

LUIZ FERNANDO BIANCHI DOS SANTOS

**ESTUDO DOS EFEITOS DO TÓRIO EM
CONFIGURAÇÕES CRÍTICAS ORIENTADO
PARA VERIFICAR OS DADOS NUCLEARES
UTILIZADOS EM SIMULAÇÕES MONTE
CARLO**

Brasil

Santo André, 7 de Maio de 2018

LUIZ FERNANDO BIANCHI DOS SANTOS

**ESTUDO DOS EFEITOS DO TÓRIO EM
CONFIGURAÇÕES CRÍTICAS ORIENTADO PARA
VERIFICAR OS DADOS NUCLEARES UTILIZADOS
EM SIMULAÇÕES MONTE CARLO**

Trabalho de graduação, apresentado para a
conclusão do curso de Graduação em Engenharia de Energia

Universidade Federal do ABC – UFABC

Centro de Engenharia, Modelagem e Ciências Sociais Aplicadas – CECS

Graduação em Engenharia de Energia

Orientador: Prof. Dr. Pedro Carlos Russo Rossi

Brasil

Santo André, 7 de Maio de 2018

ESTUDO DOS EFEITOS DO TÓRIO EM CONFIGURAÇÕES CRÍTICAS ORIENTADO PARA VERIFICAR OS DADOS NUCLEARES UTILIZADOS EM SIMULAÇÕES MONTE CARLO/ LUIZ FERNANDO BIANCHI DOS SANTOS. – Brasil, Santo André, 7 de Maio de 2018-

80 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. Pedro Carlos Russo Rossi

Trabalho de Graduação – Universidade Federal do ABC – UFABC
Centro de Engenharia, Modelagem e Ciências Sociais Aplicadas – CECS
Graduação em Engenharia de Energia.

1. Tório. 2. MCNP. 2.Reatores Nucleares. I. Pedro Carlos Russo Rossi. II. Universidade Federal do ABC. III. Centro de Engenharia e Ciências Sociais Aplicadas.

LUIZ FERNANDO BIANCHI DOS SANTOS

**ESTUDO DOS EFEITOS DO TÓRIO EM
CONFIGURAÇÕES CRÍTICAS ORIENTADO PARA
VERIFICAR OS DADOS NUCLEARES UTILIZADOS
EM SIMULAÇÕES MONTE CARLO**

Trabalho de graduação, apresentado para a
conclusão do curso de Graduação em Enge-
nharia de Energia

Trabalho aprovado. Brasil, 10 de Maio de 2018:

Prof. Dr. Pedro Carlos Russo Rossi
Orientador

Professor
Convidado 1

Professor
Convidado 2

Brasil
Santo André, 7 de Maio de 2018

Este trabalho é dedicado aos meus pais, padrinhos e irmãos, que me apoiaram na longa jornada da graduação e à minha noiva que, muitas vezes, redefiniu o significado de paciência.

Agradecimentos

Os agradecimentos vão para os Professores Doutores da Universidade Federal do ABC Pedro Carlos Russo Rossi e João Manoel Losada Moreira, que viabilizaram com grande esforço a execução deste trabalho. Principalmente o professor Pedro, fornecendo apoio até mesmo em situações de logística complicada.

Além destes, faz juz ao agradecimento o aluno Vinícius Nery de Araújo Miranda, que prestou auxílio nas nuances do código em LaTeX e em diversos momentos durante o desenvolvimento do trabalho.

Sem o ensaio proposto pelo Professor João em seu artigo de 1998 a definição de alguns dos aspectos deste trabalho se tornaria muito mais demorada.

*“Em algum lugar, algo incrível
está esperando para ser descoberto. (Carl Sagan)”*

Resumo

A utilização de combustíveis a base de tório em reatores nucleares é a muito tempo cogitada como alternativa tecnológica para o desenvolvimento de reatores nucleares, porém, incertezas surgem no projeto destes sistemas devido a possíveis inconsistências que podem existir nos dados nucleares. Tendo em vista as largas reservas de Tório localizadas no território brasileiro, torna-se interessante explorar a possibilidade de utilizar este elemento como um componente base nos combustíveis nucleares. Enquanto a possibilidade do uso de tório em reatores já é conhecida, ainda é necessário que seja investido tempo e capital no desenvolvimento da tecnologia. Antes de realizar experimentos com varetas de Óxido de Tório é inteligente que sejam analisados os resultados obtidos em simulações computacionais. O presente trabalho atende esta necessidade propondo duas configurações críticas utilizando varetas contendo Óxido de Tório para o reator IPEN/MB-01. Os resultados deste trabalho poderão ser comparados com resultados de um ensaio real para averiguar a confiabilidade dos dados de secção de choque disponíveis para o Tório.

Palavras-chave: Tório. MCNP. Reatores Nucleares. Reatores de Óxido Misto.

Abstract

The use of Thorium based fuels in nuclear reactors has been seen as an technological alternative to the development of nuclear reactors, however, uncertainties arise in the project of these systems regarding the possibility of problems that might exist in the nuclear data. Because of the large Thorium reserves located in the Brazilian territory, it becomes interesting to explore the possibility of utilizing this element as a base component for nuclear fuels. Even though the possibility to use Thorium in reactors is a well known fact, it is still necessary to invest some time and money in the development of the technology. Before the realization of experiments with Thorium Oxide rods it is smart to analyze the results obtained in computational simulations; the present paper sees through this need by proposing two critical configurations containing Thorium Oxide rods to the IPEN/MB-01 reactor. The results of this work may be compared to a real case scenario to ascertain the reliability of the cross section data available for Thorium.

Keywords:Thorium. MCNP. Nuclear Reactors. Mixed Oxide Reactors.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Esquemático do reator PWR de Angra 3.	25
Figura 2 – Gráfico da distribuição de probabilidade de formação de elementos na fissão do ^{235}U	26
Figura 3 – Secção de choque dos nêutrons gerados na fissão do U-235 em relação à sua energia.	31
Figura 4 – Diagrama de visão lateral do nucleo do reator MB-01.	41
Figura 5 – Diagrama de visão superior do reator MB-01 com detalhe.	42
Figura 6 – Diagrama de visão lateral do nucleo do reator MB-01 com detalhe para as matrizes de furos.	43
Figura 7 – Diagrama de visão lateral de uma vareta combustível do MB-01.	44
Figura 8 – Foto do núcleo do MB-01 durante uma parada da unidade.	45
Figura 9 – Arranjo 2x2 para as varetas de teste.	52
Figura 10 – Arranjo em cruz para as varetas de teste.	52

Lista de tabelas

Tabela 1 – Mnemônicos dos cartões de superfície do código MCNP	35
Tabela 2 – Mnemônicos mais relevantes para os cartões de célula do código MCNP	36
Tabela 3 – Densidades atômicas calculadas	49
Tabela 4 – Frações de isótopos de Tório natural(KAERI, 2018)	50
Tabela 5 – Frações de isótopos de Urânio enriquecido a 5%(KAERI, 2018)	50
Tabela 6 – Frações de isótopos de Oxigênio natural(KAERI, 2018)	50
Tabela 7 – Cálculo das densidades atômicas para varetas com ThO_2 puro	50
Tabela 8 – Cálculo das densidades atômicas para varetas com $(Th - U)O_2$, com 75% de Tório	51
Tabela 9 – Cálculo das densidades atômicas para varetas com $(Th - U)O_2$, com 50% de Tório	51
Tabela 10 – Resultados de k_{ef} para as composições Th-U no arranjo em cruz, confiança de 68%;	57
Tabela 11 – Resultados de k_{ef} para as composições Th-U no arranjo 2x2, confiança de 68%;	57
Tabela 12 – Resultados de k_{ef} para as composições Th-U no arranjo em cruz, confiança de 95%;	57
Tabela 13 – Resultados de k_{ef} para as composições Th-U no arranjo 2x2, confiança de 95%;	57
Tabela 14 – Resultados de k_{ef} para as composições Th-U no arranjo em cruz, confiança de 99%;	58
Tabela 15 – Resultados de k_{ef} para as composições Th-U no arranjo 2x2, confiança de 99%;	58

Lista de abreviaturas e siglas

EPE	Empresa de Pesquisa Energética
IDH	Índice de Desenvolvimento Humano
IPEN	Instituto de Pesquisas Energéticas Nucleares
IPEN/MB-01	Reator nuclear do IPEN, <i>mock-up</i> do submarino nuclear brasileiro
HEU	<i>Highly Enriched Uranium</i> - Urânio Altamente Enriquecido
IAEA	<i>International Atomic Energy Association</i> - Associação Internacional de Energia Nuclear
MCNP	<i>Monte Carlo N-Particle</i> - Monte Carlo Partícula N
LANL	<i>Los Alamos National Lab</i> - Laboratório Nacional de Los Alamos
MCNPX	Código do tipo MCNP de criação do LANL
ENDF	<i>Evaluated Nuclear Data File</i> - Arquivo de Dado Nuclear Avaliado
ASTM	<i>American Society for Testing and Materials</i> - Sociedade Americana para Testes e Materiais
AISI	<i>American Iron and Steel Institute</i> - Instituto Americano de Ferro e Aço

Sumário

	Introdução	23
1	REFERENCIAIS TEÓRICOS	24
1.1	Reatores Nucleares	24
1.2	Combustíveis Nucleares	25
1.3	Dados Nucleares	29
1.3.1	Densidades numéricas	30
1.3.2	Faixas de energia de nêutrons	30
1.4	O método Monte Carlo	31
1.4.1	O código MCNP	34
1.5	Justificativa	39
2	MODELAGEM E APROXIMAÇÕES	40
2.1	O Reator IPEN/MB-01	40
2.1.1	Tanque Moderador	40
2.1.2	Núcleo do Reator	40
2.1.3	Matrizes de Furos	43
2.1.4	Varetas de Combustível	44
2.1.5	Barras de Controle e Segurança	45
2.2	Varetas de Ensaio	47
2.3	Composição das Varetas	49
2.4	Arranjo das Varetas	52
2.5	Aproximações Consideradas	54
2.5.1	Parâmetros de Condições iniciais	54
2.5.2	Parâmetros de Ensaio	55
3	CONCLUSÃO	59
	REFERÊNCIAS	60
	APÊNDICES	63
	APÊNDICE A – CÓDIGO BASE DA SIMULAÇÃO PARA A IPEN/MB-01 EM CONFIGURAÇÃO PADRÃO	64

ANEXOS	73
ANEXO A – CÓDIGO PARA AS VARETAS DE ENSAIO	74
ANEXO B – CÓDIGO PARA OS ARRANJOS DE VARETAS	78
ANEXO C – CARTÕES DE MATERIAIS UTILIZADOS	80

Introdução

Segundo o Anuário Estatístico de Demanda Energética, fornecido pela EPE (Empresa de Pesquisa Energética), a demanda energética do Brasil em 2015 cresceu 10% quando comparada à demanda energética de 2010; o consumo atual per capita, segundo a mesma fonte, aumentou de 2,37kWh/Ano para 2,63kWh/Ano, um aumento de 10,9% em 5 anos(EPE, 2016). Se compararmos estes dados com os de países com maior IDH, perceberemos que o consumo de energia no Brasil ainda está aquém do esperado, é imprescindível considerar este crescimento no planejamento energético de um país com as proporções territoriais do Brasil e nesse contexto a alternativa nuclear se mostra como um forte candidata para atender às demandas futuras com grande grau de confiabilidade.

A expansão parque nuclear nacional ainda é um assunto delicado a ser abordado, principalmente devido a temas como acidentes severos, gerenciamento de rejeitos em toda cadeia de produção e competitividade econômica, entretanto, se observarmos benefícios como disponibilidade, constância de abastecimento e potência por metro quadrado ocupado em conjunto com os malefícios associados às outras alternativas energéticas (JUNK W. J.; MELLO, 1990)(INATOMI T. A. H.; UDAETA, 2005) vemos que o balanço entre riscos e benefícios da energia nuclear é bastante favorável. Protocolos de segurança internacionais tornaram os novos projetos de reatores mais seguros do que os projetos antigos. As tecnologias de estado da arte tornam a alternativa nuclear cada vez mais interessante.

Outro fator estratégico que deve ser observado na avaliação da viabilidade da energia nuclear como parte significativa da matriz energética nacional é a disponibilidade de recursos. O Brasil possui tecnologia proprietária para enriquecimento de urânio e suas reservas naturais deste elemento estão dentro das três maiores do mundo(USGS, 2017), além disto, como será tratado neste trabalho, alguns elementos, com destaque para o Tório podem ser utilizados para gerar energia dentro de reatores nucleares com apenas pequenas alterações em suas configurações.

Se formos capazes de dominar esta tecnologia e superarmos as barreiras, relacionadas intimamente ao preconceito e não a problemas factíveis, a energia nuclear pode permitir uma redução no custo operacional do setor industrial, culminando também em um acesso mais difundido da energia elétrica para toda a população brasileira.

