



**INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES**  
Autarquia Associada à Universidade de São Paulo

**Análise e Impacto das Matrizes de Covariância de Dados Nucleares com Efeitos de Auto Blindagem em Parâmetros Integrais de Reatores Nucleares.**

**MARCUS VINÍCIUS CAMILLO GÁLIA**

**Tese apresentada como parte dos requisitos para obtenção do Grau de Doutor em Ciências na Área de Tecnologia Nuclear - Reatores**

Orientador:  
Prof. Dr. **Adimir dos Santos**

**São Paulo**  
2022

**INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES**  
**Autarquia Associada à Universidade de São Paulo**

**Análise e Impacto das Matrizes de Covariância de Dados Nucleares com Efeitos de Auto Blindagem em Parâmetros Integrais de Reatores Nucleares.**

Versão Corrigida

Versão Original disponível no IPEN

**MARCUS VINÍCIUS CAMILLO GÁLIA**

**Tese apresentada como parte dos requisitos para obtenção do Grau de Doutor em Ciências na Área de Tecnologia Nuclear - Reatores**

Orientador:

Prof. Dr. **Adimir dos Santos**

**São Paulo**

2022

Fonte de Financiamento: IPEN/CNEN

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Como citar:

GÁLIA, M. V. C. . **Análise e Impacto das Matrizes de Covariância de Dados Nucleares com Efeitos de Auto Blindagem em Parâmetros Integrais de Reatores Nucleares.**. 2022. 102 f. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear), Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN-CNEN, São Paulo. Disponível em: <<http://repositorio.ipen.br/>> (data de consulta no formato: dd/mm/aaaa)

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de geração automática da Biblioteca IPEN, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Gália, Marcus Vinícius Camillo  
Análise e Impacto das Matrizes de Covariância de Dados Nucleares com Efeitos de Auto Blindagem em Parâmetros Integrais de Reatores Nucleares. / Marcus Vinícius Camillo Gália; orientador Adimir dos Santos. -- São Paulo, 2022.  
102 f.

Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em Tecnologia Nuclear (Reatores) -- Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo, 2022.

1. Dados Nucleares. 2. Física de Reatores. 3. Física Nuclear. I. dos Santos, Adimir, orient. II. Título.

## FOLHA DE APROVAÇÃO

Autor: Marcus Vinícius Camillo Gália

Título: Análise e Impacto das Matrizes de Covariância de Dados Nucleares com Efeitos de Auto Blindagem em Parâmetros Integrais de Reatores Nucleares.

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia Nuclear da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Data: 15/06/2022

### Banca Examinadora

Prof. Dr.: Adimir dos Santos

Instituição: IPEN-USP

Julgamento: Aprovado

Prof. Dr.: Julian Marco Barbosa Shorto

Instituição: IPEN-USP

Julgamento: Aprovado

Prof.Dr.: Airton Deppman

Instituição: IF-USP

Julgamento: Aprovado

Prof. Dr.: Luiz Carlos Leal

Instituição: IRSN

Julgamento: Aprovado

# Agradecimentos

A Deus, pela minha vida, e por me permitir ultrapassar todos os obstáculos encontrados ao longo da realização desta tese.

Aos meus pais, Marcus Fernando e Norma Sueli, que me incentivaram nos momentos difíceis e compreenderam a minha ausência enquanto eu me dedicava à realização desta tese.

À minha esposa Caroline Amaral, pelo apoio, incentivo nos momentos difíceis e compreensão na realização desta tese.

Ao meu filho Heitor, por ser minha companhia alegre e muito divertida e motivação em concluir o doutorado.

Aos meus sogros Regiane e Edivaldo, pelo apoio e incentivo em concluir o doutorado.

Ao professor Dr. Adimir dos Santos, por ter sido meu orientador e ter desempenhado tal função com dedicação, amizade e sempre sendo muito compreensivo nos momentos difíceis da minha jornada para conclusão da tese.

Ao professor Luiz Leal, pelos ensinamentos e disponibilidade em inúmeras conversas sobre as bibliotecas de dados nucleares.

Ao Professor Pedro Carlos Russo Rossi da UFABC, pela ajuda na utilização do Cluster do Centro de Engenharia Nuclear e pelos ensinamentos relativos à Física de reatores.

Ao Professor Giovanni Laranjo de Stefani da UFRJ, por inúmeras conversas sobre a perspectiva da Física de Reatores.

Aos professores e pesquisadores do Centro de Engenharia Nuclear, pelas correções e ensinamentos que me permitiram apresentar um melhor desempenho no meu processo de formação profissional ao longo do curso de doutorado.

Aos membros da banca examinadora, pelas correções e observações para a melhoria da tese.

À Bruna da Comissão de Pós-Graduação, por resolver todas as burocracias de uma forma eficaz, além de literalmente salvar alguns semestres realizando minha matrícula esquecida.

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, essencial no meu processo de formação profissional, pela dedicação, e por tudo o que aprendi ao longo dos anos do curso.

À Comissão Nacional de Energia Nuclear, pelo apoio financeiro para a realização desta tese.

# Resumo

GÁLIA, M. V. C. .*Análise e Impacto das Matrizes de Covariância de Dados Nucleares com Efeitos de Auto Blindagem em Parâmetros Integrais de Reatores Nucleares*. 2022. 102 f. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear), Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN-CNEN, São Paulo.

Uma abordagem numérica foi proposta para tratar os efeitos auto-blindagem nas matrizes de covariância no formalismo de multigrupo de reatores térmicos com combustíveis de urânio ligeiramente enriquecido. O código NJOY foi amplamente utilizado para reconstruir e efetuar o alargamento Doppler das seções de choque na região de ressonância resolvida e transformar esses dados pontuais em seções de choque de multigrupo. O fluxo de ponderação foi obtido com o modulo ROLAIDS do sistema AMPX-II. O procedimento emprega apenas as seções de choque linearizadas do NJOY e o fluxo de ponderação do ROLAIDS. As análises restringiram-se aos dados nucleares  $^{238}\text{U}$ , que é o nuclídeo mais importante na região de energia de ressonância resolvida. O formalismo de Reich Moore é empregado em todo o método desenvolvido. O procedimento considera os efeitos diretos e indiretos dos dados nucleares sobre a matriz de covariância no formalismo de multigrupos, e os efeitos de auto-blindagem são levados em consideração de forma simples. Os resultados para a dependência da temperatura também são considerados e fornecidos. Mostraram-se que os efeitos de auto-blindagem são possíveis de serem considerados e eles têm uma influência importante sobre a matriz de covariância de multigrupo. Considerou-se como verificação independente resultados do MCNP5 na modelagem do reator IPEN/MB-01. A concordância dos resultados do método proposto e o MCNP5 foram excelentes. O modulo ERRORR do sistema NJOY emprega o modelo Breit-Wigner a 0K para descrever as ressonâncias e para obter as derivadas das seções de choque nas ressonâncias em relação aos parâmetros de ressonância. Além disso, verificou-se que o modelo ERRORR considera apenas o efeito direto e não leva em consideração o efeito indireto da função de ponderação na matriz de covariância multigrupo. Ambas essas suposições induzem discordâncias severas na matriz de covariância de multigrupo gerada pelo ERRORR quando comparadas aos valores obtidos neste trabalho.

**Palavras-chave:** Dados Nucleares. Física de Reatores. Física Nuclear.

# Abstract

GÁLIA, M. V. C. .*Analysis and Impact of Nuclear Data Covariance Matrices with Self Shielding Effects on Integral Parameters of Nuclear Reactors*. 2022. 102 f. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear), Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN-CNEN, São Paulo.

A numerical approach has been proposed to treat the self-shielding effects in the multigroup covariance matrices of thermal reactors fueled with slightly enriched uranium. The procedure takes advantage of the capacity of NJOY to reconstruct and to Doppler Broadening the cross section in the resolved resonance region and the collision probability code ROLAIDS to get the weighting flux. The procedure employs only the linearized cross section from NJOY and the weighting flux from ROLAIDS. The analyses are restricted to the  $^{238}\text{U}$  nuclear data which is by far the most important nuclide in the resolved resonance energy region. Reich Moore formalism is employed all over the developed method. The procedure considers the direct and indirect effects of the nuclear data on the multigroup covariance matrix, and the self-shielding effects are taken into consideration in a straightforward fashion. Results for the temperature dependence are also provided. There were shown that the self-shielding effects are possible to take into consideration and they have an important bearing on the multigroup covariance matrix. The agreement of the results of the proposed method a MCNP5, as an independent verification method, were excellent The ERRORR procedure employs the Breit-Wigner model at 0K to describe the resonances and to get the derivatives of the resonance cross section to the resonance parameter. Furthermore, it has been found that the ERRORR model considers only the direct effect and does not take into consideration the indirect effect of the weighting function on the multigroup covariance matrix. Both of these assumptions induce a severe disagreement of the ERRORR generated multigroup covariance matrix to the corresponding values found in this work.

**Keywords:** Nuclear Data. Reactor Physics. Nuclear Physics.

# Lista de ilustrações

Figura 1 – Estrutura do arquivo 2 . . . . .	24
Figura 2 – Estrutura do arquivo 3 . . . . .	27
Figura 3 – Estrutura do arquivo 32 . . . . .	28
Figura 4 – Efeito da autoblindagem num nuclide genérico . . . . .	33
Figura 5 – Metodologia Geral da Tese . . . . .	36
Figura 6 – Metodologia de Cálculo (parte 1) . . . . .	40
Figura 7 – Célula Combustível do Reator IPEN/MB-01. . . . .	45
Figura 8 – Seções de Choque Pontuais do NJOY e fluxo de nêutrons do ROLAIDS	46
Figura 9 – Derivativas da seção de choque . . . . .	48
Figura 10 – Derivativa DGN em Diferentes Temperaturas . . . . .	49
Figura 11 – Derivativa da DGY em Diferentes Temperaturas . . . . .	49
Figura 12 – Derivada do Fluxo de Nêutron . . . . .	50
Figura 13 – Seção de Choque de Captura e Derivada da Seção de Choque no $E_0$ . .	51
Figura 14 – Fluxo de Nêutrons e Derivada da Seção de Choque no $E_0$ . . . . .	52
Figura 15 – Derivada do Fluxo de Nêutrons no Parâmetro $E_0$ . . . . .	53
Figura 16 – Derivativa da seção de choque e o fluxo com autoblindagem em 293K .	63



# Lista de tabelas

Tabela 1 – Bibliotecas de Dados Nucleares de Acordo com NLIB. . . . .	20
Tabela 2 – Sub-bibliotecas . . . . .	21
Tabela 3 – Descrição dos arquivos (MF) . . . . .	22
Tabela 4 – Reações (MT) Utilizadas na Tese . . . . .	23
Tabela 5 – Modelos de Ressonância . . . . .	23
Tabela 6 – Estrutura do arquivo 33 . . . . .	29
Tabela 7 – Estrutura de Multigrupo . . . . .	44
Tabela 8 – Seções de Choque dos Grupos 11 e 15 . . . . .	46
Tabela 9 – Diferenças percentuais entre Metodologias 2 e 3 para derivadas em 0K	54
Tabela 10 – Diferenças percentuais entre Metodologias 2 e 3 para derivadas em 293K	54
Tabela 11 – Partes 1, 2, e 3 da Equação 3.1 relativa aos parâmetros de ressonância a 0K . . . . .	55
Tabela 12 – Partes 1, 2, e 3 da Equação 3.1 relativa aos parâmetros de ressonância a 293K . . . . .	56
Tabela 13 – Consistência entre Metodologia 2 e 3 na Determinação de Derivadas para 0K . . . . .	57
Tabela 14 – Consistência entre Metodologia 2 e 3 na Determinação de Derivadas para 293K . . . . .	58
Tabela 15 – Derivadas para grupo 11 em 2sigma a 0K . . . . .	59
Tabela 16 – Derivadas para grupo 11 em 2sigma a 293K . . . . .	59
Tabela 17 – Derivadas $\frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j}$ 2sigma em Função Temperaturas no Grupo 11 . . . . .	60
Tabela 18 – Derivadas $\frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j}$ 2sigma em Função das Temperaturas no Grupo 15 . . . . .	60
Tabela 19 – Valores do Fator de Autoblindagem para Grupo 11 . . . . .	65
Tabela 20 – Valores do Fator de Autoblindagem para Grupo 15 . . . . .	66
Tabela 21 – Matriz de Covariância dos Parâmetros de Ressonância . . . . .	69
Tabela 22 – Componentes das Matrizes de Covariâncias no Grupo 11 . . . . .	70
Tabela 23 – Componentes das Matrizes de Covariâncias no Grupo 15 . . . . .	71
Tabela 24 – Matriz de Covariância com autoblindagem no Grupo 11 . . . . .	72
Tabela 25 – Matriz de Covariância com autoblindagem no Grupo 15 . . . . .	72
Tabela 26 – Matriz de Covariância com autoblindagem no Grupo 11-15 . . . . .	72
Tabela 27 – Comparação NJOY – Metodologia 3 (ROLAIDS) – Grupo 11 . . . . .	74
Tabela 28 – Covariância no Espectro Rolaidis do Grupo 11 Metodologia 1 . . . . .	75
Tabela 29 – Covariância no Espectro Rolaidis do Grupo 15 Metodologia 1 . . . . .	76
Tabela 30 – Covariância no Espectro Rolaidis do Grupo 11-15 Metodologia 1 . . . . .	77
Tabela 31 – Comparação NJOY – Metodologia 3 (ROLAIDS) – Grupo 11 . . . . .	79
Tabela 32 – Comparação NJOY – Metodologia 3 (ROLAIDS) – Grupo 15 . . . . .	80

Tabela 33 – Comparação NJOY – Metodologia 3 (ROLAIDS) – Grupos 11-15 . . .	81
Tabela 34 – Matriz de Covariância com Diluição Infinita no Grupo 11 . . . . .	82
Tabela 35 – Matriz de Covariância com Diluição Infinita no Grupo 15 . . . . .	82
Tabela 36 – Covariância com Diluição Infinita no Grupo 11 Calculada com Metodologia 1 ( NJOY). . . . .	84
Tabela 37 – Covariância com Diluição Infinita no Grupo 15 Calculada com Metodologia 1 ( NJOY). . . . .	85
Tabela 38 – Fator de Autoblindagem na Matriz de Covariância para Grupo 11 . . .	86
Tabela 39 – Fator de Autoblindagem na Matriz de Covariância para Grupo 15 . . .	86
Tabela 40 – Valores calculados com MCNP5 no grupo 11 . . . . .	87
Tabela 41 – Valores Calculados com MCNP5 no Grupo 15 . . . . .	88
Tabela 42 – Seção de choque média Captura do $^{238}\text{U}$ no grupo 11 . . . . .	88
Tabela 43 – Seção de Choque Média de Captura do $^{238}\text{U}$ no Grupo 15 . . . . .	89
Tabela 44 – Comparação dos resultados Obtidos por MCNP5 e ROLAIDS no Grupo 11 e Grupo 15 . . . . .	89
Tabela 45 – Comparação da Matriz de Covariância entre Metodologia 3 e Metodologia 4 . . . . .	90
Tabela 46 – $k_{eff}$ e Derivadas em relação a $\Gamma_n$ e $\Gamma_\gamma$ . . . . .	91
Tabela 47 – Matriz de Covariância do $k_{eff}$ e respectiva incerteza. . . . .	91

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>13</b>
1.1	Histórico sobre a Matriz de Covariância dos parâmetros de ressonância.	17
1.2	Objetivos da Tese	18
1.3	Justificativa e Aspectos de Originalidade	19
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b>	<b>20</b>
2.1	Dados Nucleares	20
2.1.1	Arquivo 2	23
2.1.2	Modelos de Ressonância	24
2.1.2.1	Modelo Breit-Wigner	24
2.1.2.2	Modelo Reich-Moore	25
2.1.2.3	Alargamento Doppler	26
2.1.3	Arquivo 3	26
2.1.4	Arquivos de Covariâncias 32 e 33	27
2.2	Teoria de Multigrupo	29
2.3	Propagação de Incertezas em Parâmetros Integrais de Reatores Nucleares	30
2.4	Fenômeno de Autoblindagem	32
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA PROPOSTA</b>	<b>35</b>
3.1	Descrição da Metodologia 1	36
3.2	Descrição da Metodologia 2	37
3.3	Descrição da Metodologia 3	40
3.4	Descrição da Metodologia 4	41
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E ANÁLISES</b>	<b>43</b>
4.1	Resultados da Metodologia NJOY/AMPX-II	43
4.2	Determinação Numérica das Derivadas $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$ e $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_l}$	47
4.3	Determinação Numérica das Derivadas $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$	53
4.4	O Fenômeno de Autoblindagem em $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_l}$	62
4.5	Matriz de Covariâncias no Formalismo de Multigrupo (File 33)	68
4.5.1	Comparação entre Metodologia 1 (NJOY) e Metodologia 2 e 3 (Tese)	73
4.5.2	Diluição Infinita na Matriz de Covariância	82
4.5.3	Fator de Autoblindagem na Matriz de Covariância	86
4.6	Metodologia 4: Utilização do MCNP5	87

4.6.1	Determinação Numérica das Derivadas $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$ via MCNP5 . . . . .	89
4.6.2	Matriz de Covariância via MCNP5 . . . . .	90
4.6.3	Ilustração da Determinação da Incerteza no $k_{eff}$ . . . . .	90
<b>5</b>	<b>CONCLUSÃO . . . . .</b>	<b>93</b>
<b>6</b>	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS . . . . .</b>	<b>95</b>
<b>7</b>	<b>ANEXOS . . . . .</b>	<b>100</b>

# 1 INTRODUÇÃO

As análises de reatores nucleares são processos que requerem um grande número de dados de entrada, incluindo os que caracterizam as interações nêutron-núcleo. A caracterização física e numérica das interações nêutron-núcleo são descritas em arquivos de dados nucleares denominados de ENDF (Evaluated Nuclear Data File) [1]. Cada dado nuclear contido nesses arquivos representa uma quantidade física bem definida e com magnitude definida, mas desconhecida. Consequentemente, os dados nucleares são geralmente conhecidos apenas com uma certa margem de certeza e a precisão desses dados depende do grau de sofisticação com que as medições e avaliações foram realizadas. A propagação das incertezas nos dados nucleares básicos nos parâmetros integrais de um reator nuclear está se tornando uma parte essencial da área física do reator bem como uma exigência em vários órgãos reguladores (veja por exemplo Seção 50.46 do US Code of Federal Regulation (CFR)). A incerteza nos dados nucleares básicos é completamente descrita por suas matrizes de covariância [2]. O desenvolvimento do módulo TSUNAMI [3] do sistema SCALE [3] e do MCNP-WHISPER[4] são bons exemplos de códigos que tratam dessa importante área. Particularmente, o MCNP-WHISPER usa perfis de sensibilidade e covariâncias de dados para selecionar problemas padrões semelhantes, determinar viés e correspondente incertezas e margem de subcriticalidade para definir o Limite Superior-Subcrítico. Neste contexto, a matriz de covariância dos dados nucleares básicos desempenha um papel importante na criação de margens de incerteza em vários parâmetros integrais de reatores nucleares, como as relacionadas à segurança contra a criticalidade nuclear.

De acordo com Smith [5,6] a covariância serve para comparar dois grupos de dados e verificar como estes dados se relacionam, de maneira mais simplificada, E uma medida estatística que avalia as alterações de uma variável em relação a variações de uma segunda variável. A covariâncias podem ser apresentar valores positivos ou negativos. Se a covariância for positiva significa que as duas variáveis tendem a variar na mesma direção Se a covariância for negativa significa que as duas variáveis tendem a variar em direções opostas. Caso o valor da covariância seja igual a zero, significa que as variáveis não são linearmente correlacionadas. Quanto mais próximo de zero for a covariância menor será a possibilidade de encontrar um comportamento de interdependência linear entre as duas variáveis.

As matrizes de covariância são organizadas em bibliotecas de dados nucleares avaliados. Essas por sua vez são as fontes de informações experimentais e de avaliações que reúnem todas as medidas realizadas em laboratórios de renome e avaliadas por especialistas do setor nuclear no âmbito internacional. Existem cinco bibliotecas de dados nucleares

avaliados: ENDF [7], JENDL [8], JEFF [9], CENDL [10], BROND [11]. Estas cinco bibliotecas contêm fontes de dados experimentais e metodologias de avaliação distintas. A única semelhança entre elas é o formato padrão da ENDF. Os dados nucleares avaliados são uma referência importante para a projeto de uma planta nuclear. Porém, os dados nucleares avaliados não são livres de incertezas haja visto que essas estão presentes em todos os processos experimentais e de avaliação. Com base nas bibliotecas disponíveis a única que contém para o desenvolvimento da tese foi a JENDL-3.3.

As matrizes de covariância dos parâmetros de ressonância resolvida disponíveis nos arquivos ENDF são obtidas pelo SAMMY [12]. Esse sistema é um conjunto de códigos utilizado extensivamente para analisar dados experimentais de seções de choque obtidas por meio da técnica de tempo de voo (time-of-flight) nas regiões de ressonância resolvida e não resolvidas. As equações de Bayes bem como o modelo da Matriz R em multilevel são utilizadas por esse sistema para ajustar os dados experimentais e com isso obter os parâmetros de ressonância resolvida bem como a matriz de covariância entre eles.

Reatores térmicos consistem na classe mais importante de reator nuclear atualmente em operação. Essa classe de reatores nucleares utiliza como combustível o  $\text{UO}_2$  com urânio levemente enriquecido em  $^{235}\text{U}$ . Entre os vários tipos de dados nucleares envolvidos em suas análises, os parâmetros de ressonância resolvidas dos núclídeos actinídeos (principalmente os do  $^{238}\text{U}$ ) são de fundamental importância. Particularmente nesta região de energia de nêutrons, os dados nucleares do núclídeo  $^{238}\text{U}$  desempenham um papel preponderante e este isótopo de urânio é o principal responsável pelo fenômeno da auto- blindagem devido a suas ressonâncias resolvidas. As análises do reator, mesmo atualmente, ainda dependem principalmente do formalismo de multigrupo, e um tema importante a ser tratado nas análises de incerteza é o tratamento da autoblindagem da matriz de covariância das seções de choque de multigrupo na região de ressonância resolvida. Esse tema ainda é um assunto aberto e apenas alguns autores abordaram esse importante fenômeno [13,14,15].

Esta tese tem como objetivo contribuir para o tema de autoblindagem da matriz de covariância no formalismo de multigrupo em reatores térmicos e apresentar uma abordagem numérica empregando o sistema acoplado NJOY/AMPX-II [16,17] desenvolvido no IPEN. O escopo principal será a análise da propagação das incertezas contidas nos parâmetros de ressonância resolvida nas seções de choque no formalismo de multigrupo. Segundo Leal [2], as matrizes de covariância contêm as incertezas dos dados nucleares básicos. As incertezas são oriundas das matrizes de covariância dos dados nucleares de interação de nêutrons com a matéria contidas nas bibliotecas de dados nucleares avaliados. As covariâncias estudadas referem-se aos parâmetros das ressonâncias e nas seções de choque definidas pela teoria de multigrupo. Os efeitos de autoblindagem devido a presença das ressonâncias nos núclídeos actinídeos ocorrem devido as depressões no fluxo de nêutrons na região de energia do nêutron onde as ressonâncias existem. A propagação dessas

incertezas nos parâmetros integrais é efetuada em duas etapas. Inicialmente propaga-se as incertezas contidas nos dados nucleares básicos nas seções de choque de multigrupo e a seguir essas incertezas são propagadas para os parâmetros integrais de reatores nucleares. Os arquivos ENDF contêm as matrizes de covariância sendo o arquivo 32 reservado a matriz de covariância dos parâmetros de ressonância resolvida e o arquivo 33 reservado a matriz de covariância no formalismo de multigrupo. O objetivo dessa tese será partir do arquivo 32 e estabelecer procedimentos levando em consideração efeitos de autoblindagem nas ressonâncias resolvidas e construir a o arquivo 33. Uma validação independente será efetuada comparando os resultados do método proposto com os resultados obtidos com o MCNP5. O reator IPEN/MB-01 [18] será utilizado para esse propósito devido as suas características de problema padrão internacional bem como tratar-se de um sistema térmico. Com exceção do  $^{238}\text{U}$ , todos os outros dados nucleares necessários a modelagem do reator IPEN/MB-01 serão originários da biblioteca de dados nucleares ENDF/B-VII.0 [19]. Os dados nucleares de  $^{238}\text{U}$  serão provenientes da biblioteca JENDL 3.3 porque esta biblioteca é a única disponível publicamente nos centros de dados nucleares como a IAEA-NDS que contém a matriz de covariância (arquivo 32) para os parâmetros de ressonância resolvida deste nuclídeo.

Os arquivos ENDF dos nuclídeos possuem uma quantidade imensa de ressonâncias resolvidas. Particularmente, o actínídeo mais importante no que concerne aos efeitos de autoblindagem na região epitérmica de energia do nêutron, o  $^{238}\text{U}$ , possui mais de 3000 ressonâncias resolvidas na ENDF/B-VII.0. Essa quantidade imensa de ressonâncias resolvidas seria intratável na metodologia proposta. Dessa forma, essa tese vai considerar somente a autoblindagem na matriz de ressonância de duas ressonâncias consideradas as mais importantes do  $^{238}\text{U}$  localizadas, respetivamente, nas energias 6,67 eV e 20,871 eV. Os limites dos grupos de energia que abrangem essas ressonâncias são, respetivamente, 6,4763 eV a 8,3012 eV e 17,60 eV a 22,60 eV. Estes dois grupos serão utilizados para determinar as matrizes de covariâncias do  $^{238}\text{U}$  relativas aos arquivo 33 da ENDF e na metodologia desenvolvida na tese.

A área de tecnologia nuclear conta com um software de uso restrito, denominado NJOY [16], para pré-processamento destes dados avaliados e obtenção das incertezas presentes nos arquivos de dados analisados. O NJOY por meio do modulo ERRORR gera dados de covariância das seções de choque formalismo de multigrupo. Por outro lado, os cálculos de parâmetros integrais neutrônicos utilizam coeficientes de sensibilidades de seções de choque autoblindada no formalismo de multigrupos em cálculos de quantificação de incertezas. Existem poucas pesquisas versando sobre o tema da tese, e dentre elas podemos citar Chiba [20] e Kawano [21]. Todos têm em comum o tratamento de autoblindagem em ressonâncias isoladas e nesse caso a autoblindagem nas ressonâncias é levada em consideração somente devido a depressão do fluxo de nêutrons devido à ressonância do actínídeo em consideração. Nenhum desses trabalhos considera a autoblindagem mútua

dos vários actínídeos constituintes de célula unitária e nem o efeito de incertezas no fluxo neutrônico devido às incertezas nos dados nucleares básicos. Outro detalhe importantíssimo em comum a todos esses trabalhos é o não tratamento do efeito indireto devido à contribuição do fluxo de nêutrons. Aplicação em benchmarks aprovados pelo ICSBEP (International Critically Safely Benchmark Evaluation Project) foram feitos por Leal e outros [22,23] e podem ser encontradas em trabalhos referenciados, porém, consideram o efeito de autoblindagem aproximado nas matrizes de covariância.

A seguir descreve-se cada capítulo que compõem este trabalho acadêmico.

O segundo capítulo apresenta a estrutura das bibliotecas de dados nucleares bem como as sessões que contemplam o foco desta pesquisa. Terminada a apresentação da estrutura das bibliotecas, será abordado os modelos de ressonância resolvida presentes nas bibliotecas de dados nucleares avaliados. Esses modelos seguem a estrutura e organização dos dados nucleares nos formatos de ENDF-B/VI [1]. O próximo tópico deste capítulo versa sobre formalismo de multigrupo usado como base de cálculo para a análise das ressonâncias mais importantes para o efeito de auto blindagem. Em geral os núclídeos actínídeos apresentam diversas ressonâncias resolvidas em sua estrutura. O formalismo de multigrupo facilita a análise dessas ressonâncias de maneira simples e objetiva. No tópico a seguir descreve-se o conceito de autoblindagem, pois é um efeito pouco considerado nas pesquisas recentes versando sobre matriz de covariância e é um aspecto importante na questão de projeto de um reator nuclear. Mais além será abordado a propagação de incertezas utilizando as matrizes de covariância dos parâmetros de ressonância no formalismo de multigrupo com efeitos de autoblindagem.

O terceiro capítulo descreve a metodologia de cálculo do programa NJOY para obter as covariâncias com o espectro de nêutrons obtido com o modulo ROLAIDS do AMPX-II. Além disso descreve-se a metodologia desenvolvida nesta tese para se obter as covariâncias levando em consideração os efeitos indiretos devidos a contribuição do fluxo autoblindado.

O quarto capítulo descreve a análise dos dados gerados pelas metodologias desenvolvidas na tese e a utilizada pelo modulo ERRORR do NJOY. Os dados serão comparados empregando duas bibliotecas distintas (ENDF-BVII.0 e JENDL- 3.3) e será analisado os efeitos da autoblindagem nas matrizes de covariâncias em três reações específicas (captura, elástico e total). Será efetuado a comparação dos valores gerados pelo NJOY e os valores gerados pela metodologia proposta na tese com objetivo de embasar nossos argumentos sobre a metodologia de propagação de incertezas nas seções de choque de multigrupo.

O quinto capítulo contém a conclusões do trabalho bem como sugestões para desenvolvimento futuro com o propósito de mostrar e provar que a metodologia utilizada pelo NJOY para cálculo de covariâncias nas seções de choque não é adequada para o uso em projetos de reatores nucleares tanto de pesquisa quanto de potência, pois os



efeitos indiretos da contribuição do fluxo de nêutrons no formalismo de multigrupo nas seções choque faz uma diferença substancial para o cálculo das matrizes de covariância no formalismo de multigrupo.

No sexto capítulo apresenta todas as referências que serviram de base para produção deste trabalho e que serviram de motivação para o desenvolvimento da pesquisa.

## 1.1 Histórico sobre a Matriz de Covariância dos parâmetros de ressonância.

Esta seção apresenta o estado da arte referente as incertezas dos parâmetros de ressonância bem como suas propagações na matriz de covariância no formalismo de multigrupo. O ênfase será devotado as bibliotecas ENDF/B e JENDL.

