

**ZÁPADOČESKÁ UNIVERZITA V PLZNI
FAKULTA ELEKTROTECHNICKÁ**

Katedra elektromechaniky a výkonové elektroniky

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

**Absorpční příměsi pro zajištění podkritičnosti
skladování vyhořelého jaderného paliva**

Originál (kopie) zadání BP/DP

Abstrakt

Předkládaná bakalářská práce se zabývá výběrem vhodných prvků jako příměsi pro zajištění podkritičnosti skladování vyhořelého jaderného paliva. První metoda byla založena na informacích ze softwaru NEA JANIS, potřebné výpočty v druhé metodě byly provedeny v programovém prostředí Serpentu. Výsledkem je jednak potvrzení dobrých vlastností boru, ale zároveň i přehled případných dalších prvků, o kterých by bylo vhodné uvažovat při budoucím návrhu absorpčních trubek skladovacích zařízení, například gadolinium.

Klíčová slova

Podkritičnost, Serpent, NEA JANIS, VVER-1000, účinný tepelný průřez

Abstract

The bachelor theses presents choice of suitable elements as additives to ensure criticality safety of spent nuclear fuel storage. The first method is based on information from NEA JANIS software, the second one employ calculations in Serpent software framework. The results confirmed good properties of boron. Moreover, a list of prospective additional elements that should be considered in further design of spent fuel storage absorber tubes, like gadolinium, is presented.

Keywords

Criticality safety, Serpent, NEA JANIS, VVER-1000, effective thermal cross-section

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně, s použitím odborné literatury a pramenů uvedených v seznamu, který je součástí této bakalářské práce.

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

.....
podpis

V Plzni dne 6.6.2018

Jan Tímr

Poděkování

Tímto bych rád poděkoval vedoucí bakalářské práce Ing. Janě Jiříčkové, Ph.D. a externímu konzultantovi ze ŠKODA J.S. Ing. Martinu Loveckému, Ph.D. za cenné profesionální rady, připomínky a metodické vedení práce i poskytnutí nutného softwaru pro zpracování této práce.

Obsah

OBSAH	7
SEZNAM SYMBOLŮ A ZKRATEK	8
ÚVOD	12
1 TEORETICKÝ ÚVOD	14
1.1 ŠTĚPNÁ REAKCE.....	14
1.2 REGULACE A ZACHYCENÍ NEUTRONŮ.....	15
1.3 KOEFICIENT NÁSOBENÍ NEUTRONŮ.....	16
1.4 ÚČINNÝ PRŮŘEZ.....	17
1.5 SKLADOVÁNÍ.....	17
1.5.1 Mokrý skladování.....	18
1.5.2 Suchý skladování.....	19
1.6 OBALOVÝ SOUBOR VYHOŘELÉHO JADERNÉHO PALIVA.....	20
2 NEA JANIS	22
2.1 PROSTŘEDÍ A MANIPULACE.....	22
2.2 VÝSLEDKY.....	23
3 SERPENT	25
3.1 POUŽÍVÁNÍ.....	25
3.2 VSTUP.....	26
3.3 GEOMETRIE.....	26
3.3.1 Plocha.....	26
3.3.2 Buňky.....	27
3.3.3 Palivový proutek.....	28
3.3.4 Univerza a mřížky.....	29
3.4 MATERIÁLY.....	30
3.5 VÝSTUP.....	32
3.6 OPTIMÁLNÍ ŠÍŘKA ABSORPČNÍ TRUBKY.....	33
3.7 VÝSLEDNÉ POROVNÁNÍ PRVKŮ.....	35
3.8 EKVIVALENTNÍ OBSAH PRVKŮ VŮČI BORU.....	37
4 ZÁVĚR	41
SEZNAM LITERATURY A INFORMAČNÍCH ZDROJŮ	43
PŘÍLOHY	1

Seznam symbolů a zkratk

H	vodík
He	helium
Li	lithium
Be	beryllium
B	bor
C	uhlík
N	dušík
O	kyslík
F	fluor
Ne	neon
Na	sodík
Mg	hořčík
Al	hliník
Si	křemík
P	fosfor
S	síra
Cl	chlor
Ar	argon
K	draslík
Ca	vápník
Sc	skandium
Ti	titan
V	vanad
Cr	chrom
Mn	mangan
Fe	železo
Co	kobalt
Ni	nikl
Cu	měď
Zn	zinek
Ga	gallium

Ge	germanium
As.....	arsen
Se	selen
Br	brom
Kr	krypton
Rb	rubidium
Sr.....	stroncium
Y	yttrium
Zr	zirkonium
Nb	niob
Mo.....	molybden
Tc.....	technecium
Ru	ruthenium
Rh	rhodium
Pd.....	palladium
Ag	stříbro
Cd	kadmium
In.....	indium
Sn.....	cín
Sb	antimon
Te.....	tellur
I.....	jod
Xe	xenon
Cs.....	cesium
Ba.....	baryum
La	lanthan
Ce.....	cer
Pr.....	praseodym
Nd	neodym
Sm.....	samarium
Eu.....	europium
Gd	gadolinium
Tb.....	terbium
Dy	dysprosium

Ho	holmium
Er	erbium
Tm.....	thulium
Yb	ytterbium
Lu.....	lutetium
Hf.....	hafnium
Ta.....	tantal
W	wolfram
Re.....	rhenium
Os.....	osmium
Ir	iridium
Pt.....	platina
Au	zlato
Hg	rtuť
Tl.....	thallium
Pb.....	olovo
Bi	bismut
Po	polonium
Rn	radon
Ra.....	radium
Th.....	thorium
U	uran
Np	neptunium
Pu.....	plutonium
Fm.....	fermium
ACE	souborový formát označující archiv
PWR	pressurized water reactor, tlakovodní reaktor
VVER	tlakovodní reaktor
BSVP ETE.....	bazén skladování vyhořelého paliva v elektrárně Temelín
n	neutron
NEA JANIS	Java-based Nuclear Information Software
pin.....	výpočetní buňka s palivovým proutkem
E-110	materiál pro pokrytí tyče s palivem
E-635	materiál pro pokrytí vodící tyče

ATABOR..... ocel s 1% boru

ENDF/B-VII.1použité knihovny

MCNP..... Monte Carlo N-Particle code, transportní výpočetní kód

KENO-VI nástroj v balíčku SCALE

SCALE Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation, kód pro
analýzu kritičnosti

CASTOR souborový obal, kontejner na vyhořelé jaderné palivo

12.1 ve všech tabulkách je jako oddělovač desetinných míst použita tečka

σ účinný průřez (b)

M..... atomová hmotnost izotopu (g/mol)

Úvod

Předkládaná bakalářská práce se zabývá výběrem vhodných prvků jako příměsí pro zajištění podkritičnosti skladování vyhořelého jaderného paliva. Zajištění podkritičnosti je elementární vlastností skladovacích zařízení, například bazén při mokřem skladování nebo obalový soubor, a v této práci je popsáno, co tento pojem znamená i jaké jsou požadovaná kritéria. První metodou bylo využití databáze NEA JANIS, které poukázalo na vhodnost gadolinia, které předčilo bor v rámci účinného tepelného průřezu. V současné době je nejrozšířenější příměsí bor. Důvodem jsou jeho vlastnosti, které zde byly ověřeny na základě výpočtů transportního kódu Serpent. Součástí této práce je samotný výpočet koeficientu násobení v souborovém obalu vyhořelého jaderného paliva z reaktoru VVER-1000.

Výpočet na základě metody Monte Carlo může být proveden hned několika kódy. Mezi ty známé a často používané se řadí MCNP, Serpent či KENO-VI, ačkoli nejsou jedinými možnostmi. Za zmínku určitě stojí i jiné kódy, a to například RACER, MORSE, VIM, RCP, MCPP, TART, COG, MONK nebo MC21. Základ metody Monte Carlo je v náhodném vzorkování, což jí významně odlišuje od ostatních metod, a simulaci jedné částice od vzniku až do jejího zániku. Též je tu zaváděn pojem náhodná cesta dané částice, kdy není přímo nadefinována její dráha. Používá se zde funkce, která náhodně generuje sekvenci čísel z intervalu (0,1), RNG taky nazývaná pseudo-náhodný generátor čísel. Většina výpočetních transportních kódů, například MCNP, používá generátor lineárně shodných náhodných čísel, který je rychlý a probádaný. [1]

Výpočetní kód MCNP byl vyvinut v Los Alamos National Laboratory v šedesátých letech minulého století a od té doby je neustále zlepšován. Původně byl používán pro výpočet koeficientu násobení, ale dnes již má širokou škálu použití. [1]

Výpočetní kód Serpent je podrobněji popsán v samostatné kapitole této práce, protože byl použit při výpočtech. Je zástupcem novějších kódů. Kódy bývají neustále nově vyvíjeny, protože je to mnohem jednodušší a levnější než přepisovat kódy starší.

KENO-VI je počítačový kód pro výpočet kritičnosti a také primárním analytickým nástrojem pro výpočet podkritičnosti v softwaru SCALE. Primárně je navržen tak, aby pomohl novým uživatelům s orientací v daném prostředí a ilustrativními příklady vysvětlil

základní principy. Byl vyvinut v sedmdesátých letech minulého století v zařízení Oak Ridge National Laboratory a softwarové prostředí běží pod operačním systémem Windows. [2]

1 Teoretický úvod

V této části se práce bude zabývat základními principy štěpné reakce, při níž vzniknou rychlé neutrony, její regulace, kritičností daného systému, skladování vyhořelého jaderného paliva a v závěru samotnému obalovému souboru na vyhořelé jaderné palivo.

1.1 Štěpná reakce

Jaderná elektrárna by se dala ve své podstatě popsat obdobným způsobem jako jakákoli jiná tepelná elektrárna, například uhelná. Nejpodstatnějším rozdílem je způsob získání energie nutné pro zajištění potřebných parametrů páry, která je přiváděna na turbínu. Na rozdíl od uhelné elektrárny, kde se za tímto účelem spaluje uhlí, se v jaderné elektrárně využívá štěpné reakce. Princip štěpné reakce spočívá obecně v tom, že navýšením nukleonového čísla stabilního jádra paliva dojde k jeho destabilizaci a následnému uvolnění energie při štěpení na štěpné produkty. Pro příklad lze uvést případ užití uranu, kde tepelný neutron narazí do jádra izotopu uranu 235, k jehož označení slouží U^{235} a toto označování je respektováno v celé práci, vznikne složené jádro, které se rozštěpí.

