

Daniel de Almeida Magalhães Campolina

**Utilização do Método da Amostragem para
Propagação de Incertezas de Parâmetros
Físicos em Sistemas com Material Físsil**

Belo Horizonte

Outubro de 2015

Daniel de Almeida Magalhães Campolina

Utilização do Método da Amostragem para Propagação de Incertezas de Parâmetros Físicos em Sistemas com Material Físsil

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Ciências e Técnicas Nucleares do Departamento de Engenharia Nuclear da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Ciências e Técnicas Nucleares. Área de concentração: Engenharia Nuclear e da Energia. Linha de Pesquisa: Tecnologia de Reatores Nucleares e Ciclos do Combustível.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

ESCOLA DE ENGENHARIA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS E TÉCNICAS NUCLEARES

Orientador: Maria Auxiliadora Fortini Veloso

Coorientador: Claúbia Pereira Bezerra Lima

Belo Horizonte

Outubro de 2015

C198u

Campolina, Daniel de Almeida Magalhães.

Utilização do método da amostragem para propagação de incertezas de parâmetros físicos em sistemas com material físsil [manuscrito] / Daniel de Almeida Magalhães Campolina. – 2015.
123 f., enc.: il.

Orientadora: Maria Auxiliadora Fortini Veloso.

Coorientadora: Cláudia Pereira Bezerra Lima.

Tese (doutorado) Universidade Federal de Minas Gerais,
Escola de Engenharia.

Apêndices e Anexos: f. 97-123.

Bibliografia: f. 87-91.

1. Engenharia nuclear - Teses. I. Veloso, Maria Auxiliadora Fortini.
II. Lima, Cláudia Pereira Bezerra. III. Universidade Federal de Minas Gerais. Escola de Engenharia. IV. Utilização do método da amostragem para propagação de incertezas de parâmetros físicos em sistemas com material físsil.

CDU: 621.039(043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS E TÉCNICAS NUCLEARES



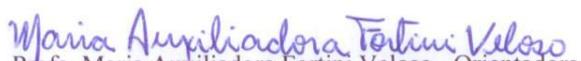
FOLHA DE APROVAÇÃO

Utilização do Método da Amostragem para Propagação de Incertezas de Parâmetros Físicos em Sistemas com Material Físsil

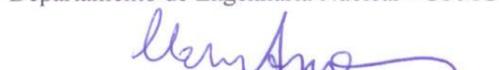
DANIEL DE ALMEIDA MAGALHAES CAMPOLINA

Tese submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em CIÊNCIAS E TÉCNICAS NUCLEARES, como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em CIÊNCIAS E TÉCNICAS NUCLEARES, área de concentração ENGENHARIA NUCLEAR E DA ENERGIA.

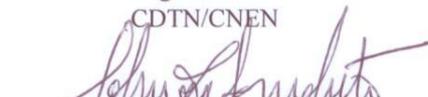
Aprovada em 28 de outubro de 2015, pela banca constituída pelos membros:

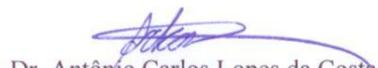

Profa. Maria Auxiliadora Fortini Veloso - Orientadora
Departamento de Engenharia Nuclear - UFMG


Profa. Cláudia Pereira Bezerra Lima – Co-orientadora
Departamento de Engenharia Nuclear - UFMG


Prof. Clarysson Alberto Mello da Silva
Departamento de Engenharia Nuclear - UFMG


Dr. Hugo Moura Dalle
CDTN/CNEN


Prof. Sabino José Ferreira Neto
Departamento de Estatística - UFMG


Dr. Antônio Carlos Lopes da Costa
CDTN/CNEN

Belo Horizonte, 28 de outubro de 2015.

Agradecimentos

Aos meus pais, Délio e Solange; aos meus irmãos, Thiago e Thalia; aos queridos Allan, Marco, Vitão, Marcelo, Paulinha, Roberta e os Bambas, pelo grande apoio. À Professora Cláudia e às professoras Fortini, pela orientação desde o primeiro projeto de iniciação científica em 2002. Ao Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear (CDTN), por facultar o desenvolvimento deste estudo no programa de trabalho da instituição. Ao mentor Hugo Dalle pelo exemplo de caráter e excelência profissional. Aos chefes Carlinhos, Elcio e Hugo Cesar, pelos direcionamentos certos. Aos jovens André, Vitor, Luiz Cláudio etc pelo otimismo e parceria nas dificuldades enfrentadas. Aos colegas do CDTN Edison, Francisco, Moisés, Marcelo, Glorinha, Ivan, Paulo Cesar, Carlão, José Afonso, Bruno, Vagner, Valdir, Marquinhos, Eduardo, Luis Leite, Cláudio, Sergio, Alberto, Stella, Rogério, Pablo, Raquel, João Roberto, Márcio, Vanderley, Fernando, Paulo Rubens, pelo grande apoio técnico ou pelo companheirismo na parte da minha vida que é dedicada à pesquisa e desenvolvimento da tecnologia nuclear.

*A humildade é a base e o fundamento de todas as virtudes
e sem ela não há nenhuma que o seja.
(Miguel Cervantes)*

Resumo

Existe uma incerteza associada a todos os componentes que integram o modelo de um sistema nuclear. Investigar o impacto destas incertezas na simulação é essencial para realização de cálculos mais realísticos, que vêm substituindo os cálculos conservadores à medida que o poder computacional aumenta. A utilização do método de amostragem para propagar incertezas em simulações que utilizam o método de Monte Carlo é recente devido ao grande custo computacional exigido. Por meio da análise da incerteza propagada para o Fator de Multiplicação Efetivo de nêutrons (k_{eff}), investigou-se os efeitos do número de amostras, da incerteza computacional e da eficiência do gerador de números aleatórios para representar as distribuições que caracterizam incertezas físicas no modelo do reator de pesquisa RA-6, do Centro Atômico de Bariloche. Este reator foi escolhido por apresentar as mesmas características (combustível, energia dos nêutrons no núcleo, revestimento e moderador) do Reator Multipropósito Brasileiro (RMB), que é o projeto mais importante atualmente no ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação para a área nuclear. Além disso existe um experimento de *benchmark* disponível para este reator. Um programa denominado GB_sample foi implementado para possibilitar a aplicação do método da amostragem aleatória, que exige um processo automatizado e com ferramentas robustas de estatística. O programa foi baseado no modelo de caixa preta e utilizou o código MCNPX trabalhando em processamento paralelo para o cálculo do transporte de nêutrons simulando o reator de pesquisa RA-6. As incertezas obtidas utilizando a metodologia desenvolvida foram comparadas com aquelas do *benchmark*, calculadas por meio de um método conservador. Verificou-se a possibilidade de melhorar a eficiência do método da amostragem aleatória através da seleção de distribuições obtidas de um gerador de números aleatórios a fim de conseguir uma melhor representatividade das incertezas. Após conseguir a convergência do método, no intuito de otimizar sua utilização, reduzindo a variância da incerteza propagada sem causar aumento no tempo computacional, verificou-se o tamanho ótimo da amostragem. Observou-se também que o efeito em k_{eff} devido a incertezas dos componentes físicos do reator em questão, são menores quando o método da amostragem é utilizado em substituição ao método conservador. A incerteza de 0,0025 mm no raio do veneno queimável gerou um efeito de 76 pcm no k_{eff} do sistema quando propagada pelo método da amostragem, enquanto que o valor superestimado pelo método conservador é 91 pcm. Com os resultados foi possível verificar o correto funcionamento do programa desenvolvido. Também foi verificado o potencial do método da amostragem para propagação de incertezas, principalmente quando muitos parâmetros com incerteza são avaliados conjuntamente no mesmo *input*, que é uma das vantagens do método da amostragem com relação ao método conservador.

Palavras-chaves: quantificação de incertezas, MCNPX, Método da Amostragem Aleatória.

Abstract

There is an uncertainty for all the components that comprise the model of a nuclear system. Assessing the impact of uncertainties in the simulation of fissionable material systems is essential for a realistic calculation that has been replacing conservative model calculations as the computational power increases. The propagation of uncertainty in a simulation using a Monte Carlo code by sampling the input parameters is recent because of the huge computational effort required. By analyzing the propagated uncertainty to the effective neutron multiplication factor (k_{eff}), the effects of the sample size, computational uncertainty and efficiency of a random number generator to represent the distributions that characterize physical uncertainty in a light water reactor was investigated. A program entitled GB_sample was implemented to enable the application of the random sampling method, which requires an automated process and robust statistical tools. The program was based on the black box model and the MCNPX code was used in and parallel processing for the calculation of particle transport. The uncertainties considered were taken from a benchmark experiment in which the effects in k_{eff} due to physical uncertainties is done through a conservative method. In this work a script called GB_sample was implemented to automate the sampling based method, use multiprocessing and assure the necessary robustness. It has been found the possibility of improving the efficiency of the random sampling method by selecting distributions obtained from a random number generator in order to obtain a better representation of uncertainty figures. After the convergence of the method is achieved, in order to reduce the variance of the uncertainty propagated without increase in computational time, it was found the best number of components to be sampled. It was also observed that if the sampling method is used to calculate the effect on k_{eff} due to physical uncertainties reported by manufacturers, there will be a reduction in the value compared to the conservative model. The results made it possible to verify the correct functioning of the program developed and show the potential of the sampling method for propagation of uncertainties, especially when many uncertainties are evaluated together in the same input.

Key-words: uncertainty quantification, MCNPX, sampling based method.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Três principais divisões da física com exemplos em sistemas nucleares. . .	24
Figura 2 – Distribuição simétrica e assimétrica.	34
Figura 3 – Precisão e acurácia.	35
Figura 4 – Esquema ilustrando a função vetorial $y = f(\vec{x})$ onde o código MCNPX é o sistema de caixa preta (seção 2.3.3).	45
Figura 5 – Foto do EC do reator RA-6, Fonte:(WYSS; JORGENSEN, 2010). . . .	46
Figura 6 – Detalhes geométricos do EC do reator RA-6, Fonte:(WYSS; JORGENSEN, 2010)	46
Figura 7 – Diagrama de blocos do processo automatizado pelo GB_sample.	48
Figura 8 – Exemplo de comandos do arquivo de entrada do GB_sample referentes a amostragem de parâmetros denominados P1, A1 e Y2.	49
Figura 9 – Organização de diretórios do GB_sample.	49
Figura 10 – Conteúdo resumido do arquivo <i>NEUTRONIC_DATA</i>	50
Figura 11 – Função em <i>Python</i> para cálculo da moda.	51
Figura 12 – Gráfico da distribuição do k_{eff} gerado automaticamente no diretório principal com o nome <i>PDF_keff_step0.jpeg</i>	51
Figura 13 – <i>Boxplot</i> de k_{eff} gerado automaticamente no diretório principal com o nome <i>BOX_PDF_keff_step0.jpeg</i>	52
Figura 14 – Fluxo de dados do GB_sample.	53
Figura 15 – Função em <i>Python</i> para aplicação do algoritmo para selecionar distribuições.	54
Figura 16 – Função em <i>Python</i> para gerar o dicionário com análise dos resultados e arquivos de saída.	56
Figura 17 – Esquema ilustrando a execução de 10 réplicas do comando de amostragem <code>@@@P1=normalRange(93,0.02425,0.00025)</code>	57
Figura 18 – Desempenho do cluster do CDTN para execução do MCNPX em processamento paralelo utilizando a biblioteca MPI	59
Figura 19 – Histogramas das distribuições geradas a partir do raio do veneno queimável e incerteza associada. Distribuições ID 0 à ID 10.	63
Figura 20 – Variação normalizada da média e do desvio padrão em função da assimetria; a.Distribuições ID 1 - 10; b.Distribuições ID 11 - 10	64
Figura 21 – Distribuição do raio do veneno queimável e incerteza associada. Distribuições ID 11 até ID 20.	67
Figura 22 – Parâmetros das distribuições do k_{eff} em função da assimetria da distribuição; a.Distribuições ID 1 à 10; b. Distribuições ID 11 à 20.	71

Figura 23 – Propagação da incerteza do raio do veneno queimável para o k_{eff} do sistema; a. Distribuições ID 1 à 10; b. Distribuições ID 11 à 20.	72
Figura 24 – Incerteza propagada em função da incerteza computacional configurada.	76
Figura 25 – Incerteza propagada em função da incerteza computacional para o raio do veneno queimável representado pela amostra de distribuição ID 20.	77
Figura 26 – Comparação da incerteza propagada entre os conjuntos ID 11 à 20 ($SD_{computacional} \approx 28$ pcm), ID 31 à 40 ($SD_{computacional} \approx 41$ pcm) e ID 41 à 50 ($SD_{computacional} \approx 59$ pcm).	79
Figura 27 – Equilíbrio entre tamanho da amostra e incerteza computacional; a. Efeito na incerteza propagada (dispersão no desvio padrão de k_{eff} para 10 réplicas); b. Efeito em k_{eff} (dispersão na média de k_{eff} para 10 réplicas).	80
Figura 28 – Distribuições do k_{eff} ; a. Caso A; b. Caso B; c. Caso C; d. Caso D.	82
Figura 29 – Distribuição do raio do veneno queimável e incerteza associada. Distribuições ID 31 até ID 40.	117
Figura 30 – Distribuição do raio do veneno queimável e incerteza associada. Distribuições ID 41 até ID 50.	119
Figura 31 – Distribuição do k_{eff} resultante da propagação das distribuições apresentadas na Figura 29.	121
Figura 32 – Distribuição do k_{eff} resultante da propagação das distribuições apresentadas na Figura 30.	123

Lista de tabelas

Tabela 1 – Tabela de intervalos de tolerância e tamanho da amostragem de Wilks.	40
Tabela 2 – Resumo das principais diferenças entre Método de Monte Carlo e métodos determinísticos.	42
Tabela 3 – Variação causada no valor do k_{eff} devido à incerteza nos parâmetros físicos de entrada. Fonte: (WYSS; JORGENSEN, 2010)	47
Tabela 4 – Funções do R utilizadas na implementação do GB_sample	48
Tabela 5 – Distribuições geradas da amostragem do raio do veneno queimável sem utilização do Algoritmo para Seleção de Distribuição.	61
Tabela 6 – Distribuições geradas da amostragem do raio do veneno queimável com sua incerteza associada.	65
Tabela 7 – Parâmetros das distribuições de k_{eff} resultantes da aplicação do método da amostragem para as distribuições ID 1 à ID 20.	69
Tabela 8 – Análise estatística dos conjuntos de distribuições ID 1 à 10 e ID 11 à 20 da Tabela 7.	69
Tabela 9 – Parâmetros das distribuições de k_{eff} resultantes da aplicação do método da amostragem para as distribuições ID 21 à ID 20, que utilizaram $n = 186$	74
Tabela 10 – Análise estatística do conjunto de distribuições ID 21 à 30 da Tabela 9.	74
Tabela 11 – Parâmetros das distribuições de k_{eff} resultantes da aplicação do método da amostragem para as distribuições ID 1 à ID 20 com incerteza computacional de aproximadamente 28 pcm.	75
Tabela 12 – Análise estatística do conjunto de réplicas da Tabela 11.	75
Tabela 13 – Parâmetros das distribuições resultantes (k_{eff}) da aplicação do método da amostragem para a distribuição ID 20 com incerteza computacional variando de 14,4 até 81,2 pcm.	76
Tabela 14 – Parâmetros das distribuições (k_{eff}) resultantes da aplicação do método da amostragem para as distribuições ID 11 à 20, ID 31 à ID 40 e ID 41 à ID 50.	78
Tabela 15 – Análise estatística do conjunto de réplicas ID 11 à 20, ID 31 à 40 e ID 41 à 50.	79
Tabela 16 – Combinação das incertezas propagadas devido aos parâmetros incertos.	81
Tabela 17 – Efeito da propagação da incerteza no k_{eff} em função do método utilizado.	83

Lista de abreviaturas e siglas

CDTN	Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear
EC	Elemento Combustível
ENDF	<i>Evaluated Nuclear Data File</i>
LHS	<i>Latin Hypercube Sampling</i>
LWR	<i>Light Water Reactor</i>
MCNP	<i>Monte Carlo N Particle code</i>
MCNPX	<i>Monte Carlo N Particle code, versão X</i>
MPI	<i>Message Passing interface</i>
NEA	<i>Nuclear Energy Agency</i>
OECD	<i>Organization for Economic Co-operation and Development</i>
pcm	por cem mil
PWR	<i>Pressurized Water Reactor</i>
R	Programa de estatística (R Development Core Team, 2010)
SA	<i>Sensitivity Analysis</i>
SCALE	<i>Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation</i>
TMC	Total Monte Carlo
UFMG	Universidade Federal de Minas Gerais
UA	<i>Uncertainty Analysis</i>
UQ	<i>Uncertainty Quantification</i>
V&V	Verificação e Validação

Lista de símbolos

x_i	<i>input</i> i com incerteza associada
y_i	<i>output</i> i com incerteza associada
\vec{x}	Vetor de <i>inputs</i> com incerteza associada
\vec{y}	Vetor de <i>outputs</i> com incerteza associada
D_i	Distribuição com índice i
SD ou σ	Desvio Padrão
PDF	Função Densidade de Probabilidade
σ^2	Variância de uma população
\bar{x}	Média de x
μ	Média de uma população
n	Número de componentes da amostra
$\frac{\partial}{\partial t}$	Derivada parcial em relação ao tempo t
v	Velocidade
Σ_t	Seção de choque macroscópica total
Σ_s	Seção de choque macroscópica de espalhamento
$\hat{\Omega}$	Vetor direção do nêutron antes do espalhamento
$\hat{\Omega}'$	Vetor direção do nêutron após o espalhamento
∇	Nabla (operador diferencial de cálculo vetorial)
\vec{r}	Vetor posição (x,y,z)
E	Energia
E'	Energia após o espalhamento

Sumário

1	INTRODUÇÃO	23
1.1	Objetivos	28
2	REVISÃO DA LITERATURA E FUNDAMENTOS TEÓRICOS	31
2.1	Conceitos básicos de estatística	31
2.1.1	Variáveis aleatórias e função densidade de probabilidade	31
2.1.2	Média, mediana e moda	31
2.1.3	Faixa de variação e desvio padrão amostral	31
2.1.4	Variância	32
2.1.5	Distribuição Normal	32
2.1.6	Função probabilidade e Esperança	32
2.1.7	Combinação Linear de Variáveis Aleatórias Normais (LCN)	33
2.1.8	Teorema do Limite Central	33
2.1.9	Simetria	34
2.1.10	Correlação entre conjuntos	34
2.1.11	Intervalo de confiança e Intervalo de tolerância	35
2.2	Precisão e acurácia (exatidão)	35
2.3	Método baseado em amostragem	36
2.3.1	Caracterização da incerteza	37
2.3.2	Geração de amostras (processo de amostragem)	37
2.3.2.1	Teoria de Wilks	39
2.3.3	Propagação das amostras pelo sistema - Modelo de Caixa Preta	40
2.3.3.1	Método de Monte Carlo aplicado à física de nêutrons	40
2.3.3.2	Incerteza e convergência de cálculos de criticalidade no MCNP	42
2.3.4	Análise estatística e apresentação dos resultados	43
2.3.5	<i>Softwares</i> para análise de incertezas	43
3	METODOLOGIA	45
3.1	Incertezas nos parâmetros físicos do sistema	45
3.1.1	GB_sample	47
3.1.2	Algoritmo para seleção de distribuição	53
3.2	Incerteza propagada	54
3.3	Teste de convergência do método	55
3.4	Otimização do desempenho do MCNPX	58
4	RESULTADOS E ANÁLISE	61

4.1	Amostragem de parâmetros e incertezas	61
4.2	Influência da distribuição na propagação da incerteza	68
4.3	Teste de convergência do método	73
4.3.1	Influência do número de componentes	73
4.3.2	Influência da incerteza computacional	74
4.3.3	Número de componentes x incerteza computacional	77
4.4	Inserção de muitos parâmetros no mesmo <i>input</i>	81
4.5	Comparação com método conservador	82
5	CONCLUSÕES	85
	Referências	87
	Trabalhos publicados pelo autor, relacionados com a tese	93
	APÊNDICES	95
	APÊNDICE A – INSTALAÇÃO DO R, PYTHON E RPY	97
	APÊNDICE B – COMPILAÇÃO DO MCNPX 2.7 PARA PROCES- SAMENTO PARALELO	99
	ANEXOS	103
	ANEXO A – EXEMPLO DE ARQUIVO DE ENTRADA PARA O <i>GB_SAMPLE</i>	105
	ANEXO B – DISTRIBUIÇÕES DA SEÇÃO 4.3.3	115

1 Introdução

As duas principais divisões da física são a física teórica e a física experimental. Na física experimental são utilizados métodos e técnicas práticas. São construídos dispositivos experimentais nos quais são feitas medições com reprodutibilidade para checar previsões teóricas, descobrir novos fenômenos e medir grandezas físicas. Na área nuclear, o procedimento experimental para obtenção do conjunto de bibliotecas de seções de choque é o exemplo mais importante. Primeiramente, dados empíricos de seções de choque microscópicas (ou probabilidades) de ocorrência de reações entre nêutrons e núcleos são coletados e armazenados. Isto geralmente é feito concomitantemente por diferentes experimentalistas em diferentes laboratórios do mundo. Em seguida os dados são analisados e podem ser combinados com previsões de cálculos obtidos de modelos teóricos, que, por sua vez são reportados em algum formato estrutural como por exemplo os arquivos do *Evaluated Nuclear Data Files* (ENDF) ([Cross Section Evaluation Working Group, 2009](#)). Na Figura 1 pode-se ver um exemplo de resultado desse procedimento, onde a seção de choque microscópica de fissão do ^{235}U obtida da mais recente biblioteca ENDF/B.VII ([NEA International Working Party on Evaluation Cooperation and Cross Section Evaluation Working Group, 2014](#)) está apresentada.

O projeto de um reator nuclear deve garantir a manutenção da reação de fissão em cadeia controlada e sustentada. Nesta situação, o número de nêutrons que são produzidos é igual ao número de nêutrons que são absorvidos ou que fogem do sistema pelas fronteiras do reator. A distribuição da população de nêutrons dentro do reator é a informação chave para todas os outros parâmetros de interesse como a energia que está sendo dissipada. Portanto, se o interessado deseja realizar cálculos de física de reatores nucleares, ele precisa de dados avaliados (seções de choque) para todas as reações induzidas por nêutrons, cobrindo toda a faixa de energia de nêutrons incidentes, para todos os materiais no sistema que ele está analisando.

A outra divisão da física, a teórica, utiliza derivações de equações matemáticas de leis físicas para explicar fenômenos observados na física experimental e também prever novos fenômenos. Na física de reatores, por exemplo, a equação de Boltzman é obtida do princípio básico da conservação das partículas, representando a equação de balanço de nêutrons no sistema. A equação resultante, apresentada na Figura 1, é conhecida como equação do transporte de nêutrons, onde a variação temporal da população n de nêutrons (i.e. $\frac{\partial n}{\partial t}$) é um equilíbrio entre a fuga líquida de nêutrons com direção $\hat{\Omega}$ (i.e. $v\hat{\Omega}\cdot\nabla n$), os nêutrons absorvidos ou espalhados para outra direção que não $\hat{\Omega}$ (i.e. $v\Sigma_t n$), a taxa de nêutrons provenientes de outras direções e energias para a direção $\hat{\Omega}$ e energia E (i.e. $\int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v' \Sigma_s n$) e a taxa de nêutrons provenientes de fontes (i.e. s). A equação

do transporte, que será explicada com mais detalhes na seção 2.3.3.1, pode ser usada para prever a distribuição de nêutrons em um reator nuclear, mas sempre utilizando as informações da física experimental, visto que, Σ_s e Σ_t são os valores de seções de choque macroscópicas, resultado da multiplicação da densidade volumétrica de átomos presentes no material pelos valores das seções de choque microscópicas, obtidos da física experimental.

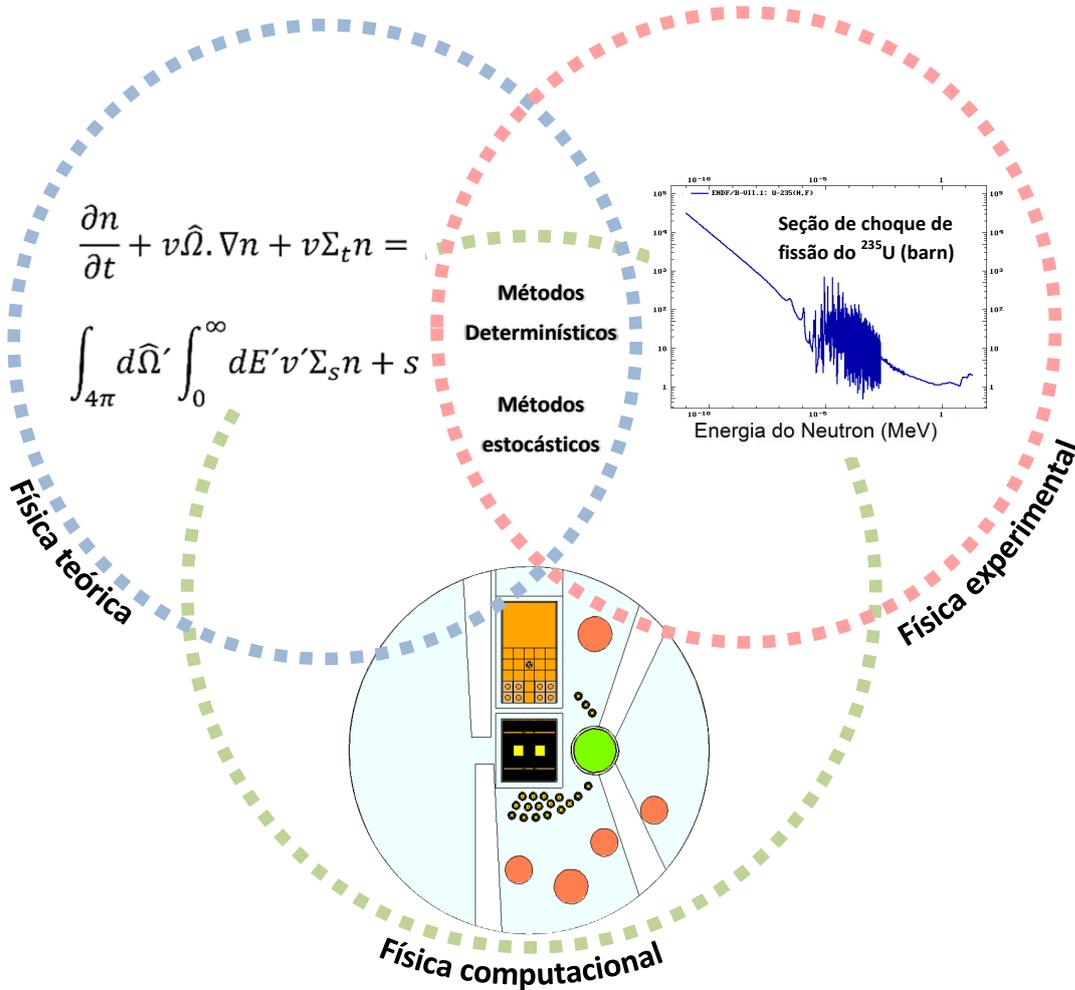


Figura 1 – Três principais divisões da física com exemplos em sistemas nucleares.

Com o rápido desenvolvimento de computadores, a física computacional se tornou uma nova divisão da física, tão importante quanto as outras duas. A física computacional foca o desenvolvimento e implementação de algoritmos numéricos rápidos, eficientes e acurados para resolver equações matemáticas que descrevem o comportamento de sistemas físicos. Por um lado, a física computacional complementa as outras duas divisões visto que atualmente não é mais possível realizar o estado da arte da física experimental ou teórica sem esforço computacional. Temos como exemplo o emprego de ferramentas numéricas para as expansões de séries com centenas de termos, cálculo de milhares de integrais e derivadas ou, o processamento de quantidades enormes de dados experimentais. Por outro lado a importância fundamental da física computacional é permitir a solução de problemas

para os quais os métodos analíticos são inaplicáveis e os procedimentos experimentais são impraticáveis ou impossíveis.

