

VALIDAÇÃO DAS PRINCIPAIS BIBLIOTECAS NUCLEARES UTILIZADAS EM REATORES DE TÓRIO COM O CÓDIGO SERPENT

Lucas J. Faga¹, Giovanni L. de Stefani² e Thiago A. dos Santos³

¹Instituto de Física
Universidade de São Paulo (USP)
Rua do Matão, 1371
05508-090 São Paulo, SP
lucas.faga@usp.br

²Centro de Engenharia Nuclear
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN / CNEN - SP)
Av. Professor Lineu Prestes 2242
03178-200 São Paulo, SP
giovanni.stefani@ipen.br

³Universidade Federal do ABC
Av. dos Estados, 5001
09210-580 São Paulo, SP
thiago.santos@ufabc.edu.br

RESUMO

Para garantir a precisão e relevância dos cálculos feitos para estudos e aplicações em tecnologia nuclear, é imprescindível que as bibliotecas de seção de choque utilizadas nas simulações computacionais para modelagem estejam apropriadamente validadas. Para isso é necessário verificar se os dados nucleares de seção de choque são capazes de reproduzir simulações de sistemas previamente analisados em benchmarks experimentais críticos e comparar os fatores macroscópicos encontrado, como o fator efetivo de multiplicação. O presente trabalho visa validar a biblioteca ENDF/B-VII, uma das bibliotecas que compõem o banco de dados padrão do código Serpent, para sistemas contendo U-233, U-235, Th-232, Pu-239 e Pu-240. O projeto servirá de suporte para os demais projetos do grupo de estudos recém-criado do Centro de Engenharia Nuclear (CEN) do IPEN, ligado ao estudo de diversos tipos de reatores e sua aplicação em ciclos de tório, assunto que ganha cada vez mais visibilidade pelas sólidas e potenciais promessas de revolução energética que traz.

Os resultados obtidos ao fim das simulações foram satisfatórios, estando os fatores de multiplicação efetiva a uma distância próxima de 100 PCM dos valores fornecidos pelos benchmarks, como o esperado para uma biblioteca validada. A distância mínima entre esses valores foi de 2 PCM e a máxima de 280 PCM. A análise final demonstra que a biblioteca ENDF/B-VII possui dados nucleares validados para os isótopos de interesse e pode, portanto, ser utilizada nos futuros projetos do grupo de estudo de tório.

1. INTRODUÇÃO

A operação de reatores nucleares depende fundamentalmente da forma com que os nêutrons interagem com os núcleos atômicos [1]. Logo, a realização de cálculos confiáveis para reatores depende intrinsecamente dos dados presentes nas bibliotecas nucleares, que contém informações sobre a natureza dessas interações. Estes dados são utilizados em simulações computacionais, compondo o conjunto de valores de entrada de modelagem nuclear juntamente com os aspectos geométricos do sistema em questão. As bibliotecas nucleares são utilizadas para estudos e aplicações em tecnologia de reatores de fissão, que requerem um número muito grande desses dados nucleares dado que a incerteza neles contida influencia diretamente a imprecisão dos parâmetros calculados para o projeto. A obtenção dos dados nucleares é feita através de métodos experimentais utilizando aceleradores de partículas ou reatores de pesquisa, complementado com teoria e modelos nucleares. Tais dados podem ser classificados como [2]:

- Constantes nucleares: massas nucleares, energia de ligação de núcleos e de partículas pesadas;
- Dados de estrutura nuclear: estados fundamental e excitado, suas energias e propriedades quânticas;
- Decaimento nuclear: meia vida total e parcial de decaimento para os estados fundamental e excitado; taxas, energias, intensidades e radiações emitidas no decaimento radioativo; espectro de energia de nêutrons emitidos em fissão espontânea de isótopos actínídeos, etc;
- Interação nuclear: dados de interação nuclear de nêutrons, partículas carregadas, luz e íons nucleares pesados.

