

## Capitolo 6 – I codici MCB e CARL

### 6.1 – Il codice MCB

Il codice MCB (*Monte Carlo Continuous Energy Burnup*) può essere utilizzato per calcolare l'evoluzione temporale della densità dei nuclidi con il bruciamento o con il decadimento; include sia il calcolo degli autovalori di sistemi critici o sottocritici, che calcoli trasportistici neutronici con sorgente fissa o in sistemi moltiplicanti per ottenere i ratei di reazione e la deposizione di energia entrambi necessari per i calcoli di burnup. L'MCB integra il ben noto codice MCNP (ver. 4C) e l'innovativo codice TTA (*Transmutation Trajectory Analysis*) che serve per i calcoli di evoluzione delle densità dei nuclidi, incluse la formazione e l'analisi delle catene di trasmutazione. Il codice MCB è compatibile con l'MCNP e ne conserva la struttura. Calcoli di burnup completi possono essere eseguiti in una singola sessione richiedendo la compilazione di un unico file che presenta modeste modifiche rispetto ad un classico file di input del MCNP. Il codice è stato estensivamente testato in calcoli di benchmark e progettazione di noccioli di reattori. La conclusione generale che si può trarre dall'applicazione pratica mostra che il codice MCB1C produce risultati valevoli, fisicamente congruenti, e che pertanto la correttezza dei modelli fisici applicati è provata. Il codice è stato inoltre dotato di nuove caratteristiche, fra cui quella più importante è la simulazione dell'evoluzione isotopica che contempla anche la generazione di nuovi nuclidi.

In generale l'obiettivo principale di un codice di calcolo di burnup è quello di determinare l'evoluzione della densità dei materiali. Nei sistemi reali che sono soggetti ad irraggiamento o a decadimento, la composizione nucleare subisce una variazione che può essere generalmente descritta da una funzione continua del tempo; il modo in cui il codice MCB risolve tale funzione è basato su due distinti passi:

- si determinano i tassi di reazione e le probabilità di decadimento ad un tempo prefissato per mezzo di calcoli trasportistici neutronici stazionari;
- in seguito viene calcolata l'evoluzione isotopica dal tempo prefissato all'inizio del passo temporale successivo.

La durata dei passi temporali ed il loro punto di inizio e fine possono essere fissati a discrezione dell'utente.

Ulteriori indicazioni circa le modalità di funzionamento del codice sono più estesamente illustrate nel manuale [6.1] allegato al codice stesso.

## 6.2 – Il codice CARL

Nonostante attualmente siano disponibili altri codici atti a calcolare l'*inventory* radiotossico del combustibile (MCB, ecc.) si è scelto, nell'ambito del presente lavoro, di sviluppare un proprio codice, denominato CARL, che consenta maggiore flessibilità nel trattamento e nella presentazione dei dati, anche in vista di un eventuale futuro aggiornamento dello stesso.

Il codice di calcolo CARL (*CALculation of Radiotoxicities Lifetime*) è stato sviluppato al fine di determinare l'evoluzione temporale dell'*inventory* radiotossico del combustibile fresco utilizzabile in un reattore nucleare e del *waste* in uscita dallo stesso. E' possibile inoltre visualizzare i grafici delle radiotossicità dei singoli elementi assieme ai loro prodotti figli. In *input* sono richieste le quantità (espresse in grammi) dei singoli nuclidi che compongono il combustibile (ottenibile ad esempio con altri codici, quali l'MCB). Il codice CARL può effettuare calcoli riguardanti combustibili nucleari contenenti combinazioni di plutonio, uranio e/o torio (nelle diverse composizioni isotopiche), così come di combustibili contenenti anche altri elementi transuranici (nettunio, americio, curio). Gli elementi del combustibile fresco ed esausto presi in considerazione sono sia gli attinidi (torio, uranio, nettunio, plutonio, americio e curio) che i principali prodotti di fissione (13, fra cui quelli considerati più pericolosi), come riportato nelle tabelle 6.1, 6.2 e 6.3.

