



TDK dolgozat

A remanens-hő reaktor-tranziensek során történő
változásának számítására szolgáló modell fejlesztése

Bucz Gábor

Témavezető: Dr. Fehér Sándor
egyetemi docens
Nukleáris Technika Tanszék

BME
2012

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés, feladatkitűzés	4
2. A remanens hővel kapcsolatos ismeretek áttekintése	5
2.1. A remanens hő eredete	5
2.1.1. A maghasadás és a hasadási termékek	5
2.1.2. A remanens hő forrása	6
2.2. A hasadási termékek jellemzése	10
2.3. Remanens hő számítására szolgáló modellek [3]	13
2.3.1. Illesztett exponenciálisok módszere ([4] alapján)	16
3. A remanens hőteljesítmény számítására kidolgozott eljárás és annak tesztelése	19
3.1. Adatok és elemzésük [3]	20
3.2. A program felépítése	22
3.2.1. Mátrix kondicionáltsága	27
3.2.2. Numerikus séma	28
3.3. Eredmények	32
3.3.1. Az első tranziens [3]	36
3.3.2. A második tranziens [3]	39
3.3.3. A harmadik tranziens [3]	42
3.3.4. A negyedik tranziens [3]	44
3.3.5. Az ötödik tranziens [3]	46
3.3.6. Az első tranziens módosítása	48
3.3.7. A második tranziens módosítása	49
3.3.8. A harmadik tranziens módosítása	52
3.3.9. A negyedik tranziens módosítása	54
3.3.10. Az ötödik tranziens módosítása	56
4. Összefoglalás, következtetések	58
5. Köszönetnyilvánítás	59
Hivatkozások	60

A. A NUREG–6999 eljárás illesztett paramétere	61
B. Motiváció a NUREG–6999 részhez	62
C. Felhasznált izotópok listája	65

1. Bevezetés, feladatkitűzés

A TDK-beli munkám egy olyan számítási modell kifejlesztésére irányult, amely a remanens hőtermelés mértékét a vonatkozó magfizikai adatok alapján, a hasadási termékek keletkezésének, bomlásának és neutronbefogásos transzmutálódásának figyelembevételével pontosan számítani tudja a néhány perces (legfeljebb 1000 másodperces) időtartományban. A feladat részét képezte a szakirodalomból rendelkezésre álló nagymennyiségű adathalmaz elemzése, értékelése és a megengedhető egyszerűsítések érdekében végzett szűrése is. A probléma megoldásához a Matlab programot használtam. A dolgozat első részében a remanens hő megértéséhez szükséges alapfogalmakat és alapjelenségeket mutatom be, a második részben pedig az általam fejlesztett számítási modellt és annak néhány tranziensre való alkalmazását foglalom össze.

A paksi atomerőműben a jelenleg alkalmazott reaktorteljesítmény-meghatározási módszer alapvetően az ex-core neutrondetektorok jelét használja fel. Az ex-core rendszer mérés technikai jellemzői miatt az így meghatározott teljesítményt kalibrálni kell – a reaktor termikus teljesítményét szintén jellemző – hűtőközeg-felmelegedés alapján meghatározott értékhez. A hűtőközeg-felmelegedés azonban csak stabil reaktorállapot esetén ad használható teljesítményértéket. Teljesítményváltozással járó tranzienseket követően, a hűtőközeg hurkonként történő mérésénél csak több perces átmeneti állapot után áll be az új teljesítményszintnek megfelelő érték a rendszer termohidraulikai tulajdonságai, valamint a hőmérsékletmérések jellemzői miatt. Ennek következtében a neutronfluxus mérésén alapuló teljesítmény szükséges korrekciója (például amikor a szabályzó kazetták helyzete a teljesítményváltoztatás miatt megváltozik) az esetek egy részében csak jelentős késéssel végezhető el, addig pedig nem áll rendelkezésre a reaktor pontos teljesítménye.

Ahhoz, hogy a reaktor termikus teljesítményét az ex-core neutrondetektorok jele alapján tranziensek során is megbízhatóan lehessen meghatározni, egy olyan összetett számítási modellre van szükség, amely a neutron-fluxus térbeli eloszlásának és a remanens hőtermelésnek a tranziens alatti időbeli változását is követni tudja. A hasadási termékek radioaktív bomlásából adódó remanens hőteljesítmény számítása azért fontos, mert a reaktor teljes teljesítményéhez való hozzájárulása egyensúlyi állapotban megközelíti a 8% -ot, tranziensek esetén pedig arányaiban ezt jelentősen meghaladhatja. Ez indokolja a kitűzött feladat megoldását.

2. A remanens hővel kapcsolatos ismeretek áttekintése

2.1. A remanens hő eredete

2.1.1. A maghasadás és a hasadási termékek

Az atomerőművek működésének alapjelensége a maghasadás, melynek során egy nehezebb atommagból két vagy három könnyebb töredékmag jön létre hatalmas kinetikus energiával. Az atomerőművekben használt U-235 és U-238 elemekre ez a szétbontás körülbelül 200 MeV energianyereséget jelent elhasadt magonként. A folyamat során az energia nem azonnal és nem egyetlen módon szabadul fel. A keletkező energia különféle részecskék és sugárzások közötti eloszlását az 1. táblázat foglalja össze:

1. táblázat. A maghasadás energiamérlege (U-235 + n)

A hasadási termékek kinetikus energiája	168 MeV	82,0%
Hasadási neutronok által elvitt energia	5 MeV	2,4%
Prompt γ -kvantumok által elvitt energia	7 MeV	3,4%
Hasadási termékek β^- -részecskéi által elvitt energia	8 MeV	3,9%
Hasadási termékek γ -sugárzása által elvitt energia	7 MeV	3,4%
Hasadási termékek β^- bomlásakor kibocsátott antineutrínók által elvitt energia	10 MeV	4,9%
Összesen	205 MeV	100%

A táblázatban látható adatokat két szempont alapján kell megvizsgálnunk. Az egyik, hogy a hasadást követően mennyi idő múlva történik meg az energia-felszabadulás. Az első három sorban jelzett energia felszabadulás a hasadást követően azonnal bekövetkezik (a maghasadás karakterisztikus idejének a nagyságrendje 10^{-12} s), a második három pedig később (ezek karakterisztikus ideje az előzőnél nagyságrendekkel nagyobb; a legkisebb felezési idő a hasadási termékek között is μs , azaz $\sim 10^{-6}$ s). A másik csoportosítási lehetőség, hogy a felszabadult energiának mekkora része adódik le a reaktorban, vagyis mennyi energia szökik ki egy hasadás után a reaktorból. A felszabadult energiának a legnagyobb része a hasadványok kinetikus energiája, amely teljes egészében a reaktorban marad, hiszen a közepes tömegű hasadványok szabad úthossza nagyon kicsi. A hasadási neutronok által elvitt energiának a jelentős része a reaktorban

adódik le, mert a moderátor segítségével lelassítjuk őket, tehát ott leadják a kinetikus energiájuk nagy részét. A β^- -bomlás elektronjai is a reaktorban adják le teljes energiájukat, mert az elektronok szabad úthossza is kicsi, még ha el is jutnak a reaktortartály faláig, az acélban mindenképp elnyelődnek, ami a termikus fűtésben még szerepet játszik. A neutrínók nagyon nagy áthatolási képességgel rendelkeznek, vagyis őket tekinthetjük úgy, mintha minden energiájuk kiszökne a reaktorból. A gammasugárzás esetében már nehezebb megállapítani, hogy ki tud-e szökni a reaktorból vagy sem. Ahhoz, hogy ezt megállapítsuk, használjunk fel Paksról származó adatokat. A paksi atomerőmű termikus teljesítménye 1480 MW. A betonfalból, ami a tartályt körülöleli, egy léghűtési rendszer szállítja el a benne keletkező felesleges hőt. A levegőhűtésre alkalmazandó hűtőteliesség már a tervezés során meghatározták, később pedig mérésekkel igazolták, hogy a betonfalban keletkező hőteljesítmény $\sim 240 - 250$ kW. A gondolatmenetünkben a reaktorban maximum 195 MeV energia szabadulhat fel hasadásonként, mert 10 MeV-et a neutrínók elvisznek. A gammasugárzás teljes energiája 14 MeV, aminek nem tudjuk, mekkora hányada marad a reaktorban. Erre a következő becslést adhatjuk: tegyük fel, hogy pillanatszerűen bekövetkezik minden energia-leadás, az időfüggésről most feledkezzünk el. A hasadások száma időegységenként legyen N , a reaktorból kiszökő, a falban elnyelődő energia legyen X . Ez az energia a 14 MeV gamma-energiából származik. Ekkor a reaktort fűtő energia hasadásonként $195 - X$ MeV. Ezzel a következő egyenletrendszer kapható:

$$(195 - X) \cdot N = 1480 \text{ MeV} \quad (1)$$

$$X \cdot N = 0,25 \text{ MeV} \quad (2)$$

A megoldás $X = 0,0329$ MeV, ami a 14 MeV-es gamma energiához képest nagyságrendekkel kisebb. Ha figyelembe vesszük, hogy a kiszökött energiát a gammasugárzás mellett a neutron-sugárzás is elvihette, akkor ezzel az egyszerű becsléssel is beláthatjuk, hogy a gammasugárzás energiája majdnem teljes mértékben a reaktorban adódik le. Ezért a következőkben azzal a közelítéssel élünk, hogy a gammasugárzás energiája teljes egészében a reaktort fűti.

2.1.2. A remanens hő forrása

A további részek problémamentes megértéséhez először összefoglalom az általam használt fogalom-definíciókat.¹

¹A következő bekezdést a [1]-ből dolgoztam fel.

- Kiegészítés: Ezt a fogalmat elég tág értelmezésben használjuk. Alapvetően az a folyamat, ami során az üzemanyag, vagy a reaktorban lévő egyéb anyag átalakul neutronbefogás során.
- A további tárgyalás szempontjából a hasadás is egy olyan reakciónak tekinthető, amelyet neutronbefogás vált ki, de itt nem egyszerű transzmutáció jön létre, hanem két vagy több hasadvány keletkezik. A hasadványoknak proton hiánya van, ezért átlagosan három–négy β^- bomláson kell átesniük míg stabilok lesznek. Pl: $\text{Xe140} \rightarrow \text{Cs140} \rightarrow \text{Ba140} \rightarrow \text{La140} \rightarrow \text{Ce140}$ (stabil).
- Hasadvány: A maghasadásból közvetlenül keletkező atom, aminek a kinetikus energiája még nagyságrendekkel nagyobb, mint a termikus energia ($E_{kin} \gg k_b T$).
- Hasadási termékek: Azok az atomok, amelyek a hasadás folyamata során jönnek létre közvetlen keletkezéssel, vagy radioaktív bomlások után. A kinetikus energiájuk már nem számottevő, összemérhető a termikus energiával, ami azt jelenti, hogy már "megálltak". A hasadási termékek már nem hasadóképes izotópok. Ide tartoznak a lelassult hasadványok és azok radioaktív bomlásából, vagy neutron reakciókból keletkezett leányelemeik.
- Remanens hő: A hasadási termékek radioaktív bomlása során felszabadult, és a reaktorban leadott energia. A fenti táblázat alapján ez a hasadási termékekből felszabaduló β^- részecskék és γ -fotonok energiái, ami megközelítőleg 15 MeV hasadásonként. A remanens hő keletkezésének forrása a radioaktív anyagok bomlása, illetve a keletkező alfa- és béta-részecskék és gamma-fotonok által a makroszkopikus közegnek különböző mechanizmusokon keresztül átadott (kinetikus, ionizációs, gerjesztési) energia, amely végülis hőenergiává alakul. A fentiek miatt a remanens hőfelszabadulás statisztikailag (átlagosan) arányos lesz az anyagok bomlási gyakoriságával. A remanens hőteljesítmény-sűrűség, azaz az egységnyi idő alatt egységnyi térfogatban felszabadult hő kifejezhető az:

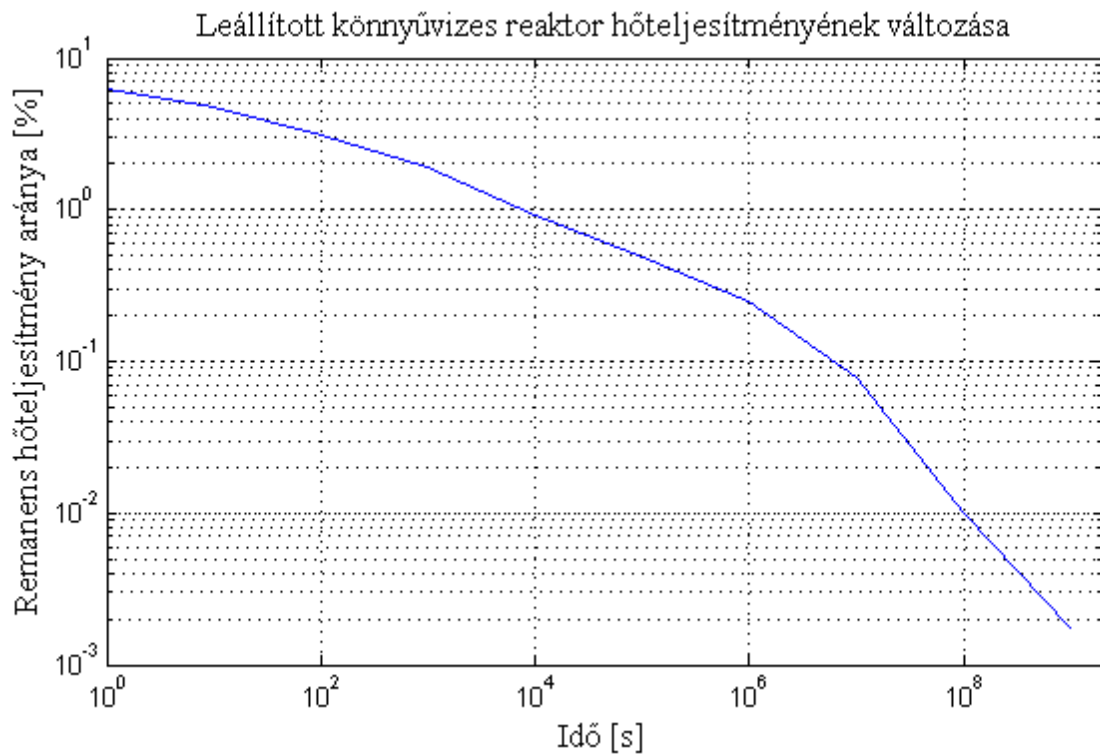
$$E_{remanens} = \sum_i N_i \cdot \lambda_i \cdot E_i \quad \left[\frac{\text{eV}}{\text{cm}^3 \text{s}} \right] \quad (3)$$

alakban, ahol E_i az i -edik hasadási termékéből keletkező radioaktív sugárzás energiája, N_i a az i -edik izotóp magssűrűsége, λ_i az i -edik izotóp bomlási állandója. A (3)-es összefüggés alapján látható, hogy a remanens hőteljesítményt nagyban befolyásolja a hasadási termékek magssűrűsége.

A reaktor működése közben üzemanyagának és az aktív zóna egyéb anyagainak összetétele egyrészt a neutronok kiváltotta magreakciók (hasadás, aktiválódás) miatt, másrészt az így

kialakult radioaktív anyagok bomlása következtében változik. Az anyagösszetétel változása stationer reaktorüzem esetén igen lassú (a kiégéssel arányos), de tranziens (másodperces, perces vagy órás) folyamatok során egyes összetevők koncentrációja (aktivitása) gyorsan (a fluxusváltozás sebességével összemérhető időskálán) módosulhat. Ez alapján két időskála különül el, attól függően, hogy a változás milyen karakterisztikus idővel történik. A nagyon rövid felezési idejű izotópok (amelyek felezési ideje összemérhető a tranziens idejével) magssűrűsége gyors tranziens esetén gyorsan változik, ennek hatására tranziensben a remanens hőteljesítmény egy része, amely ezekből az izotópokból szabadul fel, szintén gyorsan változik. A hosszabb felezési idejű (a tranziens karakterisztikus idejénél nagyságrendekkel nagyobb a felezési idejű) izotópokból adódó remanens hőjárulék ekkor háttérként (additív konstans tagként) van jelen. Hosszabb tranziens esetén a rövid felezési idejű izotópok (amelyeknek nagyságrendekkel kisebb a felezési ideje a tranziens idejénél) magssűrűségének lassú változása összemérhető a nagy felezési idejű izotópok változásával. A rövid tranziensek kategóriájában a reaktor leállása vagy leállítása a legkritikusabb. Leállítás után a kis felezési idejű izotópok (akár néhány napos felezési idejűek is) megfelelő idő után elfogynak, és csak a nagyon hosszú felezési idejű izotópok járuléka marad meg, ami tulajdonképpen egy háttérsugárzást ad. A remanens hőteljesítmény jellemző időbeli változását a 2. táblázat és az azon alapuló 1. ábra szemlélteti egy tipikus LWR reaktor leállítását követő (1-től 10^9 másodpercig terjedő) időszakra nagyságrendi lépésekben. Látható, hogy a remanens hőteljesítmény a reaktor leállítását követő első 100 másodperc alatt körülbelül megfeleződik, egy nap alatt pedig kevesebb, mint tizedére csökken.

$$\text{Remanens hő aránya} = \frac{\text{Remanens hőteljesítmény a "t" időben}}{\text{Teljes teljesítmény a leállítás kezdetét jelentő "0" időpillanatban}} \quad (4)$$



1. ábra. Remanens hőteljesítmény arányának változása a reaktor tranziens előtti teljes teljesítményhez képest [2] alapján.

2. táblázat. A remanens hő aránya a teljes teljesítményhez képest. Forrás: [2]

Leállítás után eltelt idő [s]	Remanens hőteljesítmény aránya
1	$6,25 \cdot 10^{-2}$
10	$4,80 \cdot 10^{-2}$
10^2	$3,12 \cdot 10^{-2}$
10^3	$1,89 \cdot 10^{-2}$
10^4 (~ 2,8 óra)	$9,24 \cdot 10^{-3}$
10^5 (~ 1 nap)	$4,87 \cdot 10^{-3}$
10^6 (~ 12 nap)	$2,47 \cdot 10^{-3}$
10^7 (~ 120 nap)	$7,75 \cdot 10^{-4}$
10^8 (~ 3,17 év)	$9,94 \cdot 10^{-5}$
10^9 (~ 31,7 év)	$1,74 \cdot 10^{-5}$

A leállított reaktor remanens hőteljesítménye többnyire nemkívánatos jelenség, mert akkor is gondoskodni kell az elvezetéséről ("elszállításáról"), ha energia-felhasználás szempontból nincs rá szükség.² Minket a feladat szempontjából a rövid tranziens (300–1000 másodperces tranziens) esetén történő viselkedés érdekel. Ezért különös jelentőségű a rövid felezési idejű izotópok magsűrűségének meghatározása a vizsgálat időintervallumán.

Az általunk (3)–es egyenlettel definiált remanens hőteljesítmény a hasadási termékek radioaktív bomlásaiból származó energiát jelenti. A reaktor üzemelése szempontjából fontos a transzuránok vizsgálata. Ezek az urán magok neutronbefogása révén keletkeznek, lehetnek hasadóképes izotópok, és/vagy radioaktívak. A gyakorlat szerint számottevő az U–235 és U–238 mellett még két transzurán izotóp hasadási gyakorisága: a Pu–239 és a Pu–241. A transzuránok között sok különbséget lehet találni, van alfa-, béta-, és gammabomló anyag is. Egy azonban közös, mindegyik felezési ideje nagyságrendekkel nagyobb, mint az általunk vizsgált időtartomány nagysága (~ 300 másodperc). Ennek fényében az ezekből származó extra hő, ami a fluxus változasi sebességétől eltérően változik, szintén egy háttérként adódik a remanens hőhöz az általunk vizsgált tranziensekben.

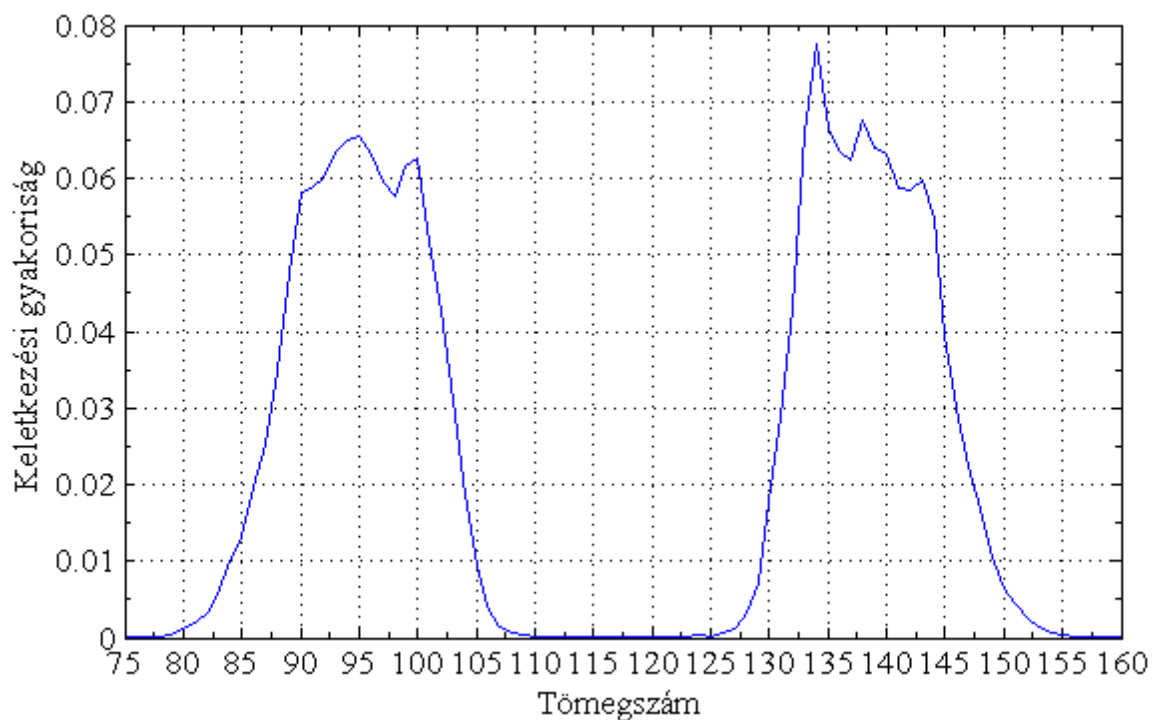
2.2. A hasadási termékek jellemzése

A fentebb megadott definíciónak megfelelően hasadási termékeknek azokat az atomokat tekintjük, amelyek közvetlenül a hasadási folyamatban jönnek létre, vagy az így keletkezett atomokból alakulnak ki radioaktív bomlások során. A kinetikus energiájuk már nem számottevő, összemérhető a termikus energiával, és már nem hasadóképes izotópok. A hasadási termékek – így a remanens hő – kialakulása nagyban függ a hasadványok termelődésétől, hiszen ők az anyaelemek³. Először tehát tekintsük át, hogy a hasadványok hogyan keletkeznek a hasadó magból. A maghasadás folyamata ún. közbülső mag kialakulásával lezajló magreakció. Ennek megfelelően miután a hasadó mag befogja a neutron, kialakul egy, az eredeti maghoz képest eggyel nagyobb tömegszámú mag, ami a neutron kinetikus energiája miatt erősen gerjesztett állapotban keletkezik. A gerjesztés hatására a mag deformálódik, majd kettészakad, kilökve magából a hasadó magra és neutronenergiára jellemző átlagos számú neutron is. Ami a lényeges, hogy a gerjesztett atommagnak a kettészakadása már nem lesz érzékeny a beérkező neutron minden jellemzőjére (természetesen az energiára igen), így statisztikusan megvizsgálhatjuk, hogy adott hasadó izo-

²A 1. ábra ad ehhez segítséget.

³A hasadványokból jönnek létre a hasadási termékek.