Depois de obtidos, esses dados são avaliados e agrupados nas bibliotecas nucleares. A validação consiste na comparação, avaliação crítica e seleção de dados experimentais e de seus erros estatísticos e sistemáticos, seguidos pela derivação de ajustes consistentes de melhores valores por métodos apropriados. Cálculos de modelos e parâmetros nucleares sistemáticos são usados para preencher lacunas e remover inconsistências dos dados experimentais [3]. Dessa forma, uma biblioteca validada contém arquivos que, se processados adequadamente, geram dados para cálculos de uma variedade extensa de aplicações em ciência e tecnologia nuclear. Cada uma das bibliotecas avaliadas consiste de dados individuais para centenas de elementos ou isótopos [4].

Os dados destas bibliotecas são utilizados para a geração de bibliotecas MASTERS, usadas em códigos de cálculo determinísticos ou mesmo estocásticos [4]. Por sua vez, estas bibliotecas são avaliadas utilizando seus dados nucleares em códigos para calcular parâmetros macroscópicos - como a constante de criticalidade efetiva e o fluxo de nêutrons - e posteriormente comparando-os com aqueles obtidos em reatores experimentais, também denominados benchmarks.

Na literatura, existem diversos relatórios que contêm benchmarks experimentais críticos envolvendo diversos isótopos. Neles, tanto a descrição geométrica do sistema quanto informações adicionais para a modelagem do mesmo em códigos Monte Carlo são

informados, sendo possível extrair deles os dados de input para uma simulação eficiente e coerente com o experimento original. O grupo CSEWG (Cross Section Evaluation Working Group) é o elemento responsável pela produção do banco de dados de bibliotecas validadas ENDF/B (Evaluated Nuclear Data File), formato criado exclusivamente para a guarda e recuperação de dados validados para aplicações em tecnologia nuclear [5]. Todos os arquivos contidos no banco de dados avaliados pelo NEA (Nuclear Energy Agency) são armazenados nesse formato [6]. Esse grupo é composto pelos laboratórios, indústrias e universidades dos Estados Unidos e Canadá mencionados a seguir [7]:

- Atomic Energy of Canada Ltd.
- Argonne National Laboratory Bechtel Bettis Inc.
- Brookhaven National Laboratory
- Defense Nuclear Facilities Safety Board
- General Atomics Idaho National Engineering and Environmental Laboratory
- Knolls Atomic Power Laboratory
- Los Alamos National Laboratory
- Lawrence Livermore National Laboratory
- National Institute of Standards and Technology
- Oak Ridge National Laboratory
- Ohio University Pacific Northwest National Laboratory
- Purdue University
- Rensselaer Polytechnic Institute
- Sandia National Laboratories
- Westinghouse Electric Corp.

O presente trabalho consiste em avaliar a biblioteca nuclear ENDF/B-VII para simulações em sistemas rápidos e térmicos relacionadas a reatores de tório produzindo U-233 e a queima de rejeitos. A biblioteca em questão compõe o banco de dados padrão do código Serpent e contém dados para mais de 400 materiais, desde o H-1 até o Fm-255 [4]. Para isso, foram escolhidos relatórios na literatura que continham benchmarks experimentais críticos com tais isótopos de interesse, a fim de modelar computacionalmente o experimento e associar o fator de multiplicação efetiva calculado com os dados de seção de choque presentes na biblioteca. Foram escolhidas duas publicações do Los Alamos National Laboratory, uma do Brookhaven National Laboratory e uma do Swiss Federal Institute for Reactor Research por serem ricas em informações relevantes para uma modelagem fiel e por contarem com uma boa diversidade de experimentos constituídos apenas pelos isótopos relacionados a tório e queima de rejeitos, permitindo uma relação mais direta entre os resultados finais e os dados de seção de choque de interesse.

O objetivo principal do trabalho é assegurar que os dados nucleares presentes nessa biblioteca sejam confiáveis para a utilização em projetos do recém formado grupo de pesquisa do IPEN, ligado a aplicação de tório como combustível para diversos reatores e ao seu aproveitamento em ciclos de tório. O grupo irá abordar o assunto em duas frentes: uma voltada para a implementação de combustível de óxidos mistos de tório nos modelos mais comuns de reatores atualmente (CANDU, PWR, HTGR, etc), e a outra para sua implementação em modelos ainda em desenvolvimento (ADS, Travelling Waves, etc). A importância da

validação, logo, se dá por essa necessidade de verificar se tais bibliotecas podem descrever bem sistemas envolvendo tório, que por sua vez ganham cada vez mais visibilidade pelas sólidas e potenciais promessas de revolução energética que trazem.