Štěpením vznikají rychlé neutrony s průměrnou energií 2 MeV. Pokud se neutron dostane do moderátoru, jeho energie se díky srážkám s lehkými jádry rychle sníží. Pokud má energii přibližně 7 eV či 20 eV a zachytí ho jádro U^{238} , dochází k tzv. rezonanční absorpci, při níž vznikne jádro U^{239} a následným β rozpadem Np^{239} , a potom Pu^{239} . Ovšem v tepelných reaktorech jsou důležité tepelné neutrony, které mají energii srovnatelnou s kinetickou energií molekul. Průměrná rychlost těchto neutronů bývá 2200 ms^{-1} , čemuž odpovídá energie 0,0253 eV. Účinný průřez pro štěpení obvykle roste při snižující se rychlosti neutronů. To je taky důvod, proč štěpná reakce v tepelném reaktoru pro svůj běh potřebuje tepelné neutrony. Celková využitelná energie, která vznikne štěpením jednoho jádra, je přibližně $(190 \pm 5) \text{ MeV}$. [3]

Pouze pro úplnost informací by zde mělo zaznít, že existují i reaktory, které pracují s neutrony rezonančních energií, které obsahují podstatně méně moderátoru, a s neutrony rychlými, v nichž moderátor není vůbec, a k absorpci neutronů dochází bez snižování jejich energie. [3]

Popsané dělení reaktorů bylo bráno z hlediska energetického spektra neutronů. Jaderné reaktory však lze rozlišovat i podle jiných specifik:

- Druhu paliva
- Druhu moderátoru
- Způsobu rozmístění paliva
- Druhu chladiva
- Účelu využití

Dle druhu paliva lze rozlišovat reaktory s přírodním uranem, obohaceným uranem, případně s čistým štěpícím se izotopem.

Dle druhu moderátoru lze zmínit reaktory s grafitem, vodou, berylliem nebo těžkou vodou.

Dle použitého rozmístění paliva lze rozlišit homogenní reaktor se stejnorodým rozmístěním paliva nebo heterogenní, kde palivo je rozmístěno v osamělých blocích. Na použitou geometrii rozložení musí být brán zřetel při zajišťování skladování vyhořelého jaderného paliva.

Dle druhu chladiva lze rozlišit reaktory na chlazené vodou, těžkou vodou, plynem nebo tekutým kovem.

Dle účelu využití je možno zmínit reaktory experimentální, určené k výrobě elektrické energie či štěpných produktů, případně obojího.

1.2 Regulace a zachycení neutronů

Jak je výše zmíněno, ke zpomalení neutronů na požadovanou energetickou hladinu se v jaderných reaktorech používá moderátor. K dosažení zpomalovacího efektu dochází při srážkách neutronů s jádry látky moderátoru. Srážky lze obecně rozdělit na pružné a nepružné. Srážku můžeme označit za pružnou, když je celková kinetická energie v těžišťové soustavě před srážkou stejná jako celková energie po srážce. Nepružnou srážkou se nazývá taková srážka, kdy se v těžišťové soustavě energie mění a část energie se vyzáří do okolí.

Zpomalení neutronů v reaktoru je zapříčiněno pružnými srážkami. V současné době je nejrozšířenější součástí moderátoru bor.

Pro představu je zde (Tabulka 1) uveden počet srážek některých prvků nutných ke snížení původní energie neutronů z hodnoty 2 MeV na přibližnou hodnotu energie tepelného neutronu 0,03 eV [3].

Moderátor	H	D	Be	C
Počet srážek	18	25	86	114

Tabulka 1: Průměrný počet srážek neutronů

1.3 Koeficient násobení neutronů

Koeficient násobení neutronů označovaný k ve své podstatě udává jakýsi poměr mezi počtem neutronů jedné generace a generace předešlé. Jako modelový příklad se udává nekonečný reaktor, který má takovou vlastnost, že z něj neutrony nevylétávají, to znamená, že z něj neunikají a nedochází k jejich absorpci vně reaktoru. Podmínku zaručující udržení řetězové reakce určuje vztah

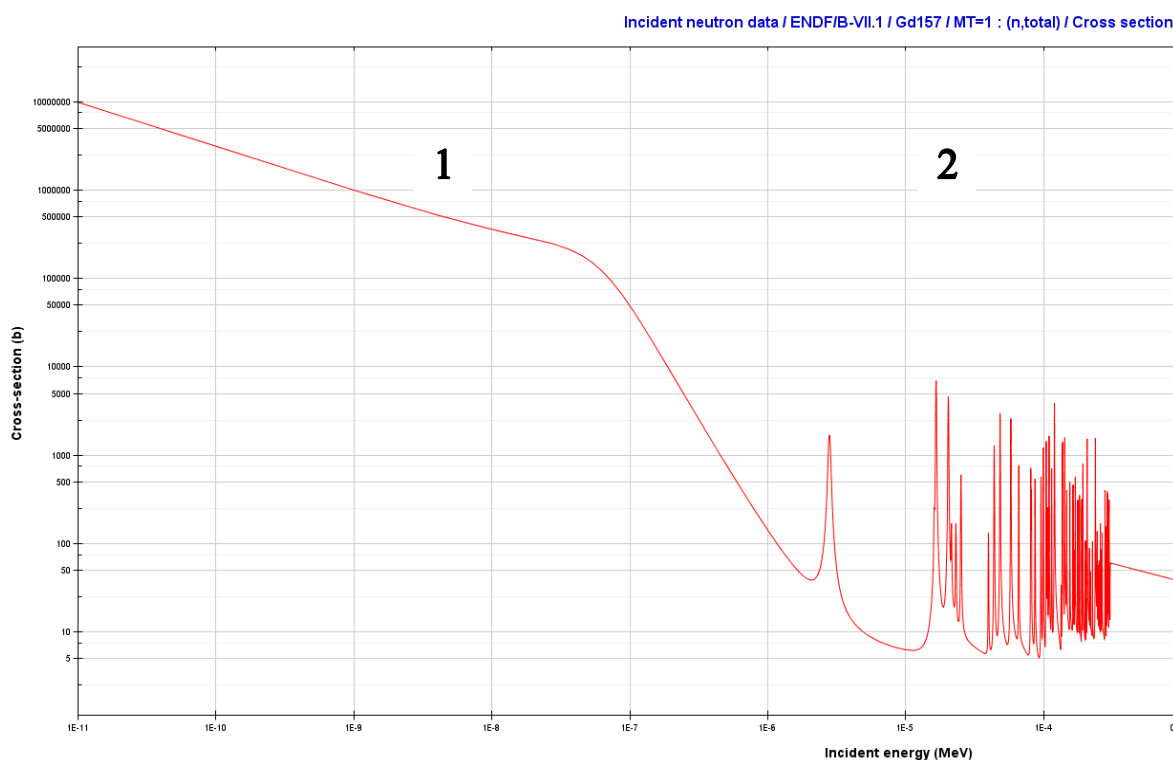
$$k = 1 \quad (1)$$

V takové situaci je systém nazýván kritický. Pokud je $k > 1$, systém je nadkritický a počet neutronů roste, v opačném případě je podkritický a počet neutronů klesá. Reálný reaktor ovšem nekonečné rozměry mít nemůže, a proto k úniku neutronů dochází, a tudíž se zavádí koeficient kritický $k_{krit} > 1$, který označuje reálný kritický systém a je s ním svázán kritický objem reaktoru. [3]

Tento koeficient se používá i při posuzování obalového souboru. Na rozdíl od reaktoru, kde se požaduje určitý průběh štěpné řetězové reakce, při skladování vyhořelého jaderného paliva je žádoucí spíše utlumení tohoto děje. Proto bylo jedno z kritérií, aby byl koeficient násobení výsledného modelovaného systému menší než 0,95.

1.4 Účinný průřez

Účinný průřez je veličina určující pravděpodobnost interakce dané částice s jinou. Z toho plyne, že čím větší účinný průřez bude, tím je i větší pravděpodobnost interakce. Díky tomuto předpokladu by mělo být možné vybírat vhodné prvky pro zpomalování či přímo absorpci tepelných neutronů na základě znalosti tepelného účinného průřezu daných prvků a energie tepelných neutronů. Jelikož je druhá metoda výběru vhodných prvků založena právě na znalosti těchto údajů, je vhodné zde přiložit pro názornost graf závislosti účinného průřezu gadolinia na energii neutronu. Zde je taky doložen fakt, že s klesající energií neutronu roste hodnota účinného průřezu, který byl zmíněn výše. Na přiloženém obrázku (Obrázek 1), který byl získán ze softwaru NEA JANIS, jsou zvýrazněny dvě oblasti. První představuje termální oblast, zatímco druhá rezonanční oblast, která následně přechází do části, kde se nachází rychlé neutrony.



