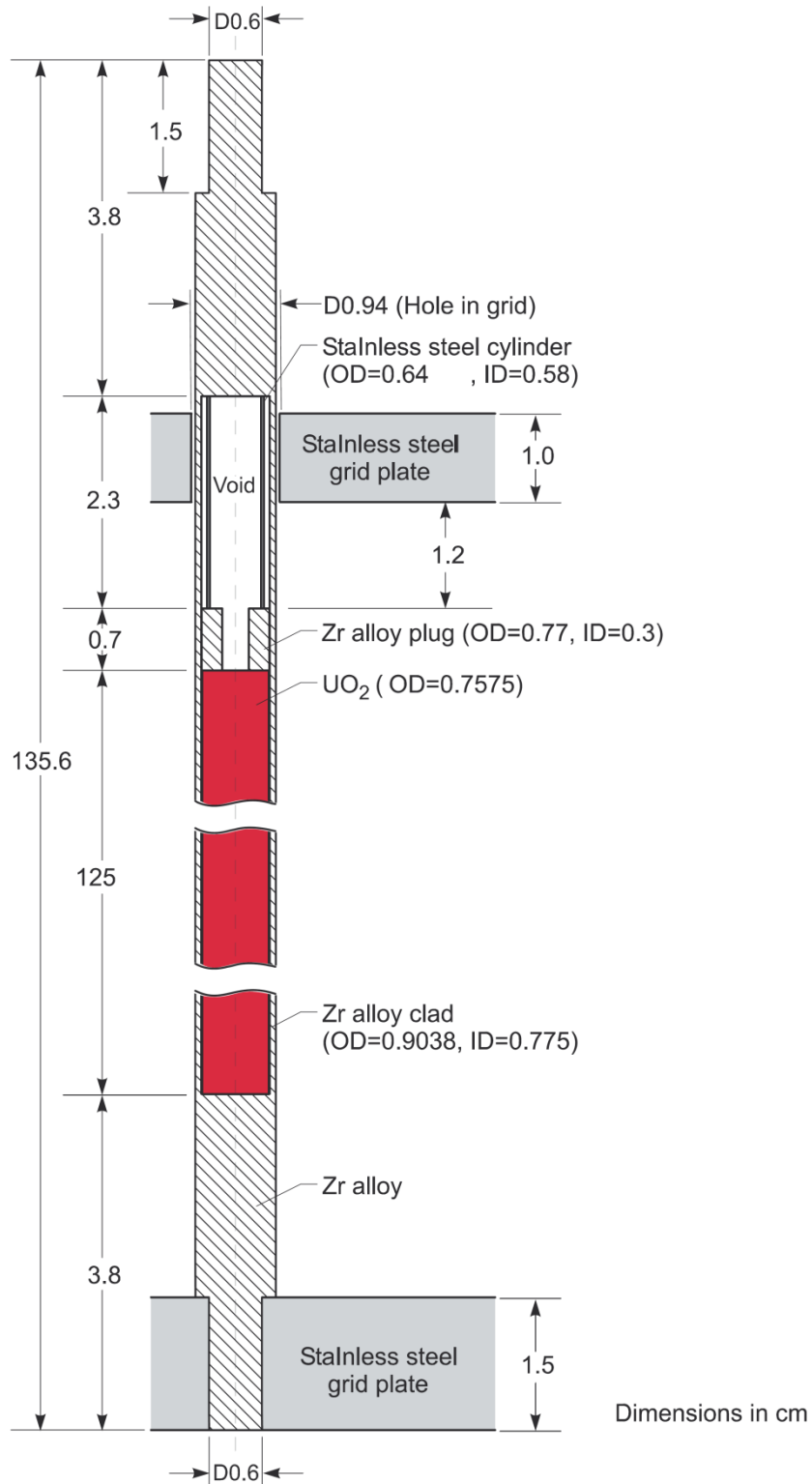
LEU-COMP-THERM-030

Stručný popis tohoto experimentu se nachází v předchozí podkapitole. Aktivní zóna je umístěna v otevřeném tanku z nerezové oceli. Na (Obr. 7) je pro představu zobrazené uspořádání se skutečnými rozměry. Průměr tanku v modelu je 130 cm. Tloušťka moderátoru, zároveň i reflektoru, pod spodní kotvící mříží je 30 cm a celková výška modelu je 165.6 cm. Průměr kotvící desky je 100 cm, přičemž tloušťka spodní mříž je 1.5 cm a horní 1 cm. Bylo použito palivo s obohacením 3.5 % a roztečí proutků 1.27 cm. Rozměry palivové tyče jsou na (Obr. 8). Celkem benchmark obsahuje 12 konfigurací, lišící

se počtem palivových proutků, viz *Tabulka 3*. V kotvicích deskách jsou vedle uspořádání palivových proutků vždy modelovány tři řady prázdných pozic. Zbytek desky je tvořen pevným materiálem. Příklad uspořádání palivových tyčí ve čtvrté konfiguraci je na (*Obr. 9*). Podpěry mezi deskami jsou v modelu zanedbány, stejně jako všechny elementy pod spodní mříží a předměty 8.27 cm nad vrškem paliva. Všechna tyto zanedbání nemají na k_{ef} vliv. [25]



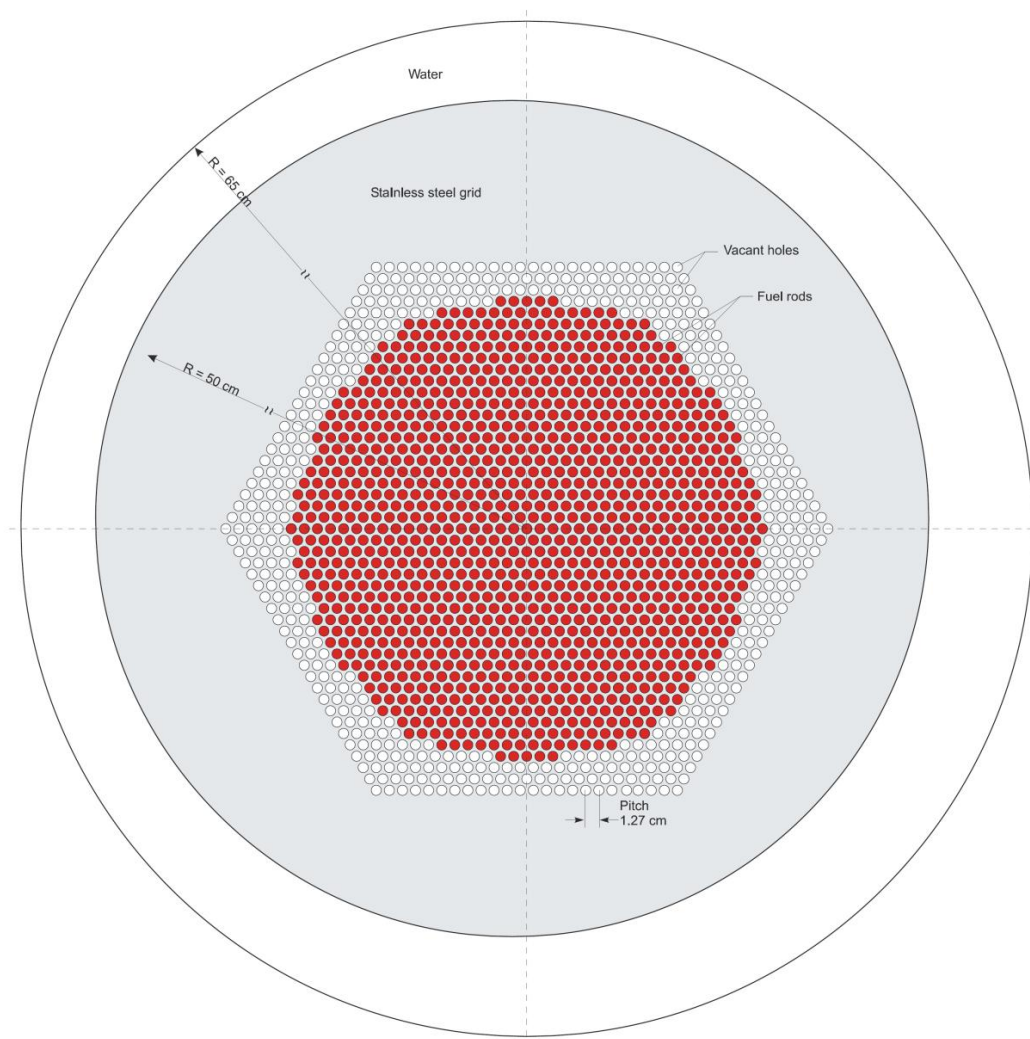
Obr. 7: Skutečné rozměry tanku a aktivní zóny LCT030 [25]



Obr. 8: Rozměry palivové tyče LCT030 [25]

Tabulka 3: Kritické konfigurace LCT030 [25]

Varianta	Počet palivových proutků	Výška moderátoru [cm]
1	1897	30.68
2	1495	35.31
3	1357	37.88
4	1141	43.81
5	931	55.15
6	823	67.23
7	793	72.52
8	769	78.03
9	745	85.66
10	727	94.00
11	709	104.6
12	691	117.89



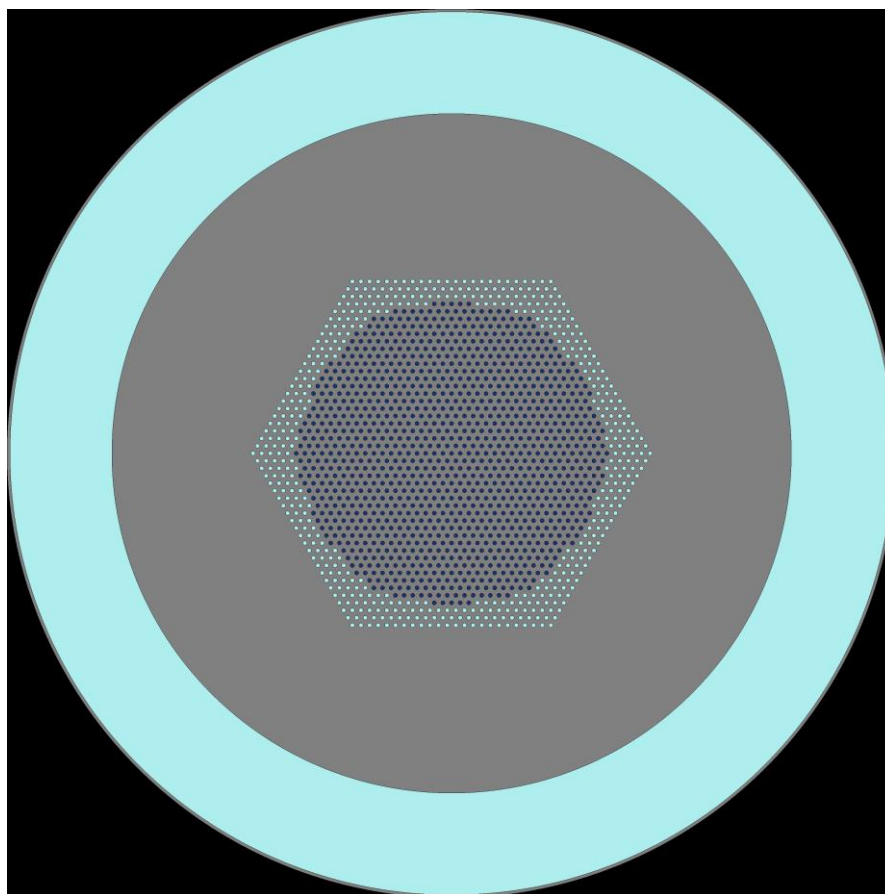
Obr. 9: Horizontální řez 4. konfigurací LCT 030 [25]

Tabulka 4 zobrazuje vypočtené hodnoty k_{ef} kódem MCU-REA, MONK9A a KENOV.a s různými knihovny účinných průřezů.