O fornecimento de combustível é fundamental a qualquer sistema de produção energética. Assim é importante garantir que exista combustível disponível para suprir as necessidades de uma usina de energia, independente de qual seja o recurso utilizado para sua alimentação. O fornecimento de combustível irá determinar desde o custo de geração de energia até mesmo o quão viável serão as novas usinas. O problema nas diretrizes atuais da produção de energia nuclear é que o urânio é predominantemente utilizado como material central na composição dos combustíveis, apesar das circunstâncias atuais estarem cada vez menos favoráveis para sua implementação em larga escala. Os custos e as dificuldades atuais associadas a disponibilidade do material na natureza e aos subprodutos das reações nucleares [8] [9] limitam o urânio como fonte primária de energia à este século, se forem excluídos os processos de reciclagem e levado em conta apenas o uso de reatores térmicos, sem o aproveitamento do plutônio remanescente do material utilizado ou de outras fontes [10]. Desta forma, estudos envolvendo combustíveis nucleares alternativos e a produção de outros materiais físseis ganham espaço [11].

Por mais que a seção de choque do tório para fissões com energia térmica seja zero, sua alta seção de choque para captura térmica, que o transforma em U-233 (físsil), faz com que ele possa ser empregado para produzi-lo (material fértil), bem como ser usado como combustível misturado com urânio ou plutônio em reatores térmicos ou no núcleo de reatores rápidos [8]. Sua abundância na crosta terrestre faz do tório uma alternativa vantajosa, possuindo reservas três vezes maiores que as do urânio, além de ser encontrado na natureza numa abundância isotópica de 100% em Th-232 [12]. Como ilustrado na Figura 2 [13], o Brasil possui a maior reserva mundial de tório, o que ressalta a importância do investimento brasileiro em pesquisa e aplicações para essa fonte de energia.



Figure 2: Reservas mundiais de tório (IThEO, 2017)

Por fim, dada tal justificativa para a validação de bibliotecas de tório e ao próprio desenvolvimento de estudos ligados a ele, o trabalho se iniciou pela busca bibliográfica por relatórios que continham benchmarks experimentais críticos envolvendo os elementos de interesse do grupo de pesquisa (no caso: U-233, U-235, Th-232, Pu-239 e Pu-240) para sistemas rápidos e térmicos. A partir deles, foram escolhidos os benchmarks a serem modelados para o Serpent, sendo preferíveis aqueles que continham o menor número de elementos não diretamente relacionados à linha de pesquisa. Uma vez modelados, os inputs foram inseridos no Serpent e o valor do fator de multiplicação efetiva absoluto encontrado foi comparado com aqueles descritos nos benchmarks experimentais. A diferença entre os dados foi dada em PCM, sendo esperado que uma biblioteca validada deva ser capaz de gerar resultados a uma distância em torno de 100 PCM dos valores experimentais.

2. METODOLOGIA

Para a validação das bibliotecas nucleares, foram pesquisados benchmarks experimentais críticos, i.e. $k_{eff} = 1$, para sistemas rápidos e térmicos que continham, preferivelmente, somente os elementos relevantes ao grupo de pesquisa, como Pu-239, Pu-240, Pu-241, Th-232, U-233 e U-235, a fim de relacionar mais diretamente o valor do parâmetro macroscópico encontrado com as seções de choque de interesse. A metodologia de cálculo neutrônico utilizada para as validações se baseou no código Serpent devido à sua disponibilidade de licença no IPEN [14]. O Serpent é um programa que resolve problemas de transporte em energia contínua através do método Monte Carlo e que pode modelar com facilidade estruturas tridimensionais complexas (como núcleos de reatores) e gerar dados importantes (como o mapa do fluxo de nêutrons e o fator de multiplicação ao longo do

mesmo). O fator de multiplicação efetiva encontrado ao fim de cada simulação, que está associado aos dados nucleares da biblioteca ENDF/B-VII, foram comparados com aqueles fornecidos pelos próprios benchmarks experimentais. É esperado que uma boa biblioteca seja consistente com os dados de outras bibliotecas nucleares validadas e que ela seja capaz de reproduzir sistemas obtendo fatores macroscópicos em uma faixa de, aproximadamente, 100 PCM de distância daqueles esperados experimentalmente.

