

Lappeenrannan teknillinen yliopisto  
Teknillinen tiedekunta  
Energiatekniikan koulutusohjelma

*Jukka Mettälä*

## **VAIKUTUSALAKIRJASTOJEN MUODOSTAMINEN SERPENT-ARES-LASKENTAKETJUSSA**

Tarkastajat: Professori, TkT Riitta Kyrki-Rajamäki  
Ylitarkastaja, DI Riku Mattila

## **TIIVISTELMÄ**

Lappeenrannan teknillinen yliopisto  
Teknillinen tiedekunta  
Energiatekniikan koulutusohjelma

Jukka Mettälä

### **DIPLOMITYÖ Vaikutusalakirjastojen muodostaminen Serpent–ARES-laskentaketjussa**

2012

64 sivua, 3 taulukkoa, 12 kuvaa, 2 liitettä

Tarkastajat: Professori, TkT Riitta Kyrki-Rajamäki  
Ylitarkastaja, DI Riku Mattila

Ohjaaja: Ylitarkastaja, DI Riku Mattila

Hakusanat: reaktorifysiikka, laskentaohjelma, vaikutusala, homogenisointi, parametrisointi

Keywords: reactor physics, computing, cross section, homogenization, parameterization

Tässä diplomityössä on esitetty työn yhteydessä toteutetun Serpent-ARES-laskentaketjun muodostamiseksi tarvittavat toimenpiteet. ARES-reaktorisydänsimulaattorissa tarvittavien homogenisoitujen ryhmävakiokirjastojen muodostaminen Serpentiä käyttäen tekee laskentaketjusta muiden käytössä olevien reaktorisydämen laskentaketjujen mahdollisista virhelähteistä riippumattoman. Monte Carlo-laskentamenetelmään perustuvaa reaktorifysiikan laskentaohjelmaa käyttämällä ryhmävakiokirjastot muodostetaan uudella menetelmällä ja näin saadaan viranomaiskäyttöön voimayhtiöiden käyttämistä menetelmistä riippumaton laskentaketju reaktorien turvallisuusmarginaalien laskentaan.

Työn yhteydessä muodostetun laskentaketjun ja tehtyjen vaikutusalakirjastojen muodostamisrutiinien sekä parametrisovitteiden toimivuus on todettu laskemalla Olkiluoto 3 -reaktorin alkulatauksen säätösauvojen tehokkuuksia ja sammutusmarginaaleja eri olosuhteissa. Menetelmä on todettu toimivaksi parametrien pätevyysalueella ja saadut laskentatulokset ovat oikeaa suuruusluokkaa. Parametrimallin tarkkuutta ja pätevyysaluetta on syytä vielä kehittää, ennen kuin laskentaketjua voidaan käyttää varmentamaan muilla menetelmillä laskettujen tulosten oikeellisuutta.

## **ABSTRACT**

Lappeenranta University of technology  
LUT Energy  
Nuclear power plant division

Jukka Mettälä

**Master's thesis: Generating the cross section data files in Serpent–ARES calculation chain**

2012

64 pages, 3 tables, 12 pictures, 2 appendices

Inspectors: Professor D.Sc. Riitta Kyrki-Rajamäki  
M.Sc. Riku Mattila

Supervisor: M.Sc. Riku Mattila

Keywords: reactor physics, computing, cross section, homogenization, parameterization

This master's thesis introduces novel method to produce the homogenized two group cross section files needed in the reactor core simulator ARES. The cross section files are now generated with Monte Carlo reactor physics calculation program Serpent. Thus is achieved an independent calculation chain that has no potential common error sources with the other existing calculation chains. This new calculation chain may be used by nuclear safety authority to confirm the results of the safety calculations made by power plant owners or fuel manufacturers.

Functioning of this calculation chain is proved by calculating control rod worths and shutdown margins of the Olkiluoto 3 EPR initial core load in different conditions. The method is found to be useful and the results near what were expected. Precision and range of the parameterization still needs to be improved before the calculation chain is ready to be used to validate other calculation's results as planned.

## ALKUSANAT

Tämä diplomityö on tehty Säteilyturvakeskuksen toimeksiannosta sekä laitteilla ja tiloissa. Työn ohjaajana toimi ylitarkastaja DI Riku Mattila, joka on myös oman toimensa ohessa kehittänyt tässä työssä käsitellyn ARES-reaktorisydän-simulaattori-ohjelman. Työn aihe ja sisältö muotoutuivat Serpent-ARES-laskentaketjun muodostamisen yhteydessä tehtyjen toimenpiteiden ja havaintojen vaikutuksesta nykyiseen muotoonsa.

Kiitän Säteilyturvakeskusta työn tekemisen mahdollistaneiden tietojen ja välineiden tarjoamisesta. Erityisesti kiitos kuuluu työn ohjaajalle monista hyvistä vinkeistä ja ideoista työn suorittamiseen, sekä esimiehelleni Risto Sairaselle luottamuksesta työn aikataulun venyessäkin ja kaikille Reaktori- ja turvallisuusjärjestelmät -toimiston kahvipöydässä istuneille yleisestä mielialan kohottamisesta.

Lopuksi suurin kiitos työn toteutumisesta kuuluu kuitenkin vaimolleni Heidille ja perheelleni, kun olette jaksaneet tukea ja kannustaa opiskelujeni suorittamisessa ajoittain rankkoinakin aikoina.

Helsinki, 7.12.2012

Jukka Mettälä

## SISÄLLYSLUETTELO

1. JOHDANTO .....	1
1.1. Työn tavoitteet .....	4
2. REAKTORIFYSIIKAN PERUSTEITA .....	6
2.1. Ydinreaktiot.....	6
2.1.1. Neutronivuorovaikutukset.....	7
2.1.2. Fissio.....	8
2.1.3. Sironta.....	10
2.1.4. Kaappaus.....	11
2.1.5. Neutroneista riippumattomat ydinreaktiot.....	12
2.1.6. Radioaktiivinen hajoaminen ja jälkilämpö.....	13
2.1.7. Viivästyneet neutronit.....	15
2.2. Palama .....	16
2.3. Vaikutusalat .....	17
2.3.1. Sirontavaikutusala.....	18
2.3.2. Absorptiovaikutusala .....	19
2.3.3. Kaappausvaikutusala .....	19
2.3.4. Fissiovaikutusala.....	20
2.4. Reaktorin kasvutekijä ja kriittisyys .....	20
3. REAKTORIN TURVALLISUUSMARGINAALIT .....	22
3.1. Sammutusmarginaali.....	22
3.2. Etäisyys kalvokiehuntaan .....	23
3.3. Kiehumavara .....	23
3.4. Dryout-marginaali .....	24
4. EPR.....	25
4.1. Olkiluoto 3.....	27
4.2. Olkiluoto 3-reaktorin alkulataus .....	28
5. REAKTORIFYSIIKKAA KÄYTÄNNÖSSÄ, OHJELMISTOT.....	34
5.1. Deterministiset laskentaohjelmat .....	34
5.2. Tilastolliset laskentaohjelmat .....	35
5.2.1. Monte Carlo-laskentamenetelmä .....	35
5.3. ARES.....	35

5.3.1. Tarvittavat vaikutusalatiedot.....	36
5.4. CASMO .....	37
5.5. Serpent .....	37
5.6. VTT:n laskentajärjestelmä .....	40
5.7. Vaikutusalakirjastot.....	41
5.8. Homogenisointi.....	41
5.9. Vaikutusalojen parametrisointi.....	44
6. VAIKUTUSALAKIRJASTOJEN LUOMINEN .....	46
6.1. Serpent-laskennat .....	46
6.2. Serpent-laskentojen tulokset .....	47
6.3. Serpent-laskentatulosten tarkkuuden optimointi .....	49
6.4. ARES-vaikutusalakirjaston rakenne .....	52
6.5. ARES-vaikutusalakirjaston muodostaminen .....	52
6.6. Vaikutusalojen parametrisointi ARES:ssa.....	56
7. TYÖN TULOKSET .....	60
8. YHTEENVETO.....	62
8.1. Jatkokehityksiä .....	63

## LÄHDELUETTELO

LIITE 1: Serpent-syötetiedosto

LIITE 2: Serpent-laskentojen suoritukseen käytetty komentoketjutiedosto

## SYMBOLILUETTELO

$E$	energia	[MeV] tai [J]
$T$	lämpötila	[°C] tai [K]
$m$	massa	[kg]
$v$	nopeus	[m/s]
$\Phi$	neutronivuo	[1/cm <sup>2</sup> ·s]
$\Sigma$	makroskooppinen vaikutusala	[1/cm]
$\sigma$	mikroskooppinen vaikutusala	[barn]

### alaindeksit

1	energiaryhmä 1, nopeat neutronit
2	energiaryhmä 2, termiset neutronit
a	absorptio
c	kaappaus
f	fissio

## 1. JOHDANTO

Ydinvoimalaitoksen toiminta on periaatteellisella tasolla melko yksinkertaista: Reaktorissa raskaat atomiytimet halkeavat neutronien aiheuttamissa fissioreaktioissa vapauttaen energiaa ja uusia neutroneja. Vapautuneet neutronit aiheuttavat edelleen fissioreaktioita muissa lähistöllä olevissa raskaissa atomeissa. Fissioissa halkeavien ytimien ja ketjureaktiona uusia fissioita aiheuttavien vapaiden neutronien määrät säädetään sopiviksi reaktorin geometrian ja materiaalivalintojen, kuten polttoaineen koostumuksen, hidasteen ja jäähdytteeseen sekoitetavan boorin tai säätösauvojen määrän avulla.

Fissioissa vapautuva energia kuljetetaan sopivaa väliainetta, yleisimmin vettä, käyttäen reaktorista voimalaitosprosessille, joka toimii kuin mitä tahansa lämmönlähdettä käyttävä höyryturbiinivoimalaitos. Tosin tähänastisissa ydinvoimalaitoksissa on jouduttu, reaktorin turvallisen käytön edellyttämistä rajoitteista johtuen, käyttämään suuriin polttovoimalaitoksiin verrattuna selvästi alhaisempaa tuorehöyryn painetta ja lämpötilaa, mikä väistämättä rajoittaa voimalaitosprosessilla saavutettavaa hyötysuhdetta. Joissakin tulevaisuudessa ehkä rakennettavissa neljännen sukupolven reaktorikonsepteissa on pyritty pääsemään eroon näistä hyötysuhdetta heikentävistä lämpötilarajoitteista uudentyyppisiä rakenteita ja materiaaleja käyttämällä [1, s.16].

Todellisuudessa hyvin toimivan ydinvoimalaitoksen tekeminen tietenkin vaatii erittäin paljon matemaattista ja teknistä osaamista sekä suunnittelua, sillä reaktorin toimintaan vaikuttavat monet käytön aikanakin muuttuvat asiat. Onnistuneen lopputuloksen saavuttamiseksi ne kaikki on otettava huomioon jo reaktoria suunniteltaessa ja rakennettaessa.

Pian ensimmäisen pidempiaikaiseen käyttöön tehdyn reaktorin käynnistämisen jälkeen huomattiin, ettei kaikkia oleellisia seikkoja oltu reaktorin suunnittelussa sittenkään osattu huomioida. Käynnistämisen jälkeen reaktori toimi moitteettomasti jonkin aikaa, kunnes silloin vielä tuntemattoman fissiotuotteen, ksenon-135:n, pitoisuus reaktorissa kohosi ja ketjureaktio alkoi hiipua kesken kaiken.



Reaktorin rakentamisesta vastuussa olleiden insinöörien epäluulojen ansiosta reaktoriin oli kuitenkin varmuuden vuoksi tehty riittävästi paikkoja ylimääräisille polttoaine-elementeille. Tämän ansiosta yllättävä, niin sanotun ksenonmyrkytyksen aiheuttama, lisääntynyt neutronien kaappaus saatiin verrattain helposti kompensoitua lisäämällä sydämeen polttoaine-elementtejä. [3]

Myös Tshernobylin onnettomuus johtui suurelta osin reaktorin huonosta suunnittelusta, vaikka pääsyyinä onnettomuuteen voitaneenkin pitää reaktorin ohjeiden vastaista käyttöä. Reaktorin säätösauvojen rakenne oli sellainen, että liian ylös nostetun säätösauvan alas laskeminen aiheutti ensin tehon suurenemista reaktorin alareunassa. Ksenonmyrkytyksen takia poikkeukselliseen tilaan ajautunutta reaktoria yritettiin saada pysymään riittävällä tehotasolla nostamalla liian paljon säätösauvoja kokonaan pois sydäimestä. Näin jouduttiin tilanteeseen jossa laukaistu pikasulku aiheutti reaktorin alaosassa räjähdysmäisesti suurentuneen tehon. Tämä äkillinen tehon suureneminen hajotti koko reaktorin, ennen kuin pikasulku olisi ehtinyt alkaa vaikuttaa tehoa pienentävästi. [4, s. 235]

Neutronien aiheuttamat reaktiot ja reaktorissa käytettyjen materiaalien ominaisuudet on jo pitkään tunnettu melko tarkkaan, joten periaatteessa myös reaktorin toiminta olisi melko suoraviivaista simuloida tietokoneella. Monte Carlo-laskentaa ja olemassa olevia kokeellisesti laadittuja ydinreaktiorakenteita voidaan käyttää neutronien aiheuttamien reaktioiden mallinnukseen ja reaktorin osien geometria pystytään helposti muodostamaan tietokoneella. Näin saadaan reaktorin toimiessa tapahtuvat ydinreaktiot mallinnettua. Reaktorin toiminta ei kuitenkaan käytännössä ole aivan niin yksinkertaista, sillä käytön aikana jatkuvasti muuttuvat suureet vaikuttavat reaktorin toimintaan joko suoraan tai välillisesti.

Vaikka arkikielessä ydinfysiikkaa joskus käytetäänkin vaikeasti ymmärrettävän asian vertauskuvana, on reaktorin termohydraulisten tapahtumien fysikaalisesti tarkka kuvaaminen kuitenkin paljon vaikeampaa kuin ydinfysikaalisten tapahtumien. Termohydrauliikan mikrotason ilmiöiden vaikutusta ei yleensä pystytä suoraan laskennallisesti kuvaamaan lainkaan, vaan niitä kuvaamaan käytetään yhtälöissä kokeellisesti kehitettyjä eri suureiden mukaan muuttuvia korrelaatioita.

Fissio on kemiallisiin reaktioihin verrattuna hyvin suurienerginen tapahtuma, yhdessä fissiossa vapautuva energiamäärä on kuitenkin käytännön elämän tasolla mitättömän pieni, noin 200 MeV eli noin  $3,204 \cdot 10^{-11}$  J. [2, s.77] Tästä johtuen fissioita täytyy suuren tehon aikaan saamiseksi tapahtua reaktorissa todella paljon. Tämä tekee reaktorissa tapahtuvien reaktioiden täydellisen simuloinnin Monte Carlo-menetelmää käyttäen mahdottomaksi, tai se ei käytännössä ole mahdollista ainakaan järjellisellä aikavälillä. Siksi mallinnuksessa on käytettävä monta kertaluokkaa todellista pienempiä reaktiomääriä ja joitakin muita yksinkertaistuksia, sillä esimerkiksi kaikkia aineen atomeja ei mitenkään pysty todellisuutta vastaavasti malliin saamaan.

Tässä työssä käsiteltävän Olkiluoto 3 EPR reaktorin 4300 MW lämpötehon tuottaminen vaatii siis noin  $1,33 \cdot 10^{20}$  fissiota sekunnissa. Keskimäärin uraani-235:n termisessä fissiossa vapautuu noin 2,4 neutronia, joten neutroneja syntyy reaktorisydämessä noin  $3,94 \cdot 10^{20}$  kappaletta sekunnissa. Kaikki reaktorissa tapahtuvat fissiot eivät todellisuudessa tietysti ole uraani-235:n termisiä fissioita. Nopeissa fissioissa ja plutonium-239:n fissioissa neutroneja vapautuu hieman enemmän, joten todellinen lukumäärä lienee hieman suurempi, mutta suuruusluokka on kuitenkin oikea.

FLOPS on tietokoneen prosessorien laskentatehokkuutta kuvaamaan käytetty yksikkö, joka on lyhenne sanoista floating-point operations per second. Se kertoo kuinka monta liukulukujen laskutoimitusta prosessorit pystyvät sekunnissa tekemään. Tämän työn laskentojen suorittamisessa käytettiin melko tehokasta Linux-työasemaa, jonka prosessorien laskentanopeus on yhteensä noin 38 GFLOPS [5]. Kyseinen tietokone mallintaa reaktorisydämen 2-ulotteisen Serpent-mallin miljoonan neutronin populaatiolla noin neljässä minuutissa. Eli mallinnusnopeus on keskimäärin noin 4000 neutronia sekunnissa. Jos oletetaan laskentanopeuden olevan sama kolmiulotteisessa tapauksessa, koko reaktorissa sekunnin aikana tapahtuvien neutronireaktioiden mallintamiseen kuluisi tällä laskentanopeudella noin  $7,97 \cdot 10^{16}$  sekuntia eli noin 2,5 miljardia vuotta. Tällä hetkellä tehokkaimmalla supertietokoneellakin tähän laskentaan kuluisi yli 900 vuotta, olettaen että mallinnus nopeutuisi suoraan laskentanopeuksien suhtees-

sa. Kirjoitushetkellä tehokkain supertietokone oli japanilainen K computer, jonka laskentanopeus on noin 10 PFLOPS [6]. Tällä perusteella on aiheellista olettaa, ettei ydinreaktorin toiminnan täydellisen reaaliaikaisen Monte Carlo-mallinnuksen vaatimaa tietokoneen laskentanopeutta saavuteta ainakaan vielä aivan lähivuosina.

Kuriositeettina voidaan laskea reaktorisydämen simulointiin teoriassa tarvittavan sähkön määrä, mikäli simulointi toteutettaisiin edellä mainituista työasemista kootulla riittävän laskentatehon omaavalla klusterilla. Yhden työaseman sähkötehon tarpeeksi voidaan olettaa noin 400 wattia. Työasemia täytyisi edellisten laskelmien perusteella kytkeä rinnakkaislaskentaan noin  $8 \cdot 10^{16}$  kpl, jotta yhden sekunnin aikana syntyneet neutronit saataisiin mallinnettua saman sekunnin aikana. Tehontarpeeksi saadaan siis  $8 \cdot 10^{16} \cdot 400 \text{ W} = 3,2 \cdot 10^{19} \text{ W}$ , joka vastaa 20 miljardin EPR tyyppisen ydinvoimalaitoksen sähkötehoa. Ilmeisimmät ongelmat tässä hankkeessa olisivat, ettei tietokoneita ole niin paljon, eikä riittävän montaa EPR laitosta mahdu Maahan, sillä yksi EPR ydinvoimalaitos tarvitsee noin 10 hehtaaria tilaa, eli kokonaistilantarve olisi noin kaksi miljardia neliökilometriä ja Maan kokonaispinta-ala on noin 510 miljoonaa neliökilometriä, ja siitäkin noin kaksi kolmasosaa on veden peittämänä.

Osittain edellä mainittujen seikkojen takia reaktorin kokosydänlaskuihin käytetään edelleen jotakin yksinkertaistettua mallia. Tässä työssä käytetty menetelmä, jossa Monte Carlo laskentaa käyttäen määritetään reaktorisydämen muodostavien polttoaineriippujen homogenisoidut vaikutusalatiedot ja lasketaan näiden perusteella nodilaskentamenetelmää käyttäen reaktorin tila erilaisissa tilanteissa, on yksi esimerkki tällaisesta yksinkertaistetusta mallista.

## 1.1. Työn tavoitteet

Tämän diplomityön tavoitteena on toimia dokumentointina työn tekemisen yhteydessä toteutettavalle hankkeelle riippumattoman reaktorisydänlaskentaketjun luomiseksi viranomaiskäyttöön. Riippumaton laskentaketju on tarkoitus muodostaa tuottamalla ARES reaktorisydänsimulaattorille tarvittavat vaikutusalatie-

dot voimayhtiöiden ja polttoaineen tuottajien käyttämistä ohjelmistoista riippumattomalla ohjelmalla.

Teknologian Tutkimuskeskus VTT:llä kehitetty Serpent Monte Carlo –laskentakoodi on valittu tähän tarkoitukseen käytettäväksi ohjelmaksi, sillä se on tehty ARES:n tapaan muista alan ohjelmistoista valmistavista tahoista riippumattomasti. Serpent on myös toimintaperiaatteeltaan erilainen muihin yleisesti ryhmävakioiden tuottamiseen käytettyihin ohjelmistoihin verrattuna.

Nämä ohjelmat yhdistämällä saadaan aikaan laskentaketju, joka on riippumaton sekä ohjelmistojen valmistajista että käytetyistä laskentamenetelmistä mahdollisesti johtuvista yhteisistä virhelähteistä. Näin muodostetulla laskentaketjulla ainoat yhteiset virhelähteet yleisesti käytettyjen laskentaketjujen kanssa ovat mahdolliset virheet ydinvakiokirjastoissa sekä tietokoneiden systemaattinen laskentavirhe, joka todennäköisesti olisi jo tullut ilmi muissa yhteyksissä.

Työn tavoitteiden toteutuminen ja laskentaketjun toimivuus on tarkoitus osoittaa laskemalla Olkiluoto 3 EPR reaktorin alkulatauksen säätösauvojen tehokkuudet ja sammutusmarginaali tätä laskentaketjua käyttäen.