Este trabalho faz parte do início do processo de avaliação dos dados nucleares do Tório, através da proposição de dois arranjos críticos para o reator IPEN/MB-01, estes arranjos foram imaginados com a intenção de simplificar e barratear o processo de teste, utilizando varetas de fabricação simples e considerando o mínimo de varetas de teste possível no núcleo do reator.

1 Referenciais Teóricos

1.1 Reatores Nucleares

Um reator nuclear é uma máquina projetada para permitir indução e manutenção de uma cadeia de reações nucleares sucessivas. Uma reação nuclear é um tipo de reação onde ocorre a transmutação de um elemento em outro com subsequente liberação de grandes quantidades de energia. Pode ser traçado um paralelo entre uma reação nuclear e uma reação de combustão, pois o produto de uma reação nuclear gera o estopím (na forma de nêutrons) para as reações subsequentes nos elementos combustíveis ao redor do inicial, devido a estas semelhanças é comum utilizar os termos “combustível nuclear” para se referir aos elementos consumidos durante a reação nuclear e “queima” para se referir à reação nuclear.

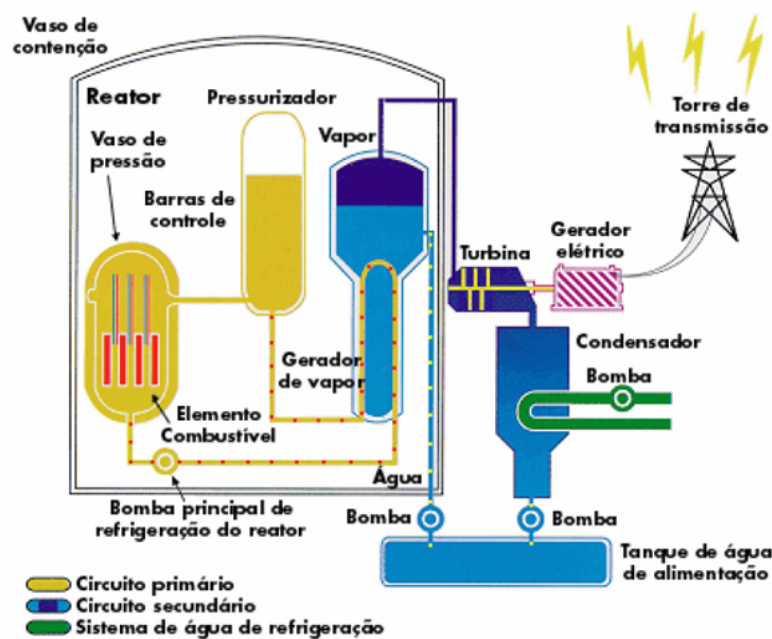
Quando a fissão de um elemento gera novos nêutrons que causam novas fissões diz-se que foi iniciada uma reação em cadeia, este é o princípio de funcionamento de um reator nuclear. As reações em cadeia podem ser estabelecidas em quantidades muito pequenas de material físsil, na situação chamada de massa crítica, entretanto, o consumo do combustível é muito rápido. O projeto do reator tem como objetivo a geração de uma situação de massa crítica em um modelo controlável e por um longo período de tempo. Para que seja feita utilização da energia proveniente das reações nucleares é necessário que seja possível controlar a taxa de reação e os chamados nêutrons lentos tem papel importante nesta função; a grosso modo uma reação nuclear pode gerar nêutrons dentro de um amplo espectro de energia e esta situação gera tempos de resposta que também variam dentro de um espectro. Para abrandar esta variação é comum o emprego de um moderador, como a água ou o grafite, que reduz a energia dos nêutrons de maior energia (nêutrons rápidos) para os patamares dos nêutrons de menor energia (nêutrons lentos), a velocidade reduzida dos nêutrons lentos causa uma situação onde a resposta do reator assume fatores de tempo de ordens que permitem seu controle com segurança (SHULTIS J. K.; FAW, 2002).

Outro fator importante é o controle do calor gerado pelo denominado núcleo do reator, que deve ser removido para ser utilizado para geração de energia em um ciclo termodinâmico, para tal é empregado um refrigerante. O uso da água desmineralizada é comum mas como alguns produtos de fissão podem reagir com este refrigerante, normalmente utiliza-se um encapsulamento metálico ao redor do combustível para impedir o contato (i.e. varetas metálicas recheadas com Óxido de Urânio no IPEN/MB-01).

Em reatores do tipo PWR (*Pressurized Water Reactor*-Reatores de Água Pressuri-

zada), como é o caso dos reatores da Central Nuclear Almirante Álvaro Alberto: Angra 1, Angra 2 e o futuro reator de Angra 3, o calor é removido do núcleo utilizando a água em um sistema primário e, através de um trocador de calor, esta água pressurizada e aquecida troca calor com outra corrente de água à menor pressão, esta segunda corrente, por sua vez, passa por um Ciclo Rankine (ÇENGEL Y. A.; BOLES, 2013); é transformada em vapor superaquecido pela fonte quente e utilizada para movimentar uma turbina que movimenta um gerador elétrico, o vapor na saída da turbina é resfriado até a condensação e uma bomba realiza a reinjeção do fluido resfriado, fechando o ciclo. A utilização de dois sistemas separados isola a água utilizada para resfriar o núcleo do reator do sistema de geração de energia elétrica, este arranjo reduz o desgaste em alguns dos equipamentos mais caros do sistema (turbina e condensador) e garante maior segurança na operação. O sistema que será implementado em Angra 3 pode ser observado na figura 3.

Figura 1 – Esquemático do reator PWR de Angra 3.



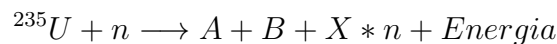
Fonte: <https://www.ipen.br/>, acesso em 07/05/2018 às 20:00.

1.2 Combustíveis Nucleares

As reações de fissão nuclear ocorrem em uma grande quantidade de núclídeos, núclídeos que são passíveis de fissão nuclear em condições específicas são denominados fissionáveis, entretanto apenas alguns são apropriados para uso em reatores nucleares, a estes é atribuído o termo “físseis”. É necessário que a reação de fissão tenha como produto dois ou mais nêutrons, além disto a fissão deve ter alta probabilidade de acontecer quando ocorre a colisão de um nêutron com o núcleo.

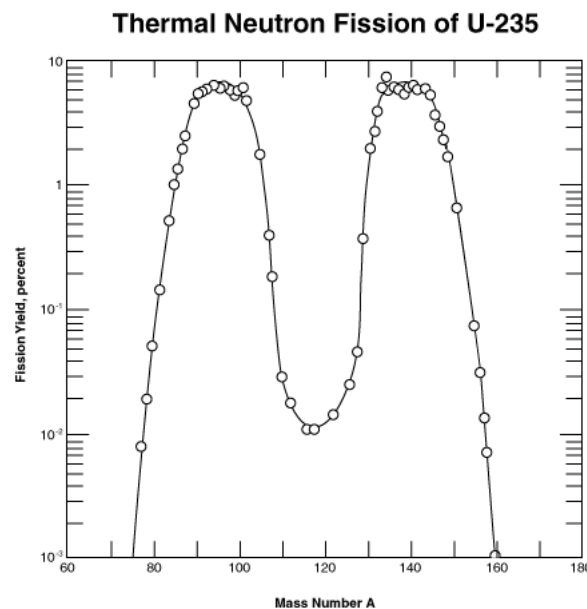
Dentre os núclídeos físeis, destaca-se o Urânio-235, presente no Urânio natural e componente chave do Urânio enriquecido. O Urânio enriquecido é o combustível utilizado na grande maioria dos reatores nucleares em funcionamento no mundo, incluindo os dois reatores em operação no litoral do Rio de Janeiro, Angra 1 e Angra 2. Denomina-se Urânio enriquecido todo Urânio que teve seu teor natural de ^{235}U , que é em torno de 0,7%, aumentado artificialmente, sendo que usualmente os reatores do tipo PWR utilizam combustíveis enriquecidos para teores de 1% a 7% de ^{235}U .

A reação de fissão genérica do ^{235}U está descrita de forma resumida a seguir:



Sendo que X pode ser 2 ou 3, totalizando uma média de aproximadamente 2,4 nêutrons por reação de fissão, os elementos A e B podem ser diversos pois a reação de fissão não ocorre sempre da mesma forma, entretanto, pode ser traçada uma curva da probabilidade da formação dos elementos. O gráfico a seguir mostra uma distribuição da probabilidade de transmutação de um elemento em função de seu número de massa em uma fissão de um núcleo de ^{235}U .

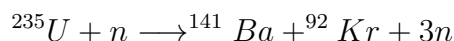
Figura 2 – Gráfico da distribuição de probabilidade de formação de elementos na fissão do ^{235}U .



Fonte: Physics of Uranium and Nuclear Energy(WNA, 2010), acesso em 07/05/2018 às 22:00

Notamos que existem dois picos de probabilidade, um em massas por volta de 95u e outro em massas por volta de 150u, ou seja, normalmente será formado um elemento

mais leve e um elemento mais pesado, sendo que é pouco provável que sejam formados elementos de massas similares. Uma das reações possíveis de fissão do ^{235}U está descrita a seguir:



Como podemos ver, esta reação específica consome um nêutron livre, entretanto libera três nêutrons, ou seja, o saldo é positivo e é possível sustentar a reação em cadeia.

Tendo assegurada a capacidade de sustentar a reação em cadeia e utilizando um arranjo de combustível favorável, surgem as necessidades associadas às outras propriedades neutrônicas do reator, em especial neste trabalho a reação de absorção seguida de captura será especialmente importante pois é o princípio fundamental dos elementos férteis. As propriedades neutrônicas se referem às formas como um nêutron pode interagir com um dado material, em termos gerais, uma colisão pode resultar em uma absorção ou espalhamento sendo que quando ocorre a absorção pode ocorrer fissão ou captura. A propriedade que define a probabilidade de uma dada interação ocorrer quando um nêutron colide com um núcleo é denominada seção de choque e será tratada posteriormente neste trabalho.

Reatores de Óxido Misto

Existe uma grande preocupação em relação ao processo de enriquecimento de Urânio, principalmente em discussões associadas ao uso militar da energia nuclear. A preocupação associada ao uso de combustíveis HEU (*Highly Enriched Uranium* – Urânio Altamente Enriquecido), ou seja, com enriquecimentos de mais de 20% de ^{235}U é justificável e deve ser levada em consideração. Considerando que houvesse uma forma de reduzir a quantidade global de Urânio utilizado no reator sem alteração na produção de energia, esta solução seria muito bem vinda, principalmente aos olhos da comunidade internacional.

Reatores de óxido misto são reatores nucleares capazes de queimar combustíveis compostos parcialmente de elementos chamados férteis, ou seja, que se tornam passíveis de fissão atômica quando ocorre a transmutação através da captura de um nêutron pelo átomo. O balanço entre elementos naturalmente físséis, como o ^{235}U , e elementos férteis é calculado no combustível para que seja alcançada a criticidade e gerada energia com um consumo menor de Urânio.

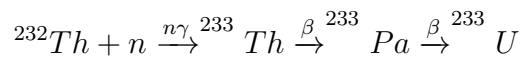
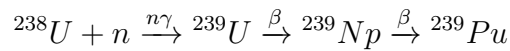
Dentre os elementos férteis, destaca-se no Brasil principalmente o Tório, devido às robustas reservas disponíveis, segundo dados da Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA), em 2005 as reservas de Tório no Brasil estavam estimadas em 606.000 mil toneladas, enquanto as reservas de Urânio estavam estimadas em 155.000 toneladas(WNA, 2010), se considerarmos que o Tório pode ser utilizado como combustível em reatores

nucleares, é possível que o Brasil se mantenha autossuficiente em produção de combustível nuclear com facilidade, além disso, o período pelo qual a autossuficiência se sustenta é aumentado drasticamente, a confiabilidade associada a uma produção que não depende de flutuações no mercado externo é uma vantagem que não pode ser mensurada.

O uso de Tório e Plutônio como elementos férteis, na composição de combustíveis nucleares já é considerado desde o início do desenvolvimento da área nuclear, entretanto a predominância do ciclo de apenas um uso em reatores PWR, visando a viabilidade econômica como maior fator diretor no desenvolvimento dos projetos afastou de discussão este tópico, existem diversas vantagens (em especial, no espectro ambiental) nos ciclos de Th-U, Pu-U e Th-Pu como é evidenciado por MOREIRA.

Uma das maiores vantagens da utilização de combustíveis de óxido misto Th-U é o fato de que a produção de elementos transplutônicos é de até três ordens de magnitude menor. Isto significa que ocorre uma menor produção de resíduos, que por sua vez significaria uma menor necessidade de incineração (MOREIRA, 1998).

O núcleo de ^{232}Th , assim como o núcleo de ^{238}U , não é físsil, entretanto quando ocorre a captura de um nêutron, o ^{232}Th se transmuta para ^{233}U , que é um núcleo físsil, através de dois decaimentos do tipo β . As reações de transmutação do ^{232}Th e do ^{238}U podem ser vistas à seguir .