Um exemplo típico no campo da física de reatores é o cálculo neutrônico do sistema reator nuclear. Neste sistema, a fissão em cadeia e, conseqüentemente, a população de nêutrons, dependem da composição material e da geometria do reator nuclear e podem ser controladas pela inserção ou retirada de barras de controle que contém material absorvedor de nêutrons. O objetivo de projeto do reator nuclear é obter uma distribuição de nêutrons que não muda com o tempo após o período de estabilização em uma dada potência. Podemos expressar matematicamente este requisito através do Fator de Multiplicação Efetivo de Nêutrons (k_{eff}). Supondo que pudéssemos medir o número de nêutrons em duas gerações de fissão sucessivas, o k_{eff} é definido como sendo

$$k_{eff} = \frac{\text{número de nêutrons em uma geração}}{\text{número de nêutrons na geração anterior}} \quad (1.1)$$

Um reator é chamado *crítico* quando o ganho e a perda de nêutrons estão exatamente balanceados, sendo que nesta condição, o k_{eff} do reator tem o valor de 1. Se $k_{eff} < 1$ o número de nêutrons diminui de geração para geração, e a fissão em cadeia morre, sendo este reator chamado de *subcrítico*. Quando o $k_{eff} > 1$ a fissão em cadeia cresce e o número de nêutrons em cada geração sucessiva é maior, sendo este reator chamado *supercrítico*.

De forma mais ampla, o k_{eff} é o parâmetro indicador da fissão em cadeia de qualquer sistema que contenha material físsil. Assegurar que $k_{eff} < 1$ para qualquer situação significa assegurar segurança do ponto de vista de *criticalidade*. Para resolver tal problema, fazemos uso de cálculos determinísticos e estocásticos através de códigos computacionais específicos para representar o balanço de nêutrons.

Mas antes que os resultados obtidos de simulações possam ser utilizados, é necessários garantir que eles são representativos da realidade, ou seja, em dadas circunstâncias, a realidade se comportaria conforme previsto pelo modelo computacional. Os dois processos disponíveis para lidar com essa situação são a verificação e a validação (V&V) (ROACHE, 2009).

- Verificação é a prova formal de que o programa está correto. Ela garante que o modelo matemático está corretamente programado e corretamente resolvido em um código computacional. Portanto, ela foca em aproximações numéricas, erros de discretização, truncamentos, etc. As principais ferramentas da verificação são o método de soluções manufaturadas, comparação com soluções analíticas conhecidas ou comparação com soluções muito precisas de casos simplificados.
- Validação é definida como o processo de avaliar a credibilidade do modelo de simulação em um dado domínio de aplicabilidade. Ela garante que o modelo computacional é

fisicamente acurado, ou seja, que todos os processos relevantes estão incluídos, as simplificações matemáticas são válidas e que o *software* faz uma representação do mundo real da perspectiva do uso intencionado. As ferramentas da validação são a comparação quantitativa de resultados computacionais com dados experimentais e a estimativa de acurácia para uso extrapolado do programa (ou seja, em condições que caem fora dos pontos do experimento de validação).

As incertezas ou, falta de conhecimento do valor exato de certos parâmetros ou variáveis, são essenciais para a aplicação da V&V. Primeiramente na verificação as incertezas numéricas devem ser quantificadas e ter valores aceitavelmente pequenos. Em seguida, na validação, os experimentos devem ser acompanhados de um rigoroso processo de quantificação de incertezas, onde as incertezas devem ser fornecidas em termos de intervalos ou distribuições de probabilidade para o máximo de condições e medidas possíveis. Em terceiro lugar, na comparação com resultados computacionais, o conhecimento impreciso dos valores de entrada do código computacional tem que ser levados em consideração através do processo de propagação das incertezas dos parâmetros de entrada para as saídas computadas. Este último processo é chamado de propagação de incertezas ou análise de incertezas e será o tema central deste trabalho. Como o Fator de Multiplicação Efetivo (k_{eff}) depende tanto do material quanto da geometria, incertezas podem ser inseridas no cálculo via seções de choque microscópicas, mas também qualquer variação na geometria ou na densidade dos materiais envolvidos no cálculo.

A análise de incertezas é um campo fundamental para o estudo de outros sistemas complexos além da área nuclear, como na construção civil, previsão do tempo e avaliação de riscos (CHRISTIE et al., 2005). Isto ocorre pois a compreensão da resposta de um sistema para as incertezas físicas inerentes (que podem ser representadas em modelos computacionais realísticos) é um caminho para identificação de possíveis otimizações em sistemas e processos, e para garantia do cumprimento das margens de segurança.

No campo da segurança nuclear, há uma demanda crescente por análise de incerteza para cálculos de criticalidade. O tema da análise de incerteza no suporte para tomada de decisões em avaliações de segurança de criticalidade repercutiu no aumento da atenção da comunidade internacional quanto aos experimentalistas, usuários e desenvolvedores de códigos, agências de regulação e indústrias do ciclo do combustível nuclear. O foco primário é em análise de incertezas, metodologias de validação de códigos e experimentos *benchmark* para segurança em criticalidade (IVANOVA, 2009).

Existem duas metodologias para análise de segurança nuclear, a metodologia baseada em conservadorismo e a metodologia de melhor estimativa (GUBA; MAKAI; PÁL, 2003)(GANDINI, 1988). Visto que o objetivo é demonstrar segurança de operação ou de criticalidade para as circunstâncias avaliadas, é possível considerar uma situação não

muito realística, mas sempre segura. Se esta situação é segura, então qualquer situação real também seria segura. Esta metodologia é chamada de conservadorismo.

A metodologia de melhor estimativa investiga a situação real e mostra que nenhuma violação de segurança pode ocorrer. Um exemplo da aplicação destas metodologias seria no cálculo do limite superior de criticalidade (LSC) para manipulação de material físsil. Um dos componentes do LSC é devido às incertezas geométricas e materiais do modelo utilizado ([American National Standards Institute, 1983](#)). Pela metodologia baseada em conservadorismo seria utilizado o pior caso para cálculo do efeito das incertezas em k_{eff} . Já pela metodologia de melhor estimativa, a incerteza dos parâmetros físicos seria propagada do *input* para o *output* do modelo para estimar seu efeito real no k_{eff} .

Um grande número de técnicas foram desenvolvidas para analisar incertezas em modelos computacionais para processos complexos, incluindo análise diferencial ([BERZ et al., 1996](#)), *response surface* ([MYERS et al., 2004](#)), método da amostragem ([HELTON; DAVIS, 2003](#)) e decomposição de variância ([LI; ROSENTHAL; RABITZ, 2001](#)). Uma comparação destas técnicas em termos de (i) facilidade de implementação, (ii) flexibilidade, (iii) obtenção da função da distribuição do resultado e (iv) adaptabilidade para diferentes métodos de análise de sensibilidade é apresentada em ([IMAN; HELTON, 2006](#)). Com relação a estes critérios, o método da amostragem e a análise de regressão apresentaram melhores performances.

O método da amostragem é amplamente utilizado em projetos internacionais para quantificação de incertezas em sistemas nucleares. A OECD/NEA coordena os projetos UAM (*Uncertainty Analysis in Modeling*) ([IVANOV; AVRAMOVA, 2007](#)) e o BEMUSE (*Best Estimate Methods – Uncertainty and Sensitivity Evaluation*) ([GLAESER, 2011](#)). Estes projetos promovem comparação de estudos de experimentos de *benchmarks* por diversas instituições. É feita uma comparação entre diferentes códigos propagando incertezas em cálculos de célula, de reticulados e de núcleos usando a mesma base de dados.

Os parâmetros nucleares, compostos por bibliotecas de seção de choque microscópicas, representam a principal fonte de incerteza no modelo de um reator nuclear. Devido a este fato, no campo da neutrônica, o foco dos estudos para quantificação de incerteza está sendo em propagação de incertezas provenientes de parâmetros nucleares (([BRATTON; AVRAMOVA; IVANOV, 2014](#)), ([GARCÍA-HERRANZ et al., 2008](#)), ([ROCHMAN et al., 2011](#)), ([CHIBA et al., 2015](#)), ([ZWERMANN et al., 2014](#))). Ultimamente ([AO, 2011](#)) foi mostrado que o efeito causado em k_{eff} devido a incertezas em parâmetros físicos podem ser comparáveis aos efeitos devido a incerteza nos parâmetros nucleares. Devido a este fato, a presente tese foca a propagação de incertezas proveniente de parâmetros físicos. Foram escolhidas as incertezas do raio do veneno queimável, densidade do Alumínio e espessura da placa combustível do reator de pesquisa RA-6, do Centro Atômico de Bariloche, disponíveis na documentação de um experimento de benchmark ([WYSS; JORGENSEN, 2010](#)). Este

reator foi escolhido por apresentar as mesmas características (tipo e formato de elemento combustível combustível, energia dos nêutrons no núcleo, revestimento e moderador) do projeto do Reator Multipropósito Brasileiro (RMB), que é o projeto mais importante atualmente no ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação para a área nuclear.

O método da amostragem foi adotado para análise devido às seguintes vantagens:

- simplicidade conceitual e facilidade de implementação (diferentemente de outros métodos, não é necessário reformulação do método de transporte original);
- grande estratificação da faixa de variação de cada variável amostrada, o que maximiza o campo de aplicação do método;
- fornece os resultados da análise de incerteza sem necessitar aproximações do modelo original (como por exemplo, séries de Taylor);
- efetividade em procedimentos de verificação de modelos (a exploração do mapeamento de incertezas do *input* para o *output* do modelo).

Foi utilizado o código computacional MCNPX versão 2.7.0 (*Monte Carlo N-Particle eXtended*) (LANL, 2011) para simular a população de nêutrons em um determinado tempo, considerando todas as possibilidades de interações de nêutrons no sistema. As interações serão obtidas da ENDF/B.VII, utilizada pelo código para descrever o transporte dos nêutrons e finalmente determinar o balanço no sistema. Um ponto de atenção é que a análise de incertezas por amostragem também é conhecida como análise por Monte Carlo. A terminologia *análise por amostragem* ou *método da amostragem* será utilizado para evitar qualquer equívoco, visto que o método de Monte Carlo também é utilizado pelo código nuclear de simulação adotado.

1.1 Objetivos

- Implementar um programa para permitir a aplicação do método da amostragem para propagação de incertezas de parâmetros físicos de sistemas nucleares que podem ser representados por modelos no código MCNPX;
- Aplicar o método da amostragem utilizando o programa implementado para o modelo do reator de pesquisa RA-6, do Centro Atômico Bariloche, a fim de verificar a convergência do método;
- Determinar o número ótimo de componentes para amostragem através de comparação entre casos com diferentes configurações e mesmo tempo de execução;

- Comparar resultados de propagação de incertezas calculados pela metodologia de melhor estimativa utilizando o método da amostragem com resultados calculados pela metodologia baseada no conservadorismo.

2 Revisão da literatura e fundamentos teóricos

2.1 Conceitos básicos de estatística

A seguir apresentamos brevemente os conceitos básicos de estatística necessários para o entendimento da metodologia empregada neste trabalho. A exposição apresentada foi baseada nos textos de (BOWKER; LIEBERMAN, 1972) e (BOX; HUNTER; HUNTER, 2005).

2.1.1 Variáveis aleatórias e função densidade de probabilidade

Uma *distribuição de probabilidade* ou *função densidade* ou *PDF* descreve a chance de uma variável assumir um valor ao longo de um espaço de valores. Trata-se de uma função cujo domínio são os valores da variável e cuja imagem são as probabilidades da variável assumir cada valor do domínio. Seu conjunto imagem está restrito ao intervalo entre 0 e 1.

Uma *variável aleatória* X é *discreta* se assume um número enumerável de valores, ou seja, se existe um conjunto enumerável $(x_1, x_2, \dots) \subseteq \mathfrak{R}$ tal que $X(\omega) \in (x_1, x_2, \dots) \forall \omega \in \Omega$. Uma variável aleatória X é *contínua* se existe uma função $f_X(x) \geq 0$ e $P(a \leq X \leq b) = \int_a^b f_X(x) dx$ tal que $F(x) = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} f_X(x) dx, \forall x \in \mathfrak{R}$ sendo que a função f_X é chamada *função densidade de probabilidade (PDF)*.

2.1.2 Média, mediana e moda

No contexto de dados numéricos, a *média* ou *media aritmética* de dados é a medição descritiva mais comum e mais útil. Se n observações são denotadas por $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$, a média aritmética \bar{x} dos dados é:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}, \quad (2.1)$$

A *média* caracteriza os dados pela medida de tendência central. Assim como a *média*, a *mediana* e a *moda* são medições comuns de tendência central. A *mediana* é definida como a observação do meio quando os números são organizados em ordem de magnitude. A *moda* é definida como a observação de maior frequência.

2.1.3 Faixa de variação e desvio padrão amostral

Para caracterizar dados numéricos pela medida de variação, podemos usar a *faixa de dados*, que é a subtração da observação de maior valor pela de menor valor. Outra

forma comum de medir a variação é o *desvio padrão* s dos dados x_i , definido como a raiz quadrada da média do desvio quadrático em relação à *média*:

$$SD = s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}}, \quad (2.2)$$

sendo n o número de observações e \bar{x} a média dos dados.

2.1.4 Variância

Variância s^2 é a medida numérica de como os valores dos dados x_i estão dispersos em relação à média \bar{x} . A *variância* de uma amostra é definida pela seguinte equação:

$$s^2 = \frac{1}{n - 1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2, \quad (2.3)$$

sendo n o número de observações e \bar{x} a média dos dados.

2.1.5 Distribuição Normal

Uma *variável aleatória contínua* que tem *função de densidade* expressa por

$$f_X(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \quad -\infty < x < \infty \quad (2.4)$$

sendo μ a média, σ^2 a variância, e x os valores que ela pode assumir, é dita ser uma variável aleatória *normalmente distribuída* ou ter, uma *distribuição normal*, onde $\sigma > 0$ e μ é um parâmetro constante.

2.1.6 Função probabilidade e Esperança

A função definida por $p(x_i) = P(X = x_i)$, $i = 1, 2, \dots$ tal que $0 \leq p(x_i) \leq 1$; $\sum_{i=1}^n p(x_i) = 1$ e $p(x) = 0$ para $x \notin \{x_1, x_2, \dots\}$, é chamada de *função probabilidade* de X . Denotando por X um conjunto de variáveis aleatórias, então se X é discreta, considera-se que a *distribuição de probabilidade* de X ($X_i, P_X(x_i) \mid_{i=1}^n$) pode ser representada por $P(X = x) = P_X(x)$ para todos os x correspondendo aos possíveis valores que a variável aleatória possa assumir. Se X é contínua, considera-se que $f_X(x)$ denota a *PDF*. O *valor esperado* de X ou *esperança* é definido por:

$$E(X) = \begin{cases} \sum_{\text{todas } x} x P_X(x), & X \text{ discreta,} \\ \int_{-\infty}^{\infty} x f_X(x) dx, & X \text{ contínua.} \end{cases} \quad (2.5)$$

Portanto, para a *variável aleatória discreta*, a *esperança* é obtida primeiramente pela multiplicação de cada valor que a variável aleatória pode assumir pela probabilidade de que ela assumira este valor ($x P_X(x)$), e depois adicionando-se todos os termos juntos. Para

a variável aleatória contínua, a *esperança* é obtida da integração de menos infinito a mais infinito do produto $xf_X(x)$.

2.1.7 Combinação Linear de Variáveis Aleatórias Normais (LCN)

Em um experimento, seja X_1, X_2, \dots, X_n variáveis aleatórias independentes de médias $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ e variâncias $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_n^2$, respectivamente¹. Considerando a_1, a_2, \dots, a_n como sendo constantes e denotando por Y uma variável aleatória que é a combinação linear dos X s, ou seja $Y = a_1X_1 + a_2X_2 + \dots + a_nX_n$, então Y possui três propriedades:

1.

$$E(Y) = \mu_Y = E(a_1X_1 + a_2X_2 + \dots + a_nX_n) = a_1\mu_1 + a_2\mu_2 + \dots + a_n\mu_n. \quad (2.6)$$

Essa afirmação diz que o valor esperado de uma combinação linear de variáveis aleatórias é igual à combinação linear dos valores esperados. Além disso, esse resultado é válido mesmo se os X s são variáveis aleatórias dependentes.

2.

$$E(Y - \mu_Y)^2 = \sigma_Y^2 = \text{Variância}(a_1X_1 + a_2X_2 + \dots + a_nX_n) = a_1^2\sigma_1^2 + a_2^2\sigma_2^2 + \dots + a_n^2\sigma_n^2. \quad (2.7)$$

Essa afirmação diz que a variância de uma combinação linear de variáveis aleatórias independentes é igual à soma do produto das variâncias e o quadrado das constantes.

3. Se X_1, X_2, \dots, X_n são variáveis aleatórias *normalmente distribuídas*, então Y também é normalmente distribuído com média μ_Y e variância σ_Y^2 .²

2.1.8 Teorema do Limite Central

Sendo a variável aleatória $Y = \sum_{i=1}^n X_i$ onde X_1, X_2, \dots, X_n são variáveis aleatórias independentes, identicamente distribuídas, cada uma com média μ e variância finita σ^2 , então, a distribuição de $N = (Y - n\mu)/\sqrt{n}\sigma$ se aproxima da distribuição normal com média 0 e variância 1, à medida que o número de observações n se aproxima de infinito.

$$\frac{Y - n\mu}{\sqrt{n}\sigma} = \left(\frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} \right) \sim N(0, 1) \quad (2.8)$$

sendo $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$.

¹ Uma constante também pode ser considerada uma variável aleatória de média igual à constante e variância igual a zero

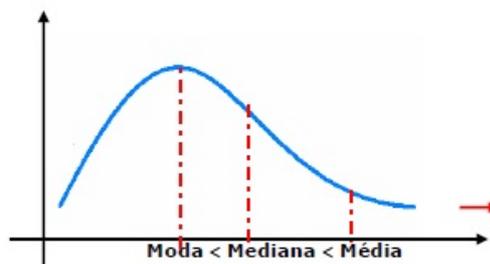
² Uma constante também pode ser considerada uma variável aleatória *normalmente distribuída* de média igual à constante e variância igual a zero

2.1.9 Simetria

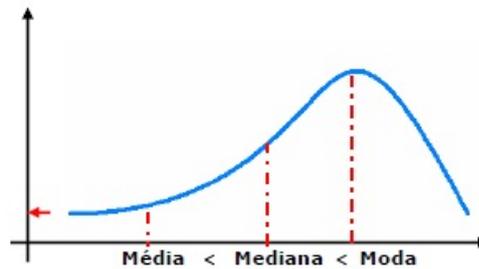
Uma distribuição de probabilidade é simétrica quando sua média e mediana tem o mesmo valor. A Figura 2 apresenta curvas da distribuição simétrica e de distribuições assimétricas. Neste trabalho utilizaremos o *Coefficiente de Assimetria de Pearson* para medir a assimetria de uma distribuição, definido por:

$$\frac{3(\text{media} - \text{mediana})}{SD} \quad (2.9)$$

→ **Distribuição Assimétrica à Direita (ou de Assimetria Positiva):**



→ **Distribuição Assimétrica à Esquerda (ou de Assimetria Negativa):**



→ **Distribuição Simétrica:**

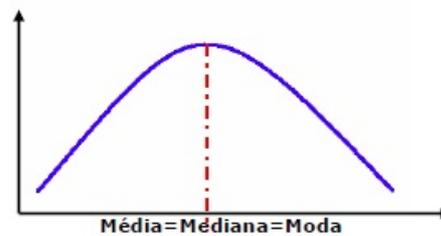


Figura 2 – Distribuição simétrica e assimétrica.

2.1.10 Correlação entre conjuntos

A correlação mede o grau de associação entre duas variáveis. Um grau de correlação positivo indica que uma variável tende a aumentar à medida que a outra aumenta. Quando a correlação é negativa, uma variável tende a decrescer à medida que a outra aumenta. Quando o valor da correlação é 1, a relação entre as variáveis é perfeita. Quando a correlação tem valor zero, as variáveis são independentes. Uma estimativa de correlação é dada pelo

coeficiente de correlação entre amostras r , dado por

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (2.10)$$

2.1.11 Intervalo de confiança e Intervalo de tolerância

Um intervalo (L, U) é um intervalo de *confiança* de $100(1 - \beta)\%$ de um parâmetro se a probabilidade de $[L < \text{parâmetro} < U]$ for igual a $1 - \alpha$, e os limites inferior e superior, L e U respectivamente, são funções dos dados amostrais. Um intervalo de tolerância é um intervalo estatístico dentro do qual, com um nível de confiança β , uma proporção especificada de uma amostragem da população, se encontra. Um intervalo de tolerância de $100 \times \alpha\% / 100(1 - \beta)$ fornece os limites dentro do qual uma certa proporção (α) da população se encontra com um dado nível de confiança de $(1 - \beta)$.

2.2 Precisão e acurácia (exatidão)

Existe uma diferença importante entre precisão e acurácia. Conforme ilustrado na Figura 3 por $\sigma_{comp.}$, precisão é a incerteza causada, por exemplo, pela flutuação estatística dos valores x_i . Acurácia é a medida de quão próximo o valor esperado de \bar{X} , $(E(\bar{X}))$ está da quantidade física real sendo estimada. A diferença entre este valor físico real e $E(x)$ é chamado de erro sistemático ou *bias*.

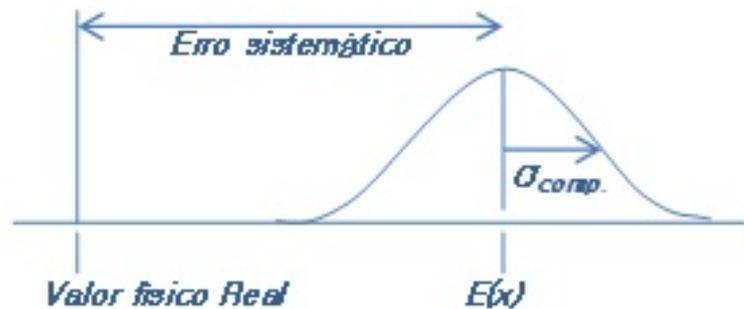


Figura 3 – Precisão e acurácia.

Neste trabalho, apenas as incertezas em parâmetros do modelo computacional foram tratadas. Mais especificamente as incertezas em parâmetros de entrada associadas a dados físicos como, por exemplo, dimensões geométricas e propriedades materiais. Portanto, as estimativas de incerteza dos resultados de execuções no código MCNPX se referem apenas à precisão do resultado, e não à acurácia.

Incertezas em parâmetros de entrada também podem estar associadas a dados nucleares como, por exemplo, seções de choque. Ambas as incertezas podem ser provenientes

de diferentes fontes como, por exemplo, erros de medição em laboratório, erros de avaliação de dados, tolerâncias de fabricantes de componentes ou dimensões e propriedades materiais imprecisos (AO, 2011).

2.3 Método baseado em amostragem

Os métodos baseados em amostragem compreendem a geração e exploração do mapeamento de entradas (*input*) com incerteza, propagadas para a saída (*output*) com incerteza (HELTON; DAVIS, 2001). O sistema ou modelo em consideração pode ser representado por uma função vetorial da forma

$$\vec{y} = \vec{y}(\vec{x}) = \vec{f}(\vec{x}) \quad (2.11)$$

onde

$$\vec{x} = [x_1, x_2, \dots, x_{nX}] \quad (2.12)$$

e

$$\vec{y} = [y_1, y_2, \dots, y_{nY}] \quad (2.13)$$

designam a entrada e a saída do sistema, respectivamente. Em sistemas reais, as dimensões nX e nY de \vec{x} e \vec{y} variam com a complexidade do sistema e podem ser enormes (>100), visto que a função \vec{f} pode representar por exemplo a análise probabilística de risco para uma instalação de engenharia como uma usina nuclear.

Se o valor inequívoco de \vec{x} fosse conhecido, então $\vec{y}(\vec{x})$ poderia ser determinado e apresentado como a saída única da análise. No entanto, existe uma incerteza quanto ao correto valor de \vec{x} que resulta em uma incerteza também no valor de $\vec{y}(x)$. A incerteza em \vec{x} e seu valor associado em \vec{y} gera duas questões: (i) qual a incerteza em $\vec{y}(x)$ dada a incerteza em \vec{x} e (ii) quão importantes são os elementos individuais de \vec{x} com respeito à incerteza em $\vec{y}(x)$. As metodologias para responder essas duas questões são referidas como análise de incerteza e análise de sensibilidade. Neste trabalho calculou-se a incerteza de alguns parâmetros físicos separadamente e foi possível compará-las. No entanto, este procedimento foi feito para demonstrar o potencial de incluir inúmeras incertezas no mesmo *input* e não aprofundar na análise de sensibilidade.

Os componentes básicos por trás da implementação da metodologia de amostragem para análise de incerteza são

- a definição de distribuições

$$D_1, D_2, \dots, D_{nX} \quad (2.14)$$

que caracterizem a incerteza nos elementos x_1, x_2, \dots, x_{nX} de \vec{x} (seção 2.3.1);

- a amostragem de x_1, x_2, \dots, x_{nX} , consistentes com as distribuições D_1, D_2, \dots, D_{nX} (seção 2.3.2);
- a propagação da amostra pelo sistema de forma a se obter o mapeamento

$$[\vec{x}_i, \vec{y}(\vec{x}_i)] i = 1, 2, \dots, nX \quad (2.15)$$

configurando a propagação de incertezas dos parâmetros de entrada para as saídas do sistema (seção 2.3.3);

- e a análise de incerteza dos resultados, onde são feitas aproximações para as distribuições dos elementos do *output* \vec{y} com base nos elementos $\vec{y}(\vec{x}_i)$.

2.3.1 Caracterização da incerteza

A definição de distribuições D_1, D_2, \dots, D_{nX} que irão caracterizar a incerteza dos elementos $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n$ de um sistema é a parte mais importante no processo de propagação de incertezas por amostragem pois são elas que irão determinar a incerteza dos elementos \vec{y} . A obtenção das distribuições envolve muita análise pois requer expertise (M.C.THORNE; WILLIAMS, 1992) e/ou uma grande quantidade de medições experimentais. É comum se utilizar uma distribuição preliminar e técnicas de análise de sensibilidade para se ter uma ideia da influência daquele parâmetro no sistema e só depois decidir o quanto investir na caracterização da incerteza.

Distribuições de probabilidade caracterizadas por diferentes fontes podem ser agregadas em uma só (HELTON; DAVIS, 2000). Como exemplo, a referência (HORA; IMAN, 1989) descreve a metodologia utilizada em um processo de exaustivo julgamento envolvendo experiência para apoiar a Comissão Reguladora Americana (US-NRC) na reavaliação de riscos para instalações com reatores comerciais. A representação de incerteza pode ser feita ainda por métodos alternativos (HELTON; JOHNSON; OBERKAMPF, 2004) como a *Teoria da Evidência*, a *Teoria da Possibilidade*, *Teoria do Conjunto de Fuzzy*, *Análise de Intervalos* etc, que não fazem parte do escopo deste trabalho.

2.3.2 Geração de amostras (processo de amostragem)

A *população* é o conjunto de todos os valores que descrevem o fenômeno que interessa ao investigador. *Amostra* é um subconjunto da população. Existem várias estratégias disponíveis para realização de amostragem, incluindo *amostragem aleatória*, *amostragem por importância* e amostragem pelo método *Latin Hypercube Sampling* (LHS) (WYSS; JORGENSEN, 1998)(HELTON; DAVIS, 2003).

A eficiência de amostragem é o número de execuções de simulação necessários para se obter um valor de variância dos resultados, abaixo de um determinado nível ou, em

outras palavras, se obter um determinado nível de precisão. Uma estratégia de amostragem eficiente é necessária portanto para minimizar o gasto computacional quando são feitas as simulações do modelo estudado utilizando o método de Monte Carlo.