O marco inicial da inclusão das incertezas dos dados nucleares nos arquivos ENDF originou-se no final dos anos 60 com a biblioteca ENDF/B-IV [24] e teve como fato importante no final dos anos 70 com a publicação do ENDF/B-V [25]. Essa biblioteca adotou a estrutura organizacional das incertezas dos arquivos ENDF. Os dados de covariância foram divididos em três subseções (31, 32 e 33) com diferentes conteúdos. sobre as covariâncias referentes ao número médio de nêutrons por fissão, parâmetros de ressonância resolvida e seções de choque de multigrupo. As estruturas dos dados nucleares eram em relação aos arquivos do 31 (covariâncias de dados para número médio de nêutrons por fissão), 32 (covariâncias de dados para parâmetros de ressonância resolvida ) e 33 (covariâncias de dados para seções de choque de multigrupo). A ENDF/B-V teve seu uso limitado na tecnologia nuclear e somente alguns núclídeos tiveram seus dados nucleares liberados irrestritamente. Os dados destes arquivos não foram completamente publicados sobre todos os núclídeos de interesse para a engenharia nuclear. No mesmo período surgiu a biblioteca JENDL-1 [26] com um total de 72 núclídeos, mas sem os dados de covariâncias.

A década de 1980 apresentou avanços sobre os dados de covariância e sub-rotinas de interpretação destes dados [24]. No final desta década foram desenvolvidos inúmeros métodos para tratar as covariâncias das seções de choque. Os métodos variavam desde a avaliação dos dados experimentais até a aplicações dos métodos Monte Carlo para avaliar os dados de covariância. Foram feitas duas revisões no ENDF/B-V para adicionar novas informações e correções.

Na década de 1990 com o surgimento do ENDF/B-VI foram disponibilizados os arquivos 31 e 33 para as covariâncias do Urânio 238. Neste período não houve grandes avanços sobre os dados de covariâncias. No que se refere a arquivo 32 foram feitas sete revisões no ENDF/B-VI para adicionar novas informações e correções. Ainda nessa década, houve o desenvolvimento de estudos com o uso de softwares de métodos Monte Carlo, por

exemplo, MCNP-WHISPER [4] e o modulo TSUNAMI [3] do sistema SCALE.

Na década de 2000 houve o lançamento da ENDF/B-VII.0 [19] a qual apresentou como avanço algumas avaliações de covariância. O ENDF/B-VII teve somente duas revisões. O JENDL-3.3 [28] é lançado em 2002 contendo dados de covariâncias de alguns núclídeos, ou seja, informações sobre o arquivo 32 para alguns elementos de interesse da engenharia nuclear e 337 núclídeos presentes na biblioteca. Neste período foram desenvolvidos novos métodos de calcular as covariâncias usando formalismo de multigrupo [29,30] e o emprego de inúmeros métodos de Monte Carlo para utilizar as covariâncias em problemas reais de aplicação em projetos de reatores nucleares.

Na década de 2010 surgiram novas bibliotecas com informações mais detalhadas nas seções de covariâncias, destacando a ENDF/B-VIII [7] que apresentou dados de covariância de seções de choque em um grupo de específico. A JENDL-4 não disponibilizou publicamente dados de covariância nos arquivos 32 para os parâmetros de ressonância e apresentou o arquivo 33 para as diferentes seções de choque em uma estrutura de grupo arbitrária. Neste período houve o estudo das incertezas nos cálculos de projetos de núcleos de reatores com diferentes tipos de reatores, por exemplo, reatores térmicos, reatores de pesquisa e reatores de potência [31]. Durante toda a década foram desenvolvidos trabalhos com o uso do formalismo de multigrupo para o cálculo de covariâncias. Ao longo deste período não foi tratado de forma extensa os efeitos indiretos da autoblindagem no cálculo das covariâncias das seções de choque.

## 1.2 **Objetivos da Tese**

Os objetivos da tese são:

- a) Desenvolver um procedimento que leva em consideração a autoblindagem mútua dos núclídeos actinídeos na geração das matrizes de covariância no formalismo de multigrupos com os dados nucleares gerados com o NJOY [16];
- b) Implementar o espectro gerado pelo ROLAIDS no processamento de dados do NJOY e gerar as matrizes de covariância no formalismo de multigrupo;
- c) Incluir a contribuição do efeito indireto na propagação de incertezas na matriz de covariância no formalismo de multigrupo;
- d) Obter as matrizes de covariância e conseqüentemente a incerteza nas seções de choque de multigrupo da célula unitária do reator IPEN/MB-01 levando em consideração os itens (a) e (b).

### 1.3 **Justificativa e Aspectos de Originalidade**

A originalidade desta tese esta na investigação das matrizes de covariância em relação ao efeito da autoblindagem mutua presente na região de ressonância das seções de choque dos núclídeos actinídeos e o tratamento dos efeitos indiretos devido a perturbação do fluxo de nêutrons. A abordagem para a investigação científica será feita por meio de programas (softwares) de uso exclusivo da área nuclear, a exemplo, o NJOY [16] e o AMPX-II [17]. O impacto do trabalho é a propagação das incertezas presentes nas bibliotecas de dados nucleares avaliados levando em conta os efeitos indiretos do fluxo autoblindado. Estas incertezas servem de base para projeto de construção de reatores e dispositivos de aplicação nuclear e estabelecimento de margens de incerteza dos parâmetros neutrônicos devido a incerteza oriunda dos dados nucleares básicos. O trabalho de pesquisa se limitará a métodos exclusivamente numéricos ou computacionais.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1 Dados Nucleares

Dados nucleares são grandezas fundamentais para a área nuclear em geral e são armazenados nos arquivos ENDF disponíveis no site da IAEA e em vários outros como Brookhaven, Los Alamos, etc. O formato destes dados é padronizado pelo ENDF (Evaluated Nuclear Data File) [1]. Neste formato temos um conjunto de dados que descrevem as características nucleares de cada nuclídeo. Cada um desses conjuntos são identificados por um número (NLIB) e são organizados conforme Tabela 1.

Tabela 1 – Bibliotecas de Dados Nucleares de Acordo com NLIB.

NLIB	Definição da biblioteca
0	ENDF/B
1	ENDF/A
2	JEFF
5	CENDL
6	JENDL
21	SG-23
31	INDL/V
32	INDL/A
33	FENDL
34	IRDF
35	BROND
36	INGDB-90
37	FENDL/A

As bibliotecas que serão o foco do nosso estudo são ENDF/B e JENDL. Serão consideradas as versões particulares destas, que são ENDF/B - VII.0 [19] e JENDL - 3.3 [26] visto que ambas apresentam características importantes para o desenvolvimento da metodologia de cálculo propostas nessa tese. As bibliotecas apresentam estruturas internas, ou seja, sub-bibliotecas que sistematiza todas informações nucleares de um nuclídeo.

As sub-bibliotecas são relacionadas as partículas incidentes e tipos de dados. São organizadas em várias sub-bibliotecas que tem por finalidade facilitar a seleção a informação desejada para o estudo e simulação de propriedades nucleares em projetos de reator. Tabela 2 lista a relação de alguns tipos de sub-bibliotecas(NSUB).

Tabela 2 – Sub-bibliotecas

NSUB	Nome da Sub-biblioteca
0	Dados Foto-Nuclear
1	Rendimento do Produto de Fissão Induzido por Fótons
3	Dados de Interação Foto-atômica
4	Dados de Decaimento Radioativo
5	Rendimentos Espontâneos dos Produtos de Fissão
6	Dado de Relaxamento Atômico
10	Dados de Nêutrons Incidentes
11	Rendimentos dos Produtos de Fissão Induzido por Nêutrons
12	Dados de Espalhamento de Nêutrons Térmicos
113	Dados de Interação Eletro-atômica
10010	Dados de Prótons Incidentes

A sub-biblioteca considerada na tese refere-se a nêutrons incidentes, pois nesta são fornecidas todos os dados nucleares importantes para o projeto de reatores nucleares. Salienta-se que o reator nuclear considerado nesse trabalho é um sistema térmico que se utiliza da fissão nuclear induzida principalmente por nêutrons térmicos no interior do reator para gerar calor com o objetivo final de gerar energia elétrica.

Dada uma sub-biblioteca pode-se especificar o núcleo alvo ou nuclídeo radioativo através do material que é simbolizado por MAT. O MAT é o conjunto de identificadores que relacionam inúmeros elementos da tabela periódica bem como seus isotopos. De posse desta informação pode-se subdividi-la em outros blocos que serão denominados de arquivos ou "file". Este por sua vez é simbolizado no ENDF por MF. Dentro de cada MF existe outra subdivisão que será simbolizado, de acordo com ENDF, por MT. Cada MT representa uma reação ou produtos resultantes de uma reação. Tabela 3 mostra os identificadores MF.

Tabela 3 – Descrição dos arquivos (MF)

MF	Descrição
1	Informações gerais
2	Dados dos Parâmetros de Ressonância
3	Seções de Choque de Reações
4	Distribuição angular de partículas emitidas
5	Distribuição energética para partículas emitidas
6	Distribuições angulares de energia para partículas emitidas
7	Dados da lei de dispersão de nêutrons térmicos
8	Dados de produção de produtos de radioatividade e fissão
9	Multiplicidades de produção radioativa de nuclídeos
10	Seções choque de produção radioativa de nuclídeos
12	Multiplicidades de produção de fótons
13	Seções choque de produção de fótons
14	Distribuições angulares de produção de fótons
15	Distribuições energéticas de produção de fótons
23	Seções choque de interação foto ou eletro-atômica
26	Ângulo eletro-atômico e distribuição de energia
27	Fatores de forma atômica ou funções de dispersão para interações foto-atômicas
28	Dados de relaxamento atômico
30	Covariâncias de dados obtidas a partir de covariâncias de parâmetros e sensibilidades
31	Covariâncias de dados de nu(bar)
32	Covariâncias de dados de parâmetros de ressonância
33	Covariâncias de dados de seções choque de reação
34	Covariâncias de dados de distribuições angulares
35	Covariâncias de dados de distribuições energéticas
39	Covariâncias de dados de rendimentos de produção de radionuclídeos
40	Covariâncias de dados de seções choque de produção de radionuclídeos

Na tese serão considerados os seguintes arquivos MF:

- 2 - Dados dos Parâmetros de Ressonância
- 3 - Seções de Choque de Reações
- 32 - Covariâncias de dados de parâmetros de ressonância
- 33 - Covariâncias de dados de seções choque de reação

A subdivisão MF(arquivo) apresenta uma subdivisão interna denotada por MT, na qual recebe o nome de nomenclatura das reações. Existem um numero considerável de reações nucleares induzidas por nêutrons. Todos as reações possíveis de serem induzidas por nêutrons estão disponíveis no manual do ENDF. Os MT ou reações nucleares de importância para a tese são descritos na Tabela 4 como:

Tabela 4 – Reações (MT) Utilizadas na Tese

MT	Descrição
1	Seção de Choque Total
2	Seção de Choque Espalhamento Elástico
102	Seção de Choque de Captura Radioativa

### 2.1.1 Arquivo 2

O arquivo 2 [1] contém dados dos parâmetros de ressonância resolvida e não resolvida, tendo apenas uma seção cada. Os dados para os diversos isótopos são ordenados em valores crescentes de ZAI (número de designação para um isótopo). A notação ZAI representa o número atômico vezes mais o número de massa atômica vezes 1000 mais I (ou S). No que se refere aos dados de ressonância para cada isótopo os mesmos são divididos em várias faixas de energia de nêutrons incidentes em ordem crescente de energia.

O modelo de ressonância é descrito por um identificador denominado de LRF. O LRF pode assumir os seguintes valores para cada modelo de ressonância: A estrutura

Tabela 5 – Modelos de Ressonância

LRF	Modelo
1	Breit-Wigner [32]
2	Breit-Wigner multilevel [33,34]
3	Reich-Moore [35]
4	Adler-Adler [36]
5	Matriz-R [37]

do arquivo 2 é essencial para o funcionamento do arquivo 32, pois estes dois arquivos necessitam ter o mesmo modelo de ressonância para estarem presentes num dado nuclear avaliado.

Figura 1 descreve a estrutura organizacional do arquivo 2 para o modelo de ressonância Reich Moore (LRF=3):

Figura 1 – Estrutura do arquivo 2

<b>ER<sub>1</sub></b>	<b>AJ<sub>1</sub></b>	<b>GN<sub>1</sub></b>	<b>GG<sub>1</sub></b>	<b>GFA<sub>1</sub></b>	<b>GFB<sub>1</sub></b>	<b>MAT</b>	<b>2151</b>
<b>ER<sub>2</sub></b>	<b>AJ<sub>2</sub></b>	<b>GN<sub>2</sub></b>	<b>GG<sub>2</sub></b>	<b>GFA<sub>2</sub></b>	<b>GFB<sub>2</sub></b>	<b>MAT</b>	<b>2151</b>
.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.
<b>ER<sub>N</sub></b>	<b>AJ<sub>N</sub></b>	<b>GN<sub>N</sub></b>	<b>GG<sub>N</sub></b>	<b>GFA<sub>N</sub></b>	<b>GFB<sub>N</sub></b>	<b>MAT</b>	<b>2151</b>

Fonte: Do autor

Os elementos listados na Figura 1 correspondem respectivamente à energia de ressonância ( $E_0$ ), spin, largura do nêutron ( $\Gamma_n$ ), largura da captura ( $\Gamma_\gamma$ ), largura de primeira fissão parcial e largura de segunda fissão parcial. Essa estrutura é repetida até a enésima ressonância.

### 2.1.2 Modelos de Ressonância

Os modelos de ressonância resolvida considerados nesta tese são Bret-Wigner e Reich-Moore. Historicamente o modelo Breit Wigner foi o primeiro modelo nuclear para descrição física e analítica das ressonâncias resolvidas. O modelo Reich-Moore é mais sofisticado e mais preciso. Cada modelo oferece uma visão específica da ressonância do actínio em estudo, pois o Breit-Wigner apresenta a ressonância do ponto de vista de quatro parâmetros de ressonância e o Reich-Moore uma visão de seis parâmetros de ressonância e uma formulação analítica mais complexa.

#### 2.1.2.1 Modelo Breit-Wigner

O modelo Breit-Wigner é descrito pelas equações (2.1 e 2.2) descrevendo, respectivamente as seções de choque de captura radiativa ( $\sigma(n, \gamma)$ ) e de espalhamento elástico ( $\sigma(n, n)$ ). A seção de choque total é obtida como a soma das reações parciais (captura e elástica).

- Captura radiativa

$$\sigma_\gamma = \sum_l \sum_r \sigma_{mr} \frac{\Gamma_{\gamma r}}{\Gamma_r} \psi(\theta, x) \tag{2.1}$$

- Espalhamento elástico



$$\sigma_n = \sum_l \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \text{sen}^2 \theta_l + \sum_l \sum_r \sigma_{mr} \left\{ \cos 2\phi_l - \left(1 - \frac{\Gamma_{nr}}{\Gamma_r}\right) \psi(\theta, x) + \text{sen}(2\phi_l) \chi(\theta, x) \right\} \quad (2.2)$$

- Total

$$\sigma_t = \sigma_n + \sigma_\gamma + \dots \quad (2.3)$$

Os parâmetros que compõem as seções de choque são as larguras  $\Gamma$  total,  $\Gamma_n$  nêutron,  $\Gamma_f$  fissão e  $\Gamma_\gamma$  captura. O termo  $\sigma_{mr}$  é dado pela expressão

$$\sigma_{mr} = \frac{4\pi}{k^2} g_J \frac{\Gamma_{nr}}{\Gamma_r}, \quad (2.4)$$

onde  $g_J$  é o fator estatístico de spin, dado pela expressão

$$g_J = \frac{2J+1}{4I+2}, \quad (2.5)$$

onde  $k$  é número de onda do nêutron e  $I$  é o spin total. A variável  $\theta$  definida pela por:

$$\theta = \frac{\Gamma_r}{\sqrt{\frac{4k_B T E}{A}}} \quad (2.6)$$

onde  $A$  é a relação peso-atômico para do nêutron,  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura absoluta e  $E$  é a energia do nêutron.

Os termos  $\psi$ ,  $\chi$  e  $x$  são dados a zero graus Kelvin pelas seguintes relações, respectivamente

$$\psi = \frac{1}{1+x^2} \quad (2.7)$$

$$\chi = \frac{x}{1+x^2} \quad (2.8)$$

$$x = \frac{2(E - E'_r)}{\Gamma_r} \quad (2.9)$$

onde  $E_r$  é a energia de ressonância.

### 2.1.2.2 Modelo Reich-Moore

O modelo que descreve as seções de choque na região de ressonância resolvida para a família dos actínidos contidas no ENDF/B-VII.0 é dado pelo formalismo de Reich-Moore [16] descrito pelas equações (2.9 a 2.11).

$$\sigma_t = \frac{2\pi}{k^2} \sum_l \sum_J g_J \left\{ (1 - \text{Re}U_{nm}^{lJ}) + 2d_{lJ} [1 - \cos(2\phi_l)] \right\} \quad (2.10)$$

$$\sigma_n = \frac{\pi}{k^2} \sum_l \sum_J g_J \left\{ |1 - U_{nm}^{lJ}|^2 + 2d_{lJ}[1 - \cos(2\phi_l)] \right\} \quad (2.11)$$

$$\sigma_f = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l \sum_J g_J \sum_c |I_{nc}^{lJ}|^2 \quad (2.12)$$

$$\sigma_\gamma = \sigma_t - \sigma_n - \sigma_f \quad (2.13)$$

onde  $\sigma_t$ ,  $\sigma_n$ ,  $\sigma_f$ ,  $\sigma_\gamma$  são respectivamente as seções de choque total, elástica, de fissão e de captura.

A matriz de colisão  $U_{nm}^{lJ}$  e a matriz R  $R_{nc}^{lJ}$  são definidos por:

$$U_{nm}^{lJ} = e^{2i\phi_l} [2I_{nm} - 1] \quad (2.14)$$

$$R_{nc}^{lJ} = \delta_{nc} - \frac{i}{2} \sum_r \frac{\Gamma_{nc}^{1/2} \Gamma_{cr}^{1/2}}{E_0 - E - \frac{i}{2} \Gamma_{\gamma r}}, \quad (2.15)$$

onde  $I_{nc}^{lJ}$  representa o inverso da matriz R. Os parâmetros de ressonância são  $\Gamma_{nr}$ ,  $\Gamma_{\gamma r}$ ,  $\Gamma_{cr}$  e  $E_0$ , são definidos como largura do nêutron, largura de captura radioativa, largura de fissão e energia de ressonância. O índice r é referente a ressonância, c significa o canal de fissão (dois são permitidos).

A fenomenologia deste modelo está completamente descrita no artigo de Arbanas [35] publicado no ano de 2017.

### 2.1.2.3 Alargamento Doppler

O modelo do alargamento Doppler da seção de choque é dado pela expressão [16] :

$$\sigma_{broad}(v, T) = \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/2} v^{1/2}} \int_0^\infty dV \sigma(V) V^2 \left\{ e^{-\alpha(V-v)^2} - e^{-\alpha(V+v)^2} \right\}, \quad (2.16)$$

onde  $\alpha = M/(2k_B T)$ , T é a temperatura em graus Kelvin,  $k_B$  é constante de Boltzmann, M é a massa do núcleo alvo, V é a velocidade relativa do sistema de colisão e  $\sigma(V)$  é a seção de choque no formalismo de Reich Moore.

A velocidade relativa é representada pela equação

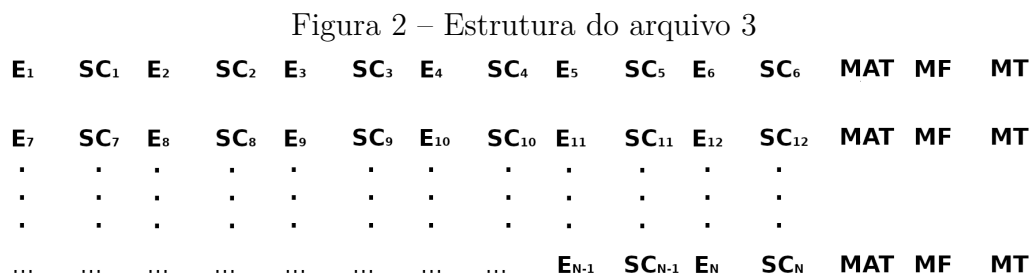
$$V = |v - v'| \quad (2.17)$$

onde  $v$  é velocidade da partícula incidente e  $v'$  é a velocidade do alvo.

### 2.1.3 Arquivo 3

O arquivo 3 [1] contém as seções de choque de “background” organizadas em funções da energia do nêutron no sistema de laboratório. Os dados são organizados como pares de energia e seção de choque. Na aplicação dessa tese serão consideradas somente as reações: reação total, reação de espalhamento elástico e reação de captura.

Figura 2 apresenta a estrutura organizacional do arquivo 3.



Fonte: Do autor

Na Figura 2 os símbolos E, SC representam, respectivamente a energia do nêutron, a seção de choque, apresentados em ordem de energia crescente da esquerda para direita. MAT, MF, e MT representam os símbolos definidos anteriormente.

### 2.1.4 Arquivos de Covariâncias 32 e 33

A matriz de covariância [6] disponível nos arquivos ENDF é uma matriz quadrada simétrica em relação a diagonal principal. Os elementos da matriz de covariância têm significados específicos, os elementos pertencentes a diagonal principal da matriz são as variâncias das grandezas envolvidas e o elementos fora da diagonal principal são as covariâncias entre todos os possíveis pares de variáveis mensuradas.

O arquivo 32 [1,38] contém as variâncias e covariâncias dos parâmetros de ressonância descritos no arquivo 2 do ENDF. Os parâmetros de ressonância são armazenados, especificando os parâmetros de cada isótopo no material. Os dados para os variados isótopos são ordenados por valores ZAI (número de designação para um isótopo). Os dados de ressonância para cada isótopo podem ser divididos em inúmeros intervalos de energia incidente de nêutrons, alocados em ordem crescente de energia.

Um fato importante é que algumas bibliotecas apresenta o arquivo 32 conforme o modelo de ressonância listado no arquivo 2, sendo assim temos algumas bibliotecas que não apresentam correlações entres as ressonâncias e modelos de ressonâncias divergentes para o mesmo nuclídeo.

Um caso prático desta situação é a biblioteca CENDL-2 para o urânio-238 que apresenta LRF (indicador de modelo de ressonância) correspondente ao modelo Breit-Wigner multinível e ausência de correlações entre as ressonâncias. Um segundo caso é a biblioteca TENDL para o urânio-238 que apresenta o RLF correspondente ao Reich-Moore e não contém as correlações entre as ressonâncias. Entretanto, a biblioteca TENDL é a única que apresenta a variança da energia de ressonância ( $E_0$ ). No caso da Biblioteca JENDL-3.3 temos o LRF correspondente ao Reich-Moore e contém as correlações entre todas as ressonâncias listas

no dado.

Portanto, diferentes bibliotecas podem conter diferentes informações sobre um mesmo núcleo e com base neste fato a biblioteca JENDL-3.3 é a mais adequada para desenvolvimento da tese.

Figura 3 apresenta a estrutura organizacional do arquivo 32. Os símbolos  $E_0$ ,  $G_n$  e  $G_g$  representam, respectivamente, a energia da ressonância, e as larguras de espalhamento e de captura.

Figura 3 – Estrutura do arquivo 32

		$R_1$			$R_2$			...	$R_{NRB}$		
		$E_0$	$G_N$	$G_G$	$E_0$	$G_N$	$G_G$	...	$E_0$	$G_N$	$G_G$
$R_1$	$E_0$	$COV(E_{01}, E_{01})$	$COV(E_{01}, G_{N1})$	$COV(E_{01}, G_{G1})$	$COV(E_{01}, E_{02})$	$COV(E_{01}, G_{N2})$	$COV(E_{01}, G_{G2})$	...	$COV(E_{01}, E_{0NRB})$	$COV(E_{01}, G_{NNRB})$	$COV(E_{01}, G_{GNRB})$
	$G_N$		$COV(G_{N1}, G_{N1})$	$COV(G_{N1}, G_{G1})$	$COV(G_{N1}, E_{02})$	$COV(G_{N1}, G_{N2})$	$COV(G_{N1}, G_{G2})$	...	$COV(G_{N1}, E_{0NRB})$	$COV(G_{N1}, G_{NNRB})$	$COV(G_{N1}, G_{GNRB})$
	$G_G$			$COV(G_{G1}, G_{G1})$	$COV(G_{G1}, E_{02})$	$COV(G_{G1}, G_{N2})$	$COV(G_{G1}, G_{G2})$	...	$COV(G_{G1}, E_{0NRB})$	$COV(G_{G1}, G_{NNRB})$	$COV(G_{G1}, G_{GNRB})$
$R_2$	$E_0$				$COV(E_{02}, E_{02})$	$COV(E_{02}, G_{N2})$	$COV(E_{02}, G_{G2})$	...	$COV(E_{02}, E_{0NRB})$	$COV(E_{02}, G_{NNRB})$	$COV(E_{02}, G_{GNRB})$
	$G_N$					$COV(G_{N2}, G_{N2})$	$COV(G_{N2}, G_{G2})$	...	$COV(G_{N2}, E_{0NRB})$	$COV(G_{N2}, G_{NNRB})$	$COV(G_{N2}, G_{GNRB})$
	$G_G$						$COV(G_{G2}, G_{G2})$	...	$COV(G_{G2}, E_{0NRB})$	$COV(G_{G2}, G_{NNRB})$	$COV(G_{G2}, G_{GNRB})$
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	
$R_{NRB}$	$E_0$								$COV(E_{0NRB}, E_{0NRB})$	$COV(E_{0NRB}, G_{NNRB})$	$COV(E_{0NRB}, G_{GNRB})$
	$G_N$									$COV(G_{NNRB}, G_{NNRB})$	$COV(G_{NNRB}, G_{GNRB})$
	$G_G$										$COV(G_{GNRB}, G_{GNRB})$

Fonte: Do autor

O arquivo 33 [1,38] contém as covariâncias das seções de choque no formalismo de multigrupo. Se destina a fornecer dados da incerteza nas seções de choque de multigrupo e suas correlações. O arquivo 33 possui os principais objetivos:

- a) Fornecer as variâncias das seções de choque de multigrupo;
- b) Fornecer as correlações entre as seções de choque dos vários grupos de energia;

O arquivo 33 é organizado conforme descrito na Tabela 5.

Tabela 6 – Estrutura do arquivo 33

		0.000000+0	0.000000+0	$ig_L$	$ig_F$	$ig_L$	$ig$
$ig$	$ig_p$	$ig_{p+0}$	$ig_{p+1}$	$ig_{p+2}$	$ig_{p+3}$	$ig_{p+4}$	$ig_{p+5}$
1	$ig_F$	$cov(ig, ig_{p+0})$	$cov(ig, ig_{p+1})$	$cov(ig, ig_{p+2})$	$cov(ig, ig_{p+3})$	$cov(ig, ig_{p+4})$	$cov(ig, ig_{p+5})$
1	$ig_{F+6}$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
1	$ig_{LL}$	$cov(ig, ig_{LL+0})$	$cov(ig, ig_{LL+1})$	$cov(ig, ig_{LL+2})$	$cov(ig, ig_{LL+3})$	$cov(ig, ig_{LL+4})$	$cov(ig, ig_{LL+5})$
2	$ig_F$	$cov(ig, ig_{p+0})$	$cov(ig, ig_{p+1})$	$cov(ig, ig_{p+2})$	$cov(ig, ig_{p+3})$	$cov(ig, ig_{p+4})$	$cov(ig, ig_{p+5})$
2	$ig_{F+6}$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
2	$ig_{LL}$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$ig_G$	$ig_F$	$cov(ig_G, ig_{G+0})$	$cov(ig_G, ig_{G+1})$	$cov(ig_G, ig_{G+2})$	$cov(ig_G, ig_{G+3})$	$cov(ig_G, ig_{G+4})$	$cov(ig_G, ig_{G+5})$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$ig_G$	$ig_{LL}$	$cov(ig_G, ig_{G+0})$	$cov(ig_G, ig_{G+1})$	$cov(ig_G, ig_{G+2})$	$cov(ig_G, ig_{G+3})$	$cov(ig_G, ig_{G+4})$	$cov(ig_G, ig_{G+5})$

Os dados presentes na estrutura do arquivo 33 são descrito como;  $cov$  representa matriz de covariância, os dois primeiros zeros na primeira linha são dados de preenchimento para contemplar o formato ENDF;  $ig$  representa um grupo genérico,  $ig_G$  representa o último grupo do arquivo, sendo G o numero total de grupos;  $ig_L$  representa o total de grupos que contém as incertezas das seções de choque;  $ig_F$  representa o primeiro grupo do arquivo 33;  $ig_{LL}$  representa a última linha que contém as incertezas com  $ig_{L+1} \leq ig_G$ ,  $i$  variando de 0 a 5;  $ig_p$  representa a relação de cada grupo de incertezas entre si.

## 2.2 Teoria de Multigrupo

O formalismo de multigrupo é extensivamente utilizado na área de física de reatores para resolver as equações de transporte e de difusão. Basicamente o Formalismo de Multigrupo considera as seguintes hipóteses: Considere que o domínio de energia do nêutron  $[0, E_{max}]$ , onde  $E_{max}$  representa a energia máxima, seja dividido numa série de subintervalos numerados de 1 a N, denominados de grupos de energia. N é o numero total de grupos. Define-se o grupo genérico g de nêutrons como o intervalo  $[E_g, E_{g+1}]$ . Os limites dos grupos  $E_1, E_2, \dots, E_{N-1}, E_N = 0$  estão em ordem decrescente de energia enquanto que

os grupos são numerados em ordem crescente. Aqui seguiu-se a convenção de definição dos grupos de energia do NJOY. Em cada um dos grupos energéticos, o transporte de nêutrons é tratado como se os nêutrons fossem mono-energéticos. As equações finais para o fluxo de nêutrons são acopladas, porque além das absorções reais no grupo em consideração existem taxas de transferências de nêutrons entre grupos. A seção de choque de multigrupo de uma reação genérica  $x$  [30], é definida por:

$$\sigma_{xg} = \frac{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \sigma_x(E) \phi(E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \phi(E) dE}, \quad (2.18)$$

onde assumiu-se um sistema infinito por simplicidade,  $\phi(E)$  representa o fluxo de nêutrons e  $\sigma_x(E)$  é seção de choque de reação nuclear genérica  $x$  ambos na energia  $E$ . O fluxo de nêutrons no grupo  $g$  é definido por:

$$\phi_g = \int_{E_g}^{E_{g+1}} \phi(E) dE. \quad (2.19)$$

## 2.3 Propagação de Incertezas em Parâmetros Integrais de Reatores Nucleares

Considere por simplicidade estado estacionário e meio infinito a temperatura  $T$  e um único nuclídeo. No desenvolvimento a seguir omitiu-se nas equações também por simplicidade a dependência explícita das seções de choque com a temperatura. Fica implícito que todo o desenvolvimento a seguir as grandezas envolvidas são consideradas na temperatura  $T$ .