O núcleo de ^{232}Th é 6 unidades de massa mais leve do que o núcleo de ^{238}U , por isso são necessárias mais capturas sucessivas para produzir actínídeos menores, como o Amerício (^{241}Am) e o Cúrio (^{247}Cm), elementos que dificultam o processo de reciclagem do combustível nuclear. Concluimos então que o uso de Tório como parte do combustível é benéfico no que diz respeito a reduzir a produção de Plutônio, Amerício, Cúrio e outros actínídeos. É possível verificar utilizando simulações, conforme observado por NIFENECKER, MEPLAN e DAVID, que as doses de radiação associadas à resíduos de combustíveis de reatores PWR à Urânio por GWh gerado são de até três ordens de grandeza maiores no curto prazo ($t < 100$ anos) e de até 4 ordens de grandeza no longo prazo ($t > 10.000$ anos). Isto considerando o cenário de apenas um uso do combustível, se considerarmos um ciclo de combustível Th-U, devemos também considerar que a maioria dos isótopos que são fonte da dosagem de radiação são gerados no núcleo, e portanto são, em grande parte, consumidos durante o reprocessamento (NIFENECKER, 2003).

Entretanto é necessário também entender que o consumo de nêutrons do reator será maior, observando de outra forma, haverão menos nêutrons disponíveis no reator ao

longo do tempo e essa regeneração deve ser um fator determinante quando o combustível é dimensionado. Em seu livro, NIFENECKER, MEPLAN e DAVID descrevem este problema da seguinte forma: a reação de fissão do ^{232}Th exige primeiro a transmutação para ^{233}U , que por sua vez exige a captura de um nêutron, além disso ainda é necessário computar um número de nêutrons que podem ser capturados após a criação do elemento físsil (α), ou seja, cada elemento físsil necessita de $1 + \alpha$ nêutrons e a criação de um novo elemento físsil necessita de outros $1 + \alpha$ nêutrons, ou seja, para produção de uma fissão, são necessários $2(1 + \alpha)$ nêutrons. Adicionado a isso ainda existe a possibilidade de fuga (L), de forma que o fator de multiplicação k é uma função do número de nêutrons médio disponível por fissão (v) e será dado por:

$$k = \frac{v}{2(1 + \alpha) + L + N_a}, \quad (1.1)$$

onde:

$$\alpha = \frac{\sigma_c}{\sigma_f}; \quad (1.2)$$

σ_c é a secção de choque de captura, σ_f é a secção de choque de fissão e N_a é o número médio de nêutrons gerados por fissão (NIFENECKER, 2003, pag. 217), observando este modelo simplificado, verifica-se que o fator de multiplicação depende da probabilidade de fuga, e da relação entre as probabilidades de captura e fissão do elemento. Lembrando também que estas energias variam se estivermos trabalhando no espectro térmico ou no espectro rápido.

1.3 Dados Nucleares

Os dados nucleares descrevem as relações que os nêutrons tem com os elementos presentes nos núcleos, de forma a determinar quais tipos de reações nucleares ocorrerão, a frequência de ocorrência e, além disso, o resultado das interações. Estas informações são de suma importância no dimensionamento de reatores e dos seus combustíveis, além de serem utilizadas em previsões e, obviamente, simulações. No centro do espectro de importância dos dados nucleares estão as informações de secção de choque, em termos mais simples, a área-alvo de um determinado nuclídeo em relação à um nêutron incidente. Este número não é apenas um dado dimensional, é uma aproximação matemática. A secção de choque depende, dentre outros fatores, da energia cinética do nêutron.

Conforme pode ser observado em SHULTIS e FAW a secção de choque macroscópica é definida como sendo o produto da secção de choque microscópica pela densidade numérica de nucleos em um determinado meio, outra forma de observar é imaginando a

mecânica probabilística, onde a secção de choque macroscópica é o inverso do caminho livre médio (SHULTIS J. K.; FAW, 2002).

$$\Sigma = N\sigma, \quad (1.3)$$

$$\lambda = \frac{1}{\Sigma}. \quad (1.4)$$

1.3.1 Densidades numéricas

A densidade numérica, juntamente com as secções de choque, é um dos fatores mais importantes na simulação de reatores nucleares. Seu calculo é feito através da densidade teórica ou experimental de um material (ρ), das massas molares (A) de cada um dos componentes desse material, da constante de avogadro (N_0) segundo a seguinte relação:

$$N = \frac{\rho N_0}{A}, \quad (1.5)$$

Ou seja:

$$\Sigma = \frac{\rho N_0 \sigma}{A}, \quad (1.6)$$

É importante frisar que, em compostos multiatômicos, como é o caso da maioria esmagadora dos combustíveis nucleares, a densidade atômica é calculada considerando todos os átomos da molécula.

1.3.2 Faixas de energia de nêutrons

Como ja foi citado, outro fator importante para a definição das secções de choque é a faixa de energia cinética do nêutron incidente, definimos as secções de choque macroscópica como funções de E , ou seja $\sigma \rightarrow \sigma(E)$ e $\Sigma \rightarrow \Sigma(E)$. Conforme observado também em SHULTIS E FAW, experimentalmente existem três faixas de energia com as quais os nêutrons podem ser produzidos após uma fissão (SHULTIS J. K.; FAW, 2002):

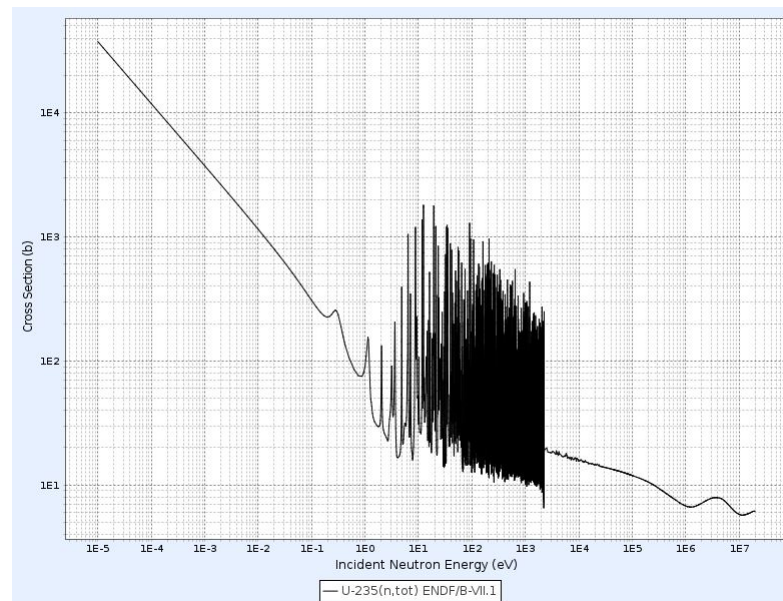
- Energias altas, que variam de 0,1 MeV até 10 MeV (nêutrons rápidos), nessa faixa a energia é alta o suficiente para que as propriedades vibracionais do meio não interfiram substancialmente no espalhamento dos nêutrons, a taxa de reação causada por estes nêutrons é alta devido às suas altas velocidades.
- Energias baixas, que variam de 0,001eV até 1,0 eV (ou nêutrons térmicos), nessa faixa, a energia é baixa, de forma que a vibração dos átomos que compõe o meio de propagação interfere no espalhamento dos nêutrons, para reatores PWR estes

nêutrons são especialmente importantes pois suas velocidades baixas permitem que o sistema tenha constantes de tempo de faixas mais controláveis.

- Energias intermediárias, que vão de 1,0 eV até 1,0 MeV.

A distribuição de número de átomos gerados em fissões em relação à energia cinética dos mesmos pode ser observada no gráfico a seguir:

Figura 3 – Secção de choque dos nêutrons gerados na fissão do U-235 em relação à sua energia.



Fonte: <http://atom.kaeri.re.kr/nuchart/>, acesso em 07/05/2018 às 21:30

1.4 O método Monte Carlo

Dentre os métodos utilizados para simulações na atualidade, o que mais se destaca é, sem dúvida, o método de Monte Carlo. O método consiste de um modelo estocástico construído de forma que o valor esperado de uma determinada variável aleatória seja equivalente a uma certa quantidade física a ser determinada. Tal valor esperado é determinado por uma gama de amostras independentes selecionadas por intermédio de uma variável aleatória obtida por intermédio de números pseudoaleatórios associados a uma distribuição específica que representa o fenômeno em questão (SPANIER J.; GELBARD, 2008) (ROSSI, 2011). No método de Monte Carlo devemos seguir a partícula desde seu nascimento (a fonte) até sua morte (absorção ou escape). A distribuição de probabilidades é amostrada aleatoriamente usando os dados nucleares de transporte (CHADWICK, 2006) para determinar o resultado da interação cada etapa de vida da partícula. Técnicas

específicas devem ser implementadas para problemas críticos, onde o comprimento da cadeia de nêutrons pode alcançar o infinito. Dentre os códigos recentemente desenvolvidos para a simulação da física de reatores se encontra o código MCNP([PRIMER...](#)), que é um sistema de simulação de física de reatores via método de Monte Carlo desenvolvido pelo LANL.

A aplicação do código se dá através do software MCNPX. A mecânica é feita por amostragem pseudorrandômica, onde são gerados parâmetros aleatórios a partir de uma situação inicial. Para que seja realizada a simulação, são realizados os seguintes questionamentos para cada ciclo de simulação dada um estado inicial:

- Se o nêutron reage com o meio;
- Caso haja reação, com quais núclídeos;
- Caso haja reação, quais tipos de reação são possíveis;
- Para cada reação ocorrida, quais partículas são emitidas.

A probabilidade de reação ou não do nêutron com o meio está relacionada a sua seção de choque macroscópica da partícula no meio tratado (Σ_t). De forma geral, a partir de um ponto inicial l , dado um diferencial qualquer de distância dl percorrido em um determinado meio, a probabilidade do nêutron sofrer uma colisão é de:

$$p(l)dl = \exp(-\Sigma_t l) \Sigma_t dl \quad (1.7)$$

A partir desta relação, considerando um número aleatório ξ distribuído no intervalo $(0, 1]$, integrando a equação (1), teremos:

$$\xi = \int_0^1 p(l') dl' = 1 - \exp(-\Sigma_t l) \quad (1.8)$$

Onde pode ser concluído que l é a distância mínima até a posição da colisão mais próxima. Dada a posição inicial da partícula, através dos parâmetros fornecidos utilizando uma amostragem específica, pode ser calculada a distância até a fronteira da célula mais próxima. Se a distância l é maior do que a distância entre a partícula e a fronteira mais próxima, então a partícula é movida para a fronteira, caso contrário considera-se que a colisão ocorre na posição l . Existem dois tratamentos possíveis para os nêutrons gerados em reações nucleares, o tratamento dado é definido a partir da energia do nêutron. Em condições de baixa energia (nos denominados nêutrons lentos) e em casos como a água ou o grafite, os efeitos de rede cristalina se tornam mais importantes e estes efeitos são adicionados à equação através das funções de transferência $S(\alpha, \beta)$, onde α é o momento

transferido e β a energia transferida corrigida. As funções de transferência são tabeladas e disponíveis em bibliotecas de arquivos ENDFB. Em casos de alta energia, ou em modelos onde o meio é um gás livre o tratamento é o mesmo, considera-se que a secção de choque à temperatura zero é independente da temperatura do nêutron incidente e a secção de choque da reação independente da temperatura do meio.

$$\sigma(T) = \sigma(0)\left(1 + \frac{kTAE_n}{2}\right) \quad (1.9)$$

Onde A é o peso atômico do sítio de colisão e E_n é a energia do nêutron (a expressão utilizada é válida enquanto $\sqrt{\frac{AE_n}{kT}} > 2$, em outros casos é utilizado uma relação mais geral). A colisão é modelada considerando o alvo como estacionário, sendo que a velocidade do nêutron em relação ao alvo é determinada através da distribuição de Maxwell.

O nuclídeo com o qual ocorre a reação é determinado através da secção de choque macroscópica, de forma que é sabido que a somatória da probabilidade de reação de todos os nuclídeos que compõe o meio é igual a 1, sendo assim é gerado um número aleatório $\eta \in (0, 1]$. As probabilidades de cada um dos nuclídeos são somadas em uma determinada ordem, o nuclídeo n será selecionado se η estiver contido no intervalo demarcado pela probabilidade deste nuclídeo. A reação que ocorre após a colisão é determinada através da secção de choque microscópica de cada uma das reações segundo a biblioteca do programa, onde a probabilidade de uma reação i ocorrer depende da secção de choque total de reação (σ_t) e é dada por; $P(i) = \frac{\sigma_i}{\sigma_t}$. A mecânica da simulação que seleciona qual reação ocorre é exatamente a mesma mecânica que seleciona com qual nuclídeo o nêutron colidirá, a mudança é que consideramos as probabilidades associadas a cada uma das secções de choque dos nuclídeos, sendo que a somatória de todas as secções de choque microscópicas é a secção de choque microscópica total. As partículas produto das reações nucleares são lançadas com direções e energias definidas aleatoriamente, em termos gerais, considera-se que a probabilidade de espalhamento em todas as direções é dada por:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi P(\delta, \theta) d\delta d\theta = 1 \quad (1.10)$$

O processo que decide em qual direção ocorrerá o espalhamento se dá de forma mais complexa, porém, similar a seleção do nuclídeo com o qual o nêutron interage, as probabilidades relacionadas a cada ângulo são determinadas através das tabelas de distribuições angulares, presentes nas bibliotecas do programa. Após finalizada a reação nuclear, é retomado o processo iterativo a partir do passo de determinação de l . O método realiza o cálculo para quantos ciclos de reação são determinados no parâmetro fonte de fissão (kcode).