O método LHS é bastante popular para se usar com modelos de grande demanda computacional devido à eficiência de suas propriedades de estratificação que permitem extrair grande quantidade de informação de incertezas com um tamanho de amostragem reduzido. Para gerar uma amostra de tamanho nS proveniente das distribuições D_1, D_2, \dots, D_{nX} associadas com os elementos de $x = [x_1, x_2, \dots, x_{nX}]$, este método divide a faixa de cada x_j em intervalos de igual probabilidade e um valor x_{ij} é aleatoriamente selecionado para cada intervalo. Os nS valores para x_1 são pareados aleatoriamente sem reposição, com os nS valores para x_2 para produzir nS pares. Estes pares são então combinados aleatoriamente e sem reposição com os nS valores de x_3 para produzir nS tuplas, ou listas ordenadas. Esse processo é continuado até que o conjunto de nS nX -tuplas $x_i = [x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{inX}]$, $i = 1, 2, \dots, nS$ seja obtido, sendo este conjunto chamado de amostra LHS.

No caso de se necessitar uma amostra muito grande para fornecer uma representação apropriada de subconjuntos de x com baixa probabilidade porém com alta consequência, a amostragem por importância pode ser mais efetiva do que o LHS (SHAHABUDDIN, 1994)(EVANS; SWARTZ, 2000). Nesta metodologia os elementos individuais da amostragem apresentam diferentes pesos, ou probabilidade de ocorrência. O controle de correlações é um aspecto importante no processo de amostragem. Variáveis correlacionadas devem ter correlações próximas do valor especificado e variáveis não-correlacionadas devem ter correlações próximas de zero. Em geral a imposição de estruturas de correlação complexas não é fácil. No entanto, em (IMAN; CONOVER, 1982) foi desenvolvido um procedimento de aplicação geral para estabelecer correlações em valores amostrados de forma que sejam independentes da distribuição, flexíveis para imposição de complexas estruturas de correlação incluindo múltiplas variáveis e que funciona tanto com o método LHS quanto com a amostragem aleatória.

Ao se utilizar o método da amostragem, surge a questão se o número de amostras foi adequado ou não. Uma maneira de responder a essa questão é através da convergência do método, que pode ser acompanhada através da realização de réplicas (ASME, 2009) (JANSSEN, 2013). As réplicas são geradas através da utilização de uma semente diferente para iniciar o gerador de números aleatórios, de forma que análise inteira é repetida e os resultados são comparados para as diferentes réplicas.

Para análise de segurança em reatores nucleares utilizando técnicas de amostragem, os projetos (GLAESER, 2011) e (IVANOV; AVRAMOVA, 2007) utilizam a mesma teoria para determinar o número mínimo de casos em função de intervalos de tolerância pré-estabelecidos. Esta teoria, primeiramente introduzida por Wilks (WILKS, 1941), está

resumida na seção 2.3.2.1. A recomendação final da fase VI do relatório BEMUSE ((GLAESER, 2011)) foi que a fórmula de Wilks deve ser aplicada na terceira ou quarta ordem (entre 124 e 153 unidades) para o caso do intervalo de tolerância superior estar próximo de algum limite regulatório.

Um recente estudo (STRYDOM, 2013) aplicou a teoria da amostragem para quantificação de incertezas no reator *Pebble Bed* através da ferramenta SUSA (GLAESER, 2008). O estudo determinou o efeito na temperatura de pico do combustível devido a incertezas em oito parâmetros físicos de entrada, para um intervalo de confiança de 95%. Não foram observadas diferenças significativas entre os resultados utilizando amostragem aleatória ou LHS. Com relação ao tamanho da amostra, também não foram observadas diferenças significativas para conjuntos consistindo de 100 ou 200 execuções do modelo, cobrindo a extensão da fórmula de Wilks desde a segunda ordem até a quinta ordem (distribuições de 93 e 181 componentes respectivamente).

As seções 3.3 e 4.3 descrevem a metodologia utilizada e os testes realizados para definir o número n de componentes da amostragem utilizado neste trabalho.

2.3.2.1 Teoria de Wilks

Wilks (WILKS, 1941) propôs um método baseado em faixas amostrais truncadas para determinar o tamanho da amostra necessária para configurar intervalos de tolerância em variáveis aleatórias X tendo qualquer distribuição contínua $f(x)$ e tendo um determinado grau de estabilidade.

A fórmula de Wilks representa o tamanho amostral tal que os valores extremos calculados na amostra estão dentro de um *intervalo de tolerância*:

$$1 - \alpha^n - n(1 - \alpha)\alpha^{n-1} \geq \beta \quad (2.16)$$

onde n é o menor número mínimo de componentes da amostra, $\beta \times 100$ ou $1 - \beta$ é o nível de confiança (%) e $\alpha \times 100$ (%) o percentil do intervalo de tolerância. A afirmação de $\alpha \times 100 = 95\%$, significa que as amostras estão dentro do *intervalo de tolerância*, ou seja, com limite inferior e limite superior, com pelo menos 95% de probabilidade. Portanto, pode-se estar $\beta\%$ confiante de que pelo menos $\alpha\%$ dos valores amostrados estão dentro do intervalo de tolerância. A Tabela 1 apresenta a relação do número de componentes da amostra com os intervalos de tolerância e os níveis de confiança relacionados.

Tabela 1 – Tabela de intervalos de tolerância e tamanho da amostragem de Wilks.

$\beta \backslash \alpha$	0,999	0,950	0,900
0,999	9230	181	89
0,950	4742	93	46
0,900	3889	77	38

2.3.3 Propagação das amostras pelo sistema - Modelo de Caixa Preta

A propagação dos componentes da amostra pelo sistema para produzir o mapeamento $[\vec{x}_i, \vec{y}(\vec{x}_i)]$, $i = 1, 2, \dots, nS$, do *input* para os resultados ou *output*, é a parte de maior demanda computacional da propagação de incertezas baseada em amostragem. Os detalhes da propagação são específicos para cada tipo de análise e podem variar de muito simples para o caso de análises que compreendem um modelo único até muito complicados, para o caso de a análise envolver sistemas complexos de vários modelos conectados (MA; ACKERMAN, 1993) (HELTON; MARIETTA, 2000). Quando um modelo único é considerado, esta parte da análise envolve a aplicação de um processo para (i) fornecer os *inputs* amostrados para o modelo, (ii) rodar o modelo, e (iii) guardar os resultados para análise futura. Quando envolve uma análise complexa com vários modelos, podem existir outros passos mais sofisticados como (i) desenvolvimento de modelos simplificados para aproximar modelos mais complexos, (ii) agrupamento de resultados em interfaces de modelos, (iii) reutilização de resultados de modelos através de interpolação ou propriedades de linearidade, e (iv) procedimentos complexos para armazenamento e recuperação de análise de resultados (BREEDING et al., 1992).

2.3.3.1 Método de Monte Carlo aplicado à física de nêutrons

A equação do transporte de nêutrons, também chamada equação de Boltzman, determina a distribuição de nêutrons em um sistema nuclear (DUDERSTADT; HAMILTON, 1976), em termos de sua posição no espaço e no tempo, sua energia e a sua direção de trajetória. A variação da distribuição de nêutrons em função do tempo é determinada através da diferença entre nêutrons que o sistema ganha e nêutrons que o sistema perde. O ganho de nêutrons é representado pelos dois termos positivos do lado direito da Eq. 2.17 enquanto a perda de nêutrons é representada pelos dois termos negativos.

$$\frac{\partial n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)}{\partial t} = -v\hat{\Omega} \cdot \nabla n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) - v\Sigma_t n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) + \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) n(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) + s(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \quad (2.17)$$

onde $\frac{\partial n}{\partial t}$ é a derivada parcial da população de neutrons em função do tempo; $v\hat{\Omega} \cdot \nabla n$ é a fuga líquida de nêutrons, com direção $\hat{\Omega}$; $v\Sigma_t n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$ são os nêutrons absorvidos ou es-

palhados para outra direção que não $\hat{\Omega}$; $\int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) n(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t)$ é a taxa de nêutrons provenientes de outras direções e energias para a direção $\hat{\Omega}$ e energia E , sendo $\Sigma = N\sigma$ a seção de choque macroscópica, dada pela multiplicação da densidade volumétrica N de átomos no material alvo pela seção de choque microscópica σ ; $s(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$ é a taxa de nêutrons provenientes de fontes.

Devido aos fatos de a equação do transporte ter (i) sete variáveis independentes $(x, y, z, \theta, \phi, E, t)$, (ii) dependência extremamente complicada das seções de choque macroscópicas com a geometria (seção de choque varia conforme a posição \vec{r}), estrutura complexa e não uniforme dos reatores nucleares e (iii) dependência extremamente complicada das seções de choque microscópica com a energia, os computadores atuais não conseguem resolver sua forma integral sem simplificações, em um tempo aceitável do ponto de vista de projeto ou de análise de segurança de um reator nuclear.

O método de Monte Carlo é uma técnica numérica usada para simulação do comportamento de sistemas complexos, que podem ir do campo da economia até a física de partículas. Trata-se de um método estocástico baseado na execução de muitos experimentos aleatórios sobre um modelo. O ponto chave é a utilização de um gerador de números aleatórios de qualidade, onde o resultado é a probabilidade de ocorrência de algum efeito.

No transporte de partículas, são simuladas as trajetórias individuais de cada uma. Para determinar se um evento ocorre, as probabilidades dos possíveis processos físicos, ou seja, as seções de choque microscópicas, são usadas e os números aleatórios são gerados dependendo da distribuição de probabilidade para cada caso. O resultado para a vida de uma partícula, também conhecido por *história da partícula* é armazenado para avaliação futura do seu comportamento médio.

O código MCNPX (LANL, 2011), através do método de Monte Carlo, realiza o transporte de partículas de forma diferente dos programas determinísticos. Os programas determinísticos, em geral, utilizam o método das ordenadas discretas, que resolve a equação do transporte com base no comportamento médio de uma partícula. O Método de Monte Carlo não resolve analiticamente a equação de transporte mas obtém resultados por meio de simulação individual de cada partícula e contagem do comportamento médio. Esse comportamento médio das partículas no sistema é inferido por meio do *Teorema do Limite Central* com base no comportamento médio das partículas que foram simuladas, ou seja, uma amostra da população. Em comparação com o método das ordenadas discretas, o método de Monte Carlo obtém uma solução que corresponderia à solução da equação de transporte integral, sem derivadas espaciais, enquanto que o método das ordenadas discretas resolve a equação integro-diferencial, tratando a variável espacial de forma discreta em vez de contínua.

A Tabela 2 apresenta um resumo das principais diferenças entre o Método de Monte Carlo e métodos determinísticos.

Tabela 2 – Resumo das principais diferenças entre Método de Monte Carlo e métodos determinísticos.

<i>Item</i>	<i>Determinístico* (D)</i>	<i>Monte Carlo* (MC)</i>
Representação da geometria	Discreta	Exata
Representação da energia	Discreta	Contínua / Exata
Representação da direção	Discreta / séries	Contínua
Questão numérica	Convergência	Incerteza computacional
Memória computacional necessária	Maior que <i>MC</i>	Menor que <i>D</i>
Custo computacional	Baixo	Alto
Processamento paralelo	Complexo	Mais simples

*Considerando o mesmo modelo calculado.

Para representar um sistema nuclear baseado na população de nêutrons, o código MCNPX utiliza bibliotecas de dados nucleares de energia contínua. As fontes primárias dos dados nucleares são o banco de dados da ENDF ([NEA International Working Party on Evaluation Cooperation and Cross Section Evaluation Working Group, 2014](#)). Além das bibliotecas de dados nucleares para interações de nêutrons, o código MCNPX possui diversas bibliotecas, permitindo o acompanhamento de partículas carregadas, fótons, elétrons, além de dados associados à dosimetria dessas partículas.

Neste trabalho o MCNPX versão 2.7.0 foi utilizado como um sistema de caixa preta para obtenção do balanço de nêutrons do sistema, através da obtenção do Fator de Multiplicação Efetivo (k_{eff}), permitindo o estudo da propagação de incertezas no sistema nuclear que será explicado na seção 3.1.

2.3.3.2 Incerteza e convergência de cálculos de criticalidade no MCNP

Cálculos de criticalidade com o MCNPX são baseados no processo iterativo chamado *Power Interaction* ([LANL, 2011](#)). Após assumir uma distribuição espacial de fontes de fissão inicial arbitrária (primeira geração), as histórias são seguidas de forma a produzir uma nova distribuição de fontes para a próxima geração e estimar um novo valor para k_{eff} . Essa nova distribuição de nêutrons de fissão é então usada para seguir histórias para segunda geração produzindo então uma nova distribuição de nêutrons de fissão e estimativa para k_{eff} . Essas gerações ou ciclos são repetidos até que a distribuição dos nêutrons de fissão tenha convergido para um estado estacionário. O critério de convergência é chamado de *normal spatial mode*, que é a verificação através de um teste de normalidade ([SHAPIRO; WILK, 1965](#)), de que o k_{eff} obtido desta distribuição espacial de nêutrons de fissão apresenta distribuição normal com um nível de confiança de 99%. Neste momento, contagens de taxas de reação e k_{eff} são acumuladas quando novos ciclos são executados até que a incerteza computacional se torne pequena o suficiente. O programa MCNPX permite que uma distribuição espacial inicial dos nêutrons de fissão sejam salvas em um arquivo do tipo SRCTP.

Existem algumas incertezas intrínsecas aos cálculos com MCNPX, a saber:

- incertezas na geometria e composição do material
- incertezas provenientes de bibliotecas de seção de choque microscópicas
- incerteza computacional

As incertezas na geometria, na composição do material e nas bibliotecas de seção de choque microscópicas podem ser propagados para os resultados da simulação por técnicas de propagação de incerteza como por exemplo a técnica da amostragem aleatória empregada neste trabalho (seção 2.3).

Para reduzir a incerteza computacional nos resultados de um cálculo no MCNPX é necessário aumentar o número de histórias seguidas pelo programa. Esta incerteza, representada pelo desvio padrão estimado, pode ser usada para formar intervalos de confiança com relação à média estimada, permitindo assim afirmar-se quão preciso é um resultado. O *Teorema do Limite Central*, Equação 2.8, afirma que à medida que n se aproxima do infinito, há uma probabilidade de 68% que o resultado real estará na faixa $\bar{x} \pm \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$, uma probabilidade de 95% de estar na faixa $\bar{x} \pm \frac{2\sigma}{\sqrt{n}}$ e uma probabilidade de 99% de estar na faixa $\bar{x} \pm \frac{3\sigma}{\sqrt{n}}$. É de extrema importância notar que estas afirmações quanto ao *intervalo de confiança* se referem apenas à precisão do cálculo de Monte Carlo e não à acurácia do resultado, se comparado com o valor físico real.

2.3.4 Análise estatística e apresentação dos resultados

A apresentação dos resultados da análise de incerteza geralmente é direta e envolve a análise estatística dos resultados já calculados no mapeamento $[\vec{x}_i, \vec{y}(\vec{x}_i)]$, $i = 1, 2, \dots, nS$. Dentre as possibilidades de apresentação estão as médias, desvios padrões, PDF, funções de distribuição cumulativa (CDF), funções complementares de distribuição cumulativa (CCDFs) e traçado de gráficos (GUBA; MAKAI; PÁL, 2003).

2.3.5 Softwares para análise de incertezas

Internacionalmente, diferentes *softwares* são propostos e empregados para análise de incertezas em instalações nucleares. Devido ao fato de que cada código nuclear tem um formato específico de entrada para parâmetros físicos e dados nucleares, a ferramenta a ser utilizada depende da estrutura do código que será empregado para simulação.

Os principais *softwares* são o SUSA (*Program System for Uncertainty and Sensitivity Analysis*) (GLAESER, 2008) e o ASTRUM (*Automated Statistical Treatment of Uncertainty Method*) (NISSLEY et al., 2005), utilizados pelo método GRS; o SAMPLER (WILLIAMS et al., 2013), do sistema SCALE; o MCNP_pstudy (BROWN; SWEEZY; HAYES, 2004),

que utiliza o MCNP; o NUDUNA (*Nuclear Data Uncertainty Analysis*) (BUSS; HOEFER; NEUBER, 2011), utilizado pela AREVA; o NUSS (*Nuclear data Uncertainty Stochastic Sampling*) (VASILIEV; FERROUKHI; PAUTZ, 2015), que utiliza códigos que fazem uso de bibliotecas em formato ACE ³ como o MCNPX e o Serpente (LEPPÄNEN, 2008). O ASTRUM tem sido aplicado no procedimento de licenciamento americano pela Framatome ANP e pela Westinghouse (STOLL, 2003) (NISSLEY et al., 2005). Esta ferramenta disponibiliza uma estrutura na linguagem Fortran que facilita a inserção de códigos para serem utilizados como modelo caixa preta ou para fazer conexão com códigos mais complexos como o MCNPX. Todos os softwares citados são pagos.

Outros *softwares* de estatística de aplicação geral também podem ser utilizados como ferramentas para aplicar o método da amostragem para quantificação de incertezas em sistemas nucleares. Entre estes softwares, podemos citar o DAKOTA (ELDRED et al., 2007), o pacote de estatística do Minitab (Minitab Inc., 2013), o pacote de estatística JMP (SAS Institute Inc., 2014), o *Mathematica* (WOLFRAM, 2014), o *Toolbox* de estatística do Matlab (The MathWorks Inc., 2014), macros de Excel como o *@Risk* (PALISADE, 2014) e o Crystal Ball (Oracle, 2014), além do R (R Development Core Team, 2010).

R é uma linguagem e um ambiente de programação para estatística e gráfica computacional. Trata-se de um projeto GNU similar à linguagem S. A linguagem S é uma referência para pesquisa em metodologia estatística, sendo que R, disponibiliza um código fonte aberto para as mesmas finalidades. R fornece uma grande variedade de técnicas estatísticas como modelagem linear e não linear, testes estatísticos clássicos, análises de séries temporais, classificação e agrupamento; além de ferramentas gráficas. O código R pode ser compilado e executado em uma grande variedade de plataformas UNIX, Windows e MacOS.

³ O formato de bibliotecas nucleares ACE pode ser gerado pelo programa de processamento NJOY (MACFARLANE; MUIR, 1994)

3 Metodologia

Este capítulo tem como objetivo apresentar a metodologia utilizada para a realização dos experimentos computacionais permitindo o entendimento dos cenários avaliados no próximo capítulo. As análises da incerteza propagada utilizando o método de amostragem se limitam a apenas um parâmetro de saída do sistema que é o k_{eff} . Portanto o modelo em consideração para propagação de incertezas pelo método da amostragem se restringe a

$$y = f(\vec{x}) \quad (3.1)$$

em substituição à forma vetorial representada pela Equação 2.11. A Figura 4 apresenta um esquema para ilustrar a Equação 3.1 e apresentar a nomenclatura que será utilizada.

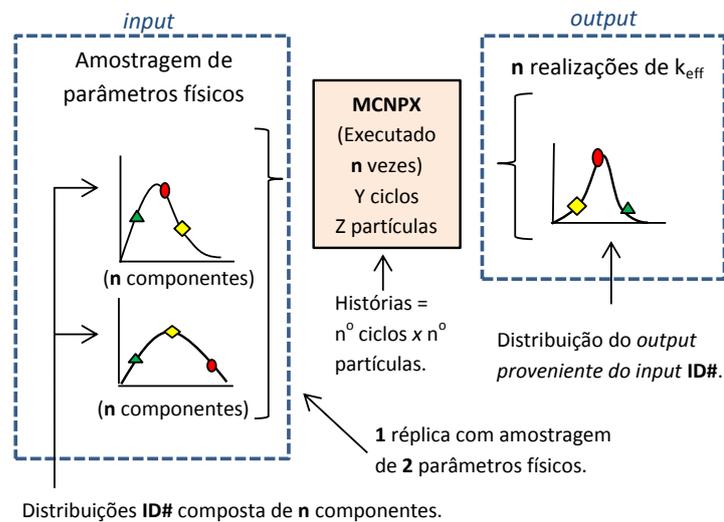


Figura 4 – Esquema ilustrando a função vetorial $y = f(\vec{x})$ onde o código MCNPX é o sistema de caixa preta (seção 2.3.3).

3.1 Incertezas nos parâmetros físicos do sistema

As informações de base utilizadas para este estudo foram extraídas do documento referente a um experimento (*benchmark*) de criticalidade (WYSS; JORGENSEN, 2010). Trata-se do reator de pesquisa argentino RA-6, localizado no Centro Atômico de Bariloche. Este reator de poço aberto, moderado e refrigerado a água leve, utiliza combustível placa de siliceto de urânio enriquecido a 19,7% em ^{235}U . O documento informa dimensões, composições materiais e incertezas do sistema fornecidas pelo grupo que fabricou os combustíveis. As informações de incerteza são baseadas em tolerâncias de fabricação, medidas experimentais e valores nominais. Este modelo de reator foi escolhido devido à sua

semelhança com o Reator Multipropósito Brasileiro, em desenvolvimento pela Comissão Nacional de Energia Nuclear. A Figura 5 apresenta uma foto do Elemento Combustível do RA-6 e a Figura 6 apresenta detalhes geométricos da seção do EC.

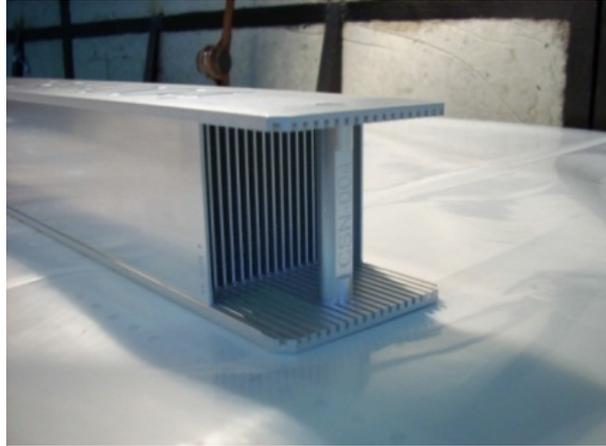


Figura 5 – Foto do EC do reator RA-6, Fonte:(WYSS; JORGENSEN, 2010).

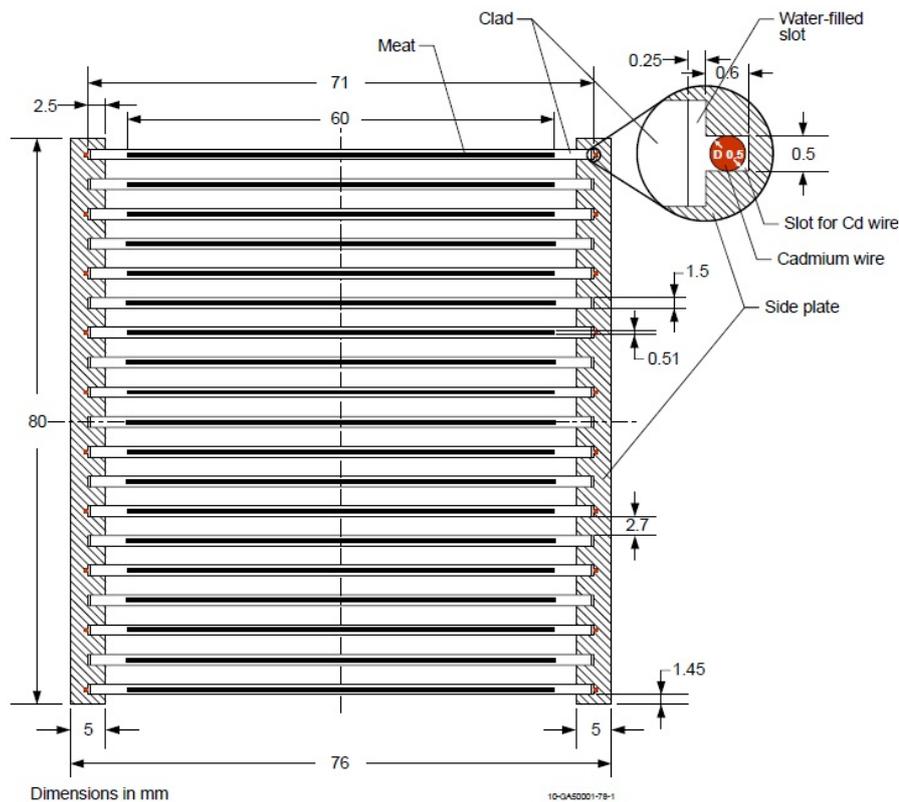


Figura 6 – Detalhes geométricos do EC do reator RA-6, Fonte:(WYSS; JORGENSEN, 2010)

Na Tabela 3 estão apresentados os parâmetros físicos, as incertezas associadas e o efeito calculado (variação no valor do k_{eff}) obtido através de um método conservador. A notação " 1σ " é usada para representar uma variação de 1 desvio padrão da média. Portanto, a faixa de tolerância de $\pm\sigma$ na média de um parâmetro é dada por *valor* \pm *incerteza*. O

método conservador utiliza a Equação 3.2 para determinar a variação no valor de k_{eff} , ou seja, Δk_{eff} através da execução do modelo para os piores casos da faixa de tolerância, ou seja, perturbações de $\pm\Delta x$. Mais informações sobre a aplicação do método para cada incerteza específica podem ser obtidas no documento original (WYSS; JORGENSEN, 2010).

$$\Delta k_{eff} = \frac{[|k_{eff}^{+\Delta x} - k_{eff}^0| + |k_{eff}^{-\Delta x} - k_{eff}^0|]}{2} \quad (3.2)$$

onde k_{eff}^0 é o Fator de Multiplicação Efetivo do sistema não perturbado.

Tabela 3 – Variação causada no valor do k_{eff} devido à incerteza nos parâmetros físicos de entrada. Fonte: (WYSS; JORGENSEN, 2010)

<i>Parâmetro</i>	<i>Valor</i>	<i>Incerteza 1σ*</i>	<i>Efeito em k_{eff}*</i>
Espessura da placa combustível	1,49 mm	0,005 mm	76,0 pcm
Densidade do Al 6061	2,7 g/cm ³	0,03 g/cm ³	20,0 pcm
Raio do veneno queimável	0,2425 mm	0,0025 mm	91,2 pcm

* Desvio padrão de uma distribuição normal. Valores foram adaptados respeitando a seção 2.2 do texto original.

3.1.1 GB_sample

Devido à grande demanda computacional e à natureza baseada em réplicas, o método da amostragem exige um processo automatizado, com ferramentas de reprodutibilidade confiáveis, funções estatísticas e controle para execução do MCNPX em processamento paralelo. Por isto, neste trabalho foi implementado um programa denominado GB_sample.

A linguagem Python (Python Software Foundation, 2010) foi utilizada no GB_sample, onde as funções estatísticas da ferramenta R podem ser embutidas na programação através do *plug in RPy* (R Development Core Team, 2010). As funções básicas do R utilizadas nos algoritmos do programa implementado estão apresentadas na Tabela 4. A base teórica para entendimento destas funções está apresentada na seção 2.1.

Detalhes teóricos e de implementação das funções no R podem ser obtidas em (R Development Core Team, 2010). O mecanismo de geração de números aleatórios do R, que utiliza a técnica desenvolvida por (MATSUMOTO; NISHIMURA, 1998), é utilizada pelo GB_sample. O Apêndice A apresenta os passos que devem ser seguidos para se obter um ambiente para programação em Python utilizando as ferramentas do R.

O GB_sample trabalha em duas etapas, que acontecem com a execução das rotinas Parte1.py e Parte2.py. A Parte 1 serve para automatizar o processo de preparação de séries de *inputs* para o código MCNPX e iniciar a execução. A Parte 2 coleta os dados, faz análise dos resultados e cria o relatório que será o arquivo de saída. O diagrama de blocos da Figura 7 apresenta o processo automatizado pelo GB_sample.