NUCLIDI CONSIDERATI NEI DATI DI INPUT					
${}_{90}\text{Th}^{232}$					
	${}_{92}\text{U}^{235}$				
		${}_{93}\text{Np}^{237}$			
	${}_{92}\text{U}^{238}$		${}_{94}\text{Pu}^{238}$		
			${}_{94}\text{Pu}^{239}$		
			${}_{94}\text{Pu}^{240}$		
			${}_{94}\text{Pu}^{241}$	${}_{95}\text{Am}^{241}$	
			${}_{94}\text{Pu}^{242}$	${}_{95}\text{Am}^{242\Xi}$	${}_{96}\text{Cm}^{242}$
			${}_{94}\text{Pu}^{243}$	${}_{95}\text{Am}^{243}$	${}_{96}\text{Cm}^{243}$
			${}_{94}\text{Pu}^{244}$		${}_{96}\text{Cm}^{244}$
					${}_{96}\text{Cm}^{245}$

Tabella 6.1 – Nuclidi presi in considerazione nell'input del codice CARL

$\Xi$  metastabile

<i>PRODOTTI DI FISSIONE CONSIDERATI NEI DATI DI OUTPUT</i>										
$^{87}_{37}\text{Rb}$										
	$^{90}_{38}\text{Sr}$									
		$^{93}_{40}\text{Zr}$								
			$^{94}_{41}\text{Nb}$							
				$^{99}_{43}\text{Tc}$						
					$^{107}_{46}\text{Pd}$					
						$^{126}_{50}\text{Sn}$				
							$^{129}_{53}\text{I}$			
								$^{135}_{55}\text{Cs}$		
								$^{137}_{55}\text{Cs}$		
									$^{147}_{62}\text{Sm}$	
									$^{151}_{62}\text{Sm}$	
										$^{154}_{63}\text{Eu}$

Tabella 6.2 – Prodotti di fissione presi in considerazione nell’output del codice CARL

<i>ATTINIDI CONSIDERATI NEI DATI DI OUTPUT</i>					
$^{232}_{90}\text{Th}$					
	$^{233}_{92}\text{U}$				
	$^{235}_{92}\text{U}$				
		$^{237}_{93}\text{Np}$			
	$^{238}_{92}\text{U}$		$^{238}_{94}\text{Pu}$		
			$^{239}_{94}\text{Pu}$		
			$^{240}_{94}\text{Pu}$		
			$^{241}_{94}\text{Pu}$	$^{241}_{95}\text{Am}$	
			$^{242}_{94}\text{Pu}$	$^{242\Xi}_{95}\text{Am}$	$^{242}_{96}\text{Cm}$
			$^{243}_{94}\text{Pu}$	$^{243}_{95}\text{Am}$	$^{243}_{96}\text{Cm}$
			$^{244}_{94}\text{Pu}$		$^{244}_{96}\text{Cm}$
					$^{245}_{96}\text{Cm}$

Tabella 6.3 – Attinidi presi in considerazione nell’output del codice CARL

$\Xi$  metastabile

I grafici visualizzano i valori delle radiotossicità in Sievert, quelli del tempo in anni. Nel calcolo della radiotossicità si considera quale via di incorporazione l'**ingestione** (i fattori di conversione di dose sono quelli forniti dall'ICRP).

Il codice CARL basa i suoi algoritmi di calcolo sulle *equazioni di Bateman* [4.6]. Si consideri infatti una catena di decadimenti:

$$1 \Rightarrow 2 \Rightarrow 3 \Rightarrow 4$$

con costanti di decadimento (pari al logaritmo neperiano di 2 diviso il periodo di dimezzamento)  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ . Le equazioni differenziali che governano il fenomeno sono:

$$\left\{ \begin{array}{l} dN_1 = -\lambda_1 N_1 dt \\ dN_2 = \lambda_1 N_1 dt - \lambda_2 N_2 dt \\ dN_3 = \lambda_2 N_2 dt - \lambda_3 N_3 dt \\ dN_4 = \lambda_3 N_3 dt - \lambda_4 N_4 dt \end{array} \right.$$

Nel caso all'inizio ci siano solo nuclei di tipo  $N_0$  si ha la seguente soluzione:

$$A_n = N_0 \cdot \sum_{i=1}^n c_i e^{-\lambda_i t} dt = N_0 \cdot (c_1 e^{-\lambda_1 t} + c_2 e^{-\lambda_2 t} + \dots + c_n e^{-\lambda_n t})$$

$$c_m = \frac{\prod_{i=1}^n \lambda_i}{\prod_{i=1, i \neq m}^n (\lambda_i - \lambda_m)} = \frac{\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \lambda_3 \cdot \dots \cdot \lambda_n}{(\lambda_1 - \lambda_m) \cdot (\lambda_2 - \lambda_m) \cdot \dots \cdot (\lambda_n - \lambda_m)}$$

I valori delle attività dei singoli nuclidi devono quindi essere moltiplicate per i rispettivi fattori di dose.