1.4.1 O código MCNP

O programa lê um arquivo denominado input, selecionado antes do início da simulação, o código deve ser estruturado sempre da mesma forma, sendo que o mesmo é dividido em três segmentos, denominados cartões([PRIMER...](#)).

- Cartões de Superfície: Definem espaços geométricos que posteriormente serão utilizados para conformar as células.
- Cartões de Célula: Os componentes do reator simulado (barras de combustível, moderador etc) são definidos através dos cartões de célula, cada célula é definida a partir do vetor diretor de um ou mais espaços definidos pelos cartões de superfície.
- Cartões de Dados: Existem três tipos de Cartões de Dados, os do cartões do tipo fonte (ksrc), os cartões do tipo código (kcode) e os cartões de materiais. Os cartões do tipo fonte definem os nêutrons que existem no reator no início da simulação, os cartões do tipo código especificam como o programa fará a simulação, já os cartões de materiais especificam a biblioteca da qual serão obtidas as informações dos materiais, além da composição específica de cada um dos materiais em caso de ligas metálicas.

Cartões de superfície

Os Cartões de Superfície são representados por um número identificador único, um mnemônico tabelado e uma série de parâmetros que diferem quantitativamente e qualitativamente para cada mnemônico, a tabela completa dos mnemônicos se encontra a seguir.

Tabela 1 – Mnemônicos dos cartões de superfície do código MCNP

Mnemônico	Equação	Entradas
P	$Ax + By + Cz - D = 0$	A, B, C, D
PX	$x - D = 0$	D
PY	$y - D = 0$	D
PZ	$z - D = 0$	D
SO	$x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
S	$(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	x, y, z, R
SX	$(x - \bar{x})^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	x, R
SY	$x^2 + (y - \bar{y})^2 + z^2 - R^2 = 0$	y, R
SZ	$x^2 + y^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	z, R
C/X	$(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	y, z, R
C/Y	$(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	x, z, R
C/Z	$(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2 - R^2 = 0$	x, y, R
CX	$y^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
CY	$x^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
CZ	$x^2 + y^2 - R^2 = 0$	R
K/X	$\sqrt{(y - \bar{y})^2 + (x - \bar{x})^2} - t(x - \bar{x}) = 0$	$x, y, z, t^2 \pm 1$
K/Y	$\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2} - t(y - \bar{y}) = 0$	$x, y, z, t^2 \pm 1$
K/Z	$\sqrt{(y - \bar{y})^2 + (x - \bar{x})^2} - t(z - \bar{z}) = 0$	$x, y, z, t^2 \pm 1$
KX	$\sqrt{y^2 + z^2} - t(x - \bar{x}) = 0$	$x, t^2 \pm 1$
KY	$\sqrt{x^2 + z^2} - t(y - \bar{y}) = 0$	$y, t^2 \pm 1$

Fonte: MCNP Manual

Os elementos gerados através do cartão de superfície são os espaços matemáticos representados por suas funções, cada cartão de superfície representa uma figura num espaço a partir de um referencial e estas figuras simples são utilizadas para construir figuras mais complexas. Cada superfície representa uma superfície de algum componente do alvo da simulação (no caso, de um reator), sendo que uma mesma superfície pode ser utilizada como base para dois ou mais Cartões de Célula (no caso de intersecções) como será explicado na etapa seguinte. A forma que utilizamos para combinar os cartões de superfície em figuras complexas são os cartões de célula.

Cartões de célula

Um cartão de célula é composto por cinco partes principais: um número identificador geral, um número identificador de material (que é relacionado com o cartão de material), um identificador de densidade que pode ser atômica ou mássica, os parâmetros que definem os limites da célula e o parâmetro imp:n.

- **Identificador de Material:** É um número natural compartilhado com o material do qual é composta a célula descrita;
- **Identificador de Densidade:** É um número real que, se positivo, indica a densidade atômica do material que compõe a célula descrita e, se negativo, indica a densidade mássica do material.
- **Parametros de Limite de Célula:** São um conjunto de números inteiros que definem o limite da célula através de relações que são equivalentes às de um Diagrama de Venn tridimensional, cada número se associa a um cartão de superfície e o sinal associado ao número indica se a zona tratada está a favor ou contra o vetor diretor da superfície identificada pelo número.
- **Parâmetro imp:n:** É um número binário que define se a célula criada faz parte ou não dos limites da simulação, ou seja, se os nêutrons que por ventura cruzarem o limite da célula devem ser simulados posteriormente ou se devem ser considerados perdidos, sendo que quando o parâmetro é regulado em 0 a célula é considerada fora dos limites da simulação e quando o parâmetro é regulado em 1 a célula é considerada dentro dos limites da simulação.

Os mnemônicos utilizados neste trabalho para relacionar os cartões de superfície e gerar os cartões de célula estão descritos na tabela a seguir:

Tabela 2 – Mnemônicos mais relevantes para os cartões de célula do código MCNP

Mnemônico	Significado
Espaço simples	União de duas superfícies
:	Intersecção de cartões de superfície
u=n	Cria um objeto que pode ser copiado e manipulado ($n \in \mathbb{N}$)

Fonte: MCNP Manual

A principal ferramenta do software utilizada neste trabalho para modelar o reator nuclear é a ferramenta latt, que é utilizada para repetir estruturas com alteração da referência central, utiliza-se esta ferramenta para modelar os conjuntos de barras de controle, de tubos-guia e de varetas de combustível.

Cartões de materiais

Os cartões de materiais especificam, como o proprio nome implica, os materiais dos quais são feitas as diferentes células apresentadas nos cartões de células, o código do cartão de material vinculado a um material específico é composto de três partes importantes: o identificador sequencial atrelado à letra m, o identificador do componente que é composto pelo número atômico associado ao número de massa e à biblioteca do MCNPX, da qual serão extraídas as informações de secção de choque e finalmente a fração normal do composto observado. Não há limites para complexidade na composição de um determinado material, sendo que a regra é sempre que o identificador é apresentado antes da fração normal para cada um dos componentes. A estrutura de um cartão de material simples, para plutônio natural pode ser observada a seguir:

```
C Materials Cards
m1  94239.66c 3.7047e-2
    94240.66c 1.751e-3
    94241.66c 1.17e-4
    31000.66c 1.375e-3
```

Há também a possibilidade de considerar as alterações na secção de choque dos elementos quando ocorrem interações específicas, por exemplo quando os mesmos estão em contato com água, através da utilização do comando lwtr.01t, que é aplicado ao cartão de materiais com o mesmo numero natural utilizado após o ponto no comando.

Cartões de Controle

O Método Monte Carlo se fundamenta na geração de números aleatórios baseados em uma condição inicial dado um número de ciclos de iteração, no código MNCP este conjunto de parâmetros é fornecido através dos cartões de controle.

O trecho kcode do cartão de controle especifica parâmetros de ensaio, como por exemplo após quantos ciclos de simulação será iniciada a coleta de dados e por quantos ciclos de simulação será feita a coleta após o início, isto se torna especialmente importante quando temos ensaios onde é necessário estudar condições desenvolvidas como gasto de combustível ou criticidade, estas condições não são observáveis quando a simulação está em seus instantes iniciais. São 4 Algarismos equenciais, o primeiro (nsrck) define o número de nêutrons que serão simulados por ciclo de simulação, o segundo (rkk) define o k_{ef} do instante inicial da simulação, o terceiro (ikz) define o número de ciclos de simulação antes

do início da aquisição de dados e o quarto (kct) define o número de ciclos de simulação que serão conduzidos.

O trecho ksrc define as condições iniciais dos nêutrons dentro do reator, no instante $t=0$ a distribuição de nêutrons é exatamente a explicitada neste trecho. Existem muitas opções para a seleção da condição inicial ideal para cada simulação, o programa apresenta opções que vão desde nêutrons pontuais com três coordenadas de posição inicial até distribuições heterogêneas que seguem padrões equacionados (como é o caso da fonte utilizada no experimento deste trabalho). Para n nêutrons são dadas as três coordenadas iniciais em sequência separadas por um espaço nêutron: $x_{n1} \ y_{n1} \ z_{n1} \ x_{n2} \ y_{n2} \ z_{n2} \ \dots \ x_{nn} \ y_{nn} \ z_{nn}$.

O cartão de controle a seguir preve um ponto de partida com um nêutron na origem, são simulados 5000 nêutrons por iteração do código com k_{ef} inicial de 1,0. Serão realizados 50 ciclos antes do início da coleta de dados, que por sua vez será feita durante 250 ciclos.

```
C Criticality Control Cards
kcode 5000 1.0 50 250
ksrc 0 0 0
```


1.5 Justificativa

Na intenção de viabilizar futuros experimentos relacionados a o uso de ciclos de combustíveis Th-U, é necessário descobrir se os dados nucleares básicos do nuclídeo tório estão suficientemente satisfatórios do ponto de vista de projeto de reatores nucleares.

O projeto busca responder esta pergunta através da proposição de um arranjo crítico de um núcleo contendo óxido de tório para o reator IPEN/MB-01. Tal núcleo pode servir de base para futuras comparações intencionadas a verificar e validar os dados nucleares básicos do tório.

2 Modelagem e Aproximações

2.1 O Reator IPEN/MB-01

O reator nuclear IPEN/MB-01(SANTOS, 2014) consiste de um reator nuclear dedicado a pesquisa básica e aplicada em física de reatores e áreas correlatas, sua potência nominal é limitada a 100 Watts e por isso é chamado de um reator de potência “zero”. O sistema nuclear é constituído por um núcleo contendo material físsil distribuído em um arranjo regular de forma a possibilitar a manutenção da reação em cadeia. Sua principal aplicação é a comprovação das metodologias utilizadas para a área de física de reatores para projetos e experimentos. Construtivamente, seu primeiro e atual núcleo, está contido em um barril de aço inoxidável, e em sua forma padrão é composto por 680 varetas de elementos combustível, cada uma das quais constituídas de pastilhas de dióxido de Urânio enriquecido a 4,3 % em Urânio 235 somados a 48 barras absorvedoras responsáveis pelo controle e segurança do reator. O objetivo principal da instalação prima pela avaliação em escala real de parâmetros nucleares, e atualmente é considerada padrão de referência internacional via participação em “benchmarks”(NEA, 2015)(INL, 2015) internacionais dedicados ao tema.

2.1.1 Tanque Moderador

O tanque moderador do MB-01 é, como já foi mencionado, um cilindro de aço inoxidável que possui uma abertura superior, sua medida de diâmetro externo é de 1830mm, sua largura é de 2750mm e o mesmo é feito de aço com 8,5mm de espessura, o aço inoxidável utilizado é o ASTM SS-304. Como padrão de operação, o nível de água permanece sempre 450mm acima da região ativa do núcleo, onde ocorre a queima de combustível.

A distância da região ativa do núcleo para as bordas do cilindro de aço é de, no ponto mínimo, 600mm e a profundidade de água abaixo da região ativa é de 530mm.