O parâmetro integral  $R$  no formalismo de multigrupo pode ser definido como:

$$R = \sum_g \Sigma_{xg} \phi_g \quad (2.20)$$

onde  $\Sigma_{xg}$  representa a seção de choque macroscópica da reação nuclear  $x$  de um nuclídeo genérico no grupo  $g$ .

A incerteza no parâmetro integral  $R$  devido às incertezas nos dados nucleares é obtida por meio da formula de propagação de erros assumindo aproximação de primeira ordem como:

$$\delta R^2 = \sum_{gg'} \frac{\partial R}{\partial \Sigma_{xg}} \langle \delta \Sigma_{xg} \delta \Sigma_{xg'} \rangle \frac{\partial R}{\partial \Sigma_{xg'}}, \quad (2.21)$$

onde  $\langle \delta \Sigma_{xg} \delta \Sigma_{xg'} \rangle$  representa a matriz de covariância das seções de choque macroscópica no formalismo de multigrupo e  $g$  e  $g'$  representam dois grupos genéricos. Considerando um único isótopo, tem-se:

$$\delta R^2 = \sum_{gg'} \frac{\partial R}{\partial \sigma_{xg}} \langle \delta \sigma_{xg} \delta \sigma_{xg'} \rangle \frac{\partial R}{\partial \sigma_{xg'}}, \quad (2.22)$$

onde  $\langle \delta\sigma_{xg}\delta\sigma_{xg'} \rangle$  representa a matriz de covariância das seções de choque microscópicas no formalismo de multigrupo. Assumindo linearidade entre  $\delta\sigma_{xg}$  e  $\delta p_j$ , tanto para  $\delta\sigma_{xg'}$  e  $\delta p_k$  tem-se a seguinte equação para  $\langle \delta\sigma_{xg}\delta\sigma_{xg'} \rangle$ .

$$\langle \delta\sigma_{xg}\delta\sigma_{xg'} \rangle = \sum_{j,k} \frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j} \langle \delta p_j \delta p_k \rangle \frac{\partial\sigma_{xg'}}{\partial p_k}. \quad (2.23)$$

As quantidades  $\langle \delta p_j \delta p_k \rangle$  e  $\langle \delta\sigma_{xg}\delta\sigma_{xg'} \rangle$  correspondem, respectivamente, aos arquivos 32 e 33 do ENDF. A derivada  $\frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j}$  pode ser obtida utilizando equação (2.18). Considerando o caso do grupo  $g$ , do parâmetro de ressonância  $p_j$ , com  $\sigma_x(E)\phi(E)$  e  $\phi(E)$  sendo funções independentes entre si tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j} &= \int_{E_g}^{E_{g+1}} \frac{\frac{\partial\sigma_x(E)\phi(E)}{\partial p_j} \phi(E) - \sigma_x(E)\phi(E) \frac{\partial\phi(E)}{\partial p_j}}{\phi(E)^2} dE \\ \frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j} &= \int_{E_g}^{E_{g+1}} \frac{\frac{\partial\sigma_x(E)}{\partial p_j} \phi(E)}{\phi(E)} + \frac{\sigma_x(E) \frac{\partial\phi(E)}{\partial p_j}}{\phi(E)} - \frac{\sigma_x(E)\phi(E) \frac{\partial\phi(E)}{\partial p_j}}{\phi(E) \cdot \phi(E)} dE \\ \frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j} &= \frac{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \left[ \frac{\partial\sigma_x(E)}{\partial p_j} \phi(E) \right] dE}{\phi_g} + \frac{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \left[ \sigma_x(E) \frac{\partial\phi(E)}{\partial p_j} \right] dE}{\phi_g} - \frac{\sigma_{xg} \int_{E_g}^{E_{g+1}} \left[ \frac{\partial\phi(E)}{\partial p_j} \right] dE}{\phi_g} \end{aligned} \quad (2.24)$$

Nota-se  $\frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j}$  possui três termos. Defini-se partes 1, 2 e 3 como:

$$\text{Parte 1} = \frac{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \left[ \frac{\partial\sigma_x(E)}{\partial p_j} \phi(E) \right] dE}{\phi_g} \quad (2.25)$$

$$\text{Parte 2} = \frac{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \left[ \sigma_x(E) \frac{\partial\phi(E)}{\partial p_j} \right] dE}{\phi_g} \quad (2.26)$$

$$\text{Parte 3} = \frac{\sigma_{xg} \int_{E_g}^{E_{g+1}} \left[ \frac{\partial\phi(E)}{\partial p_j} \right] dE}{\phi_g} \quad (2.27)$$

A parte 1 é classificado como efeito direto; ou seja, a contribuição direta do parâmetro de ressonância  $p_j$  em  $\frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j}$ . Parte 2 e parte 3 são classificados como efeitos indiretos que são obtidos por meio da derivada do fluxo de nêutrons em relação ao parâmetro de ressonância  $p_j$ . Os efeitos indiretos são mais complicados de se obter devido a necessidade

de resolver a equação de transporte e se obter o fluxo de nêutrons e conseqüentemente sua derivada em relação a  $p_j$ .

Todos os trabalhos realizados no calculo da matriz de covariância consideram somente o primeiro termo da equação (2.24). O proposito principal dessa tese será considerar os efeitos indiretos e verificar os impactos destes em  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$ . O desenvolvimento a seguir considera somente o efeito direto para manter coerência com os demais trabalhos desenvolvidos nessa área. A inclusão dos efeitos indiretos pode ser considerada de maneira direta.

Equação (2.23) com auxílio da equação (2.24) pode ser escrita numa forma mais compacta como:

$$\begin{aligned} \langle \delta \sigma_{xg} \delta \sigma_{xg'} \rangle &= \frac{1}{\phi_g \phi_{g'}} \sum_{jk} \int_{E_g}^{E_{g+1}} \left[ \frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j} \phi(E) + \sigma_x(E) \frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j} - \frac{\sigma_x(E) \phi(E)}{\phi(E)} \frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j} \right] dE \\ \langle \delta p_j \delta p_k \rangle &\int_{E_{g'}}^{E_{g'+1}} \left[ \frac{\partial \sigma_x(E')}{\partial p_k} \phi(E') + \sigma_x(E') \frac{\partial \phi(E')}{\partial p_k} - \frac{\sigma_x(E') \phi(E')}{\phi(E')} \frac{\partial \phi(E')}{\partial p_k} \right] dE' \end{aligned} \quad (2.28)$$

A matriz de covariância dos parâmetros de ressonância  $\langle \delta p_j \delta p_k \rangle$  é fornecido no MF 32 da ENDF e é uma propriedade intrínseca do processo de avaliação desses dados nucleares. Conseqüentemente o problema de obter a matriz de covariância das seções de choque de multigrupo restringe-se em obter inicialmente  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  e as integrais  $\int \frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j} \phi(E) dE$  nos grupos  $g$  e  $g'$ .

Equação (2.28) pode ser escrita de maneira mais sintética como:

$$\langle \delta \sigma_{xg} \delta \sigma_{xg'} \rangle = \frac{1}{\phi_g \phi_{g'}} \int_{E_g}^{E_{g+1}} \int_{E_{g'}}^{E_{g'+1}} \phi(E) COV(\sigma) \phi(E') dE dE' \quad (2.29)$$

onde  $COV(\sigma)$  é dada por:

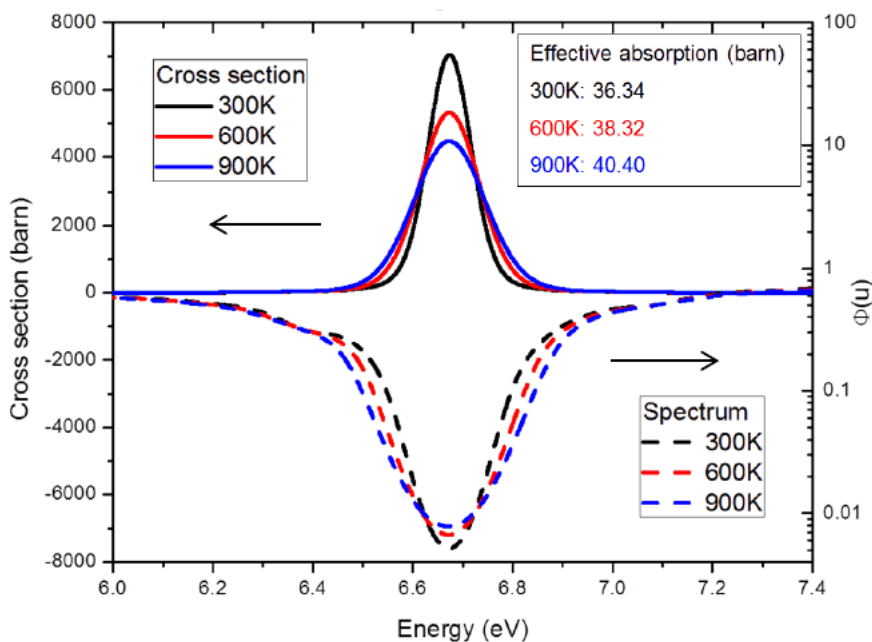
$$COV(\sigma) = \sum_{jk} \frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j} \langle \delta p_j \delta p_k \rangle \frac{\partial \sigma_x(E')}{\partial p_k} \quad (2.30)$$

## 2.4 Fenômeno de Autoblindagem

A autoblindagem [39,40,41] é o efeito da redução do fluxo de nêutrons nas vizinhanças das ressonâncias da seção de choque conforme mostrado na figura 4.



Figura 4 – Efeito da autoblindagem num nuclide genérico



Fonte: Nuclear Power[42]

Essa ocorrência é importante em reatores térmicos com combustível levemente enriquecido em  $^{235}\text{U}$ . Nesse caso, o actínídeo principal é o  $^{238}\text{U}$ , o qual exibe fortes ressonâncias na região epitérmica de energia do nêutron, além de sua concentração atômica ser bem superior à do  $^{235}\text{U}$ . O fenômeno de autoblindagem é mutuo, ou seja, a depressão do fluxo de nêutrons devido à ressonância de um determinado actínídeo, ( $^{238}\text{U}$  por exemplo), pode exercer o mesmo fenômeno em outro actínídeo, ( $^{235}\text{U}$  por exemplo), se esse possui uma ressonância próxima a do primeiro. Esse aspecto é denominado de interferência entre ressonância. Os métodos propostos por Chiba[20,42], para tratar do efeito de autoblindagem nas matrizes de covariância não contemplam esse efeito de interferência entre ressonâncias. A proposta desse trabalho considerará esse aspecto em detalhes bem como o efeito indireto na derivativa da seção de choque  $\sigma_{xg}(E)$  em relação aos parâmetros  $p_j$  e  $p_k$  dado pela equação (2.23).

Nesse ponto é interessante observar o seguinte aspecto. Na definição da seção de choque de multigrupo dada pela equação (2.18) a integral na energia é efetuada considerando o produto de duas grandezas positivas  $\sigma_x(E)$  e  $\phi(E)$ . Nesse caso a integral é sempre positiva. Agora por exemplo na integral  $\int \frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j} \phi(E) dE$ , a derivada  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  pode ser positiva, pode ser negativa bem como ter regiões de energia do nêutron parcialmente positivas e parcialmente negativas. De tal forma que a integral  $\int \frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j} \phi(E) dE$  pode ser negativa ou positiva dependendo do comportamento da derivada  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$ . Essa é uma característica interessante na determinação das matrizes de covariância no formalismo de multigrupo e adiciona um complicador na interpretação dos efeitos de autoblindagem na

matriz de covariância.

### 3 METODOLOGIA PROPOSTA

O escopo dessa tese considera dois aspectos importantíssimos para a determinação da matriz de covariância das seções de choque de multigrupo: o tratamento de autoblindagem mútua dos núclídeos actinídeos e a inclusão dos efeitos indiretos na determinação de  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$ .

O presente capítulo da tese apresenta quatro metodologias para o cálculo da matriz de covariância. Cada metodologia será descrita em cada seção deste capítulo.

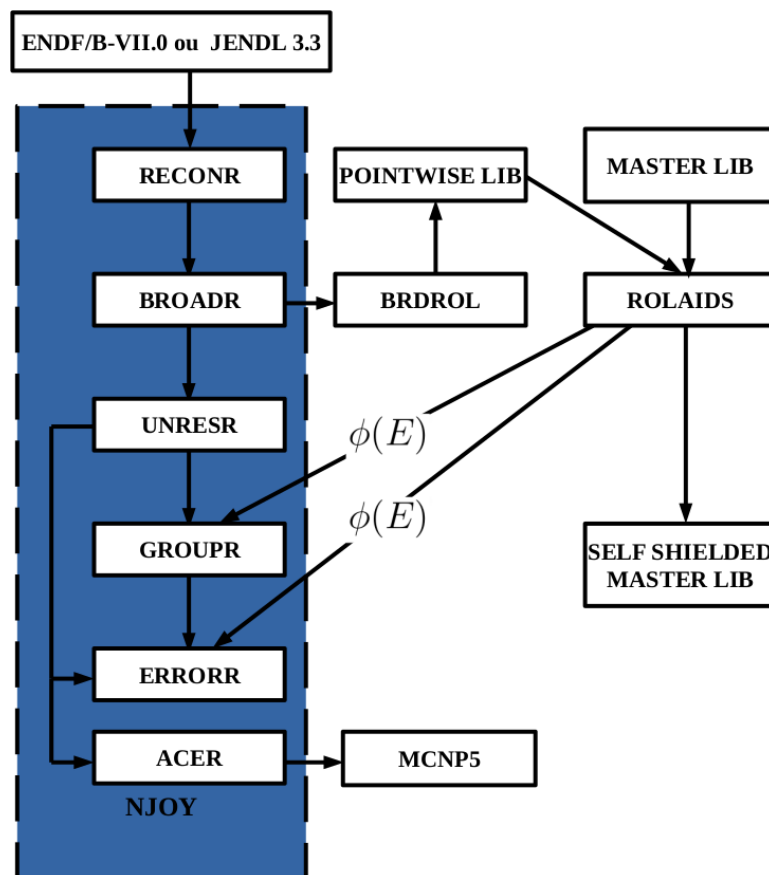
De acordo com Equação 2.23 o problema de se obter a matriz de covariância no formalismo de multigrupo restringe-se a determinação da derivada  $\frac{\partial \sigma_{xg}(E)}{\partial p_j}$ . Essa derivada é repetida aqui nesse capítulo com intuito de detalhar melhor a metodologia desenvolvida nessa tese.

$$\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j} = \underbrace{\frac{1}{\phi_g} \int_{E_g}^{E_{g+1}} \left( \frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j} \right) \phi(E) dE}_{\text{Efeito direto}} + \underbrace{\frac{1}{\phi_g} \int_{E_g}^{E_{g+1}} \sigma_x(E) \left( \frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j} \right) dE - \frac{1}{\phi_g} \sigma_{xg} \int_{E_g}^{E_{g+1}} \left( \frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j} \right) dE}_{\text{Efeito indireto}} \quad (3.1)$$

A obtenção de  $\frac{\partial \sigma_{xg}(E)}{\partial p_j}$  envolve inicialmente as determinações das derivadas  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  e  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$  e efetuar as integrais envolvendo essas derivadas em 3.1.  $\sigma_x(E)$  possui dependência explícita na energia do nêutron, na temperatura e nos parâmetros de ressonância conforme exposto na Equação 2.16. A derivada  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  poderia ser obtida por meio da Equação 2.24, mas isso envolveria um imenso trabalho analítico devido a complexidade do formalismo de Reich-Moore e numérico ao efetuar as integrais envolvidas na equação 2.24.  $\phi(E)$  é obtido por meio da solução da equação de transporte de nêutrons cuja solução requer o conhecimento de  $\sigma_x(E)$  como requisito prévio. Conseqüentemente  $\phi(E)$  possui dependência implícita na energia do nêutron ( $E$ ), na temperatura ( $T$ ) e nos parâmetros de ressonância ( $p_j$ ) através da seção de choque  $\sigma_x(E)$ . Devido a essas dificuldades as derivadas  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  e  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$  têm que ser necessariamente obtidas por processos numéricos.

A metodologia proposta nesta tese é mostrado na Figura 5 e representa os dois sistemas de processamento de dados nucleares, NJOY [16] e AMPX-II [17], mais utilizados no processamento de dados nucleares da área nuclear. Esse acoplamento denominado de sistema acoplado NJOY/AMPX-II foi elaborado no IPEN a alguns anos atrás e vem sendo utilizado frequentemente em várias pesquisas de física reatores do IPEN. Os módulos de acoplamento são denominados de BRDROL e AMPXR, este último não mostrado na Figura 5.

Figura 5 – Metodologia Geral da Tese



Fonte: Do autor

### 3.1 Descrição da Metodologia 1

A primeira metodologia consiste na execução das rotinas do NJOY que são descritas a seguir.

O módulo BRDROL lê o arquivo PENDF (Pointwise Evaluated Nuclear Data File) gerada pelo módulo BROADR do NJOY e escreve esses dados no formato de biblioteca de seções de choque pontuais do módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II. O módulo AMPXR lê o arquivo GENDF (Groupwise Evaluated Nuclear data File) gerado pelo módulo GROUPE e escreve esses dados no formato da biblioteca master do sistema AMPX-II. A biblioteca denominada de MASTER LIB possui 55 grupos de energia e foi gerada pelo NJOY e formatada pelo AMPXR. A razão de 55 grupos ficará melhor entendida no Capítulo 4. O processamento começa com o sistema NJOY o qual acessa os arquivos ENDF e gera seções de choque pontuais em função da energia do nêutron e da temperatura. O módulo RECONR reconstrói as seções de choque a 0K com interpolação linear em dois pontos consecutivos. O módulo BROADR realiza o alargamento Doppler na temperatura desejada, o módulo UNRESR corrige as seções de choque na região de ressonâncias não-resolvidas, A seguir, as seções de choque geradas pelo BROADR são transferidas para o

programa BRDROL o qual transforma esses dados na formatação exigida pelo ROLAIDS. O ROLAIDS resolve a equação integral de transporte por meio do método de probabilidade de colisão com energias do nêutron pontuais na região epitérmica de energia do nêutron. Os dados geométricos e de composição atômica dos vários constituintes da célula unitária do reator IPEN/MB-01 são fornecidos para esse módulo do AMPX-II. Como resultado da execução do modulo ROLAIDS obtém-se o espectro de nêutrons nessa região de energia do nêutron para considerar a autoblindagem mútua de ressonâncias nos núclídeos actinídeos na determinação das seções de choque e matrizes de covariância, ambas no formalismo de multigrupo. O ROLAIDS complementa o espectro epitérmico adicionando um espectro maxwelliano na região térmica e o espectro de fissão na região rápida. Além disso pondera as seções de choque pontuais utilizando o fluxo obtido com a solução da equação de transporte utilizando Equação 8. As seções de choque no formalismo de multigrupo assim obtidas são autoblindadas com o espectro típico da célula combustível. O intervalo de energia escolhido compreende de 0,625 eV até 5,53 keV onde predomina as ressonâncias do núclídeo  $^{238}\text{U}$ . Aqui se obtém o espectro de nêutrons para considerar a autoblindagem mútua das ressonâncias dos núclídeos actinídeos na determinação da matriz de covariância. A seguir o espectro de nêutrons obtido pelo ROLAIDS é transferido para os módulos GROUPE e ERRORR. Esses dois módulos do NJOY são utilizados, respectivamente, para calcular as seções de choque e a matriz de covariância ambas no formalismo de multigrupo ponderadas com o espectro calculado pelo ROLAIDS. Convém salientar que as matrizes de covariância na metodologia de calculo da Figura 5 são as produzida pela metodologia do modulo ERRORR do NJOY, a qual não contempla os efeitos indiretos da perturbação do fluxo de nêutrons. A proposta desta tese contempla todos os efeitos direto e indireto os na determinação da matrizes de covariância.

Como resultado final da metodologia de calculo mostrada na Figura 5 tem-se conjuntos de seções de choque pontuais (arquivo PENDF), seções de choque em 55 grupos geradas pelo GROUPE (arquivo GENDF) e ROLAIDS, matriz de covariância gerada pelo ERRORR também em 55 grupos e espectro de ponderação gerada pelo ROLAIDS. Os arquivos que serão de extrema importância para a metodologia proposta nessa tese são: seções de choque pontuais, seções de choque em 55 grupos e espectro de ponderação. Esses arquivos serão importantes para a determinação das derivadas  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  e  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$  conforme definidas previamente.

## 3.2 Descrição da Metodologia 2

A metodologia proposta nessa tese considera um procedimento totalmente numérico e se apoiara no sistema acoplado NJOY/AMPX-II [16,17] desenvolvido no IPEN. A seção de choque  $\sigma_x(E)$  na temperatura  $T$  será obtida com o NJOY 2016 [16] e  $\phi(E)$  com o modulo ROLAIDS do sistema AMPX-II [17]. ROLAIDS resolve a equação integral de

transporte de nêutrons na célula unitária do reator em análise assumindo correção de transporte na região de ressonância resolvida a partir da biblioteca de seções de choque pontuais proveniente do NJOY. A célula unitária utilizada pelo ROLAIDS será proveniente do reator IPEN/MB-01 por se tratar de um benchmark internacional. A descrição dos materiais que compõem a célula unitária e sua descrição geométrica do reator IPEN/MB-01 são extremamente detalhadas na Ref. [18]. Inicialmente essas duas grandezas ( $\sigma_x(E)$  e  $\phi(E)$ ) serão obtidas com os parâmetros de ressonância nominais. Esse caso será considerado como referência. A seguir pequenas perturbações (+sigma ou -sigma) serão efetuadas nos parâmetros de ressonância (uma ressonância e um parâmetro por vez) com a simultânea determinação das grandezas ( $\sigma_x(E)$  e  $\phi(E)$ ) as quais serão consideradas perturbadas. A derivada  $\frac{\partial\sigma_x(E)}{\partial p_j}$  será obtida para as perturbações +sigma, -sigma e 2sigma como:

$$\frac{\partial\sigma_x^+(E)}{\partial p_j} = \frac{\sigma_x^+(E) - \sigma_x^{Ref}(E)}{p_j^+ - p_j^{Ref}} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial\sigma_x^-(E)}{\partial p_j} = \frac{\sigma_x^{Ref}(E) - \sigma_x^-(E)}{p_j^{Ref} - p_j^-} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial\sigma_x^{2\sigma}(E)}{\partial p_j} = \frac{\sigma_x^+(E) - \sigma_x^-(E)}{p_j^+ - p_j^-} \quad (3.4)$$

onde os sobrescritos +, -,  $2\sigma$ , e Ref representam, respectivamente as perturbações +sigma, -sigma, 2sigma e o caso referência. Equações similares são definidas para o caso da derivada  $\frac{\partial\phi(E)}{\partial p_j}$ .

A derivada  $\frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j}$  será obtida por meio de dois procedimentos distintos, mas ao mesmo consistentes. O primeiro procedimento envolve Equação 3.1 a partir da determinação das derivadas  $\frac{\partial\sigma_x(E)}{\partial p_j}$  e  $\frac{\partial\phi(E)}{\partial p_j}$  sendo as outras grandezas dessa equação ( $\sigma_{xg}$  e  $\phi_g$ ) referem-se ao caso referência. As integrais envolvidas nessa equação serão efetuadas utilizando a regra do trapézio. Programas em FORTRAN foram especialmente elaborados para obter as derivadas  $\frac{\partial\sigma_x(E)}{\partial p_j}$  e  $\frac{\partial\phi(E)}{\partial p_j}$  e as integrais em 3.1.

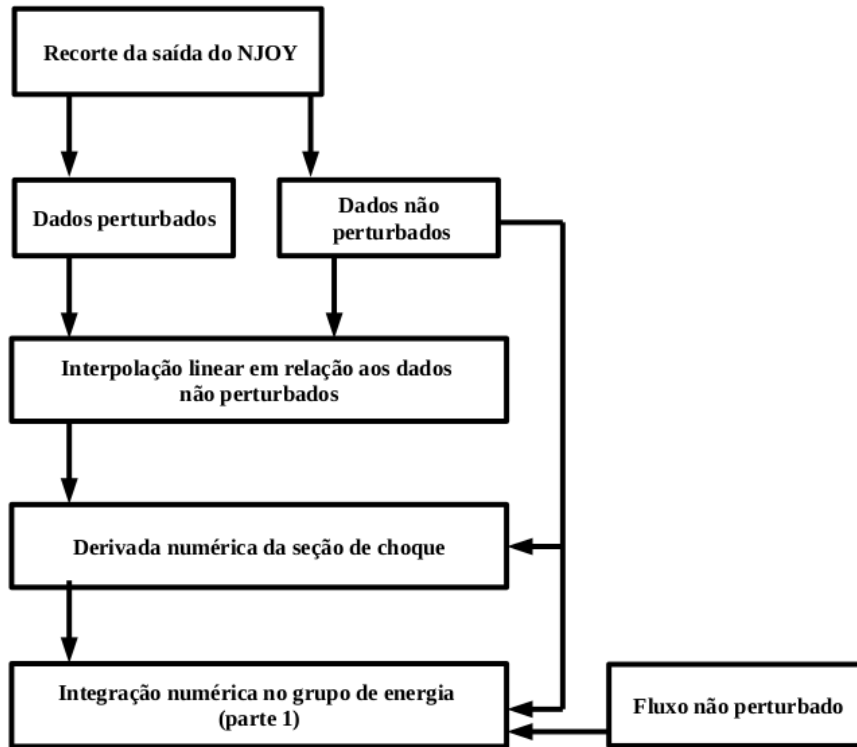
As derivativas das seções de choque em relação aos parâmetros de ressonância  $p_j$  e  $p_k$  no modelo Reich-Moore (RM) foram obtidas por métodos numéricos conforme descrito previamente. Figura 6 ilustra o procedimento de obtenção de  $\frac{\partial\sigma_x(E)}{\partial p_j}$ .

Basicamente, considerou-se a metodologia de calculo descrita na Figura 5 e executou-se sequencialmente numa determinada temperatura o NJOY para todos os núclídeos constituintes da célula unitária do reator IPEN/MB-01 e a seguir executou-se o modulo BRDROL para montar a biblioteca do ROLAIDS. Esse modulo do AMPX-II foi executado para obter-se seções de choque de multigrupo autoblindadas e o espectro de nêutrons. Esse caso é denominado de referência. A seguir considera-se somente o  $^{238}\text{U}$  e elege-se um ressonância em particular e perturba-se um parâmetro de ressonância específico ( $\Gamma_n$ ,  $\Gamma_\gamma$  ou  $E_0$ ) por um determinado valor e reexecuta-se o NJOY. Esse caso é denominado de

perturbado. Após a obtenção das seções de choque linearizadas é feita uma interpolação dos casos perturbados no mesh de energia do caso não perturbado com a finalidade de obter um mesh único de energia. A seguir efetua-se a diferença das seções de choque entre o caso perturbado e o não perturbado, e divide-se pela variação do parâmetro de ressonância considerado. O resultado dessa operação é  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$ . Essas operações foram efetuadas individualmente para as ressonâncias consideradas na tese e para todos os parâmetros de ressonância.

O procedimento para obtenção de  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$  é ilustrado na Figure 6. O procedimento basicamente é o mesmo considerado na determinação das derivadas das seções de choque em relação ao parâmetro de ressonância. Agora a grandeza considerada é o fluxo de nêutrons calculado pelo ROLAIDS que é executado para o caso referência e para cada perturbação no parâmetro de ressonância do  $^{238}\text{U}$  considerada previamente. A seguir efetua-se a diferença do fluxo de nêutrons entre o caso perturbado e o não perturbado, e divide-se pela variação do parâmetro de ressonância considerado. O resultado dessa operação é  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$ . Essas operações foram efetuadas individualmente para as ressonâncias consideradas e para todos os parâmetros de ressonância.

Figura 6 – Metodologia de Cálculo (parte 1)



Fonte: Do autor

Várias perturbações foram consideradas nesse trabalho bem como várias temperaturas. O valor da perturbação escolhido em definitivo para a obtenção dos dados da tese foi de 0,0625% e as temperaturas em estudo foram 0K, 293K, 600K, 900K e 1200K.

Conforme exposto anteriormente a derivada  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$  será obtida de duas formas distintas. A primeira forma será substituir as derivadas  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  e  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$  na Equação 3.1 e efetuar as integrais envolvidas com a regra do trapézio. As parte 1, 2, e 3 da derivada  $\frac{d\sigma_{xg}}{dp_j}$  são imediatamente obtidas nesse processo.

Consequentemente a matriz de covariância no formalismo de multigrupo é obtida por meio da Equação 2.21:

$$\langle \delta \sigma_{xg} \delta \sigma_{xg'} \rangle = \sum_{j,k} \frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j} \langle \delta p_j \delta p_k \rangle \frac{\partial \sigma_{xg'}}{\partial p_k} \quad (3.5)$$

onde os símbolos têm o mesmo significado como anteriormente.

### 3.3 Descrição da Metodologia 3

O Terceiro procedimento se baseia na utilização das seções de choque no formalismo de multigrupo obtidas ou pelo NJOY ou pelo ROLAIDS. O procedimento é descrito de forma geral pela figura 5. A derivada  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  será obtida para as perturbações +sigma,



-sigma e 2sigma como:

$$\frac{\partial \sigma_{xg}^+}{\partial p_j} = \frac{\sigma_{xg}^+ - \sigma_{xg}^{Ref}}{p_j^+ - p_j^{Ref}} \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial \sigma_{xg}^-}{\partial p_j} = \frac{\sigma_{xg}^{Ref} - \sigma_{xg}^-}{p_j^{Ref} - p_j^-} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial \sigma_{xg}^{2\sigma}}{\partial p_j} = \frac{\sigma_{xg}^+ - \sigma_{xg}^-}{p_j^+ - p_j^-} \quad (3.8)$$

onde os sobrescritos +, -, 2 $\sigma$ , e Ref representam, respectivamente as perturbações +sigma, -sigma, 2sigma e o caso referência. Equações similares são definidas para o caso da derivada  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$ .