2.1. Benchmarks rápidos

Uma publicação do Los Alamos National Laboratory [15] e o relatório JEF REPORT 6 do Swiss Federal Institute for Reactor Research [16] foram as fontes escolhidas para servir de base à modelagem dos benchmarks rápidos. Os aspectos dos sistemas estão descritos abaixo, sendo comentados primeiramente os benchmarks do JEF REPORT 6 e, posteriormente, os experimentos das esferas de urânio mencionado na publicação do Los Alamos. Como nenhuma temperatura foi mencionada nos relatórios, considerou-se a temperatura dos sistemas como 300 K.

2.1.1. JEZEBEL, esfera nua de plutônio

O modelo em questão é constituído por uma esfera nua de plutônio de raio 6,385 cm composta uniformemente dos seguintes materiais:

Tabela 1: Densidades atômicas para o benchmark JEZEBEL

Isótopo	Densidade [átomos/(b-cm)]
Pu-239	0,037050
Pu-240	0,001751
Pu-241	0,000117
Ga-69	0,000826
Ga-71	0,000549

O resultado esperado para o k_{eff} , encontrado experimentalmente, é de 1,000(2).

2.1.2. JEZEBEL-23, esfera nua de U-233

JEZEBEL-23 é uma esfera nua de urânio com raio de 5,983 cm constituída uniformemente pelas seguintes concentrações dos isótopos de urânio:

Tabela 2: Densidades atômicas para o benchmark JEZEBEL-23

Isótopo	Densidade [átomos/(b-cm)]
U-233	0,04671
U-234	0,00059
U-235	0,00001
U-238	0,00029

O resultado esperado para o k_{eff} , encontrado experimentalmente, é de 1,000(1).

2.1.3. THOR, esfera de plutônio com refletor de tório

O modelo esférico é composto por um núcleo de raio 5,13 cm centrado em um refletor de raio interno também de 5,13 cm e raio externo de 29,88 cm. O sistema tem a seguinte composição:

Tabela 3: Densidades atômicas para o benchmark THOR

	Núcleo	Refletor
Isótopo	Densidade [átomos/(b-cm)]	
Pu-239	0,037050	-
Pu-240	0,001751	-
Ga-69	0,0007994364	-
Ga-71	0,0005305636	-
Th-232	-	0,030050

O resultado esperado para o k_{eff} , encontrado experimentalmente, é de 1,000(1).

2.1.4. FLATTOP-23, esfera de U-233 refletida

FLATTOP-23 é um sistema de formato esférico consistindo em um núcleo de raio 4,317 cm de U-233 concentrado (98,13%) envolto por um fino refletor, também esférico, de urânio a 0,293 cm de distância. O espaço entre núcleo e refletor é preenchido por vácuo e a composição homogênea das estruturas está descrita na tabela abaixo:

Tabela 4: Densidades atômicas para o benchmark FLATTOP-23

	Núcleo	Refletor
Isótopo	Densidade [átomos/(b-cm)]	
U-233	0,046710	-
U-234	0,000590	-
U-235	0,00001	0,00034
U-238	0,00029	0,04774

O resultado esperado para o k_{eff} , encontrado experimentalmente, é de 1,000(1).

2.1.5. U233-MET-FAST-002

Este experimento foi reproduzido em duas versões diferentes: uma constituída por um núcleo de 10,012 kg de raio 5,0444 cm, encoberto por um refletor também de urânio de 1,227 cm de espessura; o outro por um núcleo de 7,601 kg e 4,5999 cm de raio, envolto em um refletor de 1,9888 cm de espessura. A composição de ambos os sistemas está descrita na tabela abaixo:

Tabela 5: Densidades atômicas para o benchmark U233-MET-FAST-002

Benchmark	10 kg	7,6 kg
Isótopo	Densidade [átomos/(b-cm)]	Densidade [átomos/(b-cm)]
Núcleo		
U-233	0,047253	0,047312
U-234	0,000527	0,000528
U-238	0,000330	0,000330
Refletor		
U-235	0,044892	0,044892
U-238	0,003234	0,003234

Os resultados esperados para os k_{eff} , encontrados experimentalmente, são de 1,0000(11) e 1,0000(10), respectivamente.