Vaikutusalakirjastojen luominen tällaisella menetelmällä on monivaiheinen prosessi. Eri vaiheissa tehtävät toimenpiteet ja käytetyt menetelmät on esitetty tässä diplomityössä. Erilaisia ohjelma- ja syötetiedostoja on kuitenkin työn edetessä tehty niin paljon, ettei kaikkia niitä voi tähän työhön liittää. Esimerkiksi liitteessä 1 nähtävä polttoaineriippujen Serpent-syötetiedosto on esitetty lyhennettynä ja vain yhdelle nipputyypille yhdessä laskentapisteessä.

## 2. REAKTORIFYSIIKAN PERUSTEITA

Tämän työn kannalta olennaisten seikkojen ymmärtäminen edellyttää ainakin pintapuolista reaktorifysiikan perusteiden tuntemista. Keskeisimmät peruskäsitteet ja ilmiöt on pyritty selvittämään totuutta mukaillen ja mahdollisimman helposti ymmärrettävällä tavalla tässä luvussa. Kovin kattavaa analyysiä kaikista ilmiöistä ei tässä yhteydessä ole mahdollista eikä välttämättä edes tarkoituksen mukaista esittää. Kaikista esitellyistä ilmiöistä on aikojen saatossa tehty useita tieteellisiä tutkimuksia ja kirjoitettu kirjojakin.

### 2.1. Ydinreaktiot

Ydinreaktorissa nimensä mukaisesti tapahtuu erilaisia ydinreaktioita. Ydinreaktio tarkoittaa muutosta tai vuorovaikutusta aineen atomin ytimessä. Yleisesti ehkä paremmin tunnetut kemialliset reaktiot eroavat ydinreaktioista siten, että ne tapahtuvat elektronien välityksellä ja vaikuttavat siis ainoastaan atomien elektronikuorien ominaisuuksiin atomien ytimien pysyessä muuttumattomina. Vaikka reaktorissa tapahtuu tietysti myös kemiallisia reaktioita, eivät ne yleensä ole, onnettomuustilanteita ehkä lukuun ottamatta, reaktorifysikaalisesti kovin mielenkiintoisia, eikä niitä siksi käsitellä tässä työssä.

Reaktorin toiminnan kannalta merkittävimpien ydinreaktioiden ominaisuuksia on esitelty tässä kappaleessa lyhyesti. Reaktioiden yksityiskohtaisempi tarkastelu esimerkiksi hiukkasfysiikan näkökulmasta ei ole reaktorifysikassa välttämätöntä. Siksi tässä yhteydessä ei syvemmin paneuduta siihen, miten tai miksi reaktiot oikeastaan tapahtuvat, vaan esitetään reaktioiden yleisiä ominaisuuksia ja pohditaan mitä niistä seuraa ja miten ne vaikuttavat reaktorin toimintaan.

### 2.1.1. Neutronivuorovaikutukset

Reaktorifysiikan kannalta merkittävimmät ydinreaktiot tapahtuvat neutronien törmätessä atomien ytimiin. Neutronin törmäminen atomin ytimeen voi aiheuttaa erilaisia ydinreaktioita kohdeytimessä. Mahdolliset reaktiot riippuvat sekä kohdeytimen ominaisuuksista että törmäävän neutronin nopeudesta eli energiatasosta.

Neutronivuorovaikutusten todennäköisyys riippuu voimakkaasti ytimeen törmäävän neutronin energiatasosta eli neutronin nopeudesta. Useiden vuorovaikutusten todennäköisyys suurenee selvästi, kun neutronien nopeus on samaa suuruusluokkaa aineen atomien lämpövärähtelystä johtuvan liikkeen nopeuden kanssa. Tällöin neutronien sanotaan olevan termisiä, sillä ne ovat liikemäärältään tasapainossa ympäröivän aineen lämpöliikkeen kanssa. Termisen alue käsittää suuruusluokaltaan alle yhden elektronivoltin energian omaavat neutronit. Tyypillisesti reaktorifysiikassa ja laskentaohjelmistoissa käytetään termisen alueen ylärajana 0.625 eV energiaa. Vaikutusalakirjastoissa on yleisesti määritetty atomien vaikutusalat termisille neutroneille käyttäen neutronien energiana 2200 m/s neutronien nopeutta vastaavaa energiaa.

Neutronin nopeuden riippuvuus energiasta voidaan laskea neutronin massan avulla liike-energian yhtälöstä

$$E = \frac{1}{2}mv^2, \tag{1}$$

missä  $E$  on neutronin energia Jouleina,  $m$  neutronin massa kilogrammoina ja  $v$  neutronin nopeus metriä sekunnissa. Taulukkotiedon mukaan neutronin massa on 1,008665 u [2, s. 601]. Yksikkö u on atomin osasten massayksikkö, jonka määritelmän mukaan hiili-12 atomin massaluku on tasan 12. Yksi u on siten  $1,660539 \cdot 10^{-27}$  kg ja 1 eV vastaava energia on  $1,6021765 \cdot 10^{-19}$  J [2, s. 599]. Nopeus ratkaistuna yhtälöstä (1) on

$$v = \sqrt{\frac{E}{\frac{1}{2}m}}. \quad (2)$$

Fissiossa vapautuvat neutronit saavat keskimäärin 1.67 MeV energian ja kulkevat sitä vastaavalla nopeudella. Näitä korkeaenergisiä fissioneutroneita kutsutaan kerkeiksi tai nopeiksi neutroneiksi. Korkeaenergiset neutronit vuorovaikuttavat materiaalien kanssa heikommin, mutta niillä on toisaalta kyky aiheuttaa fissio myös useissa sellaisissa raskaissa ytimissä, jotka eivät ole fissiilejä eli termisillä neutroneilla fissioituvia.

Termisten neutronien nopeus 2200 m/s vastaa yhtälön (1) mukaan 0,025 eV energiatasoa. Vaikka nopeimpien termistenkin neutronien nopeus, joka yhtälöstä (2) 0,625 eV energian mukaan ratkaistuna on lähes 11 km/s, vaikuttaa melko suurelta, sopii usein käytetty kuvaus hitaat neutronit kuitenkin verrattain hyvin termisten neutronien ryhmälle. Nimittäin fissiossa vapautuvien, keskimäärin 1,67 MeV energian omaavien, neutronien keskinopeus on kuitenkin aivan eri kertaluokkaa, eli noin 17942 km/s.

### 2.1.2. Fissio

Fissio, joka oikeastaan on koko energiantuotantoon tähtäävän ydintekniikan päätavoite, on ydinreaktioista reaktorin toiminnan kannalta merkittävin ja muut ydinreaktiot lähinnä vain tapahtuvat fysiikan lakien mukaan tavoitellun stabiilin fissioketjureaktion sivutuotteina. Fissioreaktiossa raskas ydin halkeaa yleensä kahdeksi kevyemmäksi ytimeksi ja samalla vapautuu joitakin neutroneja, sillä kahdessa kevyemmässä ytimessä neutroneja on yhteensä vähemmän kuin yhdessä raskaassa ytimessä. Neutronimäärän lisäksi myös raskaan ytimen massa on hieman suurempi kuin fissiotuotteiden ja vapautuvien neutronien yhteenlaskettu massa. Tämä massojen pieni ero johtuu siitä, että raskaamman ytimen hiukkasten välinen sidosenergia on nukleonia kohden hieman fissiotuotteiden yhteenlaskettua sidosenergiaa pienempi.

Tämä fissiossa ytimen osasten energiasidosten vahvistuessa katoava massa muuttuu gammakvantteina vapautuvaksi energiaksi ja fissiotuotteiden liike-energiaksi. Fissiotuotteiden saama liike-energia muuttuu hyvin nopeasti lämmöksi niiden törmätessä ympäröivään materiaaliin. Myös suuri osuus fissioissa ja muissa ydinreaktioissa vapautuvasta gammasäteilystä absorboituu reaktorisydämen materiaaleihin muuttuen lämmöksi. Näiden mekanismien kautta syntyy pääosa reaktorin tuottamasta lämpötehosta.

### **Neutronien aiheuttamat ja spontaanit fissiot**

Fissio aiheutuu neutronin törmätessä raskaan atomin ytimeen. Törmäyksen seurauksena ydin absorboi neutronin ja muuttuu neutroniytimäärän vuoksi epävakaaiksi. Parittoman massaluvun omaavat raskaat atomit hajoavat helpommin tällaisen häiriön seurauksena ja ne fissioituvat helposti termisten neutronien vaikutuksesta. Tällaisen atomirakenteen omaavia raskaita isotooppeja kutsutaankin fissiileiksi.

Parillisen massaluvun omaavilla atomeilla fission todennäköisyys termisillä neutroneilla on hyvin pieni, sillä tällaisen ytimen sidosenergia on suurempi kuin parittoman massaluvun atomien. On kuitenkin olemassa kullekin isotoopille ominainen kynnyksenergia, jonka ylittävä neutronitörmäys voi aiheuttaa fission myös tällaisessa ei-fissiilissä ytimessä. Suurienerginen neutroni ei törmää ytimeen niin todennäköisesti kuin termiselle tasolle hidastunut, mutta törmätessään se voi aiheuttaa fission missä tahansa lyijyä raskaammassa ytimessä. Tällaisia suurienerginen neutronin aiheuttamia fissioita kutsutaan reaktorifysiikassa nopeiksi fissioiksi.

Fissioita tapahtuu eräissä raskaimmissa atomeissa myös ilman neutronivuorovaikutusta, mutta tällaisten spontaanien fissioiden osuus kaikista reaktorissa tapahtuvista ydinreaktioista on kuitenkin niin vähäinen, ettei niillä ole reaktorin käynnistystä lukuun ottamatta merkitystä reaktorin toiminnan kannalta. Reaktoria käynnistettäessä käytettyyn polttoaineeseen muodostuneet spontaanisti fissioituvat uraania raskaammat atomit muodostavat ketjureaktion hallitun käynnistämisen mahdollistavan neutronilähteen. Pelkästään tuoreella polttoaineella



ladattu reaktori on käynnistettävä erillistä neutronilähdettä käyttäen, sillä tuoreen polttoaineen neutronien tuotto on hyvin vähäistä. Tästä johtuen ketjureaktion käynnistymiseksi täytyisi reaktori saattaa niin paljon ylikriittiseksi, ettei ketjureaktion kasvua välttämättä pystyittäisi hallitsemaan sen päästyä alulle.

### **2.1.3. Sironta**

Sironta on ydinreaktio, jossa neutroni törmää väliaineen ytimeen, mutta jatkaa matkaansa johonkin suuntaan ytimen muuttumatta. Sironnassa neutronin nopeus ja kulkusuunta yleensä muuttuvat. Neutronien hidastuminen reaktorin hidasteissa perustuukin pääosin kevyistä ytimistä tapahtuvaan sirontareaktioon.

#### **Elastinen sironta**

Elastinen sironta, jossa kohdeydin ja törmäävä hiukkanen säilyttävät varauksensa, ei välttämättä ole varsinainen ydinreaktio vaan se voi tapahtua hiukkasen muuttaessa suuntaansa atomiytimen voimakenttien vaikutuksesta hiukkasen varsinaisesti törmäämättä ytimeen. Suunnanmuutos kuitenkin pienentää hiukkasen liike-energiaa suunnanmuutoksen ja törmäyksen kohteena olevan ytimen massan mukaisesti. Mitä suurempi suunnanmuutos on, sitä enemmän liike-energiaa se vaatii tapahtuakseen ja mitä kevyempi on törmäyksen kohteena oleva ydin, sitä enemmän energiaa voi siirtyä törmäävältä hiukkaselta kohdeytimelle.

Vety-ytimen ja neutronin törmäys on tapahtumana samankaltainen kuin biljardipallojen osuminen toisiinsa. Tällöin keskeisessä törmäyksessä liike-energian on mahdollista siirtyä kokonaisuudessaan törmäyksen kohteena olevalle ytimelle, törmäävän neutronin jäädessä paikoilleen. Neutronin törmääminen raskaaseen uraaniytimeen taas muistuttaa massajakauman kannalta enemmän tapahtumaa, jossa hernepyssyllä ammutaan keilapalloa. Silloin neutronin vauhti ei kimpoamisessa juuri hidastu, vaikka suunta muuttuisi paljonkin.

## Epäelastinen sironta

Sirontaa kutsutaan epäelastiseksi, jos törmäyksen kohteena olevan ytimen va-  
raustila muuttuu sironnan seurauksena. Sironnan vaikutuksesta virittynyt ydin  
palautuu yleensä myöhemmin tapahtumaa edeltäneeseen tilaansa ja viritystilan  
palautuessa ydin lähettää gammakvantin.

Joissakin tapauksissa sironnan yhteydessä ytimestä voi irrota muitakin neut-  
roneja. Tällaista tapahtumaa kutsutaan  $n$ - $xn$  reaktioksi, missä  $x$  on jokin pieni  
positiivinen kokonaisluku. Esimerkiksi  $n$ - $2n$  reaktiossa ytimeen törmännyt neut-  
roni irrottaa yhden kohdeytimen neutroneista.

### 2.1.4. Kaappaus

Kaappaukseksi kutsutaan reaktiota, jossa kohdeytin absorboi neutronin, mutta  
tästä ei kuitenkaan seuraa fissiota. Kaappaus on mahdollinen lähes kaikilla yti-  
millä. Kaappauksen todennäköisyys riippuu törmäyksen kohteena olevasta yti-  
mestä ja neutronin energiatasosta. Useilla aineilla on niin sanottu resonanssi-  
alue, eli neutronien energiatasoja joilla neutronien absorptio on erityisen toden-  
näköistä. Etenkin uraani-238:n resonanssialue on reaktorin toiminnan kannalta  
oleellinen. Suurimmalta osin tähän ilmiöön perustuu reaktorien käytön ja sää-  
dettävyyden kannalta hyödyllinen polttoaineen lämpötilan suurentumisesta joh-  
tuva automaattinen tehon aleneminen. Lämpötilan suurentuminen aiheuttaa  
resonanssien laajenemista, jolloin entistä suurempi osuus neutroneista osuu  
tällaisille energiatasoille, joilla kaappaus on erittäin todennäköinen ja tämä vä-  
hentää vapaiden neutronien määrää reaktorissa.

Joidenkin fissiotuotteiden kaappausreaktiot ovat myös oleellisesti reaktorin toi-  
mintaan vaikuttavia. Aiemmin esille tulleen ksenonmyrkytyksen aiheuttaja, kse-  
non-135, on tärkein tällainen reaktorin toimintaan vaikuttava fissiotuote. Toinen  
merkittävän kaappausvaikutusalan omaava fissiotuote on samarium-149. Näi-  
den isotooppien pitoisuuksia seurataankin yleensä laskennoissa.

## **Fertiili kaappaus**

Uraani-238:n kaappaamat neutronit ovat paitsi reaktorin säädettävyyden, niin myös pidemmällä aikavälillä reaktorin polttoainetalouden kannalta hyödyllisiä. Tämä johtuu konversioilmioistä, jossa neutronin kaapannut ydin muuttuu toiseksi aineeksi, jonka seurauksena saadaan uusia fissiilejä ytimiä polttoaineeseen. Polttoainetalouden kannalta tämä ilmiö on hyvin merkittävä, sillä polttoaineesta saatavasta energiamäärästä koko käyttöjakson ajalla suurin osa tulee plutonium-239:n fissioitumisesta, vaikka plutoniumia ei tuoreessa polttoaineessa ole ollenkaan.

## **Loiskaappaus**

Uraani-235:n kaappausreaktiota kutsutaan loiskaappaukseksi. Tämä ei ole toivottu tapahtuma, sillä uraani-235 muuttuu kaappauksen seurauksena ei fissiiliksi uraani-236:ksi. Tällaisen kaappauksen seurauksena menetetään siis neutronin lisäksi polttoaineydin. Uraani-236 saattaa tietenkin neutronikaappausten kautta muuntua vielä fissiiliksi isotoopiksi tai fissioitua nopean neutronin törmäyksessä, mutta kokonaisuudessaan tapahtuman neutronituotto ei enää ole positiivinen.

### **2.1.5. Neutroneista riippumattomat ydinreaktiot**

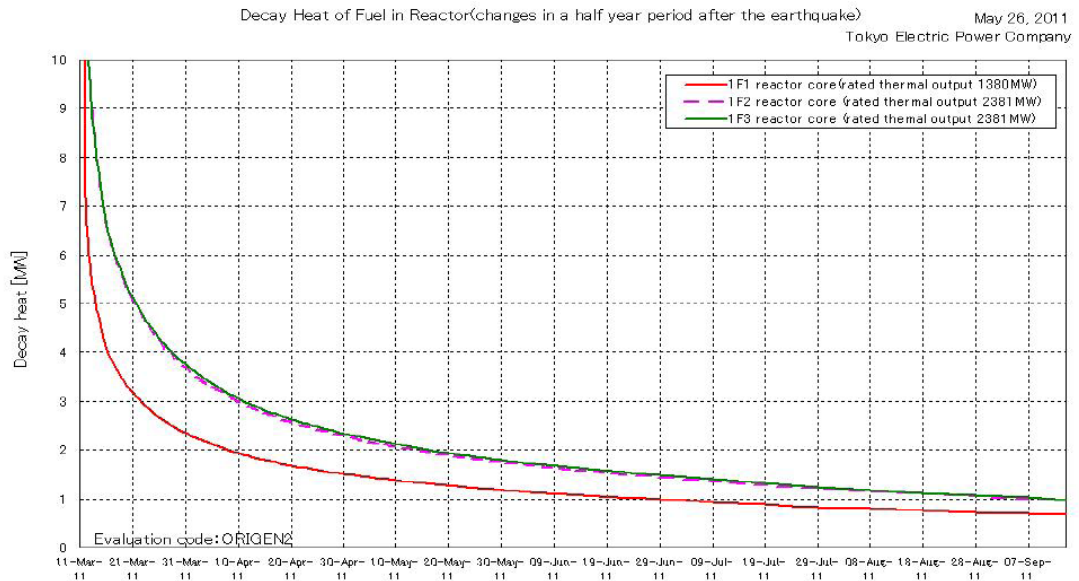
Reaktorissa tapahtuu myös sellaisia ydinreaktioita, jotka eivät ole suoraan neutronien aiheuttamia. Suurin osa näistäkin reaktioista on kuitenkin välillisesti neutronisäteilytyksestä johtuvia fissiotuotteiden ja aktivoitumistuotteiden ydinreaktioita. Oleellisimmin reaktorin käyttöön näistä vaikuttavat radioaktiivinen hajoaminen ja jo aiemmin esitelty spontaani fissio.

### 2.1.6. Radioaktiivinen hajoaminen ja jälkilämpö

Radioaktiivinen hajoaminen on eräiden ydinten ominaisuus. Vaikka radioaktiivisia aineita esiintyykin luonnossa melko vähän, on kuitenkin suurin osa aineiden tunnetuista isotoopeista radioaktiivisia. Radioaktiivisten aineiden vähyys luonnossa johtuu siitä, että aineet muuttuvat radioaktiivisen hajoamisen yhteydessä toisiksi aineiksi, jotka saattavat edelleen olla radioaktiivisia, mutta jossain vaiheessa hajoamisketjut kuitenkin aina päättyvät stabiiliin isotooppiin. Tällä tavoin pitkän ajan kuluessa radioaktiiviset aineet häviävät ja stabiilit isotoopit jäävät jäljelle.

Fissiotuotteet ja neutronin kaapanneet ytimet ovat yleensä epästabiileja, koska niissä on liikaa neutroneita protonien määrään nähden. Tämä neutroniylimäärä poistuu radioaktiivisen hajoamisen kautta. Yleisimmin ytimestä oleva ylimääräinen neutroni muuttuu protoniksi, jolloin ytimen massaluku kasvaa yhdellä ja ytimestä poistuu elektroni ja antineutriino, eli tapahtuu beeta-miinus-hajoaminen.

Reaktorin sammuttamisen jälkeen syntyvä jälkilämpö johtuukin lähes yksinomaan radioaktiivisten fissiotuotteiden hajoamisissa vapautuvasta energiasta. Jälkilämpöteho on korkeimmillaan, välittömästi pitkään käynnissä olleen reaktorin sammutuksen jälkeen, noin 7 % reaktorin käynnin aikaisesta lämpötehosta. Tarkasti ottaen välittömästi ketjureaktion katkeamisen jälkeen tehotaso on hieman yli 7 % reaktorin sammutusta edeltäneestä tehosta, sillä myös viivästyneiden neutronien aiheuttamat fissiot tuottavat energiaa vielä noin minuutin ketjureaktion katkeamisen jälkeen. Jälkilämpöteho pienenee ajan myötä radioaktiivisten atomien hajotessa, sillä halkeamistuotteita ei enää synny lisää reaktorin sammuttamisen jälkeen ja jossain kohdin kaikkien radioaktiivisten aineiden hajoamisketjut päättyvät stabiileihin isotooppeihin. Kuvassa 1 nähdään reaktorin jälkilämpötehon suuruus ajan funktiona reaktorin sammuttamisen jälkeen.



**Kuva 1.** Jälkilämpöteho pienenee logaritmisesti reaktorin sammuttamisen jälkeen. Tässä kuvassa on esitetty Fukushima erityyppisten reaktorien tehon tuotot sammutuksen jälkeen. (TEPCO)

Jälkilämpö on siinä mielessä ikävä ilmiö, että se tekee polttoaineen jäädyttämisen välttämättömäksi vielä pitkään reaktorin sammuttamisen jälkeen, eikä sitä pysty pysäyttämään tai säätämään. Mikäli pitkään käytetyn sammutetun reaktorin tuottamaa jälkilämpöä ei onnistuta siirtämään pois, riittää jälkilämmön tuotto sulattamaan polttoaineen vielä huomattavan pitkän ajan kuluttua reaktorin sammutuksesta. Pitkään reaktorissa käytettyä polttoainetta on reaktorista poistamisen jälkeenkin jäädytettävä vesialtaissa useita vuosia, ennen kuin sen tuottama lämpöteho pienenee sellaiselle tasolle, ettei polttoaine vaurioituisi sen joutuessa ilmajäähdytetyksi.