Os procedimentos são equivalentes e complementares sendo que uma maneira de verificar os procedimentos numéricos envolvidos é na consistência dos resultados obtidos individualmente.

Várias perturbações foram consideradas nesta tese bem como várias temperaturas. O valor da perturbação escolhido em definitivo para a obtenção dos dados da tese foi de 0, 0625% e as temperaturas em estudo foram 0K, 293K, 600K, 900K e 1200K.

Consequentemente a matriz de covariância no formalismo de multigrupo é obtida por meio da Equação 2.21:

$$\langle \delta \sigma_{xg} \delta \sigma_{xg'} \rangle = \sum_{j,k} \frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j} \langle \delta p_j \delta p_k \rangle \frac{\partial \sigma_{xg'}}{\partial p_k} \quad (3.9)$$

onde os símbolos têm o mesmo significado como anteriormente.

### 3.4 Descrição da Metodologia 4

A quarta metodologia consistem em utilizar o processamento do NJOY em algumas rotinas a apresentadas na figura 5. Foi utilizado as seguintes rotinas para esta metodologia: RECONR, BROADR, UNRESR e ACER. As rotinas listadas já foram descritas anteriormente na metodologia 1, exceto a rotina ACER que é responsável por elaborar as bibliotecas de seções de choque para o uso do MCNP5.

A modelagem do núcleo do reator IPEN/MB-01 considerada pelo MCNP5 [16] baseou-se no modelo tridimensional descrito na Ref. [18]. Nesse modelo considerou-se a modelagem das varetas combustíveis, dos tubos guias bem como das varetas de controle, a placa matriz, e o moderador e refletor de água leve. As barras de controle foram posicionadas todas alinhadas na posição axial de criticalidade. A temperatura considerada foi de 293K. Nessa simulação, a derivada foi calculada para toda a região de combustível UO<sub>2</sub>. Foram solicitados os tallies para as taxas de reação de captura  $\sigma_\gamma$  e espalhamento elástico  $\sigma_n$  e para o fluxo de nêutrons; tanto para o grupo11 quanto para o grupo 15. As

seções de choque (captura e elástica) nesses dois grupos foram obtidas como a razão dos respectivos tallies das taxas de reação e do fluxo de nêutrons. As simulações efetuadas pelo MCNP5 consideraram como antes as perturbações +sigma e -sigma nos parâmetros de ressonância, mas neste caso as perturbações consideradas foram de 1%. A derivada  $\frac{\partial \sigma_\gamma}{\partial \Gamma_\gamma}$  foi calculado como sendo  $(\sigma_\gamma^+ - \sigma_\gamma^-)/(2\Delta\Gamma_\gamma)$ . A derivada  $\frac{\partial \sigma_n}{\partial \Gamma_n}$  foi obtida de maneira análoga.

Exceção feita aos dados nucleares do  $^{238}\text{U}$ , todos os demais provieram da biblioteca ENDF/B VII.0 já existente no MCNP5. Os dados nucleares do  $^{238}\text{U}$  provieram da JENDL 3.3 e a correspondente geração da biblioteca para o MCNP5 foi realizada com o sistema NJOY seguindo a metodologia mostrada na Figura 5 para os casos +sigma e -sigma.

Para haver compatibilidade entre as metodologias do MCNP5 e ROLAIDS, calculou-se a seção de choque média do  $^{238}\text{U}$  na região combustível da célula unitária do reator IPEN/MB-01 como:

$$\bar{\sigma} = \frac{\sum_{i=1}^{10} (\sigma_{\gamma_i} \phi_i V_i)}{\sum_{i=1}^{10} \phi_i V_i} \quad (3.10)$$

Com os valores das seções de choque para +sigma e -sigma foi possível calcular as seguintes derivadas:

$$\frac{\partial \sigma_\gamma}{\partial \Gamma_\gamma} = \frac{\sigma_\gamma^+ - \sigma_\gamma^-}{2\Delta\Gamma_\gamma} \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial \sigma_n}{\partial \Gamma_n} = \frac{\sigma_n^+ - \sigma_n^-}{2\Delta\Gamma_n} \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial \sigma_\gamma}{\partial \Gamma_n} = \frac{\sigma_\gamma^+ - \sigma_\gamma^-}{2\Delta\Gamma_n} \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial \sigma_n}{\partial \Gamma_\gamma} = \frac{\sigma_n^+ - \sigma_n^-}{2\Delta\Gamma_\gamma} \quad (3.14)$$

Com os valores obtidos das equações 3.11 a 3.14 usa-se a equação 3.9 para determinar as covariâncias nos grupos 11 e 15 para as reações de espalhamento elástico e captura radioativa.

O uso do MCNP5 é para calcular o  $k_{eff}$ , ou seja, o fator de multiplicação de nêutrons em modelo computacional já avaliado ou validado (Benchmark). Com os valores do  $k_{eff}$  perturbados +sigma, -sigma e 2 sigma pode-se fazer uma ilustração da incerteza no  $k_{eff}$  para os grupos de energia.

## 4 RESULTADOS E ANALISES

Os resultados obtidos nessa tese são mostrados nesse capítulo. As bibliotecas de dados nucleares utilizados nas várias análises e desenvolvimentos foram provenientes da ENDF/B-VII.0 e JENDL 3.3. A ENDF/B-VII.0 serviu para como fonte de dados nucleares para gerar a biblioteca do modulo ROLAIDS do sistema AMPX-II contendo todos os núclídeos que compõem a célula unitária do reator IPEN/MB-01. A JENDL 3.3 serviu como fonte de dados nucleares da matriz de covariância dos parâmetros de ressonância. Essa biblioteca é a única disponível nos bancos de dados nucleares públicos como o da IAEA-NSD que contém o arquivo 32. Consequentemente, todas as matrizes de covariância no formalismo de multigrupo geradas nessa tese utilizaram o arquivo 32 da JENDL 3.3. O arquivo 32 dessa biblioteca possui matriz de covariância dos parâmetros de ressonância para 26 ressonâncias resolvidas para os parâmetros  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$ . A covariância desses dois parâmetros com a energia de ressonância ( $E_0$ ) não foi considerada. Esse capítulo apresenta as matrizes de covariância no formalismo de multigrupo considerando somente as covariâncias dos parâmetros de ressonância  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$ .

### 4.1 Resultados da Metodologia NJOY/AMPX-II

O sistema NJOY bem o modulo ROLAIDS do sistema AMPX-II foram extensivamente utilizados na tese de doutorado. Considerou-se uma estrutura epitérmica de 55 grupos de energia conforme mostrado na Tabela 7. Essa estrutura de multigrupo é padrão em vários códigos celulares como o HAMMER-TECHNION [44].

Tabela 7 – Estrutura de Multigrupo

Grupo	Intervalo(eV)	Grupo	Intervalo(eV)
1	$5,119.10^{-1} - 6,25.10^{-1}$	28	$1,234.10^3 - 2,035.10^3$
2	$6,25.10^{-1} - 8,34.10^{-1}$	29	$2,035.10^3 - 3,355.10^3$
3	$8,34.10^{-1} - 1,125$	30	$3,355.10^3 - 5,531.10^3$
4	$1,125 - 1,439$	31	$5,531.10^3 - 9,11.10^3$
5	$1,439 - 1,855$	32	$9,11.10^3 - 1,503.10^4$
6	$1,855 - 2,382$	33	$1,503.10^4 - 2,479.10^4$
7	$2,382 - 3,059$	34	$2,479.10^4 - 4,087.10^4$
8	$3,059 - 3,928$	35	$4,087.10^4 - 6,738.10^4$
9	$3,928 - 5,043$	36	$6,738.10^4 - 8,652.10^4$
10	$5,043 - 6,4763$	37	$8,652.10^4 - 1,111.10^5$
11	$6,4763 - 8,3012$	38	$1,111.10^5 - 1,426.10^5$
12	$8,3012 - 1,068.10^1$	39	$1,426.10^5 - 1,832.10^5$
13	$1,068.10^1 - 1,371.10^1$	40	$1,832.10^5 - 2,352.10^5$
14	$1,371.10^1 - 1,76.10^1$	41	$2,352.10^5 - 3,02.10^5$
15	$1,76.10^1 - 2,26.10^1$	42	$3,02.10^5 - 3,877.10^5$
16	$2,26.10^1 - 2,902.10^1$	43	$3,877.10^5 - 4,979.10^5$
17	$2,902.10^1 - 3,727.10^1$	44	$4,979.10^5 - 6,393.10^5$
18	$3,727.10^1 - 4,785.10^1$	45	$6,393.10^5 - 8,208.10^5$
19	$4,785.10^1 - 6,144.10^1$	46	$8,208.10^5 - 1,054.10^6$
20	$6,144.10^1 - 7,889.10^1$	47	$1,054.10^6 - 1,353.10^6$
21	$7,889.10^1 - 1,013.10^2$	48	$1,353.10^6 - 1,738.10^6$
22	$1,013.10^2 - 1,3.10^2$	49	$1,738.10^6 - 2,231.10^6$
23	$1,3.10^2 - 1,67.10^2$	50	$2,231.10^6 - 2,865.10^6$
24	$1,67.10^2 - 2,754.10^2$	51	$2,865.10^6 - 3,679.10^6$
25	$2,754.10^2 - 4,54.10^2$	52	$3,679.10^6 - 4,724.10^6$
26	$4,54.10^2 - 7,485.10^2$	53	$4,724.10^6 - 6,065.10^6$
27	$7,485.10^2 - 1,234.10^3$	54	$6,065.10^6 - 7,788.10^6$
		55	$7,788.10^6 - 1,0.10^7$

Fonte: Ref. [44]

Essa tese considera somente os efeitos de autoblindagem na matriz de ressonância de duas ressonâncias consideradas as mais importantes do  $^{238}\text{U}$  localizadas, respetivamente, nas energias 6,67 eV e 20,871 eV. Os limites dos grupos de energia que abrangem boa parte dessas ressonâncias conforme mostrado na Tabela 7 são os grupos 11 e 15 que abrangem, respetivamente, os intervalos de energia, de 6,4763 eV a 8,3012 eV e de 17,60 eV a 22,60 eV. Estes dois grupos serão utilizados para determinar as matrizes de covariâncias do  $^{238}\text{U}$  relativas aos arquivos 33 da ENDF e na metodologia desenvolvida na tese.

Figura 7 a célula unitária do reator IPEN/MB-01 a ser utilizada pelo modulo ROLAIDS do sistema AMPX-II. Essa célula unitária foi descrita em geometria cilíndrica composta de 12 zonas ou regiões para a discretização espacial, sendo as 10 primeiras regiões na pastilha combustível, uma região no encamisamento (SS-304) e uma região no moderador ( $\text{H}_2\text{O}$ ). As condições de contorno aplicáveis a célula unitária foram: reflexão isotrópica (white boundary condition) à direita e refletida à esquerda. Os raios das dez primeiras zonas ou regiões foram obtidos considerando áreas iguais para cada zona.

Com exceção feita a seção 4.6, todos os demais resultados da tese ficam limitados a primeira zona ou região da pastilha combustível apresentada na Figura 7. Essa região da

célula unitária é a que possui os maiores efeitos de autoblindagem devido as ressonâncias.

Matematicamente o raio de cada região foi obtido como:

$$A_p = \pi R^2 / 10 \text{ (área de cada zona ou região)}$$

$$r_{i+1} = [A_p / \pi + (r_i)^2]^{1/2} \text{ (raio para zona ou região, com } r_i = 0 \text{ para } i = 0)$$

onde:

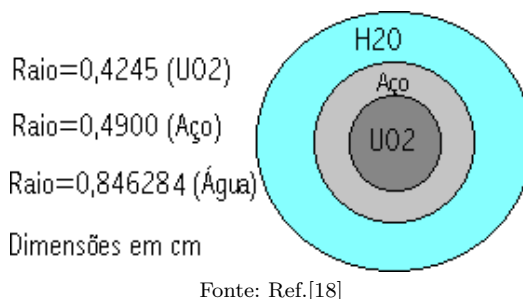
$A_p$  é a área da pastilha dividida por 10

$R$  é o raio da pastilha,  $R=0,4245$  cm

$\pi = 3,141592654$

Esquemáticamente o modelo da célula unitária utilizado pelo ROLAIDS é mostrado na Figura 7. A região denominada por aço representa a homogeneização do revestimento e o “gap” da vareta combustível.

Figura 7 – Célula Combustível do Reator IPEN/MB-01.



As seções de choque linearizadas obtidas com o NJOY dependem da temperatura devido ao alargamento Doppler efetuado pelo modulo BROADR. Considerando a mesma precisão de linearização, o número de pontos de linearização diminuem com o aumento da temperatura devido a suavização da curva da ressonância. A sensibilidade da precisão da linearização e seu impacto nos parâmetros calculados nesse tese como seção de choque de multigrupo, derivadas em geral em relação ao parâmetro de ressonância foi analisada e chegou-se a conclusão que o melhor conjunto foram, respectivamente, 0,001, 0,0001, e 0,00005 para 0K e 293K, 600 e 900K, e 1200K.

Tabela 8 apresenta uma comparação das seções de choque do  $^{238}\text{U}$  e do fluxo de nêutrons para os grupos 11 e 15 obtidos com o NJOY, ROLAIDS e o método da tese. Essa comparação é importante para a consistência dos resultados numéricos das grandezas de multigrupo bem como para apresentar a qualidade do método utilizado nas varias integrais envolvidas as derivadas das seções de choque em relação ao parâmetro de ressonância e fluxo de nêutrons. O método empregado na tese para efetuar integrais em geral baseia-se no método do trapézio [45,46]. A concordância em geral é adequada e atende os propósitos dessa tese.

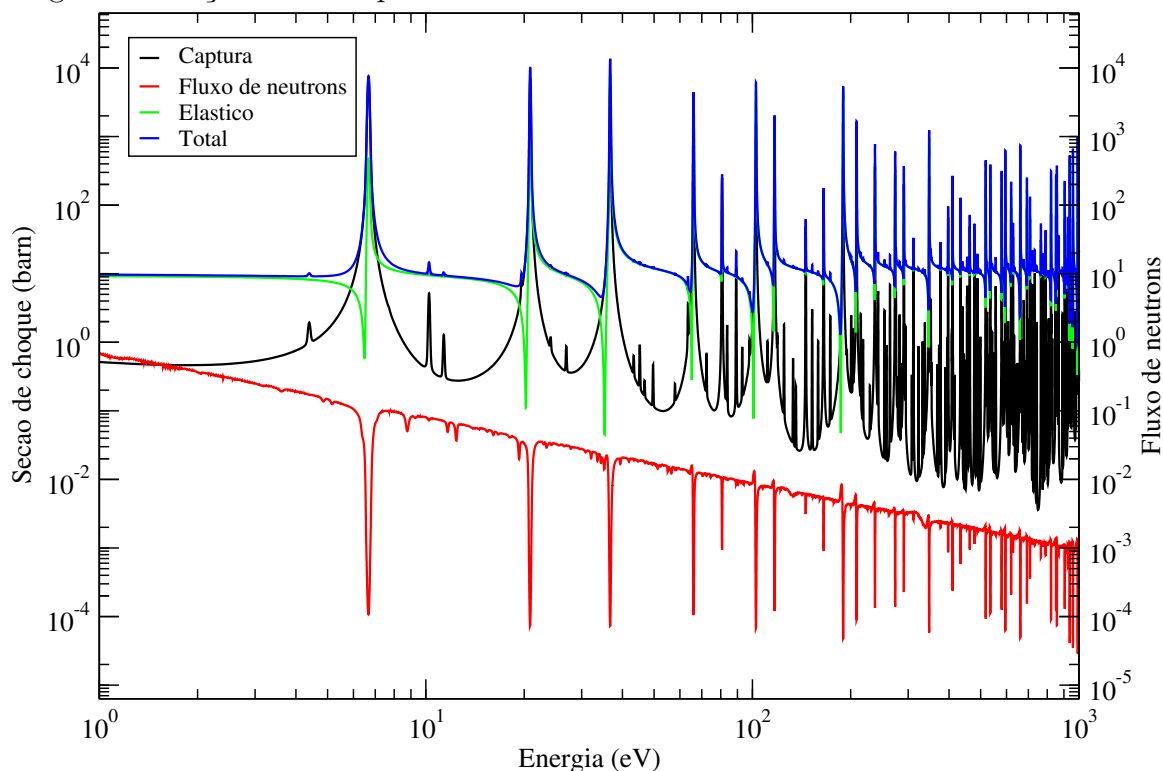
Tabela 8 – Seções de Choque dos Grupos 11 e 15

293K - Grupo 11			
Seção de Choque	NJOY	ROLAIDS	TESE
Captura	12,2854	12,2830	12,2692
Elástico	13,5887	13,5885	13,5078
Total	25,8742	25,8715	25,7756
Fluxo de Nêutrons	0,1316	0,1316	0,1324
293K - Grupo 15			
Seção de Choque	NJOY	ROLAIDS	TESE
Captura	10,0659	10,0651	10,0642
Elástico	11,3407	11,3404	11,3402
Total	21,4066	21,4055	21,4043
Fluxo de Nêutrons	0,1503	0,1503	0,1503

Fonte: Do autor

Figura 8 apresenta as seções de choque de captura, elástica e total do  $^{238}\text{U}$  obtidas com o NJOY na temperatura de 293K e o fluxo de nêutrons calculado pelo módulo ROLAIDS (na função ponderação utilizada pelos módulos GROUPR e ERRORR do NJOY). Os dados nucleares foram originários da ENDF/B-VII.0. Ilustra-se nesse gráfico as varias ressonâncias resolvidas do  $^{238}\text{U}$  e o efeito de autoblindagem devido as varias depressões agudas do fluxo de nêutrons na região próxima das energias onde as ressonâncias ocorrem.

Figura 8 – Seções de Choque Pontuais do NJOY e fluxo de nêutrons do ROLAIDS



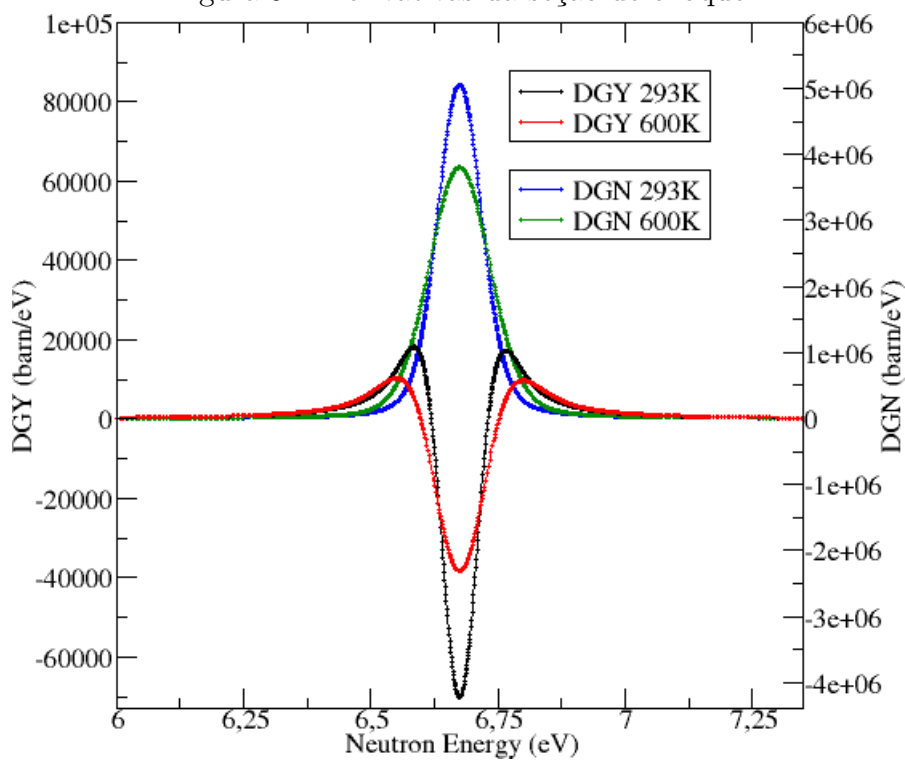
## 4.2 Determinação Numérica das Derivadas $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$ e $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_l}$

O procedimento para obtenção dessas derivadas foi exposto no Capítulo 3 é numérico e se baseia em efetuar perturbações nos parâmetros de ressonância e recalculas as seções de choque. Essa perturbação é em princípio arbitrária, mas fica restrita a perturbações de primeira ordem. Por razões que serão expostas na subseção 4.2 a perturbação considerada em todos os casos nos parâmetros de ressonância foi de 0,0625%.

A derivada  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  foi calculada numericamente como  $\Delta \sigma_x(E)/\Delta p$ , onde  $\Delta \sigma_x(E)$  representa a perturbação na seção de choque ( $\sigma_x(E)$ ) na energia  $E$  e  $\Delta p$  a correspondente perturbação no parâmetro de ressonância ( $p$ ) considerado. A determinação da derivada  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$  segue o mesmo princípio e procedimento, mas aqui o efeito é indireto porque  $\phi(E)$  não é uma função explícita dos parâmetros de ressonâncias ( $p$ ).  $\phi(E)$  é determinado por meio da solução da equação de transporte que por sua vez depende das seções de choque consideradas nas várias regiões da célula unitária do reator IPEN/MB-01. Na solução da equação de transporte os parâmetros de ressonância ao sofrerem perturbação alteram as seções de choque que por sua vez perturbam o fluxo de nêutrons. As derivadas  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  e  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$  são funções da energia do nêutron e do parâmetro de ressonância considerado. Figuras 9, 10 e 11 mostram, respectivamente, as derivadas  $\frac{\partial \sigma_\gamma(E)}{\partial \Gamma_\gamma}$  e  $\frac{\partial \sigma_\gamma(E)}{\partial \Gamma_n}$  considerando as temperaturas 293K, 600K e 900K para a ressonância localizada em 6,6734 eV. O símbolo  $\sigma_\gamma$  representa a seção de choque de captura do  $^{238}\text{U}$  e DGY e DGN representam, respectivamente, as derivadas  $\frac{\partial \sigma_\gamma(E)}{\partial \Gamma_\gamma}$  e  $\frac{\partial \sigma_\gamma(E)}{\partial \Gamma_n}$ . Os dados nucleares foram provenientes da ENDF/B-VII.0.

Vários detalhes podem ser observados nessas duas figuras. Inicialmente, não necessariamente a forma do gráfico é a mesma da seção de choque.  $\frac{\partial \sigma_\gamma(E)}{\partial \Gamma_n}$  possui a mesma forma de  $\sigma_\gamma(E)$ , mas o mesmo não ocorre para  $\frac{\partial \sigma_\gamma(E)}{\partial \Gamma_\gamma}$ . As derivadas tendem a zero quando a energia do nêutron se afasta da energia do pico da ressonância. As derivadas podem apresentar sinal positiva como no caso de  $\frac{\partial \sigma_\gamma(E)}{\partial \Gamma_n}$  ou apresentar regiões de energia onde são positivas e outras negativas como no caso  $\frac{\partial \sigma_\gamma(E)}{\partial \Gamma_\gamma}$ . O alargamento Doppler nas derivadas  $\frac{\partial \sigma_\gamma(E)}{\partial \Gamma_\gamma}$  e  $\frac{\partial \sigma_\gamma(E)}{\partial \Gamma_n}$  apresentam as mesmas características do alargamento Doppler aplicado as seções de choque. Observa-se que a largura da ressonância aumentou e a altura máxima da ressonância (pico) diminuiu para DGN e aumentou para DGY. Os dois picos adicionais de DGY diminuíram em magnitude, mas houve uma extensão sendo mais efetivo numa região maior de energia do nêutron.

Figura 9 – Derivativas da seção de choque



Fonte: Do autor



Figura 10 – Derivativa DGN em Diferentes Temperaturas

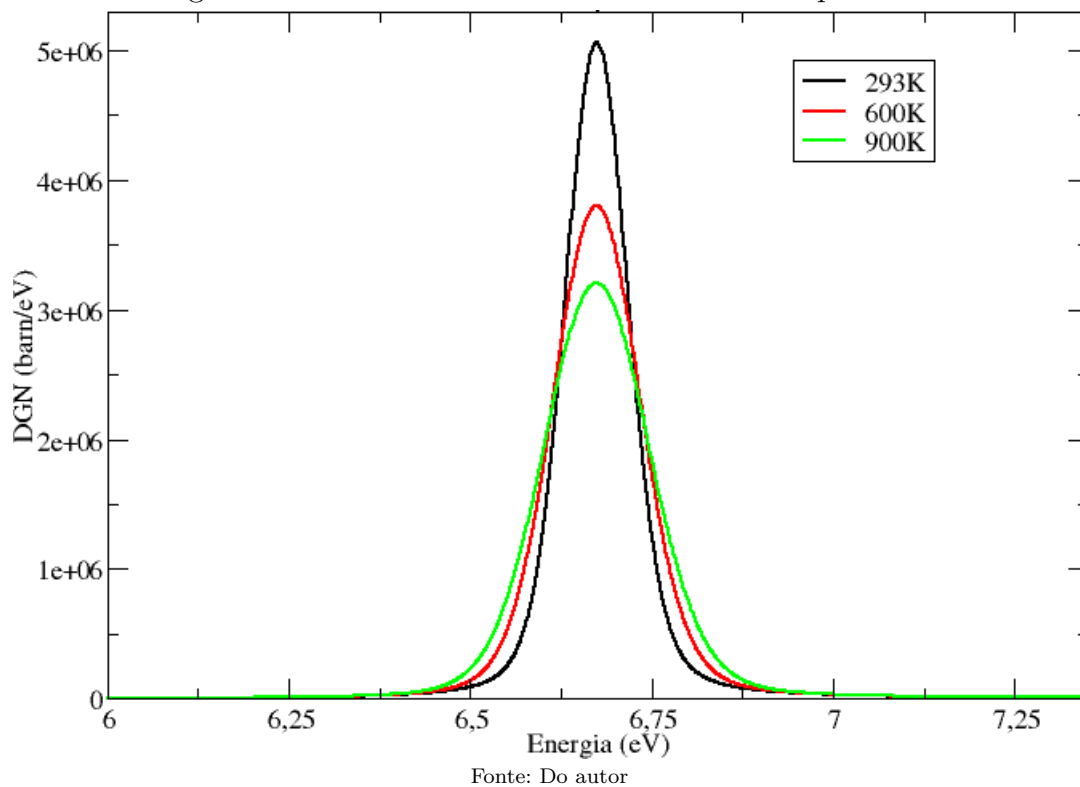
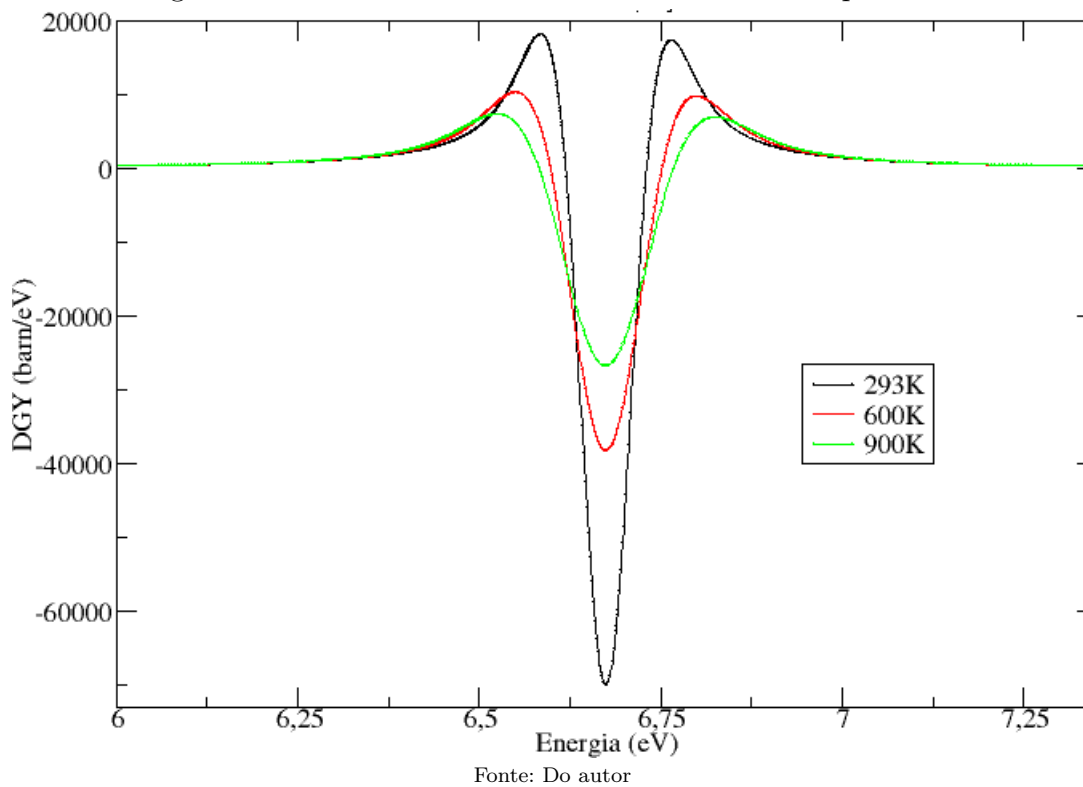
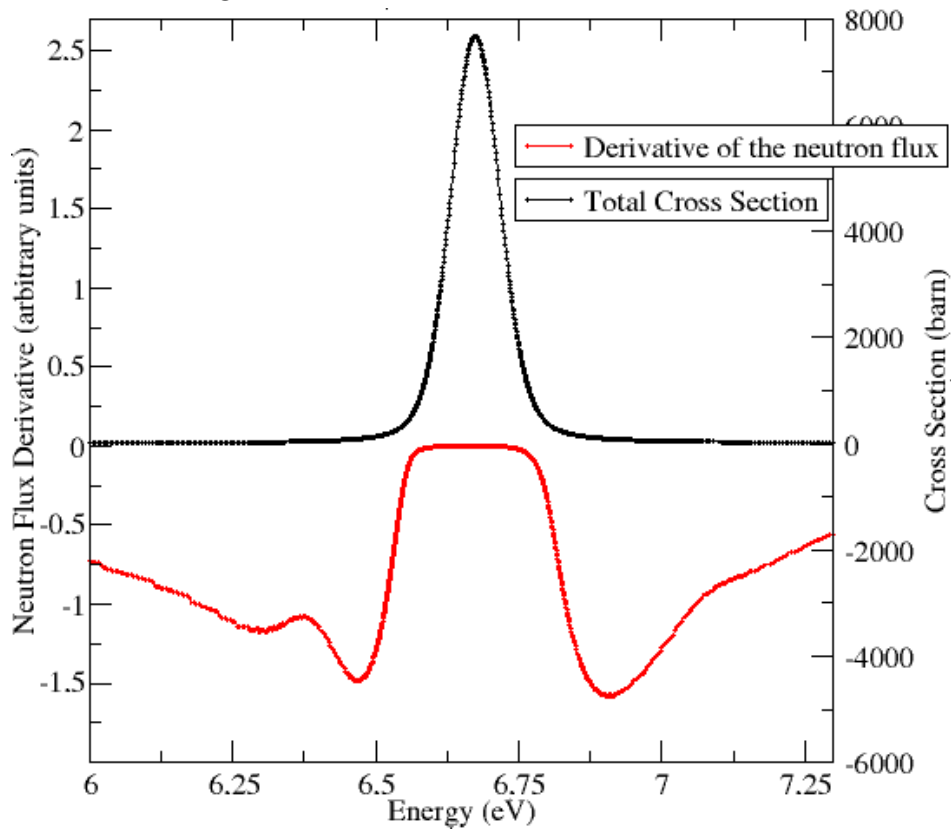


Figura 11 – Derivativa da DGY em Diferentes Temperaturas



A derivada  $\frac{\partial\phi(E)}{\partial\Gamma_\gamma}$  na temperatura de 293K obtida para a primeira região da patilha combustível conforme exposto na Figura 7 é apresentada na Figura 12 e nesse caso é sempre negativa. Nota-se que mesmo negativa a derivada  $\frac{\partial\phi(E)}{\partial\Gamma_\gamma}$  se torna bem próxima de zero na região de energia do nêutron próxima do pico da ressonância, exercendo de uma certa forma o fenômeno de autoblindagem na seção de choque total. O efeito da parte antissimétrica da seção de espalhamento elástico também pode ser observado ao lado esquerdo da derivada  $\frac{\partial\phi(E)}{\partial\Gamma_\gamma}$ . Observa-se um ligeiro pico na derivada  $\frac{\partial\phi(E)}{\partial\Gamma_\gamma}$  devido a queda brusca da seção de choque de espalhamento elástico. Finalmente, a derivada  $\frac{\partial\phi(E)}{\partial\Gamma_\gamma}$  tende a zero para regiões de energia afastadas da energia de ressonância.