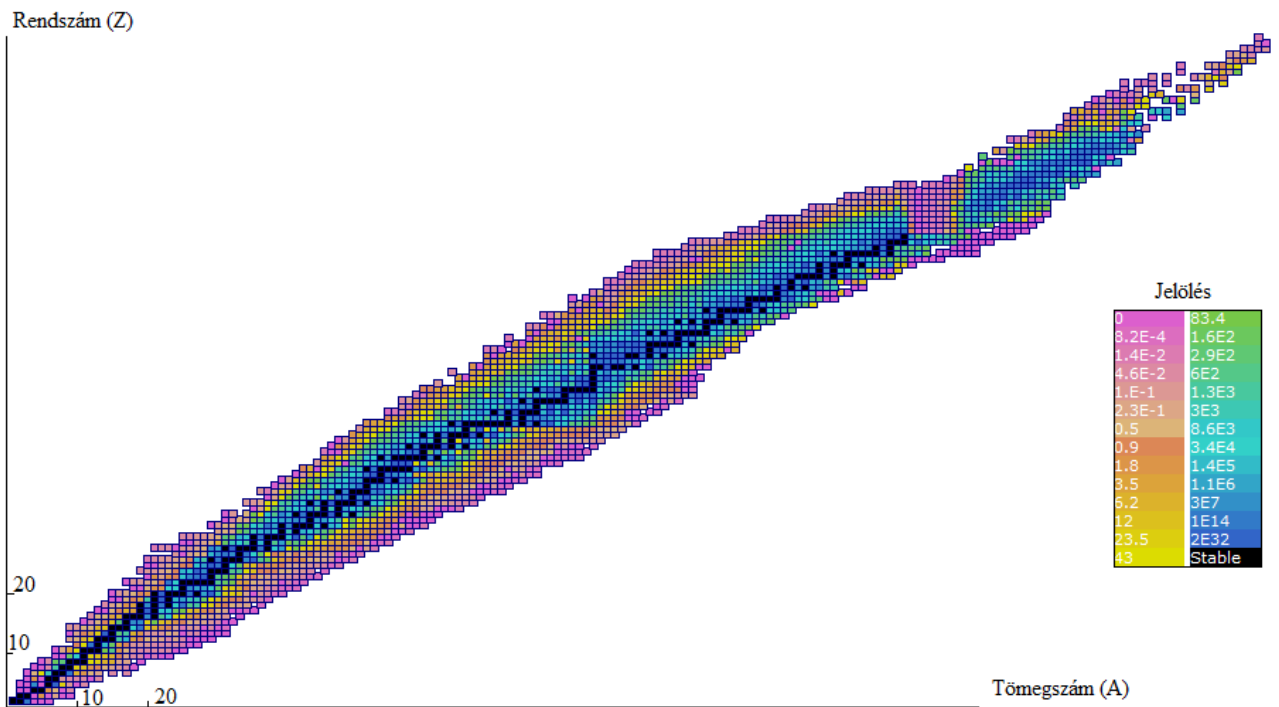
tópból adott neutronenergián milyen gyakorisággal milyen izotóp keletkezik. Ezt mutatja be a 2.ábra.



2. ábra. Az U–235 hasadóképes izotóp hasadási gyakoriságának tömeg szerinti eloszlása termikus neutronok által kiváltott hasadásra.

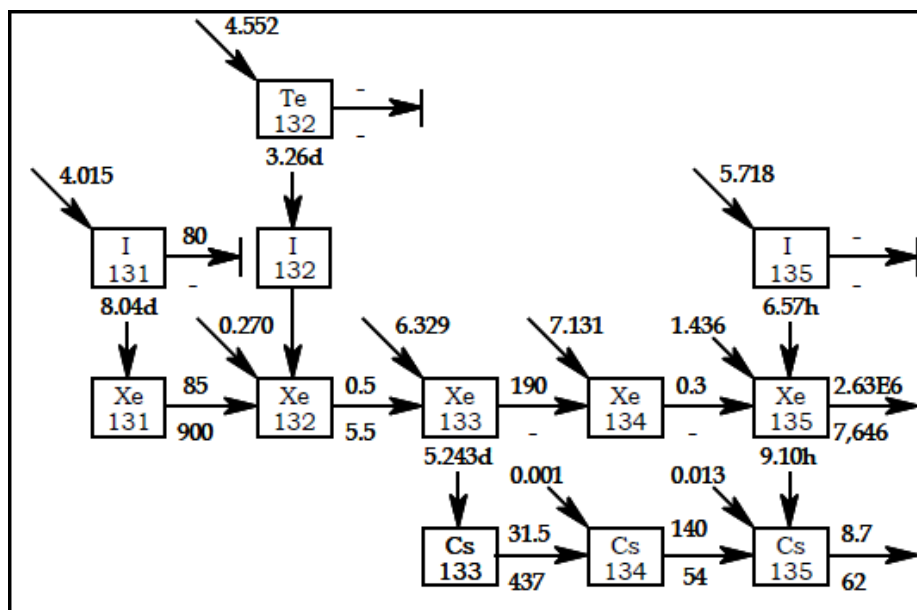
Jól látható, hogy azon reakciónak van a legnagyobb gyakorisága, amikor egy nagyobb és egy kisebb tömegű mag keletkezik egyszerre.

Ezután vizsgáljuk meg a hasadványokat abból a szempontból, hogy milyen a keletkezett atommag proton–neutron ($p^+ - n$) aránya. Erre a kérdésre könnyen választ kaphatunk, hogyha a 3.ábrát tüzetesen megvizsgáljuk. Az ábrán az összes elem felezési idejét a megfelelő színekkel ábrázoltuk a rendszám–tömegszám grafikonon. Feketével láthatjuk a stabil izotópokat, a rózsaszínű elemek rendelkeznek a legkisebb felezési idővel, ezáltal ők a leginstabilabbak. A kék felé haladva a felezési idő nő, a legsötétebb kék színekű izotópok már nagyon nagy felezési idővel rendelkeznek. Forrás:[5].



3. ábra. Az ismert izotópok rendszám–tömegszám grafikonja; a színek az izotópok felezési idejét jeleníti meg. Ezt az ábrát az [5] alapján készítettem

Látható, hogy nagyjából a 20-as rendszámig az azonos p^+ – n számmal rendelkező izotópok stabilak. E felett az az energetikailag kedvezőbb konfiguráció, hogyha a magban több neutron foglal helyet, mint proton. Emiatt amikor a nehéz hasadó mag két kisebbre esik szét, hiába lök ki még néhány neutron, a hasadványokban neutron-többlet lesz tapasztalható. A hasadvány magok igyekeznek az energetikailag kedvezőbb arány előállítására, így β^- bomlanak, amiben egy n alakul át p^+ -ná egy elektron kisugárzása mellett. Ezek szerint a hasadványoknak legtöbbször β^- -bomlásokon addig kell túlesniük, amíg stabilok nem lesznek. Fontos megemlíteni, hogy a hasadási termékek a radioaktív bomlásokon kívül még ki is éghetnek, ezáltal a hasadási termékek egy bonyolult bomlási sorozatba állíthatók, egy ilyen sorozat részletét szemlélteti a 4.ábra.



4. ábra. A maghasadásból keletkező hasadási termékek átalakulási láncának egy részlete

A 4. ábrán szereplő mennyiségek számértéke a mi számításaink szempontjából nem releváns, mert más adatbázisból dolgoztunk. Az izotópok köré rajzolt téglalap bal felső sarkába mutató nyílhoz tartozó szám azt adja meg, hogy a hasadvány mekkora gyakorisággal keletkezik a hasadó anyagból. A lefelé mutató nyíl a β^- bomlást jelenti, a szám a bomlás felezési idejét mutatja. A jobbra mutató nyíl a neutronbefogást jelöli.

Összességében megállapítható, hogy a keletkező hasadványok általában kis felezési idővel bomlanak, mert az α p⁺-n arányukkal előálló mag még nagyon instabil, és ahogy közeledünk a stabil arányhoz úgy a felezési idő is nő (annál kevésbé instabil a mag).

2.3. Remanens hő számítására szolgáló modellek [3]

Az előző fejezetekben rávilágítottunk, hogy a remanens hő honnan származik. Láthatjuk, hogy a remanens hő időbeli fejlődésének leírására szükségünk van a hasadási termékek magsűrűségének ismeretére az idő függvényében. Erre egy differenciálegyenlet-rendszert tudunk felírni, amely a legegyszerűbb formában a következő. Valamely izotóp magszámának időegységre vonatkozó megváltozása felírható a keletkezésbe (pozitív előjellel) és a fogyásba (negatív előjellel) tagot adó járulékok összegeként. Keletkezésre a következő folyamatok vezethetnek:

- hasadás során közvetlen keletkezés,

- valamely hasadási termékek β^- bomlásából keletkezés,
- valamely elemből kiégés folyamán neutron abszorpcióval keletkezés.

Egy izotóp fogyása adódhat abból, hogy radioaktív bomlással elbomlik, vagy kiég, tehát neutron abszorpció során átalakul. Összefoglalva:

$$\frac{dN_z}{dt} = \text{Keletkezés} - \text{Fogyás} \quad (5)$$

$$\text{Keletkezés} = \sum_i \delta_{i \rightarrow z} \sigma_i^f N_i \phi + \sum_j \kappa_{j \rightarrow z} \sigma_j^c N_j \phi + \sum_k \rho_{k \rightarrow z} \lambda_k N_k \quad (6)$$

$$\text{Fogyás} = N_z \lambda_z + N_z \sigma_z^{\text{tot}} \phi, \quad (7)$$

ahol ϕ a fluxus, σ_i^f az i -edik hasadóképes izotóp mikroszkópikus hasadási hatáskeresztmetszete, σ_i^c az i -edik izotóp mikroszkópikus neutronbefogási hatáskeresztmetszete, N_i az i -edik izotóp magzsűrűsége, λ_k a k -adik izotóp bomlási állandója, σ_z^{tot} a z -edik izotóp teljes mikroszkópikus hatáskeresztmetszete, $\delta_{i \rightarrow z}$ annak a gyakorisága, hogy az i -edik hasadóképes magból a z -edik mag keletkezik a hasadás után, $\kappa_{j \rightarrow z}$ annak a valószínűsége, hogy a j -edik sorszámú magból a z -edik mag keletkezik neutronbefogással, $\rho_{k \rightarrow z}$ annak a bomlási gyakorisága, hogy a k -adik mag radioaktív bomlása során a z -edik mag keletkezik. Az összegzéseket a reaktorban előforduló összes izotópra el kell végezni.

Láthatjuk tehát, hogy a hasadási termékek magzsűrűségének meghatározása a számításigénye miatt általánosságban nem egyszerű feladat, mivel a megoldás során felírható differenciálegyenlet-rendszerben annyi ismeretlen van, amennyi fajta izotóp a reaktorban előfordul. A probléma bonyolultságát mutatja, hogy a különböző izotópok a differenciálegyenlet-rendszerben a legkülönbözőbben tudnak egymással kapcsolódni. Ezen felül az egyenletben lévő tagokban a hatáskeresztmetszet energiafüggő is, illetve az összes mennyiség helyfüggő. Ezzel fel lehet írni a következő egyenletet, amit a remanens hő számítása szempontjából alapvető fontosságúnak vehetünk, ezt Bateman-egyenletnek nevezik, amely megadja egy kiszemelt izotóp (az i -dik) magzsűrűségének az időderiváltját:

$$\begin{aligned} \frac{dN_i(\underline{r}, t)}{dt} = & + \sum_{k \neq i} \rho_{k \rightarrow i} \lambda_k N_k(\underline{r}, t) - \lambda_i N_i(\underline{r}, t) - \int_0^\infty N_i(\underline{r}, t) \sigma_i^{\text{tot}}(\underline{r}, E, t) \phi(\underline{r}, E, t) dE + \\ & + \int_0^\infty \left[\sum_z \delta_{z \rightarrow i} N_z(\underline{r}, t) \sigma_z^f(\underline{r}, E, t) \phi(\underline{r}, E, t) + \sum_j \kappa_{j \rightarrow i} N_j(\underline{r}, t) \sigma_j^c(\underline{r}, E, t) \phi(\underline{r}, E, t) \right] dE \end{aligned} \quad (8)$$

A neutronfluxus helyfüggésének meghatározása a reaktorfizika központi feladata, ezért ezzel a dolgozatban nem foglalkozunk, a helyfüggését ismertnek (adottnak) tételezzük fel. Miután a hasadási termékek gyakorlatilag ott maradnak, ahol keletkeznek, az egyenleteinket térfüggetlenül írjuk fel. Ez azért tehető meg, mert a biztonság szempontjából fontos, hogy a radioaktív anyagokat a lehető legjobban elzárva tartsuk. Ez által például a kazettából (de a pálcából, sőt a pasztillából) egy közepes méretű atom nem tud kijutni. Az így felírt egyenlet vonatkozhat az egész zónára vagy annál kisebb hányadára (például egy kazettára, kazetta-nóduszra, pálcára, pálcá-nóduszra, stb.). A helyfüggést nem tartalmazó számítási eljárást pontmodellnek is szokás nevezni.

A remanens hő időbeli változásának meghatározására különböző módszereket lehet alkalmazni, ezek közül mutatok be ebben a fejezetben kettőt, a szakdolgozatban pedig kidolgoztam egyet, ami ennek a differenciálegyenlet-rendszernek a megoldásán alapul.

A hasadási termékekre felírható Bateman-egyenlet az elsőfokú inhomogén differenciálegyenlet-rendszerek közé sorolandó. Az egyenlet alaptípusa a

$$\frac{d\underline{N}(t)}{dt} = \underline{A}(t) \underline{N}(t) + \underline{B}(t) \quad (9)$$

egyenlet, ahol $\underline{A}(t)$ mátrix, $\underline{B}(t)$ vektor, és általános esetben mindkettő időfüggő. Amennyiben n ismeretlen izotóp magssűrűségét kell meghatároznunk, úgy \underline{N} és \underline{B} vektorok $1 \times n$ méretűek, az \underline{A} mátrix $n \times n$ méretű. A (9)-es egyenlet általános megoldó képlete:

$$\underline{N}(t) = e^{\int_{t_0}^t \underline{A}(s) ds} \underline{N}(t_0) + e^{\int_{t_0}^t \underline{A}(s) ds} \int_{t_0}^t e^{-\int_{t_0}^{\tau} \underline{A}(s) ds} \underline{B}(\tau) d\tau \quad (10)$$

amiről könnyen meggyőződhetünk visszahelyettesítéssel. A számítás nehézségét innentől a numerikus megvalósíthatóság adja. Látható, hogy mátrixot kell integrálni, illetve egy mátrix integráljának az exponenciálisát kiszámolni és még egyszer integrálni a $\underline{B}(t)$ mennyiséggel. Ezen mennyiségek kiszámítása okozza a nehézséget. Az általam kidolgozott eljárás nem az (10)-es analitikus megoldóképletből indul ki, hanem a véges differencia módszer alapján oldja meg a differenciálegyenlet-rendszert.

2.3.1. Illesztett exponenciálisok módszere ([4] alapján)

A [4] tanulmányt⁴ az U.S.NRC.⁵ készítette szabvány előkészítése céljából. A feldolgozott anyag azt mutatja be, hogyan kell a remanens hő számítani kivett, használt üzemanyag–kazetták esetében. Fontos, hogy a módszert alapvetően már használt üzemanyagok tárolásánál keletkező remanens hő számítására fejlesztették ki. Az alábbiakban bemutatott számítási eljárás validálását a remanens hő kalorimetrikus mérésével végezték el, összesen 132 „szerelvényre” (68 az USA-ban, 64 Svédországban). Az U.S.NRC. által kifejlesztett eljárást NUREG–6999 eljárásnak fogom nevezni.

A számításokat PWR és BWR reaktorokban felhasznált üzemanyagokra lehet alkalmazni. Már fentebb említettük, hogy a remanens hő a hasadási termékek radioaktív bomlásaiból felszabadult energia. Ez az energia kiszámítható a négy legjelentősebb hasadóképes izotóp hasadási gyakoriságaiból, ha feltesszük, hogy a vizsgált rendszerben nincs neutronabszorpció. A hasadóképes izotópok részvétele a remanens hő felszabadulásában: sorrendben U–235, Pu–239, U–238, Pu–241. A hasadások több mint 99%-át ez a négy aktinida adja szokásos LWR üzemanyag esetén. A módszer alapja, hogy egy hasadóképes izotóp atommagjának elhasadása után a hasadási termékek által leadott remanens hőnek az időbeli lecsengését le lehet írni egy 23 tagú összeggel⁶:

$$f_{\alpha}(t) = \sum_{j=1}^{23} a_{\alpha,j} e^{-\lambda_{\alpha,j}t} \quad (11)$$

Ez a remanens hő teljesítményét adja meg az idő függvényében.⁷ Az α index a négy hasadóképes izotópot jelöli. A 4. táblázat tartalmazza az illesztésből meghatározható együtthatókat és a "bomlási állandókat". Az (11)–es egyenlet jobb oldalát adott időpontok között integrálva kapható az egy hasadást követően felszabadult remanens hő. Ha feltesszük, hogy az időpontok között T idő telik el:

$$F_{\alpha}(t, T) = \sum_{j=1}^{23} \frac{a_{\alpha,j}}{\lambda_{\alpha,j}} (1 - e^{-\lambda_{\alpha,j}T}) e^{-\lambda_{\alpha,j}t} \quad (12)$$

Jól látható, hogy a módszer alapvető lényege az, hogy adott izotóp egy atomjának elhasadására meghatározható az izotópból keletkező hasadási termékek remanens hőteljesítménye az idő függvényében. Ezzel, ha tudjuk az üzemanyag előéletét, ami jelen esetben csak a négy fontos hasadóképes izotóp hasadási teljesítménye az idő függvényében, akkor a konvolúció segítségével

⁴A további szóhasználatban ezt a tanulmányt "háttéranyagnak" is nevezzük.

⁵U.S.NRC. : United States Nuclear Regulatory Commission

⁶A vizsgált mag elhasadása a $t = 0$ időpillanatban történt

⁷Az illesztés motivációját lásd: [B]

meghatározható a remanens hő teljesítménye. A konvolúció, mint matematikai művelet definíciója:

$$A(t) = g(t) * h(t) = \int_{-\infty}^t g(\tau) h(t - \tau) d\tau \quad (13)$$

Általános esetben a konvolúció elvégzése nem egyszerű feladat, analitikusan legtöbbször nem is oldható meg, sőt sokszor még a numerikus megoldás is számításigényes.

A NUREG-6999 eljárás ezzel a matematikai eljárással bármilyen időfüggő hasadási teljesítményre meg tudja adni a remanens hő időbeli alakulását. Legyenek a hasadási teljesítményeket leíró függvények a $p_\alpha(t)$ -k, $\alpha = 1, 2, 3, 4$. Ekkor a remanens hő ($P(t)$) a következő összefüggéssel kaphatjuk meg:

$$P(t) = \sum_{\alpha=1}^4 f_\alpha(t) * p_\alpha(t) \quad (14)$$

Gyors algoritmus fejlesztésére ezt a módszert a legcélszerűbb alkalmazni az egyszerűsége miatt. Belátható, hogy a konvolúció egyszerűbb függvényekre, illetve speciális függvény-párookra könnyen elvégezhető analitikus formában. Vegyük most azt az esetet, amikor a hasadási teljesítmény görbéje az általunk kiválasztott szakaszokon lineáris függvénnyel közelíthető. Ez azért tehető meg, mert minden folytonos függvény approximálható szakaszonként lineáris függvénnyel. Ennek megfelelően célszerű ezek közül a legáltalánosabb lineáris hasadási görbére analitikusan kiszámítani a végeredményt, ami már könnyen programozható, ezáltal gyorsan eredményt ad.

A hasadási teljesítmény görbe legyen 0, a T időpillanat előtt, és a $T + \tau$ időpillanat után. A kezdeti T időpillanatban a hasadási teljesítmény legyen p_1^α , a végső $T + \tau$ időpillanatban pedig p_2^α , a két időpillanat között pedig lineáris, azaz:

$$p_\alpha(T < t < T + \tau) = p_1^\alpha + \frac{p_2^\alpha - p_1^\alpha}{\tau} t, \text{ egyébként pedig } 0. \quad (15)$$

Ekkor a remanens hőteljesítményt a T^* időpillanatban megkaphatjuk, ha figyelembe vesszük a (14) egyenletet:

$$\begin{aligned} P(T^*) &= \sum_{\alpha=1}^4 \int_{-\infty}^{T^*} p_\alpha(t) f_\alpha(T^* - t) dt = \\ &= \sum_{\alpha=1}^4 \int_T^{T+\tau} \left(p_1^\alpha + \frac{p_2^\alpha - p_1^\alpha}{\tau} t \right) \left(\sum_{j=1}^{23} a_{\alpha,j} e^{-\lambda_{\alpha,j}(T^*-t)} \right) dt = \\ &= \sum_{\alpha=1}^4 \sum_{j=1}^{23} a_{\alpha,j} e^{-\lambda_{\alpha,j} T^*} \left(\underbrace{\int_T^{T+\tau} p_1^\alpha e^{\lambda_{\alpha,j} t} dt}_A + \underbrace{\int_T^{T+\tau} \frac{p_2^\alpha - p_1^\alpha}{\tau} t e^{\lambda_{\alpha,j} t} dt}_B \right) \end{aligned} \quad (16)$$

Parciális integrálás után:

$$A = \frac{p_1^\alpha}{\lambda_{\alpha,j}} e^{\lambda_{\alpha,j} T} (e^{\lambda_{\alpha,j} \tau} - 1)$$

$$B = \frac{p_2^\alpha - p_1^\alpha}{\tau \lambda_{\alpha,j}} e^{\lambda_{\alpha,j} T} \left[\tau e^{\lambda_{\alpha,j} \tau} + T (e^{\lambda_{\alpha,j} \tau} - 1) + \frac{1}{\lambda_{\alpha,j}} (e^{\lambda_{\alpha,j} \tau} - 1) \right]$$

Ez egy elég hosszú formula, de ha megnézzük, akkor szorzáson és összeadáson kívül nincs benne numerikus bonyolultságot okozó matematikai művelet. Ennek a segítségével sikerült a tanszéken összerakni egy, ezt nagyon gyorsan számoló rutint, amit a dolgozat további részében NUREG-6999 rutinnak fogok majd nevezni. Fontos megjegyezni, hogy ezzel a módszerrel természetesen a konstans hasadási teljesítmény görbét is le lehet írni. Ennek a módszernek a használata során feltételezni fogjuk, hogy a tranziens előtt a reaktor a $-\infty$ időpillanattól folyamatosan konstans hasadási szinten üzemelt a tranziens kezdetét jelentő 0 időpillanatig. Ez a képletekbe $T = -\infty$ és $\tau = \infty$ behelyettesítésével adja az ilyenkor használt formulát:

$$P(T^*) = \sum_{\alpha=1}^4 \sum_{j=1}^{23} \frac{p_1^\alpha a_{\alpha,j} e^{-\lambda_{\alpha,j} T^*}}{\lambda_{\alpha,j}} \quad (17)$$

3. A remanens hőteljesítmény számítására kidolgozott eljárás és annak tesztelése

A feladat során megoldandó differenciálegyenlet-rendszer alaptípusa:

$$\frac{d\underline{N}(t)}{dt} = \underline{A}(t) \underline{N}(t) + \underline{B}(t). \quad (18)$$

Ez egy inhomogén elsőrendű függvényegyütthatós differenciálegyenlet-rendszer. A megoldáshoz ismernünk kell az együtthatómátrix elemeit, a forrástagot, és az ismeretlen vektor kezdeti értékét. Ha ezt összevetjük a Bateman egyenlet (8)–es formájával, akkor látható, hogy az $\underline{A}(t)$ és a $\underline{B}(t)$ mennyiségek hogyan állnak elő. Az együtthatómátrix elemeiben a fogyást és az indirekt keletkezést, míg a forrásvektorban a direkt keletkezést leíró tagok szerepelnek.