2.2. Benchmarks térmicos

Uma outra publicação do Los Alamos [17], contendo dezenas de benchmarks, foi utilizada como referência para escolha dos sistemas térmicos juntamente com um relatório do

Brookhaven National Laboratory [18]. Os benchmarks ORNL-5 a ORNL-8 foram retirados do trabalho do Los Alamos, enquanto que os experimentos ORNL-1, ORNL-2 e a série PNL foram escolhidos dentre aqueles do Brookhaven. Como novamente nenhuma temperatura foi mencionada no relatório, considerou-se a temperatura dos sistemas como 300 K e o tratamento térmico associado ao hidrogênio de 293 K. A descrição de cada modelo é feita a seguir:

2.2.1 ORNL-1 e ONRL-2, esferas não dissolvidas de U-235

ORNL 1 a 4 é uma série de benchmarks composta por uma esfera de U-235 com 34,595 cm de raio, cuja concentração dos materiais que a constituem é única em cada experimento. Nesse trabalho, estamos interessados nas duas primeiras esferas desta série, que são compostas da seguinte forma:

Tabela 6: Densidades atômicas para os benchmarks ORNL-1 e ORNL-2

Benchmark	ORNL-1	ORNL-2
Isótopo	Densidade [átomos/(b-cm)]	
B-10	-	1,0286E-06
H	6,6228E-02	6,6148E-02
O	3,3736E-02	3,3800E-02
N	1,8690E-04	2,1290E-04
U-234	5,3800E-07	6,3100E-07
U-235	4,8066E-05	5,6206E-05
U-236	1,3800E-07	1,6300E-07
U-238	2,8070E-06	3,2810E-06

Os resultados esperados para os k_{eff} , encontrados experimentalmente, são de 1,00026(1) e 0,99975(1), respectivamente.

2.2.2 ORNL-5 a ONRL-8, U233-SOL-THERM-001

A série de experimentos ONRL 5 a 8 é similar à série anterior, sendo feita também por um núcleo de raio 34,595, porém agora contendo Th-232. Essa esfera é encoberta por uma casca também esférica de espessura 34,914 cm. Novamente, apenas as concentrações dos materiais que formam o sistema se alteram entre cada experimento da série e estas estão expostas juntamente com valores esperados da constante de multiplicação efetiva na tabela abaixo:

Tabela 7: Densidades atômicas e fator de multiplicação efetivo esperado para os benchmarks ORNL-5 a ORNL-8

Benchmark	ORNL-5	ORNL-6	ORNL-7	ORNL-8	Benchmark	Todos
Isótopo	Densidade do núcleo [átomos/(b-cm)]				Isótopo	Densidade do refletor [átomos/(b-cm)]
H-1	6,6271E-02	6,6362E-02	6,6413E-02	6,6337E-02	Al-27	5,9881E-02
B-10	-	2,6481E-07	5,1591E-07	7,6312E-07	Si-28	2,0095E-04
B-11	-	1,0659E-06	2,0766E-06	3,0716E-06	Si-29	1,0209E-05
N-14	1,1819E-04	1,2248E-04	1,2772E-04	1,3173E-04	Si-30	6,7375E-06
O-16	0,033564	0,033628	0,033674	0,033653	Mn-55	0,000014853
Th-232	1,9639E-07	2,0489E-07	2,1331E-07	2,2133E-07	Fe-54	6,4652E-06
U-233	4,3271E-05	4,5093E-05	4,6768E-05	4,8433E-05	Fe-56	1,0051E-04
U-234	7,1442E-07	7,4451E-07	7,7216E-07	7,9965E-07	Fe-57	2,3012E-06
U-235	1,7565E-08	1,8305E-08	1,8984E-08	1,9660E-08	Fe-58	3,0682E-07
U-238	2,7748E-07	2,8917E-07	2,9991E-07	3,1059E-07	Cu-63	3,5529E-05
keff	1,0000(31)	1,0005(33)	1,0006(33)	0,9998(33)	Cu-65	1,5836E-05

2.2.3. PNL-3 e PNL-5, esfera não dissolvida de plutônio

PNL é uma outra série de experimentos, dessa vez ligada a esferas de plutônio não refletidas com variações entre suas especificações. Os experimentos PNL-3 e PNL-5 associados a ela foram os selecionados para a modelagem e os raios das esferas, bem como a sua composição, estão expostos na tabela abaixo:

Tabela 8: Densidades atômicas e raios das esferas para os benchmarks da série PNL

Benchmark	PNL-3	PNL-5
Isótopo	Densidade [átomos/(b-cm)]	
H-1	6,4950E-02	6,0280E-02
O-16	3,4410E-02	3,7100E-02
N-14	7,3930E-04	2,7370E-03
Fe-54	7,5634E-08	1,1281E-07
Fe-56	1,1873E-06	1,7709E-06
Fe-57	2,7420E-08	4,0897E-08
Fe-58	3,6491E-09	5,4426E-09
Pu-239	5,3950E-05	1,0430E-04
Pu-240	2,3550E-06	4,5200E-06
Raio da esfera [cm]	22,70	20,1265

Como o relatório não menciona o k_{eff} encontrado experimentalmente e não dá nenhum outro valor de referência, considerou-se o resultado esperado como sendo 1.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

As simulações foram feitas para 30.000 histórias em 2.000 ciclos de criticalidade. Como, a priori, quanto maior o número de histórias e de ciclos melhor a simulação representa o experimento, inicialmente elas foram planejadas para 100.000 histórias e 2.000 ciclos; o tempo de duração, entretanto, era de 10 horas cada, surgindo a necessidade de diminuir o número de histórias. O efeito prático mais significativo dessa diminuição, no trabalho, foi o aumento da incerteza dos valores, uma vez que para 30.000 histórias o sistema já chegara a convergir para um keff. A despeito disso, as incertezas calculadas ainda estavam num tamanho adequado, não comprometendo a comparação dos fatores de multiplicação efetiva. Vale ressaltar também que os primeiros 100 ciclos de criticalidade não entraram na conta, pois considerou-se eles ainda em regime transiente.

Ao rodar o código do experimento FLATTOP-23 pela primeira vez, o Serpent emitiu uma mensagem de erro, dizendo que era necessário aumentar o número de buffers de armazenamento de dados, pois os dois buffers da configuração padrão do programa não eram capazes de lidar com a quantidade de dados de nêutrons produzidos em reações de multiplicação de espalhamento e novos pontos de fonte [14]. O problema foi contornado aumentando o número de buffers para dez, inserindo o cartão “set nbuf 10”. A partir disso, com a finalidade de estudar o comportamento dos códigos, o mesmo cartão foi inserido em outras simulações, e seus resultados finais comparados com aqueles das versões dos códigos sem o cartão. A comparação mostrou que: (i) em alguns poucos casos, o keff se afastou muito do esperado (a uma distância superior a 1.000 PCM); (ii) em outros, não houve mudanças significativas.

Os dados de fator absoluto de multiplicação efetiva fornecidos pelo Serpent, ao fim da simulação, estão expostos nas tabelas 9 e 10 juntamente com aqueles encontrados nos benchmarks experimentais. É esperado que uma biblioteca com dados coerentes seja capaz de gerar valores a uma distância de aproximadamente 100 PCM dos valores de referência.

Tabela 9: Fatores de multiplicação efetiva encontrados para os benchmarks rápidos

Benchmarks	keff encontrado		keff esperado		Diferença [PCM]
	valor	incerteza	valor	incerteza	
JEZEBEL	1,00024	0,00013	1,000	0,002	24
JEZEBEL-23	0,99962	0,00012	1,000	0,001	38
THOR	0,99894	0,00014	1,000	0,001	106
FLATTOP-23	1,00149	0,00013	1,000	0,001	149
U233-MET-FAST-002 (10kg)	0,99921	0,00012	1,0000	0,0011	79
U233-MET-FAST-002 (7,6kg)	1,00050	0,00012	1,0000	0,0010	50

Tabela 10: Fatores de multiplicação efetiva encontrados para os benchmarks térmicos

Benchmarks	keff encontrado		keff esperado		Diferença [PCM]
	valor	incerteza	valor	incerteza	
ORNL-1	0,99746	0,00008	1,00026	0,00001	280
ORNL-2	0,99729	0,00008	0,99975	0,00001	246
ORNL-5	1,00137	0,00008	1,0000	0,0031	137
ORNL-6	1,00119	0,00008	1,0005	0,0033	69
ORNL-7	1,00069	0,00008	1,0006	0,0033	9
ORNL-8	1,00070	0,00008	0,9998	0,0033	90
PNL-3	0,99998	0,00011	1	0	2
PNL-5	1,00057	0,00013	1	0	57