Tuoreenkin polttoaineen sisältämät uraaniatomit ovat myös radioaktiivisia, mutta niiden puoliintumisaika on kuitenkin niin pitkä, ettei uraanista aiheutuva radioaktiivisuus ole kovin merkittävää. Tuoretta polttoainetta voidaankin säteilyn kannalta käsitellä ilman varotoimia, kunhan huolehditaan, ettei polttoaine pääse kriittisyyden mahdollistaviin olosuhteisiin. Uraanin myrkyllisyyden ja reaktorikäytön edellyttämien puhtausvaatimusten takia polttoainetta ei kuitenkaan koskaan käsitellä paljain käsin.

Käytetyssä polttoaineessa radioaktiivisia aineita on todella paljon. Juuri reaktorista poistetussa polttoainenipussa tapahtuu niin paljon radioaktiivisten aineiden hajoamista, että suojaamattoman nipun lähellä oleskelu aiheuttaisi kuolettavan säteilyannoksen sekunneissa. Käytetty polttoaine onkin jälkilämmön poiston mahdollistamisen ohella myös säteilysuojelullisista syistä pidettävä vesialtaissa. Vesi on hyvien lämmönsiirto-ominaisuuksien lisäksi hyvä säteilysuojausmateriaali. Vesi absorboi melko tehokkaasti kaikkia säteilylajeja. Hiukkassäteily pysähtyy hyvin lyhyellä matkalla vedessä ja gammasäteilykin vaimenee muutama metrin vesikerroksella hyvin tehokkaasti. Vesi on myös hyvä suoja neutronisäteilyä vastaan, sillä neutronit hidastuvat vedessä erittäin tehokkaasti.

### **2.1.7. Viivästyneet neutronit**

Joissakin tapauksissa fissiotuotteiden hajotessa ylimääräisiä neutroneja sinkoutuu ulos ytimeistä. Tällä tavoin viivästyneenä syntyy uraani-235:n fissioituessa noin 0,65 % kaikista fissioissa vapautuvista neutroneista. Viivästymisaika vaihtelee sekunnin murto-osista joihinkin minuutteihin, keskiarvon ollessa noin 13 sekuntia uraani-235:n ollessa fissioituvana aineena. Vaikka viivästyneiden neutronien osuus on pieni ja pieni viive fission ja neutronien vapautumisen välillä vaikuttaa äkkiseltään muutenkin melko merkityksettömältä, on tämä ilmiö reaktorin toiminnan kannalta hyvin tärkeä, sillä tämä viive fission ja neutronien vapautumisen välillä mahdollistaa reaktorin säätämisen. Fissiossa välittömästi vapautuvien neutronien absorboituminen reaktorissa kestää keskimäärin vain joitakin mikrosekunteja [2. s 73]. Tällainen viive on niin pieni, että käytännön säätötoimenpiteet eivät mitenkään ehdi reagoida tällaisella aikavakiolla tapahtuviin muutoksiin. Kun otetaan tarkasteluun mukaan viivästyneet neutronit, saadaan keskimääräiseksi absorboitumiseen kuluvaksi ajaksi selvästi pidempi aika, jolloin neutronien määrän säätäminen on mahdollista. Viivästyneiden neutronien energiataso on selvästi alhaisempi kuin fissiossa suoraan vapautuvien kerkeiden neutronien. Tämä tekee viivästyneistä neutroneista vielä merkittävämpiä säädön kannalta, sillä alemmalla energiatasolla syntyvät neutronit hidastuvat nopeammin termiselle energiatasolle ja ne välttävät helpommin resonanssi-kaappaukset.

## 2.2. Palama

Ydinpolttoaineen kulumista määritettäessä käytetään käsitettä palama. Palama tarkoittaa polttoaineella tuotettua energiaa painoyksikköä kohden. Yleisesti käytetään yksikköinä megawattipäivää kilogrammaa kohden (MWd/kg) tai gigawattipäivää tonnia kohden (GWd/t). Usein tarkennuksena ilmoitetaan vielä massayksikön jälkeen mistä massasta on kysymys ja perään lisätään U uraanin massan tai HM (Heavy Metal) kaikkien aktinidien massan mukaan, mikäli tuore polttoaine sisältää muitakin aineita kuin uraania.

Palamaa käytetään polttoaineen kulumisen mittarina, koska käytännössä polttoaineen massa ei juuri muutu, vaikka saatava energia syntyykin katoavasta massasta. Loppuun käytetty polttoainenippukin on energian luovuttamisen myötä menettänyt massastaan niin pienen osan, ettei käytännössä pystytä punnitsemalla havaitsemaan onko nippu uusi vai loppuun käytetty. Massan pieneneminen voidaan laskea Einsteinin kuuluisalla yhtälöllä

$$E = mc^2, \tag{3}$$

missä  $c$  on valon nopeus. Massan muutos voidaan laskea saadusta energiasta yhtälöllä

$$m = \frac{E}{c^2}. \tag{4}$$

Loppuun käytetyn polttoaineen palama voi kevytvesireaktorissa olla enimmillään noin 60 MWd/kgU. Tämä on  $60 \cdot 10^6 \cdot 24 \text{ h/d} \cdot 60 \text{ min/h} \cdot 60 \text{ min/s} = 5,184 \cdot 10^{12} \text{ J/kgU}$ . Valon nopeus on 299792458 m/s. Näillä arvoilla yhtälöstä (4) voidaan ratkaista loppuun käytetyn polttoainenipun menettäneen massastaan 0,00005768 kg/kgU. Yhdessä EPR polttoainenipussa uraanidioksidin massa on noin 600 kg. Tällaisessa polttoainenipussa massan muutos olisi 60 MWd/kgU palamalla noin 34 grammaa. Näin pientä muutosta on käytännössä hyvin hankala havaita.

### 2.3. Vaikutusalat

Vaikutusala kuvaa tapahtuvan neutronivuorovaikutuksen todennäköisyyttä kyseisessä väliaineessa. Vaikutusala riippuu materiaalin ominaisuuksien ja atomitiheyden lisäksi voimakkaasti törmäävän neutronin energiasta. Myös kohdeaineen lämpötila voi vaikuttaa vaikutusalaan merkittävästi.

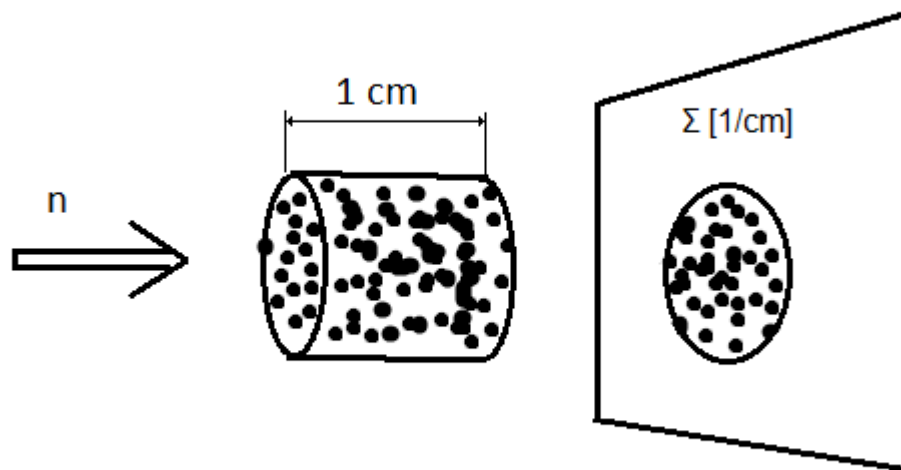
Vaikutusaloja voidaan tarkastella eri tasoilla. Eli joko yksittäisen atomin vaikutusala tai atomeista koostuvan aineen vaikutusala. Tarkasteltaessa yksittäisen atomin tapausta, puhutaan mikroskooppisesta vaikutusalasta, jolla tarkoitetaan atomiytimen kuvitteellista pinta-alaa siihen törmäävää neutronia vastaan. Mikroskooppisen vaikutusalan symbolina käytetään pientä kreikkalaista  $\sigma$  kirjainta ja sen yksikkönä käytetään yleisesti yksikköä barn. Barn on lähinnä ydinfysiikan alalla käytetty pinta-alan yksikkö, joka on Suuruudeltaan  $1 \cdot 10^{-28} \text{ m}^2$ . Tämä suuruusluokka käytetylle pinta-alan yksikölle perustuu vaikutusalojen suuruuteen, siten barneissa ilmaistuna reaktorifysiikan kannalta tärkeimpien atomien useimmat vaikutusalat voidaan esittää helposti luettavina lukuina. Esimerkiksi uraani-235:n fissiovaikutusala termisillä neutroneilla on noin 582 barn [2, s. 605].

Materiaalin vaikutusala tarkasteltaessa puhutaan makroskooppisesta vaikutusalasta, joka kuvaa todennäköisyyttä jolla neutroni aiheuttaa aineessa tarkasteltavan ydinreaktion jossakin sen atomien ytimistä. Makroskooppisen vaikutusalan symbolina käytetään isoa sigmaa  $\Sigma$  ja sen yksikkönä käytetään yleisimmin yksikköä  $\text{cm}^{-1}$ , eli vuorovaikutuksia senttimetriä kohden.

Mikroskooppinen vaikutusala on ytimen ominaisuus, johon vaikuttavat lämpötila ja törmäävän neutronin energia. Makroskooppiseen vaikutusalaan vaikuttaa edellisten lisäksi mahdolliset muutokset aineen atomitiheydessä. Atomitiheyden muuttumista voi aiheuttaa esimerkiksi paineen tai lämpötilan muutos tai atomien määrän muuttuminen esimerkiksi polttoaineessa palaman myötä.



Makroskooppista vaikutusalaa voidaan ajatella kuvan 2 mukaisena yksinkertaistettuna mallina, jossa vaikutusala kuvautuu ”varjon” ja ”valon” suhteena kuvassa oikealla olevalle seinämälle väliaineen atomien estäessä vasemmalta tulevien neutronien reitin seinään.



**KUVA 2.** Makroskooppisen vaikutusalan teoreettinen yksinkertaistus voisi näyttää tältä.

Kullekin kappaleessa 2.1 esitellylle ydinreaktiolle on määriteltävissä oma vaikutusala, joka siis kuvaa kyseisen reaktion tapahtumisen todennäköisyyttä tarkasteltavassa aineessa.

### 2.3.1. Sirontavaikutusala

Sirontavaikutusala kuvaa todennäköisyyttä, jolla neutroni osuu kyseisen väliaineen atomien ytimeen tai sen voimakenttään ja muuttaa kulkunopeuttaan. Vuorovaikutuksessa neutroni voi muuttaa nopeuttaan ja suuntaansa, mutta ei absorboidu kyseiseen ytimeen. Sirontavaikutusala on oleellinen peruste reaktorissa käytettävän hidasteaineen valinnalle. Useilla kevyillä atomiytimillä on kaappausvaikutusalaan verrattuna huomattavan suuri sirontavaikutusala, siksi esimerkiksi vety ja deuterium ovat hyviä hidasteaineita. Hapen sirontavaikutusala on melko pieni, mutta myös sen kaappausvaikutusala on merkittävän pieni.

Suurin osa maailman ydinreaktoreista hyödyntääkin näitä ominaisuuksia hidasteena käytettävän kevyen tai raskaan veden muodossa.

Myös polttoaineella ja muilla reaktorin osilla on omat sirontavaikutusalansa, mutta raskaampina aineina näiden neutroneita hidastava vaikutus on sironnasta huolimatta pieni, sillä liikemäärän yhtälön mukaisesti sirottavan ytimen massa vaikuttaa kääntäen verrannollisesti sen kykyyn ottaa vastaan energiaa törmäyksessä. Tämän seurauksena raskaammasta ytimestä sirotessa neutronin energia pienenee vähemmän ja sirontoja täytyy neutronin nopeuden hidastumiseksi tapahtua enemmän kuin kevyempien ytimien tapauksessa.

### **2.3.2. Absorptiovaikutusala**

Absorptiovaikutusala kuvaa todennäköisyyttä, jolla neutroni absorboituu johonkin väliaineen ytimeen. Absorptiovaikutusala käsittää sekä kaappaus- että fissioreaktioiden tapahtumisen todennäköisyyden ja on näiden vaikutusalojen summa. Fissioitumattomilla aineilla absorptiovaikutusala on siis sama kuin kaappausvaikutusala, koska fissioreaktion todennäköisyys on nolla.

### **2.3.3. Kaappausvaikutusala**

Kaappausvaikutusala kuvaa todennäköisyyttä jolla neutroni absorboituu väliaineeseen aiheuttamatta fissiota. Kaappausreaktio on mahdollinen kaikilla ytimillä, ja etenkin raskaat ytimet kaappaavat neutroneja helposti. Keskiraskaista ytimistä poikkeuksellisen suuri kaappausvaikutusala on ksenon-135:lla ja samarium-149:llä. Nämä ovatkin niin kutsuttuja reaktorimyrkkyjä, joita syntyy ydinpoltoaineen fissioiden seurauksena ja joiden vaikutus on syytä huomioida jo reaktorisydämen suunnittelussa, jotta reaktoria voitaisiin käyttää toivotulla tavalla. Kevyistä ytimistä suurin kaappausvaikutusala on boori-10:llä. Painevesireaktorien tehon säätäminen perustuukin yleensä jäähdytteen joukkoon sekoitetun boorihapon pitoisuuden säätämiseen.

Huomattavan pieni kaappausvaikutusala on puolestaan raskaalla vedyllä, hapella ja hiilellä, minkä takia kyseisiä aineita onkin käytetty raskaan veden ja grafiitin muodossa hidasteena monissa erilaisissa reaktoreissa. Kaappausvaikutusala on myös hyvin tärkeä tekijä hidasteen valinnassa, sillä hidasteeseen absorboituvat neutronit menetetään ja täten ketjureaktion jatkuminen vaarantuu. Tämän lisäksi hidasteen kaappaamat neutronit aiheuttavat hidasteaineessa muutoksia, jotka saattavat rajoittaa reaktorin tai hidasteen käyttöikä.

Reaktorisydämen rakenneosat tehdään yleensä zirkonium-seoksista sillä zirkoniumin kaappausvaikutusala on metalleista selvästi pienin. Sopivasti seostettuna zirkonium saadaan myös mekaanisesti riittävän kestäväksi esimerkiksi polttoaineen suojakuorena käytettäväksi.

#### **2.3.4. Fissiovaikutusala**

Fissiovaikutusala kuvaa todennäköisyyttä jolla neutroni absorboituu väliaineeseen aiheuttaen fission. Fissiovaikutusala on nolla kaikilla keveillä alkuaineilla, koska käytännössä ainoastaan lyijyä raskaammissa aineissa tapahtuu fissioita ja näin ollen vain raskaimmilla aineilla voi olla nollasta poikkeava fissiovaikutusala. Fissioituminen on todennäköisintä termisten neutronien absorboituessa fissiileihin isotooppeihin, eli yleisimpien kevytvesireaktoreissa käytettävien polttoaineiden tapauksissa käytännössä uraani 235 ja plutonium 239 ja 241. MOX-tai toriumpolttoainetta käytettäessä fissiilejä isotooppeja voi olla muitakin. Nopeat neutronit eivät aiheuta fissioita fissiileissä isotoopeissa niin suurella todennäköisyydellä kuin termiset, joten nopeassa reaktorissa vuon tiheys täytyy olla selvästi kevytvesireaktorien vastaavaa suurempi.

### **2.4. Reaktorin kasvutekijä ja kriittisyys**

Mikäli jälkilämpötehon osuus jätetään huomioimatta, riippuu reaktorin tuottama teho suoraan neutronivuon arvosta. Neutronivuo tarkoittaa tarkasteltavan alueen läpi kulkevien neutronien määrää aikayksikössä. Neutronivuon muutosta kuvaa reaktorin kasvukerroin  $k$ . Kasvukertoimen ollessa tasan 1 on reaktori kriit-

tinen, eli neutroneja syntyy ja häviää reaktorissa täsmälleen yhtä paljon, jolloin neutronivuo ja reaktorin teho pysyvät vakiona. Jos reaktorissa syntyy enemmän neutroneja kuin niitä häviää, on kasvukertoimen arvo yli yhden ja on reaktori ylikriittinen, tällöin neutronivuo ja teho kasvavat. Reaktorin ollessa alikriittinen, neutroneja häviää enemmän kuin niitä syntyy ja kasvukerroin on alle yhden, jolloin neutronivuo ja teho vähenevät.

Reaktorin kasvukerroin riippuu vallitsevista olosuhteista. Kasvukerointa kuvaamaan käytetään tunnettua neljän tekijän yhtälöä

$$k = \eta \epsilon p f, \tag{5}$$

missä  $\eta$  on fissioneutronituottoa kuvaava tekijä,  $\epsilon$  on nopean fission tekijä,  $p$  on resonanssin välttämisen todennäköisyys ja  $f$  on terminen käyttösuhde.

Määritelmän mukaan yhtälön ensimmäinen tekijä  $\eta$  on fissioneutronituoton ja fissiovaikutusalan tulo jaettuna absorptiovaikutusosalalla.

$$\eta = \frac{\nu \Sigma_f}{\Sigma_a} \tag{6}$$

Nopean fission tekijä kuvaa fission vapautuvien nopeuden neutronien välittömästi aiheuttamien fissioiden tuottamaa neutronien lisäystä. Resonanssin välttämisen todennäköisyys kuvaa todennäköisyyttä, jolla neutroni välttää hidastumisen aikana kaappauksen johonkin reaktorisydämen sisältämiin aineisiin. Terminen käyttösuhde kuvaa termiselle alueelle hidastuneen neutronin absorboitumisesta aiheutuvien fissioiden määrää suhteessa muihin reaktioihin.

### 3. REAKTORIN TURVALLISUUSMARGINAALIT

Ydinreaktorin käyttöön liittyy tunnettuja riskejä. Nämä on syytä ottaa huomioon jo reaktoria ja latausta suunniteltaessa, jolloin ikäviltä reaktiivisuusonnettomuuksilta ja reaktorin käyttöhäiriöiltä todennäköisesti vältetään. Kulloinkin vallitsevasta reaktorin käyttötilasta riippuen tiettyjen suureiden liiallinen muuttuminen, aiheuttaa reaktorin turvallisuuden kannalta ei toivottuja ilmiöitä. Näiden suureiden etäisyyttä vaaralliselle alueelle kutsutaan reaktorin turvallisuusmarginaaleiksi.

#### 3.1. Sammutusmarginaali

Turvallisuuden varmistamiseksi reaktori on kyettävä luotettavasti ja riittävän nopeasti sammuttamaan kaikissa käyttötilanteissa. Sammuttaminen toteutetaan kevytvesireaktoreissa säätösauvoilla, jotka kaappaavat neutroneja ja estävät siten ketjureaktion jatkumisen. Säätösauvojen tehokkuus kuvaa sitä minkä verran sauvan reaktorin sydämeen laittaminen tai sen poistaminen sydäimestä vaikuttaa reaktorin kasvukertoimeen. Sammutusmarginaalilla tarkoitetaan säätösauvojen aiheuttaman alikriittisyyden määrää, eli sitä kuinka paljon säätösauvojen tehokkuus voisi heikentyä, ennen kuin sammutettu reaktori tulisi uudelleen kriittiseksi. Ydinvoimalaitosohje YVL 1.13 määrää, että sammutusmarginaalin on oltava vähintään yhden prosentin suuruinen myös yksittäisen laitteen vikaantumisen tai henkilökunnan yksittäisen virheen sattuessa.

Säätösauvojen toimimattomuuden varalta on oltava myös vaihtoehtoinen tapa sammuttaa reaktori luotettavasti. Yleisimmin vaihtoehtoisena sammutustapana käytetään kevytvesireaktoreissa jäähdytteen sekaan syötettävää boorihappoa, jonka sisältämä isotooppi boori-10 kaappaa tehokkaasti termisiä neutroneja ja saa siten reaktorin alikriittiseksi. Vaihtoehtoisia sammutusmenetelmiä voi olla muunlaisiakin, kuten ensimmäisissä raskasvesihidasteisissa reaktoreissa oleva hidasteen poistamisen mahdollistava venttiili.

Sammutusmarginaali lasketaan siten, että etsitään ensin tehokkain säätösauva, oletetaan se toimimattomaksi ja lasketaan reaktorin kasvukerroin muiden säätösauvojen ollessa sydämessä. Tässä tilanteessa, YVL 1.13 mukaan, reaktorin on oltava vähintään yhden prosentin verran alikriittinen, eli suurin hyväksyttävissä oleva kasvukertoimen arvo tässä tilassa on siis 0.99.

Sammutusmarginaalia voitaisiin parantaa lisäämällä säätösauvojen tehokkuutta, mutta toisaalta säätösauvojen tehokkuutta rajoittaa vaatimus, ettei polttoaine saa rikkoutua mahdollisen säätösauvan ulossinkoutumisen aiheuttaman tehon nousun takia. Säätösauvan ulossinkoutumisen aiheuttama tehon tuotto on sitä suurempi, mitä tehokkaampi ulos sinkoutuva säätösauva on.