A feladat kitűzésekor egyszerűnek tűnt az együtthatómátrix és a forrásvektor megadása, hiszen már voltak olyan adatbázisok, amelyekben a felezési idők és a különböző izotópok bomlási fajtái és gyakoriságaik voltak találhatóak. A munka elején tudtuk, hogy a differenciálegyenlet-rendszert a reaktorban megtalálható összes izotópra megoldani nem lehet, hiszen a hasadási folyamat következtében több ezer különböző izotópra kellene ezt elvégezni. Reméltük, hogy az egyenletet csak kevés izotópra kell megoldani, mert sokat el lehet hanyagolni. Az elhanyagolásnak több oka is lehetséges, de a legfőbb motiváció mindenképpen az volt, hogy a remanens hő kis mértékben befolyásolja az elhagyott tag. A kezdeti feltételezésünk, hogy a remanens hőbe jelentősen csak kevés izotóp ad járulékot, tévesnek bizonyult a kezdeti számítások alapján, azaz kiderült, hogy a differenciálegyenletet sok izotópra szükséges megoldani. Attól, hogy sok izotóp ad járulékot a remanens hőbe, még nem következik közvetlenül, hogy nem lehet valamilyen átlagolással figyelmebe venni a többséget. Azonban az izotópok kihagyása a differenciálegyenlet-rendszerből és a neutronok okozta kiegészítés összefüggésben áll. Mégpedig pont a neutronabszorpció jelentősége miatt nem jól kontrollált a csatolás az izotópok között. Ezzel azt akarom mondani, hogyha kivesszük például a nagy felezési idejű izotópokat, mondván, hogy úgyis csak egy háttér marad meg miattuk, akkor az nem lesz teljesen korrekt, mert belőlük keletkezve makroszkopikus mennyiségű, a vizsgálatunkban már fontos szerepet betöltő, közepes felezési idejű izotóp keletkeződik. Ez az átalakulás lehet neutronbefogás is, ezért nem hagyható figyelmen kívül ebben a számításban az izotópoknak a jelentős része.

Az együtthatómátrix felírása sok ismeretlen esetében manuálisan nagyon nehéz, ráadásul nehezebb is a dolgon, hogyha még egy ismeretlent be akarnánk venni a rendszerbe, hiszen akkor újra kellene gondolni az együtthatómátrixot. Ezért az együtthatómátrix felírását automatizálni

kellett, amely algoritmusát a következő alfejezetben írjuk le. Mivel néhány száz ismeretlenünk van, ezért a differenciálegyenlet-rendszer felírása nehéz feladat.

A következő nehézség a kezdőérték megadásakor adódott. A kezdőértéknek a differenciálegyenlet-rendszer stabil állapotát lenne célszerű választani. Ezt a feltételezés összekötöttünk azzal, hogy a reaktorokat általában sok ideig stabil teljesítményen tartanak, úgy gondoltuk, hogy a kezdőérték (vagyis a stabil állapot) az ilyenkor megvalósuló izotópösszetétel. Hamar kiderült, hogy ez nagy tévedés. Egyrészt, a stabil reaktorüzem nem azt jelenti, hogy az összes izotóp magsűrűsége állandó, hanem csak azt, hogy a reaktor összteljesítménye állandó. Könnyen látható, hogy egyszerű ellenpélda a nagyon nagy felezési idejű izotópok esete, amelyeknek a magsűrűsége egy kampány alatt folyamatosan nő, tehát sosem állnak be állandó magsűrűsége. Másrészt, a differenciálegyenlet-rendszert vizsgálva megmutatható, hogy nincs egyensúlyi állapot a 0 állapoton kívül. Ezt enyhén árnyékolja az az egyszerűsítés, amivel éltünk, miszerint a forrásvektor csak a fluxussal arányosan változik. Ez azért érdekes, mert a fluxuson kívül még azért is változnia kellene, mert az üzemanyag (ami jelen esetben a négy fő hasadóképes izotópot jelenti) magsűrűsége is változik. Tehát azzal az egyszerűsítő feltételezéssel éltünk, hogy az üzemanyag a vizsgálatunk során állandó, ami jó közelítés, hiszen pár száz másodperc alatt az üzemanyagnak csak elhanyagolható része ég ki. Globálisan vizsgálva a jelenséget már számításba kellene venni, viszont erre nincs módunk, hiszen nem ez a feladat.

3.1. Adatok és elemzésük [3]

A remanens hőteljesítmény számítására általam kidolgozott program a Bateman-egyenletrendszert oldja meg. Ha megvizsgáljuk a (8) differenciálegyenlet-rendszert, akkor látható, hogy a megoldása során szükség van a következő adatokra:

- az anyagok hatáskeresztmetszeteire az energia függvényében;
- az összes anyag magsűrűségére a tranziens kezdetekor, ami a differenciálegyenlet-rendszer kezdőértékvektora;
- az anyagok radioaktív adataira, nevezetesen a következőkre:
 - a felezési idő,
 - a bomlási fajtái,
 - a bomlása során felszabadult energia,

- milyen izotóp keletkezik a bomlásából;
- a hasadóképes izotópok hasadási hozamaira, amely megadja, hogy a különböző izotópok milyen gyakorisággal keletkeznek egy hasadás során;
- a fluxusra az energia függvényében.

A felsorolásban említett nukleáris adatokat három különböző helyről gyűjtöttem össze, a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (NAÜ; IAEA – International Atomic Energy Agency) weboldaláról [6], az ORIGEN, és a Scale programok egy-egy számításából. Az adatok begyűjtésére azért volt szükség, mert a Bateman-egyenletrendszer nem energia- és helyfüggő formában kívántuk megoldani. A helyfüggés kikerülésére a már fentebb említett pontmodellel dolgoztunk. Az energiafüggés megoldására három csoportos közelítéssel éltünk. Az energiafüggést úgy küszöböltük ki ezzel a módszerrel, hogy a három –általunk kiválasztott– energiatartományban az energiafüggő mennyiségeket a vizsgált reaktor fluxusának energiafüggése szerint átlagoltuk. Ennek megfelelően az Bateman-egyenletrendszerben lévő energia szerinti intergálokat ki kellett számítani az általunk kijelölt csoporthatárok között. Például, a $C(E)$ fizika mennyiségnek az x energiacsoportra számított átlagértéke alatt a következő mennyiséget értjük:

$$\bar{C}_x = \int_{E_{min}^x}^{E_{max}^x} C(E) \phi(E) dE, \quad (19)$$

ahol E_{min}^x az x energiacsoport alsó határa, E_{max}^x a felső határa, $\phi(E)$ a fluxus. Amennyiben a fluxus átlagértékét kell meghatározni, úgy a $C(E) \equiv 1$ -et kell behelyettesíteni.

Ez az átlagolás a reaktorfizika nehéz feladatai közé tartozik, a szakdolgozat kereteibe ennek az elvégzése nem fért bele. Az átlagolás eredménye erősen függ a reaktor típusától, ez jelentősen befolyásolja a Bateman-egyenletben felhasználásra kerülő adatokat. A kifejlesztett program használójának lesz majd a feladata, hogy az átlagolást a programban felhasználásra kerülő mennyiségekre elvégezze, hiszen nem egy kifejezett reaktortípusra szerettük volna az eljárást kifejleszteni.⁸

A NAÜ honlapjáról elérhető tartalmak közül a hasadási hozamokat és az anyagok radioaktív tulajdonságait használtam fel. Ezek univerzális adatok, tetszőlegesen pontosan meghatározhatóak megfelelően pontos mérésből, így beépíthetőek a programba anélkül, hogy a felhasználónak kellene őket megadnia. A NAÜ adatok strukturálása szempontjából megemlíteném, hogy a

⁸Ezeket az adatokat a program tesztelése céljából hozta létre Reiss Tibor az NTI-ben.

különböző helyekről származó számítások vagy mérések különböző adatbázisokban vannak tárolva. Én a „JEFF–3.1 Evaluated nuclear data library of the OECD Nuclear Energy Agency” adatbázisból dolgoztam, az adatok formátuma ENDF–6.

A szakirodalomban a hasadási hozamokra különböző definíciók találhatók attól függően, hogy mihez használjuk fel az adatokat. A két jelentősebb, amit az adatbázis is tartalmaz, az a független és a kumulatív hozam adatok. A független hasadási hozam definíció szerint az a gyakoriság, amivel a kiválasztott izotóp a hasadóképes magból direkt keletkezik még a későneutron emisszió, β^- -bomlás, stb. előtt, míg a kumulatív hasadási hozam adott izotópra azt a gyakoriságot adja meg, amivel az keletkezik direkt hasadásból, vagy bármilyen bomlásból, a későneutron emissziót is belevéve. Mi a számításunkban a független hasadási hozamokkal dolgoztunk, mivel arra van szükségünk, hogy a kiszemelt izotóp milyen gyakorisággal keletkezik direkt bomlás következtében, és a differenciálegyenlet-rendszer megoldása során megkapjuk a bomlási láncból adódó, a kumulatív hozamba addíciónálisan járulékot adó tagokat. A hasadási hozam-adatokkal kapcsolatban megjegyzendő, hogy a NAÜ adata három energiacsoportra van kiszámítva (az energiacsoport most a hasadást kiváltó neutron energiáját jelenti), így a számításaink során adottak voltak a következő csoportértékek:

Kisenergiás csoport: $0 \text{ eV} - 2,53 \cdot 10^{-2} \text{ eV}$

Középennergiás csoport: $2,53 \cdot 10^{-2} \text{ eV} - 4 \cdot 10^{+5} \text{ eV}$

Nagyenergiás csoport: $4 \cdot 10^{+5} \text{ eV} - 1,4 \cdot 10^{+7} \text{ eV}$

Ezekre az energiahatárokat végeztük el a (19) egyenlettel definiált átlagolásokat is, hogy megkaphassuk a fenti felsorolásban lévő összes adatot.

3.2. A program felépítése

A feladatkitűzés alapján egy olyan számítási modellt kívántam létrehozni, amely a Bateman-egyenletrendszerrel oldja meg. Először a NAÜ honlapjáról letöltött hasadási hozam adatokból csökkenő sorrendbe rendeztem az izotópokat a hasadásból való keletkezés gyakorisága alapján, ezt mind a négy hasadóképes izotóp mindhárom energiasávjára elvégeztem. Azokat az izotópokat, amelyeknek a hasadási gyakorisága 10^{-4} -nél kisebb, azoknak elhanyagoltam a keletkezésből adódó forrástagját. A 3. táblázat foglalja össze, hogy mekkora elhanyagolásokat tettem az egyes hasadóképes izotópra vonatkozóan. A táblázatban az "Energiasáv" oszlop megadja, hogy a három

energiacsoportból hány csoportra érhetőek el a gyakoriság-adatok. Az "Izotópok száma" megmutatja, hogy a gyakoriság-adatok hány izotópra vannak megadva. A gyakoriságok összege egy energiacsoportra kettő, hiszen a hasadásból két elem keletkezik leggyakrabban, ennek megfelelően a "Gyakoriságok összege" oszlop megmutatja, hogy a megadott számú energiasávra mennyi az összeg, a következő oszlop pedig megmutatja, hogy ebből mennyit használtunk fel a számítási eljárás során.

3. táblázat. A hasadási hozam adatok feldolgozása során tett elhanyagolás

Hasadóképes izotóp	Energiasáv	Izotópok száma	Figyelembe vett izotópok száma	Gyakoriságok összege	Felhasznált gyakoriságok összege	Elhanyagolás egy energiacsoportra
U-235	3	1048	310	6,0056	5,9873	<1%
U-238	2	1050	326	4,0025	3,9932	<1%
Pu-239	2	1112	330	4,0046	3,9993	<1%
Pu-241	2	1081	320	4,0041	3,9934	<1%

Az általam fejlesztett számítási modell alapján a Matlab programban megírtam egy saját programot a remanens hő számítására a Bateman-egyenletrendszer megoldása alapján. A program megírása során komoly nehézséget okozott a hasadásból direkt keletkező izotópokból kiinduló bomlási izotópláncok felállítása. Ezt automatizálni kellett, hiszen a programban nem kívántam a kiindulási elemeket lefixálni, meghagyva ezzel a lehetőségét annak, hogy a számításba tetszőleges keletkezési gyakoriságtól vehessünk fel izotópokat. Az izotóplánc felállítására a következő algoritmust fejlesztettem ki:

A program bemenete a hasadási gyakoriságok alapján kiválogatott izotópok, amikről még csak a keletkezési gyakoriságot tudjuk. Adott még egy adathalmaz, mely tartalmazza minden izotóp összes nukleáris adatát (pl.: felezési idő, bomlási hő, bomlási típusok, stb.). A következő lépéssorozat kellően sok ismétlése után a bomlási sorok összes izotópja szerepelni fog a listában:

- **1. lépés:** Az új ciklusban az ismeretlen nukleáris adatokkal rendelkező izotópok adatainak feltöltése.

- **2. lépés:** Az előző lépésben adatokkal feltöltött izotópok nukleáris átalakulása során létrejövő leány-izotópok meghatározása.
- **3. lépés:** Az átalakulás⁹ során létrejövő új, a listában még nem szereplő, izotópok felvétele a listába.

Ez a ciklus azért fontos része a programomnak, mert itt alakul ki azon izotópoknak az összessége, amiknek a magsűrűségét számítani fogjuk a Bateman-egyenlet megoldása során, a magsűrűségeen keresztül pedig a remanens hőhoz való hozzájárulásukat. A ciklusok közben egy fontos egyszerűsítő feltételezéssel élünk, amivel könnyítünk a megoldáson: ha egy izotópra $\lambda \gg \phi \cdot \sigma$, ahol λ a bomlási állandó, ϕ a fluxus és σ a mikroszkopikus hatáskeresztmetszet, akkor a neutronbefogásból származó fogyás nagyságrendekkel kisebb, mint a radioaktív bomlás, ami miatt a kiégést elhanyagoljuk. Ez azért nagy könnyítés, mert a differenciálegyenlet-rendszer megoldása során a (9) egyenlet alakból indultam ki. Az együtthatómátrix elemeinek tartalmazniuk kellene a kiégést leíró tagot, de ha a fenti feltételezésünk igaz, akkor a kiégést leíró tag elhagyható, ezáltal az együtthatómátrix szerkezete egyszerűbb lesz, így a numerikus megoldás, és a kezelhetőség is egyszerűsödik.

Fontos megemlíteni, hogy a NAÜ honlapján fellelhető, az izotópok nukleáris adatait tartalmazó adatbázisban sok helyen elírási hiba volt, aminek köszönhetően sok időbe tellett a saját programomnak a véglegesítése, mivel minden hibánál külön ki kellett léptetni, kijavítani az adatbázist és újraindítani az algoritmust. Az elírás majdnem az összes esetben a gerjesztési állapotban volt, például az egyik esetben alapállapotú izotópra a gerjesztési állapot számánál egy 9-es szerepelt, ez nyilvánvalóan csak elírási hiba.

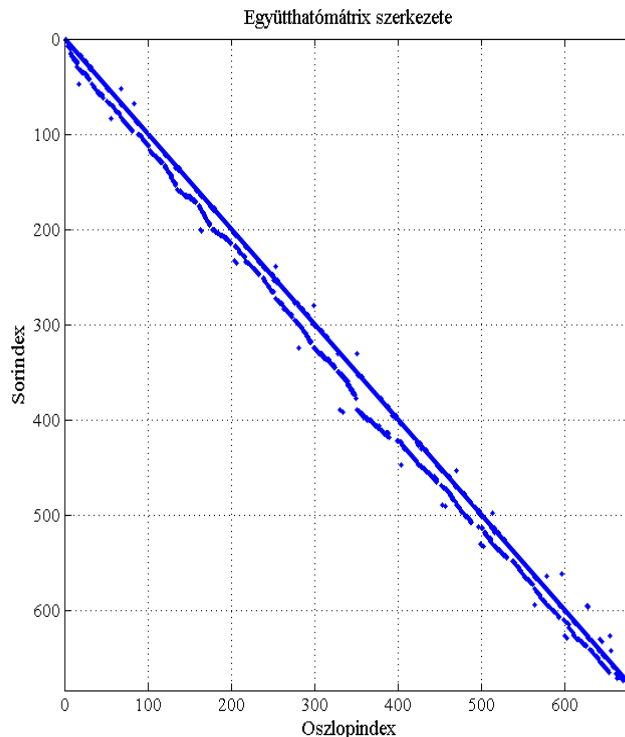
A program a hasadási adatok beolvasásakor pontosan 500 különböző izotóp hasadásból történő direkt keletkezési gyakoriság adatait olvassa be. Ez az alacsony izotópszám a 3. táblázat alapján furcsa lehet, de a különböző hasadóképes izotópból direkt keletkező izotópok között nagy volt az átfedés. A program futásának végétével lett egy adatbázisunk, amelyben 683 izotóp legfontosabb nukleáris adatai vannak benne (az adatok mennyisége ráadásul tetszőlegesen bővíthető, hiszen a NAÜ adatbázisából csak a programhoz szükséges adatok lettek kivonva). Az adatbázis az izotópok azonosítására a szokásos rendszám – tömegszám – gerjesztési állapot¹⁰ hármast használom.

⁹A nukleáris átalakulás alatt a radioaktív bomlást és a neutronbefogást együtt értjük.

¹⁰A gerjesztési állapot n , ha az atommag szerkezete az n -dik gerjesztett állapotban van.

A fentebb leírt algoritmus kifejlesztése a Bateman–egyenletrendszer megoldása szempontjából döntő fontosságú. Papíron a Bateman–egyenletrendszert úgy lenne szükséges megoldani, hogy látjuk, hogy melyik izotópból melyik keletkezik, hiszen az egyenletek így csatolódnak egymáshoz, viszont a NAÜ adatok strukturálása és egységessége lehetővé teszi az átalakulások felírásának automatizálását, amivel hirtelen könnyűvé válik a 683 (!) ismeretlenből álló differenciálegyenlet–rendszer kezelése és megoldása.

Az adatok megfelelő strukturálása után a következő feladatot a differenciálegyenlet–rendszer megoldása jelentette. Differenciálegyenlet–megoldás során rengeteg buktató adódhat a differenciálegyenlet szerkezetéből adódóan, jelen esetben azonban az egyetlen nehézséget az egyenletrendszer nagysága okozta (esetünkben ez 683 változót jelent). Ezt a nagy mennyiségű ismeretlent manuálisan nem lehet kezelni, ezért az előző fejezetben ismertetett (9) egyenlet alakúra alakítottam a differenciálegyenlet–rendszert. Ahhoz, hogy az egyenletrendszer megoldását előkészítsük, meg kell határoznunk a $\underline{B}(t)$ forrásvektort és az $\underline{A}(t)$ együtthatómátrixot. Az előző alfejezetben ismertetett algoritmus segítségével együtthatómátrix előállítható, ha az egyenletrendszerben megtalálható izotópokra egy szigorú sorrendet állítunk fel. Erre a rendszám–tömegszám–gerjesztési állapot sorrendet tartottam alkalmasnak, mert így a bomlások tulajdonságai miatt majdnem alsóháromszög mátrix lesz az együtthatómátrix. A β^+ és a β^- , a főátló különböző oldalain adna járulékot, de a mi számításainkban nincs β^+ bomlás (lásd a hasadási termékek jellemzése alfejezet). Ha az (5)–ös ábrát megvizsgáljuk, akkor láthatjuk, hogy az együtthatómátrix nem alsóháromszög.



5. ábra. A számításomban használt együtthatómátrix nemnulla elemeit kék pontok jelölik az ábrán. Ezt a Matlab beépített `spy()` parancsának segítségével készítettem.

Nagyon kevés eleme található a diagonális felett, ezek kizárólag az alfa bomlás miatt vannak. Mivel a számításainkban nem szerettünk volna további feltételezésekkel élni, ezért ezt a bomlásfajta benne hagytuk a rendszerben, aminek következtében nem lehetett egyszerűbb eljárást kifejleszteni, ami specifikusan az alsóháromszög mátrixokra alkalmazható. Itt arra gondolok, hogy ebben az esetben a mátrix soraiban lefelé haladva egy egyváltozós inhomogén függvény-együtthatós differenciálegyenletet kellett volna megoldani, amire léteznek kidolgozott módszerek. Azért egyszerűsödik le annyira, mert az n -edik izotópot csak az előző $n - 1$ befolyásolja, a következők nem. Ha van a diagonális felett nemnulla elem, az azt jelenti, hogy egyenletrendszert kell megoldani, mint ahogy azt ebben a dolgozatban is tettem.

Az előző rész alapján az itt kidolgozott algoritmus lépései a következők voltak:

- A ciklus bemenete az izotópok sorszámozása a rendszám–tömegszám–gerjesztési állapot szerint.
- Az i -dik lépésben kiválasztom az i -dik izotópot, megvizsgálom a bomlási típusait (ha az

"i" izotópból a "j" izotóp keletkezik, akkor a mátrix [ji] elemébe pozitív előjellel kerül be az együttható) és a keletkező leányelemnek megfelelő helyre az együtthatómátrixba beírom az együtthatót.¹¹

Miután végigmentünk az összes izotópon, előállt az együtthatómátrix, ami a differenciálegyenlet rendszert meghatározza.

A forrásvektornak az i-edik izotópra vonatkozó tagját sokkal könnyebb előállítani:

$$B_i(t) = \sum_{\alpha,j} p_i^* \cdot \Sigma_{\alpha}^j \cdot \phi^j(t), \quad (20)$$

ahol p_i^* a hasadási gyakoriság, Σ_{α}^j az α jelű hasadóképes izotóp makroszkopikus hatáskeresztmetszete a j-edik energiasávra átlagolva ($\Sigma_{\alpha}^j = \sigma_{\alpha}^j \cdot N_{\alpha}$, ahol σ_{α} a mikroszkopikus hatáskeresztmetszet, N_{α} pedig a magssűrűség), ϕ^j a j-edik energiasávra átlagolt fluxus. Az összegzést a négy hasadóképes izotóp mindhárom energiasávjára el kell végezni, tehát egy adott keletkező elemre ez egy 12 tagú összeg, ami a fluxus miatt időfüggő, de könnyen kezelhető. Fontos megemlíteni, hogy a reaktor működése során a hasadóanyag-készlet folyamatosan fogy, ezáltal a tranziensben is figyelembe kellene venni, hogy az idő előrehaladtával a forrástagot adó hasadóanyagaink fogynak, ezáltal csökkentve a forrástagot. Mivel az általunk számított tranziens maximum 1000 másodperc, az alatt az idő alatt a hasadóanyagoknak egy elhanyagolhatóan csekély, még ezrelékben sem kifejezhető mennyisége fogy el, ezáltal logikus, és teljesen jogos könnyítés, hogyha erről a fogyásról elfeledkezünk. Miután ilyen módon előkészítettük az adatokat, elkezdhetjük a differenciálegyenlet-rendszer megoldását.