Pela diferença entre os dois valores, evidenciada em PCM, nota-se que cinco dos 14 experimentos simulados obtiveram um fator de multiplicação efetiva a mais de 100 PCM distância do esperado, porém, com valores ainda próximos do aceitável. Nota-se que a diferença entre os valores variam em um intervalo que vai de 2 a 280 PCM.

A tabela 11 relaciona os elementos utilizados para cada benchmark com a diferença entre os fatores macroscópicos, e mostra que, de uma maneira geral, os resultados distantes do esperado não estão associados à presença de um isótopo a uma determinada temperatura em específico.

Tabela 11: Comparação entre benchmarks: isótopos envolvidos e diferença no fator de multiplicação efetivo

Benchmarks		Elementos envolvidos	Diferença [PCM]
Rápidos	JEZEBEL	Pu-239, Pu-240, Pu-241, Ga	24
	JEZEBEL-23	U-233, U-234, U-235, U-238	38
	THOR	Pu-239, Pu-240, Th-232, Ga	106
	FLATTOP-23	U-233, U-234, U-235, U-238	149
	U233-MET-FAST-002 (10kg)	U-233, U-234, U-235, U-238	79
	U233-MET-FAST-002 (7,6kg)	U-233, U-234, U-235, U-238	50
Térmicos	ORNL-1	H, O, N, U-233, U-234, U-235, U-236, U-238	280
	ORNL-2	B-10, H, O, N, U-233, U-234, U-235, U-236, U-238	246
	ORNL-5	H, O, N-14, Th-232, U-233, U-234, U-235, U-236, U-238, Al-27, Si, Mn-55, Fe, Cu	137
	ORNL-6	B-10, B-11, H, O, N, Th-232, U-233, U-234, U-235, U-236, U-238, Al-27, Si, Mn-55, Fe, Cu	69
	ORNL-7	B-10, B-11, H, O, N, Th-232, U-233, U-234, U-235, U-236, U-238, Al-27, Si, Mn-55, Fe, Cu	9
	ORNL-8	B-10, B-11, H, O, N, Th-232, U-233, U-234, U-235, U-236, U-238, Al-27, Si, Mn-55, Fe, Cu	90
	PNL-3	H, O, N, Fe, Pu-239, Pu-240	2

Pela análise da tabela, apenas os benchmarks ORNL-1 e ORNL-2, que continham U-233 e U-235 para energias térmicas, divergiram mais significativamente dos valores encontrados experimentalmente, apesar de apresentarem valores na faixa do aceitável. Junto a isso, o fato dos benchmarks ORNL-5 a ORNL-8, que também continham esses isótopos, convergirem a valores próximos do esperado (alcançando uma diferença de apenas 9 PCM para o ORNL-7), não é possível atribuir um erro sistemático aos dados nucleares de seção de choque dos isótopos U-233 e U-235; ou seja, é possível justificar que os dados nucleares de seção de choque para o U-233, U-235, Pu-239, Pu-241 e Th-232 conseguiram apresentar resultados válidos de keff para sistemas rápidos e térmicos e, portanto, podem ser utilizados em simulações de reatores de futuros projetos.

4. CONCLUSÃO

O objetivo principal deste trabalho foi verificar se os dados nucleares de seção de choque presentes na biblioteca ENDF/B-VII, referentes aos isótopos U-233, U-235, Th-232, Pu-239 e Pu-240, eram capazes de reproduzir os fatores de multiplicação efetiva descritos em benchmarks experimentais críticos, a fim de garantir que essa biblioteca pudesse ser utilizada em simulações de futuros projetos do grupo recém formado no IPEN ligado a aplicação de tório como combustível para diversos reatores e ao seu aproveitamento em ciclos de tório. Os resultados gerais para as constantes macroscópicas encontradas se mostraram satisfatórios e dentro do esperado para uma biblioteca nuclear, estando todos a uma distância aceitável (próximo de 100 PCM) daquelas fornecidas pelos benchmarks experimentais.