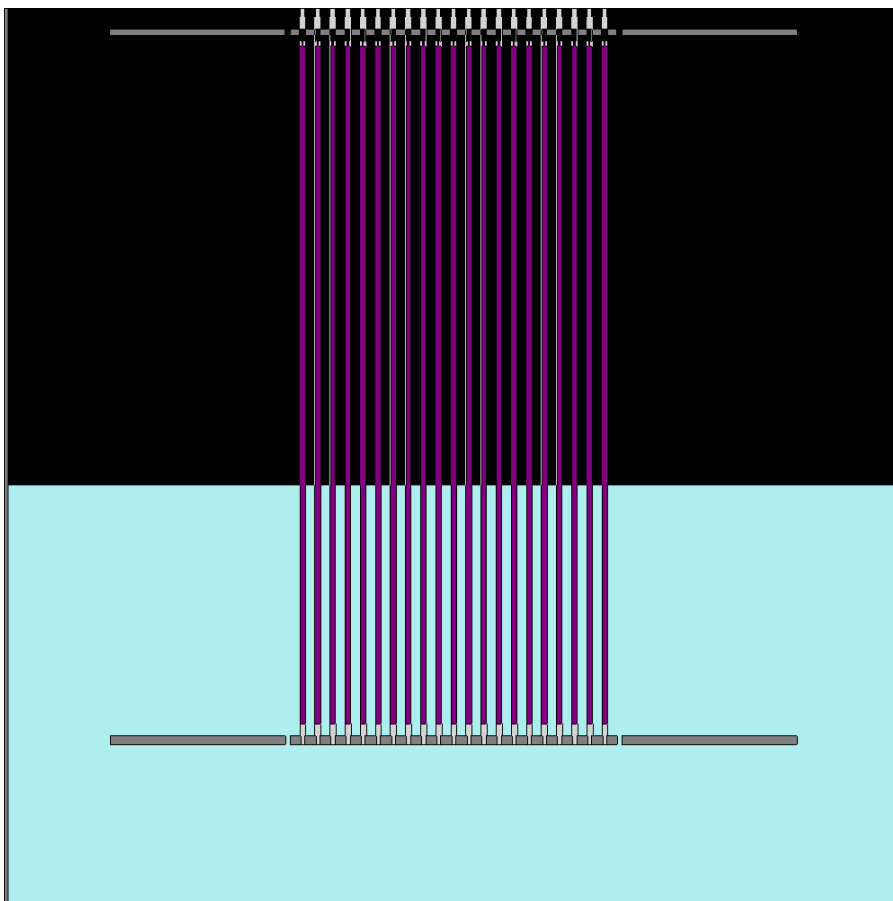
Tabulka 4: Výsledky výpočtu LCT 030 pomocí MCU-REA, MONK9A a KENOV.a [25]

LCT 030 Varianta	MCU-REA (DLC/MCUDAT-2.2)	MONK9A (JEF2.2)	MONK9A (JEFF3.1)	KENOV.a (ENDF/B-VII.0)	k_{ef} bench.
1	1.0055 ± 0.0006	1.0142 ± 0.0003	1.0143 ± 0.0003	1.0158 ± 0.0001	1.0006 ± 0.0018
2	1.0059 ± 0.0006	1.0144 ± 0.0003	1.0147 ± 0.0003	1.0160 ± 0.0001	
3	1.0074 ± 0.0006	1.0143 ± 0.0003	1.0142 ± 0.0003	1.0160 ± 0.0001	
4	1.0055 ± 0.0006	1.0127 ± 0.0003	1.0130 ± 0.0003	1.0149 ± 0.0001	
5	1.0030 ± 0.0006	1.0099 ± 0.0003	1.0105 ± 0.0003	1.0126 ± 0.0001	
6	1.0012 ± 0.0006	1.0083 ± 0.0003	1.0081 ± 0.0003	1.0101 ± 0.0001	
7	1.0001 ± 0.0006	1.0071 ± 0.0003	1.0073 ± 0.0003	1.0095 ± 0.0001	
8	1.0003 ± 0.0006	1.0059 ± 0.0003	1.0064 ± 0.0003	1.0086 ± 0.0001	
9	0.9990 ± 0.0006	1.0059 ± 0.0003	1.0069 ± 0.0003	1.0086 ± 0.0001	
10	0.9994 ± 0.0006	1.0065 ± 0.0003	1.0064 ± 0.0003	1.0086 ± 0.0001	
11	0.9989 ± 0.0006	1.0067 ± 0.0003	1.0078 ± 0.0003	1.0094 ± 0.0001	
12	0.9986 ± 0.0006	1.0057 ± 0.0003	1.0057 ± 0.0003	1.0079 ± 0.0001	

Na obrázcích (Obr. 10 a 11) je příklad geometrie tohoto benchmarku vytvořené v Serpentu pro variantu 4.



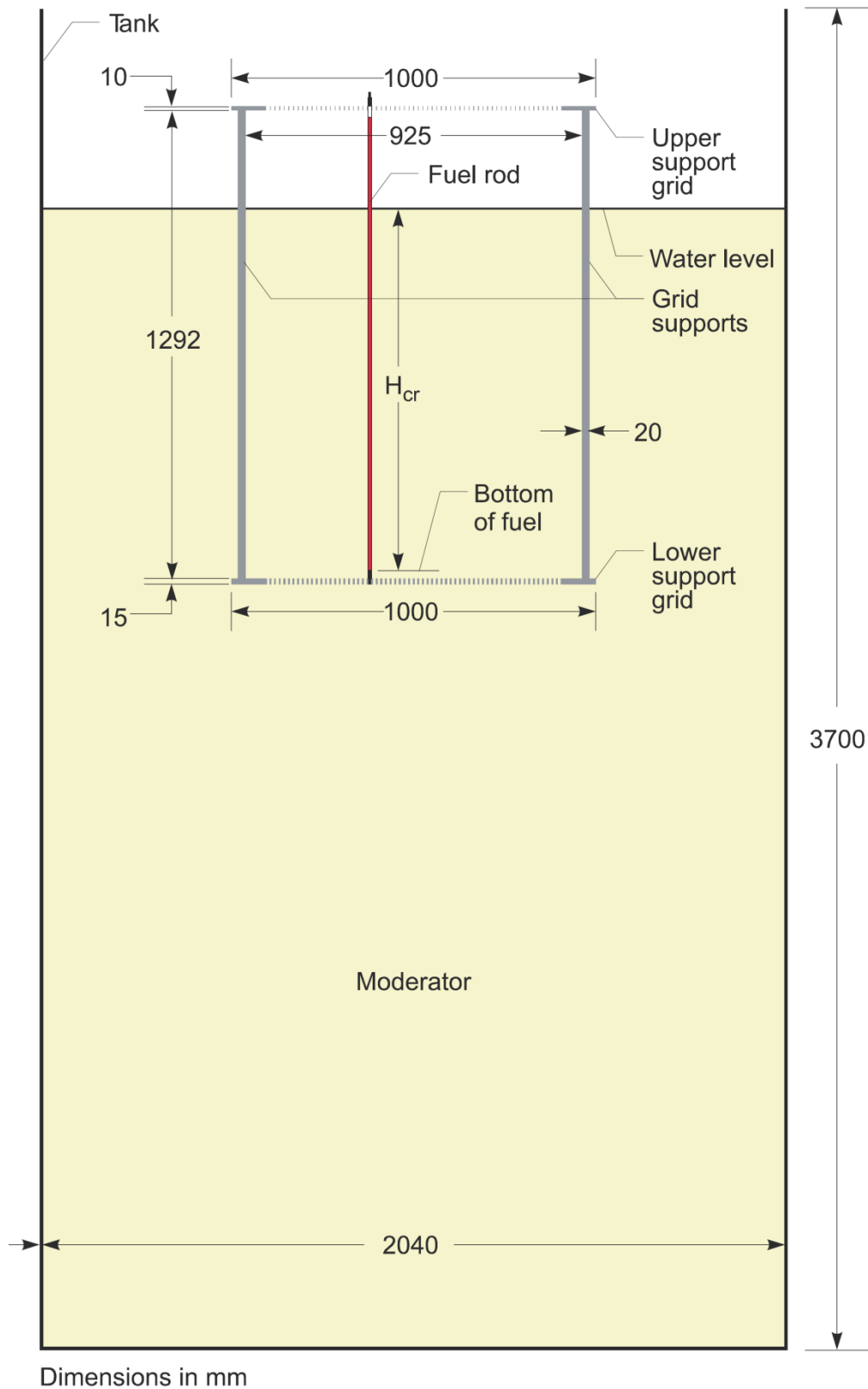
Obr. 10: LCT030- Aktivní zóna 4. varianty, pohled shora



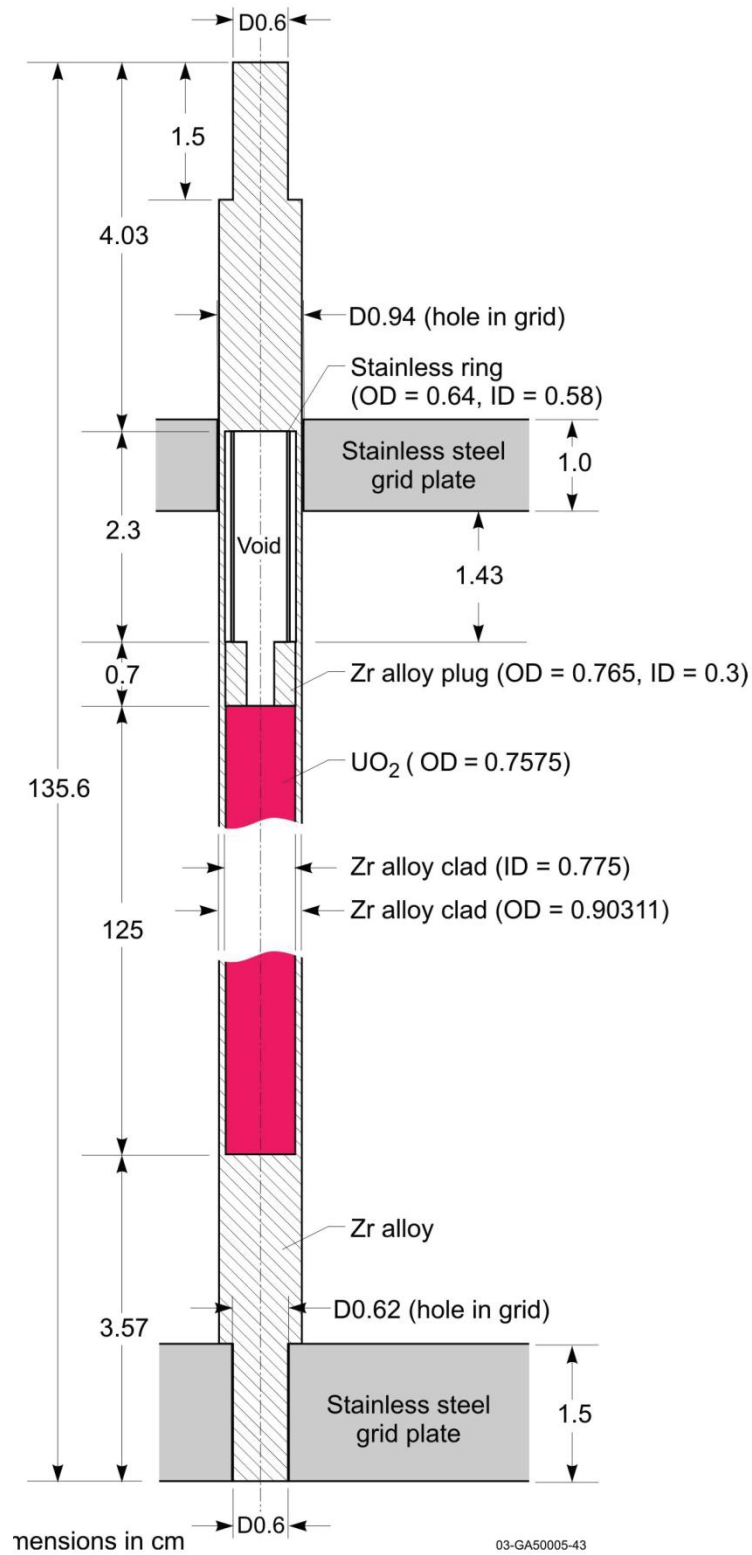
Obr. 11: LCT030 - Aktivní zóna 4. varianty, pohled ze strany

LEU-COMP-THERM-064

LCT 064 obsahuje 7 konfigurací s palivem obohaceným na 2.4 % ^{235}U s roztečí proutků 1.27 cm. Aktivní zóna je opět v otevřeném nerezovém tanku, jehož rozměry jsou znázorněny na (Obr. 12). V modelu došlo opět k určitým zjednodušením, jako je například zanedbání všech elementů pod spodní kotvící mříží, vertikálních podpor, pružiny v horní části palivové tyče, nečistot v uranu a předmětů 7.03 cm nad horní částí paliva. Rozměry tanku a kotvících mříží má tento model stejné, jako předchozí. Na (Obr. 13) se nachází geometrie palivového proutku, který je v tomto modelu použit. Účelem experimentu je získat kritické parametry pro různé rozměry aktivní zóny, tedy různý počet palivových tyčí. Tabulka 5 obsahuje počet jednotlivých palivových proutků a výšku moderátoru pro jednotlivé konfigurace. Příklad jedné takové konfigurace je na (Obr. 14). [25]