### **3.2. Etäisyys kalvokiehuntaan**

Painevesireaktorissa polttoainesauvan tuottaman lämpötehon liiallinen suureneneminen aiheuttaa paikallista kiehumista sauvan pinnalla. Veden kiehumisen polttoainesauvan pinnalla muodostaa sauvan ympärille eristävän höyrykerroksen, mikä radikaalisti heikentää lämmön siirtymistä polttoainesauvan pinnalta jäähdytteeseen ja siten aiheuttaa polttoaineen ja suojakuoren lämpötilojen suurentumista. Tämän vuoksi on huolehdittava, ettei lämpövuoto sauvan pinnalla suurene niin paljoa, että jäähdyte alkaa sen takia kiehua polttoainesauvojen pinnalla reaktorin käytön aikana. Polttoaineen lineaariteho, eli tuotettu teho pituusyksikköä kohden, on rajoitettava sellaiseksi, ettei jäähdyte kiehu odotettavissa olevissa käyttötilanteissa.

### **3.3. Kiehumavara**

Kiehumavara kuvaa marginaalia, jonka verran jäähdyte voi polttoainekanavan matkalla vielä lämmitä ennen kuin se saavuttaa kiehumispisteen. Kiehumisen aiheuttaa jäähdytteen tilavuuden kasvua, mikä puolestaan lisää virtausvastusta ja näin ollen hidastaa kyseisen polttoainenipun ohi kulkevaa virtausta. Virtauksen hidastuessa jäähdyte lämpenee enemmän ja kiehumisen voimistuu edelleen. Painevesireaktorin polttoainenipuissa ei yleensä ole virtausta ohjaavaa

polttoainekanavaa, joten yhden polttoainenipun alueella kiehumisen aiheuttama paikallinen virtausvastuksen kasvu siirtää virtauksen osin kiehuvan nipun alueelta viereisille nipoille.

### **3.4. Dryout-marginaali**

Kiehutusvesireaktorissa, missä jäähdyte kiehuu normaalistikin, polttoaineen jäähdytys puolestaan heikkenee oleellisesti, jos kaikki sauvan ympärillä virtaava vesi pääsee höyrystymään, eli sauvan pinta kiehuu kuiviin. Vesihöyryn lämmönjohtavuus ja lämpökapasiteetti ovat huomattavasti pienemmät kuin nestemäisellä vedellä. Tästä johtuen polttoaineen suoja-kuori pääsee lämpenemään vaarallisen korkeaan lämpötilaan, mikäli kaikki vesi polttoainesauvan ympärillä höyrystyy.

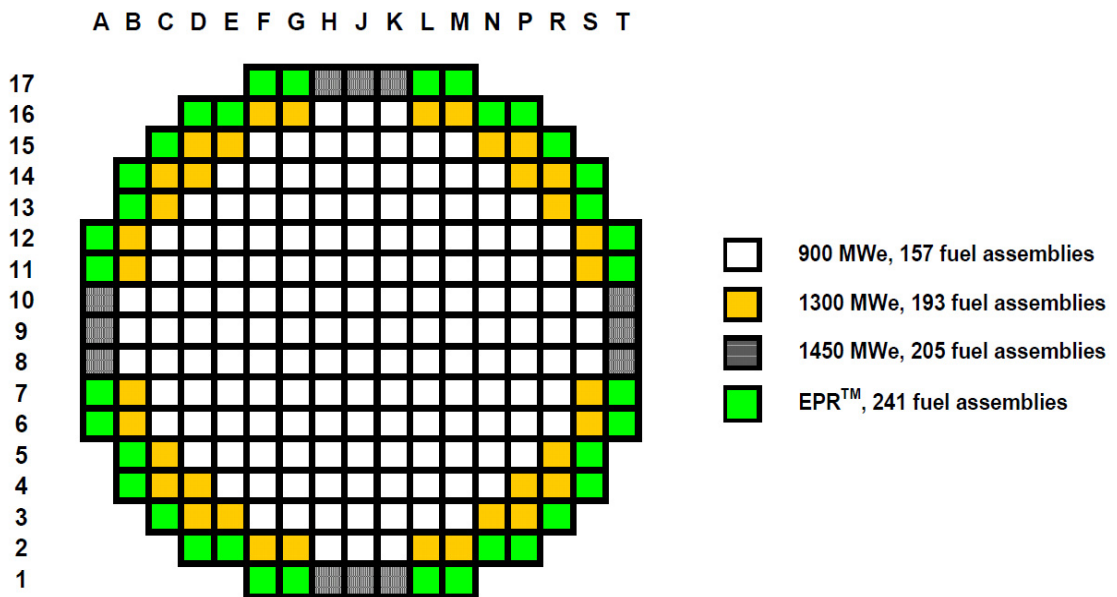
## 4. EPR

EPR (European Pressure Reactor) on Areva-Siemens konsortion suuritehoinen painevesireaktori. Reaktori on suunniteltu aikaisempien samankaltaisten, ranskalaisen Arevan N4 ja saksalaisen KWU:n KONVOI painevesireaktorien käyttökokemusten pohjalta. Uudessa EPR reaktorissa on N4 ja KONVOI tyyppisiin reaktoreihin verrattuna hieman suurempi sydän. Tällä muutoksella saavutetaan edelleen samankaltaisia polttoainenippuja käyttämällä suurempi lämpöteho. Reaktoriin liittyvien järjestelmien muutoksilla ja Siemensin uudella turbiinilaitoksella on laitoksen kokonaishyötysuhdetta saatu parannettua hieman edeltäviin laitostyyppeihin verrattuna.

EPR on rakenteeltaan tyypillisen länsimaisen painevesireaktorin kaltainen. Siinä on neljästä kiertopiiristä koostuva primääripiiri. Kussakin kiertopiirissä on pääkiertopumppu ja pystymallinen höyrystin. Paineistin on liitetty yhden kiertopiirin kuumaan haaraan, eli putkeen jota pitkin reaktorissa kuumennettu vesi virtaa höyrystimeen.

Reaktorien tehoa on aikojen kuluessa suurennettu siten, että kun vanhat painevesireaktorilaitokset olivat tyypillisesti sähköteholtaan noin 900 MW, ovat nykyisin rakennettavien yksiköiden tehot jo lähes kaksinkertaisia. Polttoaineniput ovat tästä riippumatta pysyneet fyysisiltä mitoiltaan hyvin samanlaisina. Suurempitehoisen reaktorin tekeminen samanlaisia polttoainenippuja käyttäen vaatii sydämen koon kasvattamista, jotta polttoaineen keskimääräinen teho ja palama saadaan pysymään hyväksyttävissä rajoissa. Poistopalamaa on aikojen kuluessa korotettu aikaisemmin tavallisesta 40 MWd/kgU arvosta nykyiseen noin 60 MWd/kgU. Sydämeen tehon suurentuessa lisättyjen polttoainenippujen sijoittelu ranskalaisissa painevesilaitoksissa, 900 MWe PWR laitoksesta noin 1600MWe EPR laitokseen, on esitetty kuvassa 3.





**KUVA 3.** Painevesireaktorien sydäntä on suurennettu tehontarpeen mukaan. Näin on saatu polttoaineen keskimääräinen palama ja teho pysymään hyväksyttävissä rajoissa. [11]

EPR-reaktori on toistaiseksi suurin painevesireaktori. Reaktorin koon suurentamista rajoittavat painesäiliön kestävyysvaatimusten lisäksi reaktorifysikaaliset seikat. Suuressa reaktorissa etäisyydet alkavat olla niin pitkiä, etteivät reaktorin toisella laidalla tapahtuvat muutokset enää suoraan näy toisella laidalla asti. Tästä voi seurata erilaisia epästabiiliusilmiöitä, kuten tehovärähtelyjä. EPR vaatii suuren reaktorisydämen takia käytön aikana tehojakauman korjaamiseksi aktiivisesti suoritettavia säätösauvan siirtoja, joita esimerkiksi Loviisan voimalaitoksen huomattavasti pienemmissä VVER-440-reaktoreissa ei ole tarvetta tehdä.

Reaktorissa on 89 säätösauvaa, jotka on jaettu toiminnallisesti pikasulkuryhmään (N), jossa on 53 säätösauvaa ja säätöryhmään (P), johon kuuluu 36 säätösauvaa. Säätöryhmään kuuluvat sauvat on, tehojakauman tasoittamisen mahdollistamiseksi, jaettu 9:ään neljän sauvan alaryhmään (PA, PB, PC, PD, PE, PF, PG, PH ja PI). Säätösauvojen sijoittelu ryhmittäin reaktorisydämessä on nähtävissä kuvasta 4.

17								N										
16					N		N		N		N							
15			N		PA		PD		PI		PE		PB		N			
14				N		N						N		N				
13			PB		PC		PF		PH		PG		PC		PA			
12		N		N				N		N				N		N		
11			PE		PG		N				N		PF		PD			
10		N				N		N		N		N				N		
9	N		PI		PH				N				PH		PI		N	
8		N				N		N		N		N				N		
7			PD		PF		N				N		PG		PE			
6		N		N				N		N				N		N		
5			PA		PC		PG		PH		PF		PC		PB			
4				N		N						N		N				
3			N		PB		PE		PI		PD		PA		N			
2						N		N		N		N						
1									N									
	A	B	C	D	E	F	G	H	J	K	L	M	N	P	R	S	T	

**KUVA 4.** Säätosauvojen sijoittelu EPR reaktorisydämessä pikasulku- ja eri säätöryhmiin jaettuna on nähtävissä kuvasta.

Säätosauvoista pikasulkuryhmän sauvat ovat normaalikäytön aikana ulkona reaktorisydäimestä, eli niitä käytetään ainoastaan reaktorin sammutukseen. Säättävän ryhmän sauvoilla säädetään reaktorin tehojakaumaa määrättyjen sekvenssien mukaan. Varsinainen reaktorin tehon säätö tapahtuu säätämällä boorihapon pitoisuutta jäähdytteessä.

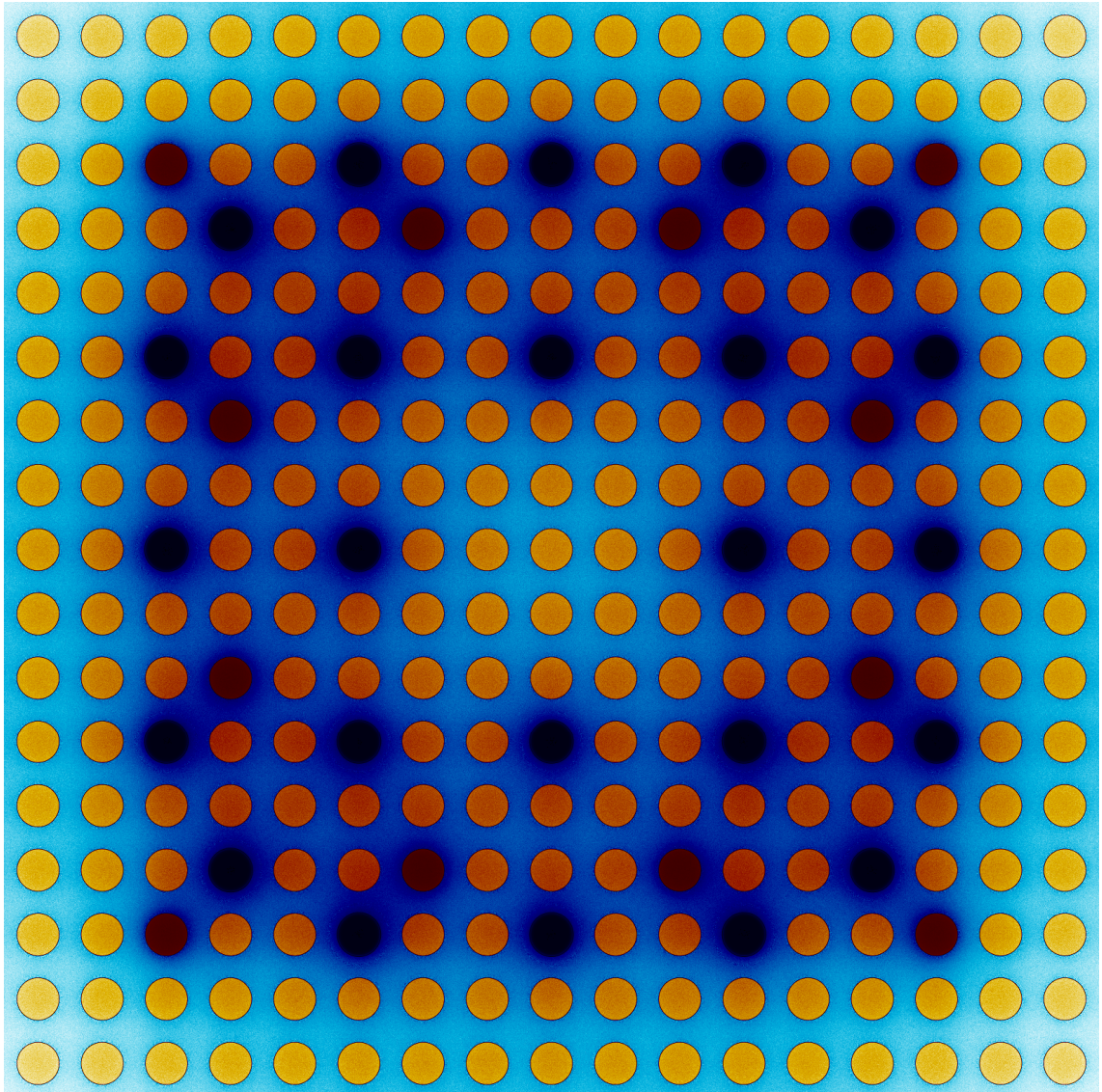
#### 4.1. Olkiluoto 3

Maailman ensimmäistä EPR reaktoria ollaan rakentamassa Olkiluodon kolmanneksi laitosyksiköksi. Valmistuessaan Olkiluoto 3 (OL3) tulee olemaan maailman suuritehoisin ydinvoimalaitosyksikkö. Rakennusprojektin valmistuminen on erilaisten teknisten ja kulttuurillisten vaikeuksien vuoksi viivästynyt alkuperäisestä aikataulustaan useaan otteeseen. Tällä hetkellä arvioitu tuotannon alkamisajankohta on vuoden 2014 aikana, kun alkujaan laitosyksikkö oli määrä saada tuotantokäyttöön vuonna 2009. OL3:a rakennettaessa on laitokseen teh-

ty joitakin Suomen turvallisuusvaatimusten vaatimia lisäyksiä ja muutoksia, joita on ainakin osittain sisällytetty myös muihin rakenteilla ja suunnitteilla oleviin EPR laitosyksiköihin.

#### **4.2. Olkiluoto 3-reaktorin alkulataus**

Olkiluoto 3 EPR-reaktoriin suunniteltu alkulataus koostuu kolmenlaisista AGO-RA HE -tyypin polttoainenipuista. Polttoaineen rikastusaste eroaa nipputyypien kesken siten, että väkevöidymmät polttoaineet on rikastettu 3,5 %:iin U235:n suhteen, toisen nipputyypin rikastusaste on 2,5 % ja kolmannen 1,9 %. Kahdessa enemmän rikastetussa nipputyypissä on erikoisuutena 12 kpl polttoainesauvoja, joihin on seostettuna 9 % ns. palavaa myrkkyä, gadoliiniumia, ja joiden rikastusaste on hieman alempi ollen väkevöidymmässä 2,3 % ja miedommassa 1,7 %. [5, s.11] Polttoainenippujen poikkileikkauksen rakenne ilmenee Serpent-laskennan tulosteesta, joka on esitetty kuvassa 5. Kuvassa gadoliiniumia sisältävät sauvat näkyvät tumman punaisina ja säätösauvat tumman sinisinä.

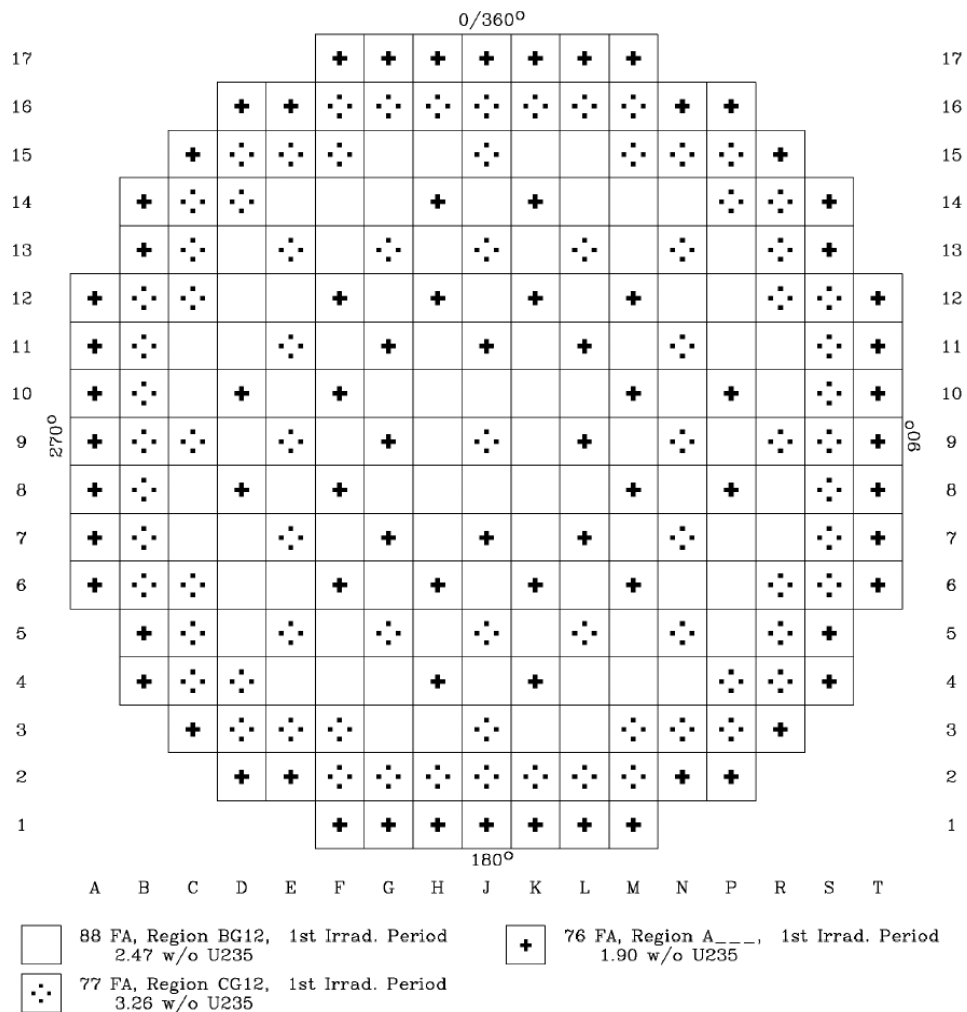


**KUVA 5.** Kuvassa näkyy EPR- reaktorin polttoainenipun rakenne ja neutronivuorovaikutusten jakautuminen Serpent Monte Carlo-laskentaohjelmalla mallinnettuna.

Polttoainenippu on muuten perinteisen 17x17 painevesireaktorin nipun kaltainen, mutta erona aiempiin on keskimmaisessä sauvapositiossa sijainneen instrumentointiputken korvautuminen polttoainesauvalla. Nipun kaikki aktiivisen sydänalueen rakenneosat, eli suojakuoret, säätösauvojen ohjainputket ja tukihilat, on valmistettu Arevan M5<sup>TM</sup> zirkoniumseoksesta, jolla on alhainen neutronien kaappausvaikutusala ja hyvä mekaaninen ja kemiallinen kestävyys reaktoriolosuhteissa.

Alkulataus on suunniteltu, nykyisin vallitsevan tavan mukaan, niin sanotusti vähävuotoiseksi. Tämä tarkoittaa sitä, että uloimpana sydämässä on vähiten ri-

kastettua polttoainetyyppiä, jolloin aivan sydämen ulkoreunalla tapahtuu fissioita keskimääräistä vähemmän. Tällainen lataustapa vähentää reaktorista ulos karkaavien neutronien määrää täysin tasaisella tehojakaumalla toimivaan reaktorisydämeen verrattuna, mikä parantaa polttoainetaloutta sekä suojelee paineestaa neutronisäteilyn haitallisilta vaikutuksilta. Täysin tasaista tehojakautta ei ole käytännössä mahdollista saavuttaa, ja mahdollisimman tasainen jakaumakin vaatisi reunimmaisten nippujen tehon olevan keskimääräistä korkeampi, mikä aiheuttaisi lisääntyntä neutronien karkaamista sydänalueelta. OL3:n suunnittelun alkulatauksen erityyppisten polttoainennippujen sijoittelu sydämessä on nähtävissä kuvassa 6.