Obrázek 1: Závislost účinného průřezu gadolinia na energii

1.5 Skladování

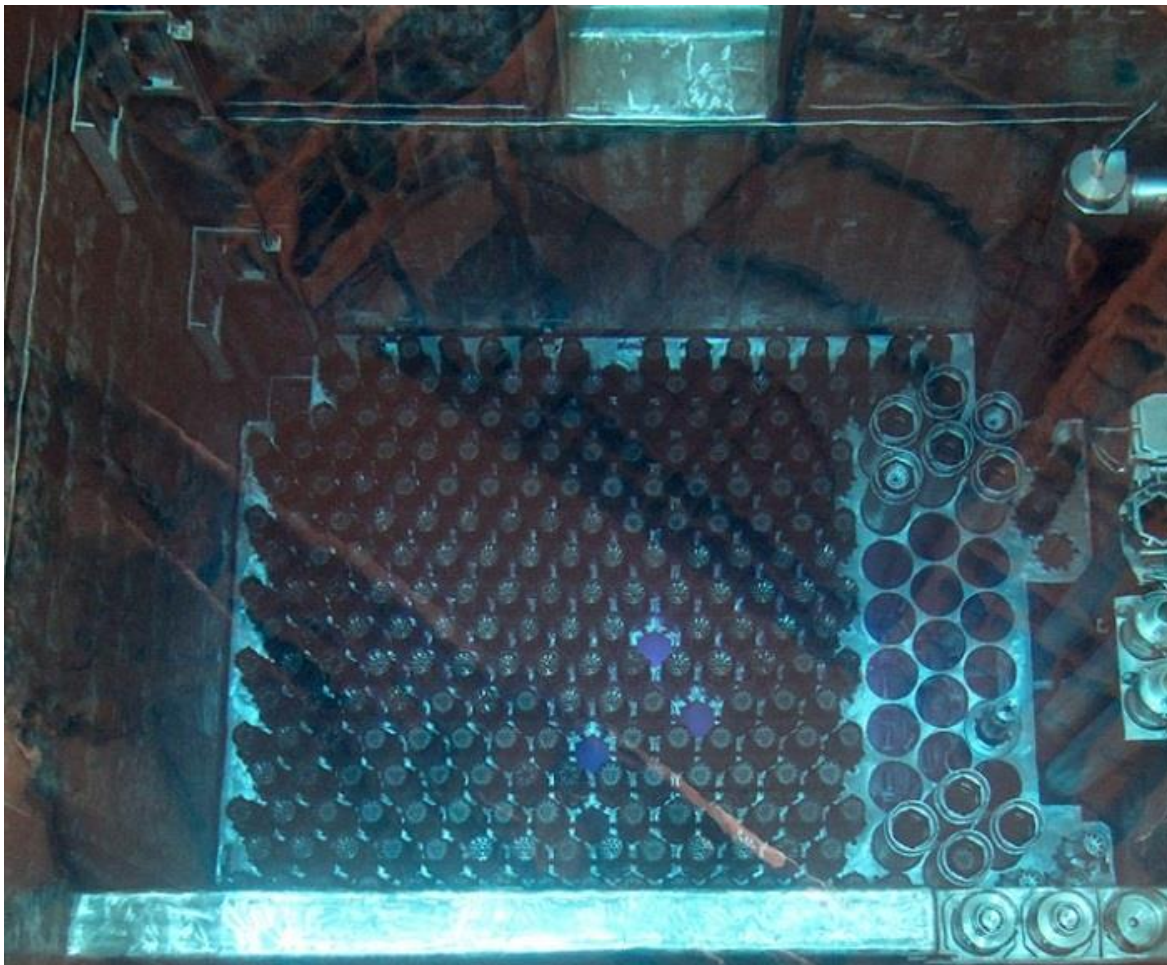
Skladování radioaktivních látek je v dnešní době nutností a nakládání s nimi je z hlediska bezpečnostních opatření pod důkladným dozorem. Nevznikají ale pouze při provozu jaderných elektráren, nýbrž například i v rámci medicíny. S těmito takzvanými

odpady lze nakládat více způsoby, jako je jejich roztrídění, spálení a následné zalití betonem do speciálních kontejnerů, ale ne každý materiál tímto procesem lze zpracovat.

Vyhořelé jaderné palivo, jehož bezpečné skladování je tématem této práce, má hned několik způsobů bezpečného uložení, přičemž některé na sebe v jistém časovém sledu navazují. Lze je rozdělit na dočasná, kdy se vyhořelé palivo ukládá do meziskladů, a trvalá, mezi která patří uložení do trvalých hlubinných úložišť. S ohledem na to, že potenciál vyhořelého jaderného paliva je využit přibližně z 5%, často diskutovaným řešením, jak s ním naložit, je přepracovat ho a takto zpracované palivo znovu využít v palivovém procesu. Každopádně takovéto řešení vyžaduje speciálně upravené reaktory. Tím přepracováním je myšleno převážně odstranění štěpných produktů, které musejí být stále někde skladovány.

1.5.1 Mokrý skladování

Tento typ skladování se provádí u většiny jaderných reaktorů, avšak bývá pouze dočasným řešením. Ve světě se používá i několik centrálních meziskladů, a to například v Japonsku či Švédsku. Mokrý skladování spočívá v tom, že se čerstvě vyhořelé jaderné palivo zaveze do bazénu, což je betonový prostor zalitý vodou, do níž lze přidat příměsi, například kyselinu boritou, pro zvýšení bezpečnosti. Dále je z důvodu oddělení palivových souborů a jejich stínění součástí bazénu mříž, která bývá vyrobena z oceli s případnou příměsí boru. Důvodem tohoto typu skladování je především dobrý odvod tepla i dobré stínění. Nutností je zajistit odpovídající chlazení prostřednictvím čerpadel a dalších součástí a případné čištění bazénů. Další výhodou je vizuální kontrola především palivových souborů. Nevýhodou je ekonomická náročnost [4]. Konkrétní příklad bazén skladování v jaderné elektrárně je na přiloženém obrázku (Obrázek 2).



Obrázek 2: BSVP ETE [5]

1.5.2 Suché skladování

Do suchého skladování patří jak mezisklady, tak i trvalá úložiště. Mezi hlavní výhody zde patří využití pasivního chlazení, které se provádí na principu odvodu tepla vedením a prouděním vzduchu, absence vzniku radioaktivního odpadu a redukce obsluhujícího personálu.

Tento typ skladování se dělí na modulové a halové. První zmiňované používá dílčích boxů nebo sklípků z betonu pro oddělení jednotlivých palivových kazet v zapouzdřených ocelových koších. Dle úložné pozice vyhořelého paliva lze dále rozdělit toto skladování na horizontální a vertikální. Zabezpečení ochlazování je provedeno rozvodem chladícího vzduchu ve speciálních kanálech. Toto je systém využívaný především v USA, Anglii, Rusku nebo v Kanadě, nikoli však v České republice.

V České republice se využívá halové suché skladování. Jedná se o mezisklady vybudované v rámci prostoru jaderné elektrárny, které jsou zbudovány jako objekty se zvýšenou odolností, kde jsou technologicky zabezpečeny stálé okolní podmínky, jako teplota a vlhkost. Před uskladněním v těchto objektech je palivo ve skladovacím bazénu, popsaném výše, vloženo do obalového souboru CASTOR nebo ŠKODA. Vložení probíhá pod hladinou vody, ta se po naplnění kontejneru palivem následně odčerpá, prostor se vakuově vysuší a naplní inertním plynem. Následný transport do meziskladu je realizován pomocí lokální železnice.

1.6 Obalový soubor vyhořelého jaderného paliva

Existuje mnoho řešení obalových souborů, a to především z důvodu specifických tvarů a rozměrů použitého paliva, například palivo z reaktoru typu PWR má čtvercové koše, zatímco palivo z typu VVER má šestihranné koše. V současné době se v České republice používají kontejnery typu CASTOR, které jsou konstruovány právě na palivo z reaktoru VVER-440, který se používá v jaderné elektrárně Dukovany, a VVER-1000, který je používán v jaderné elektrárně Temelín.



Obrázek 3: CASTOR 1000/19 [6]

Kontejner CASTOR 1000/19 (Obrázek 3) musí splňovat požadavky pro skladování i transport vyhořelého jaderného paliva. Do vnitřního koše lze vložit 19 palivových souborů, které jsou symetricky rozmístěny kolem středové osy. Jejich celkový maximální zbytkový tepelný výkon je 17,5 kW. Každý palivový soubor obsahuje jednu instrumentační trubku, 18 vodících trubek regulačních tyčí a 312 palivových tyčí. Absorpční trubka palivového souboru je ze slitiny ATABOR, kde je jako příměs 1% boru pro zajištění podkritičnosti.

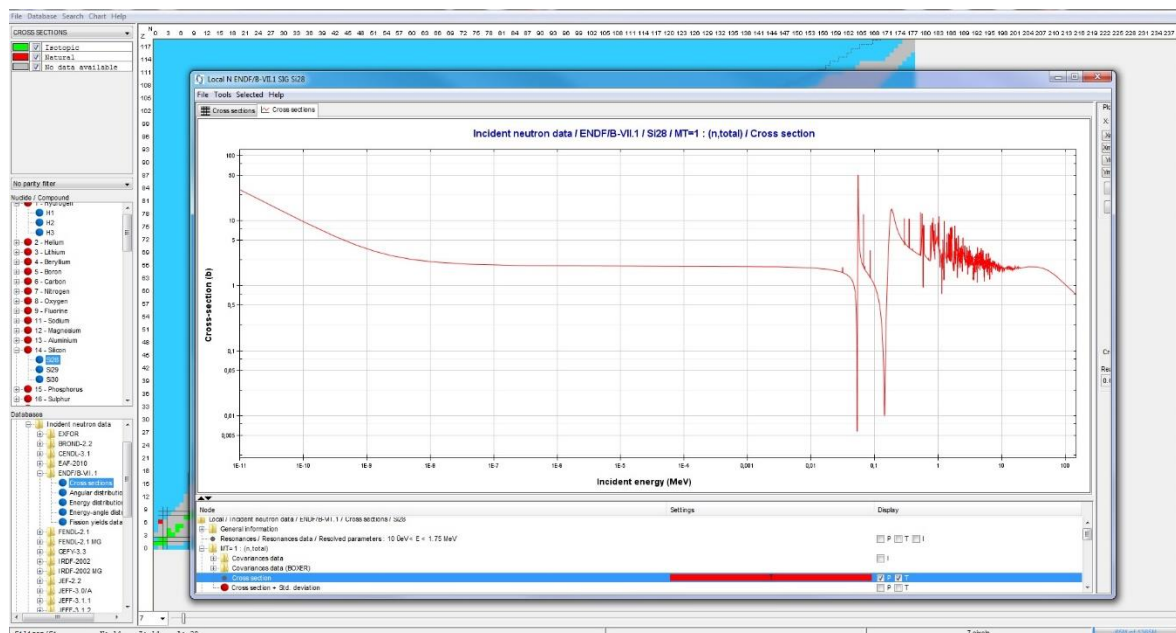
2 NEA JANIS

NEA JANIS je software navržený pro zobrazení a manipulaci s nukleárními daty postavený na jazyku Java.[7] Ve své podstatě je to velká databáze, která obsahuje různé knihovny důležitých parametrů izotopů pro výpočty nukleárních reakcí.