Tabela 4 – Funções do R utilizadas na implementação do GB_sample

<i>sintaxe</i>	<i>opções</i>	<i>explicação</i>
r.sd		calcula o desvio padrão
r.mean		calcula a média
r.shapiro_test(lista)		teste de normalidade
r.hist(lista)		calcula parâmetros do histograma
r.rnorm(n, mean, sd)	<i>mean</i> : média da distribuição <i>sd</i> : desvio padrão da distribuição <i>n</i> : número de componentes	gera números aleatórios baseados na distribuição normal

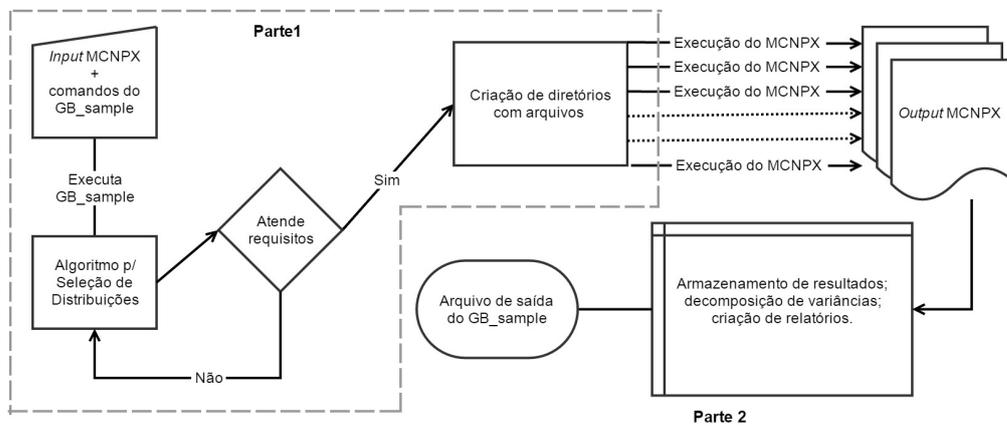


Figura 7 – Diagrama de blocos do processo automatizado pelo GB_sample.

Para inserir parâmetros com incerteza associada no arquivo de entrada para o GB_sample são usados caracteres simbólicos e comandos dentro do texto do *input* para MCNPX. Cada linha destinada a leitura pelo GB_sample tem o seguinte começo: "c @@@". Para amostragem de acordo com uma PDF normal, o usuário deve inserir a palavra chave *normalrange(n, mean, sd)* após o "c @@@", indicando uma amostragem de n componentes, com média *mean* e desvio padrão *sd*.

A Figura 8 apresenta um exemplo de cabeçalho do arquivo de entrada do GB_sample, com a parte referente aos parâmetros que serão amostrados. Este arquivo de entrada foi editado, para remover a parte referente ao modelo geométrico, materiais, fontes e comandos de controle da execução do código MCNPX. Com base na figura, observa-se que são informados três parâmetros com incerteza (ou parâmetros incertos), representados pelas siglas "P1", "A1", "Y2". É solicitado ao GB_sample realizar uma amostragem de distribuição normal com 93 componentes. O valor de $n=93$, que corresponde a um tamanho de amostra para significância estatística de percentil 95% do intervalo de tolerância com nível de confiança de 95% (Tabela 1), foi adotado como número mínimo de componentes das

amostras consideradas neste trabalho. As médias de P1, A1, Y2 tem valor igual a 0,02425, 0,060075 e 0,0745; e os desvios padrão (1σ) valem 0,00025, 6,69585E-4 e 0,00035355 respectivamente. O ponto é o separador decimal definido para ser utilizado. As siglas definidas no cabeçalho do arquivo de entrada são utilizadas na definição da geometria e materiais do modelo, em substituição os valores de parâmetros que tem incerteza associada. Um exemplo de arquivo de entrada completo para o GB_sample está apresentado no Anexo A.

```

RA6_GB-SAMPLE_MCNPX_INPUT
c @@@ P1=normalRange(93,0.02425,0.00025)
c @@@ A1=normalRange(93,0.060075,6.69585E-4)
c @@@ Y2=normalRange(93,0.0745,0.00035355)
CELL CARDS
...
SURFACE CARDS
...
DATA CARDS
...

```

Figura 8 – Exemplo de comandos do arquivo de entrada do GB_sample referentes a amostragem de parâmetros denominados P1, A1 e Y2.

Com a execução da Parte 1, os parâmetros solicitados são amostrados, são montados casos para cada componente da amostragem e são criados subdiretórios para armazenar os arquivos de cada caso. Cada subdiretório abriga o *input* do MCNPX referente ao caso em questão e o arquivo contendo a distribuição espacial inicial de nêutrons de fissão, isto é, o arquivo SRCTP que será explicado na seção 3.4. A Figura 9 apresenta um esquema de diretório principal com subdiretórios contendo o arquivo de entrada, denominado *INPUT0*, neste caso que é o primeiro componente da amostragem, e o arquivo SRCTP. O número de subdiretórios é equivalente ao número de componentes da amostragem, isto é, 93 para o caso de se utilizar os comandos ilustrados na Figura 8.

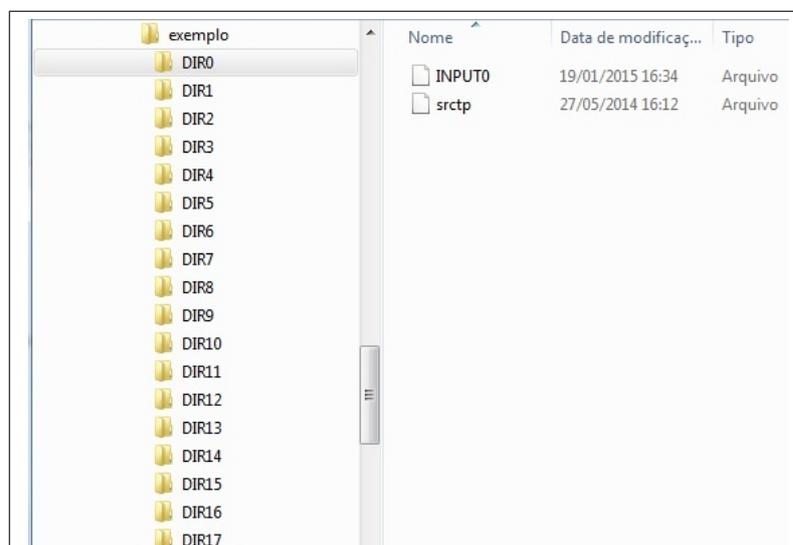


Figura 9 – Organização de diretórios do GB_sample.

Após a execução de todos os casos no MCNPX a "Parte2.py" pode ser executada. Os resultados de k_{eff} constituem uma distribuição de probabilidade e o GB_sample calcula os parâmetros dessa distribuição. O arquivo de saída denominado *NEUTRONIC_DATA* apresentado na Figura 10 é criado no diretório principal. Este arquivo contém o resumo dos valores de k_{eff} obtidos em cada caso e análise estatística da distribuição obtida do conjunto de todos os casos. A análise estatística consiste no cálculo da média, mediana, moda, desvio padrão total, desvio padrão computacional e desvio padrão propagado. A média, mediana e desvio padrão total são calculados com funções do R, reproduzidas na Tabela 4. A Figura 11 apresenta a função em *Python* para cálculo da moda visto que não é uma função pronta do R. O desvio padrão computacional de cada caso é informado no arquivo de saída do MCNPX e os valores obtidos em todos os casos são utilizados para cálculo do desvio padrão propagado conforme será explicado na seção 3.2.

```
#####
PROJETO GB_sample
#####
k-effective
INPUT 0  0.99816
INPUT 1  0.99838
INPUT 2  0.99814
INPUT 3  0.99728
INPUT 4  0.99895
INPUT 5  0.99761
INPUT 6  0.99860
INPUT 7  0.99839
INPUT 8  0.99794
INPUT 9  0.99765
INPUT10  0.99749
INPUT11  0.99700
...
...
...
INPUT79  0.99884
INPUT80  0.99775
INPUT81  0.99652
INPUT82  0.99797
INPUT83  0.99822
INPUT84  0.99785
INPUT85  0.99942
INPUT86  0.99842
INPUT87  0.99861
INPUT88  0.99897
INPUT89  0.99843
INPUT90  0.99629
INPUT91  0.99828
INPUT92  0.99833
MEDIA    0.997867
MEDIANA  0.997860
MODA     0.997765
SD_COMP. 2.853763E-04
SD_PROP. 7.209940E-04
SD_TOTAL 7.754173E-04
```

Figura 10 – Conteúdo resumido do arquivo *NEUTRONIC_DATA*.

O gráfico da distribuição e o *boxplot* do parâmetro de saída (k_{eff}) são plotados automaticamente. Os arquivos *PDF_keff_step0.jpeg* e *BOX_PDF_keff_step0.jpeg* são gerados no diretório principal e tem seus conteúdos exibidos nas figuras 12 e 13, respecti-

```

def Moda(Lista):
    ht = []
    delta = []
    ht = r.hist(Lista, plot = 'False')
    Max = r('which.max')
    mcl = Max(ht['counts'])
    li = ht['breaks'][mcl-1]
    width = r.diff(ht['breaks'])[0:2]
    counts = r.c(0,ht['counts'],0)
    for j in range(2):
        delta.append(abs(counts[mcl+j] - counts[mcl-1+j]))
    moda = li + (width*delta[0]/r.sum(delta))
    return moda

```

Figura 11 – Função em *Python* para cálculo da moda.

vamente. Na Figura 12, *frequency* representa a contagem do número de valores de k_{eff} resultados dentro de cada faixa ou intervalo. Cada pequeno traço abaixo do eixo das abcissas é um resultado de k_{eff} . A linha pontilhada é uma curva normal plotada com a média e desvio padrão da distribuição resultante. Na Figura 13, o *quartil* divide o conjunto de dados da amostra em quatro partes iguais. A *faixa interquartil* (IQR) compreende os dados entre o primeiro e o terceiro quartil. A mediana, conforme explicado na seção 2.1.2, é a observação do meio quando os números são organizados em ordem de magnitude.

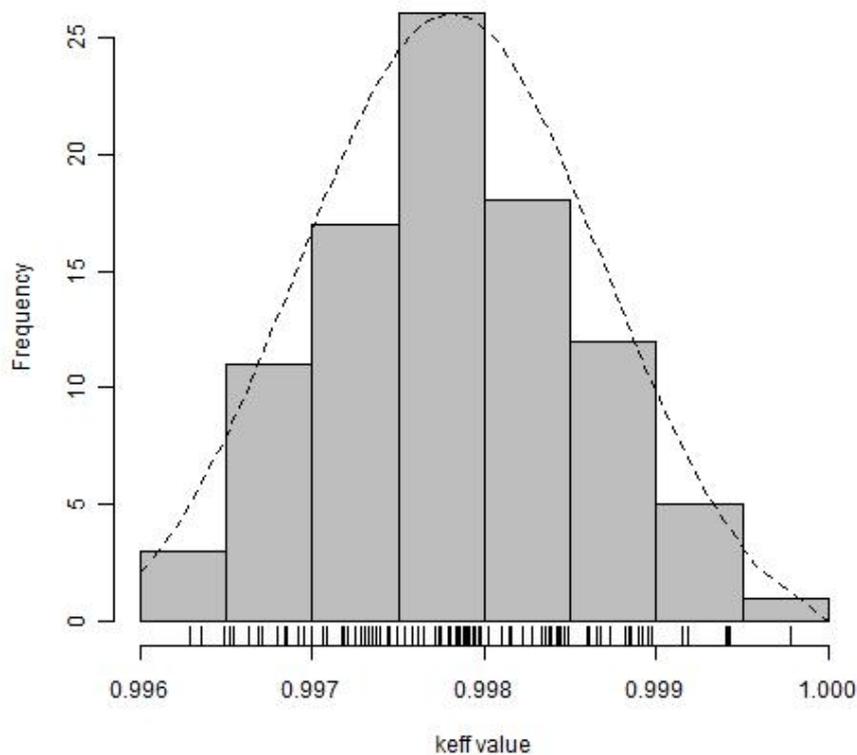


Figura 12 – Gráfico da distribuição do k_{eff} gerado automaticamente no diretório principal com o nome *PDF_keff_step0.jpeg*.

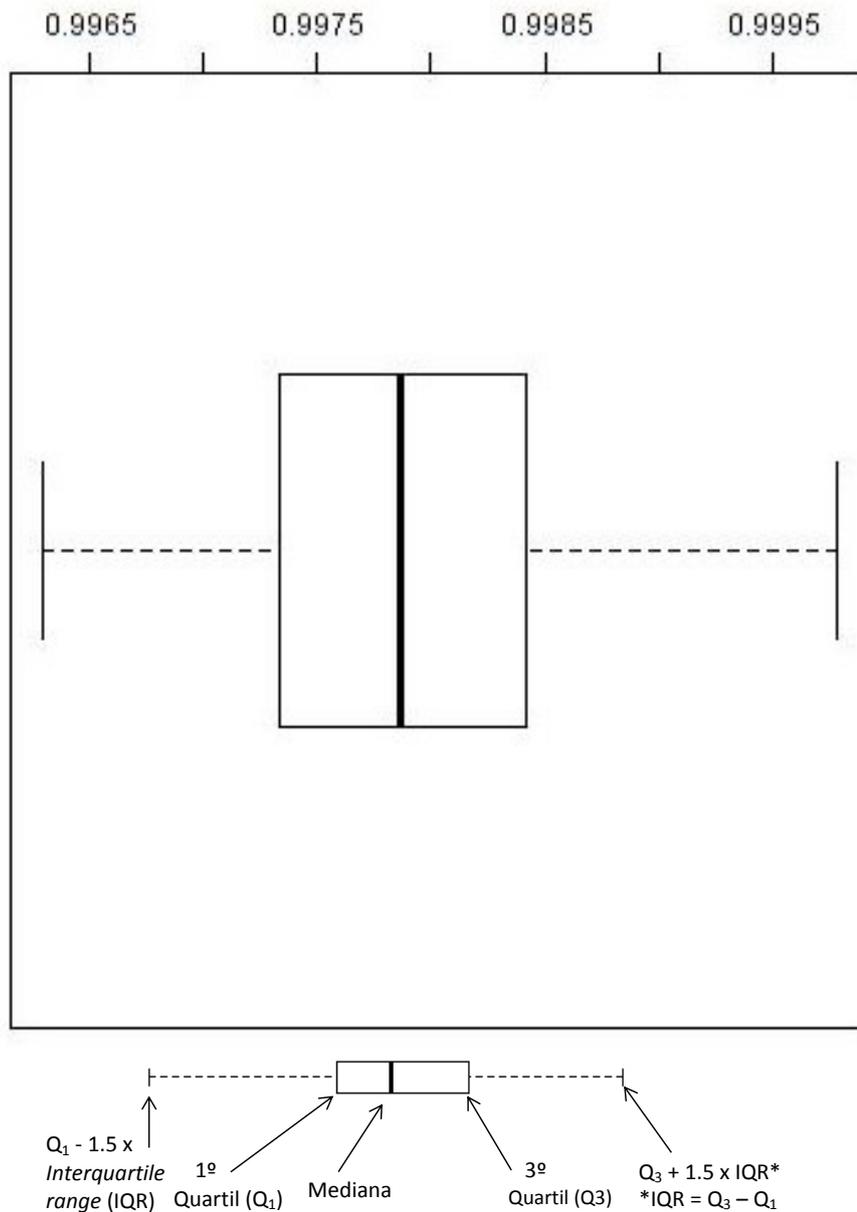


Figura 13 – *Boxplot* de k_{eff} gerado automaticamente no diretório principal com o nome *BOX_PDF_keff_step0.jpeg*.

A Figura 14 apresenta o fluxo de dados envolvidos na execução das duas etapas do GB_sample.

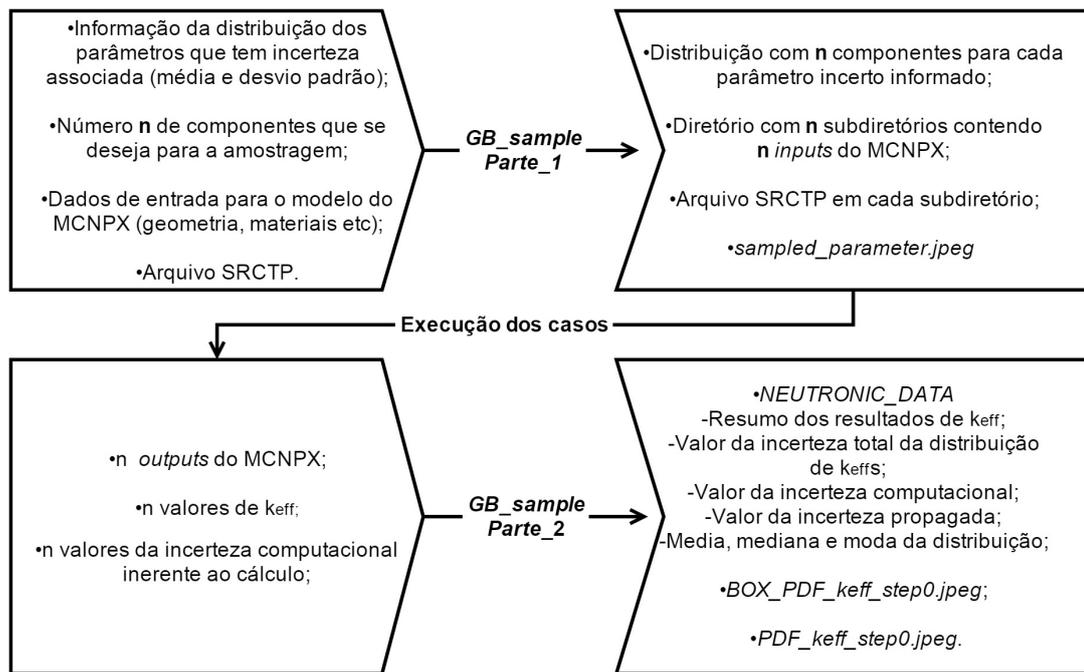


Figura 14 – Fluxo de dados do GB_sample.

3.1.2 Algoritmo para seleção de distribuição

Conforme explicado na seção 2.3.2, a eficiência de amostragem mede a capacidade de representar uma distribuição com o mínimo de componentes. Neste contexto, a fim de minimizar o número de execuções de simulação necessários para se obter resultados precisos, foi implementado o Algoritmo para Seleção de Distribuição. Este algoritmo realiza os seguintes testes antes de disponibilizar n valores que irão compor uma distribuição normal solicitada pela função *normalRange* do GB_sample:

- cada número aleatório gerado deve estar dentro do intervalo de confiança de: $média \pm 3SD^1$;
- a distribuição é normal (*p-value* maior que 0,05);
- a distribuição apresenta *coeficiente de assimetria de Pearson*, seção 2.9, abaixo de um determinado limite *MAXsimetry*;
- a diferença entre a média da distribuição gerada e a média solicitada deve ser menor que um determinado limite *MAXmean*;

¹ Erros de medições geralmente são admitidos como tendo distribuição normal. Conforme explicado na seção 2.1.5, apesar da faixa de uma distribuição normal ser infinita, é evidente que medições e suas incertezas são delimitados, discretos e não-negativos, pela natureza física dos mesmos. Para conciliar essa aparente contradição, quando a tolerância (variação máxima admissível) de um parâmetro não é informada, a função *normalRange* delimita automaticamente a distribuição dentro da faixa de $\pm 3SD$ (3 desvios padrão) do valor de sua média.

- a diferença entre o desvio padrão da distribuição gerada e o desvio padrão solicitado deve ser menor que um determinado limite $MAXsd$.

Aplicando a fórmula de Wilks (Equação 2.16) no método da amostragem para propagação de incertezas, podemos dizer que o número n de execuções do código MCNPX é independente do número de parâmetros selecionados no *input* para propagar incerteza, dependendo apenas do percentil e da porcentagem de nível de confiança desejado (GLAESER, 2008).

Em termos de implementação na linguagem *Python*, o Algoritmo para Seleção de Distribuição está embutido na função *normalRange* conforme apresentado na Figura 15.

```
def normalRange(n, mean, sd):
    min = mean - 3*sd
    max = mean + 3*sd
    naoPassou = 0
    requisitoSimetria = 0.01
    requisitoNormalidadeShapiro = 0.05
    requisitoDeltaSD = 0.001
    requisitoDeltaMedia = 0.01

    while 1:
        lista = []
        while len(lista) != n:
            teste = r.rnorm(1,mean,sd)
            if teste < max and teste > min:
                lista.append(teste)

        if len(lista)> 2 and
            TesteNormalidade(lista ,requisitoNormalidadeShapiro) == 1 and
            TesteSimetriaPearson(lista ,requisitoSimetria)==1 and
            (abs((r.sd(lista)-sd)/r.sd(lista))<requisitoDeltaSD) and
            (abs((r.mean(lista)-mean)/r.mean(lista))<requisitoDeltaMedia):
            return lista
        else:
            lista = []
            naoPassou+=1
```

Figura 15 – Função em *Python* para aplicação do algoritmo para selecionar distribuições.

3.2 Incerteza propagada

Quando o GB_sample é utilizado para amostrar um parâmetro do sistema baseado em uma distribuição estatística e n casos são executados no MCNPX, conforme foi visto na seção 2.3.3.2, a incerteza estatística computada da distribuição resultante não diminui na proporção $\frac{1}{\sqrt{n}}$ à medida que mais histórias são seguidas. Com base no conceito de *Combinação Linear de Variáveis Aleatórias Normais*, apresentado na seção 2.1.7, a variância total propagada pode ser decomposta em dois componentes (Equação 3.3). Um devido à amostragem aleatória que ocorre nas histórias do método de Monte Carlo, ou seja, a incerteza computacional intrínseca ao código (σ_{comp}^2), e outro causado pela variação nos

parâmetros do *input* (σ_{input}^2).

$$\sigma_{total}^2 = \bar{\sigma}_{comp.}^2 + \sigma_{input}^2 \quad (3.3)$$

$$\bar{\sigma}_{comp.}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sigma_{comp.,i}^2 \quad (3.4)$$

O valor de σ_{total}^2 é obtido da distribuição composta pelos n resultados executados no MCNPX. Os valores estimados de $\sigma_{comp.,i}^2$ para os n resultados também são fornecidos pelo MCNPX e são usados para calcular $\bar{\sigma}_{comp.}^2$ através da Equação 3.4 (ROCHMAN et al., 2014). De posse destes dois valores, σ_{input}^2 pode ser extraído por meio da Equação 3.3. A Figura 16 apresenta a função *criaDicionarioResultadoK* em *Python* que calcula os parâmetros da distribuição de k_{eff} e gera o dicionário que irá compor o arquivo de saída do GB_sample. Como podemos ver, o cálculo do $\sigma_{comp.}$, dado por *sdComputacional* é feito através da função *mean* do R e o cálculo do σ_{input} , dado por *sdPropagado*, é obtido da raiz quadrada da diferença dos quadrados.

Para permitir o estudo da influência da incerteza computacional na determinação da incerteza propagada, a incerteza computacional empregada nos cálculos deste trabalho variou de 14 a 80 pcm. No entanto, a convergência da distribuição espacial inicial dos nêutrons de fissão foi sempre acompanhada, de forma a garantir a convergência da simulação (seção 2.3.3.2), conforme diretrizes informadas no manual do código MCNPX (LANL, 2011).

3.3 Teste de convergência do método

Para confirmar a convergência do método e do número de componentes da amostragem dois ou mais conjuntos devem apresentar resultados equivalentes. A faixa de variação do resultado do parâmetro calculado assim como a incerteza propagada nos diversos conjuntos não pode ser maior do que um valor preestabelecido. Conforme explicado na seção 2.3.2, os conjuntos ou réplicas, são gerados através da utilização de uma semente diferente para iniciar o gerador de números aleatórios, de forma que análise inteira é repetida e os resultados são comparados. A Figura 17 ilustra um esquema da geração de 10 réplicas da amostragem "`@@@P1=normalRange(93,0.02425,0.00025)`".

Para verificar o método da amostragem para propagar incertezas no fluxo de calor utilizando a metodologia LHS, o documento (ASME, 2009) utilizou 10 réplicas. O estudo de Hans (JANSSEN, 2013) sobre eficiência e convergência para análise de incerteza, utilizando método baseado em amostragem, também adota a utilização de 10 réplicas para o acompanhamento da convergência dos resultados gerados por diferentes métodos de amostragem. Com base nas duas referências supracitadas, utilizou-se o GB_sample para processar 10 conjuntos de n casos, ou seja, 10 réplicas. A variável incerta acompanhada para verificação da convergência foi o raio do fio de veneno queimável, presente no elemento

```

def criaDicionarioResultadoK (listaStringResumoOutput ,
numSteps , listaStringIncertezasOutput , burn):
    listaDicResultadoK=[]
    listaDicPcmK=[]
    for i in range(0 , len(listaStringResumoOutput)):
        splitResumo= []
        indice=listaStringResumoOutput [ i ]
        splitResumo = listaStringResumoOutput [ i ] . split ( )
        listaK=[]
        comeca=0
        if burn=='n' or 'N':
            comeca=0
            for k in range(0 , len(splitPcmK)):
                if (splitPcmK [k]=='collision/absorption/track-length'):
                    comeca=1
                if (comeca==1 and k%20==6):
                    listaK . append (splitPcmK [k])
    listaParaCalculo=[]
    listaDeMedias=[]
    listaDeMedianas=[]
    listaDeDesvios=[]
    listaParaCalculoPcmComputacional=[]
    listaSdComputacional=[]
    listaSdPropagado=[]
    listaModa=[]
    for i in range(0 , numSteps):
        for j in range(0 , len(listaStringResumoOutput)):
            listaParaCalculo . append (float (listaDicResultadoK [j][i]))
            listaParaCalculoPcmComputacional . append (float (listaDicPcmK [j][i]))
        media=r . mean (listaParaCalculo)
        mediana=r . median (listaParaCalculo)
        desvio=r . sd (listaParaCalculo)
        sdComputacional=r . mean (listaParaCalculoPcmComputacional)
        sdPropagado=math . sqrt (( desvio)**2 - (sdComputacional)**2)
        moda=Moda (listaParaCalculo)
        listaDeMedias . append (media)
        listaDeMedianas . append (mediana)
        listaDeDesvios . append (desvio)
        listaSdComputacional . append (sdComputacional)
        listaSdPropagado . append (sdPropagado)
        listaModa . append (moda)
        listaParaCalculo=[]
        listaParaCalculoPcmComputacional=[]
        media=float
        mediana=float
        desvio=float
    listaDicResultadoK . append (listaDeMedias)
    listaDicResultadoK . append (listaDeMedianas)
    listaDicResultadoK . append (listaModa)
    listaDicResultadoK . append (listaSdComputacional)
    listaDicResultadoK . append (listaSdPropagado)
    listaDicResultadoK . append (listaDeDesvios)
    return listaDicResultadoK

```

Figura 16 – Função em *Python* para gerar o dicionário com análise dos resultados e arquivos de saída.

combustível (Fig. 6). Ela foi escolhida por gerar maior efeito em k_{eff} (Tabela 3), o que facilita a investigação do método da amostragem na medida que não é necessário trabalhar com incertezas computacionais demasiadamente baixas. Será considerado neste trabalho um valor arbitrário de desvio padrão interno de 5 pcm como referência para a convergência dos parâmetros sendo estudados. Este valor foi adotado pois a grande maioria das aplicações

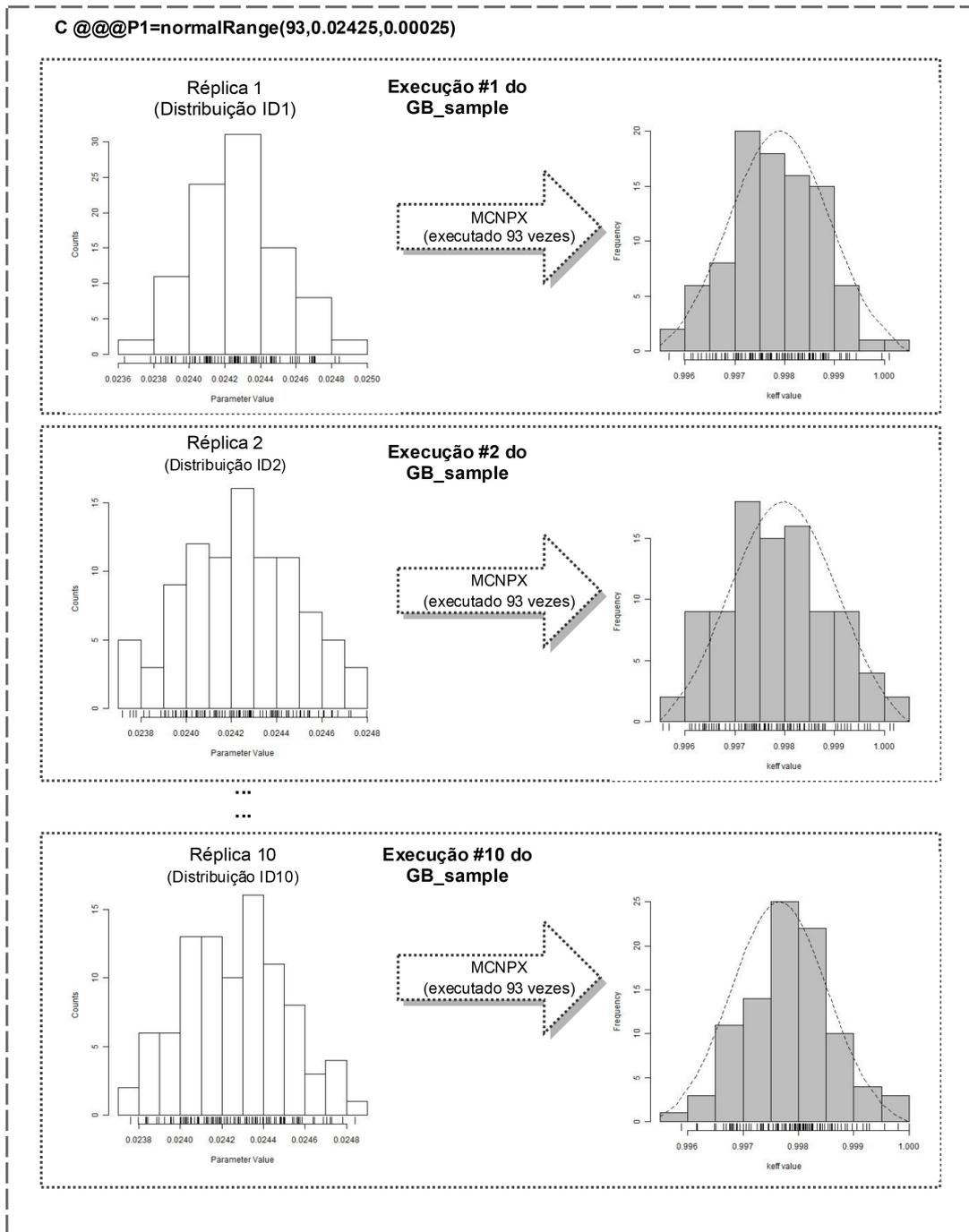


Figura 17 – Esquema ilustrando a execução de 10 réplicas do comando de amostragem $@@@P1=normalRange(93,0.02425,0.00025)$.

que envolvem k_{eff} encontradas na literatura utiliza 30 pcm de incerteza para apresentação de resultados provenientes de cálculos utilizando códigos estocásticos. O desvio padrão interno é definido como o desvio padrão entre o valor dos desvios padrão propagados dos *inputs* (σ_{input}), para as 10 réplicas.