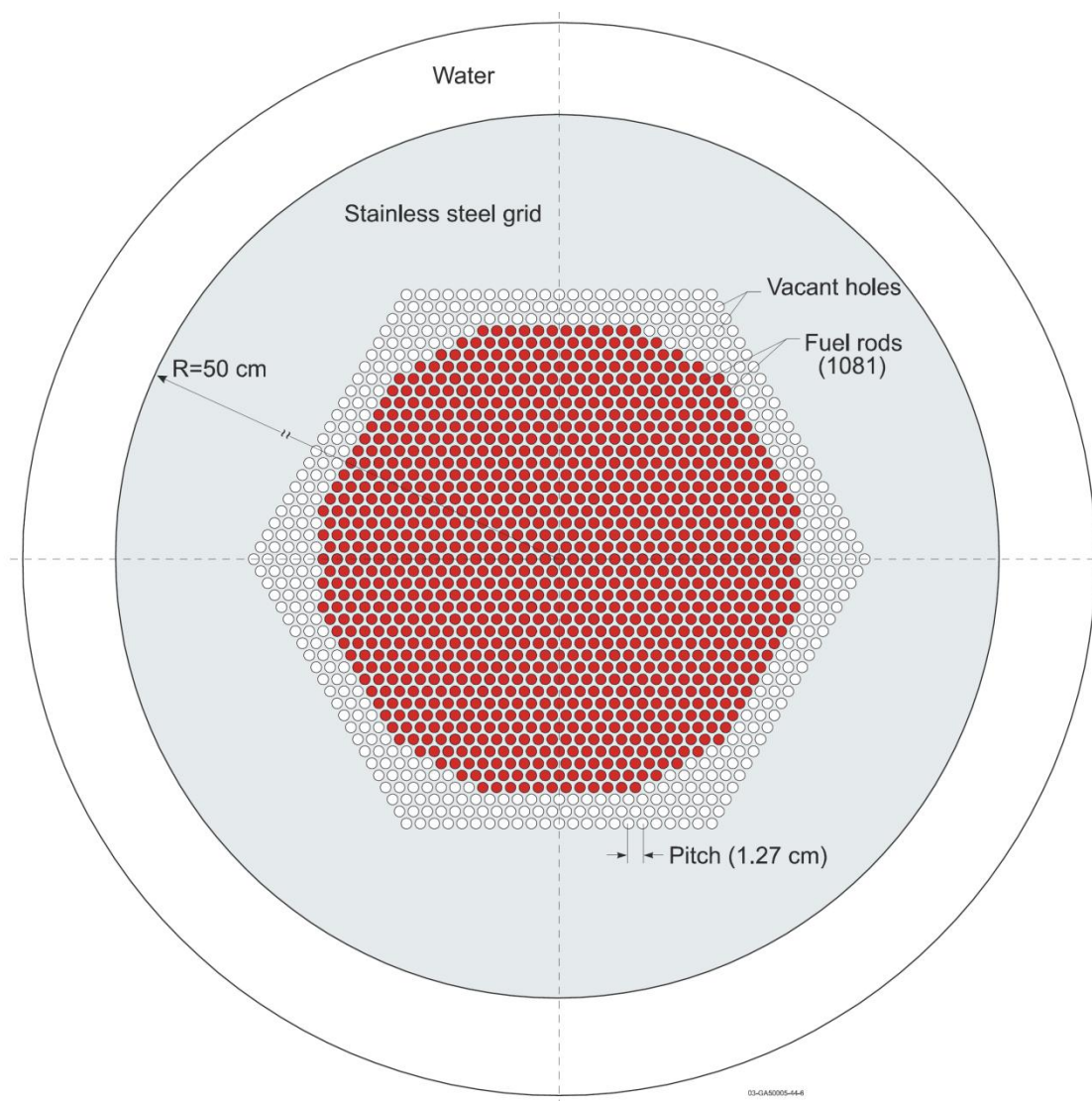
Obr. 12: Skutečné rozměry tanku a aktivní zóny LCT064 [25]



Obr. 13: Rozměry palivové tyče LCT064 [25]

Tabulka 5: Kritické konfigurace LCT064 [25]

Varianta	Počet palivových proutků	Výška moderátoru [cm]
1	1897	43.35
2	1495	50.87
3	1135	78.37
4	1081	88.54
5	1057	94.61
6	1039	99.53
7	1021	105.76



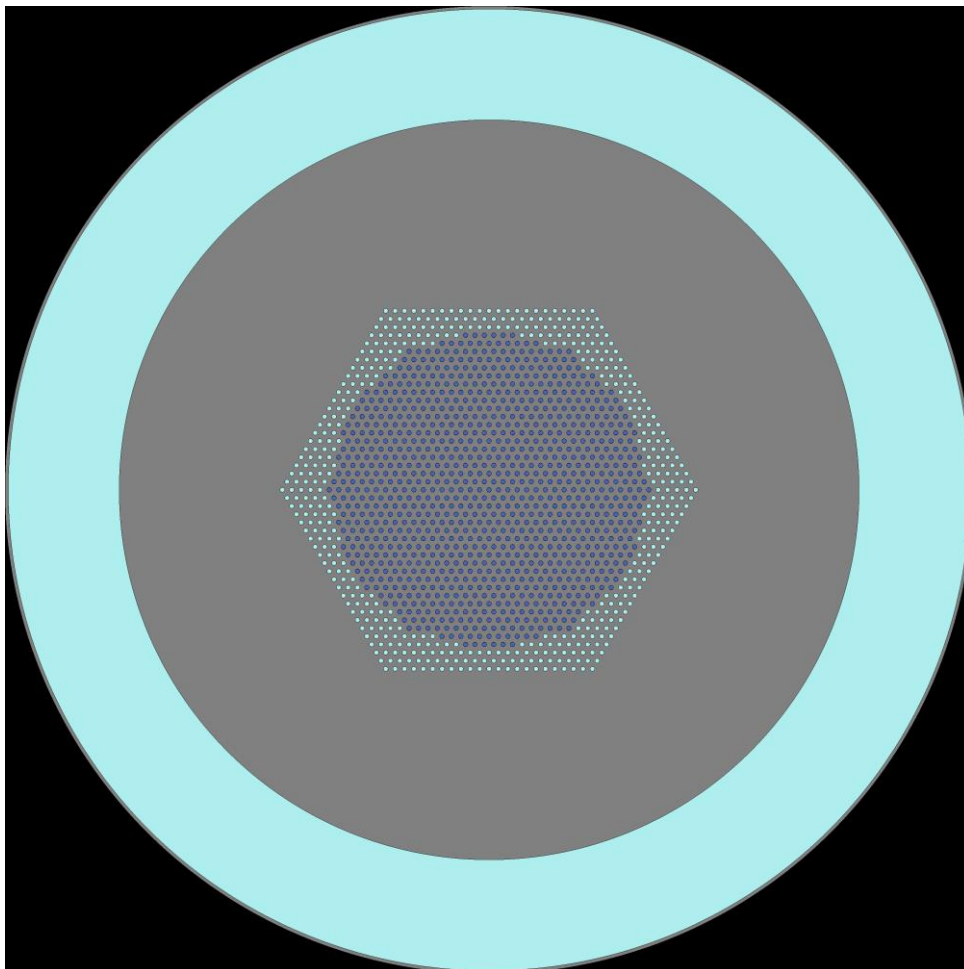
Obr. 14 Horizontální řez 4. konfigurací LCT 64[25]

Následující *Tabulka 6* obsahuje přehled výpočtů k_{ef} kódem MCUPD a MCNP5 s knihovnou jaderných dat MDBPD50 a JENDL3.3.

Tabulka 6: Výsledky výpočtu LCT 064 pomocí MCUPD a MCNP5 [25]

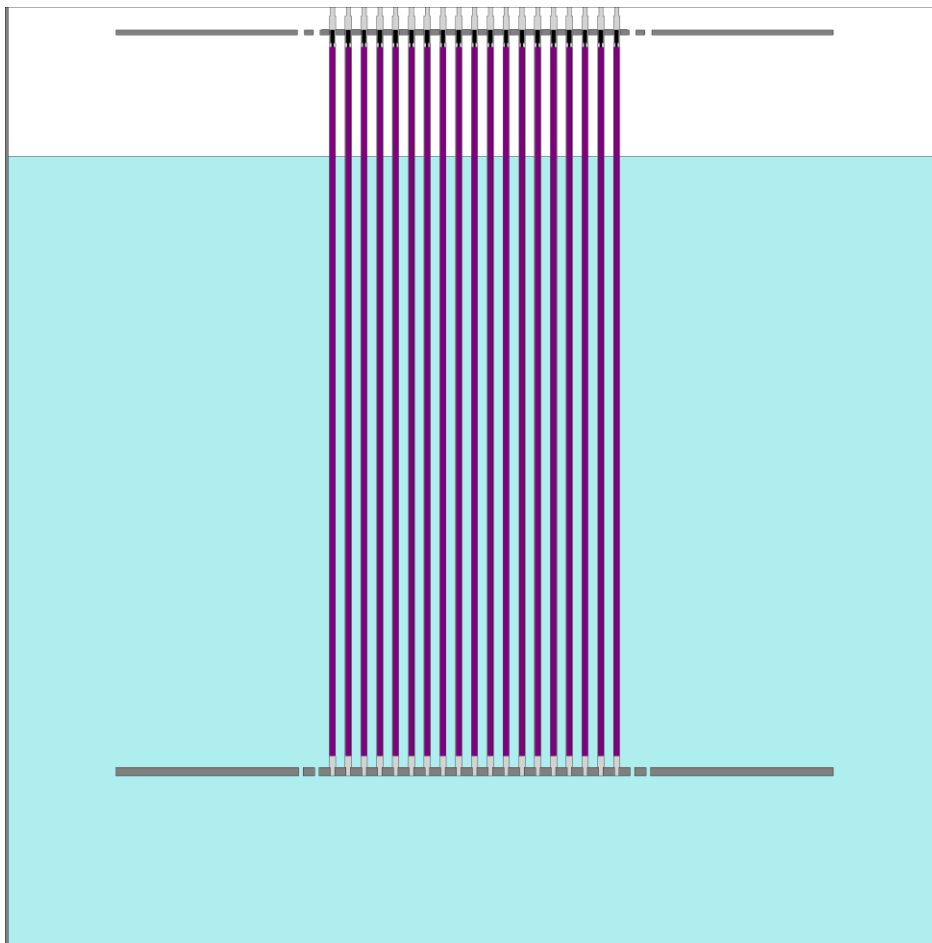
LCT 064 Varianta	MCUPD (MDBPD50)	MCNP5 (JENDL3.3)	k_{ef} benchmarku
1	1.0074 ± 0.0004	1.01534 ± 0.00022	1.0009 ± 0.0028
2	0.9999 ± 0.0004	1.00802 ± 0.00022	
3	1.0013 ± 0.0004	1.01150 ± 0.00022	
4	1.0008 ± 0.0004	1.01104 ± 0.00023	
5	1.0006 ± 0.0004	1.01150 ± 0.00021	
6	1.0014 ± 0.0004	1.01113 ± 0.00019	
7	1.0002 ± 0.0004	1.01152 ± 0.00021	

(*Obr. 15*) je pohled na uspořádání palivových proutků sedmé varianty v mříži a (*Obr. 16*) pak boční pohled na celou aktivní zónu.



Obr. 15: LCT064- Aktivní zóna 7. varianty, pohled shora

Na rozdíl od benchmarku LCT 030 má tento model definovaný prostor i nad hladinou moderátoru, který je vyplněn vzduchem (V Serpentu mu byla přiřazena bílá barva). V modelu LCT 030 je tento prostor definovaný jako *void*.