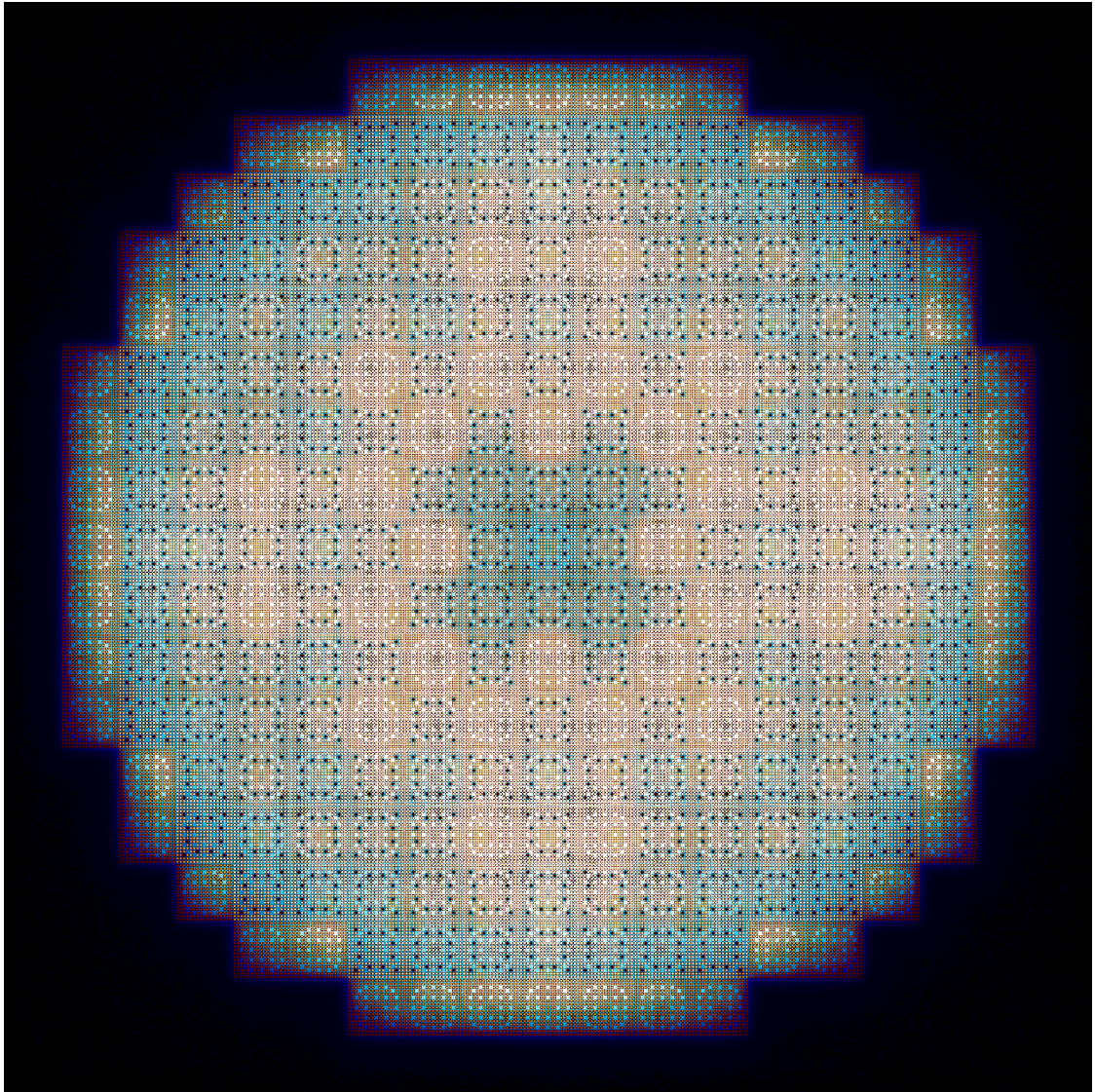


**KUVA 6.** Olkiluoto 3 reaktorin alkulatauksen erityyppisten polttoainennippujen avulla on luotu tasaisen tehojakauman muodostava ja vähävuotoinen sydän. [5]

Serpent:n käytön opettelemiseksi tehtiin varsinaisen työn suorittamisen kannalta tarpeeton OL3:n alkulatauksen kaksiulotteinen malli, jonka avulla kokeiltiin erilaisten asetusten vaikutusta laskennan kestoon ja tuloksiin. Malliin on tehty kaikki alkulatauksen erilaiset polttoaine- ja säätösauvatyyppit, joten sen avulla on mahdollista tarkastella muun muassa reaktorin tehojakaumaa erilaisilla säätösauvakuvioilla. Mikäli mallilla haluttaisiin tehdä myös palamalaskuja, täytyisi erilaisten polttoainenippujen määrää mallissa lisätä. Sydämen eri positioissa oleviin nippuihin kohdistuu hieman erilainen neutronivuo, minkä vuoksi niihin muodostuu palaman lisääntyessä erilaiset materiaalikoostumukset ja ne täytyisi palamalaskussa määritellä kukin omina materiaaleinaan. Tämä todennäköisesti aiheuttaa liian suuren muistintarpeen nykyiselle laskentakoneelle.

Riittävän tarkkojen tulosten saavuttamiseksi koko sydämen laajuinen malli vaatii kuitenkin niin suuren neutronipopulaation käyttämistä, ettei palamalaskuja pysty nykyisellä laskentakapasiteetilla järkevässä ajassa muutenkaan tekemään. Tällä mallilla mallinnetut neutronireaktiot reaktorisydämessä käyttöjakson alussa ovat nähtävissä Serpent-ohjelman tulosteessa, joka on esitetty kuvassa 7.





**KUVA 7.** Kokosydänmallin tulosteessa neutronireaktiot näyttävät olevan melko tasaisesti reaktorin alueelle jakautuneet. Kuvassa on havaittavissa myös gadoliiniumia sisältävät polttoainesauvat tumman sinisinä pisteinä sekä tyhjät säätösauvojen ohjainputket vaaleampina pisteinä.

OL3:n alkulataus on suunniteltu 18 kuukauden pituiselle käyttöjaksolle. EPR reaktorin suunnittelu mahdollistaa myös muun pituiset käyttöjaksot aina 24 kuukauden pituiseen asti. Aiemmin Suomen ydinvoimalaitoksissa on totuttu 12 kuukauden polttoaineenvaihtoväleihin, joten on mielenkiintoista nähdä millaisin aikavälein TVO tulee uuteen reaktoriinsa polttoaineenvaihtoja tekemään.

Vuodenaikojen aiheuttaman sähköntarpeen ja hinnan vaihtelu huomioon ottaen on todennäköisintä, että tulevat vaihtolataukset ovat 12 tai mahdollisesti 24 kuukauden välein ja alkulatauksen ylimääräisellä kuuden kuukauden jaksolla

pyritään mahdollistamaan koekäytön jälkeen täysi 12 kuukauden käyttöjakso ja polttoaineenvaihdon sijoittuminen kesäkuukausille, jolloin sähkönhinta ja -tarve ovat yleensä vähimmillään.



## 5. REAKTORIFYSIIKKAÄ KÄYTÄNNÖSSÄ, OHJELMISTOT

Reaktorien toimintaa mallinnetaan ja reaktoriin liittyviä ominaisuuksia tutkitaan käyttäen erilaisia tietokoneohjelmia. Ohjelmia on kehitetty tarpeen mukaan useiden ydinteknistä toimintaa harjoittavien tahojen toimesta, joten erilaisten ohjelmien kirjo maailmalla on melko laaja toimijoiden lukumäärään nähden. Osasyynä erilaisten ohjelmistojen suhteellisen suureen määrään lienee alkuaikojen yhteydet ydinvoimaloiden käytön ja ydinaseteknologian välillä ydinasevaltioissa. Ymmärrettävästi nämä maat eivät ole olleet halukkaita jakamaan tietoja ydinhankkeistaan ja kehittämistään ohjelmistoista, joita on myös sotilaallisiin tarkoituksiin käytetty ja kehitelty. Tämän takia uusien ydinvoima-alalle tulneiden toimijoiden on täytynyt aluksi kehittää omat ohjelmistonsa ja myöhemmin aikoina, kun ohjelmistoja olisi ollut mahdollisesti helpommin saatavissa, olivat useimmat alalla toimivat tahot jo kehittäneet ja tottuneet käyttämään omia ohjelmistojaan. Erityyppisille reaktoreille suunnitellut ohjelmat on myös usein optimoitu niin pitkälle, ettei niillä ainakaan helposti pysty toisen tyyppisten reaktoreiden laskentaa tekemään.

### 5.1. Deterministiset laskentaohjelmat

Deterministisiksi ohjelmistoiksi kutsutaan sellaisia ohjelmia, joissa neutronivuon yhtälöt ratkotaan matemaattisesti. Matemaattinen ratkaisu edellyttää joitakin reunaehtoja, sillä kaikissa tilanteissa yhtälöiden ratkaiseminen ei ole matemaattisesti mahdollista. Neutronivuon on oltava jatkuva yhtälön kuvaamalla alueella, sillä ratkaisussa on mukana vuon derivaattoja, joiden on oltava määriteltyjä tarkasteltavalla alueella, jotta yhtälön matemaattinen ratkaisu olisi mahdollinen.

Käytännössä myös yhtälöissä olevien tuntemattomien muuttujien määrän on oltava järkevissä rajoissa, jotta yhtälöitä pystytään ratkomaan. Esimerkiksi koko reaktorin tarkan neutronivuo jakauman esittäminen yhtälöllä on muuttujien suuren määrän takia mahdoton tehtävä. Deterministisiä laskentaohjelmia ovat esimerkiksi CASMO, ARES, SIMULATE ja HEXTRAN.

## 5.2. Tilastolliset laskentaohjelmat

Tilastollisissa ohjelmistoissa neutronivuon yhtälöiden ratkaisu perustuu satunnaisten tapahtumien generoimiseen ja saatujen tulosten tilastoinnilla saatavaan kuvaukseen mallinnetusta tapauksesta. Tällaista laskentaa kutsutaan Monte Carlo -menetelmäksi. Menetelmä on saanut alkunsa ja nimensä uhkapelien voittotodennäköisyyksien laskennasta, mutta myöhemmin on havaittu sillä voitavan mallintaa monenlaisia satunnaisia tapahtumia. Tilastollisia reaktorifysiikan laskentaohjelmia ovat tässä työssä hyödynnetyn Serpentin lisäksi ainakin MCNP, KENO, TRIPOLI ja MCU.

### 5.2.1. Monte Carlo-laskentamenetelmä

Monte Carlo -laskentamenetelmä perustuu satunnaisten tapahtumien toistamiseen ja niitä tarkkailemalla saatujen tulosten tilastointiin. Klassinen esimerkki Monte Carlo -menetelmästä on ympyrän pinta-alan selvittäminen kiviä heittämällä. Kiviä heitellään satunnaisesti alueelle jossa on ympyrä tunnetun mittaisen neliön sisällä, heitettyjen kivien määrä ja ympyrän sisään jääneiden määrät tilastoidaan ja ympyrän pinta-ala saadaan kertomalla neliön pinta-ala ympyrän sisään osuneiden kivien osuudella. Tuloksen tarkkuus paranee heitettyjen kivien määrää lisäämällä. Ongelmana menetelmässä on aidosti satunnaisen kivenheittelyn toteuttaminen.

## 5.3. ARES

ARES on Riku Mattilan VTT:lla ja myöhemmin Säteilyturvakeskuksella (STUK) kehittämä, Fortran77-ohjelmointikielellä toteutettu, stationääritilan reaktorisydänsimulaattori. Ohjelmassa on yhdistetty kahden energiaryhmän diffuusiolaskentaan perustuva kolmiulotteisella nodaalimenetelmällä reaktorin neutronifysiikkaa mallintava osa termohydrauliikkaa mallintavaan osaan.

Ohjelma on alun perin tehty kiehutusvesireaktorin toiminnan mallintamiseen, mutta myöhemmin tehdyillä muutoksilla on ohjelma muutettu toimimaan myös painevesireaktorin mallinnuksessa. Ohjelmaa on käytetty lähinnä riippumattomana vertailuohjelmana varmistamaan muiden vastaavia suureita laskevien ohjelmien tulosten oikeellisuutta sekä OL3-reaktorin luvitukseen liittyvien turvallisuusmarginaalien erityistarkasteluihin. [12]

ARES on asiantuntijan omaan käyttöön tekemänä ohjelmana hieman hankalasti käytettävä, sillä ohjelman käyttöliittymänä toimii input-tiedosto, johon erilaisia optioita ja lähtöarvoja asettelemalla eri laskentaominaisuuksia hallitaan. Tämä tekee ohjelman käyttämisen haastavaksi, mikä on toisaalta hyväkin asia. Näin varmistuu, että käyttäjä joutuu perehtymään aiheeseen ja hänellä täytyy olla ymmärrys siitä, mitä on tekemässä, jotta olisi mahdollista saada jotain tuloksia kyseisellä ohjelmalla. Haastavan käyttöliittymän lisäksi ohjelman dokumentointi on suurelta osin puutteellista perustuen lähinnä koodin kommentointiin, jota ei välttämättä kaikkien muutosten ja ominaisuuksien lisäämisten yhteydessä ole muistettu tehdä tai päivittää ajan tasalle.

Ohjelmassa on lukuisia ominaisuuksia, joita on aina tarpeen mukaan kehitetty. Tämän työn yhteydessä sillä laskettiin reaktorin kasvukertoimen arvoja erilaisissa reaktorin käyttötiloissa sekä selvitettiin kriittisen tilan booripitoisuuksia erilaisissa tiloissa. Näiden toimintojen lisäksi ARES:illa on mahdollista laskea ainakin tehojakauman oikaisemiseksi vaadittavat säätösauvojen siirrot ja reaktoriin joutuvan boorittoman veden tulpan aiheuttama reaktiivisuusvaikutus.

### **5.3.1. Tarvittavat vaikutusalatiedot**

ARES tarvitsee laskennan suorittamiseen seuraavia vaikutusalatietoja käytettävästä polttoaineesta: kokonaisabsorptiovaikutusalat nopeille ja hitaille neuroneille, fissiovaikutusalat nopeille ja hitaille neutroneille, fissioneutronien sekä fissioenergian tuotto hitaalle ja nopealle neutroniryhmälle, diffuusiokertoimet nopealle ja hitaalle ryhmälle sekä nopeasta hitaaseen ryhmään siirtymisen todennäköisyys. Näiden lisäksi tarvitaan polttoainenipun epäjatkuvuuskertoimet nipun si-

vuille ja kulmille, reaktorimyrkkyjen ksenon-135 ja samarium-149 aiheuttamat kaappausvaikutusalat sekä fissiotuotot ja näiden lähdeaineiden jodi-135:n ja prometium-149:n kaappausvaikutusalat sekä fissiotuotot.

Kaikista vaikutusaloista vaaditaan myös parametritiedot keskeisimpien reaktorin muuttuvien suureiden, kuten lämpötilojen, jäähdytteen tiheyden ja booripitoisuuden sekä kiehutusvesireaktorin tapauksessa aukko-osuuden suhteen.

#### **5.4. CASMO**

CASMO-4 on Studsvik Scandpower -yhtiön kehittämä neliöhilaisen ydinpolttoaineen palamalaskuihin käytettävä ohjelma. Sillä voi laskea erilaisia vesikanavia sekä palavia absorbaattoreita sisältäviä polttoainenippuja. CASMO-4:n toiminta perustuu kaksiulotteiseen transportyhtälöiden ratkaisuun karakteristika menetelmää käyttäen. CASMO-4 käyttää 70 energiaryhmän vaikutusalatietoja energiatasoiltaan 0 ... 10 MeV välillä. CASMO-4:lla voidaan muodostaa polttoaineiden vaikutusala- ja epäjatkuvuustiedot, joita voidaan sitten hyödyntää esimerkiksi sydänsimulaattoriohjelmassa. [5]

#### **5.5. Serpent**

Serpent on jatkuvaa energiaspektriä käyttävä reaktorifysiikan Monte Carlo-laskentaohjelma. Se on toteutettu C-kielellä ja tehty alusta lähtien reaktorilaskentaan, joten ohjelman rutiinit on voitu optimoida tähän tarkoitukseen ja täten C-kielelle luontaisen ohjelman nopean suorituksen avulla on voitu aikaansaada markkinoiden tehokkain Monte Carlo -laskentaan perustuva reaktorilaskentaohjelma.

Serpent käyttää geometrian mallintamiseen Monte Carlo-laskentaohjelmissa yleisesti käytettyä univarsumeihin perustuvaa CSG-mallia, jolla voidaan muodostaa kaksi- ja kolmiulotteisia rakenteita. Erilaisia geometria-alkioita yhdistelemällä voidaan toteuttaa lähes kaikenlaiset kuviteltavissa olevat rakenteet. Kevytvesireaktorioiden polttoaineen mallinnusta varten on tehty erilliset mallit, joilla

polttoainesauvojen ja nippujen muodostamat geometriat on helposti toteutettavissa. Tämän lisäksi kuulakekoreaktorien, pieniä partikkeleita sisältävien, monikerroksisten pallomaisten polttoaineiden muodostamiseksi on oma rutiininsa.

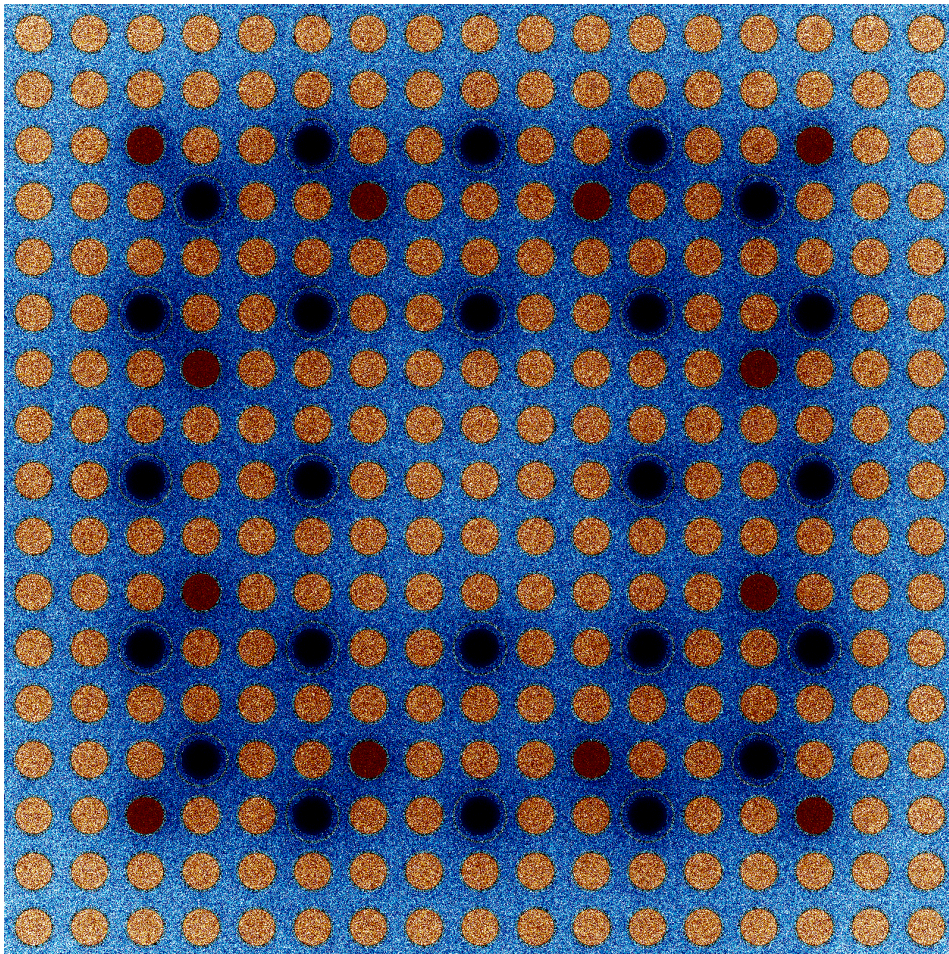
Neutronireaktiot mallinnetaan ACE-muotoisia ydinvakiokirjastoja käyttäen. Serpent-jakelussa on mukana ydinvakiokirjastot JEF-2.2, JEFF-3.1, JEFF-3.1.1, ENDF/B-VI.8 ja ENDF/B-VII sekä termisten neutronien sirontakirjastot kevyelle ja raskaalle vedelle ja grafiitille. Näissä kirjastoissa on tiedot 432 nuklidille kuudessa eri lämpötilassa 300 K ja 1800 K väliltä. Kirjastojen muoto on yhtenevä MCNP-lasken-ohjelman kirjastoformaatin kanssa.

Neutronien seuranta reaktioiden välillä on toteutettu yhdistämällä perinteisen ray-tracing ja Woodcock delta-tracking menetelmien hyvät ominaisuudet. Tällä kombinaatiolla on saavutettu tehokas ja tarkka mallinnus polttoainegeometriassa, missä neutronin keskimääräinen vapaamatka on tyypillisesti useamman materiaalirajapinnan ylittävä etäisyys neutronin syntyypaikasta.

Palamalaskenta on toteutettu ohjelman sisäänrakennetuilla laskentarutiineilla. Palamalaskenta perustuu Batemanin transmutaatioyhtälöiden ratkaisuun annetulla neutronivuon tiheydellä ja palama-askelten pituuksilla. Palamalaskentaan on käytettävissä kaksi vaihtoehtoista syötetiedoston optioilla valittavaa ratkaisumenetelmää TTA ja CRAM. Palamalaskennassa ksenon-135:n pitoisuus on erikseen iteroitu tasapainopitoisuuteen.

Ohjelman heikkoutena voidaan pitää suuren laskentanopeuden mahdollistavien ohjelmointiratkaisujen aiheuttamaa suurta muistin tarvetta, mikä selvästi rajoittaa Monte Carlo laskennalle ominaisen hyvän rinnakkaistuvuuden hyödyntämistä käytännössä. Etenkin palamalaskuissa muistin tarve korostuu, sillä jokainen laskennassa mukana oleva materiaali vaatii omat vaikutusalueensa. Tämä ominaisuus tuli tätä työtä suorittaessa esiin käytännössä siten, että alkutilan pisteet pystyttiin kohtuullisella tarkkuudella laskemaan neljällä rinnakkaisella laskennalla jo koneessa alkujaan olleella 2 gigatavun keskusmuistilla, mutta palamalaskuissa jouduttiin lopulta käyttämään vain yhtä laskentaa kerralla, vaikka muistia lisättiin emolevyn ominaisuuksien mukaiseen 8 gigatavun maksimimäärään.

Serpent:llä työtä suoritettaessa tehtyjen laskentojen yhteydessä saatujen tulosten joukosta on otettu esimerkiksi erään polttoainepinon poikkileikkauksessa tapahtuneita neutronireaktioita kuvaava kuva. Kyseisessä polttoainepinussa, jossa on gadoliiniumia sisältäviä polttoainesauvoja sekä säätösauvat sisään työnnettynä, tapahtuneet neutronireaktiot ovat nähtävissä kuvassa 8.