2.1.2 Núcleo do Reator

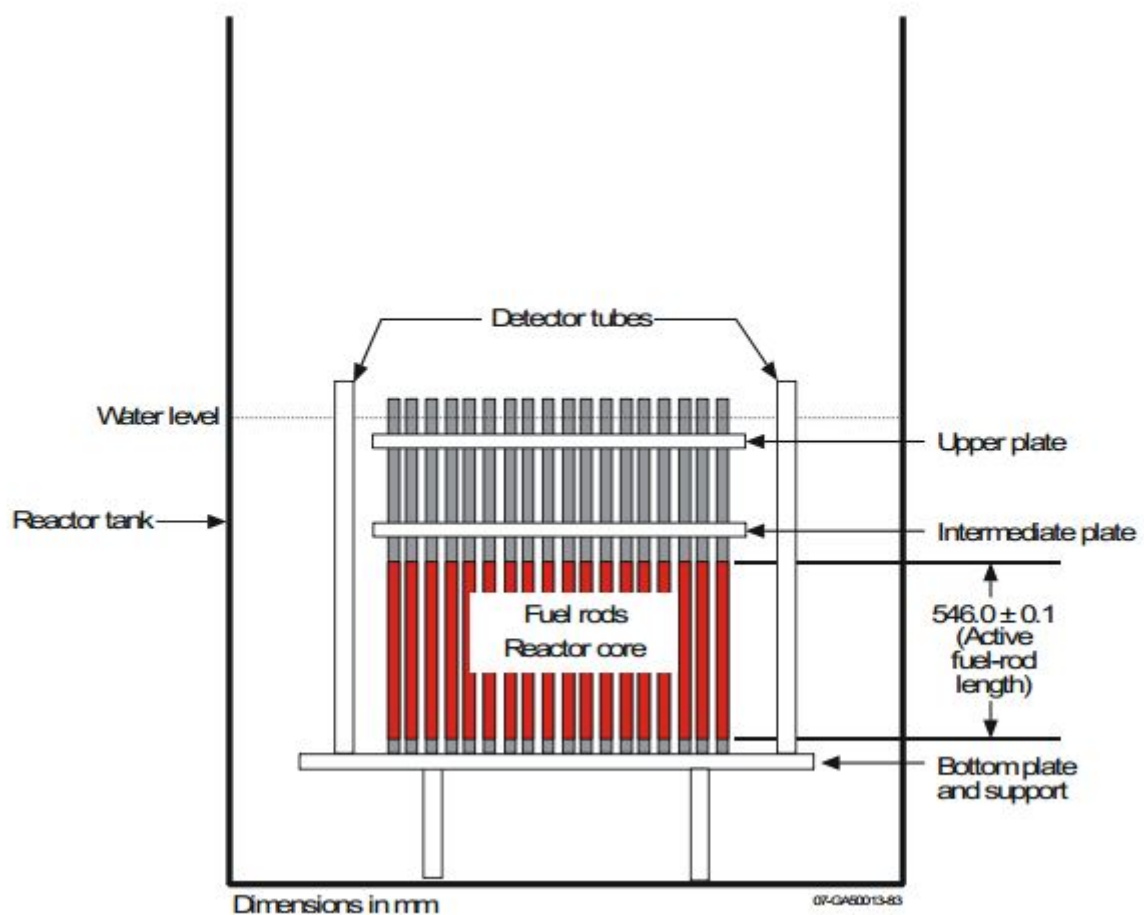
O núcleo do reator é composto por um arranjo de até 30 por 30 varetas idênticas dimensionalmente, mas é mais comumente utilizado no arranjo 26x28, alocadas em uma matriz (composta de três placas perfuradas), resultando no formato de um paralelepípedo de dimensões 390mm por 420mm por 546mm, estas varetas são divididas em:

- 24 Barras de Controle
- 24 Barras de Segurança

- 680 Varetas de Combustível

A figura 4 apresenta o arranjo contendo o tanque moderador e o núcleo do reator em visão lateral, o experimento conduzido considerou este arranjo padrão para as varetas, os ajustes foram feitos apenas na composição da parte ativa das mesmas.

Figura 4 – Diagrama de visão lateral do nucleo do reator MB-01.

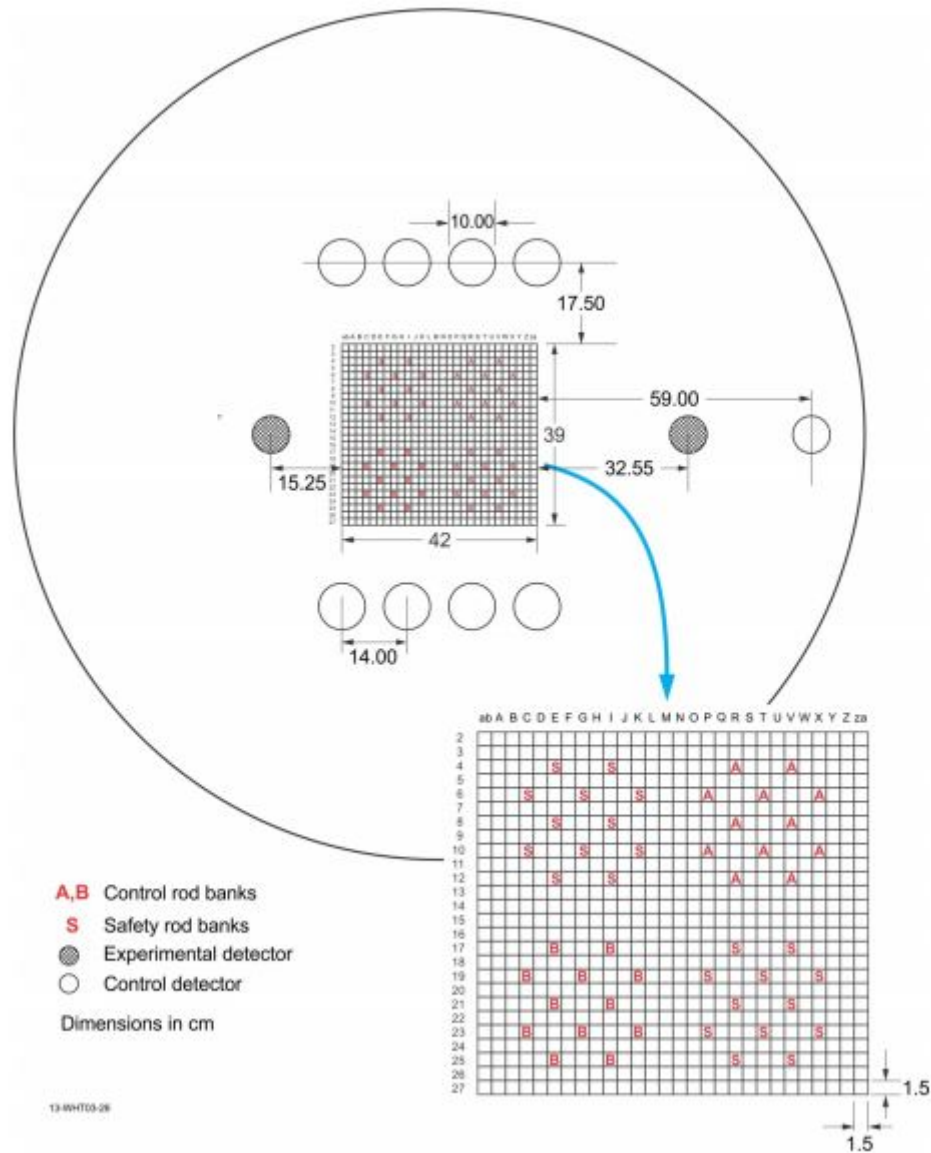


Fonte: CRITICAL LOADING CONFIGURATIONS OF THE IPEN/MB-01 REACTOR WITH HEAVY REFLECTORS COMPOSED OF CARBON STEEL AND NICKEL (IPEN, 2013)

Na visão superior apresentada na figura 5 podemos ver a localização de cada um dos 728 cilindros, as barras de controle, apresentando a letra C, são utilizadas para controle da criticidade do reator a curto prazo, usualmente são operadas por um sistema de controle avançado, as barras apresentando a letra S são utilizadas em caso de emergência, onde a criticidade do reator precisa ser reduzida com grande velocidade para evitar vazamentos ou outros problemas, este sistema é operado por outro controle avançado mas pode ser acionado pela operação do reator em caso de falha do controle. O ajuste fino na criticidade

do reator é feito através da dosagem de um sal de Boro na água que modera o sistema, minimizando a atuação das barras de controle.

Figura 5 – Diagrama de visão superior do reator MB-01 com detalhe.



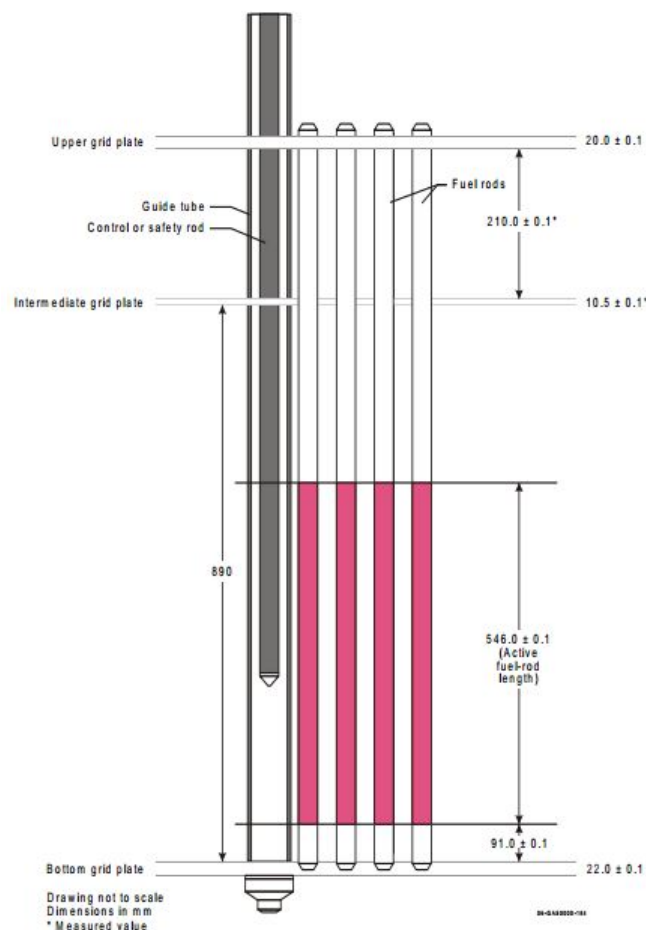
Fonte: CRITICAL LOADING CONFIGURATIONS OF THE IPEN/MB-01 REACTOR WITH HEAVY REFLECTORS COMPOSED OF CARBON STEEL AND NICKEL(IPEN, 2013)

2.1.3 Matrizes de Furos

A matriz onde são alocadas as varetas e as barras de controle (para garantia de alinhamento correto) é composta de três placas de aço perfuradas, a placa superior tem espessura de 20mm com furos passantes para todas as barras de controle e varetas combustíveis, a placa intermediária fica a 210mm da base da placa superior e tem 10,5mm, os furos tem a mesma distribuição da placa superior, a placa inferior fica a 890mm da base da placa intermediária e não possui furos passantes, apenas cavidades de 12mm de profundidade onde se alojam as pontas de todas as varetas e barras, a placa inferior tem 22mm de espessura.

A figura 6 apresenta o arranjo das placas da matriz conforme apresentado, assim como a incerteza para cada uma das grandezas.

Figura 6 – Diagrama de visão lateral do núcleo do reator MB-01 com detalhe para as matrizes de furos.

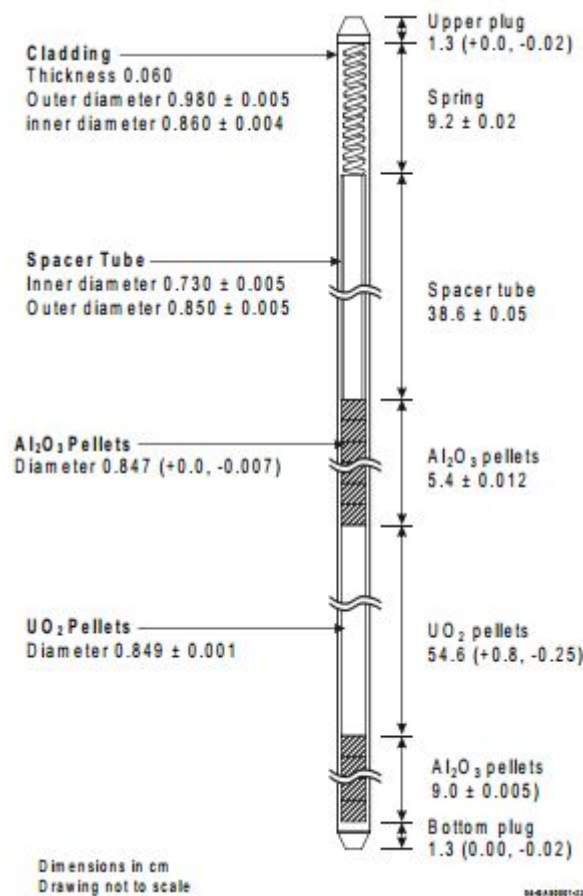


Fonte: CRITICAL LOADING CONFIGURATIONS OF THE IPEN/MB-01 REACTOR WITH HEAVY REFLECTORS COMPOSED OF CARBON STEEL AND NICKEL(IPEN, 2013)

2.1.4 Varetas de Combustível

As varetas de combustível padrão do reator são tubos de aço inox AISI-304 que contêm 54 pastilhas de Óxido de Urânio enriquecido em seu interior, cada pastilha tem altura de 10,5mm e 8,49mm de diâmetro. As extremidades inferior e superior das varetas não são ativas e são preenchidas com pastilhas de Alumina com as mesmas dimensões das pastilhas de Óxido de Urânio, a figura 7 apresenta o diagrama de uma vareta. Na extremidade inferior das varetas há um cone cortado, que possui encaixe na matriz inferior, para fixação da vareta.

Figura 7 – Diagrama de visão lateral de uma vareta combustível do MB-01.