O resultado positivo indica que a biblioteca ENDF/B-VII pode ser utilizada em futuros projetos sobre o funcionamento de reatores como um todo, por ser capaz de gerar dados confiáveis através dos dados nucleares de seção de choque nela presentes. Isso permite que o grupo possa modelar estruturas complexas de atuais e de novos conceitos de reatores com precisão, uma vez que os cálculos computacionais chegarão em resultados próximos do que chegariam em experimentos reais por utilizarem uma biblioteca nuclear validada. Para que o grupo tenha a garantia de poder simular o funcionamento de reatores para combustíveis de reciclagem em sua totalidade, porém, ainda será necessária uma validação para os dados de seção de choque dos actínídeos menores, tais como cúrio, neptúno e amerício, demandando assim uma nova etapa desse projeto.

AGRADECIMENTOS

Ao CNPq, pela concessão de bolsa de iniciação científica PIBIC, que fomentou esse trabalho.

Ao Giovanni Laranjo de Stefani, pela orientação, suporte, paciência e por acreditar em meu potencial.

Ao IPEN, pela infraestrutura.

Aos meus pais e à Larissa Maria da Fonte Pérez, por todo apoio e incentivo.

REFERÊNCIAS

1. J. R. Lamarsh, *Introduction to Nuclear Engineering*, Addison-Wesley Publishing Company, inc., Massachusetts, Estados Unidos (2001).
2. D. E. Cullen, R. Muranaka, J. Schmidt, “Reactor Physics Calculations for Applications in Nuclear Technology,” *International Center for Theoretical Physics*, Trieste, Itália (1990).
3. W. F. Stacey, *Nuclear Reactor Physics*, Wiley-VCH, Estados Unidos (2007).
4. J. O. Shimokawa, “Uma introdução à geração de dados nucleares e a avaliação das bibliotecas de dados nucleares utilizadas nos programas SCALE 5.1 e MCNP, com ênfase nos dados de ^{232}Th e ^{233}U ,” Santo André, Brasil (2015).
5. A. Trkov, M. Herman, D. A. Brown, “ENDF-6 Formats Manual. National Nuclear Data Center”, *Brookhaven National Laboratory*, Brookhaven, Estados Unidos (2011).
6. “Evaluated Nuclear Data Library Descriptions,” http://www.oecd-nea.org/dbdata/data/nds_eval_libs.htm#STANDARDS (2017).
7. “CSEWG Member Organizations,” <http://www.nndc.bnl.gov/csewg/labs.jsp> (2017).
8. J. R. Maiorino, et al. “Thorium as a New Primary Source of Nuclear Energy,” IX *Congresso Brasileiro de Planejamento Energético*, Florianópolis, Brasil (2014).
9. Nuclear Energy Agency (NEA), “Uranium 2016: Resources, production and Demand,” *OECD NEA No. 7301*, Paris, França (2017).
10. International Atomic Energy Agency (IAEA), “Technology Roadmap Update for Generation IV Nuclear Energy Systems,” *OECD*, Viena, Áustria (2014).
11. International Atomic Energy Agency (IAEA). “Analysis of Uranium Supply to 2050,” *OECD*, Viena, Áustria (2001).
12. “World Nuclear Association (WNA),” <http://www.world-nuclear.org/> (2016).
13. “Thorium Resources,” <http://www.itheo.org/thoriumresources> (2017).
14. J. Leppanen, “The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013,” *Annals of Nuclear Energy*, Vol. 82, (2013).
15. S. Pelloni, “Benchmark Test of JEF-1 Evaluation by Calculating Fast Criticalities,” *OECD NEA DATA BANK*, Würenlingen, Suíça (1986).
16. R. W. Brewer, “Benchmark Critical Experiments of Uranium-233 Spheres Surrounded by Uranium-235,” *Los Alamos National Laboratory*, Los Alamos, Estados Unidos (1995).
17. S. C. Frankle, “A Suite of Criticality Benchmarks for Validating Nuclear Data,” *Los Alamos National Laboratory*, Los Alamos, Estados Unidos (1999).
18. H. Alter, et Al, “Benchmark Specification”, *Brookhaven National Laboratory*, Brookhaven, Estados Unidos (1974).