2.1 Prostředí a manipulace

Oproti Serpentu je tento software spustitelný i pod operačním systémem Windows a celkově jsou s ním operace pro běžného uživatele mnohem přívětivější, a to zejména díky využití grafického uživatelského rozhraní. Použité knihovny je možné mít uloženy přímo na disku, což zvyšuje míru flexibility, ale není to nutné, stačí mít přístup k internetu. Dalším pozitivem je skutečnost, že NEA JANIS je volně dostupná softwarová aplikace.

Po vybrání vhodné knihovny lze intuitivně nalézt požadovaný prvek a jeho izotop. Na přiloženém obrázku (Obrázek 4) lze vidět příklad účinného průřezu izotopu křemíku ^{28}Si . Vedle záložky grafu je záložka tabulky, kde jsou vidět přesné hodnoty účinných průřezů s odpovídajícími energiemi, které bylo použito při získávání potřebných údajů.



Obrázek 4: Příklad grafu účinného průřezu

2.2 Výsledky

Nejdříve je nutné zmínit, že výsledkem je srovnání jednotlivých prvků dle hodnoty účinného tepelného průřezu každého z nich. Z důvodu rozdílné atomové hmotnosti je účinný průřez dělen hmotností izotopu. NEA JANIS poskytuje tuto informaci ke každému izotopu periodického prvku. Tepelné neutrony mají energii 0,0253 eV, tudíž je vhodné se zaměřit na účinné průřezy při této energii. Posléze je možné z těchto získaných dat spočítat účinný průřez jednotlivých prvků prostým vynásobením každé hodnoty průřezu daných izotopů a jejich hmotnostního procenta a dělením součinu sta a hmotností daného prvku. Následným sečtením mezivýsledků lze docílit kýženého výsledku, a to účinného tepelného průřezu daného prvku. Takto získané výsledky už zbývá jen seřadit a výstupem tohoto výpočtu je přiložená tabulka (Tabulka 5).

Příklad použitého postupu na boru:

$$\frac{\sigma}{M_B} = \frac{\frac{\sigma_{B10} \cdot wt\%_{B10}}{100} + \frac{\sigma_{B11} \cdot wt\%_{B11}}{100}}{M_B} = \frac{\frac{3846,321 \cdot 18,431}{100} + \frac{5,067 \cdot 81,569}{100}}{10,811} = 65,956 \quad (2)$$

S ohledem na jejich funkci se zde používají víceméně všechny prvky s vysokým účinným průřezem. Z výsledků je patrné, že používaný bor je sice vhodným řešením, ale bylo by zajímavé přemýšlet i nad využitím gadolinia. Jeden z jeho izotopů, Gd^{157} , má jeden z nejvyšších účinných průřezů vůbec. Zmiňovaný prvek se již v jaderné energetice využívá jako příměs do moderátorových tyčí v jaderných reaktorech, kde plní funkci vyhořívajícího absorbátoru.[8] Dále se také používá v medicíně, kde slouží jako kontrastní látka. Jeho širšímu využití brání především výrobní cena.

Prvek	σ/M	Prvek	σ/M
Gd	308.606	Tb	0.191
B	65.956	Cu	0.183
Sm	37.528	Na	0.171
H	30.166	Mg	0.151
Eu	29.975	Ta	0.151
Cd	21.896	Ge	0.145
Fm	14.16	Ga	0.142
Li	8.945	Br	0.141
Dy	6.439	P	0.14
Ir	2.274	La	0.139
Hg	1.953	As	0.133
In	1.714	Cr	0.127
Rh	1.423	W	0.127
Cl	1.383	Pd	0.112
Sc	1.103	K	0.108
Er	0.996	Y	0.101
N	0.867	Pr	0.101
Co	0.725	Ru	0.098
Be	0.722	Sr	0.092
Tm	0.663	Th	0.088
Hf	0.646	Ca	0.087
Ag	0.633	Mo	0.086
Au	0.541	Zn	0.082
Re	0.534	Nb	0.081
Lu	0.477	Si	0.079
Nd	0.45	I	0.078
Ho	0.446	Zr	0.077
C	0.412	Sb	0.073
Kr	0.377	Rb	0.072
Ni	0.376	U	0.071
Mn	0.28	Te	0.068
Tc	0.263	Al	0.063
Fe	0.249	Tl	0.062
Se	0.249	Pb	0.055
Cs	0.249	S	0.049
O	0.248	Sn	0.048
Xe	0.22	Bi	0.045
He	0.216	Ar	0.039
Ti	0.211	Ba	0.039
F	0.197	Ce	0.03
V	0.196		

Tabulka 2: Výsledky při použití softwaru NEA JANIS

Pro samotný výpočet jsou velice důležité knihovny ve formátu ACE, které v sobě obsahují množství informací ohledně jednotlivých prvků a jejich izotopů, například různé účinné průřezy včetně energií, které se k nim váží, úhlů a podobně. [10]

3.2 Vstup

Formát vstupního souboru není až na kódování, které musí být ASCII, omezen, ovšem samotná forma textu uvnitř ano. Jednotlivé části budou popsány později. Samotný soubor je rozdělen do datových bloků, které jsou zpracovávány samostatně. Prostorově nejsou jakkoli omezeny, hranice dílčích bloků jsou tvořeny samotnými bloky, kde jeden končí, druhý začíná. Zajímavou možností je rozdělení bloků do samostatných souborů, na které se lze z hlavního souboru odkazovat příkazem *include*. Tímto řešením lze dosáhnout určitého zjednodušení a hlavně přehlednosti vstupních informací. Jelikož je Serpent napsaný v jazyce C, uživatelé se zkušeností s tímto jazykem nebudou mít problém s pochopením použité logiky napříč celým softwarem. [10]

3.3 Geometrie

Serpent používá pro popis složitých struktur geometrický model univers založený na rozdělení objektů do určitých oblastí, které jsou nadefinovány nezávisle na sobě a vloženy jedna do druhé. Důvod je jednoduchý, s menšími oblastmi, které jsou pevně popsány, se lépe pracuje, ale zároveň to uživateli dovoluje použít tvary klasické geometrie.[10]

3.3.1 Plocha

K nadefinování plochy slouží příkaz

```
surf <id> <type> <param1> <param2> ...
```

kde <id> je zvolené číslo pro označení plochy, dále používané v buňce

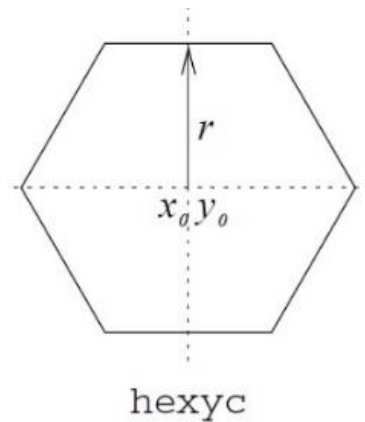
<type> je typ povrchu

<param1> <param2> ... jsou parametry povrchu

Tento výpočetní kód obsahuje 20 typů okolí, z nichž každý má pevně stanovený počet parametrů. Pro zjednodušení je zde přiložen pouze jeden příklad, který byl použit při

výpočtu, a to jeden ze šestihranů, který má 4 parametry (Obrázek 6):

`surf <2> <hexyc> <x0> <y0> <r> <r0>`



Obrázek 6: Znázornění šestihranu a jeho parametrů

Plochy se používají k definování geometrie buněk. Za tímto účelem se zavádí kladná a záporná strana. Bod je uvnitř plochy, pokud se nachází na záporné straně dané plochy. [10]

Konkrétní příklad použitý při výpočtu

```
% --- Surfaces (assembly pitch = 28.8 cm):
surf 1 hexyc 0.0 0.0 12.1 % Shroud tube inner radius
surf 2 hexyc 0.0 0.0 12.77 % Shroud tube outer radius
surf 3 hexyc 0.0 0.0 14.4 % Outer boundary
```

3.3.2 Buňky

Buňky jsou dvourozměrné nebo třírozměrné oblasti, které jsou definovány řadou kladných či záporných povrchů, které jsou popsány v minulé kapitole. Důležité je to, že tento výpočetní kód pracuje jen s průsečíkem hranic daných povrchů. To znamená, že neutron je uvnitř buňky tehdy a pouze tehdy, pokud je na stejné straně každé hrany v daném seznamu ploch.

K nadefinování buňky slouží příkaz

cell <name> <u0> <mat> <surf1> <surf2>...

kde <name> je název buňky
 <u0> je číslo univerza v buňce
 <mat> materiál buňky
 <surf1> <surf2>... jsou hraniční povrchy buňky [10]

Příklad konkrétních buněk, použitých při výpočtech

```
% --- Cells:
cell 1 0 fill 10 -1 % Pin lattice
cell 4 0 atabor 1 -2 % Shroud tube
cell 5 0 water 2 -3 % Water in channel
cell 99 0 outside 3 % Outside world
```

3.3.3 Palivový proutek

Důležitým prvkem jsou palivové proutky, které představují zjednodušený zápis univerza s válcovými plochami a jsou určeny pro vyplnění mřížek, se kterými Serpent pracuje.

K nadefinování proutku slouží příkaz

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

kde <id> je rozdělení článků (číslo univerza)
 <mat 1> <mat 2> ... jsou materiály článků
 <r1> <r2> ... jsou vnější poloměry jednotlivých materiálů

Ve své podstatě to jsou spíše makro objekty, které se používají k vyplnění mřížky.[10]

Příklad použitého pinu při výpočtech

```
% --- Fuel pin with central hole:  
  
pin 1  
void 0.08  
fuel 0.386  
110 0.455  
water
```

3.3.4 Univerza a mřížky

Dalšími důležitými prvky jsou univerza a mřížky.

Univerza musí pokrýt celý prostor a jsou definována nezávisle na sobě.