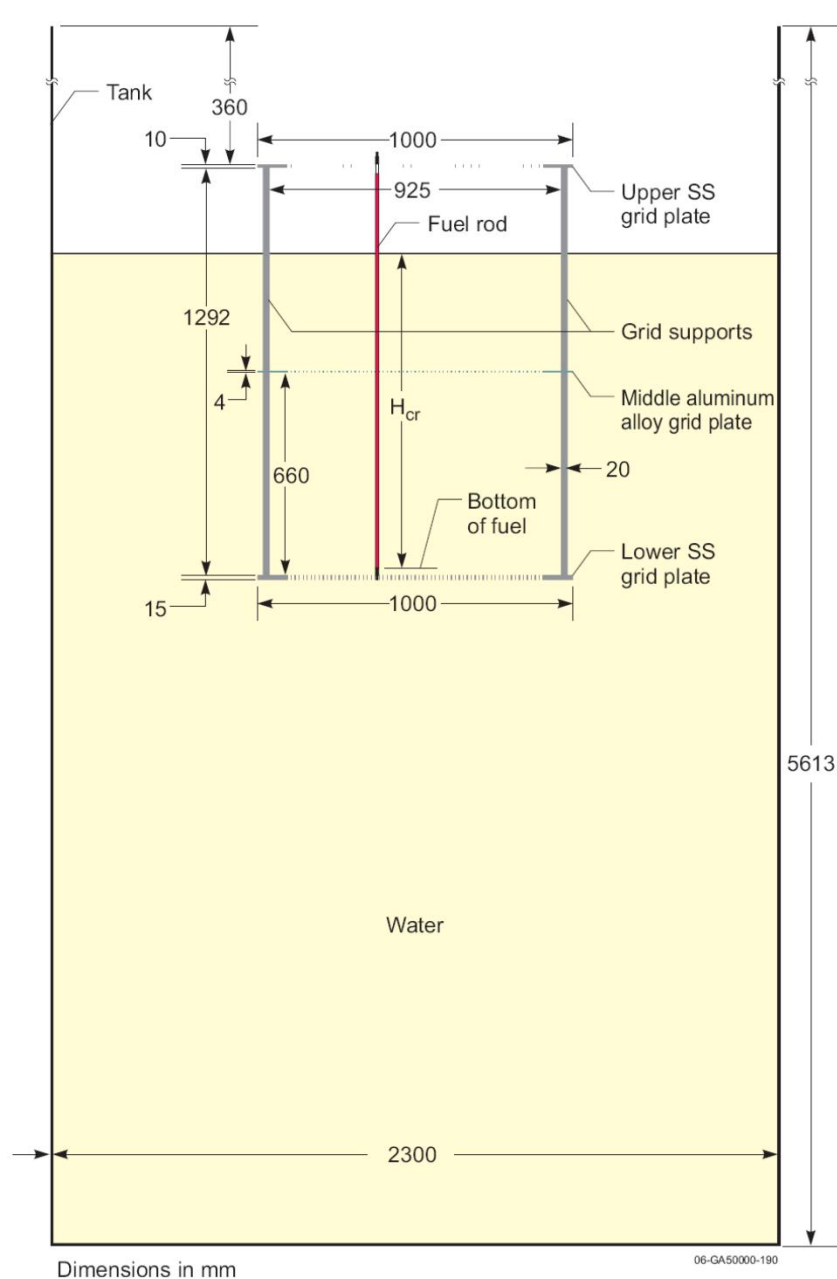


Obr. 16: LCT064 - Aktivní zóna 7. varianty, pohled ze strany

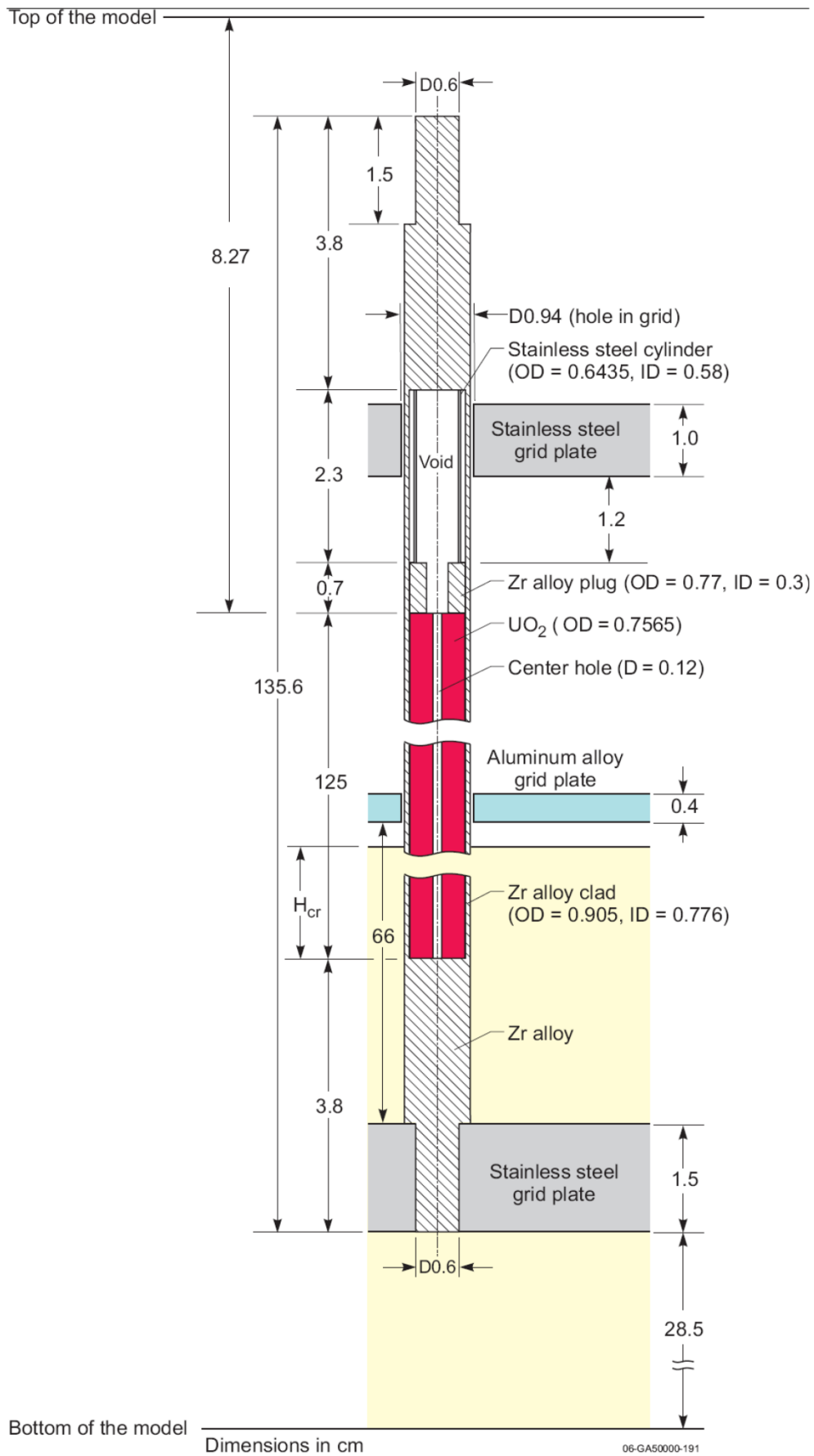
LEU-COMP-THERM-094

Na kritickém zařízení P vznikla v roce 1990 série experimentů s dvou-regionální aktivní zónou. Vnitřní zóna obsahuje palivo obohacené na 6.5 % ^{235}U a vnější část aktivní zóny obsahuje palivo s obohacením 4.4 % ^{235}U . Celkem bylo vytvořeno 11 konfigurací. Cílem experimentů bylo opět získat kritické parametry relativně těsné VVER mříže (rozteč 1.1 cm) při různých rozměrech aktivní zóny. Ta je umístěna v otevřeném nerezovém válci, jehož skutečné rozměry jsou na (Obr. 17). Tank je naplněn moderátorem (čistou lehkou vodou) do výšky H_{cr} , která zajišťuje dosažení kritického stavu. Pro zajištění pravidelnosti palivových proučků byla použita střední distanční mříž. Ocelová pružina v obou druzích palivových tyčích (Obr. 18 a 19) je zanedbána, stejně jako vertikální

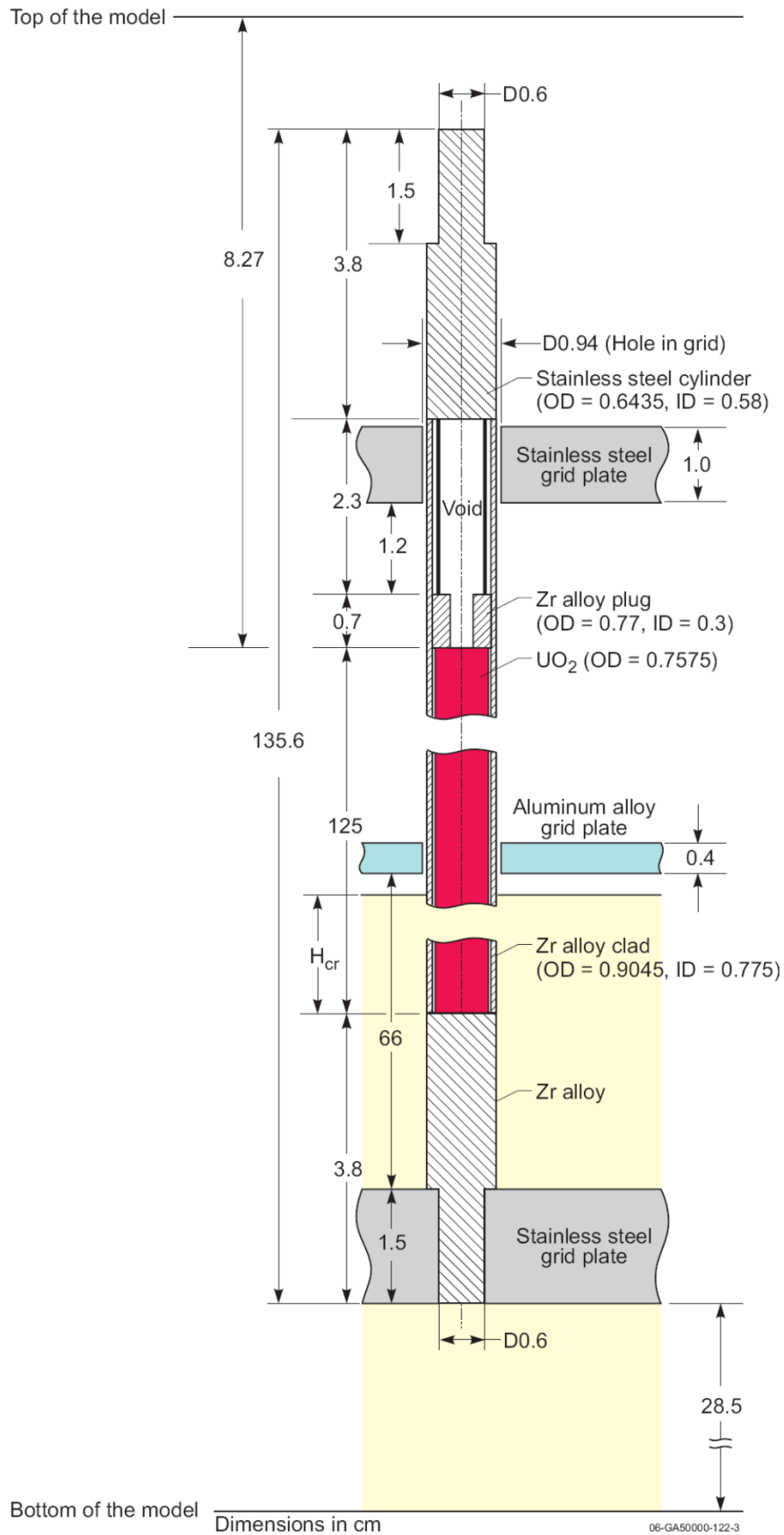
podpory, nečistoty v uranu a předměty pod a nad aktivní zónou. Rozměry modelu jsou: 130 cm průměr modelu, 100 cm průměr kotvících desek, 28.5 cm moderátoru pod spodní kotvící mříží, 165.57 cm celková výška modelu. Rozteč palivových proutků je 1.1 cm. V *Tabulce 7* jsou sepsány všechny konfigurace aktivní zóny, včetně výšky moderátoru. Je možné si všimnout, že počet palivových tyčí s 6.5% obohacením se nemění. Příklad uspořádání palivových proutků konfigurace č. 4 se nachází na (*Obr. 20*). [25]



Obr. 17: Skutečné rozměry tanku a aktivní zóny LCT094 [25]



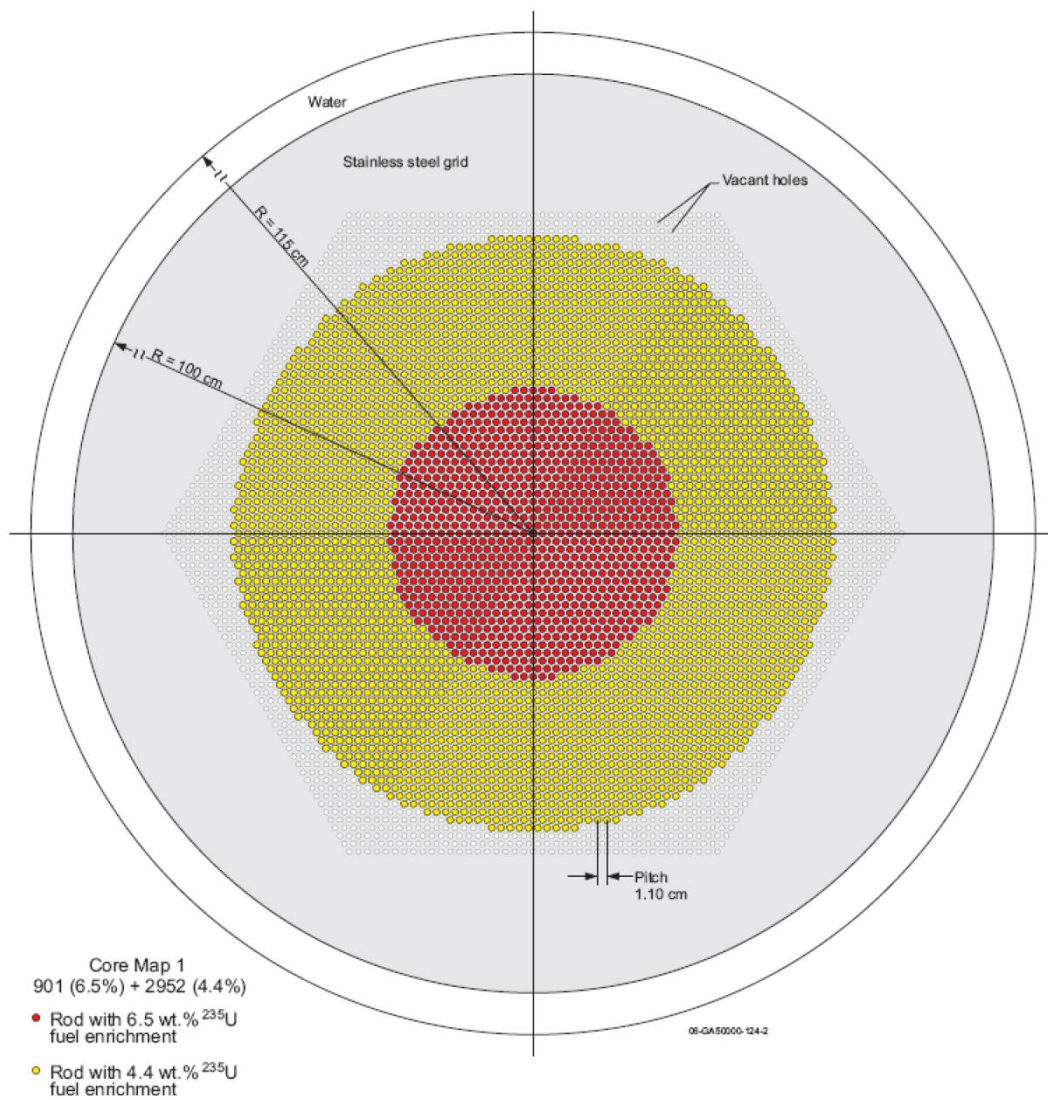
Obr. 18: Rozměry palivové tyče LCT094, obohacení 6.5 % [25]



Obr. 19: Rozměry palivové tyče LCT094, obohacení 4.4 % [25]

Tabulka 7: Kritické konfigurace LCT094 [25]

Varianta	Počet palivových proutků	Výška moderátoru [cm]
1	1897	30.68
2	1495	35.31
3	1357	37.88
4	1141	43.81
5	931	55.15
6	823	67.23
7	793	72.52
8	769	78.03
9	745	85.66
10	727	94.00
11	709	104.6
12	691	117.89