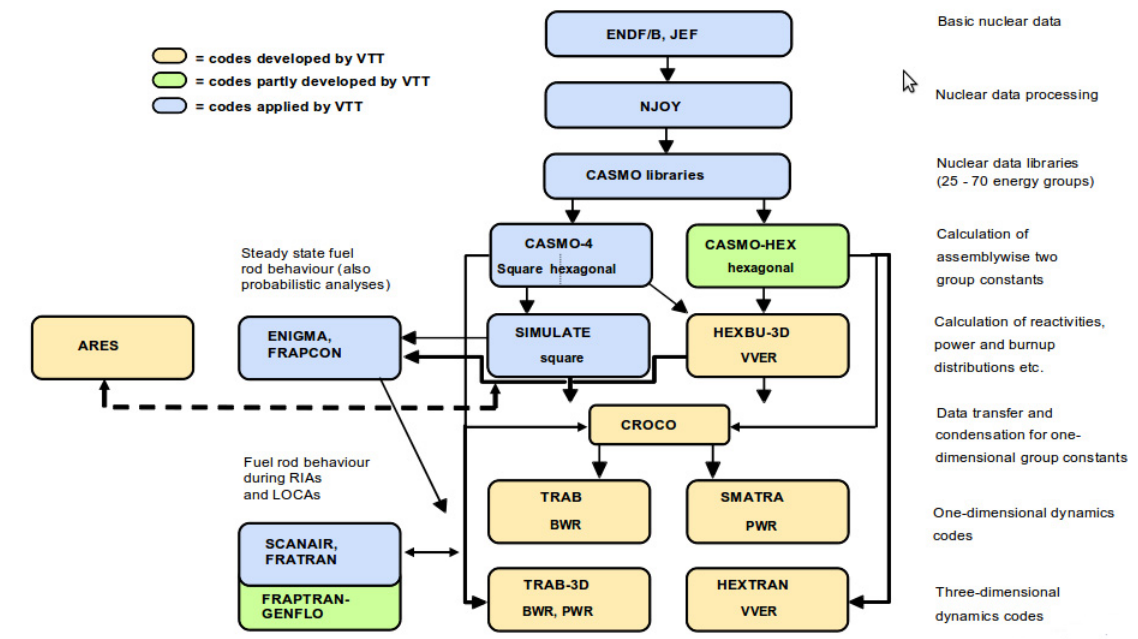


**KUVA 8.** OL3 polttoainepinussa mallinnetut neutronireaktiot näyttävät ohjelman tulostamassa värikuvassa hienolta. Säätösauvat erottuvat kuvassa tummansinisinä ja gadoliiniumia sisältävät polttoainesauvat tummanpunaisena.



## 5.6. VTT:n laskentajärjestelmä

Esimerkkinä ohjelmistojen kytkemisestä voidaan esittää kuvassa 9 nähtävä VTT:n käyttämä laskentajärjestelmä. Ydinkirjastoista muodostetaan NJOY-ohjelmaa hyväksikäyttäen CASMO-yhteensopivat moniryhmävakiokirjastot CASMO-laskujen tulokset syötetään SIMULATE tai HEXBU-3D -ohjelmalle, jolla lasketaan kokosydänlaskut. Tarkasteltavan reaktorityypin mukaan ohjelmistoista käytetään joko tavallisia neliöhilaiselle polttoaineelle tehtyjä ohjelmistoja, tai erityisesti VVER-reaktorien kolmiohilaisen polttoaineen laskentaan kehitettyjä versioita, joiden nimestä yleensä löytää polttoaineen kuusikulmaisuuuteen viittaavan sanan HEX jostakin kohtaa.



**KUVA 9.** VTT:n käyttämä laskentajärjestelmä reaktorifysikaalisten ilmiöiden selvittämiseksi.

Näitä samoja laskentaketjuja käytetään myös voimalaitosten lataussuunnittelussa ja muissa reaktorin toiminnan tarkastelemista vaativissa laskennoissa. Tämän takia onkin haluttu kehittää valvontaviranomaisen käyttöön näistä ohjelmistoista riippumaton laskentaketju, jolla voidaan tarvittaessa varmentaa saattujen tulosten oikeellisuus.

Tällainen riippumaton laskentaketju on päätetty toteuttaa käyttämällä Serpent Monte Carlo-ohjelmistoa vaikutusalakirjastojen luomisessa ja ARES-reaktorisydänsimulaattoria kokosydänsimulaatiossa. Näin mahdolliset virheet muiden käyttämissä laskentaohjelmistoissa eivät vaikuta viranomaisen varmistuslaskentojen tuloksiin. Diversiteetti koskee nyt siis kaikkia laskentatoimituksia ja mikäli laskennassa mahdollisesti tapahtuva virhe johtuu muusta kuin ydinkirjastojen tai tietokoneen systemaattisesta virheestä, tulee virhe luultavasti tarkastuslaskennoissa huomatuksi.

## **5.7. Vaikutusalakirjastot**

ARES-reaktorisydänsimulaattorille vaikutusalakirjastoja luovat komentosarjatiedostot on tehty hyödyntämään CASMO-4:lla laskettuja tuloksia. Serpent:n tuottamat tiedostot ja laskentamenetelmät eroavat CASMO:lla tehdyistä siinä määrin, ettei vanhoilla komentosarjoilla pysty vaikutusalakirjastoja tuottamaan. Eräs työn suuritöisimmistä vaiheista olikin kehittää sopiva komentosarjatiedosto, joka nuo tarvittavat tiedot Serpent:n tulostiedoista hakisi ja tallettaisi sopivaan muotoon, jotta niitä voitaisiin ARES:lla hyödyntää. Tämä pyrittiin tekemään siten, että selvittää mahdollisimman vähillä muutoksilla itse ohjelmaan.

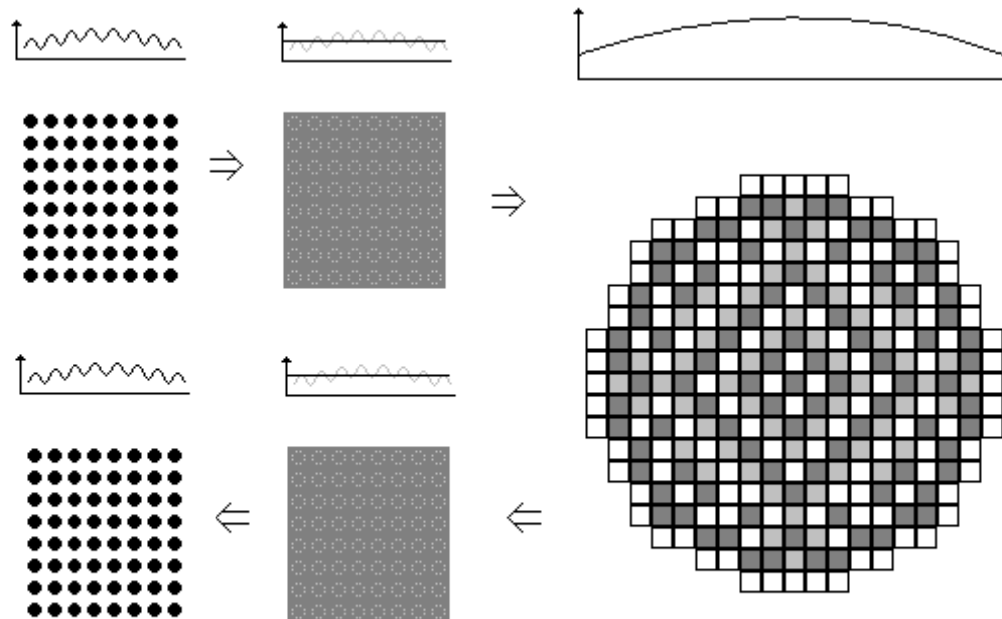
## **5.8. Homogenisointi**

Reaktorissa on niin paljon ominaisuuksiltaan ja materiaaleiltaan erilaisia alueita, kuten polttoainepelletit, kaasurako, suojakuori, jäähdyte, polttoainenipun rakenteosat ja muut reaktorin rakenteet, joissa kaikissa vaikutusalat poikkeavat toisistaan, että näiden kaikkien huomioiminen kokosydänlaskuissa johtaisi suunnattoman suureen määrään ratkaistavia muuttujia ja tekisi täten laskennasta mahdotonta. Reaktorisydämen ulkopuoliset osat jätetäänkin tavallisesti pois laskennasta, sillä niiden vaikutus neutroniikkaan on vähäinen. Sydämen alueellakin on kuitenkin niin paljon yksittäisiä polttoainesauvoja, säätösauvoja, vesitilavuuksia ja erilaisia rakennemateriaaleja, että yksin nämä johtaisivat jo liian suureen määrään ratkaistavia muuttujia.



Tämä ongelma kierretään pilkkomalla laskettava alue pienempiin osiin, laske-  
malla vaikutusalojen keskiarvo kussakin osa-alueessa ja olettamalla kyseisen  
alueen vaikutusalan olevan kauttaaltaan tämän keskiarvon suuruinen. Tätä toi-  
menpidettä kutsutaan homogenisoinniksi. Vaikutusalojen homogenisointi teh-  
dään reaktorilaskennassa yleensä polttoainenipun poikkileikkauksen alalla ja  
korkeussuunnassa noin 20 cm kokoisissa paloissa. Polttoainenippujen saman-  
kaltaisuuden ja säännöllisen rakenteen vuoksi tämän kokoisissa alueissa vaiku-  
tusalojen keskiarvo kuvaa yleensä todellisuutta riittäväällä tarkkuudella.

Ennen homogenisointia määritetään polttoainenipun tehojakauma ja kuumim-  
man eli eniten tehoa tuottavan sauvan suhteellinen tehokkuus verrattuna nipun  
keskimääräiseen tehoon. Nämä tiedot tallennetaan ja homogenisoitujen vaiku-  
tusalatietojen mukaan laskettujen kokosydänlaskujen tuloksista saatavasta ni-  
pun keskimääräisestä tehosta lasketaan sitten reaktorin käyttöä rajoittava kuu-  
mimman sauvan teho tallennetun jakauman perusteella. Homogenisoinnin pää-  
vaiheet on esitetty havainnollistavassa kuvassa 10.



**KUVA 10.** Homogenisoinnissa häviävä yksittäisten polttoainesauvojen informaatio palautetaan rekonstruoimalla.

Homogenisointi on matemaattisessa mielessä integrointia homogenisoitavan alueen yli. Teoreettisesti vaikutusalan homogenisointi kolmiulotteissa kappa- leessa voitaisiin toteuttaa yhtälön

(7)

mukaan, missä  $\Sigma_i$  on homogenisoitava vaikutusala,  $g$  energiaryhmän tunnus ja  $\Phi$  neutronivuo.

Tietokone ei kuitenkaan integrointia suoraan ymmärrä, eikä neutronivuo koko tilavuuden yli ole analyttisesti ratkaistavissa, joten käytetään diskretointia, eli alueen jakamista pienempiin osiin ja näiden osa-alueiden keskiarvojen sum- maamista integroinnin korvaavana laskutoimenpiteenä.

## 5.9. Vaikutusalojen parametrisointi

Vaikutusalat on parametrisoitava erilaisten reaktorin käytön aikana muuttuvien suureiden, kuten polttoaineen ja hidasteen lämpötilojen, hidasteen booripitoisuuden, säätösauvahistorian sekä polttoaineen palaman suhteen. Parametrisointi vaaditaan, koska reaktorin toiminnan mukaan muuttuvat suureet vaikuttavat joko suoraan tai välillisesti vallitseviin vaikutusaloihin. Tarkkojen laskentatulosten saamiseksi ilman parametrisointia vaikutusalat täytyisi laskea kaikille laskettaville reaktorin tiloille erikseen. Erilaisia mahdollisia tiloja on kuitenkin äärettömän paljon, joten kaikissa eri tiloissa vaikutusaloja ei mitenkään voida laskea, ja jo riittävän kattavan kirjaston muodostaminen kaikille reaktorin normaalikäytön aikana esiintyville tilapisteille vaatisi vaikutusalojen laskennan miljoonissa pisteissä.

Parametrisointi voidaan suorittaa laskemalla vaikutusalat muutamassa pisteessä kutakin muuttuvaa suuretta muuntelemalla ja pitämällä muut arvot vakiona, näin saadaan näkyviin kyseisen suureen muutoksen vaikutus kokonaisuuteen. Laskenta voidaan tehdä riittävän monessa pisteessä kutakin muuttuvaa suuretta varioimalla ja taulukoimalla tulokset. Taulukosta voidaan sitten interpoloida aina kyseistä tilaa vastaavat arvot. Taulukoinnin huonoja puolia ovat tarvittavien laskentapisteiden määrän kasvaminen hyvin suureksi, kun muuttuvia suureita on useita. Lisäksi moniulotteisten taulukoiden käsitteleminen on tietokoneella melko hidasta ja niitä on ihmisen vaikea hahmottaa.

Toisena vaihtoehtona on parametrisoitavien vaikutusalojen kuvaaminen jollakin sopivalla funktiolla, jonka arvo aina kulloinkin kyseessä olevan laskentapisteen tilassa ratkaisemalla saadaan tarvittava vaikutusalan arvo. Saatuihin tuloksiin sovitetaan esimerkiksi pienimmän neliösumman menetelmällä jokin sopiva helposti laskettavissa oleva funktio, jonka perusteella aiemmin laskettujen pisteiden väliltä olevat vaikutusalojen arvot ratkaistaan.

Säätösauvahistorialla tarkoitetaan säätösauvan läsnäolon vaikutuksen kuvaamista polttoainepussissa. Polttoainepussissa oleva säätösauva kaappaa pääosin

vain termiselle tasolle hidastuneita neutroneja, mikä johtaa nopeiden neutronien osuuden kohoamiseen kyseisen nipun alueella. Tällaista ilmiötä kutsutaan neutronispektrin kovenemiseksi ja se aiheuttaa uraani-235:ssa tapahtuvien fission vähenemistä suhteessa uraani-238:ssa tapahtuviin kaappausreaktioihin. Tästä johtuen säätösauvan läsnäolo lisää plutonium-239:n osuutta polttoaineessa, mikä taas johtaa paikallisen tehon suurentumiseen kyseisessä nipussa säätösauvan poistamisen jälkeen.

Palaman vaikutus polttoaineen materiaalikoostumukseen ja muihin vaikutusaloihin vaikuttaviin ominaisuuksiin on sen verran monimutkaisempi, ettei muutamassa pisteessä laskemalla saada riittävästi tietoja vaikutusaloista koko käyttöjakson ajalle. Koska palama vaikuttaa suoraan polttoaineen materiaalikoostumukseen, muuttuvat myös vaikutusalojen lämpötilariippuvuudet ja neutronispektri palaman lisääntymisen mukaan. Muutos polttoaineen materiaaleissa on palaman kasvaessa melko nopeaa etenkin käyttöjakson alkuvaiheessa sellaisissa polttoainenipuissa, joissa on käytön aikana kuluva neutronia absorboivaa ainetta sisältäviä polttoainesauvoja. Palava absorbaattori sisältävät polttoainesauvat käyttäytyvät oikeastaan lähes samoin kuin polttoainenipussa oleva heikkotehoinen säätösauva, joka poistetaan käyttöjakson aikana. Palava absorbaattorikin kaappaa enimmäkseen termisiä neutroneja, mikä siis johtaa neutronispektrin kovenemiseen ja siten plutoniumin paikalliseen lisääntymiseen absorboivan aineen läheisyydessä. Säätösauvaan verrattuna neutronien absorptio on kuitenkin vähäisempää, eikä se poistu nipusta äkillisesti, joten säätösauvan poistamiseen verrattavaa neutronivuon ja -spektrin nopeaa muutosta ja siitä seuraavaa tehon paikallista nousemista ei absorbaattorin loppuun palamisen seurauksena tapahdu.

## 6. VAIKUTUSALAKIRJASTOJEN LUOMINEN

Vaikutusalakirjaston luominen on monivaiheinen prosessi. Ensin valitaan laskentapisteet, joissa laskennat tehdään ja suoritetaan laskennat. Laskentojen tuloksista haetaan vaikutusalatiedot ja tehdään mahdolliset yksikkömuunnokset sekä muut tarvittavat korjauslaskut. Viimeisenä lasketaan parametrisovitteet vaikutusalatietojen ja laskentapisteiden perusteella ja tallennetaan vaikutusalatiedot parametrisointineen vaikutusalakirjastoihin.

### 6.1. Serpent-laskennat

Serpent laskee polttoaineen homogenisoidut ryhmävakiot annetulle laskentatapaukselle. Kullekin polttoainetyypille eri säätösauvan arvoilla ja jäähdytteen lämpötiloilla on luotava oma syötetiedostonsa, jonka perusteella ryhmävakiot lasketaan. Tätä toimintoa toteuttamaan on luotu Perl-komentoketjutiedosto. Komentoketju lukee Serpent syötetiedoston pohjan, johon on koodattu muuttujina kaikki eri laskentatapauksissa mahdollisesti vaihtuvat suureet, sijoittaa muuttujiin tapauksen mukaiset arvot ja tallentaa näin syntyneen valmiin Serpent syötetiedoston sekä käynnistää laskennan. Serpent-laskennan valmistuttua komentoketju tallentaa laskentatulokset tapauksen mukaisesti nimettyihin tulostiedostoihin.

Polttoaineniippuja on kolmea eri tyyppiä, mutta kahden erilaisen gadoliiniumia sisältävän polttoaineniipputyypin yläpäissä olevat gadoliiniumvapaat vyöhykkeet on mallinnettava erikseen, mikä lisää erilaisten mallinnettavien polttoaineniippujen määrän viiteen. Kaikkien tarvittavien vaikutusalojen saamiseksi kukin niippu-tyyppi täytyy laskea erikseen neljällä eri säätösauvan arvolla. Parametrisointiin käytettävien sovitteiden aikaansaamiseksi täytyy laskenta tehdä vielä kolmella eri jäähdytteen lämpötilalla sekä lisäksi kahdella jäähdytteen booripitoisuudella ja kahdella eri polttoaineen lämpötilalla. Yhteensä siis  $5 \cdot 4 \cdot 3 + 5 \cdot 4 \cdot 2 + 5 \cdot 4 \cdot 2 = 140$  erilaista tapausta täytyy mallintaa alkutilanteen ryhmävakioiden ja parametrien selvittämiseksi. Yhden tapauksen laskenta kestää käytetyillä asetuksilla noin neljä minuuttia, joten kaikkien tarvittavien tapausten laskenta kestää

nykyisellä tietokonekokoonpanolla noin  $140 * 4 = 560$  minuuttia eli hieman yli 9 tuntia.

Tämän lisäksi kaikista tapauksista on laskettava eri palaman arvoilla riittävästi pisteitä, jotta laskentoja voidaan tehdä tarvittaessa koko käyttöjaksolle. Jotta tuloksia voitaisiin paremmin vertailla vanhojen laskentojen tuloksiin, päätettiin käyttää samoja palamapisteitä kuin edellisissä laskennoissakin on käytetty. Palamamatriisissa on 32 eri palamaa, joten laskettavia pisteitä tulee kaikkiaan 4480. Tämä ei kuitenkaan lisää tarvittavien Serpent-syötetiedostojen määrää, sillä Serpent hoitaa palamalaskennan rutiinit laskentatapauksen sisällä syöte-tiedostoon merkittyjen palamapisteiden mukaan.

Laskenta-aika sen sijaan pitenee palamalaskennan lisäämisen vuoksi moninkertaiseksi, sillä jokainen palama-askel lasketaan erikseen omana tapauksena edellisen palama-askeleen materiaalikoostumuksen perusteella. Käytettyä tarkkuutta parantavaa predictor-corrector-laskentamenetelmää käytettäessä lasketaan kaikki pisteet vielä toisenkin kerran. Tämän lisäksi palamalaskennan vaatima muistin määrä nykyisellä laitekokoonpanolla estää useamman rinnakkaisen laskennan suorittamisen samaan aikaan, mikä lisää laskentaan kuluvaa aikaa entisestään.

## **6.2. Serpent-laskentojen tulokset**

Serpent tulostaa laskennan valmistuttua tulostiedostot, joista tarvittavat tiedot vaikutusalakirjastoihin löytyvät. Tiedostojen muoto pysyy samana laskentatapauksista riippumatta, mikä helpottaa tulosten lukemista ja käsittelyä koneellisesti ja täten myös vaikutusalakirjastojen luomista. Serpentin laskennan tulokset jokaiselle erilliselle tapaukselle tallentuvat omiin tulostiedostoihinsa.

Serpent tallentaa laskennasta automaattisesti restart-tiedoston josta suurin osa tarvittavista vaikutusalatiedoista löytyy. Kaikkien palama-askeleiden tiedot tallentuvat samaan restart-tiedostoon.

Erillisellä optiolla Serpent tallentaa palamapisteiden materiaalitiedot erilliseen tulostiedostoon. Materiaalitietoja tarvitaan puuttuvien reaktorimyrkkyjen fissiotuottojen määrittämisessä.

Joitakin vaikutuslakirjastoihin tarvittavia tietoja, kuten reaktorimyrkkyjen ja näiden lähdeaineiden kaappausvaikutusalat, ei restart-tiedostoista löytynyt, eikä kaikkia tarvittavia tietoja saa Serpent:n valmiilla reaktorimyrkkyjen laskentaoptiollakaan tulostetuksi. Näiden tietojen saamiseksi täytyi syötetiedostossa määrittellä erikseen detektoreja, jotka tallentavat kyseisessä materiaalissa tapahtuvien neutronireaktioiden määrän. Detektorien tallentamat tiedot tallentuvat omaan tiedostoonsa ja jokaiselle palama-askeleelle luodaan oma detektorin tulostiedosto. Tämä ominaisuus lisää tulostiedostojen määrää ja näiden sisältämien tietojen käsitteleminen vaatii omat rutiininsa vaikutuslakirjastoja muodostavaan komentosarjaan.