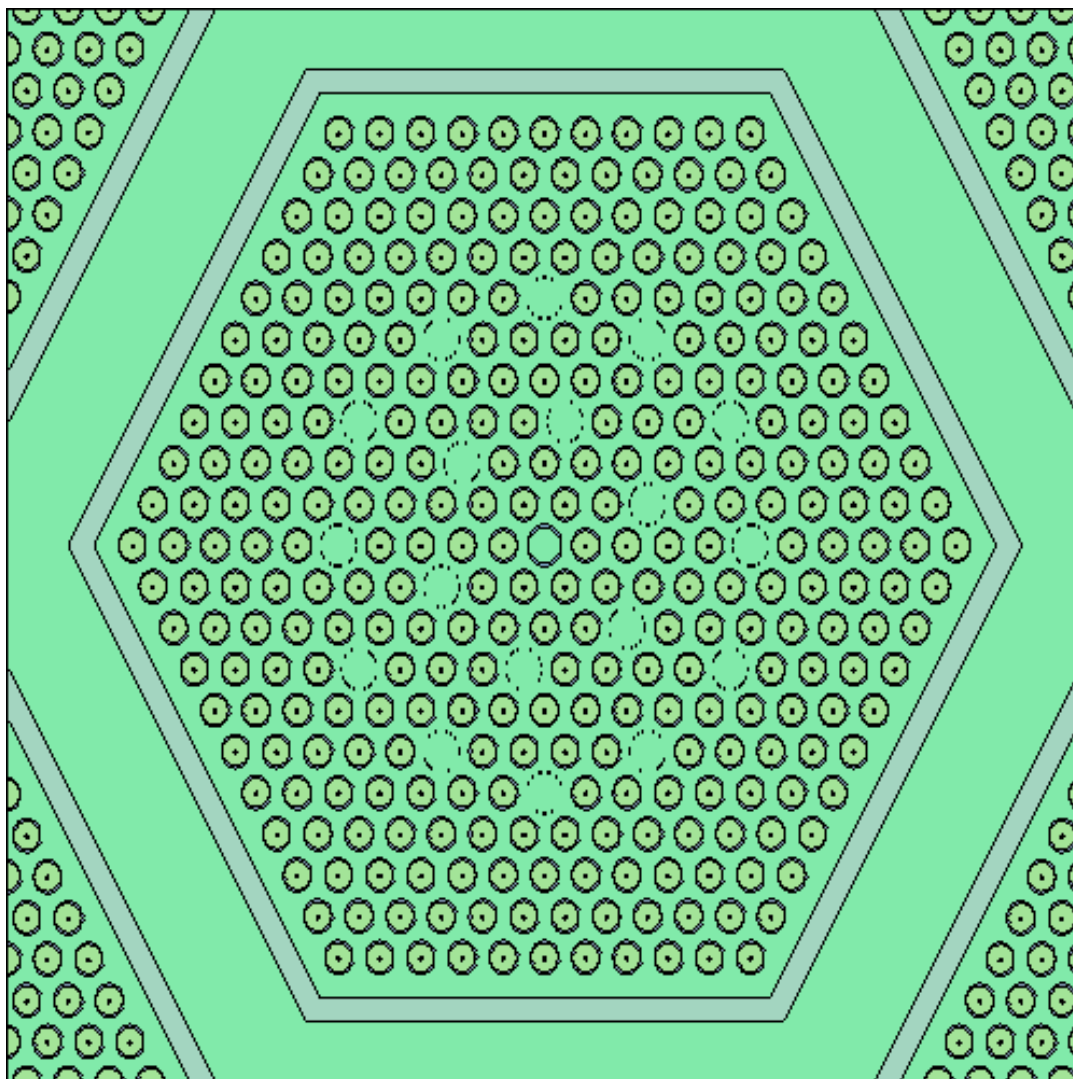
Mřížky jsou speciální případy univerz, které jsou vyplněny strukturami, v nichž jsou další univerza. V Serpentu je na výběr z osmi mřížek, mezi nejpoužívanější se řadí čtvercová, dvě šestihranné a kruhová.

K nadefinování mřížky slouží příkaz

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

kde	<u0>	je číslo univerza mřížky
	<type>	je typ mřížky
	<x0>	je počátek mřížky v x ose
	<y0>	je počátek mřížky v y ose
	<nx>	je počet prvků mřížky v x ose
	<ny>	je počet prvků mřížky v y ose
	<p>	rozteč mřížky [10]

Na přiloženém obrázku (Obrázek 7) je vyobrazena celková geometrie jednoho palivového souboru uloženého v obalovém souboru, tedy jednotlivé piny uložené v absorpční trubce, jejíž parametry byly v této práci měněny a výsledky budou prezentovány později. Je zde vidět 312 palivových proutků, 18 vodících tyčí, jedna centrální instrumentální tyč, stěna absorpční trubky, voda a druhá stěna absorpční trubky.



Obrázek 7: Konkrétní vyobrazení geometrie - VVER-1000

3.4 Materiály

Každý materiál je nadefinován seznamem nuklidů, které jsou uloženy v knihovně se všemi důležitými parametry. Tato knihovna se obvykle nachází v kořenovém adresáři programu.

Pro úplnost je zde uveden obecný návrh a konkrétní příklad izotopu prvku.

$\langle Z \rangle \langle A \rangle . \langle id \rangle$

kde $\langle Z \rangle$ je protonové číslo
 $\langle A \rangle$ je třímístné nukleonové číslo (označení izotopů)
 $\langle id \rangle$ označení knihovny [10]

92235.03c odkazuje na ^{235}U . Označení knihovny se většinou řídí dle teploty, takže .03c odkazuje na vygenerovaná data při 300K.

K nadefinování materiálu slouží příkaz

mat $\langle name \rangle \langle dens \rangle [\langle options \rangle]$

$\langle iso 1 \rangle \langle frac 1 \rangle$

$\langle iso 2 \rangle \langle frac 2 \rangle$

...

kde $\langle name \rangle$ je název materiálu
 $\langle dens \rangle$ je hustota materiálu
 $\langle options \rangle$ jsou možnosti, které záleží na konkrétním případě
 $\langle iso 1 \rangle \langle iso 2 \rangle \dots$ jsou názvy nuklidů
 $\langle frac 1 \rangle \langle frac 2 \rangle \dots$ je údaj udávající množství

Název je vkládán do buněk, názvy nuklidů musí odpovídat názvům souborů v knihovně. Hustota a množství mohou být vkládány, jak ve tvaru hmotnostním (se znamínkem „-“ (g/cm^3)), tak i ve tvaru vztaženém na počet atomů (se znamínkem „+“ ($10^{24}/\text{cm}^3$)). Výsledná hustota materiálu není vždy známá, a proto se může použít hodnota **sum**, čímž ji Serpent vypočítá. [10]

Příklad zápisu materiálu 110, které se používá pro pokrytí paliva

```
mat 110      -6.55
40090.03c   -3.28012E+00
40091.03c   -7.23274E-01
40092.03c   -1.11768E+00
40094.03c   -1.15733E+00
40096.03c   -1.90441E-01
41093.03c   -6.55000E-02
72176.03c   -3.36146E-05
72177.03c   -1.20815E-04
72178.03c   -1.78252E-04
72179.03c   -8.94992E-05
72180.03c   -2.31785E-04
72174.03c   -1.03490E-06
26054.03c   -2.61299E-04
26056.03c   -4.21224E-03
26057.03c   -9.81649E-05
26058.03c   -1.32965E-05
8016.03c    -6.55000E-03
28058.03c   -8.82875E-04
28060.03c   -3.49154E-04
28061.03c   -1.53663E-05
28062.03c   -4.96228E-05
28064.03c   -1.29821E-05
24050.03c   -5.46794E-05
24052.03c   -1.09647E-03
24053.03c   -1.26716E-04
24054.03c   -3.21343E-05
6000.03c    -1.31000E-03
```

3.5 Výstup

Je mnoho dalších parametrů, které lze nastavit, ale nyní je vhodné se zaměřit namísto vstupního souboru k výstupu. Pokaždé, když Serpent dopočítá, v terminálu zůstanou výsledná data (Obrázek 6). Ale pro zpracování těchto dat se automaticky vytvoří soubor nazvaný `<input>_res.m`, přičemž `input` je název vstupního souboru. Z přípony zmiňovaného souboru je patrné, že se výsledky uloží ve formátu `m-file`, se kterým pracuje `matlab`. Dále se může vytvořit i soubor `seed`, který lze použít při opakovaném spuštění simulace s požadavkem stejného výsledku, nebo může dojít k vygenerování obrázků, které znázorní geometrické rozložení systému s názvem `<input>geom.png`. Tohoto obrázku bylo použito při konkrétním příkladu geometrie výše (Obrázek 8). Je zde možnost vytvořit i další soubory, pokud uživatel používá tzv. detektory.[10]


```
jack@Ubuntu-Jack: ~/Serpent/serpent2129
-----
Serpent 2.1.29 -- Static criticality source simulation
Title: "VVER-1000"
Active cycle 500 / 500 Source neutrons : 2002
Running time : 0:03:48
Estimated running time : 0:03:48
Estimated running time left : 0:00:00
Estimated relative CPU usage : 100.1%
k-eff (analog) = 0.96256 +/- 0.00119 [0.96024 0.96489]
k-eff (implicit) = 0.96499 +/- 0.00090 [0.96323 0.96674]
(04) (OMP=1)
-----
Transport cycle completed in 3.28 minutes.
jack@Ubuntu-Jack:~/Serpent/serpent2129$
```