Il codice è stato sviluppato in ambiente *Mathcad*<sup>®</sup>.

In particolare per gli elementi transuranici vengono considerati solo i prodotti figli della catena di decadimento che danno contributi significativi nei primi 300000 anni di decadimento. Il software si avvale dei dati forniti dal programma *Radiation Decay* (ver. 3.6) di Charles Hacker e della tabella dei nuclidi edita dalla *Lockheed Martin* (15<sup>a</sup> edizione).

Il codice CARL consente di determinare graficamente dopo quanto tempo le 'scorie' raggiungono la radiotossicità del combustibile fresco, di quanto i due valori si discostano nel tempo, e dopo quanto tempo si raggiungono dei valori prefissati (fig. 6.1, 6.2, 6.3, 6.4, 6.5).

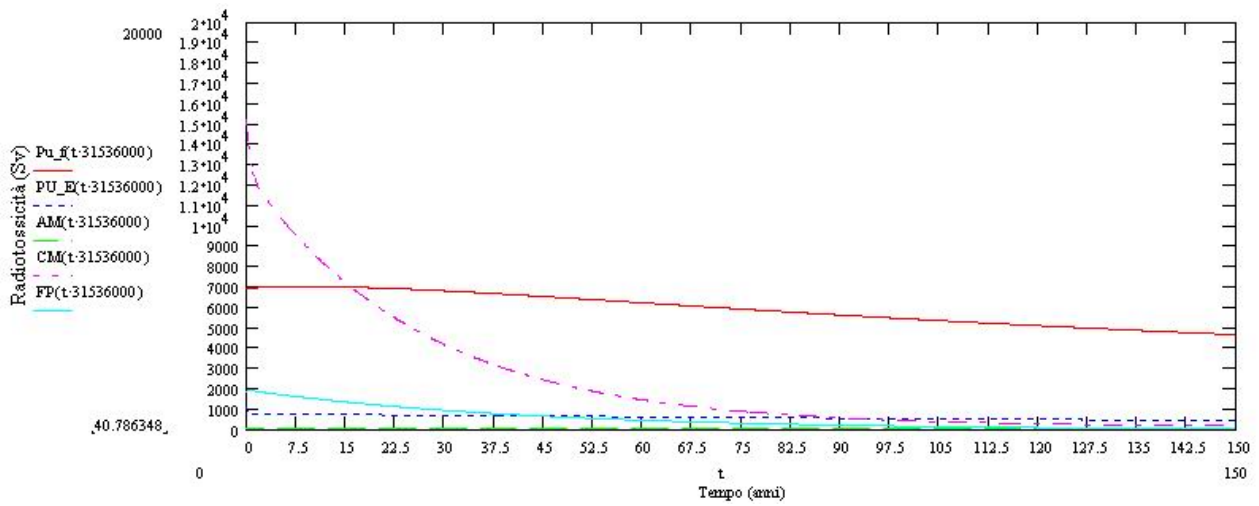


Figura 6.1 – Confronto dei contributi alla radiotossicità del combustibile fresco, gli elementi transuranici ed i prodotti di fissione