- Caso controle

Será utilizado também um caso controle executado sem incertezas no *input*, ou seja, um caso sem amostragem, rodado apenas no MCNPX com incerteza computacional configurada para 10 pcm. Este caso servirá de referência para comparação do k_{eff} obtido, com a média do valor do k_{eff} das réplicas.

3.4 Otimização do desempenho do MCNPX

Conforme foi mencionado na seção 2.3.3, a propagação das amostras pelo sistema domina o tempo computacional do método da amostragem para propagação de incertezas. Além do tamanho da amostra, o desempenho da execução de cada caso no modelo de caixa preta é um fator de importância. Para minimizar o tempo de cálculo, foi utilizado o processamento paralelo para executar o MCNPX no *cluster* de computadores do Serviço de Tecnologia de Reatores do CDTN. O Apêndice B enumera os passos seguidos para configuração do ambiente do sistema operacional e compilação do MCNPX para processamento paralelo e instalação das bibliotecas MPI (MPI Forum, 2012).

Foi realizado um experimento para determinar qual a maneira de se utilizar o *cluster* de computadores de forma a se obter desempenho ótimo para a aplicação neste trabalho. Conforme pode ser visto na Figura 18 foram considerados 3 casos denominados "tempo 2K", "tempo 20K" e "tempo 50K" que foram configurados com 2 mil, 20 mil e 50 mil nêutrons/ciclo respectivamente. Cada caso foi rodado no *cluster* configurado para utilizar de 1 até 7 computadores *dual core* em processamento paralelo. O *speed-up* é definido pela seguinte equação:

$$speedup = \frac{t_1}{t_{nc}} \times \frac{1}{nc} \quad (3.5)$$

onde t_1 é o tempo gasto por ciclo (tempo/ciclo) para o *cluster* rodando com apenas 1 computador e t_{nc} é o tempo/ciclo para nc computadores.

Verificou-se que à medida que o tempo por ciclo na execução do MCNPX se reduzia abaixo de aproximadamente 4 segundos, o *speed-up* era prejudicado, pois o tempo de comunicação entre as máquinas passa a dominar o processo. Portanto, o aumento do número de histórias por ciclo foi utilizado preferencialmente ao aumento do número de ciclos nos casos deste trabalho, de forma a se trabalhar na faixa ótima do *cluster*. Utilizou-se um mínimo de 275 ciclos ativos², de forma a respeitar também as prerrogativas de convergência dos cálculos (seção 2.3.3.2), que estabelece que o número de ciclos também tem que ser grande suficiente para ser possível acompanhar o processo de convergência.

² São ciclos que tem os resultados levados em conta no resultado final da simulação, ou seja, número de ciclos já desconsiderando os ciclos utilizados no processo de convergência da distribuição espacial inicial dos nêutrons de fissão.

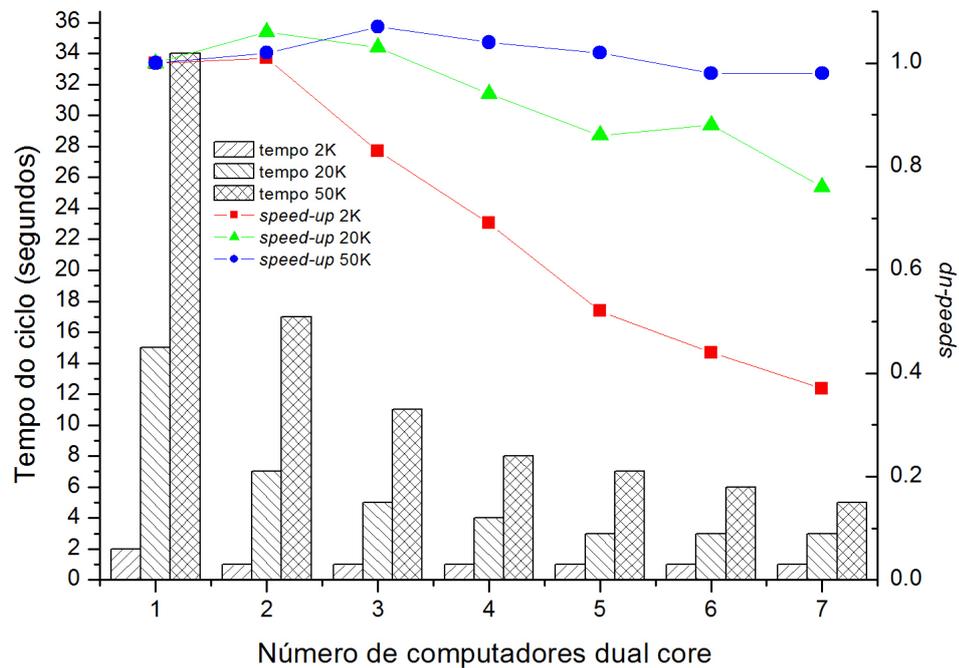


Figura 18 – Desempenho do cluster do CDTN para execução do MCNPX em processamento paralelo utilizando a biblioteca MPI

Da mesma forma que foi feito por (MARCK; ROCHMAN, 2013), visando eliminar o tempo de execução do MCNPX necessário para se obter convergência da distribuição espacial inicial dos nêutrons de fissão, foi simulado um caso com muitas histórias e o arquivo SRCTP desta execução, conforme explicado na seção 2.3.3.2, foi salvo e utilizado em todos os casos. O arquivo SRCTP de referência foi resultado de um caso fornecendo um k_{eff} com desvio padrão de 10 pcm.

4 Resultados e Análise

4.1 Amostragem de parâmetros e incertezas

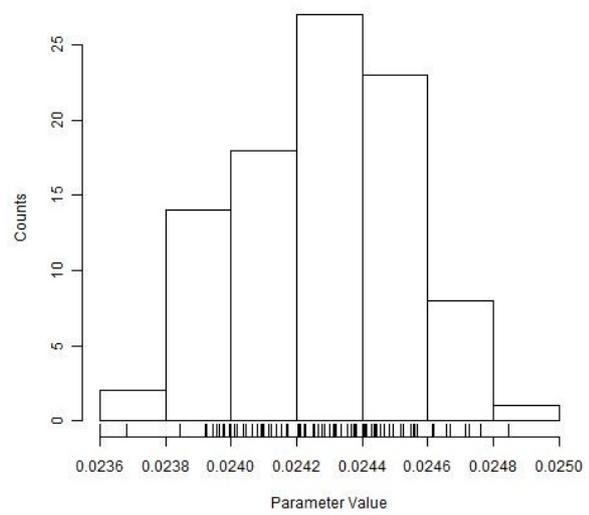
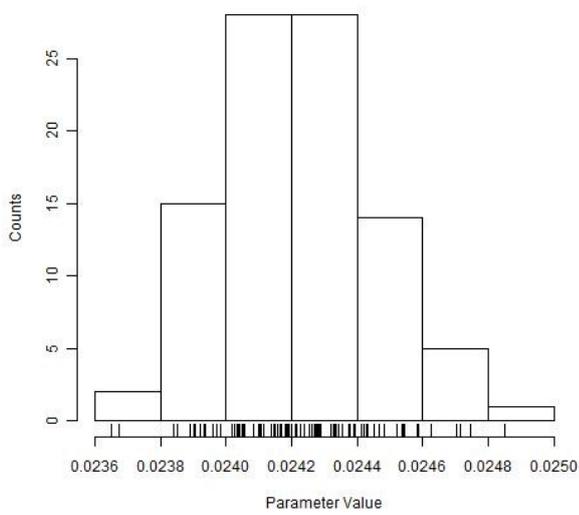
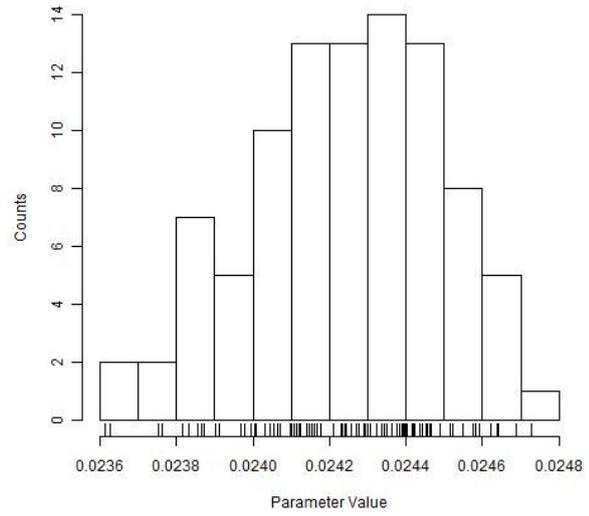
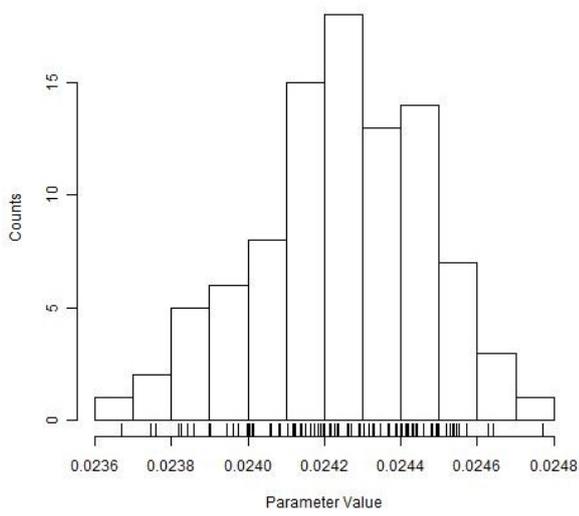
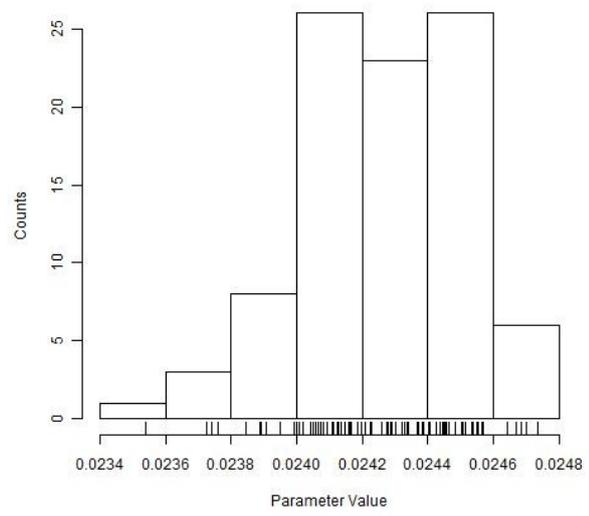
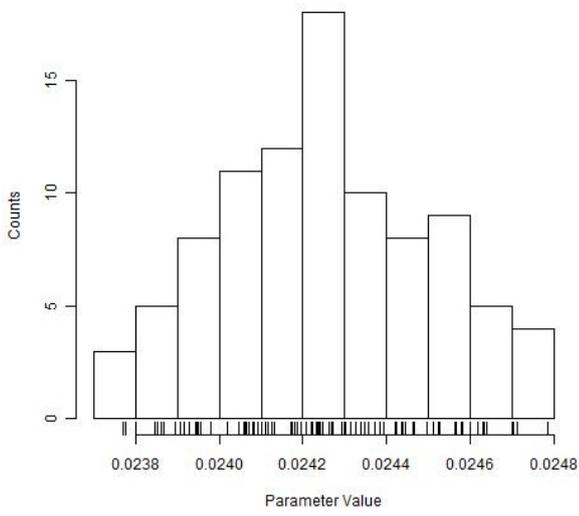
Neste item utilizaremos apenas a Parte 1 do GB_sample para criar réplicas de amostragem do raio do veneno queimável (\bar{R}) e sua incerteza associada (Tabela 3), onde $\bar{R} = 0,02425 \text{ cm}$, $\sigma = 0,00025 \text{ cm}$ e $n=93$. O objetivo aqui é verificar a importância de aumentar a eficiência da amostragem aleatória¹. A Tabela 5 apresenta 10 réplicas, denominadas distribuições ID 1 à ID 10, de 93 componentes cada, representada pelo seu ID na primeira coluna. Para estas réplicas, o Algoritmo para Seleção de Distribuição (seção 3.1.2) foi desabilitado. A média, o desvio padrão e o coeficiente de assimetria estão apresentados na segunda, terceira e quarta coluna respectivamente.

Tabela 5 – Distribuições geradas da amostragem do raio do veneno queimável sem utilização do Algoritmo para Seleção de Distribuição.

<i>Distribuição ID</i>	<i>Média (cm)</i>	<i>SD (cm)</i>	<i>Assimetria</i>
1	2,4249E-02	2,4685E-04	0,17
2	2,4258E-02	2,4798E-04	-0,22
3	2,4241E-02	2,2764E-04	0,05
4	2,4240E-02	2,5188E-04	-0,34
5	2,4227E-02	2,4207E-04	0,14
6	2,4273E-02	2,4893E-04	-0,14
7	2,4238E-02	2,4804E-04	0,13
8	2,4304E-02	2,7961E-04	-0,24
9	2,4217E-02	2,6212E-04	0,21
10	2,4160E-02	2,3521E-04	0,00

Conforme explicado na seção 3.1.1, as distribuições são geradas pelo GB_sample por meio da função *rnorm* do R que se baseia na geração de números aleatórios (MATSUMOTO; NISHIMURA, 1998). Devido a este fato, as distribuições obtidas são diferentes umas das outras, conforme pode ser visto pelos histogramas das mesmas, apresentado na Figura 19. O eixo horizontal informa o valor do raio do veneno queimável. Cada tracinho neste eixo representa um valor de um componente da amostragem. A frequência ou contagem (*counts*) que cada valor acontece está informada no eixo vertical.

¹ que foi feita neste trabalho por meio do Algoritmo para Selecionar Distribuição embutido na função *normalRange*.



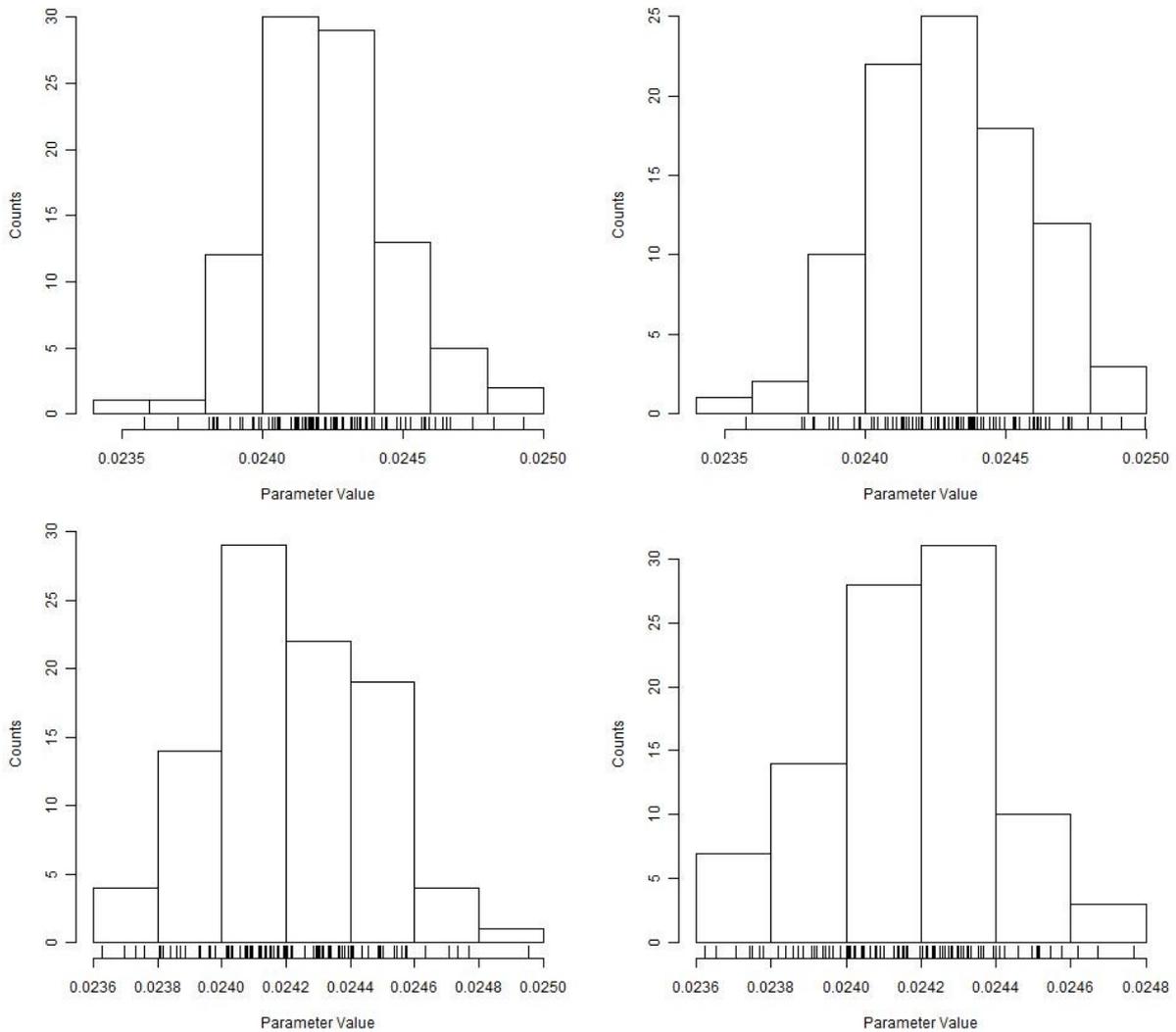
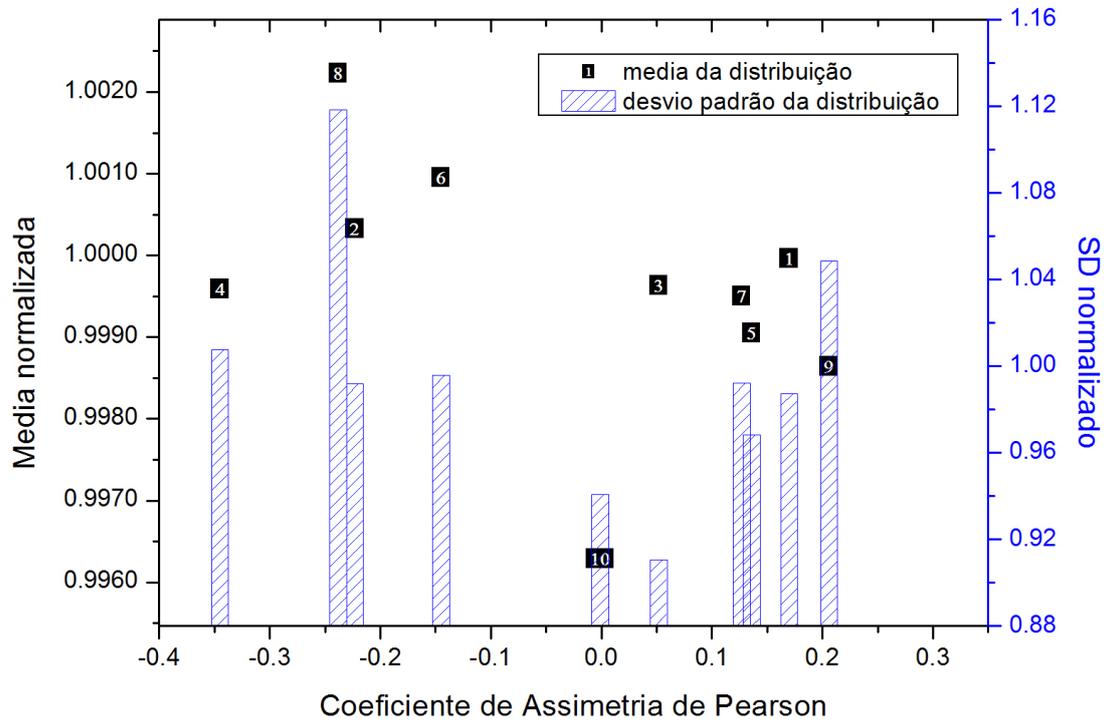


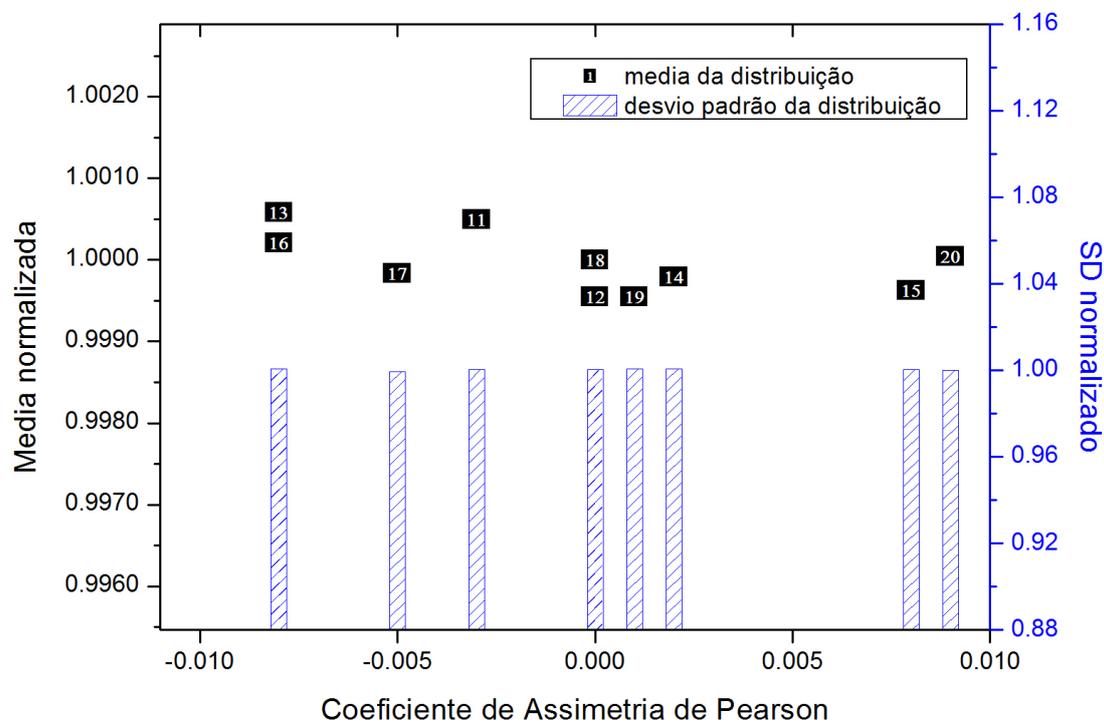
Figura 19 – Histogramas das distribuições geradas a partir do raio do veneno queimável e incerteza associada. Distribuições ID 0 à ID 10.

A fim de estudar a variação relativa dos parâmetros das distribuições geradas (média e desvio padrão) com relação aos parâmetros solicitados para a amostragem, traçou-se o gráfico da Figura 20.a, que ilustra os dados da Tabela 5. Os eixos das ordenadas da esquerda e da direita estão normalizados pelos valores nominais de 0,02425 cm (raio do veneno queimável) e 0,00025 cm (1 SD de incerteza) respectivamente. Observa-se que a média varia de aproximadamente -0,4% até +0,2%, o SD varia de aproximadamente -8% até +14% e o coeficiente de assimetria varia de aproximadamente -0,35 até 0,2.

Outras 10 distribuições foram geradas utilizando o Algoritmo para Seleção de Distribuição explicado na seção 3.1.2. Trata-se das distribuições de ID 11 à ID 20 que tem os parâmetros apresentadas na Tabela 6 e os histogramas apresentados na Figura 21.



a.