Oman erityisen haasteensa vaikutuslakirjastojen luomisessa muodosti reaktorimyrkkyjen fissiotuottojen määrittäminen. Fissiotuotteiden syntymistä ei rekisteröidä laskennan yhteydessä ainakaan mihinkään jälkeempään löydettävissä olevaan kohteeseen. Tästä johtuen fissiotuotot päädyttiin määrittämään erillisellä komentosarjalla, joka Octave-laskentaohjelmaa käyttäen hakee palamalaskennan materiaalitiedostoista fissioituvien polttoaineytimien atomitiheydet ja ydinvakiokirjastojen sekä erillisellä detektorilla määritellyn vuosuhteen perusteella laskee reaktorimyrkkyjen fissiotuotot näiden perusteella.

Työn suorittamisen aikana ilmestyneessä uudemmassa Serpent-versiossa on kehittyneempi reaktorimyrkkyjen vaikutusalarutiini, mutta tämän tulostamat vaikutusalat poikkeavat useita kertaluokkia vanhoista Casmo 4:lla lasketuista. Luultavasti kyseessä on jokin ero käytetyissä mittayksiköissä. Tätä ei kuitenkaan tarkemmin selvitetty työn teon yhteydessä, koska omatekoinen malli antoi oikean suuruusluokan tuloksia.

### 6.3. Serpent-laskentatulosten tarkkuuden optimointi

Monte Carlo-laskennan tulosten tarkkuuteen on mahdollista vaikuttaa käytettävän laskentapopulaation suuruutta sekä laskentakierrosten määrää muuttamalla. Suuremmalla populaatiolla tilastollisen virheen osuus tuloksissa on pienempi kuin saman laskennan tuloksessa pienemmällä populaatiolla.

Laskennan satunnaisuudesta johtuen saadaan tulosten luotettavuutta lisättyä ja virhemarginaalia täten pienennettyä myös toistamalla sama laskenta useaan kertaan. Laskennan toistaminen useampaan kertaan kasvattaa tietenkin laskenta-aikaa suoraan verrannollisesti laskentojen määrään. Tässä tosin on huomiotava ensimmäisen laskentakierroksen yhteydessä tehtävät geometriarutiinit, vaikutusalatiedon haut ja muistiin siirrot, jotka vievät oman aikansa ja pidentävät siten vain ensimmäiseen laskentakierrokseen kuluvaan aikaa.

Pienehköllä populaatiolla vaikutusalatietojen luominen ja muistiin tallentaminen vie moninkertaisen ajan itse laskentaan verrattuna, joten laskennan toistaminen muutamia kymmeniä kertoja ei vielä lisää laskenta-aikaa merkittävästi. Esimerkiksi laskennat ajavan komentosarjan toimintaa testattaessa käytetyssä tapauksessa, 1000 neutronin populaatiolla 100 laskentakierroksella, kesti ensimmäisen laskennan alustuksessa ja materiaalitietojen luomisessa noin minuutin ja palama askelten välillä suoritettavien materiaalitietojen päivityksessä noin 35 sekuntia, kun suoritettavat 100 laskentakierrosta kestivät yhteensä noin 20 sekuntia.

Populaation suurentaminenkin hidastaa laskentaa ja lisää samalla laskennan vaatiman muistin määrää. Tästä johtuen on olemassa jokin raja tulosten tarkkuudelle, mikä kyseisellä laitekoonpanolla voidaan saavuttaa populaatiota kasvattamalla.

Edellä mainituista seikoista johtuen on tehtävä kompromissi tulosten tarkkuuden ja käytettävissä olevan laskentakapasiteetin ja –ajan suhteen. Tietenkin aina olisi toivottavaa saada mahdollisimman tarkat tulokset, mutta tosielämän reali-



teetit pakottavat insinöörimäiseen lähestymistapaan. Eli pyritään saavuttamaan riittävän tarkat tulokset minimoidulla resurssien käytöllä.

Koska laskennassa kuluu aikaa joka tapauksessa melko paljon ja lopputulokseen vaikuttavien vaikutusalatietojen määrä on suuri, ei tässä yhteydessä tehty koelaskentoja tai epävarmuusanalyysyjä riittävän tarkkuuden todentamiseksi, vaan oletettiin tulosten olevan riittävän tarkkoja kokeneemman reaktorifyysikon lausuman tavoitteen "kasvukerroin 100 pcm:n tarkkuudella" toteutuessa.

Empiiristen koelaskentojen mukaan tähän tulokseen päästään minimaalisella laskenta-ajan käytöllä käyttäen nippumallin laskennassa populaationa 8000 neutronia ja toistamalla laskenta 100 kertaa. Empiiristen laskentatarkkuuden kokeilujen yhteydessä tilastoidut tulokset on esitetty taulukossa 1.

**TAULUKKO 1.** Testiajojen tuloksista voidaan havaita laskennan epävarmuuden ja laskenta-ajan riippuvan lähinnä mallinnettujen neutronien kokonaismäärästä.

Testiajo	Populaatio	Toistot	Tulos $k_{\text{eff}}$	Epävarmuus [pcm]	Laskenta-aika [min]
1	500	200	1,12550	150	0,46
2	500	400	1,12605	108	0,75
3	500	800	1,12472	79	1,34
4	500	1600	1,12348	57	2,45
5	500	3200	1,12383	41	4,73
6	500	6400	1,12358	29	9,23
7	1000	100	1,12279	175	0,45
8	1000	200	1,12518	118	0,74
9	1000	400	1,12344	88	1,29
10	1000	800	1,12454	59	2,33
11	1000	1600	1,12380	39	4,52
12	1000	3200	1,12412	29	8,82
13	2000	50	1,12678	145	0,49
14	2000	100	1,12385	117	0,75
15	2000	200	1,12401	81	1,29
16	2000	400	1,12403	57	2,33
17	2000	800	1,12382	40	4,46
18	2000	1600	1,12365	29	8,75
19	4000	25	1,12179	147	0,57
20	4000	50	1,12561	102	0,83
21	4000	100	1,12530	85	1,34
22	4000	200	1,12400	53	2,41
23	4000	400	1,12388	40	4,47
24	4000	800	1,12387	29	8,74
25	8000	25	1,12430	107	0,99
26	8000	50	1,12538	78	1,5
27	8000	100	1,12333	48	2,54
28	8000	200	1,12445	38	4,61
29	8000	400	1,12421	28	9,08
30	16000	50	1,12476	49	2,89

Käytännössä laskentojen yhteydessä havaittiin valitulla yhdistelmällä, 8000 lähdeneutronia ja 100 laskentakierrosta, tulosten tarkkuuden jäävän selvästi heikommaksi kuin mitä testiajoista saatujen tulosten perusteella olisi voinut odottaa. Ilmeisesti testilaskentaa tehdessä sattui olemaan poikkeuksellisen hyvä onni laskennassa, jolloin tulosten tarkkuus oli sattumalta parempi. Lopulta laskennoissa päästiin kuitenkin vähintään noin 160 pcm:n tarkkuuteen. Myöhemmin ilmi käyneiden seikkojen vuoksi laskennat täytyi kuitenkin tehdä uudelleen puuttuvien vaikutusalatietojen takia, joten seuraavissa laskennoissa käytettiin

hieman suurempaa 10000 lähdeneutronin populaatiota ja samaa toistojen määrää, jolloin laskentojen epävarmuus oli noin 130 pcm.

#### **6.4. ARES-vaikutusalakirjaston rakenne**

ARES lukee vaikutusalakirjastosta tarvitsemansa tiedot ennalta määritellyn muotoilun mukaisesti, joten tiedostossa olevien vaikutusalatietojen täytyy olla oikeassa muodossa ja oikein sijoiteltu, jotta ohjelma lukisi oikeat tiedot oikeisiin muuttujiin ja voisi siten saada laskennasta oikean tuloksen. Vaikutusalakirjasto on rakenteeltaan matriisimainen. Kirjaston yhdellä rivillä on tiedot säätösauvan asennosta, jäähdytteen lämpötilasta, polttoaineen palamasta, kyseisen vaikutusalan arvo näillä tilapisteiden arvoilla ja tilanmuutoksen määrittämät parametrien arvot eri muuttujille. Yhden polttoainetyypin vaikutusalatiedot parametrisoitteineen muodostavat noin 2 megatavun kokoisen tekstitiedoston.

Jokaiselle erilaiselle polttoainetyypille on oma vaikutusalakirjaston sisältävä tiedostonsa. Vaikutusalakirjastoja on siis viisi erillistä tiedostoa, kolmelle eri polttoaineryhmälle omansa ja lisäksi kahden gadoliiniumia sisältävän nipun gadoliiniumvapaalle yläpuolelle omansa.

#### **6.5. ARES-vaikutusalakirjaston muodostaminen**

Serpent-tulostiedostoissa on tallennettuna vaikutusalatietoja jokaiselle palama-askeleelle. Tässä kappaleessa on eritelty ARES-vaikutusalakirjastojen luomiseksi vaadittavat toimenpiteet. Suluissa on esitetty ARES-muuttujien nimet kullekin vaikutusalalle.

Absorptiovaikutusalat (SIGA1) nopealle ja (SIGA2) termiselle neutroniryhmälle löytyvät Serpent-tulostiedostoista TapausX\_res.m, muuttujasta ABSXS. Kyseessä on vektorityyppinen muuttuja, jossa alkioina ovat järjestyksessä kokonaisabsorptiovaikutusala, virhemarginaali tälle ja vaikutusalat kaikille määritetyille energiaryhmille virhemarginaaleineen alkaen korkeimman energian omaavasta ryhmästä.

Absorptiovaikutusalat ovat Serpent-tulostiedostoissa valmiiksi sopivassa muodossa ARES-vaikutusalakirjastoon sijoitettavaksi. Näiden osalta tarvittavat toimenpiteet ovat tietojen lukeminen oikeista tulostiedostoista sopiviin komentojonon muuttujiin, tallentaminen oikeaan vaikutusalakirjastoon polttoainetyypin mukaan sekä tarvittavien parametritietojen laskenta. Perl-komentosarjalla tämän toteutus on melko suoraviivaista.

Fissioneutronituotot (NUSF1) nopealle ja (NUSF2) termiselle neutroniryhmälle löytyvät samoista tulostiedostoista kuin absorptiovaikutusalat, muuttujasta NSF. Fissioneutronituotto Serpent tulostiedostoissa on myös samantyyppinen vektorimuuttuja, jossa alkioina ovat kokonaisfissioneutronituotto virhemarginaaleineen ja määriteltujen energiaryhmien neutronituotot virhemarginaaleineen alenevassa järjestyksessä.

Diffuusiokertoimet (DIFF1) nopealle ja (DIFF2) termiselle neutroniryhmälle ovat edelleen samoissa tulostiedostoissa samanmuotoisessa vektorimuuttujassa DIFFCOEF. Diffuusiokertoimetkin ovat valmiiksi sopivassa muodossa.

Nopeasta neutroniryhmästä termiseen ryhmään siirtymisen todennäköisyys (SIG12) on sekin samoissa tiedostoissa ja samanmuotoisena vektorimuuttujana GTRANSFXS.

Fissioenergiatuotto (EPSF1) nopeille ja (EPSF2) termisille neutroneille löytyy myös samoista tiedostoista, mutta fissioenergian tuottoa Serpent ei tallenna suoraan ARES:n vaikutusalakirjastoihin sopivassa muodossa. Serpent-tuloksista löytyvät fissiovaikutusalat muuttujassa FISSXS ja fissioenergiat erikseen muuttujasta FISSE. Näiden arvot keskenään kertomalla saadaan ARES vaikutusalakirjastoihin tarvittava fissioenergiatuotto. Tämän lisäksi Serpent laskentatuloksissa fissioenergia on ilmoitettu MeV:eina ja ARES-vaikutusalakirjastoon tarvitaan fissioenergiatuotto Jouleina, joten joudutaan tekemään vielä yksikkömuutos sopivan lukuarvon aikaansaamiseksi. Yksikkömuutos MeV:sta Jouleksi voidaan tehdä kertomalla MeV:eina ilmoitettu energia kertoimella  $1,6021773 \cdot 10^{13}$  J/MeV.

Polttoainenipun reunojen neutronivuon epäjatkuvuuskertoimet (SDF1W, SDF2W, SDF1S, SDF2S, SDF1E, SDF2E, SDF1N, SDF2N) on Serpent tuloksissa tallennettu virhemarginaaleineen muuttujaan ADFS.

Polttoainenipun kulmien epäjatkuvuuskertoimet (CD1SW, CD2SW, CD1SE, CD2SE, CD1NW, CD2NW, CD1NE, CD2NE) puolestaan ovat Serpent tulostiedostoissa muuttujassa ADFC.

Kaikkia ARES vaikutuslakirjastoissa tarvittavia reaktorimyrkkyjen vaikutusaloja ja fissiotuottoja ei Serpent-tulostiedostoista suoraan ole saatavissa. Valmiilla Serpent:n reaktorimyrkkyoptiolla olisi tosin saatavissa jodin ja ksenonin vaikutusalat, mutta ARES laskee reaktorimyrkkyjen pitoisuudet fissiotuoton ja lähdeaineiden hajoamisen mukaan ja ottaa huomioon myös samariumin ja tämän lähteenä toimivan prometiumin, joiden vaikutusalatietoja Serpent ei suoraan anna. Näiden tietojen saamiseksi on syötetiedostossa luotu detektoreja jotka laskevat tarkasteltavassa aineessa tapahtuvien reaktioiden määrät, mistä saadaan kyseisen aineen kaappausvaikutusala.

Fissiotuottojen osalta tilanne on hankalampi, sillä Serpent ei tulosta fissiotuottoja mihinkään. Tarvittavat reaktorimyrkkyjen ja näiden lähdeaineiden fissiotuotot on laskettu Serpent:n tulostamien palamalaskennan materiaalitietojen, ydinvaikotiedotkirjastojen sekä edellä mainittujen detektorien avulla määritetyn vuojauman avulla.

Taulukossa 2 on kootusti nähtävissä ARES vaikutuslakirjastossa esiintyvät vaikutusalat ja näiden Serpentillä saamiseksi tarvittavat toimenpiteet.

**Taulukko 2.** ARES vaikutusalat ja Serpentin vastaavat, sekä tarvittavat toimenpiteet on esitetty taulukossa kootusti.

ARES vaikutusala	Merkitys	Serpent muuttuja	Missä ?	Tarvittavat toimenpiteet
SIGA1	Absorptiovaikutusala, nopeat neutronit	ABSXS 3	Serpent tulokset _res.m tiedosto	
SIGA2	Absorptiovaikutusala, termiset neutronit	ABSXS 5	Serpent tulokset _res.m tiedosto	
NUSF1	Fissioneutronituotto, nopeat neutronit	NSF 3		
NUSF2	Fissioneutronituotto, termiset neutronit	NSF 5		
DIFF1	Diffuusiokerroin, nopeat neutronit	DIFFCOEF 3		
DIFF2	Diffuusiokerroin, termiset neutronit	DIFFCOEF 5		
SIG12	Termalioitumis todennäköisyys	GTRANSFXS 5		
EPSF1	Fissioenergiatuotto, nopeat neutronit	FISSE 3 * FISSXS 3		MeV – J muunnos
EPSF2	Fissioenergiatuotto, termiset neutronit	FISSE 5 * FISSXS 5		MeV – J muunnos
SIGF1	Fissiovaikutusala	FISSXS 3		
SIGF2	Fissiovaikutusala	FISSXS 5		
SDF1W	Neutronivuon	ADFS 1		
SDF2W	epäjatkuvuustekijät	ADFS 3		
SDF1S	polttoainenipun	ADFS 5		
SDF2S	reunoilla	ADFS 7		
SDF1E		ADFS 9		
SDF2E		ADFS 11		
SDF1N		ADFS 13		
SDF2N		ADFS 15		
CD1SW	Neutronivuon	ADFC 13		
CD2SW	epäjatkuvuustekijät	ADFC 15		
CD1SE	polttoainenipun	ADFC 9		
CD2SE	kulmissa	ADFC 11		
CD1NE		ADFC 5		
CD2NE		ADFC 7		
CD1NW		ADFC 1		
CD2NW		ADFC 3		
SIGI1	Jodikaappausvaikutusala nopeat neutronit		_detXX.m	cm2 – barn muutos
SIGI2	Jodikaappausvaikutusala, termiset neutronit		_detXX.m	cm2 – barn muutos
SIGI3	Jodin fissiotuotto		_dep.m +Ydinvakiot	
SIGX1	Xenon 135 kaappaus, nopeat neutronit		_detXX.m	cm2 – barn muunnos
SIGX2	Xenon 135 kaappaus, termiset neutronit		_detXX.m	cm2 – barn muunnos
SIGX3	Xenon 135 fissiotuotto		_dep.m +Ydinvakiot	
SIGP1	Prometium 149 kaappaus Nopeat		_detXX.m	
SIGP2	Prometium 149 kaappaus Termiset		_detXX.m	
SIGP3	Prometium 149 fissiotuotto		_dep.m +Ydinvakiot	
SIGS1	Samarium 149 kaappaus nopeat			
SIGS2	Samarium kaappaus termiset			
SIGS3	Samarium fissiotuotto		_dep.m +Ydinvakiot	
BETA	Viivästyneiden neutronien osuus	BETA_EFF 1	_res.m tiedostosta	luetaan suoraan

## 6.6. Vaikutusalojen parametrisointi ARES:ssa

ARES on alkujaan kiehutusvesireaktorin laskentaan suunniteltu ja tehty. Painevesireaktorin laskennassa tarvittavat parametrisoinnit on lisätty jälkikäteen vanhaan malliin, joten vaikutusalojen parametrisointiin käytettävä funktio on melko monimutkainen. Painevesireaktorin laskennassa ei välttämättä tarvitse huomioida kaikkia kiehutusvesireaktorin laskennassa oleellisia suureita, sillä prosessien eroista johtuen reaktorin käyttäytymiseen vaikuttavat hieman erilaiset asiat. Esimerkiksi aukko-osuus, joka on kiehutusvesireaktorissa keskeisimpiä tehoon vaikuttavia suureita, ei ole painevesireaktorin tapauksessa yleensä merkittävä tekijä. Painevesireaktorissa jäähdyte ei käytännössä kiehu juuri ollenkaan, mistä johtuen aukko-osuuskin on väistämättä hyvin pieni, eikä sillä täten ole kovin merkittävää vaikutusta reaktorin toiminnan eikä laskennan kannalta.

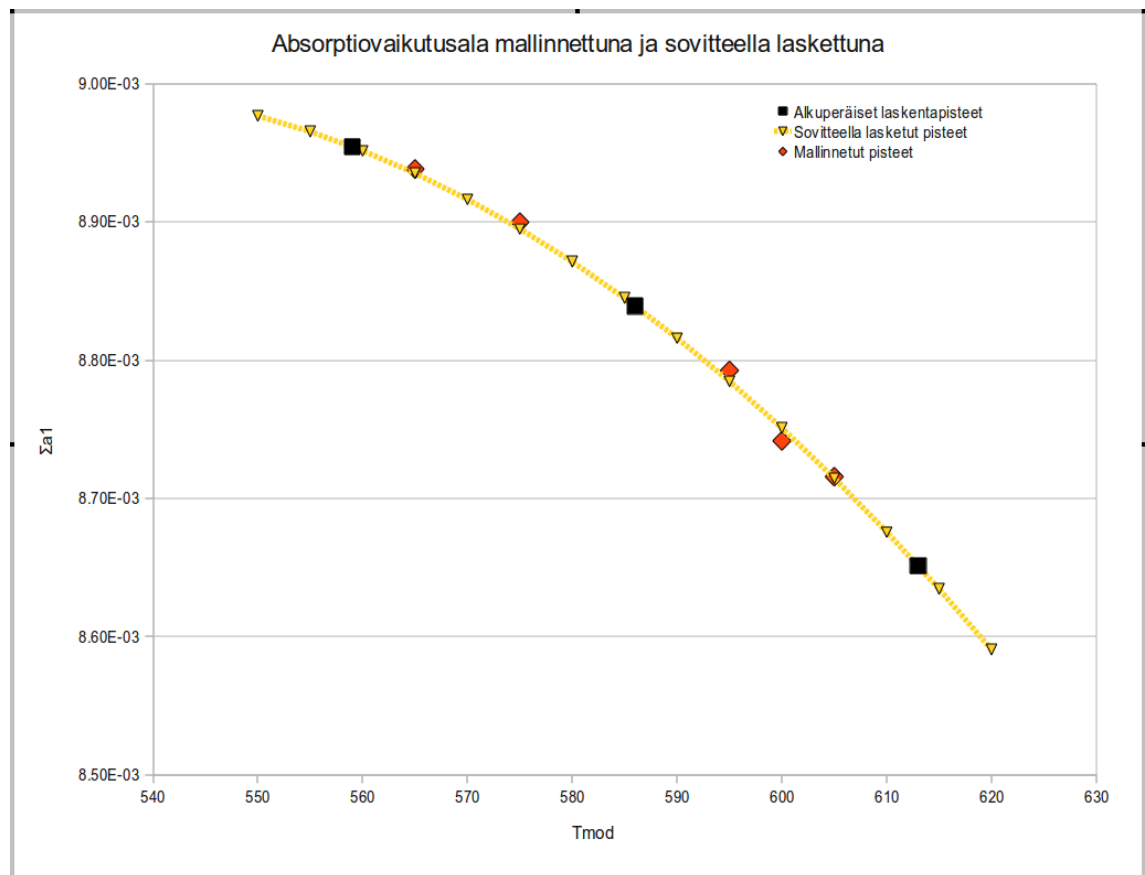
Parametrisointi eri muuttujien suhteen vaatii kyseessä olevaa muuttujaa varioimalla lasketut vaikutusalatiedot. CASMO 4:llä vaikutusaloja laskettaessa, on mahdollista järkevällä laskenta-ajalla tehdä parametrisointi käyttäen vanhan mallin vaatimaa noin 5000 laskentapistettä. Monte Carlo-laskenta on sen verran hitaampaa, että aivan näin suuria määriä laskentapisteitä ei ole järkevää käyttää, vaan parametrisointia on yksinkertaistettava nykyisestä.