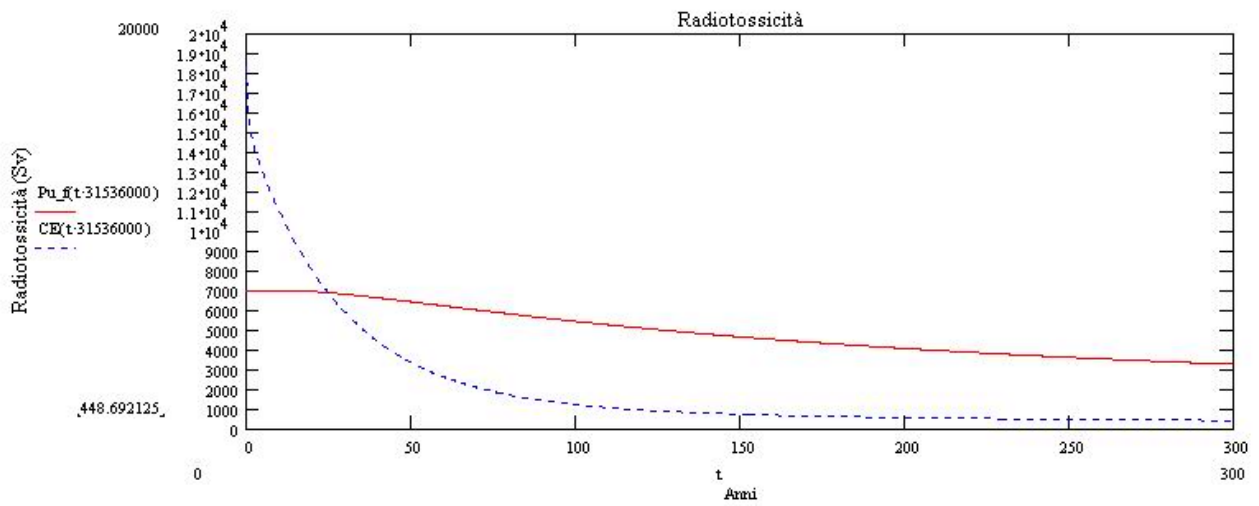


Figura 6.2 – Andamento della radiotossicità nel tempo del combustibile fresco (in rosso) e quello esausto (in blu a tratti)

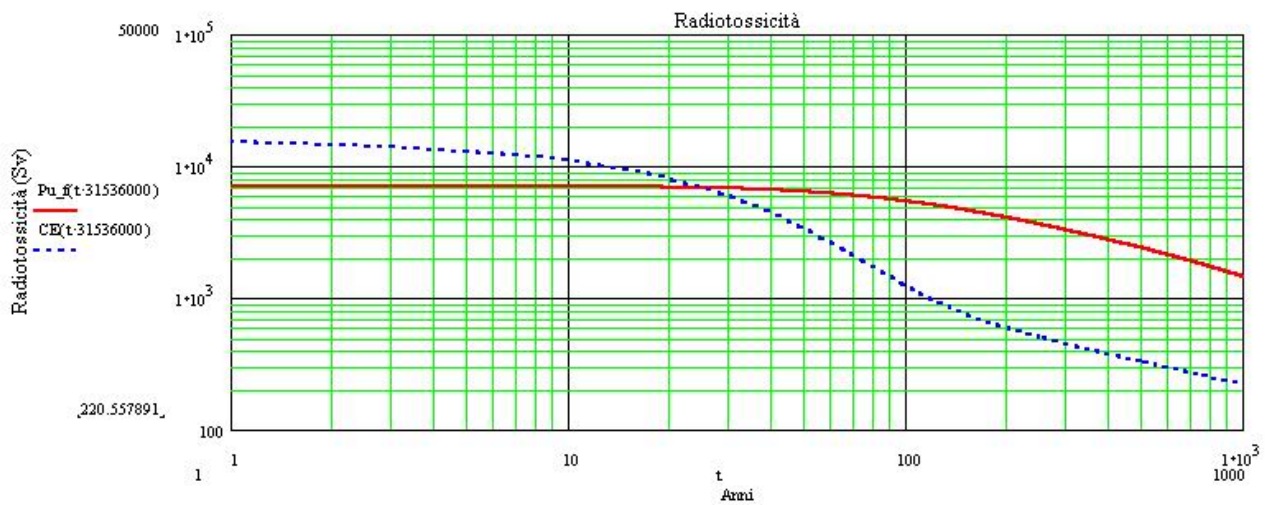


Figura 6.3 – Andamento della radiotossicità nel tempo del combustibile fresco (in rosso) e quello esausto (in blu) nei primi 1000 anni