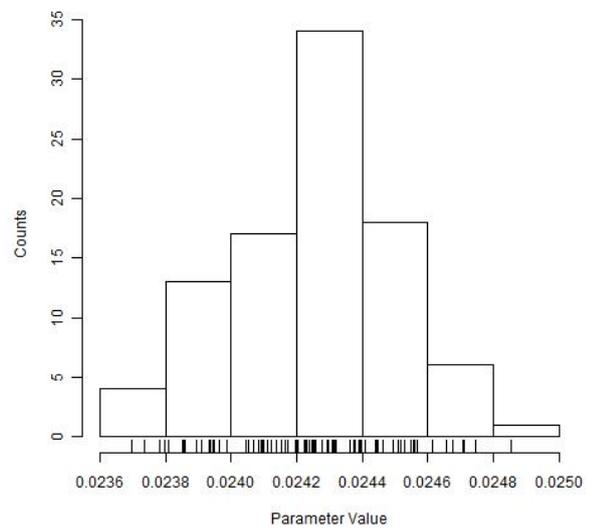
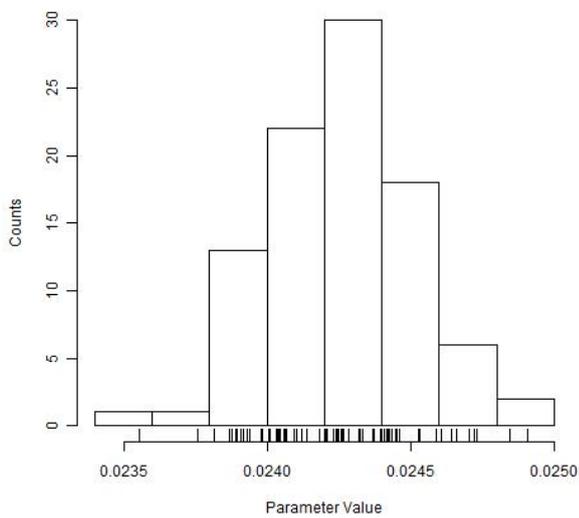
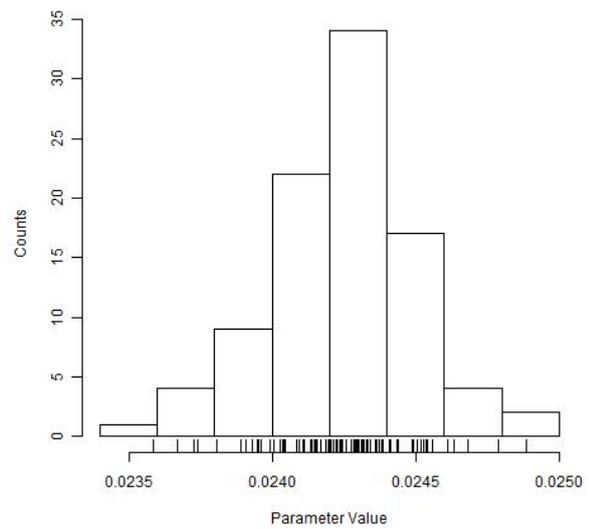
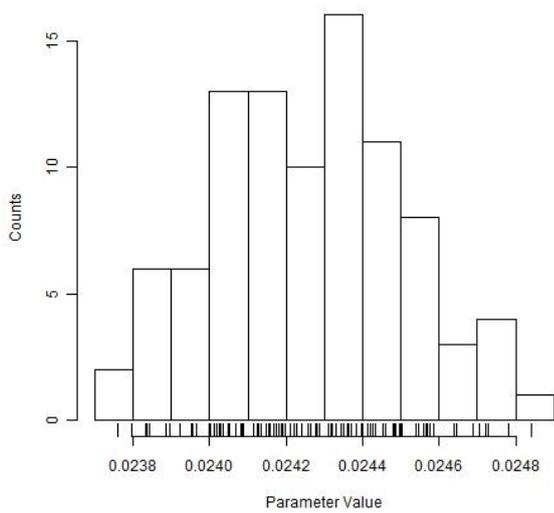
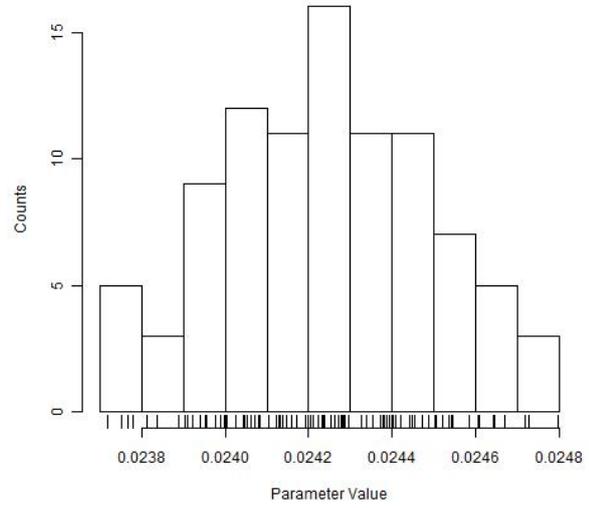
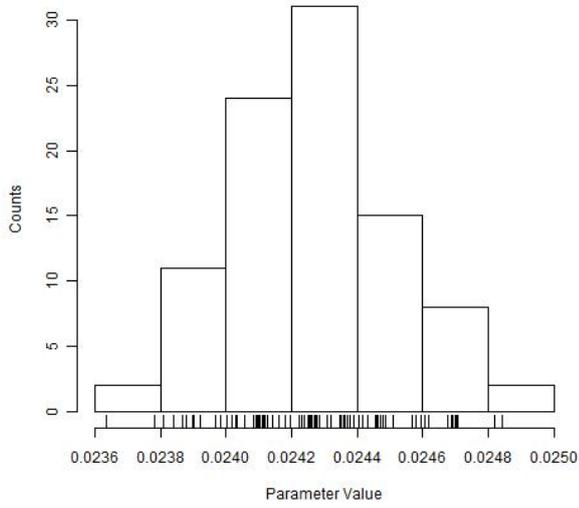


b.

Figura 20 – Variação normalizada da média e do desvio padrão em função da assimetria; a. Distribuições ID 1 - 10; b. Distribuições ID 11 - 10

Tabela 6 – Distribuições geradas da amostragem do raio do veneno queimável com sua incerteza associada.

<i>ID</i>	<i>Média (cm)</i>	<i>SD (cm)</i>	<i>Assimetria</i>
11	2,4262E-02	2,5010E-04	-0,003
12	2,4239E-02	2,5010E-04	0,000
13	2,4264E-02	2,5017E-04	-0,008
14	2,4245E-02	2,5021E-04	0,002
15	2,4241E-02	2,5012E-04	0,008
16	2,4255E-02	2,5020E-04	-0,008
17	2,4246E-02	2,4988E-04	-0,005
18	2,4250E-02	2,5007E-04	0,000
19	2,4250E-02	2,5007E-04	0,000
20	2,4239E-02	2,5021E-04	0,001



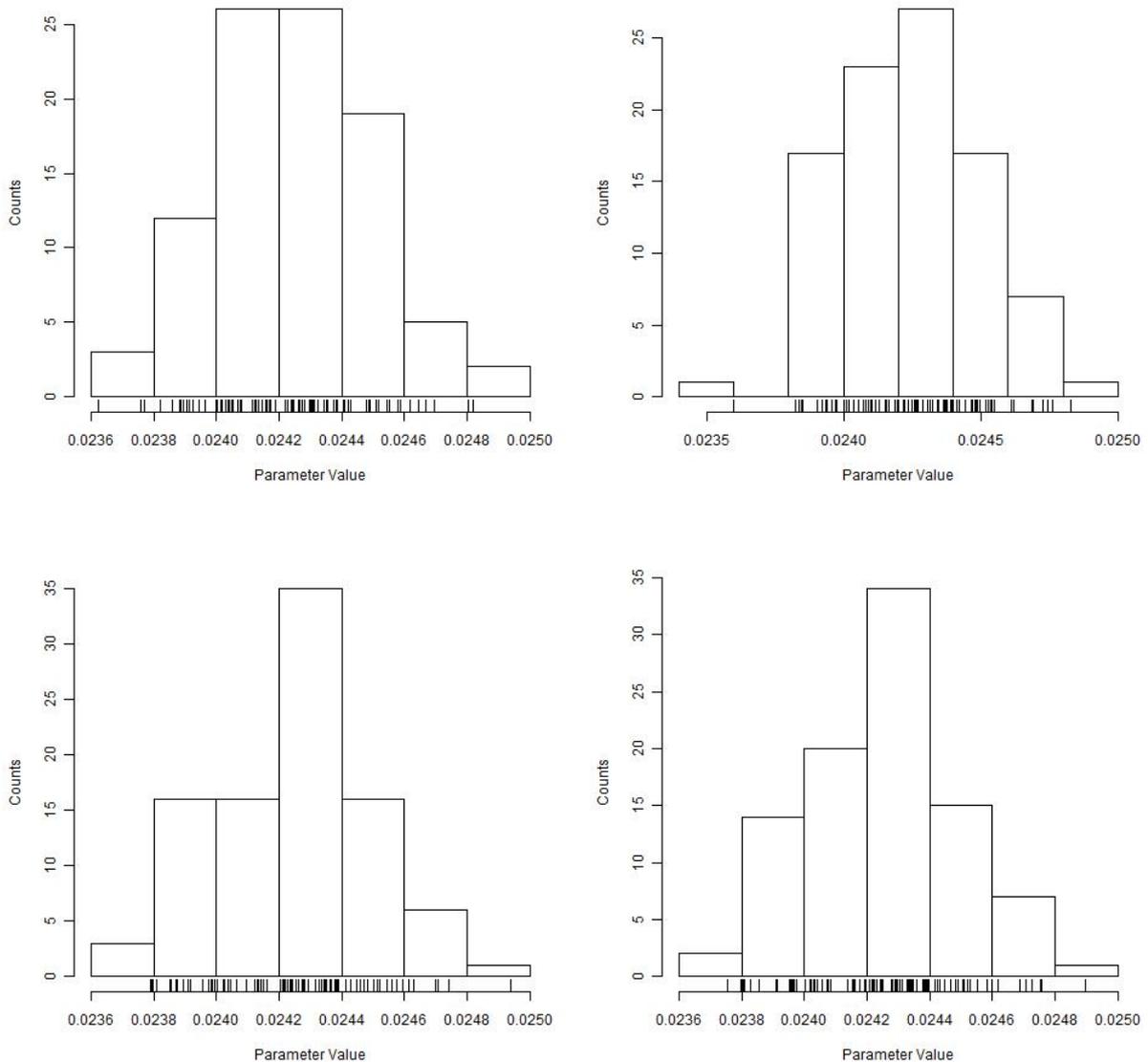


Figura 21 – Distribuição do raio do veneno queimável e incerteza associada. Distribuições ID 11 até ID 20.

Conforme esperado, a máxima variação absoluta da média, do desvio padrão e da assimetria da distribuição em relação aos valores solicitados para amostragem, não passou de 0,1%, 0,01% e 0,01 (MAX_{mean} , MAX_{sd} , $MAX_{simetry}$; seção 3.1.2.). Este resultado, ilustrado na Figura 20.b, evidencia a eficiência da amostragem após utilização do Algoritmo para Seleção de Distribuição. Com o mesmo tamanho da amostra ($n=93$), cada réplica ID11 à ID20 representou melhor a distribuição normal solicitada ($\bar{R} = 0,02425 \text{ cm}$ e $\sigma = 0,00025 \text{ cm}$).

4.2 Influência da distribuição na propagação da incerteza

Nesta seção, além das distribuições do raio do veneno queimável, passaremos a analisar também as distribuições do k_{eff} . Portanto, foram executadas as etapas: (i) Parte 1 do GB_sample para amostragem dos parâmetros incertos, (ii) execução dos casos no MCNPX e (iii) execução da Parte 2 do GB_sample. Os parâmetros que caracterizam as distribuições de probabilidade foram estudados a fim de se entender a relação do *input* com o *output*, na aplicação do método da propagação de incerteza por amostragem para o sistema em questão.

As 20 amostras geradas na seção 4.1 foram executados com a quantidade de histórias do MCNPX da mesma ordem de grandeza². A Tabela 7, obtida dos arquivos de saída do GB_sample (*NEUTRONIC_DATA*), apresenta os valores dos principais parâmetros das distribuições do k_{eff} para cada distribuição aplicada no *input*. A média, mediana, moda e desvio padrão da distribuição estão apresentados nas colunas 2, 3, 4 e 7, respectivamente. A quinta coluna representa a incerteza computacional ($SD_{computacional}$) aplicada no caso. A sexta coluna apresenta o desvio padrão propagado ($SD_{propagado}$), que foi calculado através da decomposição da incerteza total da distribuição, conforme explicado na seção 3.2. A Tabela 8 apresenta a análise estatística dos resultados da Tabela 7.

As Figuras 22.a e 22.b apresentam, em mesma escala, os parâmetros das distribuições do k_{eff} em função das distribuições utilizadas no *input*, ID 1 à 10 e ID 11 à 20 respectivamente.

Com a análise da Figura 22.a percebemos uma grande variação gerada na distribuição do k_{eff} , tanto no valor da média quanto no valor da assimetria, possivelmente causada pela má representação do valor amostrado pelas distribuições ID 1 à 10 com 93 componentes. Existe uma correlação negativa forte (coeficiente de correlação de 0,86) entre o conjunto de valores da média da distribuição do raio do veneno queimável e o conjunto de valores da média da distribuição do k_{eff} . Esta correlação é esperada, visto que um aumento da quantidade de veneno queimável causaria diminuição do Fator de Multiplicação Efetivo do sistema. Na tentativa de eliminar esta variável, foram analisados os resultados das distribuições ID 11 à 20, que utilizaram o Algoritmo para Seleção de Distribuição em sua amostragem. A análise da Tabela 8 nos mostra que, após minimizadas as variâncias na *variação da média* (agora com faixa de variação abaixo de 0,1%) e *assimetria* (agora com faixa de variação abaixo de 0,01) das distribuições do *input*, o *desvio padrão* da média, da mediana e da moda da distribuição do *output* (k_{eff}) reduziu de 12,3 pcm, 14,8 pcm e 30,4 pcm para 6,8 pcm, 11,3 pcm e 21,7 pcm respectivamente. Portanto, conforme ilustrado na Figura 22.b, o aumento da eficiência da amostragem do parâmetro incerto acarreta

² Para se obter a incerteza computacional informada na quinta coluna da Tabela 7, os casos ID 1 a 10 utilizaram 8000 partículas por ciclo com 250 ciclos ativos e os casos de ID 11 a 20 utilizaram 8000 partículas por ciclo com 275 ciclos ativos.

Tabela 7 – Parâmetros das distribuições de k_{eff} resultantes da aplicação do método da amostragem para as distribuições ID 1 à ID 20.

<i>ID</i>	<i>Média</i>	<i>Mediana</i>	<i>Moda</i>	$SD^*_{computacional}$	$SD^*_{propagado}$	SD^*_{total}
1	0,99793	0,99803	0,99836	66,4	79,4	103,5
2	0,99796	0,99787	0,99777	66,4	87,8	110,1
3	0,99809	0,99813	0,99831	66,6	69,5	96,2
4	0,99809	0,99809	0,99825	66,2	74,3	99,5
5	0,99798	0,99809	0,99824	66,5	65,3	93,2
6	0,99796	0,99804	0,99825	66,4	59,7	89,3
7	0,99799	0,99799	0,99784	65,7	85,6	107,9
8	0,99776	0,99768	0,99775	66,5	90,1	112,0
9	0,99798	0,99784	0,99750	66,2	79,0	103,1
10	0,99824	0,99813	0,99783	65,9	77,0	101,4
11	0,99780	0,99773	0,99743	59,1	69,6	91,3
12	0,99785	0,99784	0,99738	57,9	86,2	103,9
13	0,99785	0,99792	0,99789	58,2	55,4	80,3
14	0,99779	0,99764	0,99768	58,4	94,5	111,0
15	0,99791	0,99773	0,99764	58,6	77,7	97,3
16	0,99789	0,99784	0,99795	58,2	83,1	101,5
17	0,99795	0,99798	0,99786	58,6	73,1	93,7
18	0,99790	0,99783	0,99771	59,0	86,6	104,8
19	0,99796	0,99797	0,99805	58,5	70,0	91,2
20	0,99776	0,99774	0,99779	58,5	78,0	97,5

* Valores expressos em *per cent mile* (pcm) ou $\times 10E - 5$.

Tabela 8 – Análise estatística dos conjuntos de distribuições ID 1 à 10 e ID 11 à 20 da Tabela 7.

<i>ID</i>	SD da <i>Média</i> *	SD da <i>Mediana</i> *	SD da <i>Moda</i> *	SD de $SD^*_{propagado}$
1 à 10**	12,3	14,8	30,4	9,8
11 à 20	6,8	11,3	21,7	11,1

* Valores expressos em *per cent mile* (pcm) ou $\times 10E - 5$.

** Não fazem uso do Algoritmo para Seleção de Distribuição.

convergência dos valores da média da distribuição do *output* (\bar{k}_{eff}).

Na Figura 22 observa-se também a linha com o valor de k_{eff} obtido do resultado da execução do caso controle, explicado na seção 3.3. Conforme esperado os valores de k_{eff} obtidos das réplicas utilizando o GB_sample ficam em torno do valor obtido do caso utilizando apenas o MCNPX³, para $\bar{R} = 0,02425$ cm.

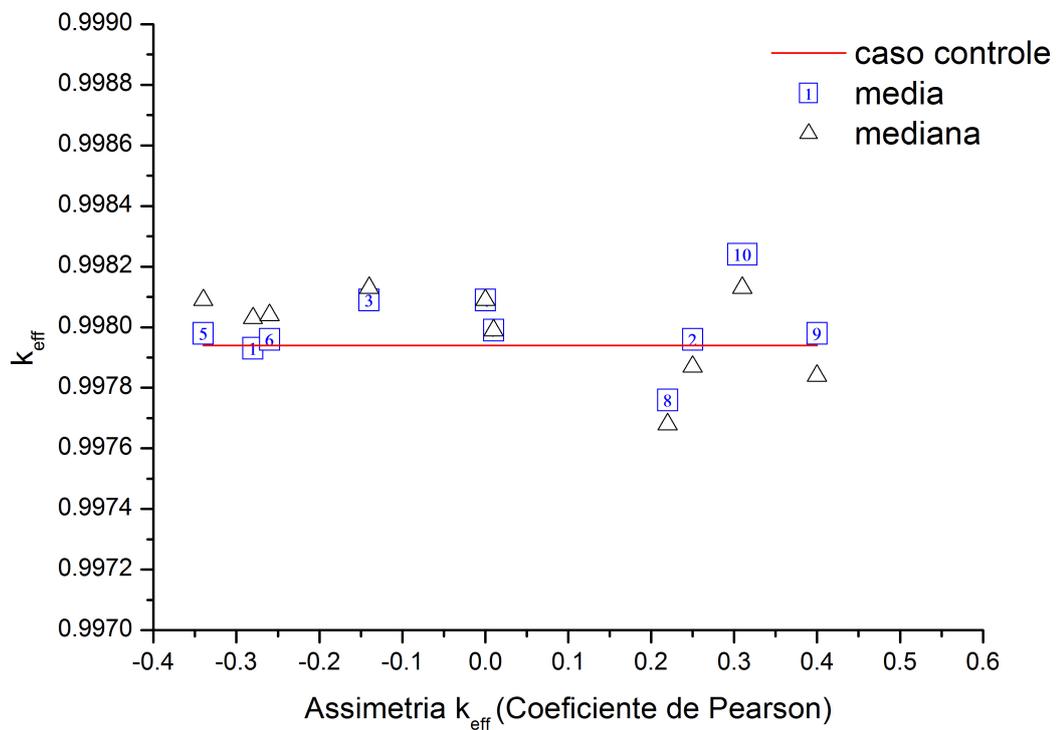
A Figura 23.a apresenta a incerteza da distribuição do raio do veneno queimável em função da *incerteza propagada*, obtida da distribuição de k_{eff} . Existe uma correlação

³ Este caso não utilizou o GB_sample para ser executado, por utilizar apenas o valor médio do raio do veneno queimável, sem incerteza associada e portanto sem necessidade de realização de amostragem.

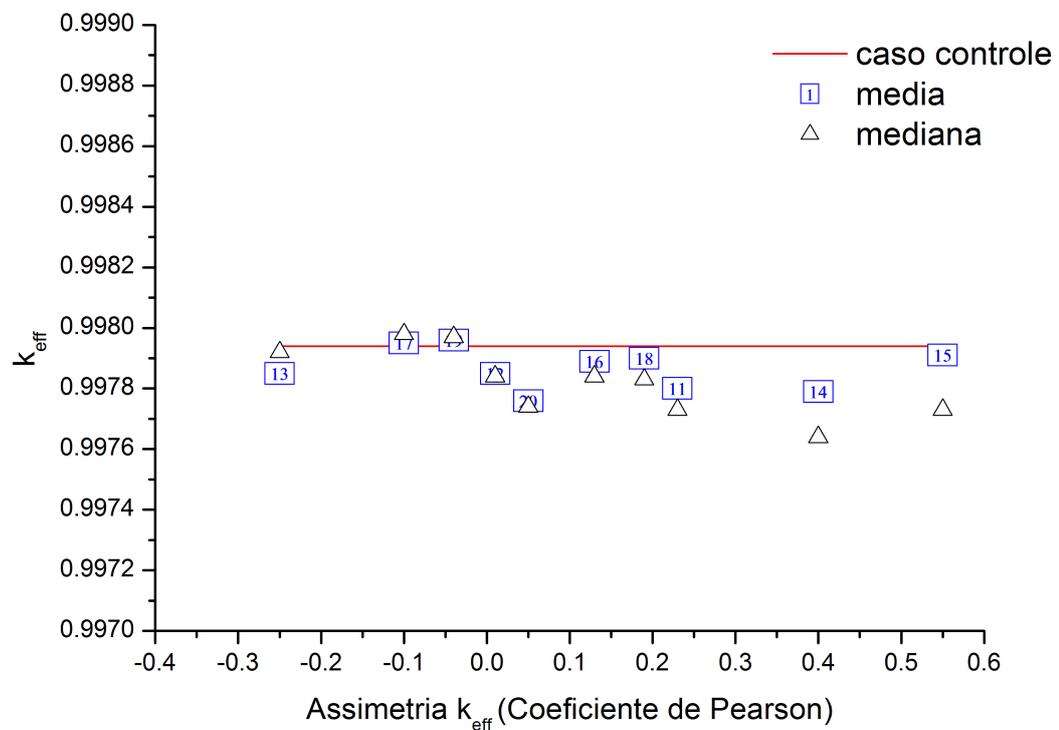
entre os conjuntos de valores das duas variáveis (coeficiente de Pearson de correlação de 0,51) que sugere que se a variação da incerteza do raio do veneno queimável diminuir, a variação da incerteza propagada também diminuiria. No entanto, verifica-se através da Figura 23.b (dados da Tabela 8) que, para um SD_{input} praticamente constante⁴, o desvio padrão da *incerteza propagada* (SD_{keff} ou desvio padrão de $SD_{propagado}^*$) das 10 réplicas não diminui, mas aumenta de 9,8 para 11,1 pcm.

Portanto, para os dois conjuntos de 10 réplicas analisados, verificou-se na distribuição do k_{eff} a convergência do valor da média mas não obteve-se a convergência do valor da incerteza propagada. Portanto, para a propagação da incerteza no raio do veneno queimável ($SD_{propagado} \approx 76 \text{ pcm}$), a amostragem de $n = 93$, e $SD_{Comp.} \approx 60 \text{ pcm}$, não é suficiente para garantir a convergência dos resultados. Torna-se necessário analisar outros fatores envolvidos no processo de amostragem e no processo de execução dos casos. No processo de amostragem, apesar das distribuições ID 11 à 20 terem média e desvio padrão com baixa variação, assegurada pelo Algoritmo de Seleção de Distribuição, o número de componentes da amostragem poderia melhorar ainda mais a representação da distribuição. No processo de execução dos casos, o parâmetro que influencia a distribuição do *output* é a incerteza computacional configurada para os cálculos no MCNPX. Na seção 4.3 estão apresentados testes realizados para verificar o comportamento dos resultados através da análise do tamanho da amostra e do valor da incerteza computacional estabelecidos para o cálculo.

⁴ Variação menor do que 0,1%, conseguido após a utilização do Algoritmo para Seleção de Distribuição

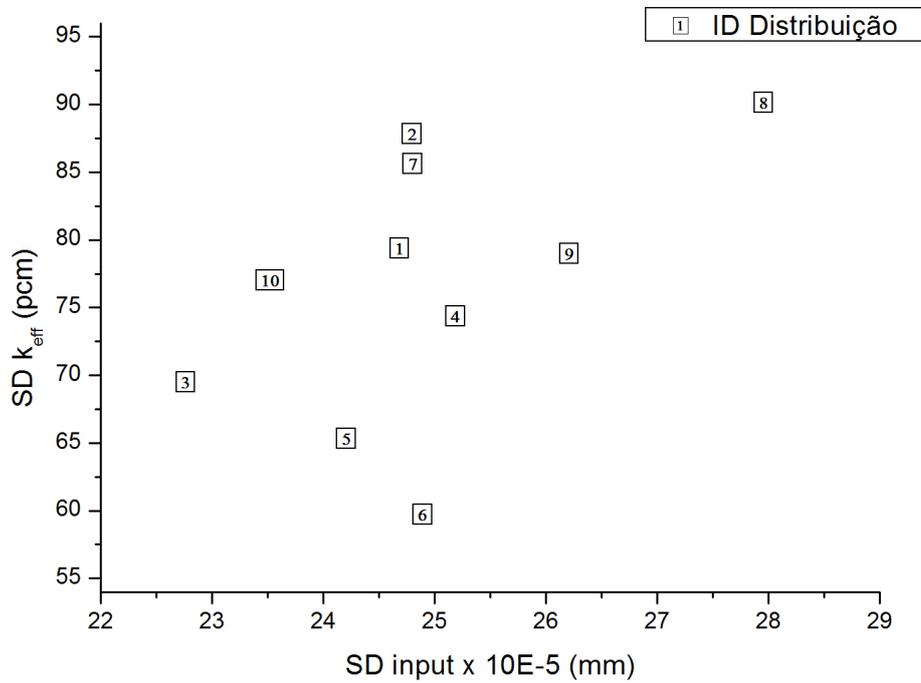


a.

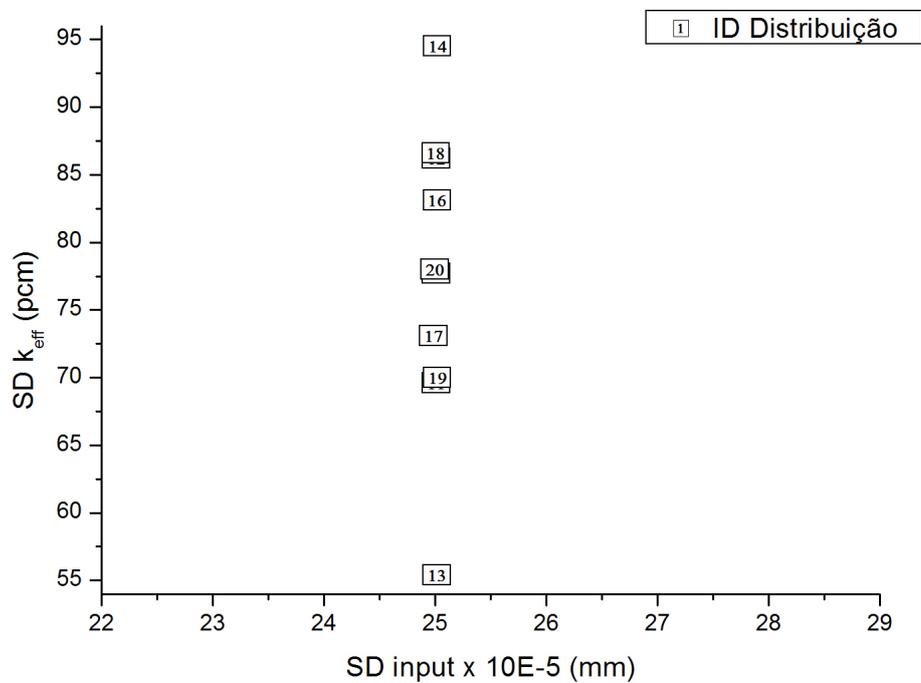


b.

Figura 22 – Parâmetros das distribuições do k_{eff} em função da assimetria da distribuição; a. Distribuições ID 1 à 10; b. Distribuições ID 11 à 20.



a.



b.

Figura 23 – Propagação da incerteza do raio do veneno queimável para o k_{eff} do sistema; a. Distribuições ID 1 à 10; b. Distribuições ID 11 à 20.