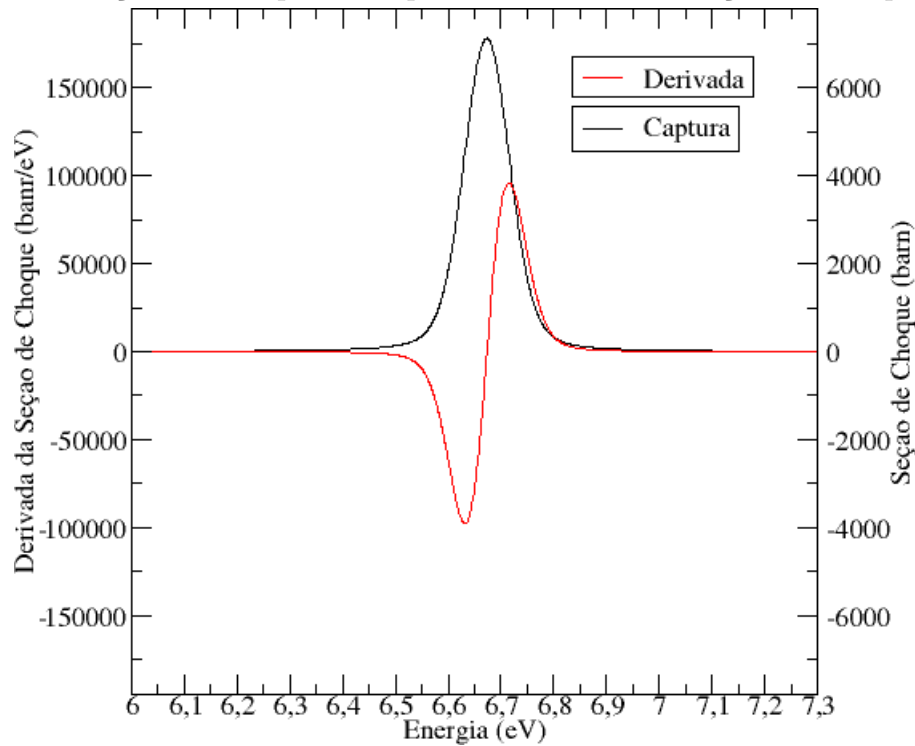
Figura 12 – Derivada do Fluxo de Nêutron



Fonte: Do autor

Figura 13 mostra a seção de choque de captura do  $^{238}\text{U}$  e a correspondente derivada em relação a  $E_0$ . A forma do gráfico da derivada é bem diferente do gráfico da seção de choque. A derivada mostra uma região negativa e uma positiva com uma certa anti simetria entre essas duas regiões.

Figura 13 – Seção de Choque de Captura e Derivada da Seção de Choque no  $E_0$



Fonte: Do autor

Figura 14 mostra a mesma derivada e o fluxo de nêutrons. Nota-se o efeito da autoblindagem exercida pelo fluxo de nêutrons na derivada da seção de choque de captura. O sinal do produto da integral da derivada da seção de choque e o fluxo de nêutrons no grupo 11 vai depender da competição entre a parte negativa e positiva da derivada.

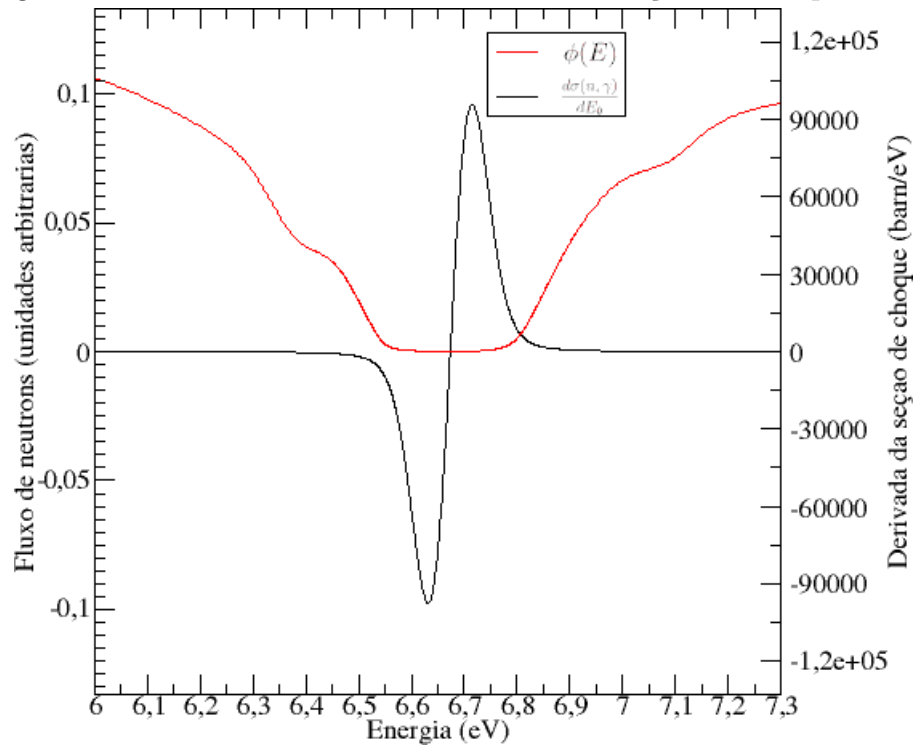
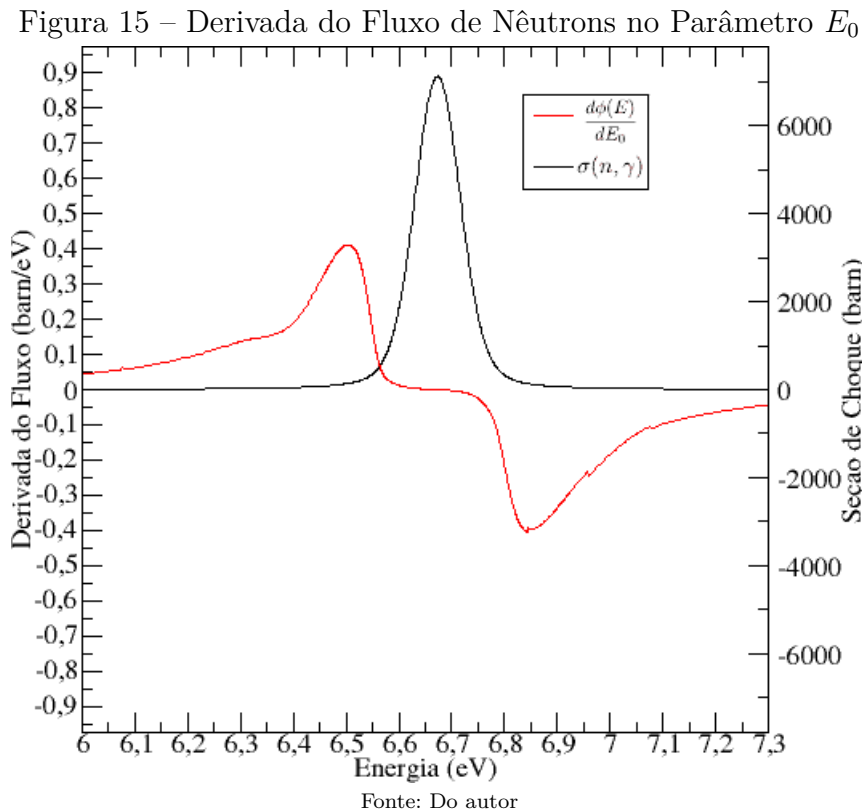
Figura 14 – Fluxo de Nêutrons e Derivada da Seção de Choque no  $E_0$ 

Figura 15 mostra a derivada do fluxo de nêutrons em relação a  $E_0$  e a seção de choque de captura. Nota-se que a derivada do fluxo de nêutrons possuem valores bem próximo de zero na região de energia na vizinhança da energia da ressonância. O efeito de autoblindagem nesse caso refere-se a essa região de energia do nêutron.



### 4.3 Determinação Numérica das Derivadas $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$

As metodologias 2 e 3 descritas no Capítulo 3 serão utilizadas extensivamente nessa subseção. A metodologia 2 envolve o processo de substituir as derivadas  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  e  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$  e o fluxo de nêutrons ( $\phi(E)$ ), obtidos previamente, nessa equação e efetuar as integrais envolvidas com a regra do trapézio. As parte 1, 2, e 3 dessa derivada conforme exposto no Capítulo 3 serão obtidas imediatamente. A metodologia 3 envolve obter a derivada  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$  a partir das seções de choque de multigrupo nos grupos 11 e 15 calculadas pelo NJOY com o espectro obtido pelo ROLAIDS ou diretamente do ROLAIDS. A derivada  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$  nesse caso será obtida utilizando a equação 3.1.

As derivadas  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  e  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$  provenientes da metodologia 2 foram obtidas por procedimentos numéricos. Nesse processo a magnitude da perturbação no parâmetro de ressonância exerce importância fundamental. Essa perturbação tem que ser grande o suficiente para alterar a seção de choque e ao mesmo tempo pequena o suficiente para que se seja considerada aproximação de primeira ordem. Nesse sentido a razão  $\Delta\sigma(E)/\Delta p_j$  e  $\Delta\phi(E)/\Delta p_j$  pode ser considerada igual a  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  e  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$ . Para atender esses critérios efetuou-se uma análise de sensibilidade para a determinação do valor mais apropriado dessa perturbação. O critério de seleção foi a consistência entre as metodologias 2 e 3 expostas no Capítulo 3.

Tabelas 9 e 10 apresentam essa análise para as temperaturas 0K e 293K, con-

siderando a reação  $(n, \gamma)$  do  $^{238}\text{U}$ , no grupo 11 e utilizando a biblioteca ENDF/B-VII.0. As perturbações foram realizadas nos parâmetros de ressonância  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$ . As diferenças percentuais referem-se a diferenças entre as derivativas  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$  obtidas pelas metodologias 2 e 3 tendo a metodologia 3 como referência. Foram selecionadas as perturbações nos parâmetros de ressonância correspondentes a 1%, 0,5%, 0,25% e 0,0625%. Todos os resultados referem-se a +sigma. Conforme mostrado nessas tabelas os melhores valores ocorrem para a perturbação de 0,0625% e essa será a perturbação nos parâmetros de ressonância para todos os casos dessa tese.

Tabela 9 – Diferenças percentuais entre Metodologias 2 e 3 para derivadas em 0K

Derivadas Grupo 11	1%	0,5%	0,25%	0,0625%
$\frac{d\sigma_\gamma}{d\Gamma_n}$	-2,49	-1,38	-0,85	0,073
$\frac{d\sigma_n}{d\Gamma_n}$	0,39	-0,23	-0,15	0,012
$\frac{d\sigma_t}{d\Gamma_n}$	-1,42	-0,80	-0,49	0,051
$\frac{d\sigma_\gamma}{d\Gamma_\gamma}$	-2,76	-1,75	-1,25	1,20
$\frac{d\sigma_n}{d\Gamma_\gamma}$	0,15	0,1	0,23	-0,53
$\frac{d\sigma_t}{d\Gamma_\gamma}$	-3,35	-2,13	-1,55	1,58

Tabela 10 – Diferenças percentuais entre Metodologias 2 e 3 para derivadas em 293K

Derivadas Grupo 11	1%	0,5%	0,25%	0,0625%
$\frac{d\sigma_\gamma}{d\Gamma_n}$	-14,53	-28,16	1,71	0,084
$\frac{d\sigma_n}{d\Gamma_n}$	-4,53	-8,01	-0,58	-0,001
$\frac{d\sigma_t}{d\Gamma_n}$	-9,71	-18,57	0,60	0,059
$\frac{d\sigma_\gamma}{d\Gamma_\gamma}$	-0,939	-2,75	2,26	1,13
$\frac{d\sigma_n}{d\Gamma_\gamma}$	-2,834	-7,29	-2,80	-0,41
$\frac{d\sigma_t}{d\Gamma_\gamma}$	-1,647	-1,90	3,09	1,47

Os resultados da tabela 9 a 0K mostram que a perturbação 0,0625% é a mais adequada para o desenvolvimento da tese, com um pequeno destaque para a derivada da seção de choque total no parâmetro  $\Gamma_\gamma$  que é a diferença percentual mais alta do conjunto de dados.

O conteúdo apresentado na tabela 10 para temperatura 293K mostra a mesma tendência dos dados da tabela 9 e confirmando a escolha da perturbação 0,0625% para o desenvolvimento da tese.

Tabelas 11 e 12 mostram, respectivamente, as partes 1, 2, e 3 da derivada  $\frac{d\sigma_{xg}}{dp_j}$  nas temperaturas 0 e 293K e para o grupo 11. Essas partes estão simbolizadas nessas tabelas, respectivamente por P1, P2 e P3. A obtenção dessas partes seguiu o procedimento estabelecido no Capítulo 3. As perturbações +sigma e -sigma nos parâmetros de ressonância necessárias para obtenção das várias derivadas envolvidas na Equação 3.1 foram de 0,0625% conforme mencionado anteriormente. A notação Captura e Elástico referem-se à reação nuclear na qual a derivada  $\frac{d\sigma_{xg}}{dp_j}$  está sendo considerada. A notação Total refere-se a seção de choque total. São mostradas as derivadas em relação aos parâmetros de ressonância  $\Gamma_n$ ,  $\Gamma_\gamma$  e  $E_0$ . Inicialmente nota-se que a derivada da seção de choque total é consistente com a soma das derivadas das seções de choque de captura e espalhamento elástico.

Tabela 11 – Partes 1, 2, e 3 da Equação 3.1 relativa aos parâmetros de ressonância a 0K

$\Gamma_n$									
0,0625%	+sigma			-sigma			2sigma		
Reações	P1	P2	P3	P1	P2	P3	P1	P2	P3
Captura	8449	-6882	1395	8449	-6889	1396	8449	-6886	1396
Elástico	3575	-2010	1487	3575	-2012	1488	3575	-2011	1487
Total	12024	-8892	2882	12023	-8901	2884	12023	-8897	2883
$\Gamma_\gamma$									
0,0625%	+sigma			-sigma			2sigma		
Reações	P1	P2	P3	P1	P2	P3	P1	P2	P3
Captura	524,01	-414,13	82,39	520,22	-415,04	82,11	522,12	-414,58	82,25
Elástico	-1,46	-118,02	87,79	-1,83	-117,67	87,49	-1,65	-117,84	87,64
Total	522,59	-532,14	170,17	518,37	-532,71	169,61	520,48	-532,43	169,89
$E_0$									
0,0625%	+sigma			-sigma			2sigma		
Reações	P1	P2	P3	P1	P2	P3	P1	P2	P3
Captura	54,31	-23,48	7,95	36,66	-40,76	9,58	45,49	-27,22	7,61
Elástico	13,65	-21,30	8,78	12,27	-26,2	10,21	12,96	-22,97	8,11
Total	67,96	-44,78	16,73	48,94	-66,96	19,79	58,45	-50,19	15,72

Tabela 12 – Partes 1, 2, e 3 da Equação 3.1 relativa aos parâmetros de ressonância a 293K

$\Gamma_n$									
0,0625%	+sigma			-sigma			2sigma		
Reações	P1	P2	P3	P1	P2	P3	P1	P2	P3
Captura	8106	-6252	1273	8107	-6259	1274	8106	-6256	1274
Elástico	3553	-1931	1406	3552	-1933	1407	3553	-1932	1407
Total	11659	-8184	2680	11659	-8192	2682	11659	-8188	2681
$\Gamma_\gamma$									
0,0625%	+sigma			-sigma			2sigma		
Reações	P1	P2	P3	P1	P2	P3	P1	P2	P3
Captura	464,77	-333,05	74,64	461,51	-334,61	74,57	463,14	-333,84	74,60
Elástico	-4,04	-110,47	82,44	-4,37	-110,40	82,36	-4,21	-110,44	82,40
Total	460,74	-443,52	157,07	457,14	-445,00	156,92	458,94	-444,27	157,00
$E_0$									
0,0625%	+sigma			-sigma			2sigma		
Reações	P1	P2	P3	P1	P2	P3	P1	P2	P3
Captura	57,98	-23,48	7,94	45,46	-43,26	8,09	51,77	-34,57	7,92
Elástico	12,72	-21,29	8,78	11,63	-23,49	8,93	12,18	-22,53	8,75
Total	70,70	-44,78	16,73	57,09	-66,75	17,02	63,95	-57,09	16,67

Os resultados da tabela 11 comprovam que os dados 2sigma são mais que adequados para todos os parâmetros da tese, pois o parâmetro  $E_0$  apresenta grande variações entre os dados +sigma e -sigma e só têm valores adequados para 2sigma. Este fato evidencia que o parâmetro  $E_0$  é o mais sensível que os demais parâmetros de ressonância. Portanto, os dados em 2sigma são adequados para todo o desenvolvimento da tese para manter a consistência do método.

Os dados contidos na tabela 12 mostram a mesma tendência que as informações contida na tabela 11. Um fato importante fica comprovado nas duas tabelas, os valores da parte 1 (P1) são maiores que os valores da parte 2 (P2) e parte 3 (P3). Os valores relativos a parte 2 são negativos para todos os parâmetros de ressonância e os valores relativos a parte 3 são positivos e em menor valor do que os da parte 1 para todos os parâmetros.



Tabelas 13 e 14 apresentam a consistências entre as metodologias 2 e 3 propostas na tese utilizando a biblioteca ENDF/B-VII.0. A notação ROLAIDS refere-se a metodologia 3 enquanto que a notação TESE refere-se a metodologia 2. A comparação é efetuada para as temperaturas 0K e 293K. Os resultados são apresentados com as perturbações +sigma, -sigma e 2sigma.conforme descrito no Capitulo 3. Com exceção a comparação 2sigma e para o parâmetro de ressonância  $\Gamma_\gamma$  a 0K todas as outras comparações revelam concordâncias excelentes. A dificuldade da comparação a 0K é devido ao aumento brusco da seção de choque na região de energia do nêutron próxima a energia da ressonância. Quando a temperatura é alterada para 293K ocorre o alargamento Doppler com a correspondente suavização da curva de seção de choque e a concordância se torna melhor. A consistência dos resultados mostrados nas Tabelas 13 e 14 reforçam a validade dos métodos numéricos propostos para a determinação da derivada de  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$ .

Tabela 13 – Consistência entre Metodologia 2 e 3 na Determinação de Derivadas para 0K

$\Gamma_n$									
0,0625%	+sigma			-sigma			2sigma		
Reações	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%
Captura	2959	2961	7,31E-02	2960	2613	1,17E+01	2960	2959	5,35E-02
Elástico	3050	3051	1,21E-02	3051	3028	7,70E-01	3051	3051	1,28E-02
Total	6010	6013	5,18E-02	6012	5641	6,18E+00	6012	6010	3,34E-02
$\Gamma_\gamma$									
0,0625%	+sigma			-sigma			2sigma		
Reações	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%
Captura	189,98	192,27	1,20E+00	202,78	128,59	3,66E+01	196,38	189,78	3,36E+00
Elástico	-31,86	-31,69	-5,32E-01	-34,02	-34,54	-1,55E+00	-32,94	-31,85	3,31E+00
Total	158,12	160,62	1,58E+00	168,77	94,04	4,43E+01	163,44	157,95	3,36E+00
$E_0$									
0,0625%	+sigma			-sigma			2sigma		
Reações	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%
Captura	28,33	38,77	3,69E+01	23,61	5,49	7,68E+01	25,97	25,88	3,48E-01
Elástico	-1,34	1,13	-1,85E+02	-2,42	-3,72	-5,36E+01	-1,88	-1,90	-1,25E+00
Total	26,99	39,91	4,79E+01	21,19	1,77	9,16E+01	24,09	23,97	4,73E-01

Tabela 14 – Consistência entre Metodologia 2 e 3 na Determinação de Derivadas para 293K

$\Gamma_n$									
0,0625%	+sigma			-sigma			2sigma		
Reações	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%
Captura	3125	3127	8,46E-02	3126	3122	1,30E-01	3125	3124	2,25E-02
Elástico	3028	3028	-1,89E-03	3027	3027	1,01E-04	3028	3027	9,95E-04
Total	6152	6155	5,96E-02	6154	6148	8,99E-02	6153	6152	1,49E-02
$\Gamma_\gamma$									
0,0625%	+sigma			-sigma			2sigma		
Reações	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%
Captura	204,03	206,36	1,14E+00	204,31	201,47	1,39E+00	204,17	203,91	1,29E-01
Elástico	-32,21	-32,07	-4,17E-01	-32,21	-32,42	-6,43E-01	-32,21	-32,25	-1,18E-01
Total	171,76	174,29	1,48E+00	172,10	169,05	1,77E+00	171,93	171,67	1,54E-01
$E_0$									
0,0625%	+sigma			-sigma			2sigma		
Reações	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%
Captura	27,29	42,45	5,55E+01	23,17	10,29	5,56E+01	25,23	25,12	4,45E-01
Elástico	-1,17	0,20	-1,17E+02	-1,98	-2,93	-4,80E+01	-1,57	-1,59	-1,34E+00
Total	26,13	42,65	6,33E+01	21,20	7,36	6,53E+01	23,66	23,53	5,63E-01

O conjunto de dados apresentados na tabela 13 e 14 confirmam o valor total da metodologia 2 está adequado aos resultados da metodologia 3, pois a diferença percentual entre as duas metodologias é baixa e constata que a perturbação 2sigma é ideal para todo o desenvolvimento da tese. Portanto os resultados da metodologia 3 devido a facilidade de execução do ROLAIDS são usados para os demais cálculos da tese.

Tabelas 15 e 16 comparam os resultados obtidos da derivada  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$  para a reação  $(n, \gamma)$  utilizando as bibliotecas ENDF/B-VII.0 e JENDL 3.3. As comparações consideram as temperaturas 0K e 293K e as derivadas em relação aos parâmetros de ressonância  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$ . De uma maneira geral a derivada  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$  mostrou ser pouco sensível a escolha dessas duas bibliotecas. A máxima diferença foi de 3.3% mas para 0K. Para o caso de 293K a concordância é excelente. A biblioteca JENDL-3.3 apresenta uma diferença percentual muito pequena entre os resultados do ROLAIDS (metodologia 3) e os resultados da metodologia da tese (metodologia 2). Portanto pode-se utilizar diretamente a biblioteca JENDL-3.3 sem prejuízo da qualidade dos resultados em relação a essa biblioteca em si e em relação a consistência entre as metodologias 2 e 3. Todos os resultados nas subseções a seguir referem-se a utilização da biblioteca JENDL 3.3.

Tabela 15 – Derivadas para grupo 11 em 2sigma a 0K

$\Gamma_n$						
0K	ENDF/B-VII.0			JENDL - 3.3		
Reação	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%
Captura	2960	2959	5,35E-02	2955	2951	1,09E-01
Elástico	3051	3051	1,28E-02	3063	3061	5,76E-02
Total	6012	6010	3,34E-02	6017	6008	1,60E-01
$\Gamma_\gamma$						
0K	ENDF/B-VII.0			JENDL - 3.3		
Reação	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%
Captura	196,38	189,78	3,36E+00	190,4	188,73	8,76E-01
Elástico	-32,94	-31,85	3,31E+00	-32,69	-32,82	-4,06E-01
Total	163,44	157,95	3,36E+00	157,70	155,96	1,10E+00

Tabela 16 – Derivadas para grupo 11 em 2sigma a 293K

$\Gamma_n$						
0K	ENDF/B-VII.0			JENDL - 3.3		
Reação	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%
Captura	3125	3124	2,25E-02	3158	3110	1,52E+00
Elástico	3028	3027	9,95E-04	3037	3038	3,93E-02
Total	6153	6152	1,49E-02	6195	6146	7,95E-01
$\Gamma_\gamma$						
0K	ENDF/B-VII.0			JENDL - 3.3		
Reação	ROLAIDS	TESE	%	ROLAIDS	TESE	%
Captura	204,17	203,91	1,29E-01	203,23	202,75	2,38E-01
Elástico	-32,21	-32,25	-1,18E-01	-33,25	-33,07	-5,18E-01
Total	171,93	171,67	1,54E-01	169,98	169,66	1,89E-01

Os resultados das tabelas 15 e 16 apresentam um fato importante das metodologias 2 e 3, que a diferença percentual entre os resultados em diferentes bibliotecas é muito pequena ou desprezível. Portanto as metodologias 2 e 3 são possíveis para a utilização da biblioteca JENDL - 3.3 em todo o desenvolvimento da tese sem qualquer demérito da pesquisa.

Tabelas 17 e 18 mostram, respectivamente, os resultados finais da derivada  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$  para os grupos 11 e 15 nas temperaturas 0K, 293K, 600K, 900K e 1200K. Esses dados serão utilizados na próxima subseção para a determinação da matriz de covariância no formalismo de multigrupo.

Tabela 17 – Derivadas  $\frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j}$  2sigma em Função Temperaturas no Grupo 11

JENDL 3.3					
$\Gamma_n$					
0,0625%	2sigma - Grupo 11				
Reações	0K	293K	600K	900K	1200K
Captura	2955	3158	3174	3231	3579
Elástico	3063	3037	2995	2949	3034
total	6017	6195	6170	6180	6614
$\Gamma_\gamma$					
Captura	190,40	203,23	222,02	228,97	202,40
Elástico	-32,70	-33,25	-34,12	-32,97	-41,36
Total	157,70	169,98	187,93	196,03	161,04
$E_0$					
Captura	25,97	25,23	25,88	20,77	14,63
Elástico	-1,88	-1,57	-0,21	0,91	1,38
Total	24,09	23,66	25,68	21,67	16,02

Tabela 18 – Derivadas  $\frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j}$  2sigma em Função das Temperaturas no Grupo 15

JENDL 3.3					
$\Gamma_n$					
0,0625%	2sigma - Grupo 15				
Reações	0K	293K	600K	900K	1200K
Captura	514,39	537,47	532,83	521,79	482,33
Elástico	427,76	422,53	437,58	429,63	407,80
Total	942,14	960,00	970,37	951,35	890,06
$\Gamma_\gamma$					
Captura	223,27	225,61	223,95	219,83	214,80
Elástico	-73,96	-75,18	-77,24	-79,86	-83,00
Total	149,31	150,47	146,73	139,96	131,82
$E_0$					
Captura	-0,0339	0,1050	0,0374	-0,4250	-0,1766
Elástico	-2,0075	-2,3031	-2,0306	-2,5611	-2,4994
Total	-2,0413	-2,1980	-1,9933	-2,9862	-2,6760

O conjunto de dados apresentados nas tabelas 17 e 18 mostram o comportamento do valor das derivadas em relação a cada parâmetro de ressonância.

A derivada  $\frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial\Gamma_n}$  apresenta valores crescente conforme aumenta a temperatura no grupo 11 indo de 0K até 1200K. Nos valores correspondentes ao grupo 15 observa-se um valor máximo na temperatura de 600K e nas temperaturas acima de 600K um decréscimo suave dos valores das derivadas.

A derivada  $\frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial\Gamma_\gamma}$  apresenta valores crescente até 900K e em 1200K apresenta uma ligeira queda em relação a temperatura anterior no grupo 11. No valores correspondentes

ao grupo 15 observa-se um valor máximo em 293K e nos demais temperaturas uma queda suave no valor das derivadas.

A derivada  $\frac{\partial \sigma_{\gamma g}}{\partial E_0}$  e  $\frac{\partial \sigma_{tg}}{\partial E_0}$  apresenta valores decrescentes para o grupo 11 e um fato importante pode ser observado. A derivada da seção de choque de espalhamento os valores começam negativos em 0K e tornam-se positivos à 900K em diante. No grupo 15 os valores correspondentes a derivada nas reações de espalhamento elástico e total são todos negativos.