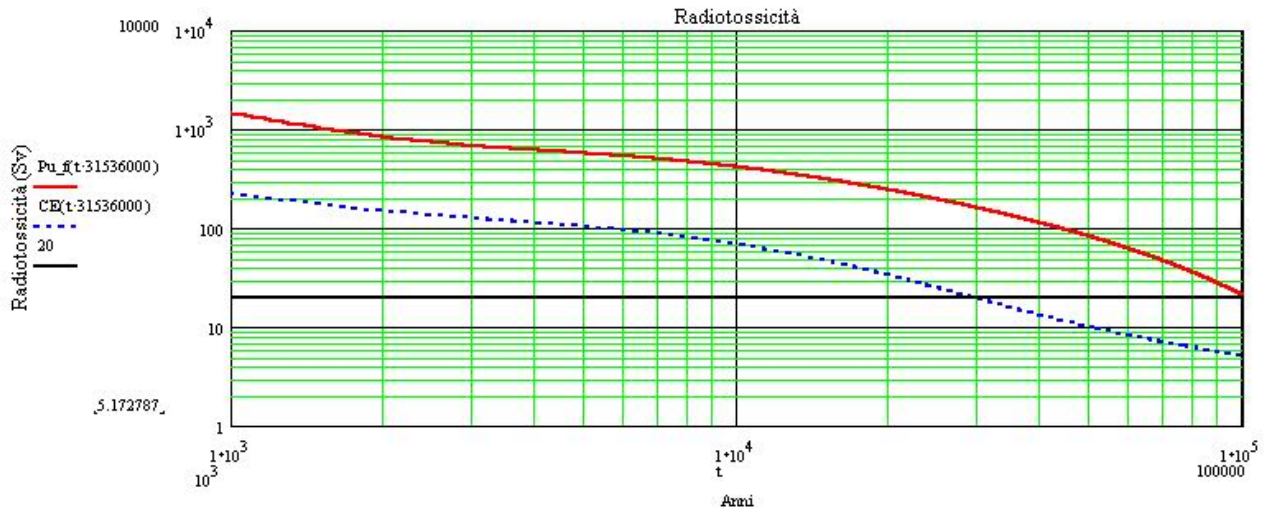


Figura 6.4 – Andamento della radiotossicità nel tempo del combustibile fresco (in rosso) ed esausto (in blu) fra 1000 e 100000 anni

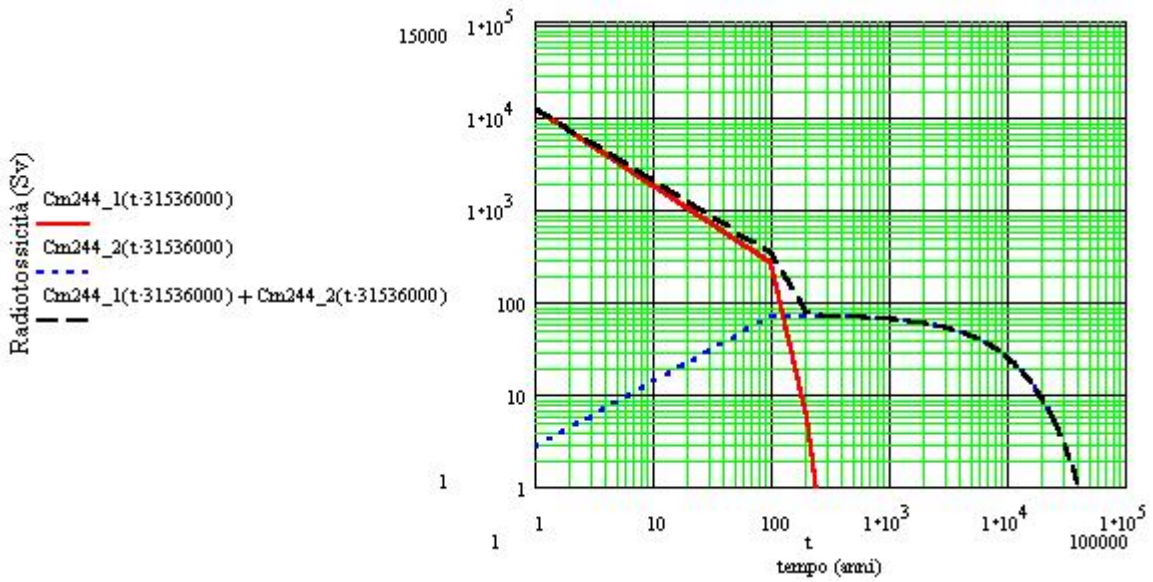


Figura 6.5 – Curve di radiotossicità del  $Cm^{244}$  e prodotto figlio ( $Pu^{240}$  indicato come Cm244\_2) e loro somma