4.3 Teste de convergência do método

Nesta seção foram analisados o número de componentes da amostra e a incerteza computacional na propagação da incerteza do raio do veneno queimável. Conforme explicado na seção 3.3 foi executado um conjunto de 10 réplicas que devem apresentar resultados com desvio padrão abaixo de 5 pcm, para passar no critério de convergência. Nas próximas seções, foram executadas as etapas: (i) Parte 1 do GB_sample para amostragem dos parâmetros incertos, (ii) execução dos casos no MCNPX e (iii) execução da Parte 2 do GB_sample.

4.3.1 Influência do número de componentes

Nesta seção acompanhou-se o valor da incerteza propagada para o *output* em função do aumento do número de componentes na amostragem. O GB_sample foi utilizado para propagar a incerteza do raio do veneno queimável, com $\bar{R} = 0,02425 \text{ cm}$ e $\sigma = 0,00025 \text{ cm}$ para 10 réplicas, denominadas distribuições ID 21 à 30, que utilizaram $n = 186$ para o número de componentes da amostragem (comando `@@@P1=normalRange(186,0.02425,0.00025)`). A incerteza computacional configurada foi a mesma incerteza computacional das distribuições ID 11 à 20, ou seja, em torno de 60 pcm⁵.

Os resultados obtidos estão apresentados na Tabela 9 e a análise estatística dos resultados está apresentada na Tabela 10. Observa-se que o desvio padrão do SD propagado para o conjunto de 10 casos é de 7,3 pcm. Este valor representa uma redução de 34% com relação ao valor de 11,1 pcm encontrado para as distribuições que utilizaram $n = 93$ componentes (primeira linha da Tabela 10). Esta redução do desvio padrão no *output* é devido à melhor representatividade das distribuições do *input* quando o n é aumentado.

⁵ Para se obter a incerteza computacional informada na sexta coluna da Tabela 9, os casos ID 21 a 30 utilizaram 8000 partículas por ciclo com 262 ciclos ativos. A pequena diferença no número de ciclos não influencia a análise dos resultados.

Tabela 9 – Parâmetros das distribuições de k_{eff} resultantes da aplicação do método da amostragem para as distribuições ID 21 à ID 30, que utilizaram $n = 186$.

ID	n	Média	$SD_{computacional}^*$	$SD_{propagado}^*$	SD_{total}^*
21	186	0,99787	62,7	74,7	97,5
22	186	0,99787	62,7	74,7	97,5
23	186	0,99797	62,4	63,7	89,2
24	186	0,99794	62,3	86,1	106,2
25	186	0,99794	62,6	71,6	95,1
26	186	0,99792	62,3	72,2	95,4
27	186	0,99797	62,1	79,4	100,8
28	186	0,99783	62,8	88,3	108,4
29	186	0,99797	62,3	74,4	97,0
30	186	0,99800	62,2	80,9	102,1

* Valores expressos em *per cent mile* (pcm) ou $\times 10E - 5$.

Tabela 10 – Análise estatística do conjunto de distribuições ID 21 à 30 da Tabela 9.

ID	n	$SD_{comp.}^*$	$SD da Média^*$	$SD de SD_{propagado}^*$
11 à 20**	93	58	6,8	11,1
21 à 30	186	62	5,5	7,3

* Valores expressos em *per cent mile* (pcm) ou $\times 10E - 5$.

** Valores da Tabela 8 repetidos aqui para efeito de comparação.

4.3.2 Influência da incerteza computacional

Nesta seção as distribuições ID 11 à 20 foram novamente utilizadas para realizar 10 réplicas do experimento de propagar a incerteza do raio do veneno queimável, com $\bar{R} = 0,02425 \text{ cm}$ e $\sigma = 0,00025 \text{ cm}$ conseguida a partir do comando de amostragem `@@@P1=normalRange(93,0.02425,0.00025)`. Apesar de reaproveitar as mesmas distribuições do *input* (ID 11 à 20), a incerteza computacional foi configurada para aproximadamente 28 pcm⁶.

Os parâmetros das distribuições de k_{eff} resultantes, assim como o novo valor de incerteza computacional obtido, estão apresentados na Tabela 11. A Figura 24 reúne os dados da Tabela 11 para ilustrar o comportamento da incerteza propagada em função da variação da incerteza computacional. Percebe-se a redução na faixa de variação da incerteza propagada do conjunto de 10 réplicas executadas com menor incerteza computacional. Segundo a Tabela 12 que contém a análise estatística dos dois conjuntos de réplicas da Tabela 11, o desvio padrão se reduz em 54%, passando de 11,1 para 5,0 pcm. Portanto este caso de distribuição com $n = 93$ componentes e $SD_{computacional} = 28$ pcm ainda não entra na faixa estabelecida como suficientemente pequena para convergência do método, visto que o desvio padrão interno das 10 réplicas deve ser menor que 5 pcm.

⁶ Foi necessário utilizar 32000 partículas por ciclo com 275 ciclos ativos do código MCNPX.

Tabela 11 – Parâmetros das distribuições de k_{eff} resultantes da aplicação do método da amostragem para as distribuições ID 1 à ID 20 com incerteza computacional de aproximadamente 28 pcm.

<i>ID</i>	<i>n</i>	<i>Média</i>	SD_{comp}^*	$SD_{propagado}^*$	SD_{total}^*
11**	93	0,99780	59,1	69,6	91,3
12**	93	0,99785	57,9	86,2	103,9
13**	93	0,99785	58,2	55,4	80,3
14**	93	0,99779	58,4	94,5	111,0
15**	93	0,99791	58,6	77,7	97,3
16**	93	0,99789	58,2	83,1	101,5
17**	93	0,99795	58,6	73,1	93,7
18**	93	0,99790	59,0	86,6	104,8
19**	93	0,99796	58,5	70,0	91,2
20**	93	0,99776	58,5	78,0	97,5
11	93	0,99787	28,5	72,1	77,5
12	93	0,99786	28,4	72,4	77,8
13	93	0,99786	28,6	64,6	70,6
14	93	0,99787	28,5	74,4	79,7
15	93	0,99788	28,5	80,6	85,5
16	93	0,99787	28,5	75,9	81,0
17	93	0,99784	28,5	76,9	82,0
18	93	0,99787	28,4	75,4	80,6
19	93	0,99792	28,4	83,2	87,9
20	93	0,99790	28,4	76,6	81,7

* Valores expressos em *per cent mille* (pcm) ou $\times 10E - 5$.

** Valores da Tabela 7 repetidos aqui para efeito de comparação.

Tabela 12 – Análise estatística do conjunto de réplicas da Tabela 11.

<i>ID</i>	<i>n</i>	SD_{comp}^*	<i>SD da Média*</i>	<i>SD de $SD_{propagado}^*$</i>
11 à 20	93	58	6,8	11,1
11 à 20	93	28	2,1	5,0

* Valores expressos em *per cent mille* (pcm) ou $\times 10E - 5$.

Foram acompanhados também, os componentes *incerteza propagada* e *incerteza computacional*, que constituem a *incerteza total* da distribuição (equações 3.3 e 3.4). Se a distribuição do parâmetro incerto no *input* (raio do veneno queimável neste caso) estiver sendo bem representada pela amostragem, a incerteza propagada é a mesma, independente da incerteza computacional configurada para o processo. A Tabela 13 apresenta os resultados obtidos, que estão, por sua vez, ilustrados na Figura 25. É possível observar que o valor da *incerteza propagada* se mantém praticamente constante à medida que é diminuído o valor da *incerteza computacional*. Esta verificação mostra que a distribuição do raio do veneno queimável está bem representada com os 93 componentes

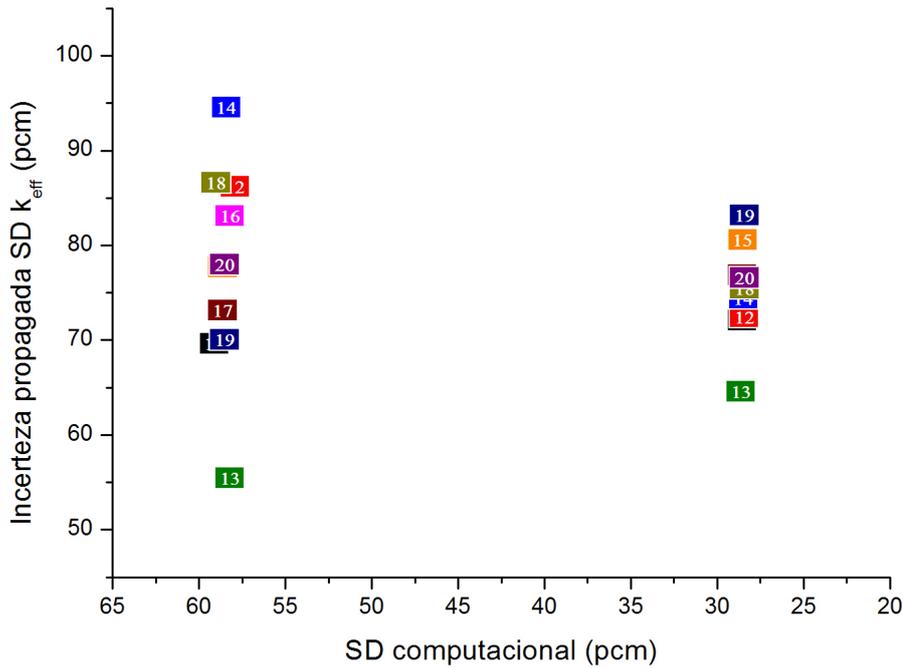


Figura 24 – Incerteza propagada em função da incerteza computacional configurada.

da amostra ID 20 e confirma experimentalmente a teoria empregada para decomposição de variâncias, explicada na seção 3.2.

Tabela 13 – Parâmetros das distribuições resultantes (k_{eff}) da aplicação do método da amostragem para a distribuição ID 20 com incerteza computacional variando de 14,4 até 81,2 pcm.

<i>ID</i>	<i>n</i>	<i>Média</i>	SD_{comp}^*	$SD_{propagado}^*$	SD_{total}^*	<i># Histórias</i>
20	93	0,99792	14,4	74,9	76,3	128000 × 275
20	93	0,99784	20,2	74,6	77,3	64000 × 275
20	93	0,99790	28,4	76,6	81,7	32000 × 275
20	93	0,99794	40,7	70,6	81,4	16000 × 275
20	93	0,99775	58,5	78,0	97,5	8000 × 275
20	93	0,99767	81,2	86,4	118,6	4000 × 275

* Valores expressos em *per cent mile* (pcm) ou $\times 10E - 5$.

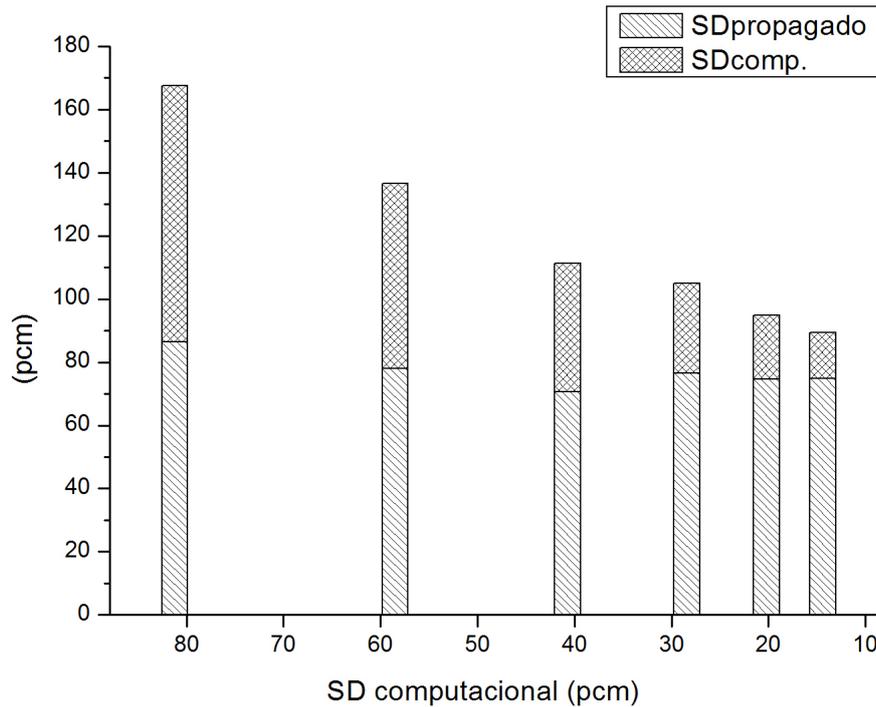


Figura 25 – Incerteza propagada em função da incerteza computacional para o raio do veneno queimável representado pela amostra de distribuição ID 20.

4.3.3 Número de componentes x incerteza computacional

Conforme verificado nas seções 4.3.1 e 4.3.2, tanto o número de componentes que representam a distribuição de uma variável incerta quanto a incerteza computacional configurada para a execução do MCNPX influenciam a variância da incerteza propagada. Foi feita portanto uma comparação entre três conjuntos de casos que necessitam o mesmo tempo computacional para execução. O primeiro conjunto de casos, distribuições ID 11 à 20 da Tabela 11 com $SD_{comp.}$ de aproximadamente 28 pcm (reproduzido também na Tabela 14) foi executado com o dobro de histórias no MCNPX do que o segundo conjunto de casos. O segundo conjunto de casos foi configurado com o dobro de componentes na amostragem do que o primeiro conjunto (distribuições ID 31 à 40 da Tabela 14), ou seja, $n = 186$. O terceiro conjunto de casos, ID 41 à 50, apresentou quatro vezes mais amostras que o primeiro conjunto de casos e um quarto das histórias seguidas no MCNPX.

A Figura 26 ilustra o SD de k_{eff} ($SD_{propagado}$) das 30 amostras (distribuições ID 11 à 20, ID 31 à 40 e ID 41 à 50) em função do SD computacional ($SD_{comp.}$), onde é possível verificar a faixa de variação do $SD_{propagado}$ de um conjunto de réplicas para o outro. A informação da quantidade de histórias seguidas pelo MCNPX para conseguir a incerteza computacional de cada caso está apresentada na legenda da figura.

A Tabela 15 apresenta a análise estatística dos três conjuntos de casos analisados.

Tabela 14 – Parâmetros das distribuições (k_{eff}) resultantes da aplicação do método da amostragem para as distribuições ID 11 à 20, ID 31 à ID 40 e ID 41 à ID 50.

<i>ID</i>	<i>n</i>	<i>Média</i>	<i>SD</i> * _{comp.}	<i>SD</i> * _{propagado}	<i>SD</i> * _{total}	# <i>Histórias</i>
11**	93	0,99787	28,5	72,1	77,5	32000 × 275
12**	93	0,99787	28,4	72,4	77,8	32000 × 275
13**	93	0,99786	28,6	64,6	70,6	32000 × 275
14**	93	0,99787	28,5	74,4	79,7	32000 × 275
15**	93	0,99788	28,5	80,6	85,5	32000 × 275
16**	93	0,99787	28,5	75,9	81,0	32000 × 275
17**	93	0,99784	28,5	76,9	82,0	32000 × 275
18**	93	0,99787	28,4	75,4	80,6	32000 × 275
19**	93	0,99792	28,4	83,2	87,9	32000 × 275
20**	93	0,99790	28,4	76,6	81,7	32000 × 275
31	186	0,99789	40,8	80,9	90,6	16000 × 275
32	186	0,99793	41,2	76,0	86,4	16000 × 275
33	186	0,99788	41,0	71,6	82,5	16000 × 275
34	186	0,99793	40,9	72,7	83,4	16000 × 275
35	186	0,99792	40,8	78,2	88,2	16000 × 275
36	186	0,99798	40,7	76,2	86,4	16000 × 275
37	186	0,99791	40,9	75,3	85,7	16000 × 275
38	186	0,99794	40,8	76,1	86,4	16000 × 275
39	186	0,99790	40,8	74,3	84,8	16000 × 275
40	186	0,99785	40,8	78,1	88,1	16000 × 275
41	372	0,99795	58,8	77,1	97,0	8000 × 275
42	372	0,99779	58,4	77,6	97,1	8000 × 275
43	372	0,99792	58,7	80,7	99,8	8000 × 275
44	372	0,99790	58,9	75,8	96,0	8000 × 275
45	372	0,99785	58,6	72,7	93,4	8000 × 275
46	372	0,99781	58,9	74,4	94,9	8000 × 275
47	372	0,99787	58,5	85,4	103,5	8000 × 275
48	372	0,99782	58,7	76,4	96,4	8000 × 275
49	372	0,99784	58,6	77,3	97,0	8000 × 275
50	372	0,99792	58,9	76,6	96,6	8000 × 275

* Valores expressos em *per cent mile* (pcm) ou $\times 10E - 5$.

** Valores da Tabela 11 repetidos aqui para efeito de comparação.

O caso com $n = 186$ apresentou a menor faixa de variação (já ilustrado na Fig.26) e o menor valor de desvio padrão da incerteza propagada, de 2,7 pcm. Verificou-se, portanto, que para um dado tempo computacional fixo, é preferível se utilizar $n = 186$ para o número de componentes na amostragem de parâmetros com incerteza associada ao invés de se investir na redução da incerteza computacional ou se aumentar ainda mais o tamanho da amostragem. Esta verificação de otimização do tamanho da amostragem foi observada portanto no caso com $n=186$, em que a incerteza computacional é de aproximadamente 54% da incerteza propagada ($\frac{\sigma_{comp.}^2}{\sigma_{input}^2} \approx 0,54$).

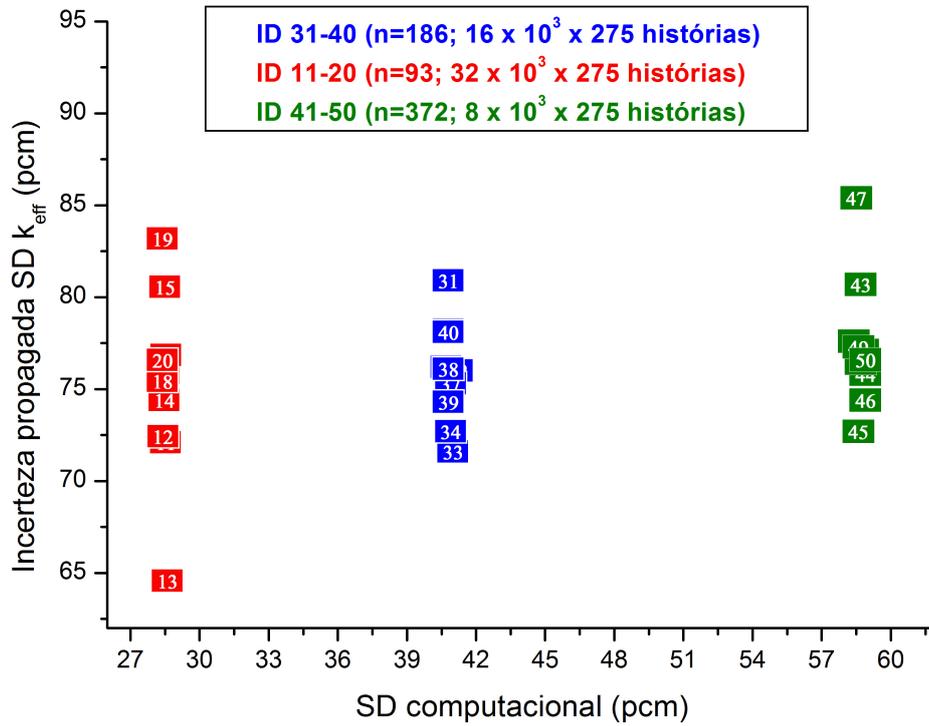


Figura 26 – Comparação da incerteza propagada entre os conjuntos ID 11 à 20 ($SD_{computacional} \approx 28$ pcm), ID 31 à 40 ($SD_{computacional} \approx 41$ pcm) e ID 41 à 50 ($SD_{computacional} \approx 59$ pcm).

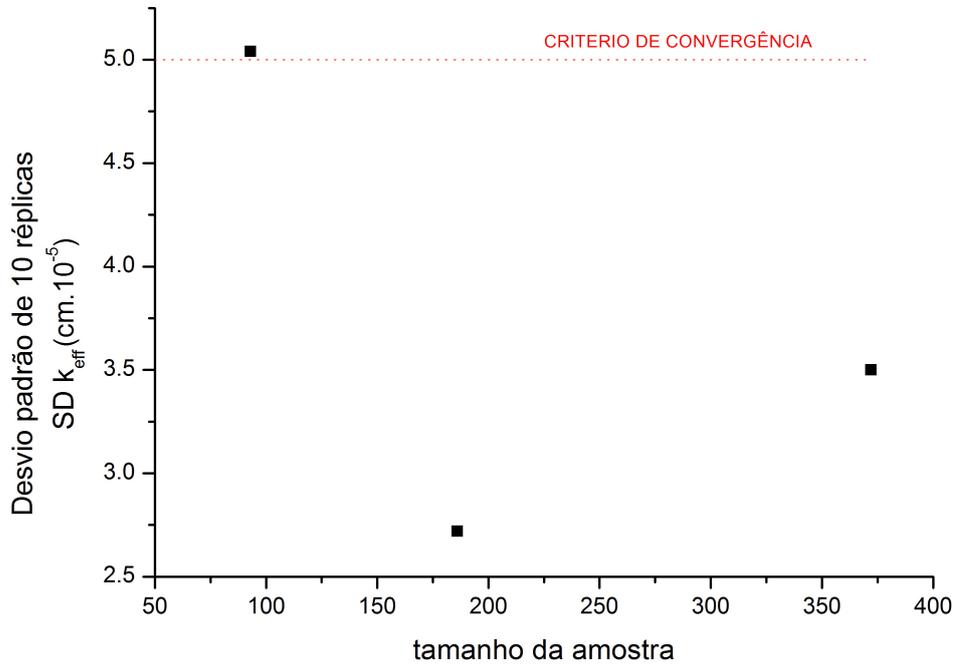
Tabela 15 – Análise estatística do conjunto de réplicas ID 11 à 20, ID 31 à 40 e ID 41 à 50.

ID	n	\overline{SD}_{comp}^*	$\overline{SD}_{propagado}^*$	SD de $SD_{propagado}^*$	Faixa de Variação*	SD de \bar{k}_{eff}^*
11-20	93	28	75,2	5,0	19	2,1
31-40	186	41	75,9	2,7	9	3,7
41-50	372	59	77,4	3,5	13	5,4

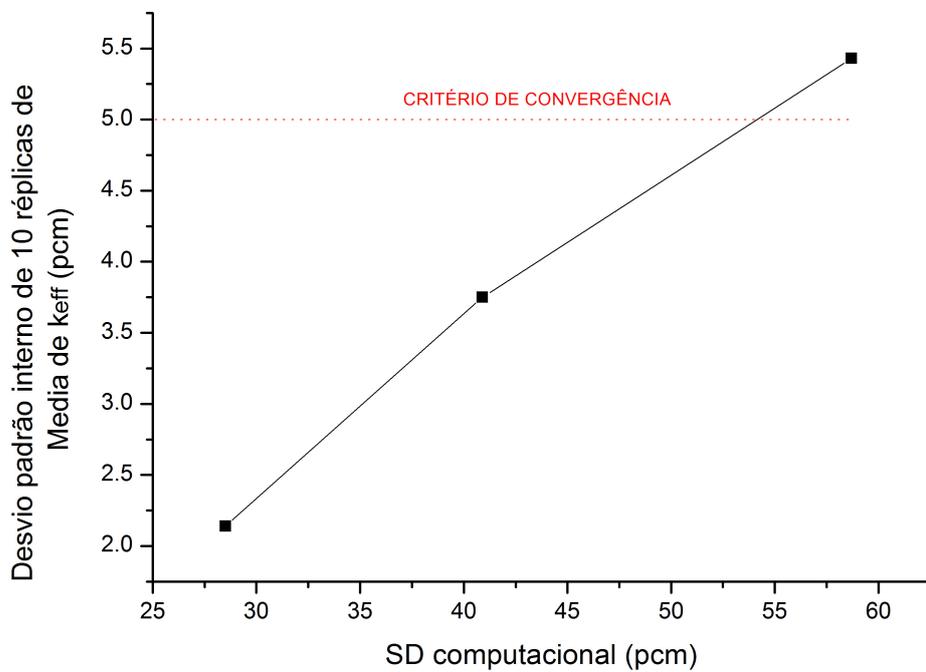
* Valores expressos em *per cent mile* (pcm) ou $\times 10E - 5$.

Com relação à convergência do método, os valores da Tabela 15 estão plotados na Figura 27 juntamente com o valor estabelecido como critério de convergência para o método, que é de desvio padrão interno da média de k_{eff} e de $SD_{propagado}$ serem menores que 5 pcm (seção 3.3). Conforme pode ser visto, apenas o conjunto dos casos ID 31 à 40 passa no critério de convergência.

As distribuições ID 31 à 40 e ID 41 à 50, assim como as distribuições dos respectivos k_{eff} estão apresentadas no Anexo B.



a.



b.

Figura 27 – Equilíbrio entre tamanho da amostra e incerteza computacional; a. Efeito na incerteza propagada (dispersão no desvio padrão de k_{eff} para 10 réplicas); b. Efeito em k_{eff} (dispersão na média de k_{eff} para 10 réplicas).

4.4 Inserção de muitos parâmetros no mesmo *input*

Nesta seção o método da amostragem foi aplicado através do GB_sample para propagar as incertezas previamente apresentadas na Tabela 3. Foi executada uma amostragem para cada parâmetro em separado e uma amostragem incluindo todos os parâmetros no mesmo *input* do MCNPX. A Tabela 16 apresenta os resultados dos casos considerados. A segunda coluna informa o número de componentes empregado na amostragem. A quarta e quinta coluna informam a incerteza computacional configurada para o cálculo e o efeito causado no k_{eff} , respectivamente.

Tabela 16 – Combinação das incertezas propagadas devido aos parâmetros incertos.

<i>Caso</i>	<i>n</i>	<i>Parâmetro</i>	SD_{comp}^*	SD_{prop}^*	\bar{k}_{eff}	$\frac{SD_{comp.}}{SD_{prop.}}$	# <i>Histórias</i>
A	186	Espessura placa	40,7	69,5	0,99779	0,58	20800 × 220
B	93+	Densidade do Al	21,6	16,8	0,99785	0,77	32000 × 495
C	186	Raio do veneno	41,2	76,0	0,99793	0,54	16000 × 275
D	186	Todos mesmo <i>input</i>	40,7	101,5	0,99777	0,40	20800 × 220
SD_{Calc}^{**}			104,4				

* Valores expressos em *per cent mile* (pcm) ou $\times 10E - 5$.

** Ver Equação 4.1.

+ Neste caso foi usado n=93 para amostragem pois a baixa incerteza propagada do parâmetro exige que o método da amostragem empregue baixa incerteza computacional que, por sua vez, inviabiliza que o cálculo seja realizado em tempo aceitável no *cluster* de computadores utilizado neste trabalho.

A Equação 4.1 faz a raiz quadrada da soma das variâncias dos $SD_{propagado}$ dos casos A, B e C. Este resultado ($SD_{Calc.}$) foi comparado com o $SD_{propagado}$ no caso D, onde se tem vários parâmetros incertos amostrados no mesmo *input*.

$$SD_{Calc.} = \sqrt{(SD_A)^2 + (SD_B)^2 + (SD_C)^2} = \sqrt{(69,5)^2 + (16,8)^2 + (76,0)^2} = 104,4 \quad (4.1)$$

Como pode ser observado, $SD_{Calculado}$ ficou ligeiramente acima do valor obtido pelo caso D. Este resultado é esperado visto que no caso D os efeitos da variação dos parâmetros podem anular entre si, por estarem no mesmo *input*, o que não acontece quando todos os casos são executados separadamente e a variância somada no final (Eq.4.1) As distribuições do k_{eff} para os casos A, B, C e D estão apresentados na Figura 28.