#### 4.4 O Fenômeno de Autoblindagem em $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_l}$

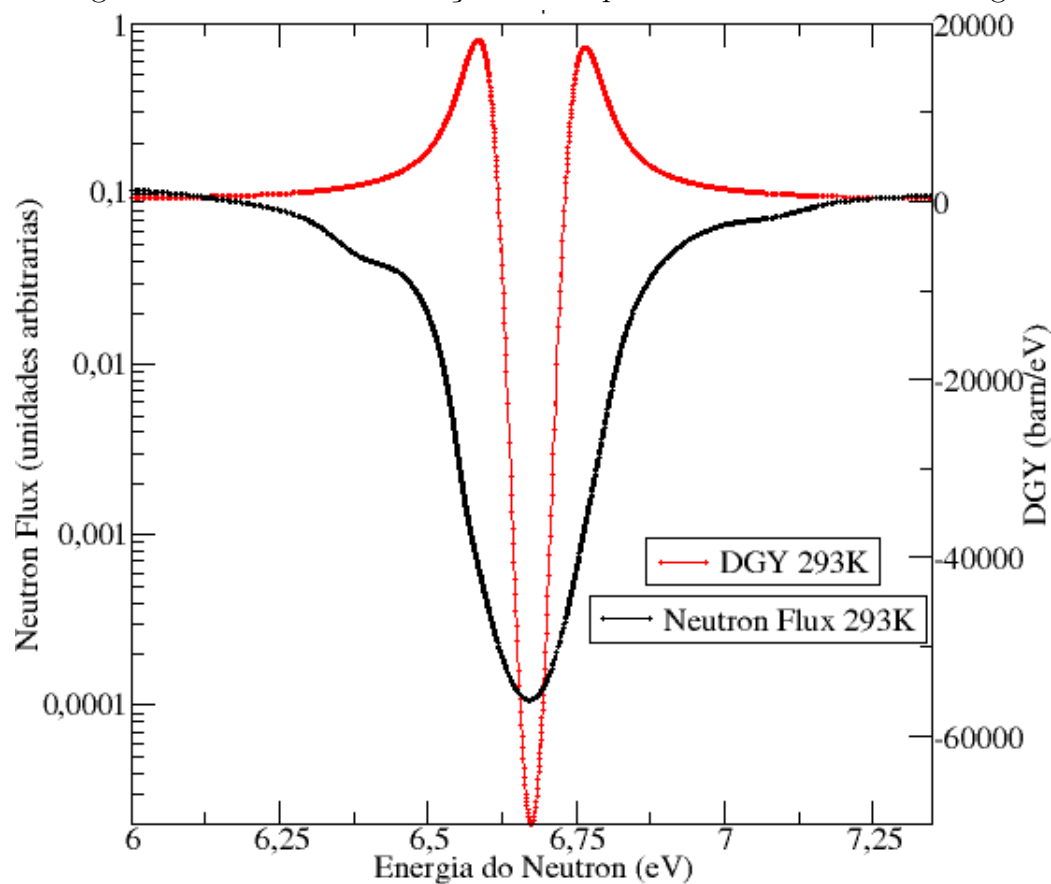
O fenômeno de autoblindagem é clássico na área de física de reatores nucleares e ocorre devido depressão brusca do fluxo de nêutrons (função ponderação) nas energias próximas às energias das ressonâncias. Figura 4 ilustra com detalhes esse fenômeno. No caso clássico que considera a autoblindagem na seção de choque de multigrupo conforme Equação 2.18 as grandezas envolvidas: seções de choque e fluxo de nêutrons, são grandezas positivas e necessariamente a seção de choque no grupo de energia em consideração será positiva.

No caso da autoblindagem da matriz de covariância no formalismo de multigrupo o fenômeno é bem mais complexo. A autoblindagem ocorre na derivada  $\frac{\partial \sigma_{kg}}{\partial p_j}$  e essa grandeza é descrita em detalhes pela metodologia 2 por meio da Equação 3.1. Existem integrais envolvendo o produto da derivada  $\frac{\partial \sigma_x(E)}{\partial p_j}$  e o fluxo de nêutrons ( $\phi(E)$ ) (definido como efeito direto) e o produto entre a seção de choque  $\sigma^k(E)$  e a derivada  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$  (definido como efeito indireto). Figura 14 mostra a derivada  $\frac{\partial \sigma_\gamma}{\partial \Gamma_\gamma}$  e o fluxo de nêutrons ( $\phi(E)$ ) em função da energia  $E$ . Conforme observado anteriormente na figura 11 a derivada  $\frac{\partial \sigma_\gamma}{\partial \Gamma_\gamma}$  pode assumir parcialmente valores positivos e parcialmente valores negativos e não exibe um pico clássico na energia de ressonância, mas sim uma queda brusca com valores negativos. Em decorrência dessa queda brusca formam-se dois picos, respectivamente, antes e após a energia da ressonância. O fenômeno de autoblindagem nesse caso, conforme mostrado na Figura 13, ocorre no produto entre os valores da região de energia do nêutron onde ocorre a queda brusca da derivada  $\frac{\partial \sigma_\gamma}{\partial \Gamma_\gamma}$  e o fluxo de nêutrons, o qual também sofre uma queda brusca, mas com valores positivos. O valor final da integral de multigrupo para esse termo conforme Equação 3.1 vai depender da competição entre as contribuições positivas e negativas. Entretanto, o caso de  $\frac{\partial \sigma_\gamma}{\partial \Gamma_n}$  é mais simples devido ao fato dessa derivativa possuir a forma do gráfico semelhante ao da seção de choque correspondente. Nesse caso a interpretação da autoblindagem é semelhante ao caso clássico. O mesmo comportamento é observado para as seções de choque de espalhamento elástico e total.

Considere o caso entre a integral envolvendo o produto entre  $\sigma_x(E)$  e  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial p_j}$  na Equação 3.1. Figura 14 ilustra essa situação considerando a derivada  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial \Gamma_\gamma}$  é sempre negativa e conseqüentemente o produto entre a seção de choque total e  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial \Gamma_\gamma}$  vai ser sempre negativa. Essa conclusão também se aplica a outras reações nucleares como  $(n, \gamma)$  e espalhamento elástico. Embora  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial \Gamma_\gamma}$  seja sempre negativo, essa derivativa aumenta significativamente na região de energia do nêutron na vizinhança da energia da ressonância assumindo valores bem próximo de zero. O efeito da autoblindagem aqui ocorre no produto entre os valores da seção de choque que exibe um pico (valores altos) e os valores da derivada  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial \Gamma_n}$  também é sempre negativa e tem comportamento similar ao observado para  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial \Gamma_\gamma}$ . Conseqüentemente as mesmas observações discutidas para  $\frac{\partial \phi(E)}{\partial \Gamma_\gamma}$  podem ser

estendidas ao caso de  $\frac{\partial\phi(E)}{\partial\Gamma_n}$ .

Figura 16 – Derivativa da seção de choque e o fluxo com autoblindagem em 293K



Fonte: Do autor

O fenômeno de autoblindagem é quantificado pela definição do fator de autoblindagem  $F_{AB}$  [47]. Esse fator é definido classicamente como a razão entre a seção de choque de multigrupo do nuclídeo em consideração calculada com diluição finita e a seção de choque de multigrupo do mesmo nuclídeo calculada com diluição infinita. O método mais clássico de calcular esse fator e disponível no NJOY é o método de Bondarenko [48]. Pode-se definir o mesmo fator para  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_i}$  bem como para a matriz de covariância no formalismo de multigrupo.

Matematicamente  $F_{AB}$  é definido como:

$$F_{AB} = \frac{\text{Grandeza Calculada com Diluição Finita}}{\text{Grandeza Calculada com Diluição Infinita}}, \quad (4.1)$$

onde a grandeza calculada significa  $\frac{d\sigma_{xg}}{dp_j}$  ou a matriz de covariância no formalismo de multigrupo de um nuclídeo específico com diluição finita ou infinita. No caso em consideração dessa tese o nuclídeo em consideração é o  $^{238}\text{U}$  e considerou-se o a célula unitária do reator IPEN/MB-01 com as concentrações atômicas nominais. Esse caso refere-se a diluição finita onde foi apresentado vários resultados nas subseções anteriores. O caso de diluição infinita significa que o  $^{238}\text{U}$  possui concentração atômica bem próxima de zero e que o fluxo de nêutrons é igual a C/E, com C uma constante arbitraria e E igual a energia do nêutron.

Tabelas 19 e 20, respectivamente, mostram o fator de autoblindagem da derivada  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_i}$  nos grupos 11 e 15. Considerou-se as temperaturas 0K e 293K. Observa-se inicialmente que a autoblindagem nos grupos considerados é importante e necessita ser considerada. Nota-se também que o fator de autoblindagem da seção de choque total é igual a soma dos respectivos fatores das seções de choque de captura e espalhamento elástico. Mais além que de uma maneira geral o fator de autoblindagem da derivada  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial p_j}$  é pouco sensível a temperatura. Finalmente, resultado surpreendente ocorre para o fator de autoblindagem da seção da derivada da seção de choque total em relação ao parâmetro de ressonância  $\Gamma_\gamma$  o qual é negativo. Esse fato é impossível de ser observado classicamente no fator de autoblindagem das seções de choque.



Tabela 19 – Valores do Fator de Autoblindagem para Grupo 11

$\Gamma_n$		Grupo 11 - 2sigma	
0K	Metodologia 3	Diluição infinita	Fator de autoblindagem
Captura	2951	320788	0,0092
Elástico	3061	45167	0,0678
Total	6008	365953	0,0164
$\Gamma_\gamma$		Grupo 11 - 2sigma	
0K	Metodologia 3	Diluição infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	188,73	843	0,2239
Elástico	-32,83	-1386	0,0237
Total	155,96	-544	-0,2869
$\Gamma_n$		Grupo 11 - 2sigma	
293K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	3110	327780	0,0095
Elástico	3038	45145	0,0673
Total	6146	372924	0,0165
$\Gamma_\gamma$		Grupo 11 - 2sigma	
293K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	202,75	825,04	0,2457
Elástico	-33,08	-1386,33	0,0239
Total	169,66	-561,39	-0,3022
$\Gamma_n$		Grupo 11 - 2sigma	
600K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	3174	320085	0,0099
Elástico	2995	45123	0,0664
Total	6170	365208	0,0169
$\Gamma_\gamma$		Grupo 11 - 2sigma	
600K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	222,02	823,65	0,2696
Elástico	-34,12	-1385,67	0,0246
Total	187,93	-561,74	-0,3346
$\Gamma_n$		Grupo 11 - 2sigma	
900K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	3231	319346	0,0101
Elástico	2949	45047,02	0,0655
Total	6180	364388	0,0170
$\Gamma_\gamma$		Grupo 11 - 2sigma	
900K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	228,97	823,65	0,2780
Elástico	-32,97	-1385,67	0,0238
Total	196,03	-561,74	-0,3490
$\Gamma_n$		Grupo 11 - 2sigma	
1200K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	3579	317679	0,0113
Elástico	3034	44870	0,0676
Total	6614	362545	0,0182
$\Gamma_\gamma$		Grupo 11 - 2sigma	
1200K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	202,40	751,30	0,2694
Elástico	-41,36	-1379,23	0,0300
Total	161,04	-628,17	-0,2564

Tabela 20 – Valores do Fator de Autoblindagem para Grupo 15

$\Gamma_n$		Grupo 15 - 2sigma	
0K	Metodologia 3	Diluição infinita	Fator de autoblindagem
Captura	514	17959	0,0286
Elástico	428	19514	0,0219
Total	942	37474	0,0251
$\Gamma_\gamma$		Grupo 15 - 2sigma	
0K	Metodologia 3	Diluição infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	223,27	3570,49	0,0625
Elástico	-73,96	-3622,87	0,0204
Total	149,31	-52,72	-2,8318
$\Gamma_n$		Grupo 15 - 2sigma	
293K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	537	18093	0,0297
Elástico	423	19712	0,0214
Total	960	37806	0,0254
$\Gamma_\gamma$		Grupo 15 - 2sigma	
293K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	225,61	3569,79	0,0632
Elástico	-75,18	-3623,22	0,0207
Total	150,47	-53,77	-2,7981
$\Gamma_n$		Grupo 15 - 2sigma	
600K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	532,83	17957	0,0297
Elástico	437,58	19513,45	0,0224
Total	970,37	37470,57	0,0259
$\Gamma_\gamma$		Grupo 15 - 2sigma	
600K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	223,95	3571,54	0,0627
Elástico	-77,24	-3622,52	0,0213
Total	146,73	-50,63	-2,8979
$\Gamma_n$		Grupo 15 - 2sigma	
900K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	521,79	17968	0,0290
Elástico	429,63	19517	0,0220
Total	951,35	37484,60	0,0254
$\Gamma_\gamma$		Grupo 15 - 2sigma	
900K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	219,83	3571,19	0,0616
Elástico	-79,86	-3622,52	0,0220
Total	139,96	-50,98	-2,7452
$\Gamma_n$		Grupo 15 - 2sigma	
1200K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	482,33	17964	0,0268
Elástico	407,80	19515	0,0209
Total	890,06	37479	0,0237
$\Gamma_\gamma$		Grupo 15 - 2sigma	
1200K	Metodologia 3	Diluição Infinita	Fator de Autoblindagem
Captura	214,80	3571,54	0,0601
Elástico	-83,00	-3622,17	0,0229
Total	131,82	-50,63	-2,6034

Os dados contidos na tabela 19 apresentam os efeitos de autoblindagem nas derivadas dos parâmetros  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$  no grupo 11. Na temperatura 0K observa-se o fator

de autoblindagem mais significativo na derivada do parâmetro  $\Gamma_n$ , pois quanto mais longe do valor 1 estiver o fator de autoblindagem mais impacto ele causa na grandeza calculada subsequentemente. Na temperatura 293K a tendência dos valores em relação 0K se repetem, comprovando que a derivada no parâmetro  $\Gamma_n$  sofre autoblindagem bem mais significativa do que  $\frac{\partial \sigma_{xg}}{\partial \Gamma_\gamma}$ . O mesmo comportamento repeti-se nas demais temperaturas com pequenas alterações de valores para o aumento da temperatura. A derivada no parâmetro  $\Gamma_\gamma$  apresenta o efeito da autoblindagem um pouco próximo de do valor 1. Os resultado presentes na tabela 20 mostram a mesma tendência dos dados da tabela 19 e ambos mostram consistência ao fator de autoblindagem. A derivada do parâmetro  $E_0$  não será considerado nesta análise, devido a indisponibilidade de informações sobre arquivo 32 (MF 32) do ENDF. Portanto, a autoblindagem impacta de forma mais intensa o parâmetro  $\Gamma_n$  do que  $\Gamma_\gamma$  na derivada da seção de choque.

## 4.5 Matriz de Covariâncias no Formalismo de Multigrupo (File 33)

A matriz de covariância no formalismo de multigrupo (File 33) é definida pela Equação 3.6. De acordo com essa equação essa matriz é dada por:

$$\langle \delta\sigma_{xg}\delta\sigma_{xg'} \rangle = \sum_{jk} \frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j} \langle \delta p_j \delta p_k \rangle \frac{\partial\sigma_{xg'}}{\partial p_k}, \quad (4.2)$$

onde  $x$  representa as reações de captura, elástico ou total.

Esta equação é aplicada para os grupos 11 e 15 descritos nas seções anteriores. Para o grupo 11 tem-se o seguinte equacionamento,

$$\begin{aligned} \langle \delta\sigma_{x11}\delta\sigma_{x11} \rangle &= \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_n} \langle \delta\Gamma_n\delta\Gamma_n \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_n} + \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial p_{\Gamma_n}} \langle \delta\Gamma_n\delta\Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial p_{\Gamma_\gamma}} + \\ &\quad \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_\gamma} \langle \delta\Gamma_\gamma\delta\Gamma_n \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_n} + \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_\gamma} \langle \delta\Gamma_\gamma\delta\Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_\gamma}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

sendo  $x$  as reações de captura, elástico ou total. De forma mais simplificada, tem-se:

$$\begin{aligned} \langle \delta\sigma_{x11}\delta\sigma_{x11} \rangle &= \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_n} \langle \delta\Gamma_n\delta\Gamma_n \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_n} + 2 \left( \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial p_{\Gamma_n}} \langle \delta\Gamma_n\delta\Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial p_{\Gamma_\gamma}} \right) + \\ &\quad \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_\gamma} \langle \delta\Gamma_\gamma\delta\Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_\gamma} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Similarmente, para o grupo 15 tem-se o seguinte equacionamento,

$$\begin{aligned} \langle \delta\sigma_{x15}\delta\sigma_{x15} \rangle &= \frac{\partial\sigma_{x15}}{\partial\Gamma_n} \langle \delta\Gamma_n\delta\Gamma_n \rangle \frac{\partial\sigma_{x15}}{\partial\Gamma_n} + 2 \left( \frac{\partial\sigma_{x15}}{\partial\Gamma_n} \langle \delta\Gamma_n\delta\Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial\sigma_{x15}}{\partial\Gamma_\gamma} \right) + \\ &\quad \frac{\partial\sigma_{x15}}{\partial\Gamma_\gamma} \langle \delta\Gamma_\gamma\delta\Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial\sigma_{x15}}{\partial\Gamma_\gamma}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Para a correlação entre os grupos 11 e 15, tem-se:

$$\begin{aligned} \langle \delta\sigma_{x11}\delta\sigma_{x15} \rangle &= 2 \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_{n11}} \langle \delta\Gamma_{n11}\delta\Gamma_{n15} \rangle \frac{\partial\sigma_{x15}}{\partial\Gamma_{n15}} + 2 \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_{n11}} \langle \delta\Gamma_{n11}\delta\Gamma_{\gamma15} \rangle \frac{\partial\sigma_{x15}}{\partial\Gamma_{\gamma15}} + \\ &\quad 2 \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_{\gamma11}} \langle \delta\Gamma_{\gamma11}\delta\Gamma_{\gamma15} \rangle \frac{\partial\sigma_{x15}}{\partial\Gamma_{\gamma15}} + 2 \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_{\gamma11}} \langle \delta\Gamma_{\gamma11}\delta\Gamma_{n15} \rangle \frac{\partial\sigma_{x15}}{\partial\Gamma_{n15}} \end{aligned} \quad (4.6)$$

A utilização das equações 4.4 a 4.6 necessitam os elementos da matriz de covariância dos parâmetros de ressonância do  $^{238}\text{U}$  presentes na biblioteca JENDL-3.3. Os Elementos desta matriz são mostrados na Tabela 21.

Tabela 21 – Matriz de Covariância dos Parâmetros de Ressonância

Matriz de Covariância dos Parâmetros de Ressonância				
	$\Gamma_{n11}$	$\Gamma_{\gamma11}$	$\Gamma_{n15}$	$\Gamma_{\gamma15}$
$\Gamma_{n11}$	9,21014e-10	1,68979e-8	1,5858e-8	-5,0455e-8
$\Gamma_{\gamma11}$		3,10649e-7	2,88346e-7	-9,11603e-7
$\Gamma_{n15}$			2,99375e-6	-7,39363e-6
$\Gamma_{\gamma15}$				2,01901e-5

Fonte: Do autor

Tabela 21 mostra as matrizes de covariância nos grupos 11 e 15. Os elementos dessa tabela podem ser classificados como dados correlacionados e anti correlacionados. Esta matriz é simétrica, portanto apresenta-se somente os elementos da diagonal principal e elementos superiores à diagonal principal. Observa-se que todos os elementos diagonais desta matriz são positivos porque a raiz quadrada dessas grandezas representam a incerteza no parâmetro de ressonância em questão. Alguns dos termos cruzados podem possuir sinal negativo. Os elementos da matriz com sinal negativo são classificados como anti-correlacionados e os elementos positivos são correlacionados.

Os termos  $\langle \delta\Gamma_n \delta\Gamma_n \rangle$ ,  $\langle \delta\Gamma_\gamma \delta\Gamma_\gamma \rangle$  e  $\langle \delta\Gamma_n \delta\Gamma_\gamma \rangle$  necessário aos três conjuntos de covariâncias dados pelas Equações 4.4 a 4.6 são fornecidos pelas Equações 4.7 a 4.16. O Primeiro conjunto de covariâncias corresponde ao grupo 11 da estrutura de multigrupo.

$$\langle \delta\Gamma_{n11} \delta\Gamma_{n11} \rangle = 9,21014e - 10 \quad (4.7)$$

$$\langle \delta\Gamma_{n11} \delta\Gamma_{\gamma11} \rangle = 1,68979e - 8 \quad (4.8)$$

$$\langle \delta\Gamma_{\gamma11} \delta\Gamma_{\gamma11} \rangle = 3,10649e - 7 \quad (4.9)$$

O segundo conjunto de covariâncias corresponde ao grupo 15 e dado a seguir:

$$\langle \delta\Gamma_{n15} \delta\Gamma_{n15} \rangle = 2,99375e - 6 \quad (4.10)$$

$$\langle \delta\Gamma_{n15} \delta\Gamma_{\gamma15} \rangle = -7,39363e - 6 \quad (4.11)$$

$$\langle \delta\Gamma_{\gamma15} \delta\Gamma_{\gamma15} \rangle = 2,01901e - 5 \quad (4.12)$$

O terceiro conjunto de covariâncias corresponde a correlação entre os grupos 11 e 15.

$$\langle \delta\Gamma_{n11} \delta\Gamma_{n15} \rangle = 1,5858e - 8 \quad (4.13)$$

$$\langle \delta\Gamma_{n11} \delta\Gamma_{\gamma15} \rangle = -5,0455e - 8 \quad (4.14)$$

$$\langle \delta\Gamma_{\gamma 11} \delta\Gamma_{\gamma 15} \rangle = -9,11603e - 7 \quad (4.15)$$

$$\langle \delta\Gamma_{\gamma 11} \delta\Gamma_{n 15} \rangle = 2,8834e - 7 \quad (4.16)$$

As equações 4.7 a 4.16 são utilizadas para o cálculo das covariâncias das seções de choque de multigrupo em diferentes temperaturas e para as três reações utilizando metodologia 3 e metodologia 4.

As Tabelas 22 e 23 apresentam as componentes das matrizes de covariâncias de acordo com as Equações 4.3 a 4.4. Os dados são apresentados em função da temperatura para os dois grupos de energia (grupo 11 e grupo 15) e para as três reações, captura radioativa ( $\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$ ), elástico ( $\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$ ) e total ( $\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$ ).

Tabela 22 – Componentes das Matrizes de Covariâncias no Grupo 11

Captura					
Grupo 11	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_n} \langle \delta\Gamma_n \delta\Gamma_n \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_n}$	0,0080	0,0091	0,0092	0,0096	0,0117
$2 \left( \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial p_{\Gamma_n}} \langle \delta\Gamma_n \delta\Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial p_{\Gamma_\gamma}} \right)$	0,0190	0,0216	0,0238	0,0250	0,0244
$\frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_\gamma} \langle \delta\Gamma_\gamma \delta\Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_\gamma}$	0,0112	0,0128	0,0153	0,0162	0,0127
Elástico					
Grupo 11	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_n} \langle \delta\Gamma_n \delta\Gamma_n \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_n}$	0,0086	0,0084	0,0082	0,0080	0,0084
$2 \left( \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial p_{\Gamma_n}} \langle \delta\Gamma_n \delta\Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial p_{\Gamma_\gamma}} \right)$	-0,0033	-0,0034	-0,0034	-0,0032	-0,0042
$\frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_\gamma} \langle \delta\Gamma_\gamma \delta\Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_\gamma}$	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0005
Total					
Grupo 11	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_n} \langle \delta\Gamma_n \delta\Gamma_n \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_n}$	0,0333	0,0353	0,0350	0,0351	0,0402
$2 \left( \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial p_{\Gamma_n}} \langle \delta\Gamma_n \delta\Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial p_{\Gamma_\gamma}} \right)$	0,0320	0,0355	0,0391	0,0409	0,0359
$\frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_\gamma} \langle \delta\Gamma_\gamma \delta\Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial\sigma_{x11}}{\partial\Gamma_\gamma}$	0,0077	0,0089	0,0109	0,0119	0,0080

Fonte: Do autor

Tabela 23 – Componentes das Matrizes de Covariâncias no Grupo 15

Captura					
Grupo 15	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_n} \langle \delta \Gamma_n \delta \Gamma_n \rangle \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_n}$	0,7921	0,8648	0,8499	0,8151	0,6964
$2 \left( \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_n} \langle \delta \Gamma_n \delta \Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_\gamma} \right)$	-1,6982	-1,7930	-1,7645	-1,6962	-1,5320
$\frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_\gamma} \langle \delta \Gamma_\gamma \delta \Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_\gamma}$	1,0064	1,0277	1,0126	0,9757	0,9315
Elástico					
Grupo 15	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_n} \langle \delta \Gamma_n \delta \Gamma_n \rangle \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_n}$	0,5477	0,5344	0,5732	0,5525	0,4978
$2 \left( \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_n} \langle \delta \Gamma_n \delta \Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_\gamma} \right)$	0,4678	0,4697	0,4998	0,5073	0,5005
$\frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_\gamma} \langle \delta \Gamma_\gamma \delta \Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_\gamma}$	0,1104	0,1141	0,1204	0,1287	0,1390
Total					
Grupo 15	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_n} \langle \delta \Gamma_n \delta \Gamma_n \rangle \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_n}$	2,6573	2,7590	2,8189	2,7095	2,3716
$2 \left( \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_n} \langle \delta \Gamma_n \delta \Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_\gamma} \right)$	-2,0802	-2,1359	-2,1054	-1,9688	-1,7349
$\frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_\gamma} \langle \delta \Gamma_\gamma \delta \Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_\gamma}$	0,4501	0,4571	0,4346	0,3954	0,3508

Fonte: Do autor

O sinal dos componentes das Tabelas 22 e 23 vai depender do sinal dos elementos da matriz de covariâncias dos parâmetros de ressonância e do produto das derivadas envolvidas. Os resultados apresentados nas Tabelas 22 e 23 mostram que  $2 \left( \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_n} \langle \delta \Gamma_n \delta \Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_\gamma} \right)$  é negativo somente na Covariância da reação de espalhamento elástico do grupo 11. O motivo deste sinal negativo é o valor das derivadas da seções de choque. Os elementos da matriz de covariâncias presentes na tabela 21 mostram que o grupo 11 tem somente valores correlacionados (positivos), com isso o termo cruzado  $2 \left( \frac{\partial \sigma_{x11}}{\partial \Gamma_n} \langle \delta \Gamma_n \delta \Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial \sigma_{x11}}{\partial \Gamma_\gamma} \right)$  para a covariância da seção de choque elástica apresenta uma derivada negativa  $\left( \frac{\partial \sigma_{x11}}{\partial \Gamma_\gamma} \right)$ . As tabelas que comprovam essa afirmação são Tabela 17 para o grupo 11 e Tabela 18 para o grupo 15. Portanto, Tabela 22 apresenta elementos anti-correlacionados em relação aos elementos de covariância da seção de choque de espalhamento elástico.

No grupo 15 observa-se que o elemento  $2 \left( \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_n} \langle \delta \Gamma_n \delta \Gamma_\gamma \rangle \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_\gamma} \right)$  é negativo nas covariâncias das seção de choque de captura e total. O motivo deste sinal negativo está no fato do termo da matriz de covariância do parâmetros de ressonância ser negativo no termo cruzado  $\langle \delta \Gamma_{n15} \delta \Gamma_{\gamma 15} \rangle$  e as derivadas envolvidas serem positivas. Um fato importante é a tendência do mesmo elemento para a covariâncias da seção de choque na reação de espalhamento elástico mudar de sinal, pois o comportamento do sinal da derivada  $\frac{\partial \sigma_{n15}}{\partial \Gamma_\gamma}$  é negativo e o sinal do elemento da matriz de covariância dos parâmetros ressonância  $\langle \delta \Gamma_{n15} \delta \Gamma_{\gamma 15} \rangle$  é negativo e a derivada  $\left( \frac{\partial \sigma_{x15}}{\partial \Gamma_n} \right)$  é positivo. Os demais valores são todos correlacionados. A tabela 23 apresenta elementos anti-correlacionados em relação aos

elementos de covariância da seção de choque de captura radioativa e total. Os demais valores são todos correlacionados. Portanto, o sinal da soma dos componentes (covariância das seções de choque) das Tabelas 22 e 23 vai depender da contribuição relativa de cada um desses componentes.

Tabelas 24 , 25 e 26 apresentam as covariâncias totais para dois grupos de energia (Grupo 11, Grupo 15 e Grupo 11-15) para as reações de captura radioativa ( $\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$ ), elástico ( $\langle \delta\sigma_{n11} \delta\sigma_{n11} \rangle$ ) e total ( $\langle \delta\sigma_{t11} \delta\sigma_{t11} \rangle$ ).

Tabela 24 – Matriz de Covariância com autoblindagem no Grupo 11

Grupo 11	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	0,0383	0,0437	0,0484	0,0509	0,0490
$\langle \delta\sigma_{n11} \delta\sigma_{n11} \rangle$	0,0055	0,0054	0,0051	0,0050	0,0047
$\langle \delta\sigma_{t11} \delta\sigma_{t11} \rangle$	0,0731	0,0799	0,0852	0,0880	0,0843

Fonte: Do autor

Tabela 25 – Matriz de Covariância com autoblindagem no Grupo 15

Grupo 15	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	0,1003	0,0994	0,0980	0,0946	0,0960
$\langle \delta\sigma_{n15} \delta\sigma_{n15} \rangle$	1,1260	1,1183	1,1935	1,1887	1,1374
$\langle \delta\sigma_{t15} \delta\sigma_{t15} \rangle$	1,0272	1,0801	1,1482	1,1361	0,9875

Fonte: Do autor

Tabela 26 – Matriz de Covariância com autoblindagem no Grupo 11-15

Grupo 11-15	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	-0,0393	-0,0386	-0,0405	-0,0410	-0,0457
$\langle \delta\sigma_{n11} \delta\sigma_{n15} \rangle$	0,0519	0,0510	0,0515	0,0509	0,0486
$\langle \delta\sigma_{t11} \delta\sigma_{t15} \rangle$	0,1318	0,1420	0,1534	0,1567	0,1426

Fonte: Do autor



Observa-se inicialmente que a covariância da seção de choque total não é igual a soma das covariâncias das seções de choque de captura e espalhamento elástico. O maior valor de covariância esta na reação total para o grupo 11 e a reação de espalhamento elástico apresenta valores pequenos as demais dados dos grupos em estudo na tese.