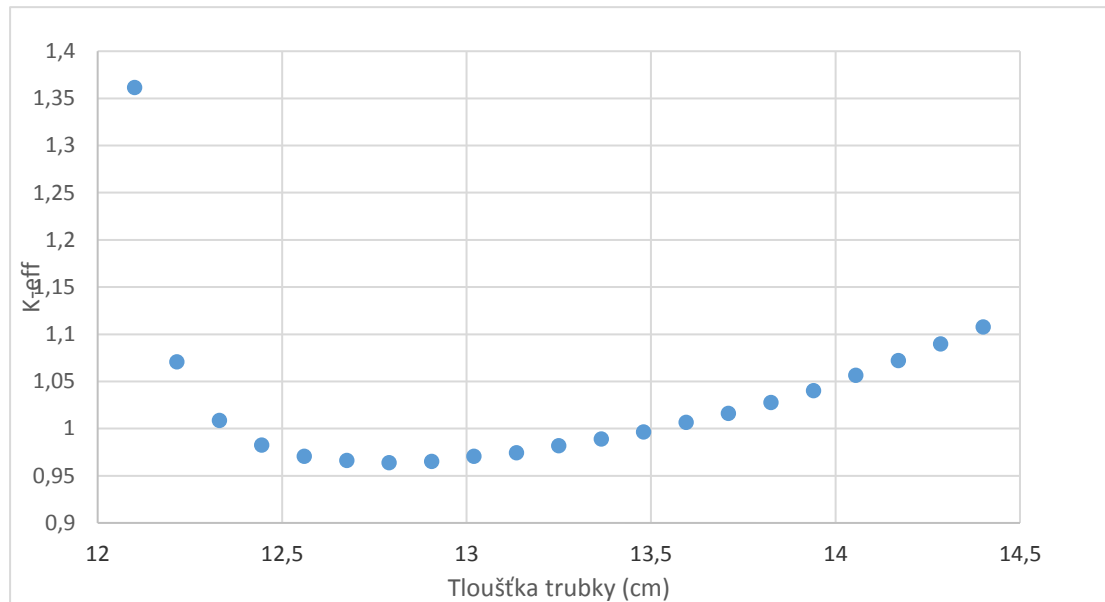
Obrázek 8: Serpent-ukázka výstupu v terminálu

3.6 Optimální šířka absorpční trubky

V prvním kroku byl vytvořen vstupní soubor, tzn. nadefinována tloušťka pinů, dílčích buněk a hran. Dále bylo nutné nadefinovat univerza, mřížku a jednotlivé materiály. Celý vstupní soubor zde není vypsán z důvodu obsáhlosti, ale je k práci přiložen v sekci přílohy s označením Příloha A. Použitými materiály jsou E-110, který se používá na pokrytí palivových tyčí, E-635 vodících tyčí a instrumentální tyče a ATABOR, což je materiál absorpční trubky.

Potom začal samotný experiment, a to postupné upravování vzdáleností stěn absorpční trubky, která mezi nimi má vodu, fungující jako neutronová past, uvnitř které jsou uloženy palivové proutky. Rychlé neutrony vzniklé štěpením mají velkou kinetickou energii, a tudíž je samotná stěna nezastaví. Zatímco voda je dokáže zpomalit a snížit jejich energii na takovou hodnotu, aby je stěna začala pohlcovat. Proto je vhodné hledat ten správný poměr mezi množstvím vody a tloušťkou stěn. Výpočet začal na nulové hodnotě tloušťky stěn, takže neutrony byly pouze zpomalovány vodou. Hodnota tloušťky stěn se pomalu zvyšovala až do hodnoty maximální, kdy mezi stěnami nezbylo místo na vodu, došlo ke spojení stěn. Tato hodnota nebyla náhodná, protože vzdálenost stěn je pevně dána rozměry palivových proutků, vzdáleností jednotlivých trubek a rozměry samotného obalového souboru. V tomto

případě nebyly neutrony zpomalovány vodou. Výstupním výsledkem Serpentu, který prováděl tyto výpočty, byl koeficient násobení k_{ef} . Výsledný graf (Graf 1) je závislost koeficientu násobení na tloušťce stěn absorpční trubky a přesné hodnoty jsou uvedeny



v příložené tabulce (Tabulka 2).

Graf 1: Závislost koeficientu násobení na rozměru trubky

Průměr (cm)	Koeficient násobení
12.1	1.36138
12.215	1.07061
12.33	1.00848
12.445	0.98252
12.56	0.97061
12.675	0.96608
12.79	0.96368
12.905	0.9653
13.02	0.97066
13.135	0.97437
13.25	0.98182
13.365	0.98904
13.48	0.99621
13.595	1.00649
13.71	1.01615
13.825	1.02763
13.94	1.04029
14.055	1.0564
14.17	1.07201
14.285	1.08955
14.4	1.10777

Tabulka 3: Závislost koeficientu násobení na rozměru trubky

Výsledkem těchto výpočtů je zjištění, že optimální rozměr pod klíč se pohybuje v okolí hodnoty 12,9 cm, což odpovídá tloušťce trubky 0,8 cm.

3.7 Výsledné porovnání prvků

Jak lze z příložené tabulky (Tabulka 3) vyčíst, jako prvek s nejlepšími vlastnostmi se ukázal být bor následován samariem, kadmiem, gadoliniem a europiem. Tím je objasněno, proč je bor nejrozšířenějším řešením dané problematiky. Používá se jak v rámci reaktoru ve formě kyseliny borité, tak i při mokřém skladování, jak bylo popsáno výše, a v obalových souborech bývá častou příměsí do slitin. To vše díky své vlastnosti omezovat pohyb neutronů. O velice dobrých vlastnostech samaria se ví, ovšem jeho malý výskyt zvyšuje jeho cenu, a tím i následné využití. Používá se mimo jiné i jako příměs do materiálu regulačních tyčí. Stejně tak i kadmium, které se používá mimo jiné i jako vysoce účinná ochrana proti korozi, do pájek či k výrobě záporné elektrody v nikl-kadmiových akumulátorech. Jeho využití se ale omezuje, kvůli toxicitě. Gadolinium bylo podrobněji popsáno v dřívější části této práce, s ohledem na zjištění výsledků získaných první metodou metodou. Europium je pro své vlastnosti též blíže zkoumáno, avšak patří mezi jeden z nejdražších drahých kovů.[11] Lithium se používá při výrobě baterií. Mnohem zajímavější využití má ale v jaderné energetice, kde se používá varianta Li^7 v malých množstvích jako Ph stabilizátor a příměs proti korozi do tekutin, které společně s ním slouží k ochlazování primárního okruhu v různých druzích reaktorů, konkrétním příkladem může být již zmiňovaná kyselina boritá.[12] Dysprosium má předpoklady k výrobě speciálních nerezových ocelí. V kombinaci s niklem se používá k ochraně chladících reaktorových tyčí, protože odolává dlouhodobějšímu bombardování neutrony bez vnějších změn. Iridium je prvek, který odolává vysokým teplotám, ale v jaderné energetice nemá významné použití. Zatímco indium se v jaderné energetice používá jako příměs do regulačních tyčí, díky svým antikorozním vlastnostem. Dále se používá při výrobě slitin s velmi nízkým bodem tání. [11]

Prvek	Koeficient násobení (-)	Prvek	Koeficient násobení (-)
B	9.63556E-01	Ru	1.18510E+00
Sm	9.95018E-01	V	1.18513E+00
Cd	1.01514E+00	Te	1.18517E+00
Gd	1.01724E+00	Pr	1.18525E+00
Eu	1.02035E+00	Ni	1.18533E+00
Li	1.07694E+00	U	1.18545E+00
Dy	1.10301E+00	Th	1.18551E+00
Ir	1.13310E+00	Ga	1.18560E+00
In	1.13940E+00	La	1.18565E+00
H	1.14546E+00	Cu	1.18569E+00
Rh	1.14838E+00	Mo	1.18581E+00
Er	1.15370E+00	Cr	1.18588E+00
Hg	1.15715E+00	Fe	1.18594E+00
Hf	1.15870E+00	K	1.18603E+00
Lu	1.16381E+00	Ge	1.18630E+00
Tm	1.16462E+00	Sr	1.18648E+00
Ag	1.16686E+00	Nb	1.18652E+00
Re	1.16897E+00	Tl	1.18654E+00
Au	1.16918E+00	Na	1.18656E+00
Cl	1.16923E+00	He	1.18658E+00
Ho	1.17130E+00	S	1.18661E+00
Co	1.17352E+00	Zn	1.18661E+00
Sc	1.17529E+00	Ca	1.18665E+00
Cs	1.17723E+00	Be	1.18666E+00
Tb	1.17789E+00	Ba	1.18668E+00
Ta	1.17799E+00	Ar	1.18669E+00
Yb	1.17857E+00	Y	1.18674E+00
Xe	1.17961E+00	Ne	1.18676E+00
Nd	1.17982E+00	Rb	1.18679E+00
Kr	1.18067E+00	Sn	1.18684E+00
W	1.18132E+00	C	1.18685E+00
Mn	1.18216E+00	P	1.18686E+00
Br	1.18276E+00	Mg	1.18688E+00
Sb	1.18282E+00	O	1.18689E+00
Os	1.18292E+00	Al	1.18692E+00
I	1.18332E+00	F	1.18693E+00
N	1.18348E+00	Zr	1.18697E+00
Se	1.18388E+00	Ce	1.18701E+00
Pd	1.18395E+00	Si	1.18701E+00
As	1.18401E+00	Pb	1.18710E+00
Pt	1.18427E+00	Bi	1.18713E+00
Ti	1.18460E+00	Pu	1.31049E+00

Tabulka 4: Výsledné porovnání prvků za použití Serpentu

3.8 Ekvivalentní obsah prvků vůči boru

Dalším krokem je určení ekvivalentního obsahu jednotlivých prvků vůči boru. Jako referenční hodnota byl zvolen koeficient násobení slitiny absorpční trubky bez boru. Následně byl proveden rozdíl koeficientů násobení dílčích prvků, což zahrnuje i bor, s referenční hodnotou. V posledním sloupci tabulky tohoto porovnání (Tabulka 4) je zmiňovaný ekvivalentní obsah každého zkoumaného prvku vůči boru. Protože bylo v minulé kapitole zjištěno, že má bor nejnižší koeficient násobení, neobjevují se v tabulce žádné ekvivalentní obsahy menší než 1. Jedné se rovná právě bor. Dalších prvků, které mají u této veličiny kladné znaménko, je potřeba do slitiny přidat více než 1%, aby byl koeficient násobení stejný jako při obsahu 1% boru. Například samaria by bylo zapotřebí přibližně 1,16%, zatímco gadolinia 1,32%. Dále je v tabulce obsažena nedefinovaná hodnota představující nekonečno. To je způsobeno faktem, že slitina obsahující baryum má přesně stejný koeficient násobení jako bez něj, což lze popsat tak, že tuto vlastnost ani nezlepšuje ani nezhoršuje při zastoupení 1% a teoreticky by ho v dané slitině muselo být nekonečně mnoho, aby měl stejné vlastnosti jako bor, což je samozřejmě nemožné. Další část tabulky se věnuje prvkům, které naopak zvýšili koeficient násobení slitiny, a tudíž nenapomáhají utlumení řetězové reakce, naopak jí podporují, což je nežádoucí. Tyto prvky by se museli pro snížení koeficientu násobení ze slitiny odebrat, proto mají zápornou hodnotu ekvivalentního obsahu. Mezi takové prvky patří například cín, fosfor, hliník nebo fluor.