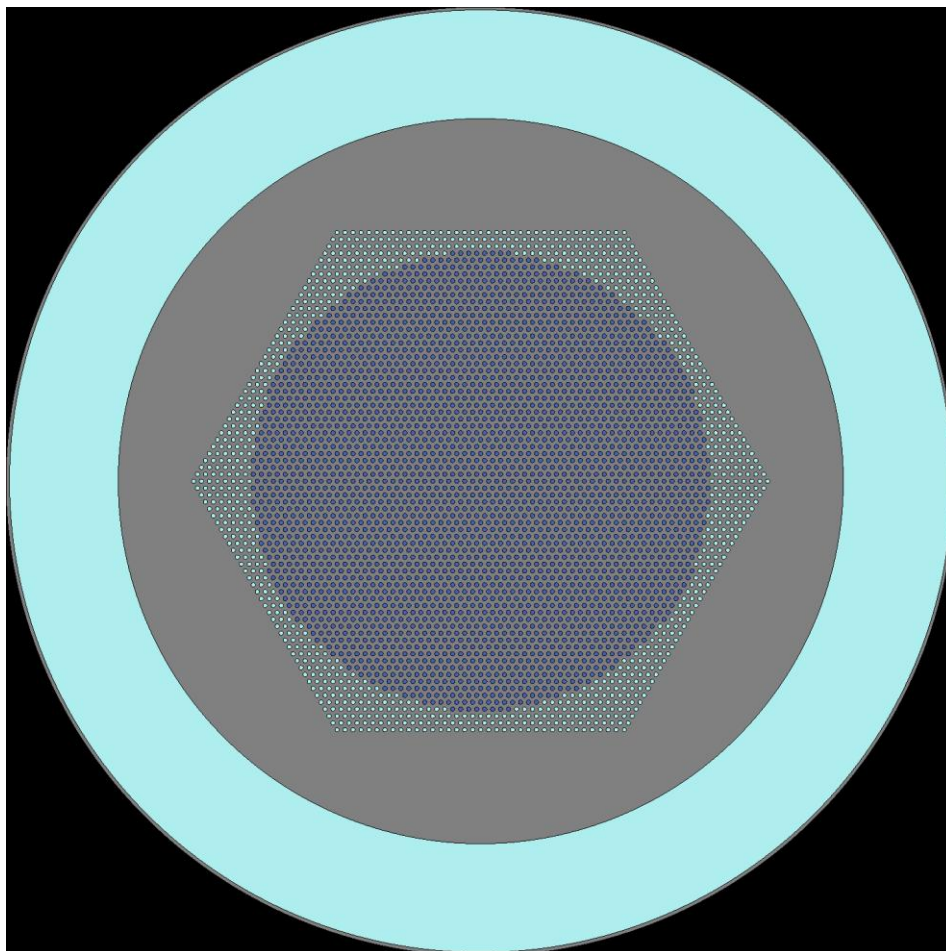


Obr. 20: Horizontální řez 4. konfigurací LCT 094 [25]

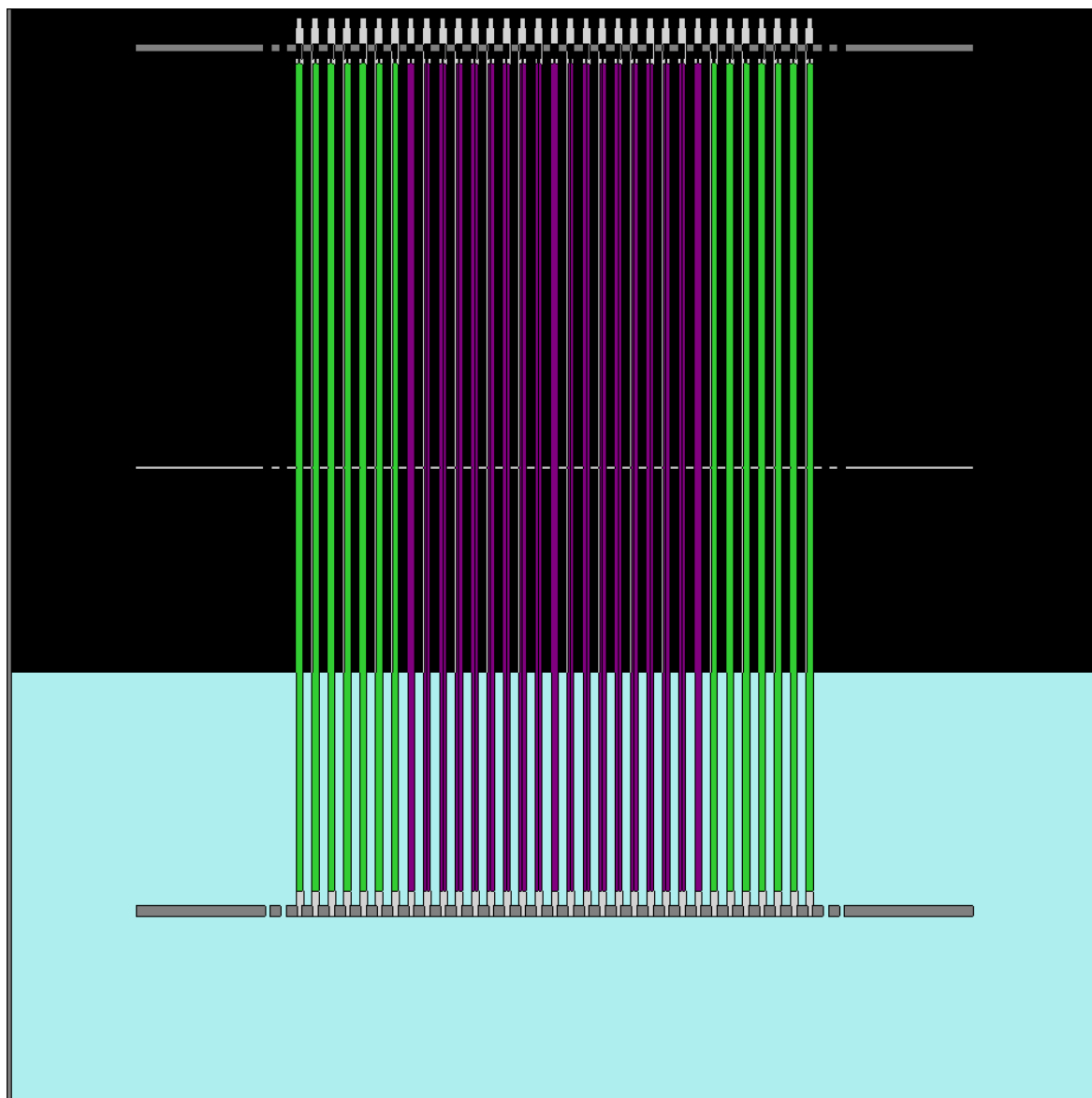
Benchmarková hodnota k_{ef} se rovná 1.0004 ± 0.0013 (1σ). Zkušební výpočet byl proveden kódem MCU-REA s knihovnou jaderných dat DLC/MCUDAT-2.1 (Tabulka 8). Na (Obr. 21 a 22) je uspořádání 4. varianty vytvořené v Serpentu. Oblast nad hladinou moderátoru je opět definovaná jako *void*.

Tabulka 8: Výsledky výpočtu LCT 094 pomocí MCU-REA [25]

LCT 094 Varianta	MCU-REA (DLC/MCUDAT-2.1)	k_{ef} benchmarku
1	1.0011 + 0.0006	1.0004 \pm 0.0013
2	1.0027 + 0.0006	
3	1.0029 + 0.0006	
4	1.0023 + 0.0006	
5	1.0025 + 0.0006	
6	1.0023 + 0.0006	
7	1.0037 + 0.0006	
8	1.0030 + 0.0006	
9	1.0018 + 0.0006	
10	1.0022 + 0.0006	
11	1.0019 + 0.0006	



Obr. 21: LCT094- Aktivní zóna 4. varianty, pohled shora



Obr. 22: LCT094 - Aktivní zóna 4. varianty, pohled ze strany

5 Validace výpočetního kódu Serpent

Tato kapitola shrnuje dosažené výsledky kódem Serpent a demonstraci systematické chyby kódu na modelu bazénu vyhořelého paliva. Jak již bylo zmíněno výše, pro účel této práce bylo v Serpentu vytvořeno 30 modelů aktivní zóny reaktorů VVER. Veškeré výpočty byly spuštěny s knihovnou jaderných dat JEFF-3.2. Průměrně jeden vstupní soubor obsahuje kolem 350 řádků, přičemž nejrozsáhlejší položkou v každém modelu je karta *lattice*, kde v benchmarcích LCT 030 a LCT 064 obsahuje 101×101 prvků a v benchmarku LCT 094 obsahuje 107×107 prvků. Příklad vstupního souboru pro LCT 030 varianta 1 se nachází v příloze A. Vzhledem k časové a hardwarové náročnosti výpočtů těchto 3D modelů, byly výpočty provedeny na výpočetních clusterech 32 jader Xeon E5-2697A v4.

5.1 Zhodnocení výpočtů

Výpočet všech 30 modelů byl spuštěn s 25 000 neutrony/cyklus v 1000 iteracích, přičemž prvních 50 cyklů nebylo, kvůli konvergenci metody, započítáno do výsledné hodnoty k_{ef} . Konečné hodnoty koeficientu násobení jednotlivých modelových aktivních zón jsou shrnuty v *Tabulce 11* spolu s porovnáním vůči benchmarkové hodnotě k_{ef} .

Tabulka 11: Porovnání hodnoty k_{ef} vypočtené kódem Serpent a hodnoty k_{ef} benchmarků

	Varianta	SERPENT, JEFF-3.2	Benchmark k_{ef}	Δk_{ef} [%]
LCT 030	1	1.01874 ± 0.00019	1.0006 ± 0.0018	1.814
	2	1.01813 ± 0.00019	1.0006 ± 0.0018	1.753
	3	1.01748 ± 0.00019	1.0006 ± 0.0018	1.688
	4	1.01676 ± 0.00019	1.0006 ± 0.0018	1.616
	5	1.01394 ± 0.00020	1.0006 ± 0.0018	1.334
	6	1.01129 ± 0.00019	1.0006 ± 0.0018	1.069
	7	1.01027 ± 0.00020	1.0006 ± 0.0018	0.967
	8	1.00932 ± 0.00019	1.0006 ± 0.0018	0.872
	9	1.00951 ± 0.00019	1.0006 ± 0.0018	0.891
	10	1.00981 ± 0.00019	1.0006 ± 0.0018	0.921
	11	1.01010 ± 0.00019	1.0006 ± 0.0018	0.950
	12	1.00839 ± 0.00019	1.0006 ± 0.0018	0.779
LCT 064	1	1.01502 ± 0.00018	1.0009 ± 0.0028	1.412
	2	1.00746 ± 0.00018	1.0009 ± 0.0028	0.656
	3	1.00845 ± 0.00019	1.0009 ± 0.0028	0.755
	4	1.00760 ± 0.00018	1.0009 ± 0.0028	0.670
	5	1.00763 ± 0.00017	1.0009 ± 0.0028	0.673

Tabulka 11 (pokračování): Porovnání hodnoty k_{ef} vypočtené kódem Serpent a hodnoty k_{ef} benchmarků

	6	1.00715 ± 0.00018	1.0009 ± 0.0028	0.625
	7	1.00727 ± 0.00018	1.0009 ± 0.0028	0.637
LCT 094	1	1.00849 ± 0.00018	1.0004 ± 0.0013	0.809
	2	1.00918 ± 0.00019	1.0004 ± 0.0013	0.878
	3	1.00859 ± 0.00019	1.0004 ± 0.0013	0.819
	4	1.00864 ± 0.00020	1.0004 ± 0.0013	0.824
	5	1.00898 ± 0.00019	1.0004 ± 0.0013	0.858
	6	1.00915 ± 0.00019	1.0004 ± 0.0013	0.875
	7	1.00922 ± 0.00019	1.0004 ± 0.0013	0.882
	8	1.00881 ± 0.00019	1.0004 ± 0.0013	0.841
	9	1.00904 ± 0.00020	1.0004 ± 0.0013	0.864
	10	1.00847 ± 0.00020	1.0004 ± 0.0013	0.807
	11	1.00771 ± 0.00020	1.0004 ± 0.0013	0.731

Ve výše uvedené tabulce si je možné všimnout, že všechny vypočtené hodnoty k_{ef} pomocí kódu Serpent jsou nadhodnocené, z čehož vyplývá určitá konzervativnost kódu. Nejvýrazněji se liší vypočtená hodnota k_{ef} v LEU-COMP-THERM-030 varianty 1-6 a v LEU-COMP-THERM-064 varianta 1. Tyto zmíněné varianty mají odchylku od benchmarkové hodnoty k_{ef} přes 1 %. Největší odchylka od benchmarkové hodnoty k_{ef} činí 1.814 %, a to v případě první varianty experimentu LEU-COMP-THERM-030. Nejnížší odchylka je potom 0.625 % pro šestou variantu experimentu LEU-COMP-THERM-064. V průměru se Δk_{ef} pohybuje kolem 0.976 %.