3.2.1. Mátrix kondicionáltsága

Vizsgáljuk meg az együtthatómátrixot, hiszen az determinálja a megoldási módszer típusát! A legfontosabb észrevétel, hogy a főatlóban a radioaktív bomlásból származó bomlási állandó mínusz egyszerese áll (ahol a neutronbefogás nem elhanyagolható, ott az annak megfelelő együttható mínusz egyszerese is megjelenik, mint az izotóp fogyása). A bomlási állandóról pedig tudjuk, hogy $\lambda = \ln 2 / T_{1/2}$. Egy differenciálegyenlet-rendszer megoldásánál a legfontosabb, hogy a mátrix megfelelően kondicionált legyen. Ehhez a felezési időket kell megvizsgálunk. Az már

¹¹Az együttható (η) kétfajta lehet: ha bomlás következtében jön létre az adott leánymag, akkor $\eta = p \cdot \lambda$, ahol p a bomlási típus gyakorisága, λ a bomlási állandó; hogyha neutronbefogás révén, akkor $\eta = \sigma \cdot \phi$, ahol σ a mikroszkopikus hatáskeresztmetszet, ϕ pedig a fluxus. A fluxus beírása miatt az együtthatómátrix is időfüggő lesz, amit a Matlab programban a cella típussal könnyen lehet kezelni.

sejthető volt, hogy a felezési idők elég széles spektrumot ölelnek fel, amit az adatok megvizsgálásával konstatálhatunk. Egy mátrix kondíciószáma:

$$\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\| \quad (21)$$

egy tetszőleges mátrixnormában. Legyen ez most a maximumnorma. Ekkor:

$$\|A\| = \max_i \left\{ \sum_j |A_{ij}| \right\} \quad \text{és} \quad \|A^{-1}\| = \max_i \left\{ \sum_j |[A^{-1}]_{ij}| \right\}. \quad (22)$$

Nagyon durva becslés, de nem ésszerűtlen, hogy vegyük A normájának A legnagyobb elemét, A^{-1} normájának pedig A legkisebb elemének a reciprokát. Ha az $A(t)$ együtthatómátrixra ezt kiszámoljuk, akkor a legkisebb felezési időnek a reciprokát és a legnagyobb felezési idő számértékeit szorozzuk össze. Tetszőlegesen kiválasztottam ide egy kis felezési idejű elemet, és egy nagy felezési idejű elemet (nem a legkisebbet, és a legnagyobbat), csak hogy szemléltessem a kondíciószámot.

$$T_{min} < 5,99 \cdot 10^{-1} \quad T_{max} > 3,891050 \cdot 10^8 \quad (23)$$

Ebből következik, hogy:

$$\kappa(A) > \frac{T_{max}}{T_{min}} = \frac{3,891050 \cdot 10^8}{5,99 \cdot 10^{-1}} = 6,4959 \cdot 10^8 \quad (24)$$

3.2.2. Numerikus séma

A megoldás során reméltem, hogy a Matlab beépített megoldó eljárásai (rutinjai) között akad olyan, amelynek sikerül megoldania a differenciálegyenlet-rendszerünket, de ilyet nem találtam. Próbálkoztam még magasabb rendű megoldási sémákat is tesztelni, de vagy a stabilitással akadtak gondok, vagy nem tudta megoldani a differenciálegyenlet-rendszert a rutin. Ezért a lehető legegyszerűbb megoldási eljárást követve az explicit Euler módszert dolgoztam át. A megoldandó egyenlet:

$$\frac{d\underline{N}(t)}{dt} = \underline{A}(t) \underline{N}(t) + \underline{B}(t). \quad (25)$$

Ebből a következő sémát lehet felírni:

$$\frac{\underline{N}^{k+1} - \underline{N}^k}{\Delta t} = \underline{A}^k \underline{N}^k + \underline{B}^k. \quad (26)$$

Ami a következő időlépésre a következőt szolgáltatja:

$$\underline{N}^{k+1} = \underline{N}^k + \Delta t \underline{A}^k \underline{N}^k + \Delta t \underline{B}^k. \quad (27)$$

Ahhoz, hogy ez az elsőrendű közelítés megállja a helyét, szükséges, hogy a jobb oldal második és harmadik tagjának összege nagyságrendekkel kisebb legyen, mint a jobb oldal első tagja. Ezt azt jelenti, hogy egy időlépés alatt a magsűrűség megváltozásának a nagyságrendje a magsűrűség nagyságrendjétől kisebb kell, hogy legyen. Könnyen meggondolhatjuk, hogy ez a Δt időlépésre ad megkötést. Ennek kisebbnek kell lennie, mint a vizsgált izotópok közötti legkisebb felezési időnek. A vizsgálatunkban azonban ez μs nagyságrendű lépésközt jelent, amivel a számításunkhoz szükséges 300–1000 másodperces szimulációt nagy számításigénnyel lehet csak elvégezni. Itt is szeretnénk kihangsúlyozni azt a közelítést, amivel ezt megkönnyítendő számoltunk. Úgy vettük, hogy az általunk vizsgált tranziens idejénél nagyságrendekkel kisebb felezési idejű izotópok a fluxus aktuális értéke által megszabott egyensúlyi magsűrűségekre állnak be. Ezt a felezési idő határt 1 másodperccnek vettük. Tehát az 1s-nél kisebb felezési idejű izotópokra igaz lesz az minden időrétegen, hogy a fogyásuk és a keletkezésük egyensúlyt tart. Az ennél nagyobb felezési idejű izotópokra pedig úgy választjuk meg a lépésközt, hogy a változás kis mértékű legyen. A lépésközt a számításainkban $\Delta t = 0,1s$ -nak vettük. Ez így szóban egyszerűen elmondható, azonban érezhető, hogy az általunk kis felezési idejű izotópoknak nevezett csoportot nem egyszerű kezelni. Ennek a kezelésére a következőket tettem. Ehhez először gondoljuk végig, hogy hol vezethet ez a közelítés nehézségre. Az egyik, amikor a kis felezési idejű izotóp $k + 1$ -edik időrétegbeli magsűrűség értékét számítjuk, a másik, amikor egy, nem ebbe a felezési idő tartományba eső, izotóp $k + 1$ -edik időrétegbeli magsűrűségébe való járulékát számítjuk a rövid felezési idejű izotópoknak.

Lássuk először, hogy mit tehetünk, ha egy hosszabb felezési idejű izotóp egy rövidebből keletkezik. Azt kell ilyenkor látni, hogy a $\Delta t \underline{A}^k \underline{N}^k$ tag nem viselkedik jól. Írjuk fel az egyenletet a j -edik tagra, ekkor:

$$N_j^{k+1} = N_j^k + \Delta t \underline{A}_j^k \underline{N}^k + \Delta t B_j^k. \quad (28)$$

Ennek az egyenletnek a jobb oldalának a második tagjában van az benne, hogy más elemek kapcsolódhatnak ehhez az elemhez kiegészítő következtében. Tegyük fel, hogy a kis felezési idejűek közül csak az x indexű kapcsolódik vele. Ekkor ennek a járuléka a $k + 1$ időrétegen lévő magsűrűséghez:

$$\Delta N_j^{k+1} = \Delta t A_{jx}^k N_x^k. \quad (29)$$

Arról már beszéltünk, hogy az A_{jx}^k mátrixelem arányos a bomlási állandóval, amivel:

$$\Delta t A_{jx}^k = \Delta t \Theta \frac{\log 2}{T_{1/2}}, \quad (30)$$

ahol $\Theta \in [0, 1]$ az arányossági tényező. A kis felezési idejű izotópokra igaz lehet a közelítésünkben, hogy $\frac{\Delta t}{T_{1/2}} \gg 1$, így az x indexű elemből származó növekedése a k indexű elem magsűrűségének nagyobb lehet, mint a k -adik időrétegen az x indexű elem magsűrűsége. Ez azért van, mert ezekre a kis felezési idejű izotópokra ez az elsőrendű közelítés nem igaz. Ehelyett használjuk a következő formulát:

$$\Delta N_j^{k+1} = N_x^k \Theta \left(1 - 2^{-\frac{\Delta t}{T_{1/2}}} \right). \quad (31)$$

Ez akkor lenne igaz, ha a k és a $k + 1$ időrétegek között az x indexű anyag csak fogyna, így ez is csak közelítés, de a numerikus megoldhatóságot elősegíti. Megfogalmazhatjuk úgy is, hogy a kis felezési idejű izotópokra azzal a feltételezéssel élünk, hogy csak diszkrét, az általunk vizsgált, időpillanatokban változtatják meg az értéküket, és a pillanatbeli érték a fluxus aktuális értéke által meghatározott egyensúlyi érték. Fontos, hogy ez egy kontrollálatlan közelítés. Nem lehet nyomon követni, hogy éppen mekkora hibát ejtettünk vele, mindazonáltal csináljuk így, mert máshogy sokkal nehezebb (és talán megoldhatatlan is), majd a végeredmény megmondja mennyire vagyunk pontatlanok.

Most vizsgáljuk meg azt az esetet, amikor egy rövidebb felezési idejű izotóp $k + 1$ -edik időrétegbeli magsűrűségét kell meghatároznunk. Induljunk ki a (25)-es egyenletből:

$$\frac{dN(t)}{dt} = \underline{A}(t) \underline{N}(t) + \underline{B}(t)$$

Erre most az igaz a feltételezésünk szerint, hogy mindig beáll egyensúlyba, tehát a bal oldal mindig nulla.

$$0 = \underline{A}(t) \underline{N}(t) + \underline{B}(t) \quad (32)$$

A vizsgált izotóp indexe legyen megint x , és a k -adik időrétegen szeretnénk megadni a magsűrűségét. Ezzel kapható:

$$\sum_j A_{xj}^k N_j^k = -B_x^k \quad (33)$$

$$A_{xx}^k N_x^k + \sum_{j \neq x} A_{xj}^k N_j^k = -B_x^k \quad (34)$$

Amiből kapható, hogy:

$$N_x^k = \frac{-B_x^k - \sum_{j \neq x} A_{xj}^k N_j^k}{A_{xx}^k} \quad (35)$$

$$N_x^k = \frac{B_x^k + \sum_{j \neq x} A_{xj}^k N_j^k}{|A_{xx}^k|} \quad (36)$$

Ez általában csak impliciten kiszámítható, hiszen ha két rövid felezési idejű izotóp is van egy bomlási láncban, akkor egyenletrendszert kell megoldani ahhoz, hogy az N_x^k mennyiségek kifejezhetőek legyenek. Ezért a dolgozatban a számítást megkönnyítettük azzal, hogy a következőként vettük a rövid felezési idejű izotópok $k + 1$ időlépésen vett értékét:

$$N_x^{k+1} = \frac{B_x^k + \sum_{j \neq x} A_{xj}^k N_j^k}{|A_{xx}^k|} \quad (37)$$

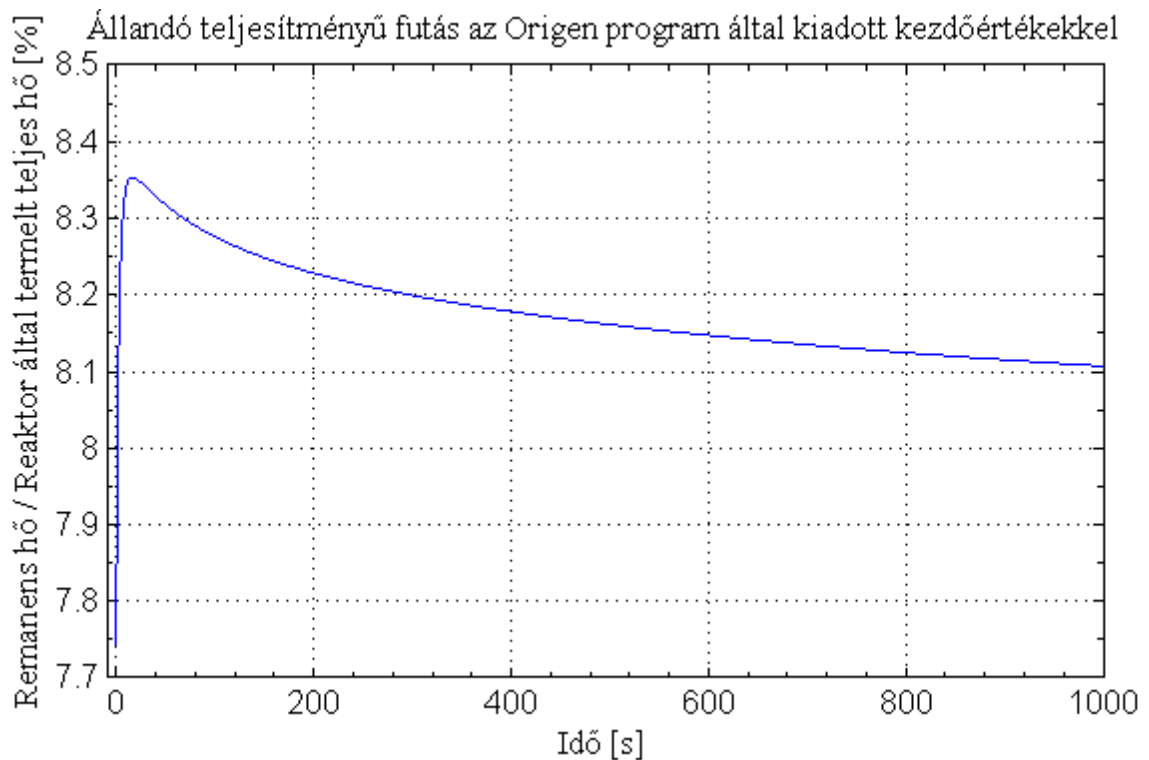
Ez csak akkor lenne igaz, hogyha a jobb oldalon is a $k + 1$ időlépésen vett értékekkel számolnánk, azonban reméljük, hogy nem követünk el ezzel nagy hibát. Ez szintén egy rosszul kontrollált közelítés, mivel nem tudjuk mekkora hibát vétetünk azzal, hogyha egy időlépéssel elcsúsztatva számoljuk a rövid felezési idejű izotópok magasságát.

Ennek megfelelően a differenciálegyenlet-rendszert megoldó rutin-részt már össze lehet állítani és lehet tesztelni. Kipróbáltam egyszerűbb, kisebb méretű mátrixokra az általam megírt differenciálegyenlet-rendszer megoldó rutint és összehasonlítottam a Matlab eredményével¹², illetve ahol lehetett, ott analitikus megoldással is összevettem. A tesztelés eredménye alapján kijelenthető, hogy egy megfelelő rutint sikerült megírni.

¹²Olyan kisebb mátrixokra végeztem el a tesztelést, amelyeket a Matlab beépített rutinjai még meg tudtak oldani.

3.3. Eredmények

A bevezetőben már megemlítettük, hogy a kifejlesztett eljárással azon jelenségekben szeretnénk modellezni a remanens hő időbeli lefutását, amikor a teljesítménymérésekkel az nem kivitelezhető. A teljesítménymérés a körülbelül 300 másodperces időintervallumon nem áll rendelkezésre, tehát ilyen tranziensekben modelleztünk tranzienseket. Fontos megemlíteni, hogy a tranziensek kitalálásánál fő motiváló szempont a valós jelenségek leírása volt, tehát az életben előforduló 300 másodperces tranzienseket vizsgáltunk. Ezen tranziensekben a remanens hő számítását egy paksi kazettára végeztük el, feltételezve, hogy a kazetta hasadási teljesítménye 4MW, és már fél éve használják a reaktorban. Lokális egyensúlyt tételeztünk fel, ami azt jelenti számunkra, hogy a reaktor a tranziens megelőzően a tranziens lezajlásához képest elég hosszú ideig (pl.: néhány napig) 100%-os teljesítményszinten működött. Erre azért van szükség, mert akkor az izotópok, a nagyon nagy felezési idejű izotópokat leszámítva, kvázi-egyensúlyban vannak. Ez azt jelenti, hogy fogyásuk és a keletkezésük majdnem egyensúlyban van, a növekedés nagyon kis ütemű. Ha a neutronbefogásról teljesen elfelejtkeznénk, akkor itt kvázi helyett tényleges egyensúlyról lehetne beszélni (persze még ez is közelítés, mert a hasadóanyag-készlet még így is fogy – ezáltal a differenciálegyenlet-rendszerben a forrás tag csökken –, még ha ez a változás nagyon lassú is). Tehát a lassú növekedés főként a hasadásból keletkező stabil magok neutronbefogása miatt van jelen. A nagyon nagy felezési idejű izotópok magsűrűsége (persze itt a nagyon nagy idő megint a tranzienshez képest értendő) sohasem fog egyensúlyba beállni, mindig növekedni fog. A mi tranziensünkben ezek csak háttérként vannak jelen, tehát a változásban nem játszanak szerepet.

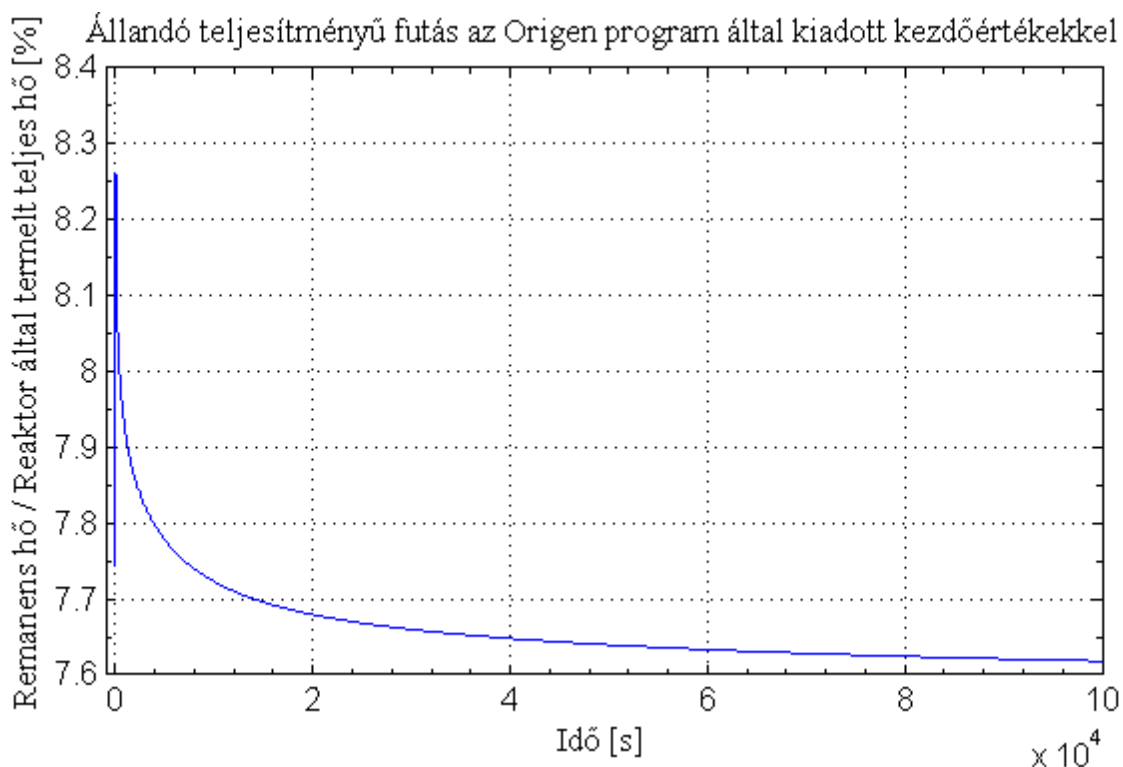


6. ábra. A remanens hőteljesítmény százalékos arányának időbeli változása a reaktor teljes hőteljesítményénél belül (állandó teljes hőteljesítmény mellett) az ORIGEN program által szolgáltatott kezdeti magssűrűségvektor felhasználása esetén

Az általam megírt saját program tesztje az állandó teljesítmény, azaz az állandó fluxus esete. Az eredmény, mint az az 6. ábrán is látható, erősen változó remanens hőt adott, ami természetesen irreális; a remanens hőnek nem kell állandónak sem lennie, enyhén növekednie kellene. Az ORIGEN eredeti kezdőértékei¹³ nem adtak megfelelő eredményt az állandó teljesítményű esetre. Az eltérés oka nagy valószínűséggel abból származik, hogy a kezdőértékek számítására használt ORIGEN programbeli és a NAÜ oldaláról elérhető nukleáris adatok különböznek egymástól. A hiba kiküszöbölése végett az általam írt programot nem az átlagos 1000 másodperces tranzienstre alkalmaztam, hanem hosszabb idejű szimulációt végeztem el vele, ami ebben az esetben 100000 s volt, ami valamivel több, mint egy nap (~27,8 óra). Ez a hosszabb futás a kezdőértékek meghatározásában játszott nagy szerepet. Az is látható, hogy a remanens hőteljesítmény aránya

¹³A differenciálegyenlet-rendszert a hasadási termékek magssűrűségére írtam fel, tehát a kezdeti érték a hasadási termékek magssűrűségei a $t = 0$ időpillanatban.

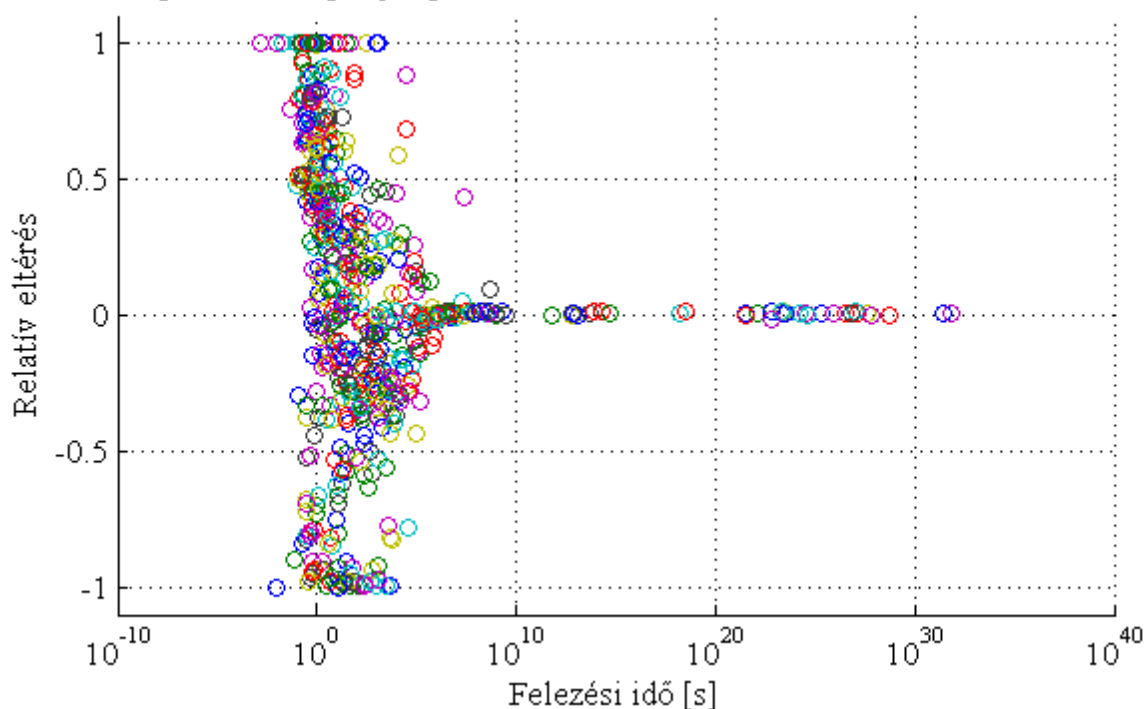
idővel stabilizálódik 7,6% körül. Ezután az állandó teljesítményű eset már olyan lassú változást mutatott, ami elfogadható volt. Ez a hosszabb futás tulajdonképpen a két, ugyanazokat a nukleáris adatokat tartalmazó, de sok adatban eltérő adathalmaz különbözőségét csiszolta helyre. A futás eredményeként stabilizálódó, általam egyensúlyinak tekintett magssűrűség-vektorral ha újra lefuttattam az állandó teljesítmény tesztfutását, akkor már helyes eredményt kaptam. Ezek után már tudtam tranzienseket számítani.



7. ábra. A remanens hőteljesítmény százalékos arányának időbeli változása a reaktor teljes hőteljesítményén belül 10^5 másodpercig (állandó teljes hőteljesítmény mellett) az ORIGEN program által szolgáltatott kezdeti magssűrűségvektor felhasználása esetén

A kezdetiérték-vektor ilyen szintű manipulálása természetesen egy elég nagy eltérést okoz a kezdőértékekben, de nem találtam más megoldást az adatok különbözőségeinek a kiegyengetésére. A 100000 másodperces futás végén beálló és egyensúlyinak tekintett kezdőérték-vektor és az ORIGEN által megadott kezdőérték-vektor összehasonlítása végett készítettem egy grafikont, ami a felezési idő függvényben ábrázolja az általam használt és az ORIGEN programból exportált kezdőértékek különbségét.

Eltérés vizsgálata az Origen program által kiadott és az általam felhasznált kezdőértékekben



8. ábra. Az ORIGEN program által számított és az általam felhasznált (egyensúlyinak tekintett) magssűrűségek relatív eltérése a felezési idők függvényében. Minden egyes karika egy-egy izotópnak felel meg

A relatív eltérést az y—tengelyen a következő képlettel definiáltam:

$$\text{Relatív eltérés} = \frac{\text{KÉP} - \text{KÉO}}{\max\{\text{KÉO}; \text{KÉP}\}} \quad (38)$$

KÉO = Kezdőérték az Originből; KÉP = Felhasznált kezdőérték a programban;

Ez egy -1 és $+1$ közé eső szám. $+1$ -et vesz fel az értéke, ha az én általam felhasznált kezdőérték nagyságrendekkel nagyobb, mint az ORIGEN által kiszámított kezdőérték, -1 -et, ha fordítva igaz a nagyságrendi eltérés.