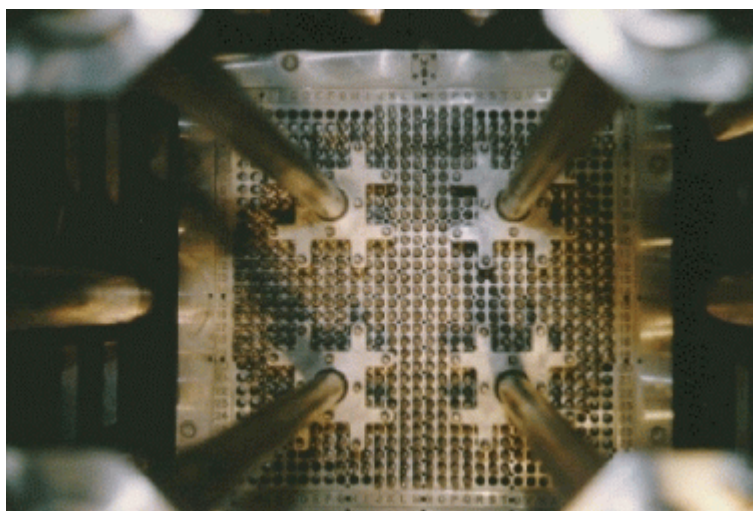
Fonte: CRITICAL LOADING CONFIGURATIONS OF THE IPEN/MB-01 REACTOR WITH HEAVY REFLECTORS COMPOSED OF CARBON STEEL AND NICKEL (IPEN, 2013)

2.1.5 Barras de Controle e Segurança

As barras utilizadas para redução de criticidade são movimentadas sempre em grupos de 12, ou seja, são dois bancos de barras de controle e dois bancos de barras de segurança, todas as 48 barras são dimensionalmente idênticas e revestidas também de aço ASTM SS-304 sendo que as barras de controle são recheadas com uma liga de Ag-In-Cd e as barras de segurança são recheadas com Carbetto de Boro (B_4C), um composto que é forte absorvedor de nêutrons.

Usualmente a grandeza que determina quanto de cada um dos bancos de controle está inserido no reator é calculada com relação ao comprimento total da barra em relação ao comprimento que ultrapassou o limite definido pela matriz de furos superior, mais especificamente o quanto das barras de controle não está inserido no núcleo, a grandeza é denominada percentagem retirada. Para configurações que visam economia de combustível é ideal trabalhar com valores de percentagem retirada próximos à 100%, pois a inserção das barras de controle absorvem nêutrons que de outro modo estariam desencadeando novas reações e gerando energia, este ajuste fino é feito através do ajuste da composição das varetas ao longo da matriz do núcleo, de forma a posicionar varetas com maior concentração de ^{235}U (ou seja, mais novas) nas camadas exteriores e varetas com menor concentração de ^{235}U nas camadas interiores. A figura 8 apresenta uma foto do núcleo do reator onde podem ser vistas as 4 hastes que controlam os 4 bancos de controle e de segurança completamente inseridas (pois o vaso de contenção do reator está aberto), ou seja com percentagem de retirada de 0%.

Figura 8 – Foto do núcleo do MB-01 durante uma parada da unidade.



Fonte: <https://www.ipen.br/>, acesso em 07/05/2018 às 20:00.

Características da Modelagem Utilizada

Os ensaios sugeridos por MOREIRA, em 1998, atendem até certo ponto a necessidade apresentada na introdução deste trabalho, entretando, em virtude de uma ótica diferente e usufruindo da versatilidade oferecida pelo método computacional, o estudo no reator MB-01 foi realizado de forma diferente da sugerida. Para todos os arranjos e proporções Tório-Urânio a simulação foi realizada utilizando os mesmos parâmetros iniciais e durante o mesmo número de ciclos. As composições utilizadas para o combustível nas varetas foram as mesmas propostas por MOREIRA em seu trabalho.

2.2 Varetas de Ensaio

As varetas de ensaio apresentadas por MOREIRA foram desenvolvidas para minimizar os efeitos de borda sobre o elemento estudado, ou seja, o Thório está presente apenas na região central das varetas, sendo que as pastilhas contendo as composições de Thório estão entre camadas de pastilhas de Urânio. Uma vareta de ensaio proposta por MOREIRA contém pastilhas de Óxido de Thório e pastilhas de Óxido de Urânio, sendo que o invólucro das pastilhas é sempre o mesmo, as varetas de ensaio não são distinguíveis visivelmente das varetas de combustível comuns do reator.

Entretanto, tendo em vista que este trabalho visa apresentar uma proposta de ensaio real, contemplando também a dificuldade adicional de manufaturar as varetas corretamente utilizando o projeto proposto por MOREIRA, foram utilizadas varetas com recheio de Tório puro, descartando as regiões com Urânio enriquecido que ficariam acima e abaixo da região do Tório. Uma das preocupações de MOREIRA era com a redução na reatividade induzida pelo Tório, que poderia não permitir a sustentação da reação em cadeia, os resultados permitiram observar que este arranjo é possível e resulta em valores de k acima de 1.

Para modelagem das varetas utilizou-se um novo objeto (no programa, chama-se universo), através do mnemônico “u”, com as mesmas características dimensionais de uma vareta comum, adicionando apenas o cilindro central contendo as frações, descritas na próxima seção do trabalho, de Óxido de Thório, o código utilizado é o seguinte:

```
c Thorium Rod
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c Thorium pellets
c
101 14 6.9450e-02
      (-1 3 -2)
      imp:n=1
      u=9
c
c aluminum stopple up
c
102 5 1.118600e-01
      (-5 2 -4)
```

```

        imp:n=1
        u=9
c
c  aluminum stopple botton
c
103  5      1.118600e-01
        (-5 -3)
        imp:n=1
        u=9
c
c  Spacer Tube
c
104  7      8.802220E-02
        (4 -7 6)
        imp:n=1
        u=9
c
c  Gap
c
105  2      -1.20492E-3
        (5 -7 2 -4 ):  $ gap top
        (5 -7 -3   ):  $ gap botton
        (3 -2 1 -7 ):  $ gap U02
        (7 -9   )    $ gap
        imp:n=1
        u=9
c
c  Void
c
106  0
        (-6 4)
        imp:n=1
        u=9
c
c  Cladding
c
107  3      8.655893e-02
        (9 -10)
        imp:n=1
        u=9
c
c  Water
c
108  4      1.00104E-01
        (10)
        imp:n=1
        u=9

```

Temos o revestimento que é um cilindro de aço de diâmetro externo e interno exatamente iguais aos de uma vareta comum, a alumina utilizada acima e abaixo do combustível também é idêntica à de uma vareta comum, a diferença é observada na célula 101 que compõe a parte ativa da vareta, onde é referenciado o material 14 (no caso, com uma densidade numérica total calculada em $6,8603\text{e-}02$ átomos/cm³), tudo isto é transformado em um universo para poder ser posicionado no arranjo do reator.

2.3 Composição das Varetas

Conforme proposto por MOREIRA, utilizou-se varetas de ThO_2 puro, com 75% de ThO_2 e 25% de Urânio enriquecido a 5% e com 50% de ThO_2 e 50% de Urânio enriquecido a 5%, foram feitos os cálculos da densidade atômica para cada um dos casos conforme a tabela 3 a seguir.

Tabela 3 – Densidades atômicas calculadas

Densidades Atômicas Calculadas	
100% ThO_2	6,9450e-2 átomos/cm ³
75% ThO_2 e 25% U(5%)	6,8693e-2 átomos/cm ³
50% ThO_2 e 50% U(5%)	6,8055e-2 átomos/cm ³

Além das densidades atômicas calculadas para o combustível como um todo, como foi abordado na introdução, também foram calculadas as densidades atômicas de cada um dos elementos e seus isótopos presentes no combustível para a entrada no Cartão de Materiais, o material foi definido como Material 14 na simulação (m14 em termos do MCNP) e sua entrada de dados pode ser conferida no exerto a seguir do código, considerando as varetas de ThO_2 puro.

```
c      pastilhas de Oxido de Torio
m14  90230.70c  2.3145e-02
      90232.70c  4.6300e-06
      8016.70c   4.6189e-02
      8017.70c   1.8520e-05
```

Cálculo da Densidade Atômica

Como o Óxido de Tório é um composto de Óxigênio e Tório, é necessário levar em consideração a densidade atômica de cada um dos isótopos mais comuns dos dois elementos, os isótopos menos comuns do Tório e do Oxigênio como o ^{231}Th e o ^{15}O foram desconsiderados pois suas frações são pequenas e não produzem variações significativas no valor da densidade atômica.

Para cálculo da densidade atômica (D , em átomos/cm³) são necessárias duas características empíricas: a massa específica do composto (ρ , em g/cm³) e a fração normal de cada um dos isótopos de seus componentes que será denominada η , o calculo é feito da seguinte forma:

$$D = \eta * \frac{A * \rho}{M}, \quad (2.1)$$

onde M é a molaridade do composto em g/mol e A é a constante de Avogadro ($6,0221e^{23}$ átomos/mol). A densidade atômica total, utilizada no cartão de célula, é obtida através da soma das densidades atômicas de todos os componentes de um dado composto.

As frações dos isótopos do Urânio, Tório e do Oxigênio estão nas tabelas 4 a 6 a seguir:

Tabela 4 – Frações de isótopos de Tório natural(KAERI, 2018)

Isótopo	Fração
^{230}Th	99,98%
^{232}Th	0,02%

Tabela 5 – Frações de isótopos de Urânio enriquecido a 5%(KAERI, 2018)

Isótopo	Fração
^{235}U	95%
^{238}U	5%

Tabela 6 – Frações de isótopos de Oxigênio natural(KAERI, 2018)

Isótopo	Fração
^{16}O	99,96%
^{17}O	0,04%

O cálculo de cada uma das densidades atômicas, utilizadas nos cartões de materiais está nas tabelas 7 a 9 a seguir:

Tabela 7 – Cálculo das densidades atômicas para varetas com ThO_2 puro

Isótopo	Densidade Atômica
^{230}Th	2,3145e-02 átomos/cm ³
^{232}Th	4,6300e-06 átomos/cm ³
^{16}O	4,6189e-02 átomos/cm ³
^{17}O	1,8520e-05 átomos/cm ³

Total	6,9450e-02 átomos/cm ³
-------	-----------------------------------

Tabela 8 – Cálculo das densidades atômicas para varetas com $(Th - U)O_2$, com 75% de Tório

Isótopo	Densidade Atômica
²³⁰ Th	1,7197e-02 átomos/cm ³
²³² Th	3,4402e-06 átomos/cm ³
²³⁵ U	2,8668e-04 átomos/cm ³
²³⁸ U	5,4469e-03 átomos/cm ³
¹⁶ O	4,5759e-02 átomos/cm ³
¹⁷ O	1,8348e-05 átomos/cm ³
Total	6,8693e-02 átomos/cm ³

Tabela 9 – Cálculo das densidades atômicas para varetas com $(Th - U)O_2$, com 50% de Tório

Isótopo	Densidade Atômica
²³⁰ Th	1,1358e-02 átomos/cm ³
²³² Th	2,2721e-06 átomos/cm ³
²³⁵ U	5,6803e-04 átomos/cm ³
²³⁸ U	1,0793e-02 átomos/cm ³
¹⁶ O	4,5333e-02 átomos/cm ³
¹⁷ O	1,8177e-05 átomos/cm ³
Total	6,8055e-02 átomos/cm ³

2.4 Arranjo das Varetas

Baseado no sugerido por MOREIRA em seu artigo, foram propostos dois arranjos para as varetas de teste. Levando em conta a queda na reatividade que seria causada pelo uso das varetas diferentes das que foram propostas por MOREIRA, utilizou-se arranjos que inserem menos varetas com Tório no núcleo do reator. O primeiro arranjo é de apenas quatro varetas, situadas no centro geométrico da matriz do reator, enquanto o segundo é um arranjo em formato de cruz, que utiliza oito varetas e também é localizado no centro do reator. Os dois arranjos são demonstrados pelas figuras 9 e 10.

Figura 9 – Arranjo 2x2 para as varetas de teste.

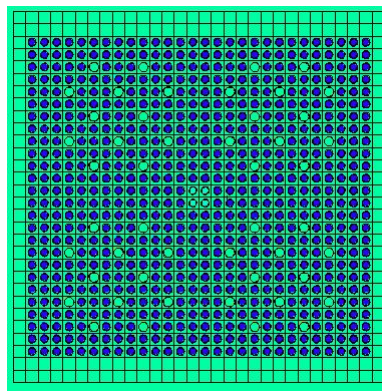
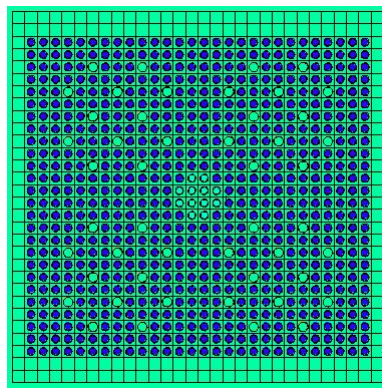


Figura 10 – Arranjo em cruz para as varetas de teste.