Os resultado presentes na tabela 26 apresentam valores anti correlacionados para covariância da seção de choque de captura radioativa em valores decrescentes. Os demais valores são todos correlacionados.

Portanto, os dois grupos tem comportamentos distintos em relação a covariância, pois a mudança na amplitude de valores deixa claro não existem um comportamento homogêneo entre estes dois grupos de energia. A causa deste comportamento esta relacionada com o valor das derivadas das seções de choque das Tabelas 17 e 18 e, as matrizes de covariâncias do parâmetros de ressonância presentes na Tabela 21.

#### 4.5.1 Comparação entre Metodologia 1 (NJOY) e Metodologia 2 e 3 (Tese)

Tabela 27 mostra comparações de elementos da matriz de covariância calculada pelo NJOY com o fluxo de nêutrons calculado pelo ROLAIDS (metodologia 1) e a parte 1 da metodologia 2. Também na mesma tabela apresenta-se uma comparação entre NJOY e Metodologia 3 (ROLAIDS). Os elementos da matriz de covariância calculado pelo NJOY tem uma boa concordância com a Parte 1 da Metodologia 2. A Parte 1 da metodologia é o efeito direto do dado nuclear na matriz de covariância conforme mostrado em varias partes da tese. Dessa foram pode-se que o NJOY contempla somente o efeito direto e não considera o efeito indireto do dado nuclear na determinação dos elementos da matriz de covariância. A discrepância entre NJOY e Metodologia 3 (ROLAIDS) é severa chegando a cerca de 670% nos casos analisados.

Tabela 27 – Comparação NJOY – Metodologia 3 (ROLAIDS) – Grupo 11

JENDL 3.3 - Grupo 11 - 0K					
	NJOY	Metodologia 2 (Parte1)	Diferença (%) (Parte1-Njoy)	Metodologia 3 (ROLAIDS)	Diferença (%) (Njoy- ROLAIDS)
Captura	2,986E-01	2,988E-01	8,93E-02	3,831E-02	6,79E+02
Elástico	1,957E-02	1,164E-02	6,81E+01	5,588E-03	2,50E+02
Total	3,935E-01	4,282E-01	8,11E+00	7,315E-02	4,38E+02
JENDL 3.3 - Grupo 11 - 293K					
	NJOY	Metodologia 2 (Parte1)	Diferença(%) (Parte1-Njoy)	Metodologia 3 (ROLAIDS)	Diferença (%) (Njoy- ROLAIDS)
Captura	2,117E-01	2,539E-01	1,66E+01	4,370E-02	3,84E+02
Elástico	1,882E-02	1,119E-02	6,82E+01	5,426E-03	2,47E+02
Total	2,894E-01	3,717E-01	2,21E+01	7,991E-02	2,62E+02

Fonte: Do autor

As Tabelas 28 a 30 mostram os valores das matrizes de covariâncias calculadas pelo NJOY (Metodologia 1) utilizando como função ponderação o fluxo de nêutrons calculado pelo ROLAIDS para cada temperatura considerada. As matrizes foram calculadas para os grupos 11 e 15. Considerou-se as bibliotecas ENDF/B-VII.0 e JENDL-3.3. Nesse caso as matrizes de covariância calculadas pelo modulo ERRORR do NJOY sofreu alterações devido a mudança da biblioteca bem como devido a alteração da temperatura. Inicialmente devido as alterações das seções de choque utilizadas pelo ROLAIDS devido a fontes diferentes de dados nucleares do arquivo ENDF utilizado (ENDF/B-VII.0 e JENDL 3.3). Segundo devido as alterações do fluxo de nêutrons calculado pelo ROLAIDS devido a alteração da temperatura que por sua alterou sua biblioteca.

Tabela 28 – Covariância no Espectro Roluids do Grupo 11 Metodologia 1

Grupo 11 - 0K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	3,033E-01	2,986E-01	1,570E+00
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$	1,964E-02	1,957E-02	3,636E-01
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$	3,993E-01	3,935E-01	1,466E+00
Grupo 11 - 293K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	2,143E-01	2,117E-01	1,254E+00
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$	1,887E-02	1,882E-02	2,765E-01
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$	2,927E-01	2,894E-01	1,157E+00
Grupo 11 - 600K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	1,625E-01	1,603E-01	1,344E+00
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$	1,825E-02	1,820E-02	2,951E-01
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$	2,299E-01	2,271E-01	1,233E+00
Grupo 11 - 900K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	1,338E-01	1,320E-01	1,332E+00
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$	1,784E-02	1,779E-02	2,539E-01
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$	1,941E-01	1,918E-01	1,204E+00
Grupo 11 - 1200K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	1,167E-01	1,154E-01	1,111E+00
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$	1,756E-02	1,753E-02	1,904E-01
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$	1,721E-01	1,704E-01	9,899E-01

Fonte: Do autor

Tabela 29 – Covariância no Espectro Roluids do Grupo 15 Metodologia 1

Grupo 15 - 0K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	3,681E-01	3,623E-01	1,605E+00
$\langle \delta\sigma_{n 15} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	1,463E+00	1,437E+00	1,811E+00
$\langle \delta\sigma_{t 15} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	1,467E+00	1,441E+00	1,790E+00
Grupo 15 - 293K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	2,583E-01	2,552E-01	1,227E+00
$\langle \delta\sigma_{n 15} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	1,082E+00	1,068E+00	1,352E+00
$\langle \delta\sigma_{t 15} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	1,122E+00	1,107E+00	1,349E+00
Grupo 15 - 600K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	2,054E-01	2,033E-01	9,938E-01
$\langle \delta\sigma_{n 15} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	8,814E-01	8,719E-01	1,086E+00
$\langle \delta\sigma_{t 15} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	9,338E-01	9,238E-01	1,082E+00
Grupo 15 - 900K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	1,717E-01	1,703E-01	7,929E-01
$\langle \delta\sigma_{n 15} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	7,416E-01	7,363E-01	7,242E-01
$\langle \delta\sigma_{t 15} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	7,992E-01	7,933E-01	7,428E-01
Grupo 15 - 1200K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	1,481E-01	1,470E-01	7,429E-01
$\langle \delta\sigma_{n 15} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	6,444E-01	6,399E-01	7,007E-01
$\langle \delta\sigma_{t 15} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	7,056E-01	7,005E-01	7,271E-01

Fonte: Do autor

Tabela 30 – Covariância no Espectro Roluids do Grupo 11-15 Metodologia 1

Grupo 11 - 15 0K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	-1,077E-01	-1,060E-01	-1,597E+00
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	-1,127E-01	-1,117E-01	-8,566E-01
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	-2,037E-02	-2,099E-02	-2,911E+00
Grupo 11 - 15 293K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	-7,287E-02	-7,197E-02	-1,239E+00
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	-9,788E-02	-9,726E-02	-6,378E-01
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	-2,704E-02	-2,734E-02	-1,104E+00
Grupo 11 - 15 600K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	-5,499E-02	-5,436E-02	-1,175E+00
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	-8,841E-02	-8,798E-02	-4,910E-01
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	-3,134E-02	-3,159E-02	-7,906E-01
Grupo 11 - 15 900K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	-4,463E-02	-4,416E-02	-1,069E+00
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	-8,154E-02	-8,129E-02	-2,994E-01
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	-3,347E-02	-3,368E-02	-6,249E-01
Grupo 11 - 15 1200K			
	ENDF	JENDL	Dif %
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	-3,787E-02	-3,753E-02	-9,174E-01
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	-7,668E-02	-7,645E-02	-3,010E-01
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	-3,436E-02	-3,449E-02	-3,827E-01

Fonte: Do autor

Os resultado contidos na tabela 28 mostram as pequenas variações entre as bibliotecas e um outro detalhe importante, o valor da covariância muda conforme aumenta a temperatura.

Os resultado da tabela 29 apresentam a mesma tendência dos dados da tabela 28 e observa-se que todos os dados são correlacionados.

Os resultados da tabela 30 mostram que todos os dados são anti correlacionados e a diferença entre as bibliotecas é muito pequena. O mesmo não ocorreu para as metodologias 2, 3 e 4.

Portanto, as tabelas 28 à 30 mostram valores distintos das metodologias 1 e 2 visto que o espectro gerado pelo ROLAIDS o qual serviu como dado de entrada do NJOY bem como na metodologia 2 é diferente para cada biblioteca. O motivo desta diferença é que os arquivos 2 e 3 das bibliotecas contêm um conjunto distinto de dados por isso o espectro é diferente para cada biblioteca, mesmo usando o arquivo 32 da JENDL 3.3. As derivadas são diferentes da metodologia 2, pois as derivadas calculadas pelo NJOY não consideram o efeito indireto da derivada da seção de choque no formalismo de multigrupo. As diferenças

da metodologia 1 (NJOY) e da metodologia 2 vão residir tanto na magnitude de cada covariância bem como no sinal das mesmas. O sinal negativo na captura é igual para a metodologia 1 e 2, mas nas demais covariâncias das reações são diferentes.

Tabelas 31 a 33 adicionaram mais comparações entre NJOY e Metodologia 3 (ROLAIDS) e demonstram discrepâncias severas na metodologia empregada pelo NJOY na determinação dos elementos da matriz de covariância no formalismo de multigrupo.

Tabela 31 – Comparação NJOY – Metodologia 3 (ROLAIDS) – Grupo 11

JENDL - Grupo 11 - 600K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (Rolaid- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	1,603E-01	4,841E-02	2,31E+02
$\langle \delta\sigma_{n11} \delta\sigma_{n11} \rangle$	1,820E-02	5,171E-03	2,52E+02
$\langle \delta\sigma_{t11} \delta\sigma_{t11} \rangle$	2,271E-01	8,522E-02	1,66E+02
JENDL - Grupo 11 - 900K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (Rolaid- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	1,320E-01	5,091E-02	1,59E+02
$\langle \delta\sigma_{n11} \delta\sigma_{n11} \rangle$	1,779E-02	5,062E-03	1,18E+02
$\langle \delta\sigma_{t11} \delta\sigma_{t11} \rangle$	1,918E-01	8,806E-02	1,18E+02
JENDL - Grupo 11 - 1200K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (Rolaid- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	1,154E-01	4,900E-02	1,36E+02
$\langle \delta\sigma_{n11} \delta\sigma_{n11} \rangle$	1,753E-02	4,771E-03	2,67E+02
$\langle \delta\sigma_{t11} \delta\sigma_{t11} \rangle$	1,704E-01	4,771E-02	1,02E+02

Fonte: Do autor

Tabela 32 – Comparação NJOY – Metodologia 3 (ROLAIDS) – Grupo 15

JENDL - Grupo 15 - 0K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (ROLAIDS- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	3,623E-01	1,003E-01	2,61E+02
$\langle \delta\sigma_{n15} \delta\sigma_{n15} \rangle$	1,437E+00	1,126E+00	2,76E+01
$\langle \delta\sigma_{t15} \delta\sigma_{t15} \rangle$	1,441E+00	1,027E+00	4,03E+01
JENDL - Grupo 15 - 293K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (ROLAIDS- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	2,552E-01	9,941E-02	1,57E+02
$\langle \delta\sigma_{n15} \delta\sigma_{n15} \rangle$	1,068E+00	1,118E+00	4,52E+00
$\langle \delta\sigma_{t15} \delta\sigma_{t15} \rangle$	1,107E+00	1,080E+00	2,53E+00
JENDL - Grupo 15 - 600K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (ROLAIDS- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	2,033E-01	9,803E-02	1,07E+02
$\langle \delta\sigma_{n15} \delta\sigma_{n15} \rangle$	8,719E-01	1,194E+00	2,69E+01
$\langle \delta\sigma_{t15} \delta\sigma_{t15} \rangle$	9,238E-01	1,148E+00	1,95E+01
JENDL - Grupo 15 - 900K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (ROLAIDS- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	1,703E-01	9,461E-02	8,00E+01
$\langle \delta\sigma_{n15} \delta\sigma_{n15} \rangle$	7,363E-01	1,189E+00	3,81E+01
$\langle \delta\sigma_{t15} \delta\sigma_{t15} \rangle$	7,933E-01	1,136E+00	3,02E+01
JENDL - Grupo 15 - 1200K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (ROLAIDS- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	1,470E-01	9,600E-02	5,31E+01
$\langle \delta\sigma_{n15} \delta\sigma_{n15} \rangle$	6,399E-01	1,137E+00	4,37E+01
$\langle \delta\sigma_{t15} \delta\sigma_{t15} \rangle$	7,005E-01	9,875E-01	2,91E+01

Fonte: Do autor



Tabela 33 – Comparação NJOY – Metodologia 3 (ROLAIDS) – Grupos 11-15

JENDL - Grupo (11-15) - 0K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (ROLAIDS- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	-1,060E-01	-1,970E-02	4,38E+02
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	-1,117E-01	2,597E-02	5,30E+02
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	-2,099E-02	6,595E-02	1,32E+02
JENDL - Grupo (11-15) - 293K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (ROLAIDS- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	-7,197E-02	-1,933E-02	2,72E+02
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	-9,726E-02	2,554E-02	4,81E+02
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	-2,734E-02	7,102E-02	1,39E+02
JENDL - Grupo (11-15) - 600K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (ROLAIDS- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	-5,436E-02	-2,026E-02	1,68E+02
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	-8,798E-02	2,575E-02	4,42E+02
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	-3,159E-02	7,671E-02	1,41E+02
JENDL - Grupo (11-15) - 900K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (ROLAIDS- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	-4,416E-02	-2,054E-02	1,15E+02
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	-8,129E-02	2,549E-02	4,19E+02
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	-3,368E-02	7,836E-02	1,43E+02
JENDL - Grupo (11-15) - 1200K			
	NJOY	ROLAIDS	Dif % (ROLAIDS- NJOY)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	-3,753E-02	-2,290E-02	6,39E+01
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	-7,645E-02	2,434E-02	4,14E+02
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	-3,449E-02	7,134E-02	1,48E+02

Fonte: Do autor

Os resultados das tabela 31 e 32 mostram as comparações entre os resultados da covariância da metodologia 1 e da metodologia 3, respectivamente para o grupo 11 e 15. Observa-se um diferença percentual muito elevada. A diferença percentual diminui conforme aumenta a temperatura.

Os resultados da tabela 33 mostram a comparação entre os resultados da covariância da metodologia 1 e da metodologia 3 para a interação entre os grupos 11 e 15. Observa-se que os dados da metodologia 1 são todos anti correlacionados e da metodologia 3 somente a

covariância da seção de choque de captura radioativa é anti correlacionado. As discrepância da metodologia 1 persiste também nesse caso.

Portanto, os dados das tabelas 31, 32 e 33 tornam claro que a metodologia 1 não considera totalmente os efeitos da derivada da seção de choque no formalismo de multigrupo e as diferenças percentuais entre as metodologias 1 e 3 são muito elevadas. O alto valor das diferenças percentuais comprova que o procedimento da metodologia 1 está comprometido e bem longe da realidade para o uso em projeto de reatores.

#### 4.5.2 Diluição Infinita na Matriz de Covariância

As tabelas 34 e 35 apresentam os dados de matriz de covariância com diluição infinita no grupos 11 e 15 com o uso da metodologia 3. Os dados nestas tabelas são organizados em cinco temperaturas partindo 0K até 1200K.

Tabela 34 – Matriz de Covariância com Diluição Infinita no Grupo 11

Diluição Infinita					
Grupo 11	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	104,1341	108,3046	103,4830	102,8540	101,1907
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$	0,3597	0,3590	0,3586	0,3575	0,3537
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$	116,7118	121,1102	116,0069	115,3176	113,4830

Fonte: Do autor

Tabela 35 – Matriz de Covariância com Diluição Infinita no Grupo 15

Diluição Infinita					
Grupo 15	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	274,7821	282,2627	274,5270	275,1669	274,9110
$\langle \delta\sigma_{n 15} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	2450,4578	2484,4787	2450,1731	2450,8375	2450,4199
$\langle \delta\sigma_{t 15} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	4233,5044	4309,2119	4231,4613	4234,8155	4233,5678

Fonte: Do autor

Os resultados da tabela 34 mostram que a covariância na seção de choque total é ligeiramente maior do que a covariância da seção de choque de captura radioativa e que a covariância da seção choque de espalhamento elástico têm valores muito pequenos em relação as demais reações.

Os resultados da tabela 35 mostram que a covariância na seção de choque total é muito maior do que as covariâncias das seções de choque nas reações de captura radioativa e espalhamento elástico. Nestes dados observa-se que o valor correspondente da covariância da seção de choque de espalhamento elástico é maior do que a covariância da seção de choque de captura radioativa.

Portanto, os valores das tabelas 34 e 35 não têm a mesma tendência, pois a amplitude entre os valores do grupo 11 e 15 são muito altas e o comportamento dos valores nas seções de choque de captura e espalhamento elástico se alteram de forma abrupta.

Compara-se nessa subseção as matrizes de covariâncias obtidas pela metodologia (NJOY) e as metodologias desenvolvidas na tese. Considere inicialmente algumas características encontradas na metodologia do NJOY. Tabelas 36 e 37 apresentam, respectivamente, a matriz de covariança do  $^{238}\text{U}$  nos grupos 11 e 15 assumindo um espectro de ponderação de diluição infinita ( $1/E$ ). Os dados são apresentados para as temperaturas 0K, 293K, 600K, 900K e 1200K. Estas Tabelas apresentam as covariâncias para as reações de captura radioativa ( $\langle\delta\sigma_{\gamma 11}\delta\sigma_{\gamma 11}\rangle$ ), elástico ( $\langle\delta\sigma_{n11}\delta\sigma_{n11}\rangle$ ) e total ( $\langle\delta\sigma_{t11}\delta\sigma_{t11}\rangle$ ).

Tabela 36 – Covariância com Diluição Infinita no Grupo 11 Calculada com Metodologia 1 ( NJOY).

Grupo 11		
0K		
Reação	ENDF/B-VII	JENDL-3.3
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	104,101043	104,101043
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$	0,32618971	0,32618971
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$	115,722812	115,722812
293K		
Reação	ENDF/B-VII	JENDL-3.3
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	104,101043	104,101043
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$	0,32618971	0,32618971
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$	115,722812	115,722812
600K		
Reação	ENDF/B-VII	JENDL-3.3
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	104,101043	104,101043
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$	0,32618971	0,32618971
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$	115,722812	115,722812
900K		
Reação	ENDF/B-VII	JENDL-3.3
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	104,101043	104,101043
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$	0,32618971	0,32618971
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$	115,722812	115,722812
1200K		
Reação	ENDF/B-VII	JENDL-3.3
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	104,101043	104,101043
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$	0,32618971	0,32618971
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$	115,722812	115,722812

Fonte: Do autor

Tabela 37 – Covariância com Diluição Infinita no Grupo 15 Calculada com Metodologia 1 ( NJOY).

Grupo 15		
0K		
Reação	ENDF/B-VII	JENDL-3.3
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	274,120805	274,120805
$\langle \delta\sigma_{n 15} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	2453,48711	2453,48711
$\langle \delta\sigma_{t 15} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	4234,43192	4234,43192
293K		
Reação	ENDF/B-VII	JENDL-3.3
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	274,120805	274,120805
$\langle \delta\sigma_{n 15} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	2453,48711	2453,48711
$\langle \delta\sigma_{t 15} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	4234,43192	4234,43192
600K		
Reação	ENDF/B-VII	JENDL-3.3
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	274,120805	274,120805
$\langle \delta\sigma_{n 15} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	2453,48711	2453,48711
$\langle \delta\sigma_{t 15} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	4234,43192	4234,43192
900K		
Reação	ENDF/B-VII	JENDL-3.3
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	274,120805	274,120805
$\langle \delta\sigma_{n 15} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	2453,48711	2453,48711
$\langle \delta\sigma_{t 15} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	4234,43192	4234,43192
1200K		
Reação	ENDF/B-VII	JENDL-3.3
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	274,120805	274,120805
$\langle \delta\sigma_{n 15} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	2453,48711	2453,48711
$\langle \delta\sigma_{t 15} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	4234,43192	4234,43192

Fonte: Do autor

Tabelas 36 e 37 mostram que, independentemente da biblioteca de dados nucleares consideradas, os valores das covariâncias para as diversas temperaturas consideradas são exatamente iguais em todas as reações. Este fato indica duas conclusões relativas ao modelo de tratamento das covariâncias no módulo ERRORR do NJOY. A primeira conclusão é que o módulo ERRORR somente utiliza os dados do arquivo 32 da ENDF e ignora as seções de choque produzidas e alargadas pelos módulos RECONR e BROADR. Essas seções são diferentes devido as diferentes origens dos dados nucleares básicos contidos na ENDF/ B-VII.0 e JENDL 3.3. A segunda conclusão é que o módulo ERRORR não considera o alargamento Doppler na matriz de covariância e considera somente os dados a 0K. Um outro detalhe importante é o uso do espectro ROLAIDS nos dados das Tabelas 28 a 30, onde observamos uma mudança em relação a temperatura dos valores processados pelo módulo ERRORR.

### 4.5.3 Fator de Autoblindagem na Matriz de Covariância

As tabelas 38 e 39 apresentam os fatores de autoblindagem nos grupos 11 e 15 em diferentes temperaturas com o uso da metodologia 3. Utilizou-se os dados de Covariância com Diluição Infinita e covariância no espectro ROLAIDS. O fator de autoblindagem é obtido dividindo o valor da covariância no espectro ROLAIDS pelo valor da covariância com diluição infinita.

Tabela 38 – Fator de Autoblindagem na Matriz de Covariância para Grupo 11

Fator de Autoblindagem					
Grupo 11	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	0,00036	0,00040	0,00046	0,00049	0,00048
$\langle \delta\sigma_{n 11} \delta\sigma_{n 11} \rangle$	0,01553	0,01511	0,01441	0,01415	0,01348
$\langle \delta\sigma_{t 11} \delta\sigma_{t 11} \rangle$	0,00062	0,00065	0,00073	0,00076	0,00074

Fonte: Do autor

Tabela 39 – Fator de Autoblindagem na Matriz de Covariância para Grupo 15

Fator de Autoblindagem					
Grupo 15	JENDL - 3.3				
Cov	0K	293K	600K	900K	1200K
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	0,00036	0,00035	0,00035	0,00034	0,00034
$\langle \delta\sigma_{n 15} \delta\sigma_{n 15} \rangle$	0,00045	0,00045	0,00048	0,00048	0,00046
$\langle \delta\sigma_{t 15} \delta\sigma_{t 15} \rangle$	0,00024	0,00025	0,00027	0,00026	0,00023

Fonte: Do autor

Os resultados presentes nas tabelas 38 e 39 mostram que o fenômeno de autoblindagem é muito forte em todas as covariâncias, pois quando o fator de autoblindagem estiver muito longe do valor 1 significa que o efeito de autoblindagem é muito atuante nos dados de covariância. Para a covariância da seção de choque de espalhamento elástico observa-se que o valor é bem diferente dos demais, pois é a única covariância no grupo 11 que está mais próxima do valor 1 e mantém o comportamento conforme aumenta-se a temperatura. Os valores da covariâncias apresentam em geral variações suaves em relação ao aumento da temperatura.

Um fato importante é que o valor da covariância da seção de choque na Tabela 39 para o espalhamento elástico está na mesma ordem de grandeza que os demais dados desta tabela.

Portanto, os resultados apresentados evidenciam que o comportamento da autoblindagem na matriz de covariância não é o mesmo para os dois grupos de energia, pois os valores tem diferenças acentuadas na reação de espalhamento elástico. As reações de captura radioativa e total têm mudanças muito suaves de um grupo para outro. Estes fatos mencionados acima mostram a grande importância da autoblindagem no cálculo de grandezas responsáveis pelo projeto de reatores nucleares.

## 4.6 Metodologia 4: Utilização do MCNP5

Considera-se nessa seção a utilização do MCNP5 para determinar as seções de choque média do  $^{238}\text{U}$  e suas perturbações em 1% para os parâmetros de ressonância, bem como o fluxo de nêutrons médio no modelo tridimensional do reator. Essa metodologia permite considerar o sistema tridimensional do reator nuclear para o cálculo das grandezas de interesse da tese.

O MCNP5 foi executado com 4050 ciclos de 3000000 cada totalizando 12 bilhões de histórias. Foram solicitados os tallies de fluxo de nêutrons e taxas de reação das reações de captura e espalhamento elástico. O desvio relativo nos tallies foi de 0,0001 (absoluto). Dessa forma, o desvio ou incerteza no tally de reação ou fluxo é 0,0001 vezes o valor do tally. As tabelas 40 e 41 apresentam os Tallies calculados com o MCNP5 para os grupo 11 e 15 respectivamente. Os tallies foram calculados na referência nas perturbações +sigma e -sigma para os parâmetros de ressonância  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$ . As seções de choque de captura e espalhamento elástico nos grupos 11 e 15 foram obtidas utilizando a seguinte equação:

$$\sigma = \frac{\text{Tally de taxa de reação}}{\text{Tally de fluxo de nêutrons}} \cdot \frac{1}{\text{Concentração atômica do } ^{238}\text{U}}, \quad (4.17)$$

e os valores das seções de choque das tabelas 40 e 41 foram calculados utilizando a concentração atômica de 2,1692E-02 átomos/barn-cm. Os valores +sigma e -sigma das Tabelas 40 e 41 são usados nas equações 3.11 a 3.14 para obter a derivada da seção de choque em 2sigma.

Tabela 40 – Valores calculados com MCNP5 no grupo 11

Captura				
	+sigma GN	-sigma GN	+sigma GG	-sigma GG
MCNP-FLUXO	0,0007997	0,0008017	0,0007998	0,0008017
MCNP-RR(MT=102)	0,0004491	0,0004466	0,0004491	0,0004467
Seção de Choque	25,8857192	25,6822670	25,8858008	25,6858806
Elástico				
	+sigma GN	-sigma GN	+sigma GG	-sigma GG
MCNP-FLUXO	0,0007997	0,0008017	0,0007998	0,0008017
MCNP-RR(MT=2)	0,0002524	0,0002510	0,0002512	0,0002522
Seção de Choque	14,5517244	14,4335746	14,4810409	14,5049280

Fonte: Do autor

Tabela 41 – Valores Calculados com MCNP5 no Grupo 15

Captura				
	+sigma GN	-sigma GN	+sigma GG	-sigma GG
MCNP-FLUXO	0,0009037	0,0009057	0,0009039	0,0009057
MCNP-RR(MT=102)	0,0003200	0,0003176	0,0003202	0,0003174
Seção de Choque	16,3228031	16,1638996	16,3290189	16,1580461
Elástico				
	+sigma GN	-sigma GN	+sigma GG	-sigma GG
MCNP-FLUXO	0,0009037	0,0009057	0,0009039	0,0009057
MCNP-RR(MT=2)	0,0002779	0,0002753	0,0002758	0,0002779
Seção de Choque	14,1775507	14,0106642	14,0662425	14,1473824

Fonte: Do autor

As Tabelas 42 e 43 mostram, respectivamente para os grupos 11 e 15, um exemplo de obtenção da seção de choque média obtidos pelo ROLAIDS ( $\sigma_\gamma$ ) do  $^{238}\text{U}$  na região combustível da célula unitária do reator IPEN/MB-01 considerando a perturbação +sigma em  $\Gamma_\gamma$ . As Tabelas mostram as seções de choque ( $\sigma_\gamma$ ) do  $^{238}\text{U}$  nas 10 regiões consideradas anteriormente e o correspondente fluxo de nêutrons na segunda coluna. A terceira coluna mostra o produto entre essas duas grandezas e na última linha tem-se a somatória geral. A seção de choque média ( $\sigma_\gamma$ ) do  $^{238}\text{U}$  foi calculada utilizando a equação 3.10 e é mostrada na final da quarta coluna. Dessa forma existe uma consistência entre as seções de choque médias calculadas por MCNP5 e ROLAIDS.

Tabela 42 – Seção de choque média Captura do  $^{238}\text{U}$  no grupo 11

Captura	+sigma GG		
$\sigma_\gamma$	Fluxo de Nêutrons	$\sigma_\gamma \phi$	Total
1,22725E+01	1,3220E-01	1,6224	
1,2987E+01	1,3423E-01	1,7432	
1,3769E+01	1,3595E-01	1,8718	
1,4700E+01	1,3764E-01	2,0233	
1,5860E+01	1,3938E-01	2,2105	
1,7385E+01	1,4123E-01	2,4553	
1,9562E+01	1,4327E-01	2,8026	
2,3163E+01	1,4562E-01	3,3731	
3,1637E+01	1,4859E-01	4,7010	
8,8976E+01	1,5400E-01	13,7023	
	1,41E+00	36,5059	25,85

Fonte: Do autor



Tabela 43 – Seção de Choque Média de Captura do  $^{238}\text{U}$  no Grupo 15

Captura	+sigma GG		
	$\sigma_\gamma$	Fluxo de Nêutrons	$\sigma_\gamma\phi$
10,0682	0,1503	1,5133	
10,4211	0,1528	1,5928	
10,8040	0,1548	1,6729	
11,2515	0,1567	1,7632	
11,7990	0,1585	1,8710	
12,5087	0,1605	2,0076	
13,5103	0,1624	2,1952	
15,1397	0,1646	2,4926	
18,8476	0,1671	3,1505	
45,2439	0,1713	7,7530	
	1,59944	26,01257	16,26354

Fonte: Do autor

Os resultados das tabelas 42 e 43 são uma amostra dos dados usados nas equações 3.11 a 3.14 para obter as derivadas das seções de choque na metodologia 3 e assim comparar com os valores obtidos da metodologia 4.

#### 4.6.1 Determinação Numérica das Derivadas $\frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_j}$ via MCNP5

Tabela 44 mostra uma comparação entre os resultados das derivadas obtidas com MCNP5 [16] e metodologia (3) ROLAIDS para  $\frac{\partial\sigma_{xg}}{\partial p_l}$  no grupos 11 e 15 com perturbação de 1% nos parâmetros de ressonância  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$ . Comparação entre essas duas metodologias mostra que elas possuem uma concordância muito boa e apoiam todo o procedimento desenvolvido neste trabalho para obter a matriz de covariância de multigrupo.