Jól látható, hogy a nagy felezési idejű izotópoknál ($T_{1/2} > 10^5 s$) nincs jelentős eltérés, tehát a két program által számított háttér, ami ráül a tranziensre, az jelentősen nem térhet el egymástól.¹⁴

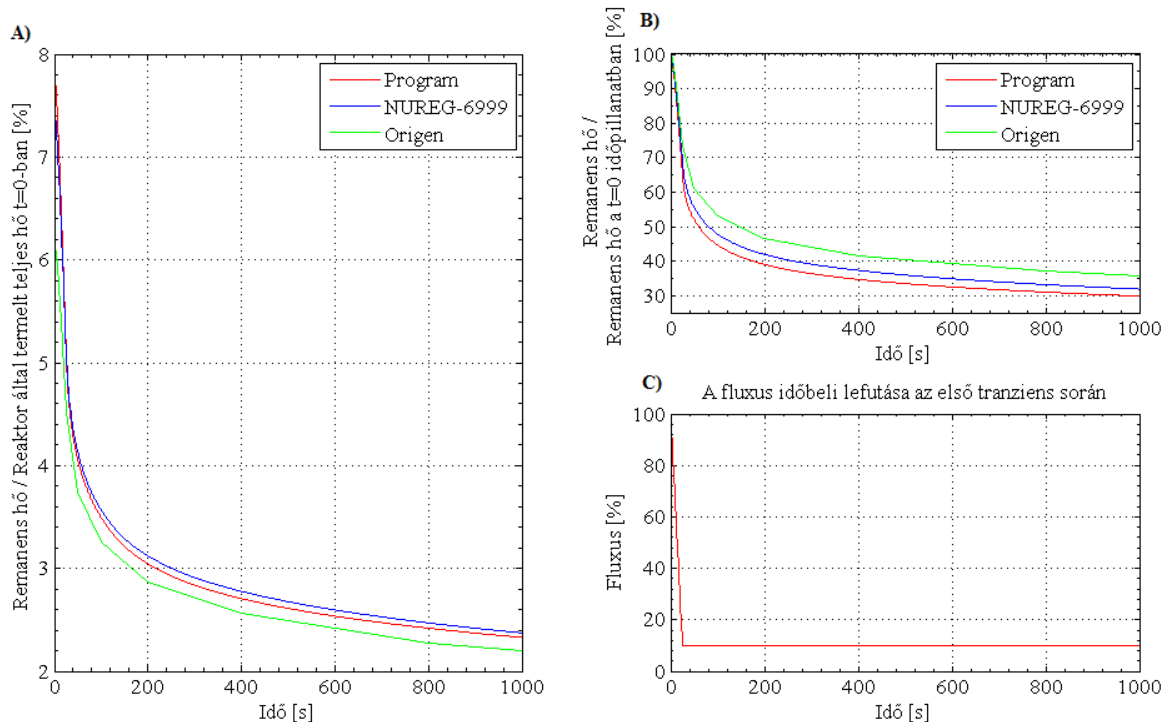
¹⁴A nagy felezési idejű izotópok fogyása az általunk vizsgált 300–1000 másodperces tranziensben elhanyagolható. Emiatt a remanens hőhöz való hozzájárulásuk sem változik abszolút értékben, ezért tekinthetünk rájuk úgy, mintha egy addicionális háttérsugárzásként lennének jelen.

Ennél alacsonyabb felezési időkre nem fedezhető fel szisztematikus hiba, mindkét irányban vannak jelentős eltérések. Viszont az is szembevetendő, hogy 1 s körüli felezési időknél az y-tengely $+0,3 - +0,8$ intervallumán jelentősen több pont helyezkedik el, mint „vele átellenben”. Ez azt jelenti, hogy ilyen kis felezési időre az általam felhasznált programbeli kezdőértékek sokkalta nagyobbak, mint az általunk etalonnak használt ORIGEN programban. Ebből a következő konklúzió is levonható, ha figyelembe vesszük, hogy a kis felezési idejű izotópok szinte egyenesen arányosak a fluxussal. Amennyiben az általunk számított tranzienst nagyon lecsökken a fluxus, tehát a reaktorban nagy teljesítménycsökkenés következik be, akkor az ORIGEN és a saját programom eredménye nagyon közel lesz egymáshoz, viszont ha a fluxus még viszonylag nagy érték marad, akkor az általam fejlesztett program eredménye nagyobb lesz, mint az ORIGEN program által számított eredmény.

A szakdolgozatban öt tranzienst számítottam ki a remanens hőteljesítményt. A saját programom számítási eredményeit még két, a már fentebb részletezett (ORIGEN és NUREG-6999) eljárás eredményével is összevetettem. A tranziensekben közös, hogy rövid ideig tartanak, viszont a fluxus időfüggése minden esetben más.

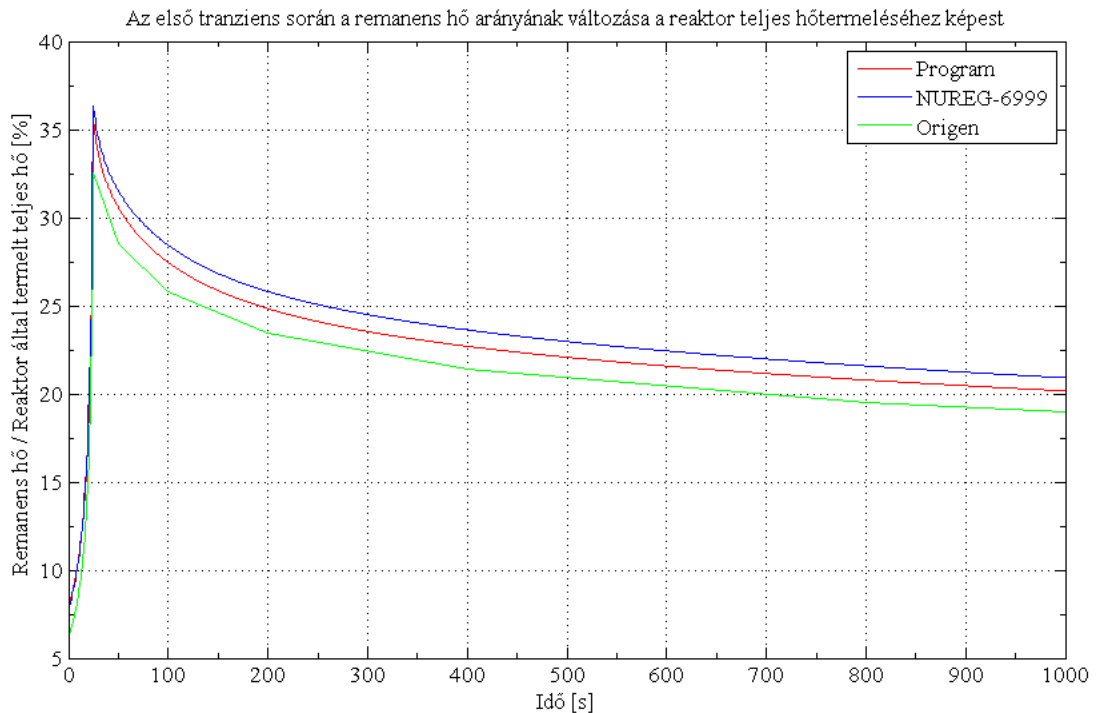
3.3.1. Az első tranzienst [3]

Az első tranzienstben a fluxus 100%-ról 25 másodperc alatt 10%-ra csökken, majd ott marad egészen a számítás végét jelentő 1000 másodpercig. A számításainkat három különböző programmal is elvégeztük, az általam írt programot egyszerűen csak saját programnak fogom hívni, az U.S.NRC háttéranyag alapján megírt programkódra a NUREG-6999 névvel hivatkozom, amint azt már az előzőekben is említettem, az ORIGEN számításait pedig kézenfekvően ORIGENnek hívom. A három eredmény közül az ORIGEN eredményét egyértelműen a helyes eredménynek fogom tekinteni, ezáltal azt ellenőrzésre használom. A 9. ábrán látható 3 grafikon közül a C jelű a fluxus időfüggését mutatja, aminek a lefutását már megemlítettük. A 9. ábra A jelű grafikonja azt szemlélteti, hogy a kezdeti időpillanathoz képest, amikor éppen elindult a tranzienst, hogyan változik meg a remanens hő értéke. Jól látható, hogy a kezdeti teljes hőtermeléshez képest a tranzienst elindulásakor – tehát 100%-os üzemenél – 6-8% között van a remanens hő aránya, addig a tranzienst végén erősen lecsökken ez a szerep. A B jelű grafikonon a három különböző módszerrel számított remanens hőteljesítmény relatív, sajátmaga kezdeti értékéhez viszonyított arányának időbeli változását szemléltetjük.



9. ábra. Az első tranzien eredménye

A grafikonok alapján egészen jól látható hasonlóságot tapasztalunk a három független eredmény között. Ebben nagy szerepe van a fluxus nagymértékű csökkenésének. A relatív viszonyokon jól látszik, hogy a kezdeti remanens hő 1000 másodperc alatt a 30–40%-ra esett le, ami azzal van összefüggésben, hogy a kisebb felezési idejű izotópok mennyisége szinte egyenesen arányos a fluxussal. Mivel ezeknek a magssűrűsége a fluxus változását követve gyorsan lecsökken, ezért a remanens hőtermelés is erősen csökken és csak a hosszabb felezési idejű izotópok lassan csökkenő háttéré marad meg.



10. ábra. Az első tranziens során a remanens hő arányának változása a reaktor teljes hőtermeléséhez képest

Végül a 10. ábrát azért tartottam még fontosnak, mert az előző ábrahármass B jelű grafikonján csak a relatív változásokat mutattuk be. Ezzel az a gond, hogy a fluxus csökkentése során a teljes hőtermelés is csökken, ezáltal a csökkenő remanens hőjárulékot a már lecsökkent teljes hővel kell elosztani, hogy az elszállításra kerülő teljes hő remanens hő részét megfelelően megkaphassuk. Ezt ábrázolja a 10. ábra. Egy kis eltérés a három eredmény között természetesen látszik, de megállapítható, hogy a remanens hő – ilyen nagyarányú teljesítményesítés közben – nagymértékben megnő a kezdeti 6–8%-os hozzájárulásáról és mintegy 33–37%-os részarányra is szert tesz.

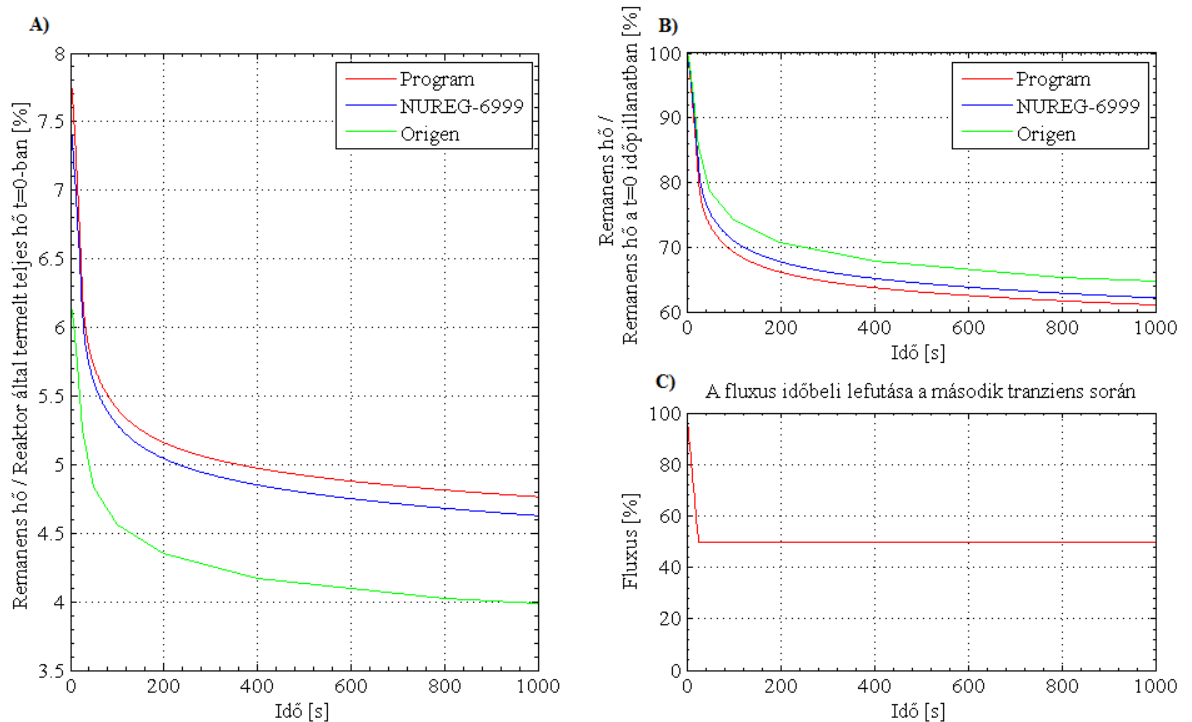
A grafikon elkészítéséhez a számítások elvégzésekor egyszerűsítéssel éltem, mert a teljes hőt egyszerűen két részre bontottam, az egyik a remanens hő, amelyet pontosan számítjuk, illetve a „maradék”, amiről feltételeztem, hogy a fluxussal egyenesen arányos. Ezekből a teljes hő a kettő összegeként áll elő, ilyenformán egyszerűen megkapható a vizsgálni kívánt remanens hő – teljes teljesítmény arány.

A teljes teljesítmény a $t = 0$ időpillanatban a $\sum_{\alpha=1}^4 p_{\alpha} \cdot E_{\alpha}$ alakban áll elő, ahol az α -ra történő összegzés a négy hasadóképes izotópot jelöli, p_{α} a hasadási gyakoriság az α jelű izotópra, E_{α} pedig az α jelű izotópból keletkező összes hő, ami izotóponként változó, de nagyságrendileg 200 MeV. A remanens hőt a $t = 0$ időpillanatban egzaktul meghatároztam a számítás során, továbbá felteszem, hogy a fluxussal egyenesen arányos rész $t = 0$ -ban a teljes hő mínusz remanens hő formában határozható meg. Ezt a hőt neveztem "maradék" hőnek (jelölése: $E_{\text{maradék}}$). Ebből a 10. ábrán az y-tengelyen ábrázolt mennyiség:

$$\frac{\text{Remanens hő}}{\text{Reaktor által termelt teljes hő}} = \frac{\text{Remanens hő}}{\text{Remanens hő} + E_{\text{maradék}} \cdot \frac{\phi(t)}{\phi(t=0)}} \quad (39)$$

3.3.2. A második tranziens [3]

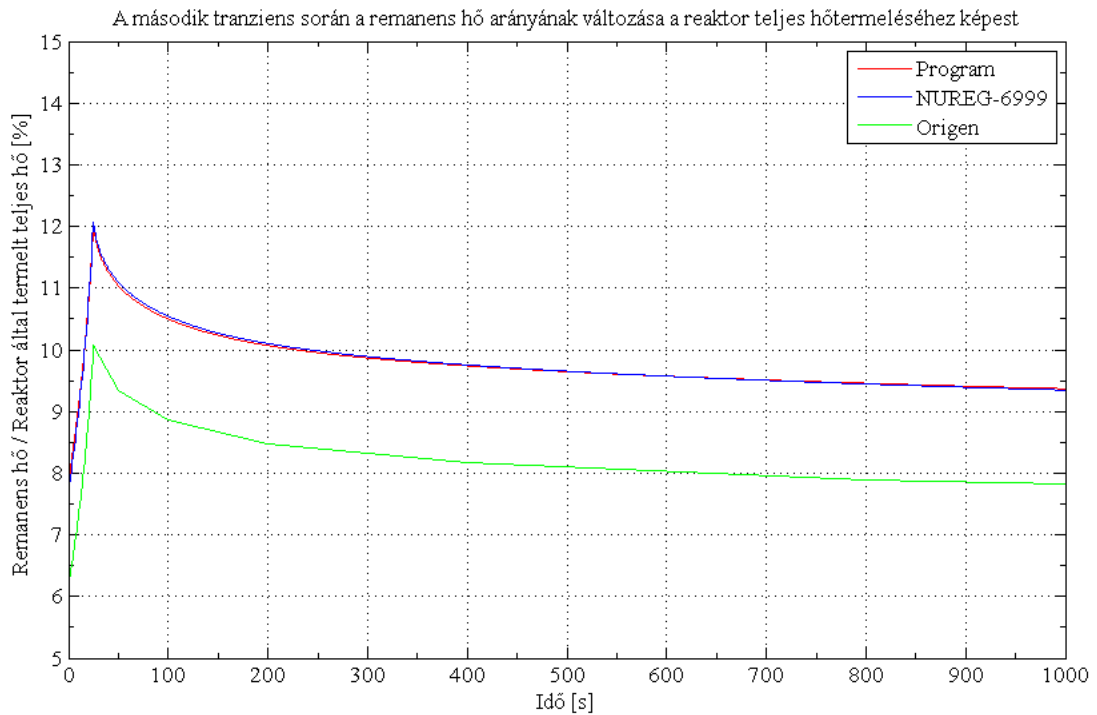
A második tranziensben a fluxus 25 másodperc alatt csökken 50%-ra és utána ott marad. A grafikonok elkészítésében az előző gondolatmenetet követtük, tehát a megfelelő ábrákon ugyanazokat a mennyiségeket ábrázoltuk.



11. ábra. A második tranziens eredménye

A 11. ábra A jelű grafikonján a legszembetűnőbb az, hogy az általunk etalonnak választott ORIGEN program eredménye kb. 0,8%–kal kevesebb remanens hőteljesítmény–részarány jelez, mint amekkorát a másik két számítási módszer adna. Ezeknek az eltéréseknek különböző magyarázatai lehetnek, mert a két másik módszer is merőben eltérő. A programom és az ORIGEN közötti különbségre már felhívtam a figyelmet a 8. ábrával, miszerint az általam egyensúlyi kezdőértékként használt adatok különböznek az ORIGEN által használttól. Kis felezési időkre jelentős többlet mutatkozott az általam használt izotóp–magsűrűségekben, ezért – mint ebben az esetben is – a nagyobb abszolút értékű fluxus a programommal számított eredményt nagyobb-nak adta, mint az ORIGEN eredménye. A NUREG–6999 számítási modell azt feltételezi, hogy a reaktor „végtelen” ideje állandó hasadási teljesítményszintekkel üzemel. Mivel ez a valóságban nem kivitelezhető, jelen esetben sem igaz, hiszen a számításainkat egy fél éve üzemelő paksi kazetta adataira végeztük el. Ezt figyelembe véve érthető, hogy a fél évnél régebben elindított remanens hőteljesítmény lefutásai „felesleges” extraként adódnak hozzá a tényleges értékhez, ezért itt is magasabb értéket prognosztizálhatunk a hiteles ORIGEN eredményhez képest.

A "fél évnél régebben elindított hőteljesítmény lefutások" alatt arra gondolok, hogy a NUREG–6999 rutin a (16) egyenlet szerint számítja a remanens hőteljesítményt. A most vizsgált tranziensben az integrál alsó határának nem a $-\infty$ értéknek, hanem fél évnél kellene lennie. Az integrál alsó határának ilyen jellegű csökkentéséből adódó járulékot feleslegesen adjuk hozzá a remanens hőteljesítményhez.

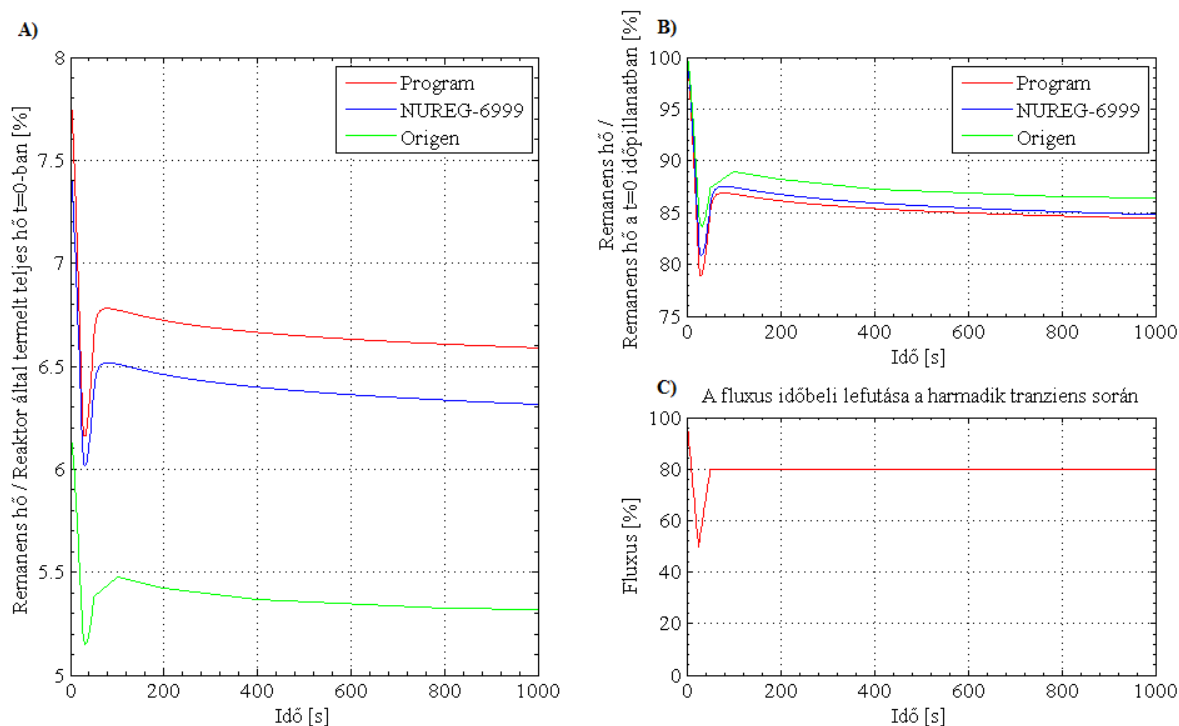


12. ábra. A második tranziens során a remanens hő arányának változása a teljes hőtermeléshez képest

Mint ahogy az várható is, a két egyszerűbb számítási rutin túlbecsüli a remanens hőteljesítményt, mint az ORIGEN számítás. Mindazonáltal szembeűnő, hogy a NUREG–6999 eljárás és az általam írt program nagyon hasonló eredményt ad. Ez már csak azért is meglepő lehet, mert a NUREG–6999 rutin lefutásához milliszekundumok kellenek csupán, az általam fejlesztett program a differenciálegyenlet-rendszer megoldása során órákat emészt fel.

3.3.3. A harmadik tranziens [3]

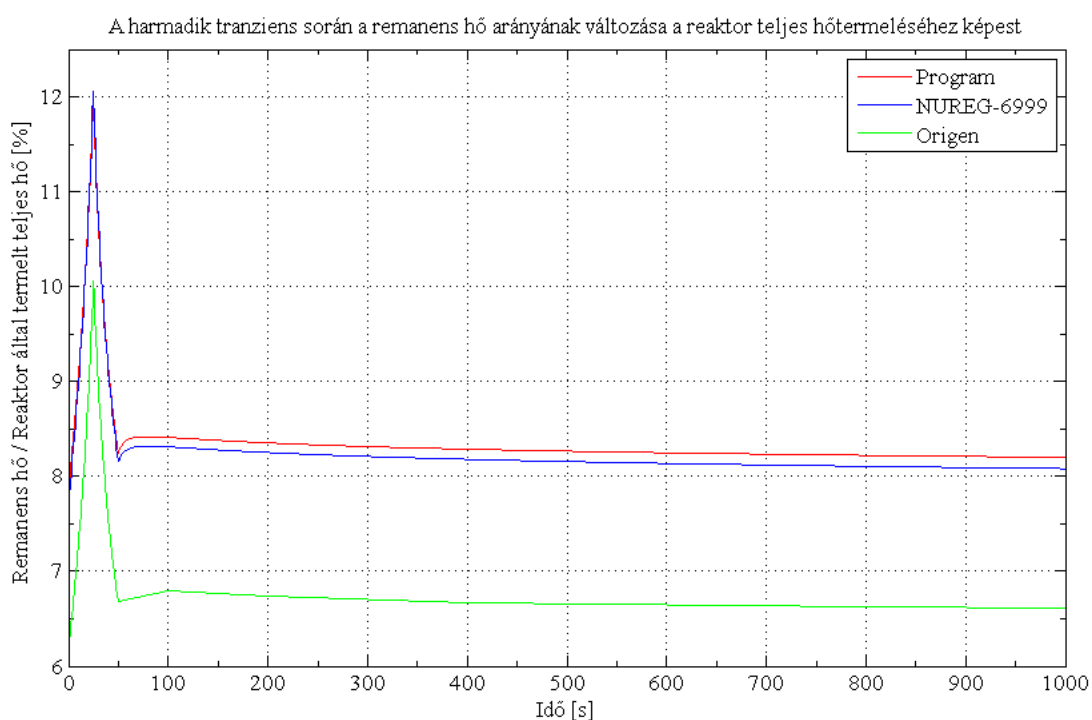
A harmadik tranziensben a fluxus 25 másodperc alatt lecsökken 50%-ra, majd az azt követő 25 szekundumban 80%-ra nő vissza. Az 50. másodperc után állandó 80%-on marad. A grafikonok elrendezése, az ábrázolt mennyiségek ugyanazok.