Následující Tabulky 12-17 shrnují, pro porovnání, výsledné hodnoty k_{ef} vypočtené různými kódy, které jsou prezentovány v jednotlivých experimentech, a výsledné hodnoty k_{ef} získané pomocí kódu Serpent. Ke každé tabulce s těmito hodnotami je příslušná tabulka s Δk_{ef} , tedy rozdíl vždy mezi příslušným kódem a Serpentem. Hodnoty k_{ef} získané Serpentem se v případě LEU-COMP-THERM-030 nejvíce rozcházejí s kódem MCU-REA, který počítal s knihovnou jaderných dat DLC/MCUDAT-2.2 (viz Tabulka 13). Odchylka od MCU-REA je průměrně 1.075 %. Znatelně větší shoda nastala mezi Serpentem a kódem MONK9A, který využil knihovny JEFF-2.2 a JEFF-3.1. Tam se průměrně Δk_{ef} pohybuje kolem 0.335 %. Největší shoda, s rozdílem pouhých 0.131 %, je mezi Serpentem a KENOV.a s knihovnou ENDF/B-VII.0.

V případě druhého experimentu, LEU-COMP-THERM-064, je situace obdobná (viz *Tabulka 14 a 15*). Zkušební výpočty zde byly provedeny jen kódem MCUPD s knihovnou jaderných dat MDBPD50 a kódem MCNP5 s japonskou knihovnou JENDL3.3. Mezi prvním kódem a Serpentelem se k_{ef} liší o 0.7 % a mezi MCNP5 a Serpentelem je Δk_{ef} pouhých 0.278 %.

Co se týče benchmarku LEU-COMP-THERM-094 (viz *Tabulka 16 a 17*), tak průměrná odchylka Δk_{ef} se rovná 0.635 %. Tato odchylka se vytvořila mezi Serpentelem a kódem MCU-REA s knihovnou jaderných dat DLC/MCUDAT-2.1.

Největší shoda nastala s kódem KENOV.a s knihovnou ENDF/B-VII.0, ačkoli kód MONK9A používal pro výpočty starší verze knihovny jaderných dat JEFF, jejíž novější verze byla použita i pro výpočty v této práci.

Tabulka 12: Hodnoty k_{ef} jednotlivých kódů z benchmarku LCT 030 a hodnoty k_{ef} získané kódem Serpent

LCT 030	A	B	C	D	E
Varianta	MCU-REA (DLC/MCUDAT-2.2)	MONK9A (JEF-2.2)	MONK9A (JEFF-3.1)	KENOV.a (ENDF/B-VII.0)	SERPENT (JEFF-3.2)
1	1.0055 ± 0.0006	1.0142 ± 0.0003	1.0143 ± 0.0003	1.0158 ± 0.0001	1.01874 ± 0.00019
2	1.0059 ± 0.0006	1.0144 ± 0.0003	1.0147 ± 0.0003	1.0160 ± 0.0001	1.01813 ± 0.00019
3	1.0074 ± 0.0006	1.0143 ± 0.0003	1.0142 ± 0.0003	1.0160 ± 0.0001	1.01748 ± 0.00019
4	1.0055 ± 0.0006	1.0127 ± 0.0003	1.0130 ± 0.0003	1.0149 ± 0.0001	1.01676 ± 0.00019
5	1.0030 ± 0.0006	1.0099 ± 0.0003	1.0105 ± 0.0003	1.0126 ± 0.0001	1.01394 ± 0.00020
6	1.0012 ± 0.0006	1.0083 ± 0.0003	1.0081 ± 0.0003	1.0101 ± 0.0001	1.01129 ± 0.00019
7	1.0001 ± 0.0006	1.0071 ± 0.0003	1.0073 ± 0.0003	1.0095 ± 0.0001	1.01027 ± 0.00020
8	1.0003 ± 0.0006	1.0059 ± 0.0003	1.0064 ± 0.0003	1.0086 ± 0.0001	1.00932 ± 0.00019
9	0.9990 ± 0.0006	1.0059 ± 0.0003	1.0069 ± 0.0003	1.0086 ± 0.0001	1.00951 ± 0.00019
10	0.9994 ± 0.0006	1.0065 ± 0.0003	1.0064 ± 0.0003	1.0086 ± 0.0001	1.00981 ± 0.00019
11	0.9989 ± 0.0006	1.0067 ± 0.0003	1.0078 ± 0.0003	1.0094 ± 0.0001	1.01010 ± 0.00019
12	0.9986 ± 0.0006	1.0057 ± 0.0003	1.0057 ± 0.0003	1.0079 ± 0.0001	1.00839 ± 0.00019

Tabulka 13: Porovnání hodnot k_{ef} získané kódem Serpent a kódy MCU-REA, MONK9A a KENOV.a

LEU-COMP-THERM-030			
Δk_{efAE} [%]	Δk_{efBE} [%]	Δk_{efCE} [%]	Δk_{efDE} [%]
1.324	0.454	0.444	0.294
1.223	0.373	0.343	0.213
1.008	0.318	0.328	0.148
1.126	0.406	0.376	0.186
1.094	0.404	0.344	0.134
1.009	0.299	0.319	0.119
1.017	0.317	0.297	0.077
0.902	0.342	0.292	0.072
1.051	0.361	0.261	0.091
1.041	0.331	0.341	0.121
1.120	0.340	0.230	0.070
0.979	0.269	0.269	0.049

Tabulka 14: Hodnoty k_{ef} jednotlivých kódů z benchmarku LCT 064 a hodnoty k_{ef} získané kódem Serpent

LCT 064	A	B	C
Varianta	MCUPD (MDBPD50)	MCNP5 (JENDL3.3)	SERPENT (JEFF-3.2)
1	1.0074 ± 0.0004	1.01534 ± 0.00022	1.01502 ± 0.00018
2	0.9999 ± 0.0004	1.00802 ± 0.00022	1.00746 ± 0.00018
3	1.0013 ± 0.0004	1.01150 ± 0.00022	1.00845 ± 0.00019
4	1.0008 ± 0.0004	1.01104 ± 0.00023	1.00760 ± 0.00018
5	1.0006 ± 0.0004	1.01150 ± 0.00021	1.00763 ± 0.00017
6	1.0014 ± 0.0004	1.01113 ± 0.00019	1.00715 ± 0.00018
7	1.0002 ± 0.0004	1.01152 ± 0.00021	1.00727 ± 0.00018

Tabulka 15: Porovnání hodnot k_{ef} získané kódem Serpent a kódy MCUPD a MCNP5

LEU-COMP-THERM-064	
Δk_{efAC} [%]	Δk_{efBC} [%]
0.762	0.032
0.756	0.056
0.715	0.305
0.680	0.344
0.703	0.387
0.575	0.398
0.707	0.425

Tabulka 16: Hodnoty k_{ef} jednotlivých kódů z benchmarku LCT 094 a hodnoty k_{ef} získané kódem Serpent

LCT 094	A	B
Varianta	MCU-REA (DLC/MCUDAT-2.1)	SERPENT (JEFF-3.2)
1	1.0011 + 0.0006	1.00849 ± 0.00018
2	1.0027 + 0.0006	1.00918 ± 0.00019
3	1.0029 + 0.0006	1.00859 ± 0.00019
4	1.0023 + 0.0006	1.00864 ± 0.00020
5	1.0025 + 0.0006	1.00898 ± 0.00019
6	1.0023 + 0.0006	1.00915 ± 0.00019
7	1.0037 + 0.0006	1.00922 ± 0.00019
8	1.0030 + 0.0006	1.00881 ± 0.00019
9	1.0018 + 0.0006	1.00904 ± 0.00020
10	1.0022 + 0.0006	1.00847 ± 0.00020
11	1.0019 + 0.0006	1.00771 ± 0.00020

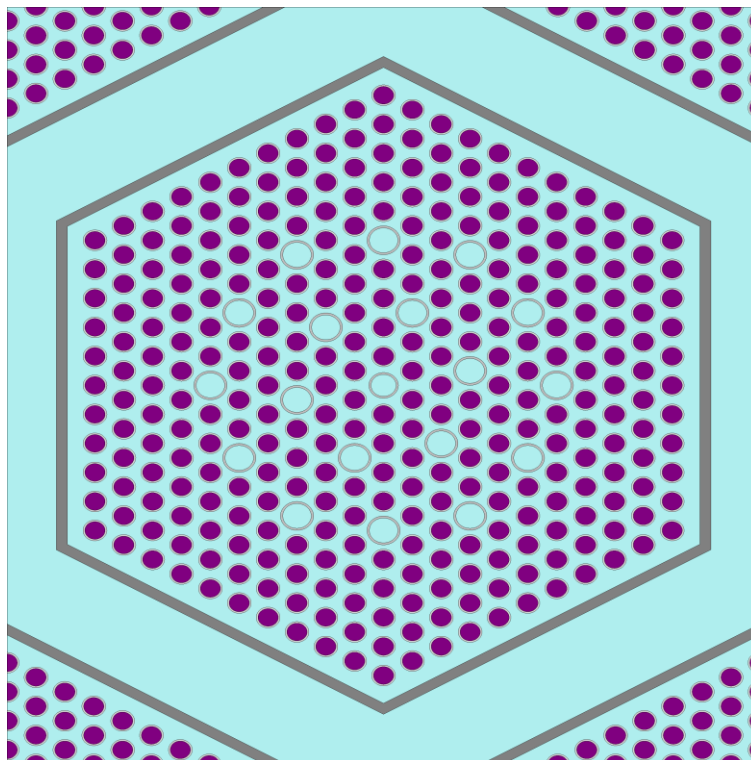
Tabulka 17: Porovnání hodnot k_{ef} získané kódem Serpent a kódy MCU-REA

LEU-COMP-THERM-094	
Δk_{efAB}	[%]
0.739	
0.648	
0.569	
0.634	
0.648	
0.685	
0.552	
0.581	
0.724	
0.627	
0.581	

5.2 Výpočet kritičnosti bazénu skladování vyhořelého paliva

Bazén pro skladování vyhořelého paliva, do kterého je použité palivo ukládáno, musí být navržen tak, aby při předpokládaných havarijních situacích (včetně zaplavení vodou) efektivní koeficient násobení nepřekročil hodnotu 0.95 a zároveň, aby nepřekročil hodnotu 0.98 při podmínkách optimální moderace. [26]

Model tohoto bazénu slouží pro demonstraci systematické chyby kódu Serpent. Jde o 2D nekonečnou mříž palivových souborů, které jsou ponořené ve vodě a umístěné v trubkách z absorpčního materiálu. Konzervativně je pro výpočet k_{ef} bráno čerstvé palivo s 5% obohacením ^{235}U bez vyhořívajícího absorbátoru a čistá voda bez kyseliny borité. Každý palivový soubor obsahuje 18 vodících trubek a jednu instrumentační ve středu souboru (Obr. 23). Model bazénu vyhořelého paliva již nebyl tak hardwarově a časově náročný, a tak byl počítán na osobním notebooku HP s procesorem AMD A10-4655M a 8GB operační pamětí. Vstupní soubor pro kód Serpent se nachází v příloze B.



Obr. 23: 2D nekonečná mříž palivových souborů v bazénu skladování použitého paliva vytvořená v Serpentu

Rozměry palivového souboru a absorpční trubky jsou v Tabulce 9. Absorpční trubky jsou vyrobeny z ATABORu, vodící a instrumentační trubky ze slitiny E-635 a jednotlivé

palivové proutky jsou pokryty zirkoniovou slitinou E-110. *Tabulka 10* obsahuje zastoupení jednotlivých prvků ve zmíněných slitinách.

Tabulka 9: Rozměry palivového souboru a absorpční trubky [27]

Absorpční trubka	
Vnitřní rozměr, cm	24.20
Vnější rozměr, cm	25.04
Palivový soubor	
Rozteč souborů, cm	28.8
Počet palivových proutků	312
Počet vodicích trubek	18
Počet instrumentačních trubek	1
Rozteč proutků, cm	1.275
Palivový proutek	
Průměr pelety, cm	0.772
Vnitřní průměr pokrytí, cm	0.772
Vnější průměr pokrytí, cm	0.91
Materiál pokrytí	E-110
Vodicí trubka	
Vnitřní průměr, cm	1.09
Vnější průměr, cm	1.265
Materiál	E-635
Instrumentační trubka	
Vnitřní průměr, cm	0.96
Vnější průměr, cm	1.125
Materiál	E-635

Tabulka 10: Složení jednotlivých slitin [28]

ATABOR		E-110		E-635	
Hustota = 7.9 g/cm ²		Hustota = 6.53 g/cm ²		Hustota = 6.54 g/cm ²	
Složení, wt%	66.032 Fe	Složení, wt%	98.76 Zr	Složení, wt%	98.46 Zr
	11.7 Ni		1.00 Nb		1.00 Nb
	19.4 Cr		0.01 Hf		0.01 Hf
	0.056 Co		0.07 Fe		0.04 Fe
	0.016 C		0.10 O		0.07 O
	0.445 Si		0.02 Ni		0.02 Ni
	0.005 P		0.02 Cr		0.02 Cr
	0.026 S		0.02 C		0.02 C
	1.32 Mn		-		-
	1.0 B		-		-

Vzhledem ke stanoveným limitům pro udržení podkritičnosti bazénu vyhořelého paliva je důležité vyhodnotit nejen samotný koeficient násobení získaný výpočtem, ale i například rozměrové neurčitosti a systematickou chybu kódu. Rozměrové neurčitosti výše zmíněného modelu obsahuje *Tabulka 18*.

Tabulka 18: Neurčitost rozměru pod klíč a rozteče palivového souboru.