Pro ilustraci je zde uveden konkrétní příklad výpočtu pro samarium:

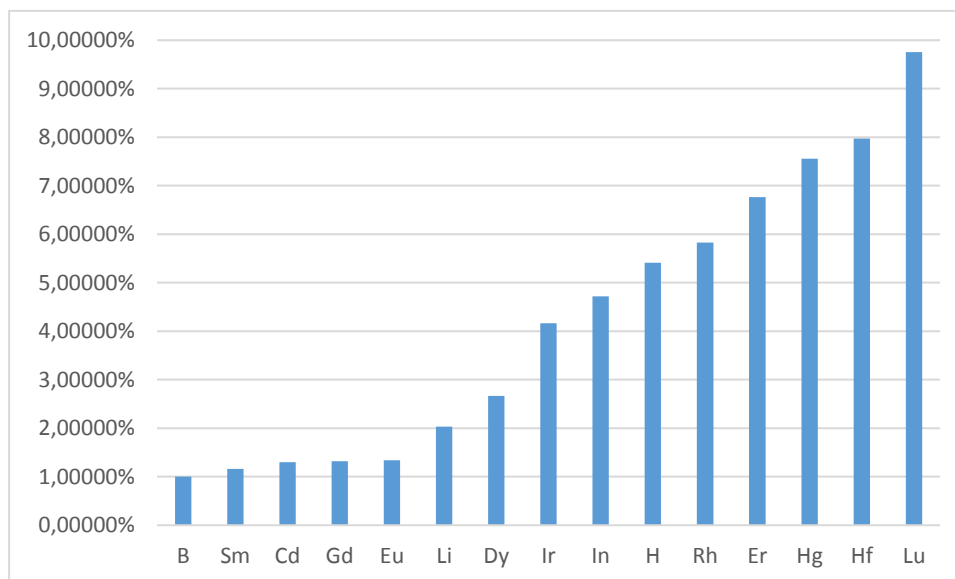
$$Sm_{wt\%} = \frac{0,223124}{0,191662} = 1,16415 \% \quad (3)$$

Prvek	Koeficient násobení (-)	Referenční hodnota koeficientu násobení (-)	Rozdíl referenční hodnoty a dílčích prvků koeficientu násobení (-)	Hmotnostní procento prvků při zachování vlastnosti reference (%)
B	9.63556E-01	1.18668	2.23124E-01	1.00000E+00
Sm	9.95018E-01	1.18668	1.91662E-01	1.16415E+00
Cd	1.01514E+00	1.18668	1.71540E-01	1.30071E+00
Gd	1.01724E+00	1.18668	1.69440E-01	1.31683E+00
Eu	1.02035E+00	1.18668	1.66330E-01	1.34145E+00
Li	1.07694E+00	1.18668	1.09740E-01	2.03321E+00
Dy	1.10301E+00	1.18668	8.36700E-02	2.66671E+00

Prvek	Koeficient násobení (-)	Referenční hodnota koeficientu násobení (-)	Rozdíl referenční hodnoty a dílčích prvků koeficientu násobení (-)	Hmotnostní procento prvků při zachování vlastnosti reference (%)
Ir	1.13310E+00	1.18668	5.35800E-02	4.16432E+00
In	1.13940E+00	1.18668	4.72800E-02	4.71920E+00
H	1.14546E+00	1.18668	4.12200E-02	5.41300E+00
Rh	1.14838E+00	1.18668	3.83000E-02	5.82569E+00
Er	1.15370E+00	1.18668	3.29800E-02	6.76543E+00
Hg	1.15715E+00	1.18668	2.95300E-02	7.55584E+00
Hf	1.15870E+00	1.18668	2.79800E-02	7.97441E+00
Lu	1.16381E+00	1.18668	2.28700E-02	9.75619E+00
Tm	1.16462E+00	1.18668	2.20600E-02	1.01144E+01
Ag	1.16686E+00	1.18668	1.98200E-02	1.12575E+01
Re	1.16897E+00	1.18668	1.77100E-02	1.25988E+01
Au	1.16918E+00	1.18668	1.75000E-02	1.27499E+01
Cl	1.16923E+00	1.18668	1.74500E-02	1.27865E+01
Ho	1.17130E+00	1.18668	1.53800E-02	1.45074E+01
Co	1.17352E+00	1.18668	1.31600E-02	1.69547E+01
Sc	1.17529E+00	1.18668	1.13900E-02	1.95895E+01
Cs	1.17723E+00	1.18668	9.45000E-03	2.36110E+01
Tb	1.17789E+00	1.18668	8.79000E-03	2.53838E+01
Ta	1.17799E+00	1.18668	8.69000E-03	2.56759E+01
Yb	1.17857E+00	1.18668	8.11000E-03	2.75122E+01
Xe	1.17961E+00	1.18668	7.07000E-03	3.15593E+01
Nd	1.17982E+00	1.18668	6.86000E-03	3.25254E+01
Kr	1.18067E+00	1.18668	6.01000E-03	3.71255E+01
W	1.18132E+00	1.18668	5.36000E-03	4.16276E+01
Mn	1.18216E+00	1.18668	4.52000E-03	4.93637E+01
Br	1.18276E+00	1.18668	3.92000E-03	5.69194E+01
Sb	1.18282E+00	1.18668	3.86000E-03	5.78041E+01
Os	1.18292E+00	1.18668	3.76000E-03	5.93415E+01
I	1.18332E+00	1.18668	3.36000E-03	6.64060E+01
N	1.18348E+00	1.18668	3.20000E-03	6.97263E+01
Se	1.18388E+00	1.18668	2.80000E-03	7.96871E+01
Pd	1.18395E+00	1.18668	2.73000E-03	8.17304E+01
As	1.18401E+00	1.18668	2.67000E-03	8.35670E+01
Pt	1.18427E+00	1.18668	2.41000E-03	9.25826E+01
Ti	1.18460E+00	1.18668	2.08000E-03	1.07271E+02
Ru	1.18510E+00	1.18668	1.58000E-03	1.41218E+02
V	1.18513E+00	1.18668	1.55000E-03	1.43951E+02
Te	1.18517E+00	1.18668	1.51000E-03	1.47764E+02
Pr	1.18525E+00	1.18668	1.43000E-03	1.56031E+02

Prvek	Koeficient násobení (-)	Referenční hodnota koeficientu násobení (-)	Rozdíl referenční hodnoty a dílčích prvků koeficientu násobení (-)	Hmotnostní procento prvků při zachování vlastnosti reference (%)
Ni	1.18533E+00	1.18668	1.35000E-03	1.65277E+02
U	1.18545E+00	1.18668	1.23000E-03	1.81402E+02
Th	1.18551E+00	1.18668	1.17000E-03	1.90704E+02
Ga	1.18560E+00	1.18668	1.08000E-03	2.06596E+02
La	1.18565E+00	1.18668	1.03000E-03	2.16625E+02
Cu	1.18569E+00	1.18668	9.90000E-04	2.25378E+02
Mo	1.18581E+00	1.18668	8.70000E-04	2.56464E+02
Cr	1.18588E+00	1.18668	8.00000E-04	2.78905E+02
Fe	1.18594E+00	1.18668	7.40000E-04	3.01519E+02
K	1.18603E+00	1.18668	6.50000E-04	3.43268E+02
Ge	1.18630E+00	1.18668	3.80000E-04	5.87168E+02
Sr	1.18648E+00	1.18668	2.00000E-04	1.11562E+03
Nb	1.18652E+00	1.18668	1.60000E-04	1.39453E+03
Tl	1.18654E+00	1.18668	1.40000E-04	1.59374E+03
Na	1.18656E+00	1.18668	1.20000E-04	1.85937E+03
He	1.18658E+00	1.18668	1.00000E-04	2.23124E+03
S	1.18661E+00	1.18668	7.00000E-05	3.18749E+03
Zn	1.18661E+00	1.18668	7.00000E-05	3.18749E+03
Ca	1.18665E+00	1.18668	3.00000E-05	7.43747E+03
Be	1.18666E+00	1.18668	2.00000E-05	1.11562E+04
Ba	1.18668E+00	1.18668	0.00000E+00	---
Ar	1.18669E+00	1.18668	-1.00000E-05	-2.23124E+04
Y	1.18674E+00	1.18668	-6.00000E-05	-3.71873E+03
Ne	1.18676E+00	1.18668	-8.00000E-05	-2.78905E+03
Rb	1.18679E+00	1.18668	-1.10000E-04	-2.02840E+03
Sn	1.18684E+00	1.18668	-1.60000E-04	-1.39453E+03
C	1.18685E+00	1.18668	-1.70000E-04	-1.31249E+03
P	1.18686E+00	1.18668	-1.80000E-04	-1.23958E+03
Mg	1.18688E+00	1.18668	-2.00000E-04	-1.11562E+03
O	1.18689E+00	1.18668	-2.10000E-04	-1.06250E+03
Al	1.18692E+00	1.18668	-2.40000E-04	-9.29683E+02
F	1.18693E+00	1.18668	-2.50000E-04	-8.92496E+02
Zr	1.18697E+00	1.18668	-2.90000E-04	-7.69393E+02
Ce	1.18701E+00	1.18668	-3.30000E-04	-6.76133E+02
Si	1.18701E+00	1.18668	-3.30000E-04	-6.76133E+02
Pb	1.18710E+00	1.18668	-4.20000E-04	-5.31248E+02
Bi	1.18713E+00	1.18668	-4.50000E-04	-4.95831E+02
Pu	1.31049E+00	1.18668	-1.23810E-01	-1.80215E+00

Tabulka 5: Ekvivalentní obsahy prvků vůči boru



Graf 2: Zobrazení ekvivalentního obsahu prvků vůči boru

V příloženém grafu (Graf 2) je mimo bor graficky znázorněno dalších čtrnáct prvků, které by na základě předešlých výsledků ze softwaru Serpent mohly být hodnoceny jako vhodné pro další zkoumání. Jejich ekvivalentní obsah vůči boru nepřesáhl 10%.