13. ábra. A harmadik tranziens eredménye

A fluxus relatív megváltozása láthatóan nagyobb, mint az első két tranziensben, tehát a várakozásnak megfelelően a programom eredménye és az ORIGEN eredménye közötti különbség most nagyobb, mint az előző két esetben. A saját programom esetében az eltérés oka világos, azonban a NUREG-6999 modell eltérésére ebben az esetben már nem alkalmazható az előző tranziensre adott magyarázat, miszerint csak azzal van gond, hogy a reaktort nem a „mínusz végtelen” időpillanattól indítottuk (ekkor ugyanis logikailag az következne, hogy kb. ugyanakkora eltérést kellene tapasztalni mindkét esetben, hiszen ugyanaz az effektus okozza az eltérést). Az eltérés oka abban rejlik, hogy a NUREG-6999 számítási modellt, ahogy azt az első fejezetben is említettük, a kiegészített üzemanyag hosszú távú tárolásánál felszabaduló remanens hő számítására fejlesztették ki. A szerzők maguk is jelezték, hogy hosszabb távon jól működik a

modell, rövidtávon lehetnek eltérések, problémák. A modellt ráadásul a reaktorból kivett kazetákra fejlesztették ki, tehát neutron-besugárzásnak már nem szabadna kitéve lenniük a modell alkalmazhatósági keretein belül. Ennek köszönhetően a modell kis időkre nem ad konzisztens, megbízható eredményt, és valószínűleg ezért adja a nagyobb eltérést (egyébként mivel a kivett kazetákra fejlesztették ki, ezért az eltérés itt is arányos kell, hogy legyen a fluxussal, de ennek a kapcsolatnak a feltárása a szakdolgozat kereteibe nem fért bele).

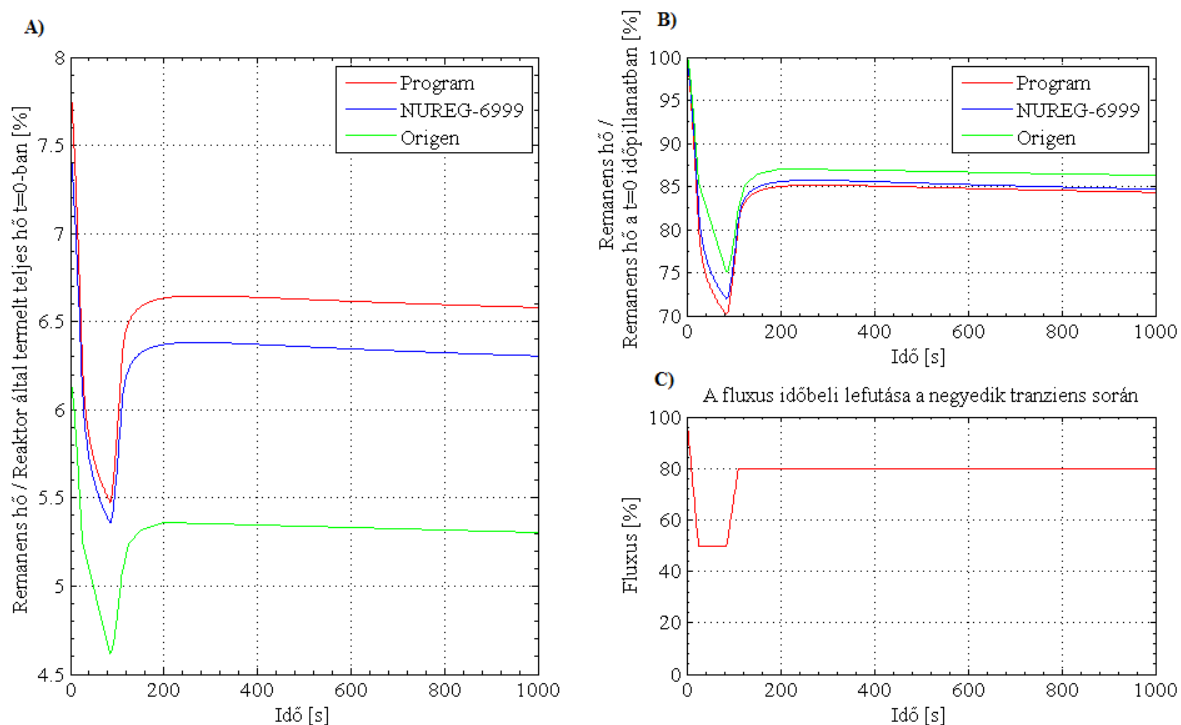


14. ábra. A harmadik tranziens során a remanens hő arányának változása a teljes hőtermeléshez képest

Érthető módon a korrigált remanens hőteljesítmény teljes hőteljesítménybe való részvételét itt is túlbecsülnék a két „egyszerűbb” számítási modellel az ORIGEN eredményéhez képest.

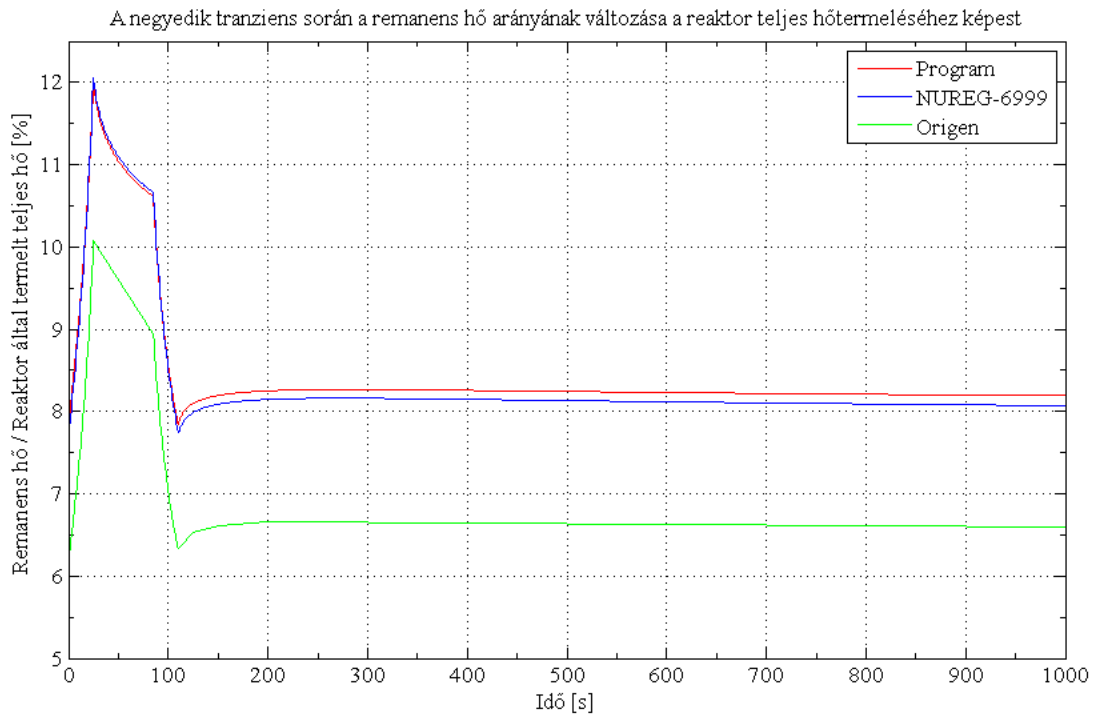
3.3.4. A negyedik tranziens [3]

A negyedik tranziensben a fluxus 25 másodperc alatt 50%-ra csökken, ahol további 60 másodpercre ott is marad. A 85. másodperctől a 110. másodpercig, azaz szintén 25 másodperc alatt visszanő 80%-ra, ahol stabilizálódik.



15. ábra. A negyedik tranziens eredménye

A 15. ábra A jelű grafikonján látható, hogy a magasabb fluxusú tartományon a különbség most is elég nagy a két egyszerűsített modell javára. Azt is észre lehet venni az A jelű grafikonon, hogy a 80. másodpercig a grafikonok közelednek egymás felé, majd amikor a fluxus újra növekedni kezd, akkor a különbség újra nagyobb lesz.

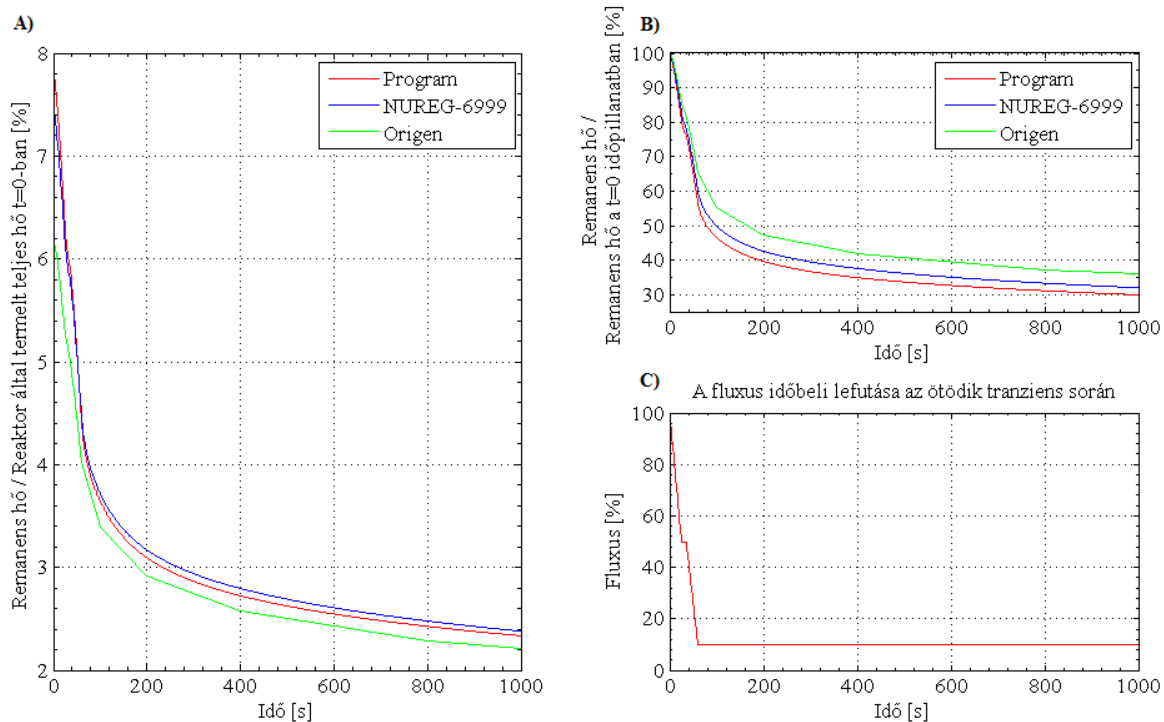


16. ábra. A negyedik tranziens során a remanens hő arányának változása a teljes hőtermeléshez képest

A 16. ábra is a várakozásnak megfelelő eredményt mutat, a két módszerrel (saját program és a NUREG–6999) – a nagy fluxus miatt – megint túlbecsültem a remanens hő részarányát.

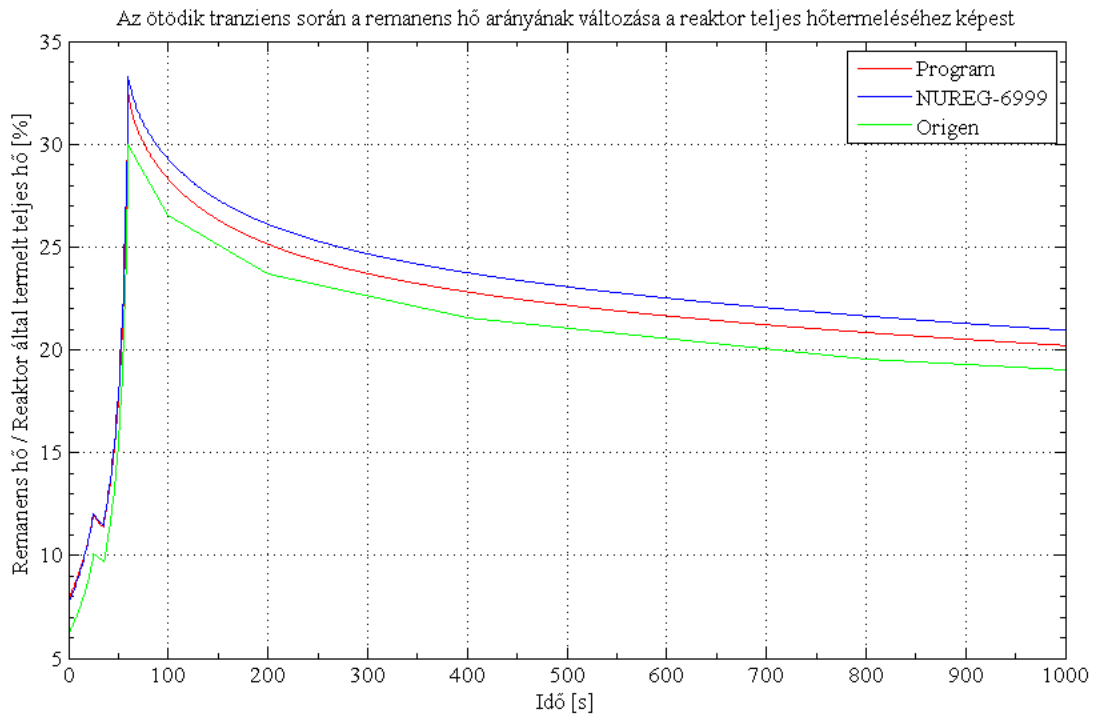
3.3.5. Az ötödik tranziens [3]

Az ötödik tranziens nagyon hasonló az első tranzienshez, annyi különbséggel, hogy 50%-on 10 másodpercig állandó, mielőtt újra csökkenni kezd a teljesítmény.



17. ábra. Az ötödik tranziens eredménye

A várakozásnak megfelelően ezek a grafikonok nagyon hasonlítanak az első tranziensben kapottakhoz. Megfigyelhető, hogy a kis fluxusú tartományon a három módszer elég pontosan ugyanazt az eredményt adja.

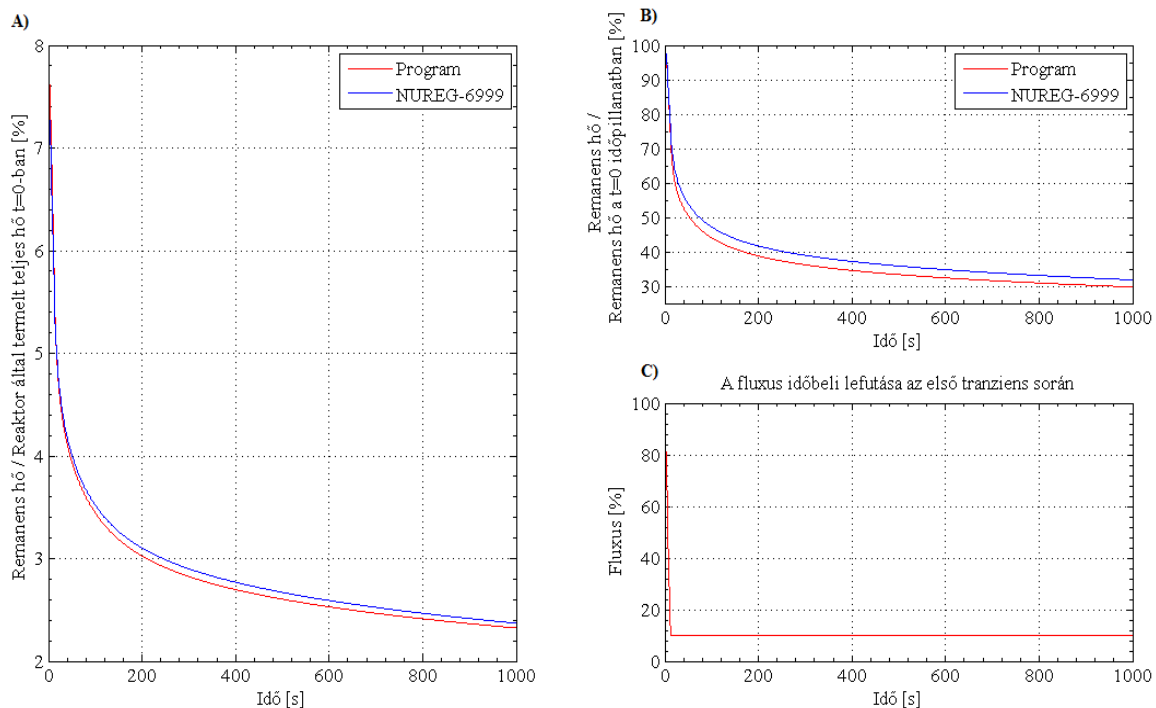


18. ábra. Az ötödik tranziens során a remanens hő arányának változása a teljes hőtermeléshez képest

Végül az elszállítandó hőre vonatkozó grafikonunkon is csak az látszik, amit már az előzőekben is elmondtunk, a kis fluxus miatt jól egybeesnek ezek a görbék is. Itt is túlbecsüljük a részarányt 3–4 százalékkal.

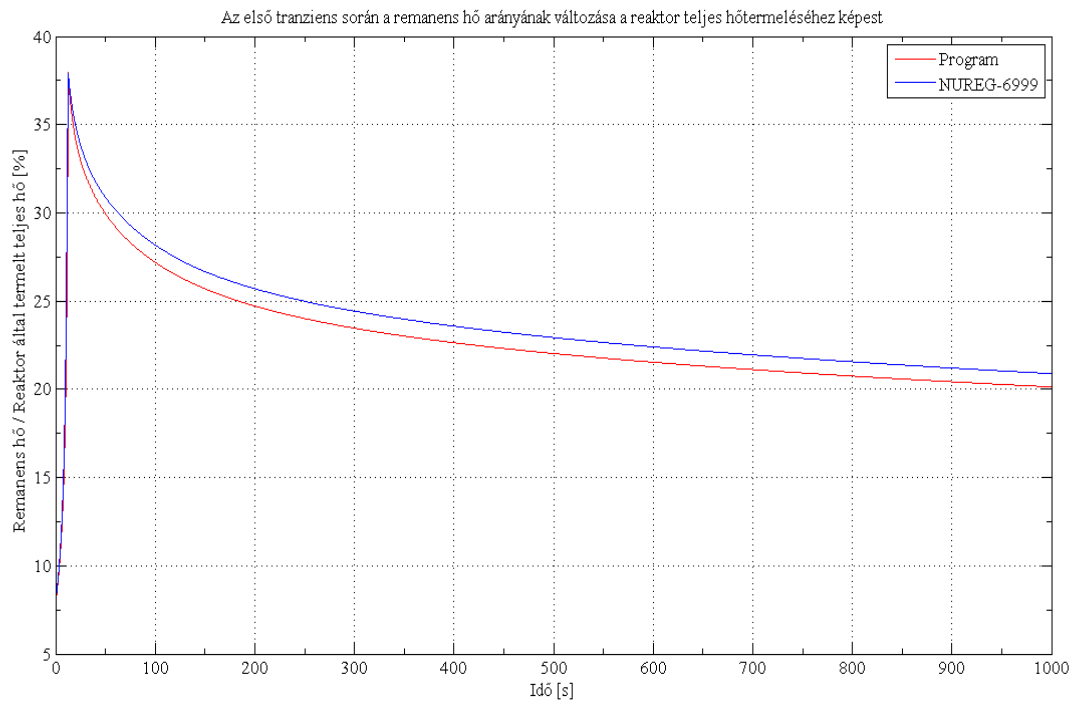
3.3.6. Az első tranziens módosítása

Az első tranziensben a fluxus 100%-ról 12,5 másodperc alatt 10%-ra csökken, majd ott marad egészen a számítás végét jelentő 1000 másodpercig.



19. ábra. A módosított első tranziens eredménye

A grafikonok alapján egészen jól látható hasonlóságot tapasztalunk a két független eredmény között. A relatív viszonyokon jól látszik, hogy a kezdeti remanens hő 1000 másodperc alatt a 30%-ra esett le.

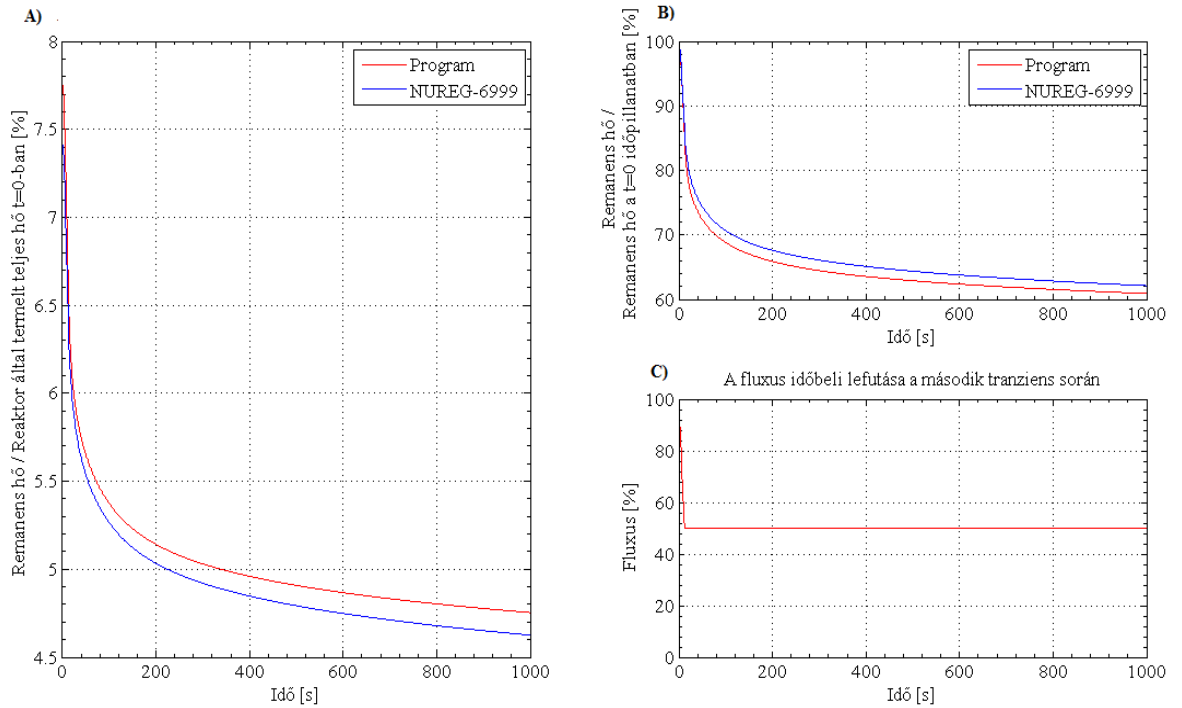


20. ábra. A módosított első tranziens során a remanens hő arányának változása a reaktor teljes hőtermeléséhez képest

Egy kis eltérés a két eredmény között természetesen látszik, de megállapítható, hogy a remanens hő – ilyen nagyarányú teljesítményesés közben – nagymértékben megnő a kezdeti 8%-os hozzájárulásáról és mintegy 37%-os részarányra is szert tesz.