Konzervativní hodnota [mm]	Toleranční hodnota [mm]	δ_i	Parametr
242	244.5	0.01032	rozměr pod klíč
300	299	0.00281	krok mříže palivového souboru

Pro ověření, zda systém splňuje bezpečnostní limit podkritičnosti lze využít následujícího vzorce [23, 29–31]:

$$k_{ef} + n\sigma \leq 1 - \Delta k_m - \Delta k_u \quad (13)$$

kde

- k_{ef} je hodnota získaná Monte Carlo analýzou,
- n je počet uvažovaných směrodatných odchylek (zpravidla 2 nebo 3)
- σ je směrodatná odchylka k_{ef} ,
- Δk_m je požadovaná hranice podkritičnosti,
- Δk_u zahrnuje nejistoty výpočtu, složení materiálu nebo výrobní tolerance.

Hodnota k_{ef} bazénu skladování vyhořelého paliva získaná kódem Serpent s knihovnou jaderných dat JEFF-3.2 je 0.97253 ± 0.00020 a systematická chyba Serpentu, stanovená pomocí předchozích 30 výpočtů, je 0.00976 se směrodatnou odchylkou 0.00344. Jelikož kód nadhodnocuje, konzervativně se při ověřování podkritičnosti uvažuje, že je systematická chyba nulová.

Limit podkritičnosti, jak bylo zmíněno výše, stanovuje SÚJB a pro tento případ je brána varianta, kdy k_{ef} nesmí překročit hodnotu 0.95. Do hodnoty Δk_u je započítána nejistota rozměru pod klíč a rozteče palivových souborů. Jeho hodnota činí 0.01070¹.

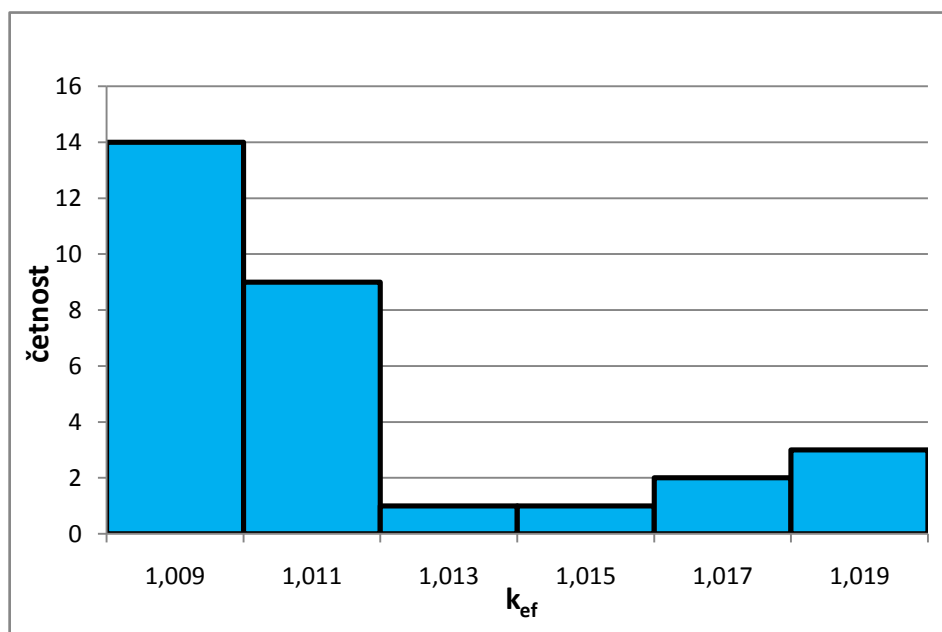
¹ $\delta = \sqrt{\sum \delta_i^2}$

5.3 Shrnutí

Už z vypočítané hodnoty k_{ef} modelu bazénu vyhořelého paliva je na první pohled jasné, že nerovnost (Rov. 13) v tomto případě nebude splněna a limit podkritičnosti nebude dodržen. Pravá strana nerovnice je označována jako *USL (Upper subcritical limit)* a její hodnota je pro tento model bazénu vyhořelého paliva 0.9393.

Pokud by byl použit 3D model namísto 2D modelu, byla by jeho vypočítaná hodnota k_{ef} o něco nižší a byla by blíže k dodržení bezpečnostního limitu. Je nutné brát v úvahu, že v modelu je konzervativně uvažováno skladování čerstvého paliva, ke kterému reálně v jaderné elektrárně nikdy nedojde. Také je uvažován stav, kdy je bazén zaplaven čistou vodou bez kyseliny borité. A jako poslední je nutné také vzít v potaz, že v současnosti je součástí paliva tzv. vyhořívající absorbátor, který snižuje přebytek reaktivity. Na místě je ovšem také případně uvažovat o snížení obohacení paliva, což by také napomohlo docílit bezpečné podkritičnosti systému.

Po zhodnocení všech výpočtů, lze výsledky získané kódem Serpent považovat za poměrně přesné. Výsledná průměrná odchylka je 0.976 %, veškeré hodnoty byly vůči benchmarkům nadhodnocené (Obr. 24). Pro větší důvěryhodnost výsledků by bylo vhodné zvýšit počet modelů a přidat další varianty obohacení paliva. Nejistoty ve výpočtech lze přičíst nejistotám v jaderných datech, nejistotám vyplývajících z geometrického modelování, výpočtové odchylce a nejistotám spojeným se statistikou. Obecně lze ale říci, že výpočetní kód Serpent je možné použít pro výpočty na reaktorech typu VVER.



Obr. 24: Rozdělení koeficientu násobení všech modelů

Závěr

Předkládaná práce se zabývá seznámením se s kódem Serpent a jeho validací. Úvodní část je ovšem věnována lehkému nahlédnutí do reaktorové fyziky tak, aby poskytovala čtenáři vědomostní základ k dalším částem práce. Tato část obsahuje popis neutronových interakcí, mikroskopického účinného průřezu, štěpné řetězové reakce a kritické podmínky reaktoru.

Značný díl teoretické části se zabývá popisem samotného kódu Serpent a metody výpočtu Monte Carlo. Zde je také rozebrán princip kritického výpočtu a přesnost a statistika odhadů metodou Monte Carlo. Následně jsou v práci vysvětleny základní příkazy kódu Serpent, pomocí kterých se tvoří geometrie nebo definují materiály či samotné parametry výpočtu. Práce také obsahuje krátce základní metodiku validace a její zásady.

Všechny zmíněné příkazy byly využity pro vytvoření 30 modelů ze tří vybraných benchmarkových úloh z *International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments* pro reaktory VVER. *ICSBEP Handbook* obsahuje benchmarkové konfigurace vycházející z experimentů, které byly provedeny na různých jaderných kritických zařízeních po celém světě. V práci lze najít stručný popis všech experimentů pro reaktory typu VVER pocházejících z České republiky, Maďarska a Ruska. Pro validaci kódu Serpent byly z databáze vybrány tři ruské experimenty LEU-COMP-THERM-030, 064 a 094. Experimenty byly vybrány podle obohacení paliva tak, aby byl rozsah co nejširší.

Výsledky výpočtů jsou shrnuty v poslední části práce. Jsou zde uvedeny hodnoty koeficientu násobení pro jednotlivé modely a porovnání s benchmarkovou hodnotou k_{ef} . Dále jsou uvedeny tabulky se srovnáním vypočteného k_{ef} kódem Serpent s k_{ef} vypočteným kódy, které byly použity pro referenční výpočty ve vyhodnocených experimentech. Pro každý experiment je také vyhodnocena odchylka koeficientu násobení od referenčních výpočtů. Výpočty provedené kódem Serpent jsou nadhodnocené o 0.976 %.

Hodnoty získané Serpentem vychází obdobně jako hodnoty získané kódem MCNP a KENO. Nejvýraznější rozdíl je mezi Serpentem a ruským MCU, jelikož nevyužívá obecné knihovny jaderných dat, které lze použít na různé aplikace, ale v rámci nejistot účinných průřezů má knihovnu jaderných dat přizpůsobenou tak, aby rozdíl mezi experimenty z ICSBEP a výpočtem byl co nejmenší (viz LCT 030 a LCT 094). Výsledná systematická

chyba kódu je demonstrována na modelovém příkladu bazénu skladování vyhořelého paliva, na kterém je zkoumáno dodržení limitu podkritičnosti. Po zhodnocení všech výsledků lze závěrem říci, že Serpent je vhodný pro výpočty na reaktorech VVER.

Seznam literatury a informačních zdrojů

- [1] ZEMAN, Jaroslav. *Reaktorová fyzika 1*. Praha: ČVUT Praha, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, 1989. ISBN 80-01-01933-0.
- [2] JEVREMOVIC, Tatjana. *Nuclear Principles in Engineering*. 2005. ISBN 0-387-23284-2.
- [3] *DOE Fundamentals Handbook, Nuclear Physics and Reactor Theory*. Washington D.C.: U.S. Department of Energy, 1993. ISBN DOE-HDBK-1019/2-93.
- [4] LEWIS, Elmer E. *Fundamentals of Nuclear Reactor Physics*. 2008. ISBN 0080560431.
- [5] *DOE Fundamentals Handbook, Nuclear Physics and Reactor Theory*. Washington D.C.: U.S. Department of Energy, 1993. ISSN 00338230.
- [6] LAMARSH, John R. *Introduction to Nuclear Engineering*. 1983. ISBN 0-201-14200-7.
- [7] *Výpočetní kód Serpent* [online]. [vid. 2017-11-13]. Dostupné z: <http://montecarlo.vtt.fi>
- [8] HRNČIAROVÁ, Zuzana. *Metoda Monte Carlo a její realizace*. B.m., 2015. Masarykova Univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav matematiky a statistiky, Bakalářská práce.
- [9] FABIAN, František a Zdeněk KLUIBER. *Metoda Monte Carlo a možnosti jejího uplatnění*. 1998. ISBN 80-7175-058-1.
- [10] LEPPÄNEN, Jaakko. *Development of a new Monte Carlo reactor physics code*. Helsinky: VTT, 2007. ISBN 9513870189.
- [11] KALTIAISENAHO, Toni. *Statistical Tests and the Underestimation of Variance in*

- Serpent 2*. B.m.: VTT Technical Research Centre of Finland. 2014.
- [12] SCHEBEN, Fynn. *Iterative Methods for Criticality Computations in Neutron Transport Theory* [online]. B.m., 2011. University of Bath. Dostupné z: <http://opus.bath.ac.uk/27837/>
- [13] KRUCHTEN, T.J.G. van. *Calculating the variance of k_{eff} over neutron chains in Monte Carlo criticality calculations*. B.m., 2013. Delft University of Technology, Department of Radiation, Radionuclides & Reactors, Faculty of Applied Sciences, Section Physics of Nuclear Reactors, Bachelor thesis.
- [14] BROWN, Forrest B. „*K-effective of the World*” and Other Concerns for Monte Carlo Eigenvalue Calculations. Los alamos: Los Alamos National Laboratory. 2010.
- [15] KALUGIN, M. A., D. S. OLEINIK a E. A. SUKHINO-KHOMENKO. Evaluation of the systematic error of Monte Carlo calculations of neutron-physical properties using a multiprocessor computer. *Atomic Energy*. 2011.
- [16] LEPPÄNEN, Jaakko. *Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code, User’s Manual*. B.m.: VTT Technical Research Centre of Finland, 2015.
- [17] TRAN, Eushiuan. Verification/Validation/Certification. *Carnegie Mellon University, 18-849b Dependable Embedded Systems* [online]. 1999 [vid. 2017-12-02]. Dostupné z: https://users.ece.cmu.edu/~koopman/des_s99/verification/index.html
- [18] *IEEE Standard Glossary of Software Engineering Terminology* [online]. 1990. ISSN 0-7381-0391-8. Dostupné z: http://ieeexplore.ieee.org/xpls/abs_all.jsp?arnumber=159342
- [19] ČSN EN ISO/IEC 17025:2001 *Posuzování shody - Všeobecné požadavky na způsobilost zkušebních a kalibračních laboratoří*. 2001

- [20] Software verification and validation. *Wikipedia* [online]. [vid. 2017-12-09]. Dostupné z: https://en.wikipedia.org/wiki/Software_verification_and_validation
- [21] THOMAS, Nina C a Henry L REEVES. Experience from quality assurance in nuclear power plant protection system software validation. *IEEE Transactions on Nuclear Science*. 1980.
- [22] J. KRATOCHVÍLA, B. FRIEDECKÝ, Z. Plzák. *Požadavky na validace z hlediska norem souvisejících s akreditačními procesy v klinické laboratoři*. 2004.
- [23] DEAN, J.C. a R.W. TAYLOE JR. *Guide for Validation of Nuclear Criticality Safety Calculational Methodology*. Washington D.C.: U.S. Nuclear Regulatory Commission, Office of Nuclear Material Safety and Safeguards, 2001.
- [24] ÚNMZ. WELMEC guide 7.2. In: *Sborníky technické harmonizace*. 2006.
- [25] *International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments*. B.m.: OECD Nuclear Energy Agency, 2014.
- [26] Vyhláška č. 329/2017, *Vyhláška o požadavcích na projekt jaderného zařízení*. 2017
- [27] EMMETT, Margaret B. *Calculational Benchmark Problems for VVER-1000 Mixed Oxide Fuel Cycle*. Oak Ridge: Oak Ridge National Laboratory.
- [28] *Kompaktní mříž BVP JE Temelín. Výkres ŠKODA a.s., Ae 16750 P*. 1988.
- [29] *The Radioactive Materials Packaging Handbook. Design, Operations and Maintenance*. Oak Ridge: Oak Ridge National Laboratory. 1998.
- [30] *IAEA Safety Standards for protecting people and the environment. Advisory Materials for the Regulations for the Safe Transport of Radioactive Material*. 2012. ISBN 978-92-0-133310-0
- [31] REZAEIAN, M. a J. KAMALI. Effect of a dual-purpose cask payload increment of

spent fuel assemblies from VVER 1000 Bushehr Nuclear Power Plant on basket criticality. *Elsevier. Applied Radiation and Isotopes* [online]. 2017, 80–85 [vid. 2018-03-29]. ISSN 18729800. Dostupné z: doi:10.1016/j.apradiso.2016.10.008