4 Závěr

Na zjištění vhodných prvků jako příměsí pro zajištění podkritičnosti skladování vyhořelého jaderného paliva byly v této práci použity dvě metody. Jednak použití účinného tepelného průřezu coby klíč pro srovnání prvků, ale i koeficient násobení zobrazující kritičnost systému. Z porovnání výsledků vyplývá, že použití softwaru NEA JANIS je možné v případě hrubého odhadu a prvotního řešení dané problematiky, ale rozhodně nedosahuje takové přesnosti, aby plnohodnotně nahradil transportní výpočetní kódy.

Z hlediska účinného tepelného průřezu se jako nejvhodnější prvek ukázalo být gadolinium, které svou hodnotou dané veličiny předčilo dokonce i nejčastěji používaný bor, a to hned několikrát. Příčinou je izotop Gd^{157} , který má patnáctiprocentní zastoupení v celkovém použitém množství prvku. Zmiňovaný bor je ovšem hned na druhém místě, a tím dokazuje svojí vhodnost použití oproti zbylým prvkům.

Z hlediska koeficientu násobení, který byl vypočten transportním kódem Serpent, pro absorpční trubku mříže bazénu skladování VVER-1000 je nejvhodnějším prvkem bor následující samariem, které má výše uvedenou veličinu taktéž menší než 1.

Taktéž zde byl vypočítán ekvivalentní obsah dílčích prvků vůči boru, který naznačuje zastoupení daného prvku ve slitině absorpční trubky, aby byl zajištěn stejný koeficient násobení jako při zastoupení 1% boru. Do budoucna je vhodné uvažovat prvky, které nepřesáhly hodnotu přibližně 10%, aby bylo možné uvažovat o jejich výrobě, například zmiňované samarium, kadmium, gadolinium, europium a lithium. Tímto přístupem byly zjištěny i prvky naprosto nevhodné k řešení tohoto problému z důvodu navýšení koeficientu násobení. Zde je důležité zmínit, že výpočty ekvivalentních obsahů, které jsou v práci uvedené, předpokládají přímou úměru mezi obsahem absorbátoru a koeficientem násobení, což nemusí vždy platit, ale pro první odhad je tento způsob plně dostačující.

Je ovšem povinností zde uvést, že se nedosáhlo požadované velikosti menší než 0,95, ale nejmenší dosažená hodnota je 0,9636. Jedním z důvodů může být konzervativní 2-D výpočet nekonečné mříže. Možným řešením by bylo provedení dalších výpočtů pro jiný rozměr absorpční trubky, který by byl blíže optimálnímu rozměru. Další variantou by jistě bylo použití více prvků jako příměsí s vlastností zvýšení podkritičnosti nebo celkové

navýšení jejich podílu v oceli. Dalším možným řešením by mohlo být použití jiného výpočetního modelu, který by se v simulaci více přibližoval reálným vlastnostem zkoumaného objektu.

Seznam literatury a informačních zdrojů

- [1] BROWN, FORREST. *FUNDAMENTALS OF MONTE CARLO PARTICLE TRANSPORT* [online]. 2005 [cit. 2018-06-05]. Dostupné z: https://laws.lanl.gov/vhosts/mcnp.lanl.gov/pdf_files/la-ur-05-4983.pdf
- [2] BOWMAN, S. M. *FUNDAMENTALS OF MONTE CARLO PARTICLE TRANSPORT* [online]. 2008 [cit. 2018-06-05]. Dostupné z: <https://info.ornl.gov/sites/publications/Files/Pub11253.pdf>. Manuál.
- [3] GALANIN, Aleksej Dmitrijevič. *Teorie tepelných jaderných reaktorů*. Praha: Státní nakladatelství technické literatury, 1959.
- [4] HABAJ, Elemír. *Palivové cykly reaktorů 3. a 3+ generace pro nové jaderné zdroje* [online]. Plzeň, 2012 [cit. 2018-06-05]. Dostupné z: <<https://theses.cz/id/rdszei/>>. Diplomová práce. Západočeská univerzita v Plzni, Fakulta elektrotechnická. Vedoucí práce Ing. Jana Jiříčková, Ph.D.
- [5] BUDEJCKÁ DRBNA [online]. 2014 [cit. 2018-06-05]. Dostupné z: <https://www.budejckadrba.cz/zpravy/byznys/temelin-zacal-zavazet-palivo-do-druheho-bloku.html>
- [6] GNS [online]. 2018 [cit. 2018-06-05]. Dostupné z: <https://www.gns.de/language=en/24442/photos>
- [7] JANIS 4.0 USER'S GUIDE [online]. 2013 [cit. 2018-06-05]. Dostupné z: https://www.oecd-nea.org/janis/janis-4.0/documentation/janis-4.0_manual_rev1.pdf. Manuál.
- [8] Nuclear Power [online]. 2018 [cit. 2018-06-05]. Dostupné z: <https://www.nuclear-power.net/glossary/gadolinium/>
- [9] Serpent - A Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code [online]. [cit. 2018-06-05]. Dostupné z: <http://montecarlo.vtt.fi/>
- [10] LEPPÄNEN, Jaakko. Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code [online]. 2015 [cit. 2018-06-05]. Dostupné z: http://montecarlo.vtt.fi/download/Serpent_manual.pdf
- [11] TeachNuclear [online]. 2018 [cit. 2018-06-05]. Dostupné z: <http://teachnuclear.ca/>
- [12] World Nuclear Association [online]. 2018 [cit. 2018-06-05]. Dostupné z: <http://www.world-nuclear.org/information-library/current-and-future-generation/lithium.aspx>


```

4 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4
4 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4
4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4

```

% --- Surfaces (assembly pitch = 28.8 cm):

```

surf 1 hexyc 0.0 0.0 12.1 % Shroud tube inner radius
surf 2 hexyc 0.0 0.0 12.77 % Shroud tube outer radius
surf 3 hexyc 0.0 0.0 14.4 % Outer boundary

```

% --- Cells:

```

cell 1 0 fill 10 -1 % Pin lattice
cell 4 0 atabor 1 -2 % Shroud tube
cell 5 0 water 2 -3 % Water in channel
cell 99 0 outside 3 % Outside world

```

% --- UO2 fuel enriched to 5.0 wt-% U-235:

```

mat fuel -10.4
92235.03c -0.05
92238.03c -0.95
8016.03c -0.135

```

% --- E-110 and E-635 materials for tubes:

```

mat 110 -6.55
40090.03c -3.28012E+00
40091.03c -7.23274E-01
40092.03c -1.11768E+00
40094.03c -1.15733E+00
40096.03c -1.90441E-01
41093.03c -6.55000E-02
72176.03c -3.36146E-05
72177.03c -1.20815E-04
72178.03c -1.78252E-04
72179.03c -8.94992E-05
72180.03c -2.31785E-04
72174.03c -1.03490E-06
26054.03c -2.61299E-04
26056.03c -4.21224E-03
26057.03c -9.81649E-05
26058.03c -1.32965E-05
8016.03c -6.55000E-03
28058.03c -8.82875E-04
28060.03c -3.49154E-04
28061.03c -1.53663E-05
28062.03c -4.96228E-05
28064.03c -1.29821E-05
24050.03c -5.46794E-05
24052.03c -1.09647E-03
24053.03c -1.26716E-04
24054.03c -3.21343E-05
6000.03c -1.31000E-03

mat 635 -6.53
40090.03c -3.27011E+00
40091.03c -7.21066E-01

```

```
40092.03c -1.11426E+00
40094.03c -1.15380E+00
40096.03c -1.89859E-01
41093.03c -6.53000E-02
72176.03c -3.35120E-05
72177.03c -1.20446E-04
72178.03c -1.77707E-04
72179.03c -8.92259E-05
72180.03c -2.31077E-04
72174.03c -1.03174E-06
26054.03c -2.60501E-04
26056.03c -4.19938E-03
26057.03c -9.78651E-05
26058.03c -1.32559E-05
8016.03c -6.53000E-03
28058.03c -8.80179E-04
28060.03c -3.48088E-04
28061.03c -1.53194E-05
28062.03c -4.94713E-05
28064.03c -1.29425E-05
24050.03c -5.45124E-05
24052.03c -1.09312E-03
24053.03c -1.26329E-04
24054.03c -3.20362E-05
6000.03c -1.30600E-03
```

% --- ATABOR

```
mat atabor -7.90
26054.03c -2.97290E-01
26056.03c -4.79242E+00
26057.03c -1.11686E-01
26058.03c -1.51279E-02
28058.03c -6.22932E-01
28060.03c -2.46354E-01
28061.03c -1.08420E-02
28062.03c -3.50125E-02
28064.03c -9.15981E-03
24050.03c -6.39707E-02
24052.03c -1.28279E+00
24053.03c -1.48248E-01
24054.03c -3.75947E-02
6000.03c -1.26400E-03
27059.03c -4.42400E-03
14028.03c -3.22980E-02
14029.03c -1.69377E-03
14030.03c -1.16293E-03
15031.03c -3.95000E-04
16032.03c -1.94608E-03
16033.03c -1.58363E-05
16034.03c -9.16084E-05
16036.03c -4.51880E-07
25055.03c -1.04280E-01
5010.03c -1.45605E-02
5011.03c -6.44395E-02
```

% --- Water:

```
mat water -1.0
  1001.03c 2.0
  8016.03c 1.0

% --- Cross section library file path:

set acelib "/home/jack/Serpent/serpent_data/sss_jeff32.xsdata"

% --- Periodic boundary condition:

set bc 3

% --- Neutron population and criticality cycles:

set pop 2000 500 20

% --- Geometry and mesh plots:

plot 3 500 500
mesh 3 500 500
```