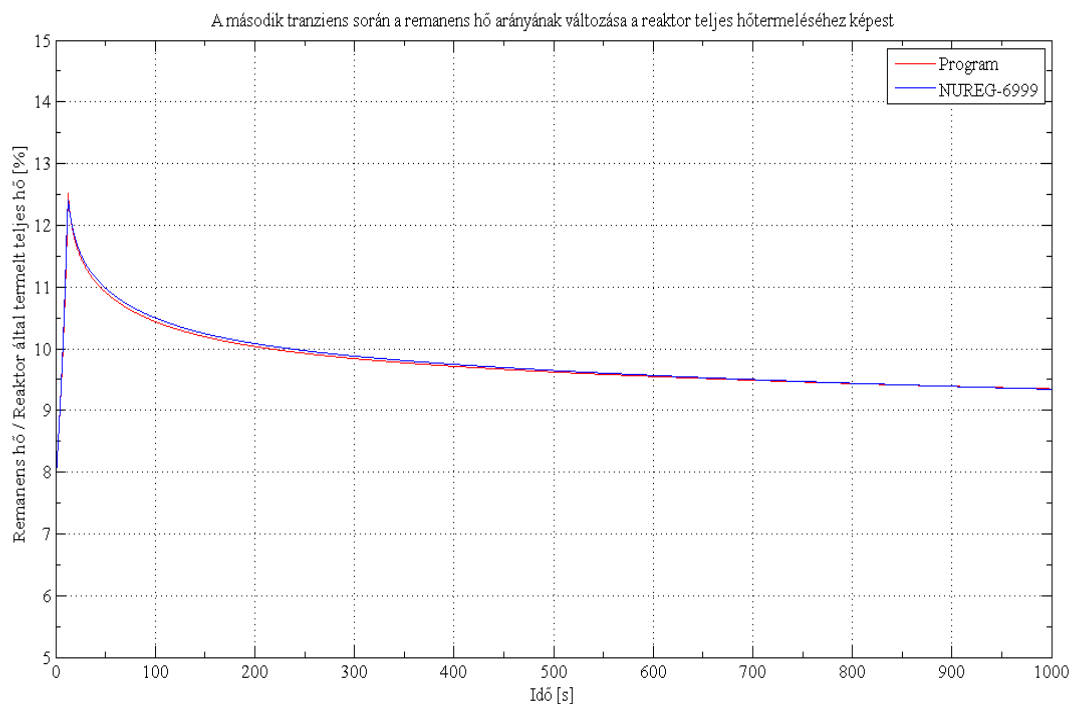
3.3.7. A második tranziens módosítása

A második tranziensben a fluxus 12,5 másodperc alatt csökken 50%-ra és utána ott marad.



21. ábra. A módosított második tranziens eredménye

Látható, hogy valamennyi különbség mutatkozik a két program eredménye között, ami az idő előrehaladtával nőni látszik.

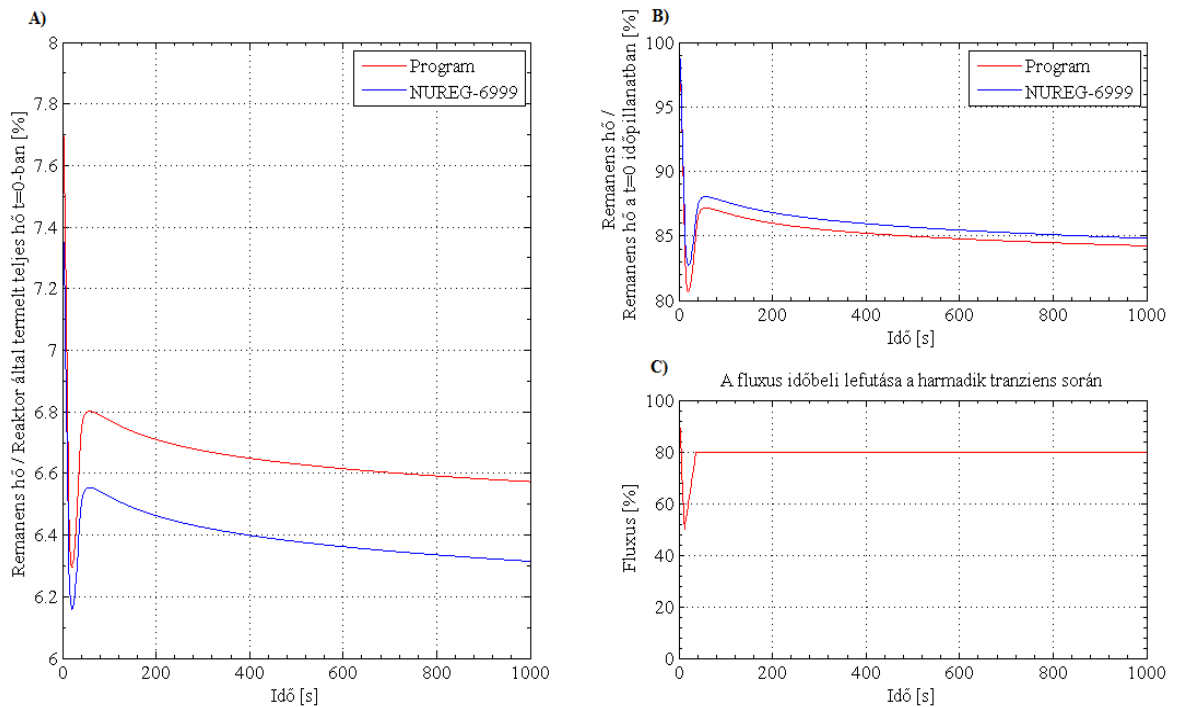


22. ábra. A módosított második tranziens során a remanens hő arányának változása a teljes hőtermeléshez képest

Szembetűnő, hogy a NUREG–6999 eljárás és az általam írt program nagyon hasonló eredményt ad. Ez már csak azért is meglepő lehet, mert a NUREG–6999 rutin lefutásához millisekundumok kellenek csupán, az általam fejlesztett program a differenciálegyenlet-rendszer megoldása során órákat emészt fel.

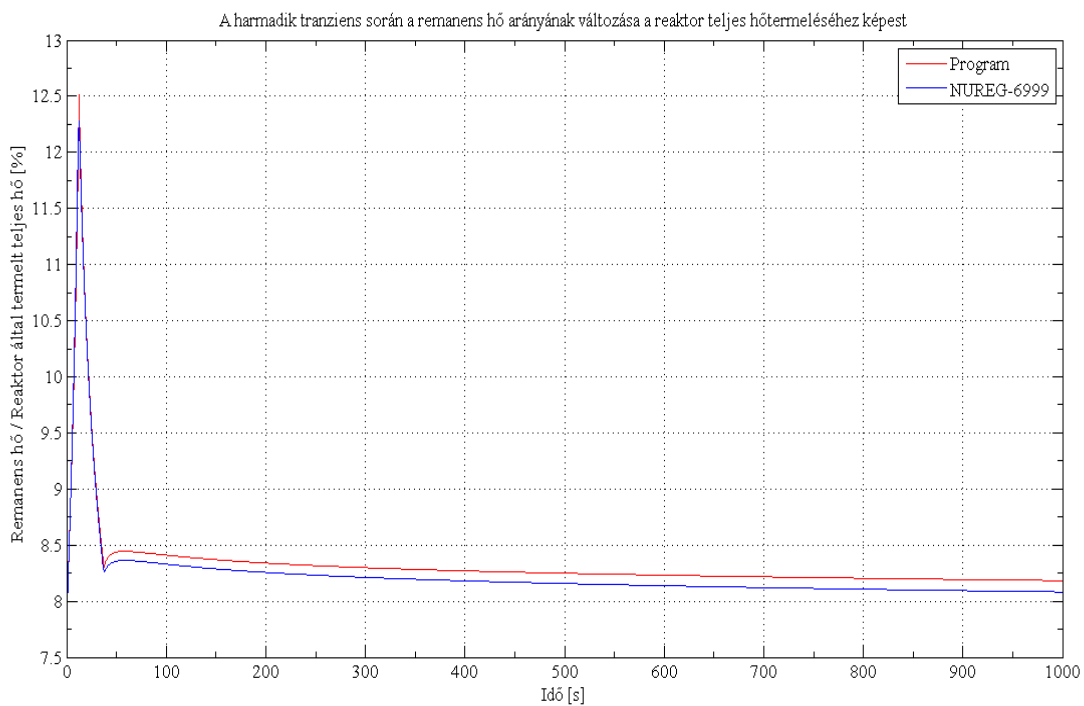
3.3.8. A harmadik tranziens módosítása

A harmadik tranziensben a fluxus 12,5 másodperc alatt lecsökken 50%-ra, majd az azt követő 25 szekundumban 80%-ra nő vissza. A 37,5. másodperc után állandó 80%-on marad. A grafikonok elrendezése, az ábrázolt mennyiségek ugyanazok.



23. ábra. A módosított harmadik tranziens eredménye

Az általam megírt program ebben a tranziensben nagyobb remanens hőt jósol, mint a NUREG-6999 rutin. Jól látható azonban a B jelű ábrán, hogy a relatív viszonyok hasonlóak.

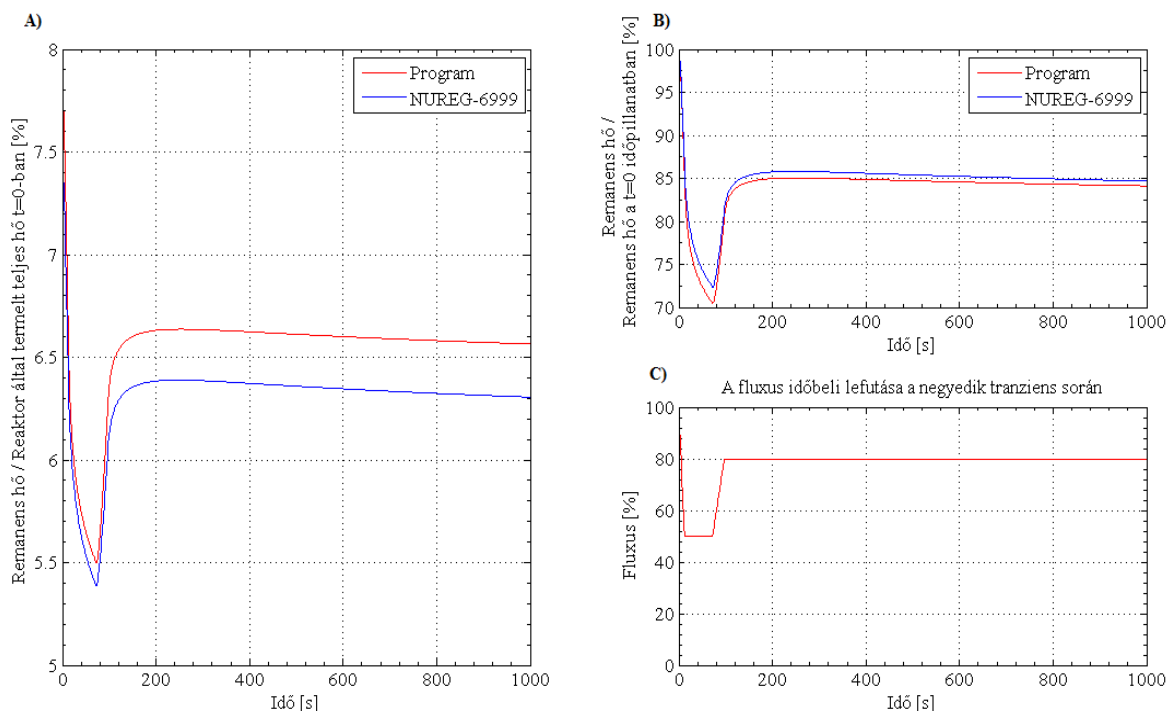


24. ábra. A módosított harmadik tranziens során a remanens hő arányának változása a teljes hőtermeléshez képest

Ez a grafikon is hasonló viselkedést jelez a két módszerrel számított relatív változásra.

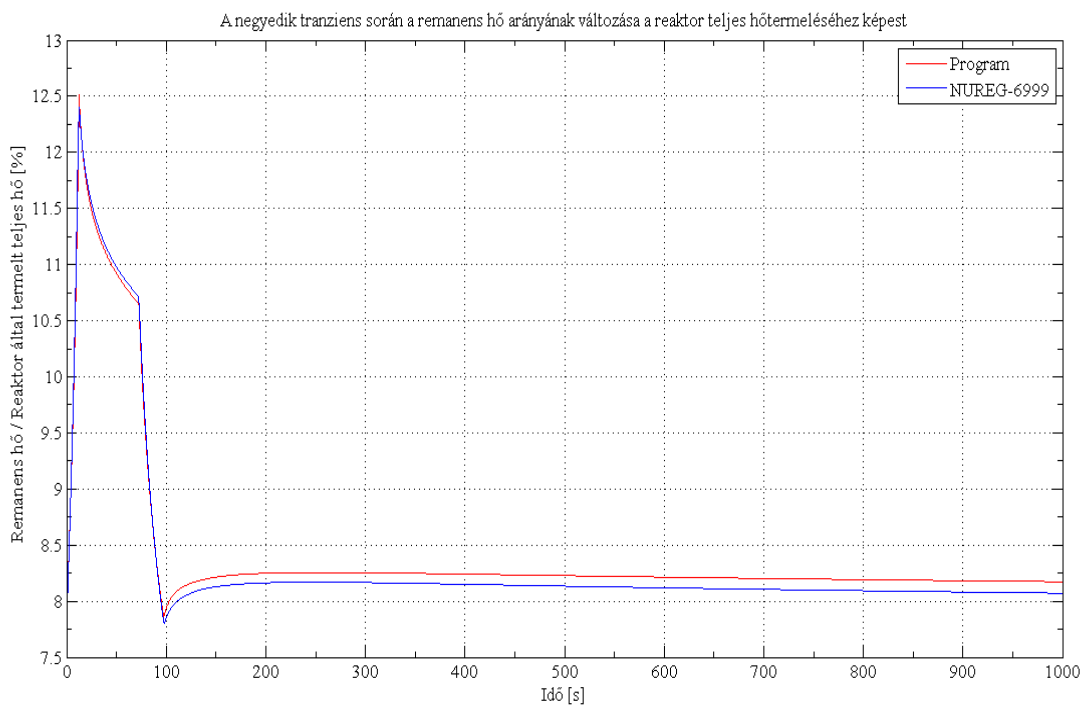
3.3.9. A negyedik tranziens módosítása

A negyedik tranziensben a fluxus 12,5 másodperc alatt 50%-ra csökken, ahol további 60 másodpercre ott is marad. A 72,5. másodperctől a 97,5. másodpercig, azaz 25 másodperc alatt vissza nő 80%-ra, ahol stabilizálódik.



25. ábra. A módosított negyedik tranziens eredménye

A 25. ábra A jelű grafikonján látható, hogy a magasabb fluxusú tartományon a különbség elég nagy a két modell között. Azt is észre lehet venni az A jelű grafikonon, hogy a 80. másodpercig a grafikonok közelednek egymás felé, majd amikor a fluxus újra növekedni kezd, akkor a különbség újra nagyobb lesz.

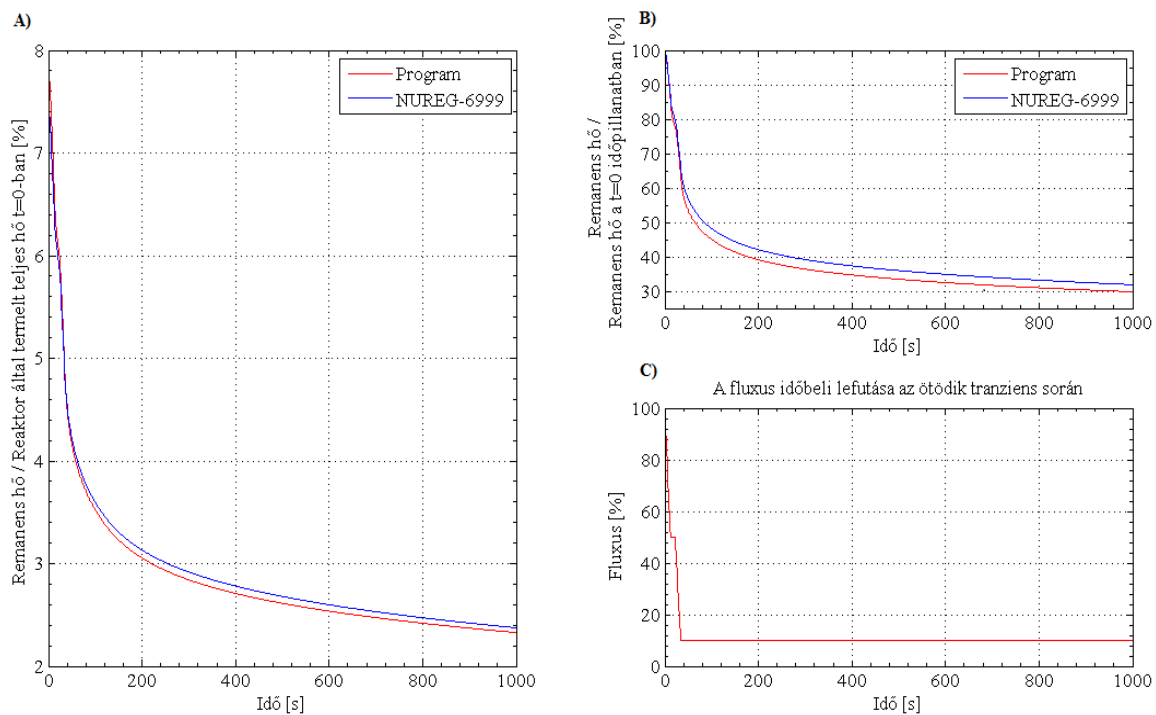


26. ábra. A módosított negyedik tranziens során a remanens hő arányának változása a teljes hőtermeléshez képest

A (26)–es ábra a várakozásnak megfelelő eredményt mutat, miszerint hasonlónak kell lennie a relatív megváltozásnak.

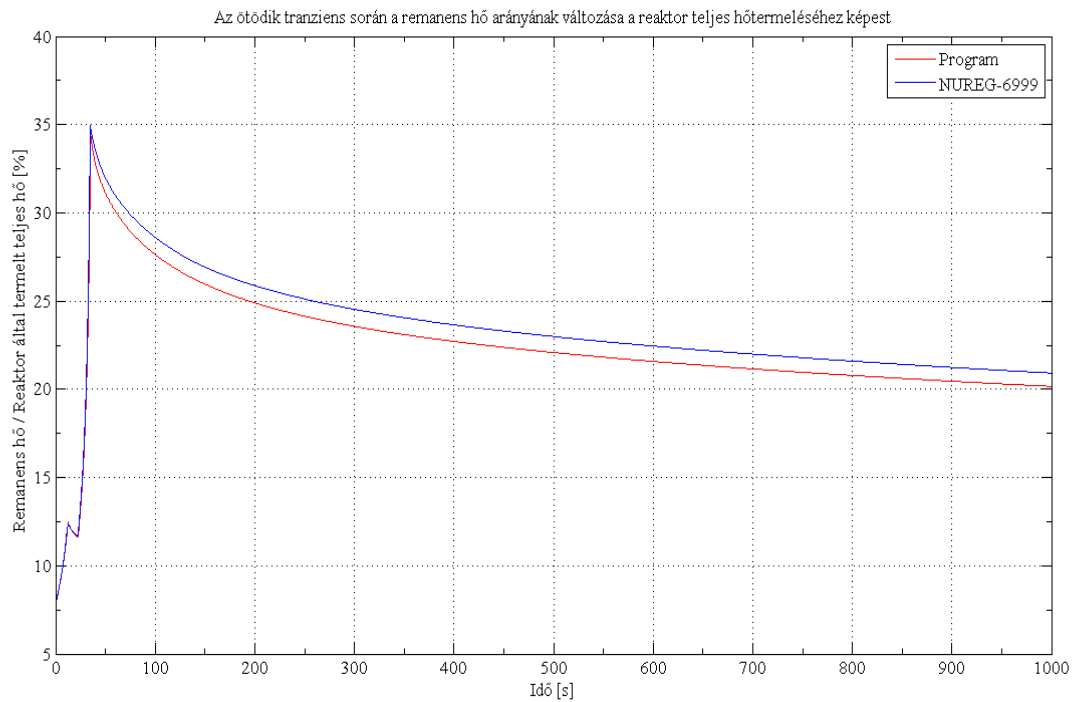
3.3.10. Az ötödik tranziens módosítása

Az ötödik tranziens nagyon hasonló az első tranzienshez, annyi különbséggel, hogy 50%-on 10 másodpercig állandó, mielőtt újra csökkenni kezd a teljesítmény.



27. ábra. A módosított ötödik tranziens eredménye

A várakozásnak megfelelően ezek a grafikonok nagyon hasonlítanak az első tranziensben kapottakhoz. Megfigyelhető, hogy a kis fluxusú tartományon a három módszer elég pontosan ugyanazt az eredményt adja.



28. ábra. A módosított ötödik tranziens során a remanens hő arányának változása a teljes hőtermeléshez képest

Végül az elszállítandó hőre vonatkozó grafikonunkon is csak az látszik, amit már az előzőekben is elmondtunk, nagyon hasonló eredményt adnak a relatív megváltozásra.

4. Összefoglalás, következtetések

A paksi atomerőműben tranziensek során a pontos teljesítmény nem áll rendelkezésre a teljesítménymérések módszereiből adódóan. A reaktorban felszabaduló teljes hőteljesítmény több részre osztható, ennek az egyik része a hasadási termékek radioaktív bomlásaiból származó remanens hő. A remanens hő vizsgálata azért fontos, mert a teljes hőnek ez egy olyan része, amely tranziens során nem feltétlenül a fluxussal arányosan változik, ezért tranziens során nehéz meghatározni. A feladat egy program fejlesztése volt, amely a remanens hőteljesítményt rövid idejű (300–1000 másodperces) tranziens során számítani tudja.

A BSc–szakdolgozat megírása közben a tanszéken kifejlesztett rutint azóta Pakson is használják "real-time" számításokra. A TDK munka folyamán így azt tartottuk szem előtt, hogy a NUREG–6999 rutint tovább ellenőrizzük, hogy milyen pontosan lehet vele számításokat végezni. Ezzel kapcsolatban mindenképpen az a továbblépési feladat, hogy meghatározzuk a pontos korrekciókat, amikkel számolni kell akkor, amikor neutronfluxus is van a rendszerben.

A feladat kidolgozása során a hasadási termékek magassűrűségeit határoztam meg a rájuk felírható Bateman differenciálegyenlet–rendszer megoldásával. A megoldás során nehézséget okozott az izotópok nukleáris adatainak az összegyűjtése, mert a szakdolgozatban említett három energia–csoportra átlagolt értékeket kellett meghatározni. Problémát jelentett még a differenciálegyenlet–rendszer megoldása, mert a hasadási termékekre felírható együtthatómátrix kondíciószáma nagyon nagy volt, ezáltal a Matlab beépített differenciál–egyenlet megoldó rutinjait nem lehetett alkalmazni, saját megoldó rutin fejlesztésére volt szükség. Az adatok begyűjtése miatt a nukleáris adatokban keletkező inkonzisztenciát (Izd. Adatok és elemzésük alfejezet) fel kellett oldani, hogy a saját fejlesztésű programot használni lehessen rövid tranziensek számításánál.

Az eredmények fejezetbeli ábrákat szemügyre véve látható, hogy kvalitatíve jó eredményeket kaptam, mindazonáltal a további, kvantitatív vizsgálatokhoz még dolgozni kell a programon. A saját fejlesztésű program előkészítésekor létrehoztam egy, sok izotóp (683 darab) nukleáris adatait tartalmazó adatbázist, ami tetszőleges adatokkal bővíthető. Fontos eredménynek tekinthető, hogy a 9., 11., 13., 15., 17., 19., 21., 23., 25., 27. ábrák B jelű grafikonjai, amelyek a remanens hőt relatíve ábrázoló grafikonok, nagyon nagyfokú hasonlóságot mutatnak.

Célszerűnek látszik a program továbbfejlesztése. Első lépésként az Origen adatbázisát és az általam felhasznált NAÜ adatbázist kell valahogyan összehangolni. Ha máshogy nem megy, akkor talán az ORIGEN adatbázisát kellene használni erre a feladatra. A most kidolgozott számítási eredményeket egy fél éves kazettára végeztem el, ezt több későbbi időpillanatban is meg kellene

teni. Remélhetőleg prognosztizálható lenne az, hogy ahogy az üzemanyag az idő előrehaladtával kiég, úgy a remanens hő is egyre inkább növekszik.