Přílohy

A. Vstupní soubor pro kód Serpent - LCT 030, varianta 1

set title "LEU-COMP-THERM-030 case 1"

% ----- Radial boundary of the core-----

surf cyl1 cylz 0.0 0.0 65 % Tank inner r

surf cyl2 cylz 0.0 0.0 65.4 % Tank outer r

surf cylg cylz 0.0 0.0 50 % Radial boundary of grid plate

% ----- Axial boundary of the core -----

surf tankbottom pz -82.8 %% Bottom of tank

surf tanktop pz 82.8 % Top of tank

surf moderator pz -18.32 % Waterlevel

surf topplate pz 77.9 % Top of grid plate

surf botplate pz -51.3 % End of grid plate

% ----- Tank -----

cell nadvodou1 0 fill core -cyl1 -tanktop -cylg topplate

cell nadvodou3 0 fill core -cyl1 -cylg -topplate moderator

cell AZ1 0 fill core -cyl1 -cylg -moderator botplate

cell AZ2 0 fill core -cyl1 -cylg -botplate tankbottom

cell voidmezi 0 void -cyl1 -tanktop moderator cylg

cell vodamezi 0 water -cyl1 -moderator cylg tankbottom

cell tank 0 steel cyl1 -cyl2

cell vne1 0 outside cyl2

cell vne2 0 outside -cyl2 -tankbottom

cell vne3 0 outside -cyl2 tanktop

% ----- Definition of fuel rod -----

pin LPS % Lower plug in steel

clad 0.3

steel

pin LPW % Lower Zr plug in water

clad 0.4519

water

pin UPV % Upper Zr plug in void

clad 0.4519

void

pin FUEL1 % Fuel sorrounded by water

fuel 0.37875

void 0.3875

clad 0.4519

water

pin FUEL2 % Fuel sorrounded by void

fuel 0.37875

void 0.3875

clad 0.4519

void

pin V1 % Void 1

void 0.15

clad 0.385

void 0.3875

clad 0.4519

void

pin V2 % Void 2

void 0.29

steel 0.32

void 0.3875

clad 0.4519

void

pin FWS % Fuel rod sorrouned by water sorrouned by steel

void 0.29

steel 0.32

void 0.3875

clad 0.4519

void 0.47

steel

pin SUPV % Small upper plug in void

clad 0.3

void

% ----- Definition of empty lattice position-----

pin lowgridhole % Lower vacant hole

water 0.31

steel

pin upgridhole % Upper vacant hole
 void 0.47
 steel
 % ----- The rest of grid plate-----
 pin lowfpos % Lower filled hole
 steel 0.31
 steel

 pin upfpos % Upper filled hole
 steel 0.47
 steel
 % ----- Axial surfaces for fuel rod-----
 surf lowerbot pz -52.8 % Bottom of lower grid plate
 surf lowertop pz -51.3 % Top of lower grid plate
 surf fuelbot pz -49 % Bottom of active fuel
 surf waterlevel pz -18.32 % Water level
 surf fueltop pz 76 % Top of active fuel
 surf voidbot pz 76.7 % Bottom of void in fuel rod
 surf upperbot pz 77.9 % Bottom of upper grid plate
 surf uppertop pz 78.9 % Top of upper grid plate
 surf voidtop pz 79 % Top of void in fuel rod
 surf cladtop pz 81.3 % Upper end of cladding
 surf rodtop pz 82.8 % Top of fuel rod
 % ----- Vertical layers for fuel rod -----
 cell rod1 F water -lowerbot

cell rod3 F fill LPS lowerbot -lowertop
 cell rod4 F fill LPW lowertop -fuelbot
 cell rod5 F fill FUEL1 fuelbot -waterlevel
 cell rod6 F fill FUEL2 waterlevel -fueltop
 cell rod7 F fill V1 fueltop -voidbot
 cell rod8 F fill V2 voidbot -upperbot
 cell rod9 F fill FWS upperbot -uppertop
 cell rod10 F fill V2 uppertop -voidtop
 cell rod11 F fill UPV voidtop -cladtop
 cell rod12 F fill SUPV cladtop -roddtop
 cell rod13 F void roddtop
 % ----- Vertical layers for empty lattice position -----
 cell EP2 _ water -lowerbot
 cell EP3 _ fill lowgridhole lowerbot -lowertop
 cell EP4 _ water lowertop -fuelbot
 cell EP5 _ water fuelbot -waterlevel
 cell EP6 _ void waterlevel -fueltop
 cell EP7 _ void fueltop -voidbot
 cell EP8 _ void voidbot -upperbot
 cell EP9 _ fill upgridhole upperbot -uppertop
 cell EP10 _ void uppertop -voidtop
 cell EP11 _ void voidtop -cladtop
 cell EP12 _ void cladtop -roddtop
 cell EP13 _ void roddtop
 % ----- Vertical layers for filling position -----
 cell FP2 o water -lowerbot

```
cell FP3 o fill lowfpos          lowerbot -lowertop
cell FP4 o water                 lowertop -fuelbot
cell FP5 o water                 fuelbot -waterlevel
cell FP6 o void   waterlevel -fueltop
cell FP7 o void   fueltop -voidbot
cell FP8 o void   voidbot -upperbot
cell FP9 o fill upfpos          upperbot -uppertop
cell FP10 o void                uppertop -voidtop
cell FP11 o void                voidtop -cladtop
cell FP12 o void                cladtop -roddtop
cell FP13 o void                roddtop

% ----- Lattice -----
lat core 2 0.0 0.0 101 101 1.27

"z důvodu rozsáhlosti je obsah lattice vynechán"

set usym core 3 2 0.0 0.0 300 60          % lattice symmetrization

% ----- Materials-----

mat fuel sum rgb 128 0 128

8016.03c 4.4869E-02
      % O16

92234.03c 6.1583E-06          % U234
92235.03c 7.9489E-04          % U235
92238.03c 2.1633E-02          % U238

mat clad sum rgb 211 211 211

40090.03c 2.2018E-02          % Zr90
40091.03c 4.8015E-03          % Zr91
40092.03c 7.3392E-03          % Zr92
```

40094.03c	7.4376E-03	% Zr94
40096.03c	1.1982E-03	% Zr96
41093.03c	4.2456E-04	% Nb93
72174.03c	1.0608E-08	% Hf174
72176.03c	3.4872E-07	% Hf176
72177.03c	1.2331E-06	% Hf177
72178.03c	1.8086E-06	% Hf178
72179.03c	9.0297E-07	% Hf179
72180.03c	2.2357E-06	% Hf180

mat steel sum rgb 128 128 128

26054.03c	3.4348E-03	% Fe54
26056.03c	5.3871E-02	% Fe56
26057.03c	1.2448E-03	% Fe57
26058.03c	1.6440E-04	% Fe58
24050.03c	7.1558E-04	% Cr50
24052.03c	1.3799E-02	% Cr52
24053.03c	1.5647E-03	% Cr53
24054.03c	3.8949E-04	% Cr54
28058.03c	5.5184E-03	% Ni58
28060.03c	2.1265E-03	% Ni60
28061.03c	9.2410E-05	% Ni61
28062.03c	2.9466E-04	% Ni62
28064.03c	7.4171E-05	% Ni64
14028.03c	1.2494E-03	% Si28
14029.03c	6.3690E-05	% Si29

14030.03c	4.2008E-05	% Si30
25055.03c	9.5257E-04	% Mn55
22046.03c	5.7382E-05	% Ti46
22047.03c	5.1748E-05	% Ti47
22048.03c	5.1275E-04	% Ti48
22049.03c	3.7629E-05	% Ti49
22050.03c	3.6029E-05	% Ti50
15031.03c	5.3759E-05	% P31
6000.03c	4.7531E-04	% C
29063.03c	1.5531E-04	% Cu63
29065.03c	6.9289E-05	% Cu65
16032.03c	2.8186E-05	% S32
16033.03c	2.2252E-07	% S33
16034.03c	1.2609E-06	% S34
16036.03c	2.9669E-09	% S36

mat water -0.9986 moder lwtr 1001 rgb 175 238 238

1001.03c 2.0 % H1

8016.03c 1.0 % O16

% --- Thermal scattering data for light water-----

therm lwtr lwj3.00t

% --- Run parameters-----

set acelib "/media/sf_Shared_folder/serpent_data/sss_jeff32.xsdata"

set pop 25000 1000 50

B. Vstupní soubor pro kód Serpent - BVP

set title "Palivo v BSVP"

pin I % central instrumentation tube

water 0.48

E635 0.5625

water

pin G % guide tube

water 0.545

E635 0.6325

water

pin F % fuel rod

fuel 0.386

E110 0.455

water

pin W % moderator

water

%-----Materials

mat fuel sum rgb 128 0 128

8016.03c	4.6300E-02	% O16
8017.03c	1.7636E-05	% O17
92235.03c	1.1743E-03	% U235
92238.03c	2.2030E-02	% U238

mat E110 sum rgb 211 211 211

40090.03c	2.1927E-02	% Zr90
40091.03c	4.7817E-03	% Zr91
40092.03c	7.3089E-03	% Zr92
40094.03c	7.4069E-03	% Zr94
40096.03c	1.1933E-03	% Zr96
41093.03c	4.2371E-04	% Nb93
72174.03c	3.5288E-09	% Hf174
72176.03c	1.1601E-07	% Hf176
72177.03c	4.1022E-07	% Hf177
72178.03c	6.0165E-07	% Hf178
72179.03c	3.0039E-07	% Hf179
72180.03c	7.7368E-07	% Hf180
26054.03c	2.8866E-06	% Fe54
26056.03c	4.5273E-05	% Fe56
26057.03c	1.0461E-06	% Fe57
26058.03c	1.3816E-07	% Fe58
8016.03c	2.4505E-04	% O16

28058.03c	9.1318E-06	% Ni58
28060.03c	3.5189E-06	% Ni60
28061.03c	1.5292E-07	% Ni61
28062.03c	4.8760E-07	% Ni62
28064.03c	1.2274E-07	% Ni64
24050.03c	6.5791E-07	% Cr50
24052.03c	1.2687E-05	% Cr52
24053.03c	1.4386E-06	% Cr53
24054.03c	3.5810E-07	% Cr54
6000.03c	6.5556E-05	% C

mat E635 sum rgb 192 192 192

40090.03c	2.1880E-02	% Zr90
40091.03c	4.7715E-03	% Zr91
40092.03c	7.2933E-03	% Zr92
40094.03c	7.3911E-03	% Zr94
40096.03c	1.1907E-03	% Zr96
41093.03c	4.2410E-04	% Nb93
72174.03c	3.5320E-09	% Hf174
72176.03c	1.1611E-07	% Hf176
72177.03c	4.1059E-07	% Hf177
72178.03c	6.0220E-07	% Hf178
72179.03c	3.0066E-07	% Hf179
72180.03c	7.7438E-07	% Hf180
26054.03c	1.6510E-05	% Fe54
26056.03c	2.5894E-04	% Fe56

26057.03c	5.9830E-06	% Fe57
26058.03c	7.9021E-07	% Fe58
8016.03c	1.7239E-04	% O16
28058.03c	9.1401E-06	% Ni58
28060.03c	3.5221E-06	% Ni60
28061.03c	1.5306E-07	% Ni61
28062.03c	4.8804E-07	% Ni62
28064.03c	1.2285E-07	% Ni64
24050.03c	6.5851E-07	% Cr50
24052.03c	1.2699E-05	% Cr52
24053.03c	1.4399E-06	% Cr53
24054.03c	3.5843E-07	% Cr54
6000.03c	6.5616E-05	% C

mat atabor sum rgb 128 128 128

26054.03c	3.2908E-03	% Fe54
26056.03c	5.1612E-02	% Fe56
26057.03c	1.1926E-03	% Fe57
26058.03c	1.5751E-04	% Fe58
24050.03c	7.7126E-04	% Cr50
24052.03c	1.4873E-02	% Cr52
24053.03c	1.6865E-03	% Cr53
24054.03c	4.1980E-04	% Cr54
27059.03c	4.5207E-05	% Co59
6000.03c	6.3383E-05	% C
14028.03c	6.9504E-04	% Si28

14029.03c	3.5430E-05	% Si29
14030.03c	2.3369E-05	% Si30
15031.03c	7.6799E-06	% P31
16032.03c	3.6647E-05	% S32
16033.03c	2.8932E-07	% S33
16034.03c	1.6395E-06	% S34
16036.03c	3.8576E-09	% S36
25055.03c	1.1431E-03	% Mn55
5010.03c	8.8053E-04	% B10
5011.03c	3.5221E-03	% B11
28058.03c	6.4562E-03	% Ni58
28060.03c	2.4878E-03	% Ni60
28061.03c	1.0811E-04	% Ni61
28062.03c	3.4473E-04	% Ni62
28064.03c	8.6775E-05	% Ni64

mat water -0.9986 moder lwtr 1001 rgb 175 238 238

1001.03c 2.0 % H1

8016.03c 1.0 % O16

% --- Thermal scattering data for light water-----

therm lwtr lwj3.00t

% --- Run parameters-----

set acelib "/media/sf_Shared_folder/serpent_data/sss_jeff32.xsdata"

set pop 25000 1000 50

plot 3 3000 3000