Tabela 44 – Comparação dos resultados Obtidos por MCNP5 e ROLAIDS no Grupo 11 e Grupo 15

Grupo 11	$\Gamma_\gamma$			$\Gamma_n$		
	MCNP5	ROLAIDS	Diferença(%)	MCNP5	ROLAIDS	Diferença(%)
293K						
$\frac{d\sigma_\gamma}{dp_l}$	434,61	445,85	2,52	6813,54	6658,03	2,33
$\frac{d\sigma_n}{dp_l}$	-51,93	-52,41	0,91	3956,79	3966,98	0,25
Grupo 15	$\Gamma_\gamma$			$\Gamma_n$		
293K						
$\frac{d\sigma_\gamma}{dp_l}$	370,18	367,81	0,64	774,38	785,10	-1,36
$\frac{d\sigma_n}{dp_l}$	-129,68	-131,79	-1,60	813,29	801,20	1,50

Fonte: Do autor

Os resultado da tabela 44 mostram uma diferença razoável entre as derivadas nas metodologias 3 e 4 no grupo 15, mas que não invalida o que já foi concluído com relação a metodologia 1.

#### 4.6.2 Matriz de Covariância via MCNP5

Com base nos dados obtidos sobre as derivadas das seções de choque usando a metodologia 4, podemos calcular a matriz de covariância para os grupos 11 e 15. Os valores das derivadas das seções de choque de captura e espelhamento elástico pode-se estimar o valor da covariância na metodologia 4.

A tabela 45 apresenta a comparação entre metodologia 3 e metodologia 4 com perturbação de 1% nos parâmetros de ressonância usando MCNP5 e 0,0625% para o ROLAIDS.

Tabela 45 – Comparação da Matriz de Covariância entre Metodologia 3 e Metodologia 4

Grupo 11 - JENDL 3.3			
	MCNP5	ROLAIDS	Diferença (%)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 11} \rangle$	0,2015	0,2028	-0,6841
$\langle \delta\sigma_{n11} \delta\sigma_{n11} \rangle$	0,0083	0,0083	-0,0909
Grupo 15 - JENDL 3.3			
	MCNP5	ROLAIDS	Diferença (%)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 15} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	0,3230	0,3066	5,3598
$\langle \delta\sigma_{n15} \delta\sigma_{n15} \rangle$	3,8793	3,8338	1,1860
Grupo 11-15 JENDL 3.3			
	MCNP5	ROLAIDS	Diferença (%)
$\langle \delta\sigma_{\gamma 11} \delta\sigma_{\gamma 15} \rangle$	-0,1864	-0,1784	4,4630
$\langle \delta\sigma_{n11} \delta\sigma_{n15} \rangle$	0,1172	0,1157	1,2380

Fonte: Do autor

Os resultados da tabela 45 mostram que a interação entre os grupos 11 e 15 na covariância da seção de choque de captura é anti correlacionada nas duas metodologias. Os demais valores são todos correlacionados. Contrário das derivadas das seções de choque apresentados na Tabela 44, os valores da tabela 45 apresentam diferenças percentuais significativas nas covariâncias da seções de choque, mas sem inviabilizar os resultado da metodologia 3. Portanto, a metodologia 4 confirma de forma independente a validade da metodologia 3.

#### 4.6.3 Ilustração da Determinação da Incerteza no $k_{eff}$

Tabela 46 mostra o  $k_{eff}$  e sua correspondente derivadas em relação a  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$  para as ressonâncias localizada em 6,67 eV e 20,87 eV. O cálculo das derivadas envolveu somente a aproximação 2 sigma. No desenvolvimento a seguir essas ressonâncias serão referenciadas, respectivamente, como ressonâncias 1 e 2.

A seguir determinou-se a incerteza no  $k_{eff}$  devido as incertezas e correlações existentes nos parâmetros de ressonância  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$  fornecidos na Tabela 21. Tabela 47 mostra a incerteza no  $k_{eff}$  bem como as contribuições parciais de cada ressonância. Os

Tabela 46 –  $k_{eff}$  e Derivadas em relação a  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$ 

Ressonância 1					
$k_{eff} + \text{sigma}\Gamma_n$	$k_{eff} - \text{sigma}\Gamma_n$	$k_{eff} + \text{sigma}\Gamma_\gamma$	$k_{eff} - \text{sigma}\Gamma_\gamma$	$\frac{dk_{eff}}{d\Gamma_n}$	$\frac{dk_{eff}}{d\Gamma_\gamma}$
9,98110E-01	9,98950E-01	9,98100E-01	9,98930E-01	-2,81313E+01	-1,80435E+00
Ressonância 2					
$k_{eff} + \text{sigma}\Gamma_n$	$k_{eff} - \text{sigma}\Gamma_n$	$k_{eff} + \text{sigma}\Gamma_\gamma$	$k_{eff} - \text{sigma}\Gamma_\gamma$	$\frac{dk_{eff}}{d\Gamma_n}$	$\frac{dk_{eff}}{d\Gamma_\gamma}$
0,998354	0,998680	0,998340	0,998710	-1,5887	-0,8075

Fonte: Do autor

superescritos nos símbolos  $\langle \sigma_1^{k_{eff}} \sigma_1^{k_{eff}} \rangle$ ,  $\langle \sigma_2^{k_{eff}} \sigma_2^{k_{eff}} \rangle$  e  $\langle \sigma_1^{k_{eff}} \sigma_2^{k_{eff}} \rangle$  referem-se as ressonâncias 1 e 2.

Tabela 47 – Matriz de Covariância do  $k_{eff}$  e respectiva incerteza.

$\langle \sigma_1^{k_{eff}} \sigma_1^{k_{eff}} \rangle$	$\langle \sigma_2^{k_{eff}} \sigma_2^{k_{eff}} \rangle$	$\langle \sigma_1^{k_{eff}} \sigma_1^{k_{eff}} \rangle + \langle \sigma_2^{k_{eff}} \sigma_2^{k_{eff}} \rangle$	$\langle \sigma_1^{k_{eff}} \sigma_2^{k_{eff}} \rangle$	Soma Total
3,45566E-06	1,75108E-06	5,20674E-06	-1,87818E-06	3,32857E-06
Incerteza correspondente no $k_{eff}$ (pcm)				
186	132	228	-	182

Fonte: Do autor

Os símbolos  $\langle \sigma_1^{k_{eff}} \sigma_1^{k_{eff}} \rangle$ ,  $\langle \sigma_2^{k_{eff}} \sigma_2^{k_{eff}} \rangle$ ,  $\langle \sigma_1^{k_{eff}} \sigma_2^{k_{eff}} \rangle$  e a soma total são definidos como:

$$\langle \sigma_1^{k_{eff}} \sigma_1^{k_{eff}} \rangle = \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_n^1} \langle \delta\Gamma_n^1 \delta\Gamma_n^1 \rangle \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_n^1} + 2 \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_n^1} \langle \delta\Gamma_n^1 \delta\Gamma_\gamma^1 \rangle \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_\gamma^1} + \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_\gamma^1} \langle \delta\Gamma_\gamma^1 \delta\Gamma_\gamma^1 \rangle \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_\gamma^1} \quad (4.18)$$

$$\langle \sigma_2^{k_{eff}} \sigma_2^{k_{eff}} \rangle = \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_n^2} \langle \delta\Gamma_n^2 \delta\Gamma_n^2 \rangle \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_n^2} + 2 \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_n^2} \langle \delta\Gamma_n^2 \delta\Gamma_\gamma^2 \rangle \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_\gamma^2} + \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_\gamma^2} \langle \delta\Gamma_\gamma^2 \delta\Gamma_\gamma^2 \rangle \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_\gamma^2} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^{k_{eff}} \sigma_2^{k_{eff}} \rangle &= \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_n^1} \langle \delta\Gamma_n^1 \delta\Gamma_n^2 \rangle \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_n^2} + \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_n^1} \langle \delta\Gamma_n^1 \delta\Gamma_\gamma^2 \rangle \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_\gamma^2} + \\ &+ \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_\gamma^1} \langle \delta\Gamma_\gamma^1 \delta\Gamma_\gamma^2 \rangle \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_\gamma^2} + \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_n^2} \langle \delta\Gamma_n^2 \delta\Gamma_\gamma^1 \rangle \frac{dk_{eff}}{d\Gamma_\gamma^1}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

a notação  $\langle \delta\Gamma_\gamma^i \delta\Gamma_\gamma^j \rangle$  refere-se aos elementos da matriz de covariância dos parâmetros de ressonância da Tabela 21 para as ressonâncias  $i$  e  $j$ , a incerteza no  $k_{eff}$  mostrada na última linha da tabela 47 refere-se a raiz quadrada do respectivo componente da matriz de covariância do  $k_{eff}$ , e a incerteza total é dada por:

$$\sigma_{eff} = \sqrt{\langle \sigma_1^{k_{eff}} \sigma_1^{k_{eff}} \rangle + \langle \sigma_2^{k_{eff}} \sigma_2^{k_{eff}} \rangle + 2 \langle \sigma_1^{k_{eff}} \sigma_2^{k_{eff}} \rangle} \quad (4.21)$$

As derivadas do  $k_{eff}$  em relação aos parâmetros de ressonância  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$  mostradas na Tabela 47 são sempre negativas. Consequentemente o produto entre quaisquer duas

derivadas nas Equações 4.17 a 4.19. A equação 4.19 será sempre positivo e a contribuição do termo cruzado na incerteza do  $k_{eff}$  vai depender se  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$  são positivamente correlacionados ou ante correlacionados. Tabela 21 mostra que  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_\gamma$  são positivamente correlacionados para a ressonância 1 e ante correlacionados para a ressonância 2. Dessa forma, considerando a correlação entre  $\Gamma_n$  e  $\Gamma_n$  a incerteza aumenta no  $k_{eff}$  aumenta na contribuição da ressonância 1 diminui na ressonância 2. O efeito da correlação entre ressonâncias é mais complicado devido a contribuição relativa dos vários termos da Equação 4.19. Entretanto, Tabela 47 ilustra o progresso da obtenção da incerteza total no  $k_{eff}$ . Observa-se que a contribuição da correlação entre as duas ressonâncias é negativa e esse fato faz com que a incerteza total decresça em relação ao caso da não considerar dessa correlação. Nota-se que a incerteza total é inclusive menor do que a correspondente contribuição da ressonância 1. Essas observações demonstram que a matriz de correlação dos parâmetros de ressonância desempenha papel fundamental na determinação da incerteza do  $k_{eff}$ .

## 5 CONCLUSÃO

Os objetivos da tese foram alcançados plenamente, mesmo com a escassa disponibilidade de informações nas bibliotecas de dados nucleares relativas a matriz de covariância do actínido  $^{238}\text{U}$ . Os resultados oriundos destes objetivos foram o desenvolvimento e a comprovação da existência de metodologias alternativas para a elaboração de métodos que estimassem as covariâncias em grandezas de interesse no projeto de reatores nucleares térmicos. Os efeitos de autoblindagem na matriz de covariância foram levados em consideração e possuem relevância fundamental e devem ser levados em consideração para determinar essa matriz. O processo efetuado levou em consideração tanto os efeitos direto como os indiretos na determinação das derivadas das seções de choque em relação aos parâmetros de ressonância. Os resultados provenientes do método elaborado tem concordância significativa com os provenientes do MCNP5, o qual reafirma a validação das metodologias desenvolvidas na tese.

O NJOY (metodologia 1) apresenta resultados que ignoram as formulações desenvolvidas nos estudos das covariâncias, e mostra resultados muito distantes da realidade, pois não considera dois efeitos fundamentais para a determinação da matriz de covariância no formalismo de multigrupo: os termos indiretos, devido ao fluxo de nêutrons, e o efeito da temperatura, ambos nas derivadas das seções de choque. Outro problema descoberto nessa tese foi o uso de um modelo de ressonância inadequado para algumas bibliotecas, uma vez que na rotina ERRORR do NJOY é empregado no modelo Breit-Wigner, ao invés de ser utilizado o modelo listado da biblioteca em uso (Reich-Moore nos casos considerados). A metodologia 1 (NJOY) não considera variações com a temperatura, pois exhibe o mesmo valor para todas as temperaturas nas duas bibliotecas utilizadas na tese.

Do ponto de vista computacional, a metodologia 2 é bastante trabalhosa e demanda uma quantidade de tempo considerável para a obtenção dos resultados. Cada item é calculado com um conjunto definido de temperaturas e em parâmetros específicos isoladamente (largura de captura do nêutron e largura do nêutron). A qualidade dos resultados esta diretamente ligada a quantidade de pares de pontos das grandezas envolvidas nos processos de obtenção de seções de choque e fluxo de nêutrons, fazendo com que o tempo de processamento seja expressivo.

A partir da observação dos aspectos apresentados no capítulo 4 entendemos que a metodologia 3, desenvolvida na tese, demonstra ser mais adequada para uma utilização mais específica dos dados de covariância, devido a um conjunto grande de ressonâncias do nuclídeo escolhido. Sendo assim os resultados são mais direcionados as regiões (grupos) de energias de interesse particular. A metodologia 3 despende menos tempo do que a

metodologia 2, e gera resultados apropriados ao estudo da covariância das seções de choque. O motivo deste fato é a diferença percentual entre os resultados das metodologias 2 e 3 ser desprezível.

Vindo de encontro as conclusões apresentadas anteriormente sobre a metodologia 3, concluímos que a metodologia 4 também demonstra que a metodologia 3 é mais apropriada do que as outras, a partir da consideração de que a metodologia 4 não permite o uso de perturbações abaixo de 1%, devido ao valor do desvio padrão do software e torna abordagens em valores de perturbação muito pequenos impossível de serem realizadas. Além disso, a metodologia 4 considera o modelo do reator com um todo e em oposição, a metodologia 3 considera diretamente a célula unitária do núcleo do reator em estudo.

Os efeitos de autoblindagem são importantes para o cálculo das derivadas e das covariâncias das seções choque, porque mostram de forma real um fenômeno de natureza conservativa. Os dados da autoblindagem expressam que a flutuação dos valores do fator de autoblindagem na matriz de covariância em relação ao aumento da temperatura são muito sutis, ou seja, a diferença entre um valor e outro esta na quinta ou sexta casa decimal dos valores do fator de autoblindagem.

Portanto, a tese mostra que as covariâncias nos dados nucleares ainda são um grande tema de desenvolvimento da área nuclear e que ainda existem detalhes a serem explorados sob uma perspectiva aplicada, pois serve como parâmetro de segurança e como parâmetro de projeto. As metodologias desenvolvida na tese servem para aplicações pontuais, pois é inviável elaborar os dados de mais 1000 ressonâncias do actínídeo  $^{238}\text{U}$ . As metodologias propostas na tese comprovam que as covariâncias das seções choque são uma área ainda em estudo e demandam de mais desenvolvimento computacional para satisfazer os conjunto de dados presentes nas bibliotecas de dados nucleares.

## 6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] MACFARLANE, R.E. An introduction to the ENDF formats. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2000.
- [2] LEAL, L.C.; LARSON, N. M.; DERRIEN, H.; KAWANO, T.; CHADWICK, M.B. A New Approach for Nuclear Data Covariance and Sensitivity Generation. *International Conference on Nuclear Data for Science and Tecnology*, New York: American Institute of Physics, 2005.
- [3] REARDEN, Bradley ; WILLIAMS, M. Overview of the SCALE TSUNAMI sensitivity and uncertainty analysis tools. Nuclear Science and Technology Division. n 96. Oak Ridge: Oak Ridge National Laboratory, 1994.
- [4] WERNER, C.J."MCNP Users Manual - Code Version 6.2", Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, report LA-UR-17-29981 ,2017.
- [5] SMITH, D. L. *Covariance matrices and applications to the field of nuclear data*. United States: Argonne National Lab, 1981.
- [6] SMITH, J. D. *Processing ENDF/B-V uncertainty data into multigroup covariance matrices*. Tennessee (United States): OAK RIDGE NATIONAL LABORATORY, 1980.
- [7] BROWN, D.A.; CHADWICK, M.B.; e al. ENDF/B-VIII.0: The 8 th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data. *Nuclear Data Sheets*, Vol.148, p.1–142, 2018.
- [8] SHIBATA, Keiichi; IWAMOTO, Osamu; NAKAGAWA, Tsuneo; IWAMOTO, Nobuyuki; ICHIHARA, Akira; KUNIEDA, Satoshi; CHIBA, Satoshi; FURUTAKA, Kazuyoshi; OTUKA, Naohiko; OHASAWA, Takaaki; MURATA, Toru; MATSUNOBU, Hiroyuki. JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering. *Journal of Nuclear Science and Technology*, Vol.48, n.1,p.1-30, 2011.
- [9] GLINATSI, Georgios; CARTA, Mario; GUGIU, Daniela; IKONOMOPOULOS, Andreas; VISAN, Iuliana. An investigation of the JEFF 3.2 nuclear data library. *Annals of Nuclear Energy*. Vol.168, p.108-885, 2021.
- [10] GE, Zhigang; XU, Ruirui; WU, Haicheng; ZHANG, Yue; CHEN, Guochang ; JIN, Yongli; SHU, Nengchuan; CHEN, Yongjing; TAO, Xi; TIAN, Yuan; LIU, Ping; QIAN, Jing; WANG, Jimin; ZHANG, Huanyu; LIU, Lile; HUANG, Xiaolong. CENDL-3.2: The new version of Chinese general purpose evaluated nuclear data library. *EPJ Web of Conferences*. Vol.239, 2020.

- [11] A.I. Blokhin, E.V. Gai, A.V. Ignatyuk, I.I. Koba, V.N. Manokhin, V.N. Pronyaev, "New version of neutron evaluated data library BROND-3.1", **Yad.Reak.Konst**, N.: 2, p.62, 2016.
- [12] LARSON, N. M., "Updated Users' Guide for SAMMY: Multilevel R-Matrix Fits to Neutron Data Using Bayes' Equations," ORNL/TM-9179/R8 ENDF-364/R2. October 2008.
- [13] GANESAN, S. Nuclear Data Covariances in the Indian Context - Progress, Challenges, Excitement and Perspectives. **Nuclear Data Sheets**, Vol.123, p. 21-26, 2015.
- [14] BENSTEAD, J.. The importance of covariance in nuclear data uncertainty propagation studies. International Conference on the Physics of Reactors 2012, PHYSOR 2012: Advances in Reactor Physics. Ed.3, p.2535-2543, 2012.
- [15] KLEIN, Markus; GALLNER, Lucia; KRZYKACZ-HAUSMANN, Bernard; PASICHNYK, Ihor; PAUTZ, Andreas; ZWERMANN, Winfried. Influence of Nuclear Data Covariance on Reactor Core Calculations. INTERNATIONAL CONFERENCE ON MATHEMATICS AND COMPUTATIONAL METHODS APPLIED TO NUCLEAR SCIENCE AND ENGINEERING, May 8-12, 2011, Rio de Janeiro, RJ.
- [16] MACFARLANE, Robert; MUIR, Douglas W.; BOICOURT, R. M.;KAHLER, Albert Comstock; CONLIN, Jeremy Lloyd. **The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2016**. Los Alamos (United States): Los Alamos National Laboratory, 2017.
- [17] GREEN, N.M.; FORD, W.E.; PETRIE, L.M.; DIGGS, B.R.; WEBSTER, C.C.; LUCIUS, J.L.; WHITE, J.E.; WRIGHT, R.Q.; WESTFALL, R.M. **AMPX: a modular system for multigroup cross-section generation and manipulation**. Tennessee (United States): OAK RIDGE NATIONAL LABORATORY, 1977.
- [18] DOS SANTOS, A. , et. al., LEU-COMP-THERM-077: Critical Loading Configurations of the IPEN/MB-01 Reactor. In: Briggs, J. Blair (Ed.), in: **International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments**. NEA/NSC/DOC (95)03/I, Paris (2014).
- [19] CHADWICK, M.; OBLOZINSKY, P.; HERMAN, Michal; GREENE, N.; MCKNIGHT, R.; SMITH, D.; YOUNG, P.; MACFARLANE, R.; HALE, G.; FRANKLE, S.; KAHLER, A.C.; KAWANO, T.; LITTLE, Robert; MADLAND, D.; MOLLER, P.; MOSTELLER, R.; PAGE, Philip; TALOU, Patrick; TRELLEUE, H.; VAN DER MARCK, Steven. ENDF/B-VII.0: Next Generation Evaluated Nuclear Data Library for Nuclear Science and Technology. **Nuclear Data Sheets**. Vol.107, N.12, p.2931-3060, 2006.
- [20] CHIBA, Go; TSUJI, Masashi;NARABAYASHI, Tadashi. Resonance Self-Shielding Effect in Uncertainty Quantification of Fission Reactor Neutronics Parameters. **Nuclear Engineering and Technology**, Vol. 46, N.3, 2014.



- [21] KAWANO, Toshihiko; SHIBATA, Keiichi. Uncertainty Analyses in the Resolved Resonance Region of  $^{235}\text{U}$ , and  $^{238}\text{U}$ , and  $^{239}\text{Pu}$  with the Reich-Moore R-Matrix Theory for JENDL-3.2. *Journal of Nuclear Science and Technology*, Vol.39, N.8, p.807-815, 2012.
- [22] LEAL, L.C.; ARBANAS, G.; WIARDA, D.; DERRIEN, H.; Resonance Region Covariance Analysis Method and New Covariance Data for  $^{232}\text{Th}$ ,  $^{233}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ , and  $^{239}\text{Pu}$ . *Nuclear Data Sheets*, Vol 109, N.12,p 2868-2873, 2008.
- [23] OTUKA, Naohiko.; ZUKERAN, Atsushi.; TAKANO, Hideki.; CHIBA, Go.; Ishikawa, M.. Covariance Analyses of Self-Shielding Factor and Its Temperature Gradient for Uranium-238 Neutron Capture Reaction. *Journal of Nuclear Science and Technology*. Vol.: 45, N.3 p. 195-210, 2008.
- [24] PEREY, F. G. *The Data Covariance Files for ENDF/B-V*. Tennessee (United States): Oak Ridge National Laboratory, 1977.
- [25] PEREY, F. G. *Expectations For ENDF/B-V Covariance Files: Coverage, Strength and Limitations*. Tennessee (United States): Oak Ridge National Laboratory, 1978.
- [26] IGARASI, Sin-iti. Japanese Evaluated Nuclear Data Library (JENDL). *Journal of Nuclear Science and Technology*. Vol.26, p.5-10, 1989.
- [27] UENOHARA, Yuji; KANDA, Yukinori. Significance of Covariance Matrices in Nuclear Data Evaluation. *Journal of Nuclear Science and Technology*. Vol.20, p.967-969, 1983.
- [28] SHIBATA, Keiichi;KAWANO, Toshihiko;NAKAGAWA, Tsuneo; e al. Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 3 Revision-3: JENDL-3.3. *Journal of Nuclear Science and Technology*. Vol. 39, N. 11 ,p. 1125–1136, 2002.
- [29] VANHANEN, Risto. Computing More Consistent Multigroup Nuclear Data Covariances. *Nuclear Science and Engineering*. Vol.181, 2015.
- [30] BELL, George C.; GLASSTONE, Samuel. *Nuclear Reactor Theory*. American Nuclear Society: 1970.
- [31] ZWERMANN, Winfried ; KRZYKACZ-HAUSMANN, B. ; GALLNER, L. ; PAUTZ, Andreas ; MATTES, M.. Uncertainty Analyses with Nuclear Covariance Data in Reactor Core Calculations. *Journal of the Korean Physical Society*. Vol.59, p.1256-1259, 2011.
- [32] BREIT, G.;WIGNER, E. Capture of slow neutrons. *Physical Review*, v. 49, p. 519-531, 1936.
- [33] PETKOV, Vesselin; ZWORSKIi, Maciej. Breit-Wigner Approximation and the Distri-

- bution of Resonances. *Communications in Mathematical Physics*. Vol 204, 1970.
- [34] GOEBEL, C.; MCVOY, K.. Eigenphases and the Generalized Breit-Wigner Approximation. *Physical Review*, Vol.: 164, pág.: 1932-1936, 1967.
- [35] ARBANAS, Goran; SOBES, Vladimir; HOLCOMB, Andrew; DUCRU, Pablo; PIGNI, Marco; WIARDA, Dorothea. Generalized Reich-Moore R-matrix approximation. EPJ Web of Conferences. Vol.146, p.12006, 2017.
- [36] ROSE, E.; COOK, J.; BERTRAM, W.. Statistics for Adler-Adler Resonance Parameters. *Australian Journal of Physics*, Vol 27, 1974.
- [37] Pisent, G.. A finite algorithm for the R-matrix description of nuclear resonances. *Lettere Al Nuovo Cimento*. Vol.: 36, pág.: 461-466, 1983.
- [38] LEAL, Luiz C.. Resonance parameter covariance representation: file32 versus file33. *EPJ Nuclear Sciences and Technologies*, Vol.4, N.17, 2018.
- [39] SEGEV, M.. A Theory of Resonance-Group Self-Shielding, *Nuclear Science and Engineering*, Vol.56, N.1, p. 72-82, 1975.
- [40] CULLEN, Dermott E. *The Importance of Resonance Self-Shielding*. Livermore: INDC International Nuclear Data Committee, 2019.
- [41] JANEVA, N.; KOYUMDJIEVA, Nina; LUKYANOV, A.; VOLEV, Konstantin. Resonance Self-Shielding in the Actinides. *Journal of Nuclear Science and Technology*. Vol.39, p.944-946, 2002.
- [42] Self-Shielding - Energy and Spacial. Nuclear Power. Disponível em: <https://www.nuclear-power.com/nuclear-power/reactor-physics/nuclear-engineering-fundamentals/neutron-nuclear-reactions/self-shielding/>. Acesso em 30/09/2018.
- [43] CHIBA, Go ; TSUJI, Masashi ; NARABAYASHI, Tadashi. Uncertainty quantification of neutronic parameters of light water reactor fuel cells with JENDL-4.0 covariance data. *Journal of Nuclear Science and Technology*. Vol.50, N.7, p.751-760, 2013.
- [44] BARHEN, J.; ROTHENSTEIN, W.; TAVIV, E.; The HAMMER Code System, Palo Alto, CA, Elétric Power Research Inst., (EPRI-NP-565- Project 709), 1978.
- [45] ABDULHAMEED, A. ; MEMON, Qurban. An improved Trapezoidal rule for numerical integration. *Journal of Physics: Conference Series*. Vol.: 2090, 2021.
- [46] VELLEMAN, Daniel J. The Generalized Simpson's Rule. *The American Mathematical Monthly*, vol. 112, no. 4, p. 342-350, Mathematical Association of America, 2005.
- [47] ZHANG, Qian; Wu, Hongchun; CAO, Liangzhi; ZHENG, Youqi; An Improved Resonance Self-Shielding Calculation Method Based on Equivalence Theory Nuclear. *Science and Engineering*, Volume 179, Issue 3: Pages 233-252. 2017.

- [48] BONDARENKO, I. I. , Group Constants for Nuclear Reactor Calculations. *Consultants Bureau*, New York ,1964.

## 7 ANEXOS

1\$\$ 2 12 12 1 1 1  
2\$\$ 24 1 0 0 12 62 2 55  
3\$\$ 3 1  
4\*\* 0.600 5.50+3 1.0 293 180 T  
5\*\* 0.0 0.134229 0.189829 0.232492 0.268458 0.300146 0.328793  
0.355137 0.379658 0.402688 0.424470 0.490370 0.846284  
6\$\$ 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12  
7\$\$ 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12  
9\*\* F293.0  
11\$\$ 825 2625 2631 2634 2637 2825 2831 2834 2837 2843 2425  
2431 2434 2437 2525 1400 600 9225 9228 1525 1600 2725 4200  
125 9237  
13\$\$ 4R1 4R2 4R3 4R4 4R5 4R6 4R7 4R8 4R9 4R10 20R11 2R12  
14\$\$ 9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
2625 2631 2634 2637  
2825 2831 2834 2837 2843  
2425 2431 2434 2437  
2525 1400  
1525 600 1600 2725 4200  
825 125  
15\*\* 7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
3.35821-3 5.07906-2 1.15296-3 1.49655-4  
5.29003-3 1.96954-3 8.42265-5 2.63876-4 6.54899-5  
7.15969-4 1.32615-2 1.47516-3 3.59680-4  
1.37621-3 6.38384-4  
3.76261-5 1.05614-4 1.46755-5 1.63529-4 7.94245-5  
3.3368-2 6.6736-2 T

1\$\$ 2 12 12 1 1 -1  
2\$\$ 25 0 0 0 12 62 6 55  
3\$\$ 3 1  
4\*\* 0.625 5.531+3 1.0 293 180 T  
5\*\* 0.0 0.134229 0.189829 0.232492 0.268458 0.300146 0.328793  
0.355137 0.379658 0.402688 0.424470 0.490370 0.846284  
6\$\$ 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12  
7\$\$ 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12  
9\*\* F293.0  
11\$\$ 825 2625 2631 2634 2637 2825 2831 2834 2837 2843 2425  
2431 2434 2437 2525 1400 600 9225 9228 1525 1600 2725 4200  
125 9237  
13\$\$ 4R1 4R2 4R3 4R4 4R5 4R6 4R7 4R8 4R9 4R10 20R11 2R12  
14\$\$ 9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
9225 9228 9237 825  
2625 2631 2634 2637  
2825 2831 2834 2837 2843  
2425 2431 2434 2437  
2525 1400  
1525 600 1600 2725 4200  
825 125  
15\*\* 7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
7.8462-6 9.9924-4 2.1694-2 4.5489-2  
3.35821-3 5.07906-2 1.15296-3 1.49655-4  
5.29003-3 1.96954-3 8.42265-5 2.63876-4 6.54899-5  
7.15969-4 1.32615-2 1.47516-3 3.59680-4  
1.37621-3 6.38384-4  
3.76261-5 1.05614-4 1.46755-5 1.63529-4 7.94245-5  
3.3368-2 6.6736-2 T

---

---

---

**INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES**  
Diretoria de Pesquisa, Desenvolvimento e Ensino  
Av. Prof. Lineu Prestes, 2242 – Cidade Universitária CEP: 05508-000  
Fone/Fax(0XX11) 3133-8908  
SÃO PAULO – São Paulo – Brasil  
<http://www.ipen.br>

**O IPEN é uma Autarquia vinculada à Secretaria de Desenvolvimento, associada à Universidade de São Paulo e gerida técnica e administrativamente pela Comissão Nacional de Energia Nuclear, órgão do Ministério da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações.**

---

---

---