5. Köszönetnyilvánítás

Köszönöm témavezetőmnek, dr. Fehér Sándornak a sok segítséget, amit e dolgozat megírása közben nyújtott.

Köszönettel tartozom még Reiss Tibornak az ORIGEN és Scale futások megírásáért, ami nagyban megkönnyítette a munkámat.

Hivatkozások

- [1] *Helios Nuclear Fuel Analysis Software documentation*. 1998, Studsvik Scandpower.
- [2] Joseph C. Braun: *Operational Safety of Spent Nuclear Fuel*. 2010. december.
URL http://www-ns.iaea.org/downloads/ni/embarking/argonne_workshop_2010/Braun/L.6.2%20Braun%20Operational%20Safety%20of%20Spent%20Nuclear%20Fuel.pdf.
- [3] Bucz Gábor: *Reaktor remanens hőteljesítményének számítására szolgáló eljárás és program fejlesztése*. 2012.
- [4] I. C. Gauld – B. D. Murphy: *Technical Basis for a Proposed Expansion of Regulatory Guide 3.54– Decay Heat Generation in an Independent Spent Fuel Storage Installation*. 2010. február, U.S.NRC. NUREG/CR-6999; ORNL/TM-2007/231.
- [5] IAEA: URL <http://www-nds.iaea.org/relnsd/vchart/>.
- [6] IAEA: URL <http://www-nds.iaea.org/exfor/e4explorer.htm>.

A. A NUREG–6999 eljárás illesztett paramétere

4. táblázat. A NUREG–6999 eljárás illesztett paramétere. Forrás: [4]

Index "j"	U-235 $a_{1,j}$	U-235 $\lambda_{1,j}$	Pu-239 $a_{2,j}$	Pu-239 $\lambda_{2,j}$	U-238 $a_{3,j}$	U-238 $\lambda_{3,j}$	Pu-241 $a_{4,j}$	Pu-241 $\lambda_{4,j}$
1	5.2800E-04	2.7216E+00	1.6540E-01	8.9246E+00	3.9368E-01	4.3427E+00	3.0934E-01	2.9049E+00
2	6.8588E-01	1.0256E+00	3.6928E-01	6.9005E-01	7.4588E-01	1.7114E+00	5.4434E-01	6.4911E-01
3	4.0752E-01	3.1419E-01	2.4006E-01	2.3618E-01	1.2169E+00	6.0572E-01	4.0782E-01	2.5569E-01
4	2.1937E-01	1.1788E-01	1.0269E-01	1.0118E-01	5.2820E-01	1.9429E-01	1.5828E-01	8.7123E-02
5	5.7701E-02	3.4365E-02	3.4916E-02	3.7193E-02	1.4805E-01	6.9788E-02	4.1577E-02	2.5068E-02
6	2.2530E-02	1.1762E-02	2.2961E-02	1.4319E-02	4.5980E-02	1.8809E-02	1.4818E-02	1.3323E-02
7	3.3392E-03	3.6065E-03	3.9070E-03	4.5094E-03	1.0406E-02	6.1265E-03	5.8176E-03	6.3772E-03
8	9.3667E-04	1.3963E-03	1.3080E-03	1.3211E-03	1.6991E-03	1.3799E-03	1.9482E-03	2.0221E-03
9	8.0899E-04	6.2608E-04	7.0265E-04	5.3481E-04	6.9102E-04	5.2799E-04	9.5196E-04	6.2933E-04
10	1.9572E-04	1.8924E-04	1.4297E-04	1.7297E-04	1.4736E-04	1.6145E-04	1.8208E-04	1.7462E-04
11	3.2609E-05	5.5074E-05	1.7642E-05	4.8918E-05	2.4049E-05	4.8419E-05	1.5310E-05	4.0172E-05
12	7.5827E-06	2.0971E-05	7.3646E-06	2.0155E-05	6.9288E-06	1.5644E-05	4.5039E-06	1.5289E-05
13	2.5189E-06	9.9940E-06	1.7720E-06	8.3687E-06	6.4927E-07	5.3610E-06	9.8277E-07	7.6113E-06
14	4.9836E-07	2.5401E-06	5.4945E-07	2.3620E-06	4.3556E-07	2.1689E-06	5.1832E-07	2.5083E-06
15	1.8523E-07	6.6332E-07	1.6736E-07	6.4594E-07	1.6020E-07	6.3343E-07	2.3018E-08	1.1312E-06
16	2.6592E-08	1.2281E-07	2.1160E-08	1.2822E-07	2.3089E-08	1.2879E-07	1.5817E-07	6.2987E-07
17	2.2356E-09	2.7163E-08	2.9388E-09	2.5166E-08	2.5481E-09	2.5604E-08	1.8074E-08	1.3149E-07
18	8.9582E-12	3.2955E-09	1.3659E-10	1.3176E-08	3.5071E-11	9.1544E-09	3.6922E-09	2.4237E-08
19	8.5968E-11	7.4225E-10	5.7450E-11	7.3568E-10	6.3399E-11	7.3940E-10	5.3843E-11	9.6433E-09
20	2.1072E-14	2.4681E-10	3.8422E-14	2.4663E-10	4.1599E-14	2.4731E-10	5.3003E-11	7.3467E-10
21	7.1219E-16	1.5596E-13	1.8030E-16	3.3490E-13	5.3295E-16	1.9594E-13	4.8358E-14	2.4827E-10
22	8.1126E-17	2.2573E-14	1.8342E-15	1.8761E-13	1.6695E-18	6.4303E-14	9.8516E-16	1.6873E-13
23	9.4678E-17	2.0503E-14	1.9884E-16	3.1544E-14	4.1058E-16	6.4229E-14	1.3076E-16	8.3639E-15

B. Motiváció a NUREG-6999 részhez

Tegyük fel először, hogy van egy 3 izotópból álló bomlási sorozatom, ami a következőként csatlódik. Az elsőből keletkezik a második és a harmadik sorszámú is, a másodikból a harmadik sorszámú, a harmadik bomlása nem növeli sem az első sem a második sorszámú izotóp darabszámát. Ekkor a következő egyenleteket lehet felírni:

$$\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_{11}N_1 \quad (40)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \lambda_{21}N_1 - \lambda_{22}N_2 \quad (41)$$

$$\frac{dN_3}{dt} = \lambda_{31}N_1 + \lambda_{32}N_2 - \lambda_{33}N_3 \quad (42)$$

A megoldások a következők (ismertek):

$$N_1(t) = N_1^{(0)}e^{-\lambda_{11}t} \quad (43)$$

$$N_2(t) = N_2^{(0)}e^{-\lambda_{22}t} + \frac{\lambda_{21}}{\lambda_{22} - \lambda_{11}}N_1^{(0)}(e^{-\lambda_{11}t} - e^{-\lambda_{22}t}) \quad (44)$$

$$N_3(t) = N_3^{(0)}e^{-\lambda_{33}t} + \frac{A}{\lambda_{33} - \lambda_{11}}(e^{-\lambda_{11}t} - e^{-\lambda_{33}t}) + \frac{B}{\lambda_{33} - \lambda_{22}}(e^{-\lambda_{22}t} - e^{-\lambda_{33}t}),$$

$$\text{ahol: } A = N_1^{(0)} \left(\lambda_{31} + \lambda_{32} \frac{\lambda_{21}}{\lambda_{22} - \lambda_{11}} \right) e^{-\lambda_{11}t} \quad \text{és}$$

$$B = \left(\lambda_{32}N_2^{(0)} - \lambda_{32} \frac{\lambda_{21}}{\lambda_{22} - \lambda_{11}}N_1^{(0)} \right) e^{-\lambda_{22}t}. \quad (45)$$

Ha megnézzük ezeket a megoldásokat, akkor látható, hogy az n -edik megoldást az előző $n - 1$ megoldás lineáris kombinációjával megadhatjuk.

Vizsgáljuk meg, mi van akkor, hogyha egy $M \times M$ méretű, ilyen típusú (alsóháromszög mátrix az együtthatómátrix) egyenletrendszerünk van. Az egyenletrendszer

$$\frac{dN}{dt} = \underline{\underline{\Gamma}} N \quad (46)$$

alakú. Az együtthatómátrix $[ij]$ eleme¹⁵:

$$\Gamma_{ij} = \lambda_{ij} - 2\delta_{ij}\lambda_{ij} \quad (47)$$

¹⁵A főátlóban a fogyást írja le a tag, ami negatív.

Tegyük fel, hogy az első m egyenletre már megoldottuk a rendszert és keressük az $m+1$ -edik ismeretlen megoldását. A megoldások az alábbi alakúak:

$$N_1(t) = A_{11} e^{-\lambda_{11}t} \quad (48)$$

$$N_2(t) = A_{21} e^{-\lambda_{11}t} + A_{22} e^{-\lambda_2 t} \quad (49)$$

\vdots

$$N_m(t) = \sum_{i=1}^m A_{mi} e^{-\lambda_{ii}t} \quad (50)$$

Tudjuk, hogy az N_{m+1} -re felírható differenciálegyenlet:

$$\frac{dN_{m+1}}{dt} = \sum_{i=1}^{m+1} \Gamma_{m+1,i} N_i = \sum_{i=1}^m (\lambda_{m+1,i} N_i) - \lambda_{m+1,m+1} N_{m+1} \quad (51)$$

Állítás: Az $m+1$ -edik megoldás is előáll, mint az első $m+1$ lineáris kombinációja.

Bizonyítás: Indukciósan; az előzőekben már az első három egyenletre már beláttuk.

A homogén egyenlet megoldása:

$$N_{m+1}(t) = C e^{-\lambda_{m+1,m+1}t} \quad \text{valamilyen } C \in \mathbb{R} \text{ esetén.} \quad (52)$$

Az inhomogén egyenlet megoldását ebből állítsuk elő az állandók variálása módszerével, azaz $C \rightarrow C(t)$! Ekkor a $C(t)$ -re felírható egyenlet:

$$\begin{aligned} C'(t) e^{-\lambda_{m+1,m+1}t} &= \sum_{i=1}^m (\lambda_{m+1,i} N_i) = \\ &= \sum_{i=1}^m \left(\lambda_{m+1,i} \left(\sum_{j=1}^i A_{ij} e^{-\lambda_{jj}t} \right) \right) = \\ &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^i (\lambda_{m+1,i} A_{ij} e^{-\lambda_{jj}t}) \end{aligned} \quad (53)$$

Átrendezve:

$$C'(t) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^i (\lambda_{m+1,i} A_{ij} e^{(\lambda_{m+1,m+1} - \lambda_{jj})t}) \quad (54)$$

A megoldás C -re:

$$C(t) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^i \left(\frac{\lambda_{m+1,i}}{\lambda_{m+1,m+1} - \lambda_{jj}} A_{ij} e^{(\lambda_{m+1,m+1} - \lambda_{jj})t} \right) + K, \quad K \in \mathbb{R} \quad (55)$$

A teljes megoldás:

$$N_{m+1}(t) = C e^{-\lambda_{m+1,m+1}t} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^i \left(\frac{\lambda_{m+1,i}}{\lambda_{m+1,m+1} - \lambda_{jj}} A_{ij} e^{-\lambda_{jj}t} \right) + K e^{(-\lambda_{m+1,m+1})t} \quad (56)$$

Ha figyelembe vesszük a kezdeti feltételt, akkor:

$$N_{m+1}(0) = N_{m+1}^{(0)} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^i \left(\frac{\lambda_{m+1,i}}{\lambda_{m+1,m+1} - \lambda_{jj}} A_{ij} \right) + K \quad (57)$$

$$\text{amiből: } K = N_{m+1}^{(0)} - \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^i \left(\frac{\lambda_{m+1,i}}{\lambda_{m+1,m+1} - \lambda_{jj}} A_{ij} \right) \quad (58)$$

Ha az (56)–es egyenletet összevetjük a bizonyítani kívánt alakkal, ami:

$$N_{m+1}(t) = \sum_{i=1}^{m+1} A_{m+1,i} e^{-\lambda_{ii}t} \quad (59)$$

akkor megkaphatjuk, hogy:

$$A_{m+1,i} = \sum_{j=i}^m \left(\frac{\lambda_{m+1,j}}{\lambda_{m+1,m+1} - \lambda_{ii}} A_{ji} \right) \quad \text{ha } i < m+1 \quad (60)$$

$$A_{m+1,m+1} = K = N_{m+1}^{(0)} - \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^i \left(\frac{\lambda_{m+1,i}}{\lambda_{m+1,m+1} - \lambda_{jj}} A_{ij} \right) \quad (61)$$

Ezzel az állítást bizonyítottuk. Tehát egy bomlási láncban csak exponenciális időfüggvények jelennek meg, és pontosan annyi, amennyi izotóp a láncban szerepel.

Ennek a használhatósága a következő. Hasítsunk el egy hasadóképes izotópot és tekintsük azokat az izotópokat, amelyek a bomlás során direkt, vagy indirekt keletkezhetnek belőle. Legyen ezeknek az izotópoknak a halmaza B . Ha a $t = 0$ időpillanatban elhasítunk X darab hasadóképes izotópot, akkor a B halmazon lesz valamilyen kezdeti izotópeloszlás. Rendezzük a halmaz elemeit megfelelően, hogy a rájuk felírható differenciálegyenlet-rendszer együttthatómátrixa alsóháromszög mátrix legyen. Ez a rendezés biztosan megtehető, hogyha csak β^- bomlás van jelen, ezért tételezzük most fel ezt az esetet. Az izotópok megsűrűségére alkalmazható az

állításunk, tehát az összes izotóp leírható maximum a B halmaz számossága darab exponenciális függvénnyel. Ebből következik, hogy az izotópok radioaktív bomlásából származó remanens hő is leírható $|B|$ darab exponenciális függvénnyel. Lehetséges, hogy az exponenciális függvények kitevői között találunk hasonló nagyságrendűeket. Az amerikai kutatócsoport munkássága során látható, hogy 23 hasonló csoportot lehet találni és ezekre hasadóképes izotóponként átlagolás lehet elvégezni, aminek az illesztett együtthatóit a (??) melléklet tartalmazza. Ez a levezetés motiváció kívánt lenni ahhoz, hogy a 23 darab exponenciális függvény nem légből kapott ötlet.

C. Felhasznált izotópok listája

H-3 H-4 He-3 He-4 He-5 Zn-76 Zn-77 Zn-78 Zn-79 Ga-75 Ga-76 Ga-77 Ga-78 Ga-79 Ga-80 Ga-81 Ga-82 Ge-75 Ge-75m Ge-76 Ge-77 Ge-77m Ge-78 Ge-79 Ge-79m Ge-80 Ge-81 Ge-81m Ge-82 Ge-83 Ge-84 Ge-85 As-75 As-75m As-76 As-77 As-78 As-79 As-80 As-81 As-82 As-82m As-83 As-84 As-84m As-85 As-86 As-87 As-88 Se-76 Se-77 Se-78 Se-79 Se-79m Se-80 Se-81 Se-81m Se-82 Se-83 Se-83m Se-84 Se-85 Se-86 Se-87 Se-88 Se-89 Se-90 Se-91 Br-79 Br-80 Br-81 Br-82 Br-83 Br-84 Br-84m Br-85 Br-86 Br-87 Br-88 Br-89 Br-90 Br-91 Br-92 Br-93 Kr-80 Kr-81 Kr-82 Kr-83 Kr-83m Kr-84 Kr-85 Kr-85m Kr-86 Kr-87 Kr-88 Kr-89 Kr-90 Kr-91 Kr-92 Kr-93 Kr-94 Kr-95 Kr-96 Rb-85 Rb-86 Rb-87 Rb-88 Rb-89 Rb-90 Rb-90m Rb-91 Rb-92 Rb-93 Rb-94 Rb-95 Rb-96 Rb-96m Rb-97 Rb-98 Rb-98m Rb-99 Sr-86 Sr-87 Sr-88 Sr-89 Sr-90 Sr-91 Sr-92 Sr-93 Sr-94 Sr-95 Sr-96 Sr-97 Sr-98 Sr-99 Sr-100 Sr-101 Y-89 Y-89m Y-90 Y-91 Y-91m Y-92 Y-93 Y-93m Y-94 Y-95 Y-96 Y-96m Y-97 Y-97m Y-97n Y-98 Y-98m Y-99 Y-100 Y-100m Y-101 Y-102 Y-102m Y-103 Y-104 Zr-90 Zr-91 Zr-92 Zr-93 Zr-94 Zr-95 Zr-96 Zr-97 Zr-98 Zr-99 Zr-100 Zr-101 Zr-102 Zr-103 Zr-104 Zr-105 Zr-106 Nb-93 Nb-93m Nb-94 Nb-95 Nb-95m Nb-96 Nb-97 Nb-97m Nb-98 Nb-98m Nb-99 Nb-99m Nb-100 Nb-100m Nb-101 Nb-102 Nb-102m Nb-103 Nb-104 Nb-104m Nb-105 Nb-106 Nb-107 Nb-108 Nb-109 Mo-94 Mo-95 Mo-96 Mo-97 Mo-98 Mo-99 Mo-100 Mo-101 Mo-102 Mo-103 Mo-104 Mo-105 Mo-106 Mo-107 Mo-108 Mo-109 Mo-110 Tc-99 Tc-99m Tc-100 Tc-101 Tc-102 Tc-102m Tc-103 Tc-104 Tc-105 Tc-106 Tc-107 Tc-108 Tc-109 Tc-110 Tc-111 Tc-112 Ru-98 Ru-99 Ru-100 Ru-101 Ru-102 Ru-103 Ru-104 Ru-105 Ru-106 Ru-107 Ru-108 Ru-109 Ru-110 Ru-111 Ru-112 Ru-113 Ru-113m Ru-114 Rh-103 Rh-103m Rh-104 Rh-105 Rh-105m Rh-106 Rh-107 Rh-108 Rh-108m Rh-109 Rh-110 Rh-111 Rh-112 Rh-112m Rh-113 Rh-114 Rh-114m Rh-115 Rh-116 Rh-116m Rh-117 Rh-118 Pd-104 Pd-105 Pd-106 Pd-107 Pd-108 Pd-109 Pd-109m

Pd-110 Pd-111 Pd-111m Pd-112 Pd-113 Pd-113m Pd-114 Pd-115 Pd-115m Pd-116 Pd-117
Pd-117m Pd-118 Pd-119 Pd-120 Pd-121 Ag-107 Ag-108 Ag-109 Ag-109m Ag-110 Ag-111
Ag-111m Ag-112 Ag-113 Ag-113m Ag-114 Ag-114m Ag-115 Ag-115m Ag-116 Ag-116m
Ag-117 Ag-117m Ag-118 Ag-118m Ag-119 Ag-119m Ag-120 Ag-120m Ag-121 Ag-122
Ag-122m Ag-123 Ag-124 Ag-124m Cd-108 Cd-109 Cd-110 Cd-111 Cd-112 Cd-113 Cd-
113m Cd-114 Cd-115 Cd-115m Cd-116 Cd-117 Cd-117m Cd-118 Cd-119 Cd-119m Cd-120
Cd-121 Cd-121m Cd-122 Cd-123 Cd-123m Cd-124 Cd-125 Cd-125m Cd-126 Cd-127 In-
113 In-114 In-115 In-115m In-116 In-117 In-117m In-118 In-119 In-119m In-120 In-120m
In-120n In-121 In-121m In-122 In-122m In-122n In-123 In-123m In-124 In-124m In-125
In-125m In-126 In-126m In-127 In-127m In-128 In-128m In-128n In-129 In-129m In-130
In-130m In-130n In-131 In-131m In-131n In-132 Sn-114 Sn-115 Sn-116 Sn-117 Sn-117m
Sn-118 Sn-119 Sn-119m Sn-120 Sn-121 Sn-121m Sn-122 Sn-123 Sn-123m Sn-124 Sn-125
Sn-125m Sn-126 Sn-127 Sn-127m Sn-128 Sn-128m Sn-129 Sn-129m Sn-130 Sn-130m Sn-
131 Sn-131m Sn-132 Sn-133 Sn-134 Sn-135 Sb-121 Sb-122 Sb-123 Sb-124 Sb-124m Sb-
124n Sb-125 Sb-126 Sb-126m Sb-126n Sb-127 Sb-128 Sb-128m Sb-129 Sb-129m Sb-130
Sb-130m Sb-131 Sb-132 Sb-132m Sb-133 Sb-134 Sb-134m Sb-135 Sb-136 Sb-137 Te-122
Te-123 Te-124 Te-125 Te-125m Te-126 Te-127 Te-127m Te-128 Te-129 Te-129m Te-130
Te-131 Te-131m Te-132 Te-133 Te-133m Te-134 Te-135 Te-136 Te-137 Te-138 Te-139 Te-
140 I-127 I-128 I-129 I-130 I-131 I-132 I-132m I-133 I-133m I-134 I-134m I-135 I-136
I-136m I-137 I-138 I-139 I-140 I-141 I-142 Xe-128 Xe-129 Xe-130 Xe-131 Xe-131m Xe-
132 Xe-132m Xe-133 Xe-133m Xe-134 Xe-134m Xe-135 Xe-135m Xe-136 Xe-137 Xe-138
Xe-139 Xe-140 Xe-141 Xe-142 Xe-143 Xe-144 Xe-145 Cs-133 Cs-134 Cs-135 Cs-135m
Cs-136 Cs-136m Cs-137 Cs-138 Cs-138m Cs-139 Cs-140 Cs-141 Cs-142 Cs-143 Cs-144
Cs-144m Cs-145 Cs-146 Cs-147 Ba-134 Ba-135 Ba-136 Ba-137 Ba-137m Ba-138 Ba-139
Ba-140 Ba-141 Ba-142 Ba-143 Ba-144 Ba-145 Ba-146 Ba-147 Ba-148 Ba-149 La-139 La-
140 La-141 La-142 La-143 La-144 La-145 La-146 La-146m La-147 La-148 La-149 La-150
La-151 Ce-140 Ce-141 Ce-142 Ce-143 Ce-144 Ce-145 Ce-146 Ce-147 Ce-148 Ce-149 Ce-
150 Ce-151 Ce-152 Ce-153 Ce-154 Ce-155 Pr-141 Pr-142 Pr-143 Pr-144 Pr-144m Pr-145
Pr-146 Pr-147 Pr-148 Pr-148m Pr-149 Pr-150 Pr-151 Pr-152 Pr-153 Pr-154 Pr-155 Nd-142
Nd-143 Nd-144 Nd-145 Nd-146 Nd-147 Nd-148 Nd-149 Nd-150 Nd-151 Nd-152 Nd-153
Nd-154 Nd-155 Nd-156 Nd-157 Nd-158 Pm-147 Pm-148 Pm-149 Pm-150 Pm-151 Pm-152
Pm-152m Pm-152n Pm-153 Pm-154 Pm-154m Pm-155 Pm-156 Pm-157 Pm-158 Pm-159
Pm-160 Pm-161 Sm-147 Sm-148 Sm-149 Sm-150 Sm-151 Sm-152 Sm-153 Sm-154 Sm-

155 Sm-156 Sm-157 Sm-158 Sm-159 Sm-160 Sm-161 Sm-162 Sm-163 Eu-151 Eu-152 Eu-153 Eu-154 Eu-155 Eu-156 Eu-157 Eu-158 Eu-159 Eu-160 Eu-161 Eu-162 Eu-163 Eu-164 Eu-165 Gd-152 Gd-153 Gd-154 Gd-155 Gd-156 Gd-157 Gd-158 Gd-159 Gd-160 Gd-161 Gd-162 Gd-163 Gd-164 Gd-165 Gd-166 Gd-167 Gd-168 Tb-159 Tb-160 Tb-161 Tb-162 Tb-163 Tb-164 Tb-165 Tb-166 Tb-167 Tb-168 Tb-169 Tb-170 Tb-171 Dy-160 Dy-161 Dy-162 Dy-163 Dy-164 Dy-165 Dy-166 Dy-167 Dy-168 Dy-169 Dy-170 Dy-171 Dy-172 Dy-173 Dy-174 Ho-165 Ho-166 Ho-167 Ho-168 Ho-169 Ho-170 Ho-170m Ho-171 Ho-172 Ho-173 Er-166 Er-167 Er-167m Er-168 Er-169 Er-170 Er-171 Er-172 Tm-169 Tm-170 Tm-171 Yb-170