Alkutilan arvot olisi vielä mahdollista kohtuullisessa ajassa laskea kaikissa vanhan parametrisointimallinkin vaatimissa pisteissä, mutta palamapisteiden lisääminen riittäväksi koko jakson laskentaa varten aiheuttaisi laskenta-ajan kasvamisen todella pitkäksi. Toisaalta ei myöskään haluttu tehdä erilaisia parametrisointeja alkutilalle ja palamamallille, sillä se olisi luultavasti aiheuttanut monenlaisia ongelmia ja enemmän työtä erilaisten laskentojen muodossa.

ARES:n tapauksessa parametrisointi on hoidettu monimuuttujaista toisen asteen polynomifunktiota käyttäen, jolloin kolme tilapistettä kutakin muuttujaa kohti laskemalla saadaan sovite, joka sopii näihin kolmeen laskettuun pisteeseen täydellisesti. Pisteiden välillä sovitteella lasketut vaikutusalat ovat melko tarkasti mallinnettujen arvojen mukaisia. Mutta soviteen laskentapisteiden ulkopuolelle

jäävillä alueilla paraabelimuotoinen funktio saattaa antaa selvästi todellisuudesta poikkeavia tuloksia.

Yhden polttoainenisipputyyppin nopeiden neutronien absorptiovaikutusalan arvoja jäädytteen lämpötilan funktiona on esitetty kuvaajassa 11. Vaikutusalat on laskettu sekä sovitefunktiota käyttäen että muunnellun lämpötilan arvoilla uudelleen mallinnettuna.



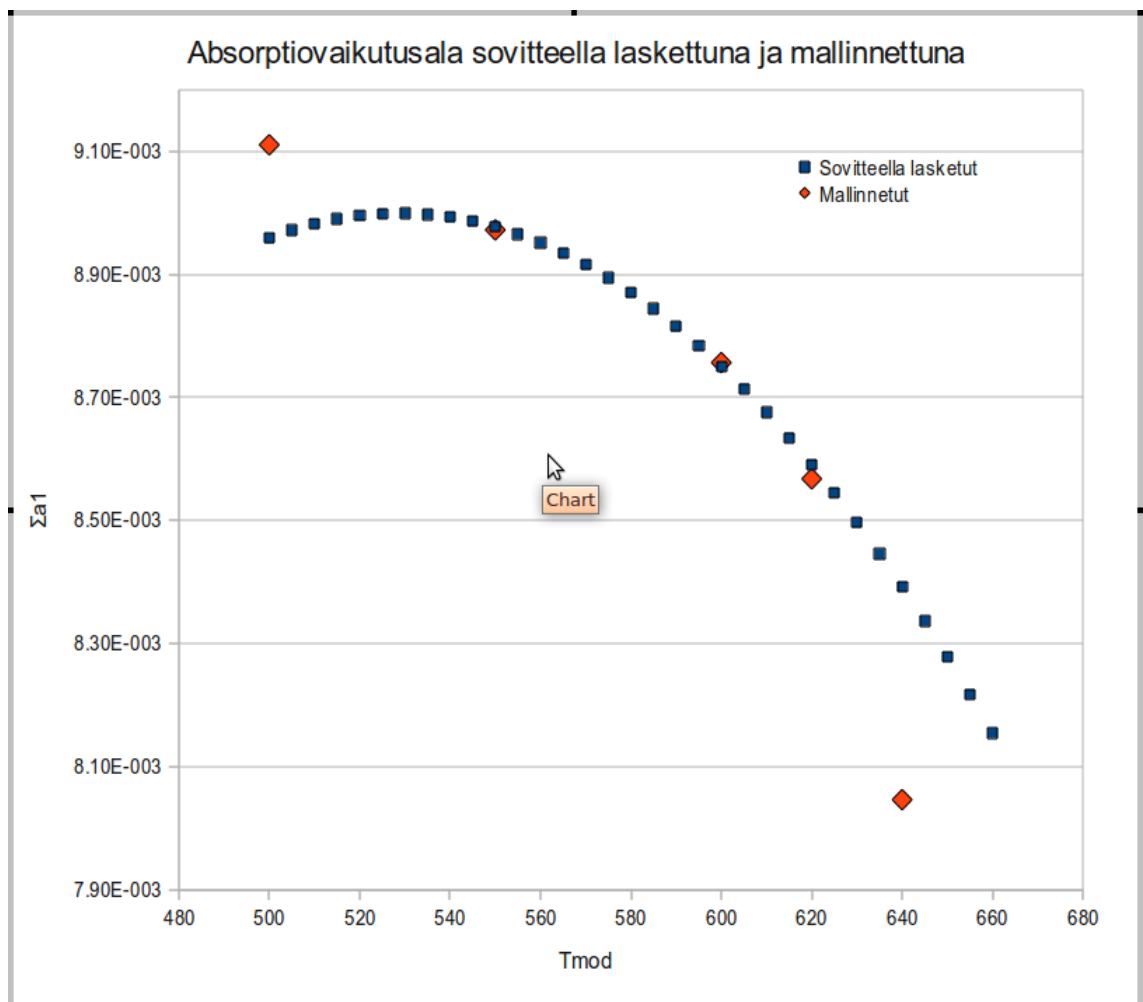
**KUVA 11.** Jäädytteen lämpötilan muutoksen vaikutus absorptiovaikutusalaan on hyvin samankaltainen soviteella laskettuna ja eri lämpötiloilla erikseen mallinnettuna.

Koska sovitefunktio on luotu laskemalla arvot tietyissä kolmessa pisteessä ja sovittamalla funktio juuri näiden pisteiden kautta kulkeväksi, antaa se näissä pisteissä tietenkin saman arvon kuin mallinnettu arvo kyseisessä pisteessä oli, joten vertailua ei täten ole mielekäs suorittaa näissä pisteissä. Toisaalta Monte Carlo laskennan tuloksissa on aina menetelmästä johtuva tilastollinen epävarmuus, joten toistamalla laskenta samoilla alkuarvoilla saadaan todennäköi-



sesti lukuarvoltaan hieman eri tulos toisella kerralla. Kuitenkin käyttämällä riittävän suurta otosta laskennassa, saadaan tilastollisen virheen osuus tuloksissa pienenemään niin paljon, ettei tällä erolla enää ole käytännössä merkitystä.

On kuitenkin hyvä muistaa, että sovitefunktio antaa järkeviä tuloksia vain rajoitetulla alueella. Tämä selviää hyvin havainnollisesti laajentamalla edellä esitetyn tapauksen lämpötilan vaihteluväliä hieman enemmän laskettujen pisteiden ulkopuolelle. Kuvassa 12 on esitetty samalla soviteella lasketut vaikutusalat hieman suuremmalla lämpötilan vaihteluvälillä ja vertailun vuoksi mallinnettu tapaus muutamassa pisteessä.



**KUVA 12.** Reaktorin käytön aikaisille lämpötiloille tehty sovite ei ole pätevä käyttöalueen ulkopuolella.

Kuvasta 12 voidaan havaita vaikutusalan poikkeavan soviteella lasketuista arvoista selvästi jo lämpötilan ylittäessä tai alittaessa pätevyysalueen muutamalla

kymmenellä asteella. Tämän takia tehokäytön aikaisilla tilaparametreilla lasketua sovitetta ei voi käyttää esimerkiksi huoltoseisokin tai onnettomuustilanteen aikaisissa olosuhteissa olevan reaktorin mallinnukseen.

Sovitteen pätevyysaluetta voitaisiin tietenkin helposti laajentaa valitsemalla sovitteen luomiseen vaikutusalat mahdollisimman suurella vaihteluvälillä, mutta näin todennäköisesti heikennettäisiin merkittävästi sovitteen tarkkuutta tärkeimmällä laskenta-alueella. Tämän vuoksi parametrisointiin käytettäviksi laskentapisteiksi on valittu hieman reaktorin normaalin käyttötilan ääripäiden ulkopuolella olevat pisteet, jotka ovat kuitenkin vielä alueella, missä jäähdytteen tai polttoaineen ominaisuudet eivät oleellisesti poikkea käytön aikaisista, sekä näiden pisteiden keskiarvo.

## 7. TYÖN TULOKSET

Työn tuloksina saatiin vaikutuslakirjastot Olkiluoto 3 reaktorin erityyppisille polttoainepuille, parametrisointimalli näille, ainakin osittain toimiva laskentaketti ja tällä lasketut säätösauvojen tehokkuudet sekä sammutusmarginaali nol-lateholla.

Vaikutuslakirjasto on niin suuri taulukkomuotoinen tiedosto, ettei sitä pysty tässä yhteydessä järkevästi esittämään. ARES simulaatioiden onnistuminen näitä kirjastoja käyttäen kuitenkin riittänee osoitukseksi luotujen kirjastojen toimivuudesta.

Olkiluoto 3 reaktorin alkulatauksen turvallisuusmarginaaleista laskettiin helppien toteutettavissa oleva sammutusmarginaali. Sammutusmarginaalin arvoksi saatiin 10719 pcm. Laskelman mukaan tehokkain säätösauva oli reaktorin positi-  
tiossa N09 oleva säätösauva. Arevan laskelmien tuloksissa vastaavassa reaktori-  
tilassa määritetty sammutusmarginaali on 10010 pcm, tehokkaimman säätö-  
sauvan ollessa R09 positiossa oleva säätösauva.

Lasketuista ARES tuloksista on esitetty taulukossa 3 säätösauvojen tehokkuu-  
det reaktorin nol-lateholla kuumassa tilassa (576 K). ARES-laskentojen tulosten  
lisäksi taulukossa on Arevan laskentojen tulokset vastaavalle reaktorin tilalle.

Taulukko 3. Luotuja vaikutuslakirjastoja käyttäen ARES:lla lasketut säätösauvojen tehokkuudet nollateholla sekä Arevan vastaavat laskentatulokset. Säätösauvaryhmien sijainti reaktorissa on esitetty kuvassa 4.

Säätösauva-ryhmä		Tehokkuus [pcm]	Arevan tulos [pcm]
N		4569	4960
N+P		11218	11960
PA		333	270
PB		333	270
PC		366	400
PD		338	330
PE		338	330
PF		341	430
PG		341	430
PH		348	440
PI		437	440

Lasketut OL3 alkulatauksen säätösauvojen tehokkuudet ja sammutusmarginaali näyttäisivät olevan Arevan laskemien kanssa jokseenkin samaa suuruusluokkaa. Poikkeamat johtuvat todennäköisimmin puutteellisesta parametrien ristitermien mallinnuksesta.

## 8. YHTEENVETO

Työn suorittaminen vaati monialaista osaamista. Reaktorifysiikan ilmiöiden lisäksi oli työtä suoritettaessa perehdyttävä moniin eri tietotekniikan osa-alueisiin. Työssä tarvittavien ohjelmien käytön edellyttämä Linux ympäristö itsessään on jo oma hieman eksoottinen maailmansa. Tämän lisäksi ohjelmistot on koodattu eri ohjelmointikielillä, ARES Fortran 77:lla ja Serpent C-kielellä, joille täytyi etsiä ja asentaa sekä asetella toimimaan sopivat kääntäjät. ARES:iin vaikutusalakirjastojen rakenteen muuttamisen edellyttävät muutokset aiheuttivat tarpeen opetella ymmärtämään Fortran 77 ohjelmointia, joka oli ennestään tuntematon laji. Näiden lisäksi vaikutusalakirjastojen luomiseksi tarvittavien tietojen käsittelyyn oli käytettävä vielä kolmatta ohjelmointikieltä. Tämä oli Octave laskentaohjelmassa käytettävä symbolinen kieli, jota tarvittiin reaktorimyrkkyjen fissiotuottojen laskennassa Serpent tulosten pohjalta.

Tätä työtä tehtäessä törmättiin Serpent palamalaskujen aiheuttaman suuren muistintarpeen myötä myös ensimmäistä kertaa käytännössä 32bittisen käyttöjärjestelmän muistiosoitteiden riittämättömyyteen. Tämän rajoitteen johdosta jouduttiin koneeseen hankitun lisämuistin käyttöön saamiseksi käyttöjärjestelmä vaihtamaan 64bittiseen versioon kesken työn suorittamisen, jotta palamalaskuja päästiin laskemaan ja työn suorittamista voitiin jatkaa. Käyttöjärjestelmän vaihdon takia jouduttiin ohjelmistojen asennukset ja asetellut tietenkin tekemään uudelleen käyttäen 64bittiselle järjestelmälle tehtyjä ohjelmistoversioita.

Serpent laskennoissa tulostiedostoja syntyi yhteensä 5040 kappaletta. Yksittäisiä vaikutusalatietoja näistä tiedostoista haettiin 76800, joille jokaiselle tehtiin parametrisovitus neljän muuttujan suhteen.

Komentojonotiedostoja tarvittiin Serpent laskentojen tulosten saamiseksi ja ARES vaikutusalakirjastojen luomiseen lopulta yhteensä noin 1500 koodiriviä. Tämän lisäksi, jotta ARES saatiin automatisoitua laskemaan sulkumarginaalit ja säätösauvojen tehokkuudet, tarvittiin vielä muutama sata riviä lisää koodia.

Monte Carlo menetelmä on toimiva, mutta uutena menetelmänä työläs ja hidas, tapa tuottaa homogenisoituja ryhmävakioita sydänsimulaattorille. Hyvänä puoleena Monte Carlo menetelmässä on helppo tulosten tarkkuuden säätämisen mahdollisuus ja laskennan hyvä rinnakkaistuvuus. Rinnakkaislaskentaa ei tosin tässä yhteydessä pystytty tietokoneen muistirajoitteisuuden takia hyödyntämään.

Saadut tulokset vaikuttavat järkevilta ja ovat oikeassa suuruusluokassa, mistä voi päätellä ryhmävakioiden olevan ainakin lähellä oikeita.

Serpent kehittäjätiimi on mahdollisesti jossakin tulevassa versiossa sisällyttämässä ohjelmaan rutiinit ARES yhteensopivien vaikutusalatiedostojen tuottamiseksi suoraan Serpent-ajojen tuloksena. Tämä olisi hieno ominaisuus, vaikkakin se tekisi tavallaan turhaksi lähes kaiken tämän työn tekemisen yhteydessä tehdyn ajatus- ja ohjelmointityön toimivan laskentaketjun tuottamiseksi. Tällä lisäominaisuudella saataisiin kuitenkin toteutettua luultavasti helpommin käytettävä menettely vaikutuslakirjastojen tuottamiseksi, sekä suurempi varmuus vaikutuslataitietojen oikeellisuudesta, kun koko systeemi olisi pätevien ammattilaisten tekemä.

## **8.1. Jatkokehityksiä**

Laskentaketjun toimivuus on todettu tämän työn suorittamisen yhteydessä. Laskentaketjun käytettävyyttä eri tilanteissa on kuitenkin vielä varsin heikko, sillä parametrisointi on tehty vain käyttötilan arvojen alueella, eikä ristitermejä eri muuttujien suhteen ole laskettu. Tulosten tarkkuus on myös kyseenalainen tästä syystä, sekä siksi ettei virhetarkastelua riittävän tarkkuuden saavuttamiseksi tässä yhteydessä suoritettu. Näiden epäkohtien korjaamiseksi olisi tulevaisuudessa suoritettava ainakin seuraavat jatkokehitystoimenpiteet.

Vaikutusalat tulisi laskea ja tehdä pätevä sovite kylmälle tilalle, eli esimerkiksi 293 K lämpötilalle, jotta laskentoja voisi tehdä myös muulla kuin reaktorin normaalilla käyttöalueella. Ainakin reaktorin käynnistystä edeltävät kylmän tilan

kokeet olisi hyvä pystyä mallintamaan, jotta mallin toimintaa voitaisiin paremmin arvioida, kun kokeiden tulokset on saatavilla. Nykyisillä vaikutuslakirjastoilla ja sovitteilla ei kuitenkaan kylmän tilan arvoja pysty laskemaan, sillä sovite on tehty reaktorin normaalin käyttölämpötilan arvoille. Tämä jäi huomioimatta alkupe- räisiä vaikutusalojen laskentapisteitä valittaessa, kun haluttiin minimoida tarvit- tavien laskentojen määrä ja toisaalta maksimoida tarkkuus reaktorin käyttöalu- eella.

Lisäksi vaikutusalat ja sovitteet olisi laskettava nykyistä suuremmalla jäähdyt- teen tiheysalueella, jotta laskennat onnistuisivat myös reaktorin täydellä teholla. Nykyisellä tiheysparametrisoinnilla laskenta ajautuu epästabiiliin tilaan tehon noustessa yli 70 % tasolle. Tämä johtunee höyryn muodostuksen lisääntymises- tä sydämen yläpäässä tehon ollessa suuri. Lisääntynyt höyryn tuotto sydämen alueella aiheuttanee paikallisesti jäähdytteen tiheyden pienenemisen liian kauas mallinnetuista arvoista ja sovitteen pätevyysalueelta. Tästä johtuen sovitteella lasketut vaikutusalatiedot eivät ole järkeviä ja laskenta ei onnistu.

Uusimman Serpent version sisältämän reaktorimyrkkyoption toimintaan tulisi perehtyä, ja vaikutuslakirjastojen luomisrutiinit mahdollisesti muuttaa hyödyn- tämään tätä ominaisuutta. Mikäli kaikki tarvittavat tiedot tämän avulla saataisiin suoraan Serpent-tulostiedostoista, nopeutuisi vaikutuslakirjastojen muodosta- minen ja yksi mahdollisesti virheitä aiheuttava laskentavaihe jäisi pois. [14]

Ryhmävakiot voisi olla hyvä laskea yleisesti myös hieman paremmalla tarkkuu- della. Tämä vähentäisi laskennan lopputuloksissa esiintyvän virheen osuutta. Tästä kannattaa kuitenkin ensin tehdä jonkinlainen tarkastelu virhemarginaalien suuruudesta käytettyyn laskenta-aikaan nähden. Paremman tarkkuuden saavut- tamiseksi laskenta-aikaa joudutaan pidentämään entisestään, mikäli selvästi tehokkaampaa laskentakonetta ei ole käytettävissä.

## LÄHDELUETTELO

1. GEN IV International Forum, GIF R&D Outlook for Generation IV Nuclear Energy Systems, 2009. 32 s, saatavissa: [http://www.gen-4.org/PDFs/GIF\\_RD\\_Outlook\\_for\\_Generation\\_IV\\_Nuclear\\_Energy\\_systems.pdf](http://www.gen-4.org/PDFs/GIF_RD_Outlook_for_Generation_IV_Nuclear_Energy_systems.pdf), Viitattu 23.7.2012.
2. Reuss Paul. Neutron physics. Institut national des sciences et techniques nucléaires, Les Ulis Cedex, 2008, ISBN 978-2-7598-0041-4
3. Department Of Energy, Hanford Reactor B, internet sivu. saatavissa: <http://www.hanford.gov/page.cfm/BReactor>, viitattu 23.7.2012.
4. Säteilyturvakeskus, toim. Jorma Sandberg. Ydinturvallisuus. Hämeenlinna 2004. 418 s. ISBN 951-712-500-3.
5. Prosessorin tiedot, Intel Internet-sivut, saatavissa: [http://download.intel.com/support/processors/core2quad/sb/core\\_Q6000.pdf](http://download.intel.com/support/processors/core2quad/sb/core_Q6000.pdf), viitattu 13.9.2011.
6. Listaus supertietokoneista. <http://www.top500.org>, viitattu 19.11.2011.
7. Wall Larry, Christiansen Tom, Schwartz Randal L. Programming Perl, Second Edition. O'Reilly & Associates Inc, Sebastopol, 1996. 645 s. ISBN 1-56592-149-6
8. Riedl E, Pulkus P. Nuclear Design Report for the First Core Reactor Physics Calculations for Cycle 1. Areva NP, 2009. 61 s., A1C-1317856-2
9. Areva, Fuel Sector, Design and Sales Division. Material Specification M5 Sheet. Areva NP, 2008. 5 s., SP/C/1172/A2
10. Leppänen Jaakko. Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code. VTT Publications 640, 2007, 228 s. ISBN 978-951-38-7019-5
11. Ardron Keith, Presentation to IOP Nuclear Industry Group, 2010, Viitattu 15.9.2012, Saatavissa: [http://www.iop.org/events/scientific/conferences/y/10/epr/file\\_45457.pdf](http://www.iop.org/events/scientific/conferences/y/10/epr/file_45457.pdf)



12. Mattila Riku. ARES-sydänsimulaattori viranomaisen työkaluna. ATS Ydintekniikka (38) 1/2009 s.35-37. ISSN-0356-0473
13. Edenius Malte, Rhodes Joel. CASMO-4 A FUEL ASSEMBLY BURNUP PROGRAM User's Manual. Studsvik Scandpower, Inc., 2001. SSP-01/400
14. Jaakko Leppänen, Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code User's Manual, 2012 164 s. Saatavissa: [http://montecarlo.vtt.fi/download/Serpent\\_manual.pdf](http://montecarlo.vtt.fi/download/Serpent_manual.pdf)