Em termos do código MCNP, são utilizados os comandos “latt” e “fill”, que criam um espaço tridimensional de um tamanho definido e preenchem com universos criados utilizando o comando “u”, este comando pode ser executado somente quando todos os universos tem o mesmo tamanho entre si e cabem dentro do espaço criado, o código que modela o núcleo do reator pode ser visto a seguir na configuração cruz:

queda no fator k e podem, se mal dimensionadas, causar o interrompimento da reação em cadeia em médio prazo, por isso é ideal utilizar menos varetas caso haja muito Tório por vareta, o arranjo ideal é aquele que mantém o valor de k levemente acima de 1 sem adição excessiva de Boro ou inserção das barras de controle.

2.5 Aproximações Consideradas

Como já foi abordado na introdução deste trabalho, os resultados fornecidos pelo MCNP dependem de diversos fatores governados pelos dados do arquivo *input*, enquanto os parâmetros de composição das varetas já foram abordados por MOREIRA, outros parâmetros, necessários para a execução do código, são baseados em sugestões abordadas manual do programa MCNPX.

2.5.1 Parâmetros de Condições iniciais

O código do MCNP exige que sejam fornecidos nêutrons primordiais para que sejam feitas as primeiras iterações da simulação através dos cartões de fonte, a utilização de nêutrons pontuais torna mais lento o processo de convergência, para contornar esta limitação foi utilizada a função de distribuição inicial de nêutrons em um cilindro de 54,84cm de altura e 16,5cm de raio localizado no centro do reator (posição 0 0 0) e orientado no eixo Y, o código utilizado nos cartões de fonte pode ser observado a seguir.

```
c SOURCE CARDS
c
sdef      pos= 0 0 0      $ center of volume source
          axs= 0 0 1      $ axis of volume source (cylinder)
          rad d1          $ radial bins to define by distributions 1
          ext d2          $ axial bins to define by distributions 2
          erg d3          $ energy distributions defined by distr. 3
si1       h 0 16.5        $ radii of volume source
si2       h -27.42 27.42  $ extension of cylinder (+/-) from the center
sp3       -3              $ built in function: Watt fission spectrum
```


2.5.2 Parâmetros de Ensaio

Para os ensaios realizados foram utilizados sempre os mesmos parâmetros, o cartão kcode utilizado pode ser observado a seguir:

```
kcode 200000 1.02 20 1000
```

Na sequência em que são inseridos le-se:

- $nsrck = 200000$: Foram simulados sempre duzentos mil nêutrons a cada ciclo de simulação;
- $rkk = 1.02$: O k_{ef} do reator em $t=0$ foi de 1.020;
- $izk = 20$: Os dados referentes aos 20 primeiros ciclos de simulação foram descartado;
- $kct = 1000$: Foram simulados 1000 ciclos no total, ou seja, 980 ciclos de aquisição de dados.

Resultados

Após 1000 ciclos de simulação foram obtidos os dados de k do reator, os resultados podem ser observados nas tabelas 10 a 15 abaixo:

Tabela 10 – Resultados de k_{ef} para as composições Th-U no arranjo em cruz, confiança de 68%

Composição da Vareta	k_{ef}	σ
ThO_2 puro	0,98962	0,0005
$(75\%Th - 25\%U)O_2$	0,99693	0,0005
$(50\%Th - 20\%U)O_2$	1,00457	0,0005

Tabela 11 – Resultados de k_{ef} para as composições Th-U no arranjo 2x2, confiança de 68%

Composição da Vareta	k_{ef}	σ
ThO_2 puro	0,98962	0,00005
$(75\%Th - 25\%U)O_2$	0,99693	0,00005
$(50\%Th - 20\%U)O_2$	1,00457	0,00005

Tabela 12 – Resultados de k_{ef} para as composições Th-U no arranjo em cruz, confiança de 95%;

Composição da Vareta	k_{ef}	σ
ThO_2 puro	0,98962	0,00010
$(75\%Th - 25\%U)O_2$	0,99693	0,00010
$(50\%Th - 20\%U)O_2$	1,00457	0,00010

Tabela 13 – Resultados de k_{ef} para as composições Th-U no arranjo 2x2, confiança de 95%;

Composição da Vareta	k_{ef}	σ
ThO_2 puro	0,98962	0,00010
$(75\%Th - 25\%U)O_2$	0,99693	0,00010
$(50\%Th - 20\%U)O_2$	1,00457	0,00010

Tabela 14 – Resultados de k_{ef} para as composições Th-U
no arranjo em cruz, confiança de 99%;

Composição da Vareta	k_{ef}	σ
ThO_2 puro	0,98962	0,00014
$(75\%Th - 25\%U)O_2$	0,99693	0,00013
$(50\%Th - 20\%U)O_2$	1,00457	0,00013

Tabela 15 – Resultados de k_{ef} para as composições Th-U
no arranjo 2x2, confiança de 99%;

Composição da Vareta	k_{ef}	σ
ThO_2 puro	1,01010	0,00014
$(75\%Th - 25\%U)O_2$	1,01281	0,00013
$(50\%Th - 20\%U)O_2$	1,01577	0,00013

Existem algumas observações interessantes que podem ser feitas observando os dados obtidos nas simulações, uma delas é que fica extremamente clara a queda no fator de multiplicação induzida pela inserção do Tório no núcleo do reator. O maior valor obtido para k é de 1,01577, este valor corresponde ao arranjo 2x2 com varetas que contém 50% de Óxido de Urânio enriquecido e 50% Óxido de Tório; ou seja, a configuração que insere a menor quantidade de Tório no reator e o menor valor de k obtido foi de 0,98962 e é o correspondente ao arranjo em cruz com varetas que contém Óxido de Tório puro. Na seção 1.2 do trabalho foi feito era esperado devido ao fato de serem consumidos dois nêutrons para fissionar o Tório, um para a transmutação e o outro para a fissão.

Note que em Monte Carlo não sabemos qual é o valor médio, ele é estimado. Logo, a variância estabelece que temos um certo nível de segurança (de 99%) que o valor médio esteja entre ± 3 sigma, não que o valor esperado do experimento esteja dentro do intervalo. Conforme aumentamos a confiança da medição, ou seja, reduzimos a faixa observada na dispersão de Gauss, o valor de variância não aumenta significativamente; sempre se mantém em menos de 0,02% do valor total. Isto aponta para uma Gaussiana com perfil agudo, ou seja, os dados tem alto grau de convergência. Outro detalhe é que a incerteza (variância) diminui com o inverso da raiz do número de histórias, logo, para diminuirmos a variância pela metade teríamos que quadruplicar o número de histórias, ou seja, quadruplicar o tempo de cálculo.

3 Conclusão

O objetivo deste trabalho era desenvolver uma base de comparação para os dados nucleares do Tório, utilizando as tabelas do MCNP, com a finalidade de propor um experimento real no reator IPEN/MB-01. Obviamente, varias configurações são possíveis mas, dentro da proposta apresentada, observando os dados, vemos que a melhor configuração irá depender de quão oneroso será o processo de produção das varetas de teste.

Os dados coletados são bastante conclusivos, a variância de 0,00014 considerando 99% de confiança está em patamares excelentes, não há motivos para acreditar que a comparação de dados reais com os dados dessa simulação possa gerar quaisquer discrepâncias. De um ponto de vista prático, os valores menores de k , observados nas simulações com o arranjo em cruz, apontam para uma menor utilização de barras de controle, o que levaria a uma menor interferência na análise dos dados de secção de choque do Tório, entretanto, a utilização de um menor número de barras no arranjo 2x2 não impossibilita o estudo e é uma estratégia válida caso o processo de manufatura das varetas seja um gargalo na execução do ensaio. Dito isso é importante relatar que está prevista uma atualização no núcleo do IPEN/MB-01, desconhecida durante o desenvolvimento deste trabalho, o novo núcleo do reator utilizará um arranjo de placas radicalmente diferente do núcleo simulado. Este fato não invalida completamente o experimento, ainda que não possa ser dado prosseguimento da forma que foi planejada no início do trabalho, a análise dos resultados aponta que a equipe envolvida nas simulações é competente para simular o novo núcleo do reator para um ensaio real nesta nova configuração.

Os dados nucleares, de uma forma geral, estão em constante reavaliação, como é sempre necessário com dados empíricos. Como já foi citado na introdução deste trabalho, a verificação dos dados do Tório é etapa fundamental do desenvolvimento de reatores capazes de queimar este elemento e este trabalho pode servir como base para futuros estudos similares. No intuito de facilitar o desenvolvimento do *input* para o MCNPX e, por ventura um texto em LaTeX, todos os dados de desenvolvimento deste trabalho estão comentados e disponíveis na íntegra através do endereço <<https://github.com/LFBianchi/MB-01-MCNPX-ToriumRods>>.

Referências

CHADWICK, M. B. e. a. Endf/b-vii. 0: next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology. nuclear data sheets. ELSEVIER, 2006. Citado na página 31.

ÇENGEL Y. A.; BOLES, M. A. *Termodinâmica*. 7. ed. Michigan: AMGH EDITORA LTDA., 2013. Citado na página 25.

EPE. *Empresa de Pesquisas Energéticas - Anuário Estatístico de Energia Elétrica 2016, ano base 2015*. Brasília: [s.n.], 2016. Website Oficial. Disponível em: <<http://www.epe.gov.br/pt/>>. Acesso em: 07 de Maio de 2018. Citado na página 23.

INATOMI T. A. H.; UDAETA, M. E. M. *Análise dos Impactos Ambientais na Produção de Energia Dentro do Planejamento Integrado de Recursos*. Universidade de São Paulo, 2005. Disponível em: <http://seeds.usp.br/portal/uploads/INATOMI_TAHI_IMPACTOS_AMBIENTAIS.pdf>. Acesso em: 07 de Maio de 2018. Citado na página 23.

INL. *Idaho National Laboratory - International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project*. Idaho, Estados Unidos: [s.n.], 2015. Website Oficial. Disponível em: <<http://icsbep.inel.gov/>>. Acesso em: 07 de Maio de 2018. Citado na página 40.

IPEN. *Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - CRITICAL LOADING CONFIGURATIONS OF THE IPEN/MB-01 REACTOR WITH HEAVY REFLECTORS COMPOSED OF CARBON STEEL AND NICKEL*. São Paulo: [s.n.], 2013. Website Oficial. Disponível em: <http://repositorioconsulta.ipen.br/Consulta_AutorIPEN.php?codigo=1309>. Acesso em: 07 de Maio de 2018. Citado 4 vezes nas páginas 41, 42, 43 e 44.

JUNK W. J.; MELLO, J. A. S. N. *Impactos ecológicos das represas hidrelétricas na bacia amazônica brasileira*. Universidade de São Paulo, 1990. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0103-40141990000100010>. Acesso em: 07 de Maio de 2018. Citado na página 23.

KAERI. *Korean Atomic Energy Research Institute - Table of Nuclides*. Gu Daejeon, Korea: [s.n.], 2018. Website Oficial. Disponível em: <<http://atom.kaeri.re.kr/nuchart/>>. Acesso em: 07 de Maio de 2018. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 50.

MOREIRA, J. M. L. *Uma proposta de estudo brasileira visando a utilização de Tório em reatores*. Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, 1998. Disponível em: <<http://repositorio.ipen.br:8080/xmlui/handle/123456789/13918>>. Acesso em: 07 de Maio de 2018. Citado na página 28.

NEA, N. E. A. *International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments*. 2015. ed. France: Nuclear Energy Agency, 2015. Citado na página 40.

NIFENECKER, H. e. a. *Series in Fundamental and Applied Nuclear Physics*. 1. ed. Philadelphia: IOP, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 29.

PRIMER - MCNPX Criticality Primer III. [S.l.]. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 34.

- ROSSI, P. C. R. *Reações Nucleares de Alta energia ("Spallation") e Sua Aplicação em calculo de Sistemas Nucleares Aficionados por Fonte*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil, 2011. Disponível em: <<http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/85/85133/tde-16062011-132603/pt-br.php>>. Acesso em: 5 de Maio de 2018. Citado na página 31.
- SANTOS, A. D. e. a. Reactor physics experiments in the ipen/mb-01 research reactor facility. IPEN, 2014. Citado na página 40.
- SHULTIS J. K.; FAW, R. *Fundamentals of Nuclear Science and Engineering*. 10. ed. United States: Marcel Dekker Inc., 2002. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 30.
- SPANIER J.; GELBARD, E. M. *Monte Carlo principles and neutron transport problems*. California: Courier Corporation, 2008. Citado na página 31.
- USGS. *U.S. Geological Survey for Mineral Commodity Summaries - Thorium*. Virgínia, Estados Unidos: [s.n.], 2017. Website Oficial. Disponível em: <<https://minerals.usgs.gov/minerals/pubs/mcs/>>. Acesso em: 07 de Maio de 2018. Citado na página 23.
- WNA. *World Nuclear Assotiation - Physics of Uranium and Nuclear Energy*. Londres, Reino Unido: [s.n.], 2010. Website Oficial. Disponível em: <<http://www.world-nuclear.org/>>. Acesso em: 07 de Maio de 2018. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 27.

Apêndices

APÊNDICE A – Código Base da Simulação para a IPEN/MB-01 em Configuração Padrão

Critical Facility 4.3 w/o u-235 enrichment

c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

c Fuel Rod

c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

c

c UO2 pellets

c

1 1 6.813709e-02

(-1 3 -2)

imp:n=1

u=1

c

c aluminum stopple up

c

2 5 1.118600e-01

(-5 2 -4)

imp:n=1

u=1

c

c aluminum stopple botton

c

3 5 1.118600e-01

(-5 -3)

imp:n=1

u=1

c

c Spacer Tube

c

4 7 8.802220E-02

(4 -7 6)

imp:n=1

u=1

c

c Gap

c

5 2 -1.20492E-3

(5 -7 2 -4): \$ gap top

(5 -7 -3): \$ gap botton

(3 -2 1 -7): \$ gap UO2

(7 -9) \$ gap

imp:n=1

u=1

c

c Void

c

6 0

(-6 4)

imp:n=1

u=1

c

c Cladding

```

c
7 3 8.655893e-02
    (9 -10)
    imp:n=1
    u=1

c
c Water
c
8 4 1.00104E-01
    (10)
    imp:n=1
    u=1

c
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c Control-Rod
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c Absorber
c
9 6 5.8233510e-02
    (-13 12)
    imp:n=1
    u=2

c
c Gap
c
10 2 -1.20492E-3
    (13 -9 12) $ gap
    imp:n=1
    u=2

c
c Tip and Cladding
c
11 3 8.655893e-02
    (9 -10 12):
    (11 -12 -10)
    imp:n=1
    u=2

c
c Water
c
12 4 1.00104E-01
    ( 10 ):
    (-10 -11)
    imp:n=1
    u=2

c
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c Guide tube plus Control-Rod
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c Control-Rod region
c
13 0 (-14)
    fill=2 (0 0 0)
    imp:n=1
    u=3

c
c Guide tube
c

```

```

14  9      8.429047E-02
      (14 -15)
      imp:n=1
      u=3

c
c Water
c
15  4      1.00104E-01
      (15)
      imp:n=1
      u=3

c
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c Safety-rod guide tube
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c Water
c
16  4      1.00104E-01
      (-14)
      imp:n=1
      u=4

c
c Guide tube
c
17  9      8.429047E-02
      (14 -15)
      imp:n=1
      u=4

c
c Water
c
18  4      1.00104E-01
      (15)
      imp:n=1
      u=4

c
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c Gd2O3
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c Gd2O3
c
19  13     1.7167297e-02
      (-9)
      imp:n=1
      u=5

c
c Cladding
c
20  3      8.655893e-02
      (9 -10)
      imp:n=1
      u=5

c
c Water
c
21  4      1.00104E-01
      (10)
      imp:n=1

```



```
c
c Lattice region
c
25 0
    (22 -21 24 -23 26 -25)
    fill=7 (0.75 0.75 0)
    imp:n=1
    u=8
c
c bottom grid plate
c
26 12 8.666089e-02
    (28 -27 30 -29 -26 31)
    imp:n=1
    u=8
c
c Water
c
28 4 1.00104E-01
    (-31 ):
    (31 -26 27 ):
    (31 -26 -28 ):
    (31 -26 -27 28 29 ):
    (31 -26 -27 28 -30 ):
    (26 -25 21 ):
    (26 -25 -22 ):
    (26 -25 -21 22 23 ):
    (26 -25 -21 22 -24 ):
    (25 )
    imp:n=1
    u=8
c
c cccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c System
c
29 0
    (37 -38 -39) fill=8
    imp:n=1
c
c Outside
c
999 0
    (39):
    (-39 38):
    (-39 -37)
    imp:n=0
c
c cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
1 cz 0.42447 $ UO2 : OR
2 pz 27.42 $ --| - (+) -> 54.84
3 pz -27.42 $ --|
c
4 pz 32.82 $
5 cz 0.4235 $ Al2O3 : OR
c
6 cz 0.365 $ Spacer Tube : IR
```



```

si2      h -27.42 27.42 $ extension of cylinder (+/-) from the center
sp3      -3              $ built in function: Watt fission spectrum
c
kcode    200000 1.02 20 1000
c
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c  Material Definitions
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c  UO2 pellet
c
m1      92234.50c 7.84560e-06
        92235.50c 9.99160e-04
        92238.50c 2.16920e-02
        8016.50c 4.54677e-02
        8017.60c 1.72843e-05
c
c  AIR - 1.20492E-3 g/cm^3
c
m2      GAS=1
        7014 7.81524E-01
        7015 2.87090E-03
        8016 2.10651E-01
        8017 8.00776E-05
        6000 1.60708E-04
        18000 4.71299E-03
c
c  SS304 clad - clad
c
m3      6000.50c 1.12390e-04
        14000.50c 6.79340e-04
        15031.50c 4.00400e-05
        16000.60c 1.56170e-05
        24000.50c 1.68240e-02
        25055.50c 1.46450e-03
        26000.55c 5.90020e-02
        27059.50c 1.74020e-04
        28000.50c 8.16250e-03
        42000.50c 8.45200e-05
c
c  H2O - water
c
m4      1001.50c 6.67360e-02
        8016.50c 3.33553e-02
        8017.60c 1.26798e-05
mt4      lwtr.01t
c
c  al2o3 - Alumina
c
m5      8016.50c 6.70905e-02
        8017.60c 2.55041e-05
        13027.50c 4.47440e-02
c
c  AG-IN-CD Control ROD
c
m6      6000.50c 1.50520e-03
        8016.50c 1.76963e-03
        8017.60c 6.72714e-07
        16000.60c 1.87910e-04
        47107.50c 2.31790e-02

```

	47109.50 c	2.11460e-02
	48000.50 c	2.58940e-03
	49000.60 c	7.85170e-03
c		
c	spacer tube - SS304	
c		
m7	6000.50 c	2.40780e-04
	14000.50 c	1.11550e-03
	15031.50 c	3.11240e-05
	24000.50 c	1.67790e-02
	25055.50 c	1.15810e-03
	26000.55 c	6.18920e-02
	27059.50 c	1.14500e-04
	28000.50 c	6.57020e-03
c		
c	stainless steel reflector - baffle	
c		
m8	6000.50 c	1.80900e-04
	14000.50 c	6.96440e-04
	16000.60 c	1.08160E-05
	22000.50 c	2.40980e-06
	24000.50 c	1.75950e-02
	25055.50 c	1.03920e-03
	26000.55 c	6.00360e-02
	28000.50 c	6.56700e-03
	29000.50 c	1.66790e-05
	42000.50 c	2.10910e-05
c		
c	guide tube - SS304	
c		
m9	6000.50 c	8.89680e-05
	14000.50 c	6.61700e-04
	15031.50 c	4.50000e-05
	24000.50 c	1.62980e-02
	25055.50 c	1.15010e-03
	26000.55 c	5.69430e-02
	28000.50 c	9.10370e-03
c		
c	SS304 Bottom Grid Plate	
c		
m10	5010.60 c	2.9974e-04
	5011.60 c	1.2065e-03
	6000.60 c	3.7656e-04
	8016.60 c	5.7928e-02
	11023.60 c	8.6686e-06
	12000.60 c	8.1995e-05
	13027.60 c	3.8619e-02
	24000.50 c	3.8327e-06
	26000.55 c	1.0705e-05
	28000.50 c	3.3956e-06
	62149.50 c	2.6508e-07
	72000.60 c	2.2331e-07
c		
c	acrylic tube	
c		
m11	1001.60 c	5.68840e-02
	6000.60 c	3.55520e-02
	8016.60 c	1.42210e-02
c		
c	bottom grid plate	

```
c
ml2      6000.50 c 7.94260e-05
          14000.50 c 8.66160e-04
          15031.50 c 5.54400e-05
          16000.60 c 4.46200e-06
          24000.50 c 1.67050e-02
          25055.50 c 1.25030e-03
          26000.55 c 6.00360e-02
          28000.50 c 7.66410e-03
          42000.50 c 2.98310e-05

c
c      gd2o3 powder density = 2.0668 g/cm3
c
ml3      8016.50 c 1.03091e-02
          8017.60 c 3.91894e-06
          64152.50 c 1.37512E-05
          64154.50 c 1.49888E-04
          64155.50 c 1.01759E-03
          64156.50 c 1.40743E-03
          64157.50 c 1.07603E-03
          64158.50 c 1.70790E-03
          64160.60 c 1.50300E-03

c
c
prtmp 1j 100 -1
print
```

Anexos

ANEXO A – Código para as Varetas de Ensaio

- Varetas de ensaio com Óxido de Tório puro.

```
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c Thorium Rod
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c Thorium pellets
c
101 14 6.9450e-02
      (-1 3 -2)
      imp:n=1
      u=9
c
c aluminum stopple up
c
102 5 1.118600e-01
      (-5 2 -4)
      imp:n=1
      u=9
c
c aluminum stopple botton
c
103 5 1.118600e-01
      (-5 -3)
      imp:n=1
      u=9
c
c Spacer Tube
c
104 7 8.802220E-02
      (4 -7 6)
      imp:n=1
      u=9
c
c Gap
c
105 2 -1.20492E-3
      (5 -7 2 -4 ): $ gap top
      (5 -7 -3 ): $ gap botton
      (3 -2 1 -7 ): $ gap U02
      (7 -9 ) $ gap
      imp:n=1
      u=9
c
c Void
c
106 0
      (-6 4)
      imp:n=1
      u=9
c
```

```

c Cladding
c
107 3      8.655893e-02
      (9 -10)
      imp:n=1
      u=9

```

```

c
c Water
c
108 4      1.00104E-01
      (10)
      imp:n=1
      u=9

```

```

c

```

- Varetas de ensaio com 25% de Óxido de Urânio enriquecido (5%) e 75% Óxido de Tório.

```

c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c Thorium Rod
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c Thorium pellets
c
101 14     6.8693e-02
      (-1 3 -2)
      imp:n=1
      u=9

```

```

c
c aluminum stopple up
c
102 5      1.118600e-01
      (-5 2 -4)
      imp:n=1
      u=9

```

```

c
c aluminum stopple botton
c
103 5      1.118600e-01
      (-5 -3)
      imp:n=1
      u=9

```

```

c
c Spacer Tube
c
104 7      8.802220E-02
      (4 -7 6)
      imp:n=1
      u=9

```

```

c
c Gap
c
105 2      -1.20492E-3
      (5 -7 2 -4 ):    $ gap top
      (5 -7 -3   ):    $ gap botton
      (3 -2 1 -7 ):    $ gap U02
      (7 -9     )      $ gap
      imp:n=1
      u=9

```

```

c
c Void
c
106 0
      (-6 4)
      imp:n=1
      u=9
c
c Cladding
c
107 3      8.655893e-02
      (9 -10)
      imp:n=1
      u=9
c
c Water
c
108 4      1.00104E-01
      (10)
      imp:n=1
      u=9
c

```

- Varetas de ensaio com 50% de Óxido de Urânio enriquecido (5%) e 50% de Óxido de Tório.

```

c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c Thorium Rod
c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c Thorium pellets
c
101 14      6.8055e-02
      (-1 3 -2)
      imp:n=1
      u=9
c
c aluminum stopple up
c
102 5      1.118600e-01
      (-5 2 -4)
      imp:n=1
      u=9
c
c aluminum stopple botton
c
103 5      1.118600e-01
      (-5 -3)
      imp:n=1
      u=9
c
c Spacer Tube
c
104 7      8.802220E-02
      (4 -7 6)
      imp:n=1
      u=9
c
c Gap

```

```

c
105 2      -1.20492E-3
      (5 -7  2 -4 ):  $ gap top
      (5 -7 -3      ):  $ gap botton
      (3 -2  1 -7 ):  $ gap U02
      (7 -9          )  $ gap
      imp:n=1
      u=9

c
c Void
c
106 0
      (-6 4)
      imp:n=1
      u=9

c
c Cladding
c
107 3      8.655893e-02
      (9 -10)
      imp:n=1
      u=9

c
c Water
c
108 4      1.00104E-01
      (10)
      imp:n=1
      u=9

c

```

- Código para o arranjo das varetas de teste em 2x2.

[illegible]

ANEXO C – Cartões de Materiais Utilizados

- Cartão de materiais para as varetas com Óxido de Tório puro.

c	Thorium pellet
m14	90230.70 c 2.3145e-02
	90232.70 c 4.6300e-06
	8016.70 c 4.6189e-02
	8017.70 c 1.8520e-05

- Cartão de materiais para as varetas com 25% de Óxido de Urânio enriquecido (5%) e 75% Óxido de de Tório.

c	Thorium pellet
m14	90230.70 c 1.7197e-02
	90232.70 c 3.4402e-06
	92238.70 c 5.4469e-03
	92235.70 c 2.8668e-04
	8016.70 c 4.5759e-02
	8017.70 c 1.8348e-05

- Cartão de materiais para as varetas com 50% de Óxido de Urânio enriquecido (5%) e 50% de Óxido de Tório.

c	Thorium pellet
m14	90230.70 c 1.1358e-02
	90232.70 c 2.2721e-06
	92238.70 c 1.0793e-02
	92235.70 c 5.6803e-04
	8016.70 c 4.5333e-02
	8017.70 c 1.8177e-05