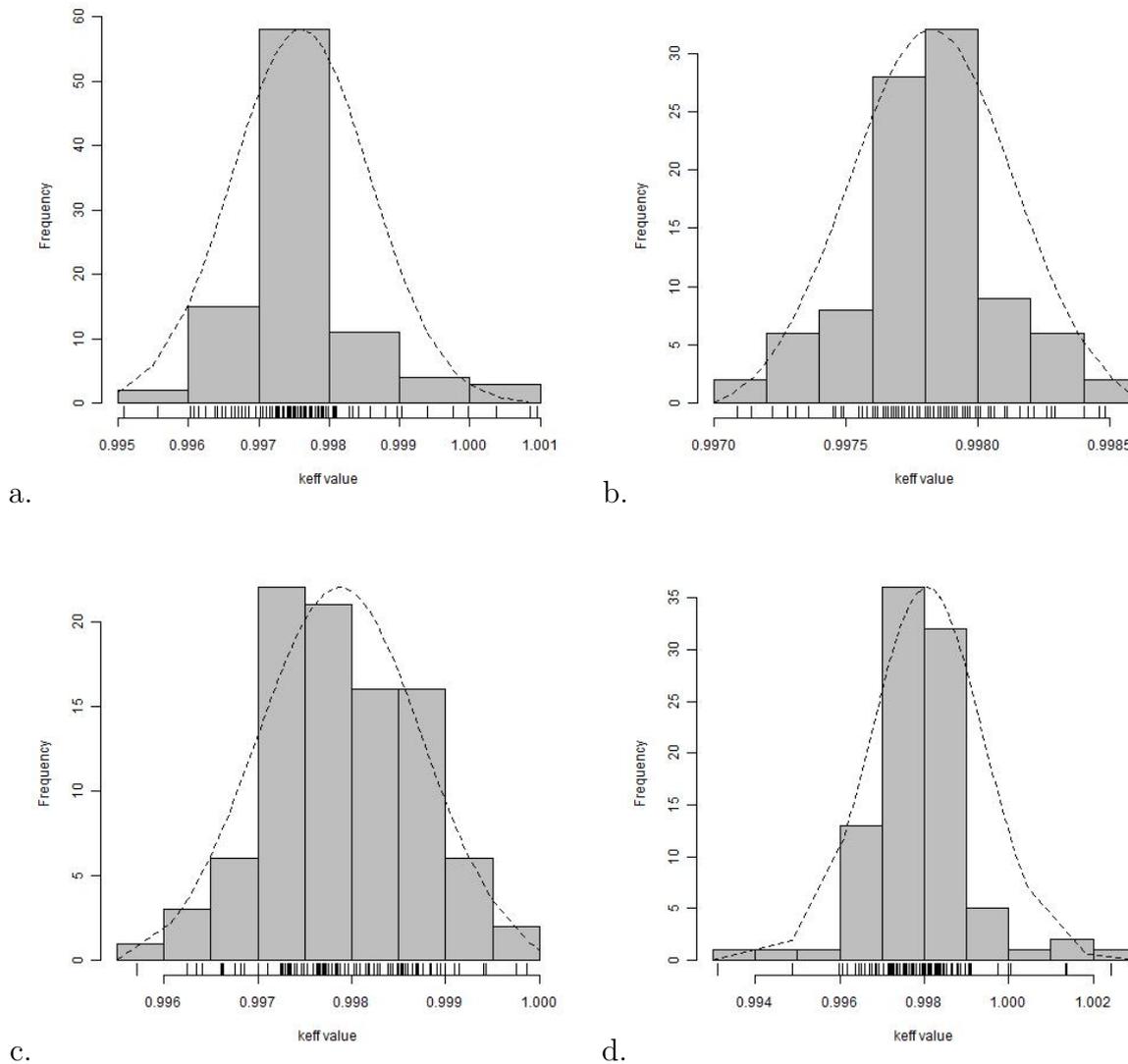


Figura 28 – Distribuições do k_{eff} ; a. Caso A; b. Caso B; c. Caso C; d. Caso D.

4.5 Comparação com método conservador

O valor da incerteza dos parâmetros físicos incertos propagadas para o k_{eff} através do método da amostragem (por meio do GB_sample) e calculado pelo método conservador (seção 3.1) estão apresentados na Tabela 17. A quinta coluna apresenta os percentuais dados pela razão entre a incerteza propagada pelo método da amostragem sobre o valor da incerteza calculada pelo método conservador. Conforme esperado, o efeito causado no k_{eff} devido ao método da amostragem foi menor do que o efeito causado pelo método conservador. A incerteza calculada pelo método conservador representa a diferença entre os casos em que o parâmetro incerto assume o valor mínimo e o valor máximo da faixa de variação de $\pm 1SD$ (Equação 3.2). Já a incerteza propagada pelo método da amostragem representa 1 SD da distribuição do k_{eff} , ou seja, um valor realístico.

Tabela 17 – Efeito da propagação da incerteza no k_{eff} em função do método utilizado.

<i>Caso</i>	<i>Parâmetro incerto</i>	$SD_{propagado}$ (<i>Conservador*</i>)	$SD_{propagado}$ (<i>GB_sample*</i>)	$\frac{GB_sample}{Conservador}$
A	Espessura placa	76,0	69,5	91,5%
B	Densidade do Al	20,0	16,8	84,1%
C	Raio do veneno	91,2	76,0	84,0%
D	A + B + C	120,4	101,5	84,3%

* Efeito causado em k_{eff} (pcm) ou $\times 10E - 5$.

5 Conclusões

Com o objetivo de aprimorar as ferramentas para estudos de quantificação de incerteza em sistemas nucleares foi implementado um programa intitulado GB_sample que possibilita a aplicação do método da amostragem para propagação de incerteza em parâmetros físicos de sistemas que podem ser representados por modelos no código MCNPX.

A eficiência da amostragem aleatória, movida pelo gerador de números aleatórios do programa R, foi avaliada utilizando amostras de $n = 93$ componentes. A fim de aumentar a eficiência da amostragem foi implementado e incorporado ao GB_sample o Algoritmo para Seleção de Distribuição (seção 3.1.2). A faixa de variação da média, do desvio padrão e do coeficiente de assimetria de dez réplicas analisadas foram reduzidos de $[-0,4\%, 0,2\%]$, $[-8\%, 14\%]$ e $[-0,35, 0,2]$ para $[-0,1\%, 0,1\%]$, $[-0,01\%, 0,01\%]$ e $[-0,01, 0,01]$ respectivamente.

O método da amostragem aleatória foi então aplicado para propagar incertezas em parâmetros físicos no modelo do reator de pesquisa RA-6. A convergência do método foi acompanhada através da análise da média (\bar{k}_{eff}) e da incerteza propagada para o coeficiente de multiplicação efetivo do sistema (σ_{input}^2). O critério de convergência foi estabelecido para desvio padrão de 10 réplicas, sendo cada réplica composta por uma amostra de n componentes, resultar menor que 5 pcm.

Para a propagação da incerteza no raio do veneno queimável do combustível considerado, que reflete uma incerteza de aproximadamente 76 pcm no k_{eff} do sistema, verificou-se que uma amostragem de $n = 93$ e incerteza computacional de aproximadamente 60 pcm não é suficiente para garantir a convergência dos resultados (SD de $\bar{k}_{eff} = 6,8$ pcm e SD de $\sigma_{input}^2 = 11,1$ pcm). Conforme visto na seção 4.3.2, para incerteza computacional do caso anterior configurada para aproximadamente 28 pcm a variância de \bar{k}_{eff} se reduz para 2,1 pcm mas o SD de σ_{input}^2 ainda não fica abaixo de 5 pcm.

Estudou-se o caso de se fixar o tempo computacional, variando-se a incerteza computacional e o número de componentes da amostragem, a fim de verificar uma possível otimização na metodologia. Conforme apresentado na seção 4.3.3, observou-se que a convergência foi conseguida para o caso com 186 componentes, apontando a configuração ótima do número de componentes para o caso (10 réplicas analisadas).

Em outras palavras, foi possível utilizar o método da amostragem aleatória para propagar incertezas para $n = 186$ componentes (utilizando o Algoritmo de Seleção de Distribuição) e a incerteza computacional configurada para aproximadamente metade do valor da incerteza propagada ($\frac{\sigma_{comp.}^2}{\sigma_{input}^2} \approx 0,54$).

O potencial do método da amostragem quando muitos parâmetros incertos são investigados simultaneamente no mesmo *input* foi verificado na seção 4.4. Devido a anulações entre efeitos propagados por diferentes parâmetros incertos, a incerteza propagada total encontrada foi menor do que a soma das variâncias de cada parâmetro quando elas são propagadas em casos separados.

Conclui-se também que, se o método da amostragem for utilizado para estimar o efeito em k_{eff} devido a incerteza dos componentes físicos do reator em questão, haverá redução com relação ao valor estimado pelo método conservador (neste trabalho a redução variou de 8,5% a 16% conforme apresentado na Tabela 17).

Trabalhos futuros

O estudo do efeito das incertezas de parâmetros físicos pode comprovar que o efeito de algumas tolerâncias de fabricação são desprezíveis. Um possível estudo seria utilizar o *GB_sample* para identificar quais tolerâncias são exageradamente conservadoras e propor flexibilização das mesmas, o que poderia resultar na redução de custo de fabricação de elementos combustíveis ou outros componentes do reator.

Com relação à caracterização das incertezas (item 2.3.1), que é uma etapa marcada pela dificuldade em se conseguir as distribuições das incertezas nos parâmetros, seria possível adaptar o programa para receber inúmeras medidas experimentais como *input* no método baseado em amostragem, em vez de solicitar ao programa fazer uma amostragem. Em alguns casos como no próprio diâmetro do veneno queimável (item 1.2.3 de (WYSS; JORGENSEN, 2010)) a informação da incerteza (média e desvio padrão) foi caracterizada por meio de uma amostra de 90 medições experimentais.

O método da amostragem para propagação de incertezas também pode ser usado com outras técnicas que não a amostragem aleatória ou o Algoritmo para Seleção de Distribuição. O método *LHS* requer menos simulações do que a amostragem aleatória, quando o número de parâmetros é grande. A implementação da amostragem por *LHS* no *GB_sample* seria direta, só dependendo de utilizar novas funções do R. Portanto a investigação dessa técnica é um caminho para aumento da eficiência do método de propagação de incerteza por amostragem.

Referências

- American National Standards Institute. *ANSI/ANS-8.1: Criticality Safety in Operations with Fissionable Materials Outside Reactors*. [S.l.], 1983. Citado na página 27.
- AO, Q. Uncertainty analysis in monte carlo criticality computations. *Nuclear Engineering and Design*, v. 241, p. 4697–4703, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 36.
- ASME. *V&V 20-2009 Standard for Verification and validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer. Effect of Input Parameter Uncertainty on Simulation Uncertainty*. [S.l.]: The American Society of Mechanical Engineers, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 55.
- BERZ, M. et al. *Computational differentiation: techniques, applications, and tools*. Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1996. Citado na página 27.
- BOWKER, A. H.; LIEBERMAN, G. J. *Engineering Statistics*. 2. ed. New Jersey: Prentice Hall, INC., 1972. Citado na página 31.
- BOX, G. E. P.; HUNTER, J. S.; HUNTER, W. G. *Statistics for Experiments: Design, Innovation and Discovery*. 2. ed. New Jersey: John Willey & Sons, Inc., 2005. Citado na página 31.
- BRATTON, R. N.; AVRAMOVA, M.; IVANOV, K. Oecd/nea benchmark for uncertainty analysis in modeling (uam) for lwrs - summary and discussion of neutronics cases (phase i). *Nuclear Engineering and Technology*, v. 46, n. 3, p. 313 – 342, 2014. ISSN 1738-5733. Citado na página 27.
- BREEDING, R. J. et al. Summary description of the methods used in the probabilistic risk assessments for nureg-1150. *Nuclear Engineering and Design*, v. 1, n. 135, p. 1–27, 1992. Citado na página 40.
- BROWN, F. B.; SWEEZY, J. E.; HAYES, R. *Monte Carlo Parameter Studies and Uncertainty Analyses with MCNP5*. [S.l.], 2004. 10 p. Citado na página 43.
- BUSS, O.; HOEFER, A.; NEUBER, J. C. Nuduna - nuclear data uncertainty analysis. In: *International Conference on Nuclear Criticality, Edinburgh, Scotland*. [S.l.: s.n.], 2011. p. 1–13. Citado na página 44.
- CHIBA, G. et al. Estimation of neutronics parameter sensitivity to nuclear data in random sampling-based uncertainty quantification calculations. *Annals of Nuclear Energy*, v. 75, n. 0, p. 395 – 403, 2015. ISSN 0306-4549. Citado na página 27.
- CHRISTIE, M. A. et al. Error analysis and simulations of complex phenomena. *Los Alamos Science*, n. 29, p. 6–25, 2005. Citado na página 26.
- Cross Section Evaluation Working Group. *ENDF-6 Formats Manual*. 2009. Disponível em: <<https://www.oecd-nea.org/dbdata/data/manual-endf/endl102.pdf>>. Citado na página 23.

- DUDERSTADT, J. J.; HAMILTON, L. J. *Nuclear Reactor analysis*. [S.l.]: John Wiley & Sons, Inc, 1976. Citado na página 40.
- ELDRED, M. S. et al. *DAKOTA, A Multilevel Parallel Object-Oriented Framework for Design Optimization, Parameter Estimation, Uncertainty Quantification, and Sensitivity Analysis*. [S.l.], 2007. Citado na página 44.
- EVANS, M.; SWARTZ, T. *Approximating integrals via Monte Carlo and deterministic methods*. Oxford, NY: Oxford University Press, 2000. Citado na página 38.
- GANDINI, A. *Uncertainty analysis and experimental data transpositions methods based on perturbation theory*. Boca Raton, FL: CRC Press, 1988. Citado na página 26.
- GARCÍA-HERRANZ, N. et al. Propagation of statistical and nuclear data uncertainties in monte carlo burn-up calculations. *Annals of Nuclear Energy*, n. 35, p. 714–730, 2008. Citado na página 27.
- GLAESER, H. Grs method for uncertainty and sensitivity evaluation of code results and applications. *Nuclear Engineering and Design*, n. 798901, p. 7, 2008. Citado 3 vezes nas páginas 39, 43 e 54.
- GLAESER, H. *BEMUSE Phase VI Report. Status report on the area, classification of the methods, conclusions and recommendations*. [S.l.], 2011. Citado 3 vezes nas páginas 27, 38 e 39.
- GUBA, A.; MAKAI, M.; PÁL, L. Statistical aspects of best estimate method—i. *Reliability Engineering and System Safety*, v. 80, p. 217–232, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 43.
- HELTON, J.; DAVIS, F. *Document 0001: Illustration of Sampling-Based Methods for Uncertainty and Sensitivity Analysis*. Tempe, AZ 85287-1804 USA, 2001. Citado na página 36.
- HELTON, J.; MARIETTA, M. G. Special issue: the 1996 performance assessment for the waste isolation pilot plant. *Reliability Engineering and System Safety*, v. 1-3, n. 69, p. 1–451, 2000. Citado na página 40.
- HELTON, J. C.; DAVIS, F. *Expert opinion in risk analysis: the NUREG1150 methodology*. [S.l.], 2000. Citado na página 37.
- HELTON, J. C.; DAVIS, F. J. Latin hypercube sampling and the propagation of uncertainty in analyses of complex systems. *Reliability Engineering and System Safety*, v. 81, n. (1), p. 23–69, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 37.
- HELTON, J. C.; JOHNSON, J. D.; OBERKAMPF, W. L. An exploration of alternative approaches to the representation of uncertainty in model predictions. *Reliability Engineering and System Safety*, v. 85, n. (1-3), p. 39–71, 2004. Citado na página 37.
- HORA, S. C.; IMAN, R. Expert opinion in risk analysis: the nureg 1150 methodology. *Nuclear Science and Engineering*, v. 4, n. 102, p. 23–31, 1989. Citado na página 37.
- IMAN, R. L.; CONOVER, W. J. A distributionfree approach to inducing rank correlation among input variables. *Commun Stat: Simul Comput B*, v. 3, n. 11, p. 311–334, 1982. Citado na página 38.

- IMAN, R. L.; HELTON, J. C. An investigation of uncertainty and sensitivity analysis techniques for computer models. *Risk Analysis*, v. 8, n. 1, p. 71–90, 2006. Citado na página 27.
- IVANOV, K.; AVRAMOVA, M. *BENCHMARK FOR UNCERTAINTY ANALYSIS IN MODELING (UAM) FOR DESIGN, OPERATION AND SAFETY ANALYSIS OF LWRs*. [S.l.], 2007. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 38.
- IVANOVA, T. Uncertainty assessment for criticality safety studies: an overview of technique. In: *OECD-NEA NCS Workshop on Future Criticality Safety Research Needs*. Pocatello, Idaho: [s.n.], 2009. Citado na página 26.
- JANSSEN, H. Monte-carlo based uncertainty analysis: Sampling efficiency and sampling convergence. *Reliability Engineering and System Safety*, v. 109, p. 123–132, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 55.
- LANL. *MCNPX USER'S MANUAL version 2.7.0*. Los Alamos, New Mexico, 2011. Citado 4 vezes nas páginas 28, 41, 42 e 55.
- LEPPÄNEN, J. *PSG2/Serpent A Continuous-Energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code*. [S.l.], 2008. Citado na página 44.
- LI, G.; ROSENTHAL, C.; RABITZ, H. High-dimensional model representations. *The Journal of Physical Chemistry*, v. 105, n. 33, p. 7765–7777, 2001. Citado na página 27.
- MA, J. Z.; ACKERMAN, E. Parameter sensitivity of a model of viral epidemics simulated with monte carlo techniques. ii. durations and peaks. *Int J Biomed Comput*, v. 3-4, n. 32, p. 255–268, 1993. Citado na página 40.
- MACFARLANE, R. E.; MUIR, D. W. *The NJOY Nuclear Data Processing System Version 91*. [S.l.], 1994. Citado na página 44.
- MARCK, S. C. van der; ROCHMAN, D. A. Nuclear data uncertainties for local power densities in the martin-hoogenboom benchmark. In: *Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2013*. [S.l.: s.n.], 2013. Citado na página 59.
- MATSUMOTO, M.; NISHIMURA, T. Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, v. 8, p. 3–33, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 47 e 61.
- M.C.THORNE; WILLIAMS, M. M. R. A review of expert judgement techniques with reference to nuclear safety. *Progr Nucl Safety*, v. 27, n. (2-3), p. 83–254, 1992. Citado na página 37.
- Minitab Inc. *Getting Started with Minitab 17*. 2013. Disponível em: <<http://www.minitab.com/pt-br/>>. Citado na página 44.
- MPI Forum. *MPI: A Message-Passing Interface Standard Version 3.0*. 2012. Disponível em: <<http://www.mpi-forum.org/docs/mpi-3.0/mpi30-report.pdf>>. Citado na página 58.

MYERS, R. H. et al. Response surface methodology: a retrospective and literature review. *Journal of Quality Technology*, v. 1, n. 36, p. 53–77, 2004. Citado na página 27.

NEA International Working Party on Evaluation Cooperation and Cross Section Evaluation Working Group. *Evaluated Nuclear Data File*. 2014. Disponível em: <<https://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm>>. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 42.

NISSLEY, M. et al. *Realistic Large-Break LOCA Evaluation Methodology Using the Automated Statistical Treatment of Uncertainty Method*. [S.l.], 2005. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 44.

Oracle. *Oracle Crystal Ball*. 2014. Disponível em: <<http://www.oracle.com/br/products/applications/crystalball/overview/index.html>>. Citado na página 44.

PALISADE. *Risk6*. 2014. Disponível em: <<http://www.palisade-br.com/risk/>>. Citado na página 44.

Python Software Foundation. *Python Language Reference, version 2.7*. 2010. Disponível em: <<http://www.python.org>>. Citado na página 47.

R Development Core Team. *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. Vienna, Austria, 2010. ISBN 3-900051-07-0. Disponível em: <<http://www.R-project.org/>>. Citado 3 vezes nas páginas 17, 44 e 47.

ROACHE, P. J. *Fundamentals of Verification and Validation*. Socorro, New Mexico 87801 USA: Hermosa publishers, 2009. Citado na página 25.

ROCHMAN, D. et al. Nuclear data uncertainty propagation: Perturbation vs. monte carlo. *Annals of Nuclear Energy*, v. 38, p. 942–952, 2011. Citado na página 27.

ROCHMAN, D. et al. Efficient use of monte carlo: uncertainty propagation. *Nuclear Science and Engineering*, v. 177, n. 3, p. 337–349, 2014. Citado na página 55.

SAS Institute Inc. *JMP*. 2014. Disponível em: <<http://www.jmp.com/>>. Citado na página 44.

SHAHABUDDIN, P. Importance sampling for the simulation of highly reliable markovian systems. *Manage Sci*, v. 3, n. 40, p. 333–352, 1994. Citado na página 38.

SHAPIRO, S. S.; WILK, M. B. An analysis of variance test for normality. *Biometrika*, v. 52, p. 591, 1965. Citado na página 42.

STOLL, U. *Anwendung realistischer Methoden fur Storfallanalysen*. [S.l.], 2003. Citado na página 44.

STRYDOM, G. Uncertainty and sensitivity analyses of a pebble bed htgr loss of cooling event. *Science and Technology of Nuclear Installations*, n. 426356, p. 16, 2013. Citado na página 39.

The MathWorks Inc. *Matlab Statistics Toolbox Users Guide*. 2014. Disponível em: <http://www.mathworks.com/help/pdf_doc/stats/stats.pdf>. Citado na página 44.

VASILIEV, T. Z. A.; FERROUKHI, H.; PAUTZ, A. Nuss: A tool for propagating multigroup nuclear data covariances in pointwise ace-formatted nuclear data using stochastic sampling method. *Annals of Nuclear Energy*, v. 75, p. 713–722, 2015. Citado na página 44.

WILKS, S. S. Determination of sample sizes for setting tolerance limits. *Annals of Mathematical Statistics*, v. 12, n. 1, p. 91–96, 1941. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 39.

WILLIAMS, M. et al. A statistical sampling method for uncertainty analysis with scale and xsusa. *Nuclear Technology*, v. 183, n. 3, p. 436–445, 2013. Citado na página 43.

WOLFRAM. *MATHEMATICA Sistema definitivo para computação técnica moderna*. 2014. Disponível em: <<http://www.wolfram.com/mathematica/>>. Citado na página 44.

WYSS, G. D.; JORGENSEN, K. H. *A User's Guide to LHS: Sandia's Latin Hypercube Sampling Software*. PO Box 5800 Albuquerque, NM 87185-0747, 1998. Citado na página 37.

WYSS, G. D.; JORGENSEN, K. H. *RA-6 REACTOR: WATER REFLECTED, WATER MODERATED U(19.77)₃Si₂ – Al FUEL PLATES*. [S.l.], 2010. Citado 7 vezes nas páginas 13, 15, 27, 45, 46, 47 e 86.

ZWERMANN, W. et al. Nuclear data uncertainty and sensitivity analysis with xsusa for fuel assembly depletion calculations. *Nuclear Engineering and Technology*, v. 46, n. 3, p. 343 – 352, 2014. ISSN 1738-5733. Citado na página 27.

Trabalhos publicados pelo autor, relacionados com a tese

- CAMPOLINA, D. A. M.; PEREIRA, C.; VELOSO, M. A. F. *Comparison Between Conservative Perturbation and Sampling Based Methods for Propagation of Non-Neutronic Uncertainties. INAC 2013 - International Nuclear Atlantic Conference. Recife, PE, Brazil, November 24-29, 2013.*
- CAMPOLINA, D. A. M.; PEREIRA, C.; VELOSO, M. A. F. *Sampling Based Method for Propagation of Uncertainty in Fissionable Material System Parameters for Burnup Analysis. PHYTRA 3 – The Third International Conference on Physics and Technology of Reactors and Applications. Tetouan, Morocco, May 12-14, 2014, on CD-ROM, GMTR, Rabat, Morocco, 2014.*
- Registro do programa de computador "GB_sample". Instituto Nacional da Propriedade Industrial, protocolo BR 5120140007065, 03/07/2014.
- CAMPOLINA, D. A. M.; LIMA, P. R. I.; PEREIRA, C.; VELOSO, M. A. F. *An Algorithm to Improve Sampling Efficiency for Uncertainty Propagation Using Sampling Based Method. INAC 2015 - International Nuclear Atlantic Conference. São Paulo, SP, Brazil, October 4-9, 2015.*
- CAMPOLINA, D. A. M.; PEREIRA, C.; VELOSO, M. A. F. *Sample Size Optimization for Propagation of Manufacturing Uncertainties in Criticality Calculation Using Random Sampling Method. Trabalho aceito para publicação no International Journal of Engineering Innovations and Research, ISSN : 2277 – 5668 em 16/09/2015.*

Apêndices

APÊNDICE A – Instalação do R, Python e RPY

1. Instalar Python (foi utilizada a versão 2.7) através da execução do arquivo *python-2.7.msi* no modo administrador, disponível no endereço eletrônico <https://www.python.org/download/releases/2.7/>;
2. Instalar Pythonwin através da execução do arquivo *pywin32-217.win32-py2.7.exe* disponível no endereço eletrônico http://pt.sourceforge.jp/projects/sfnet_pywin32/releases/;
3. Instalar o *plug in* de conexão do R com o Python através da execução do arquivo *rpy-1.0.3.win32-py2.7-R.2.12.1.exe* disponível no endereço eletrônico <http://sourceforge.net/projects/rpy/files/rpy/1.0.3/>;
4. Instalar o programa R (foi utilizada a versão 2.12) através da execução do arquivo *R-2.12.1-win.exe* disponível no endereço eletrônico <http://cran.r-project.org/bin/windows/base/old/2.12.1/>;
5. Iniciar os *scripts* na linguagem Python importando o pacote RPY através do comando *from rpy import **

APÊNDICE B – Compilação do MCNPX

2.7 para processamento paralelo

1. STATUS INICIAL DO SISTEMA

```

ifort
/home/mcnp/intel/composer_xe_2013.2.146/bin/intel64/ifort
f90
/usr/bin/f90
lrwxrwxrwx. 1 root root 57 Jan 7 18:38 /usr/bin/f90 ->
/home/mcnp/intel/composer_xe_2013.2.146/bin/intel64/ifort
f77
/usr/bin/f77
lrwxrwxrwx. 1 root root 57 Jan 7 18:45 /usr/bin/f77 ->
/home/mcnp/intel/composer_xe_2013.2.146/bin/intel64/ifort
mpif90
/home/mcnp/OpenMPI-1.4.5/bin/mpif90
mpicc
/home/mcnp/OpenMPI-1.4.5/bin/mpicc
cc
/usr/lib64/ccache/cc
mcnpcaprara_lx $ GFORTRAN
bash: GFORTRAN: command not found
OBSERVE QUE NÃO TEM GFORTRAN, APENAS IFORT.(em /usr/bin mv gfortran gfortran_desabilitado)

```

2. CONSTRUA gcc4.4 NO FEDORA (BASEADO NAS ORIENTAÇÕES DE

```

http://forums.fedoraforum.org/archive/index.php/t-284687.html E
http://www.rad.upenn.edu/sbia/software/gondola/install/gcc.html)
ERRO*****
./libs/libgcj.so: undefined reference to `__cxa_call_unexpected'
collect2: ld returned 1 exit status
*****
find . -name prims* -print
rm prims.cc
cd libjava
cp /home/mcnp/ZIPS/prims.cc .
/tmp/gcc-4.4.6/configure --prefix=/home/mcnp/gcc-4.4
make
make install

```

3. INSTALE IFORT NO FEDORA

```

http://software.intel.com/en-us/articles/using-intelr-compilers-for-linux-under-fedora
yum install java
yum install libstdc++.i686
SE NAO TIVER GCC, COMPILE ELE E INSTALE OS PREREQUISITOS (FEDORA)
gmp-devel, mpfr-devel and libmpc-devel glibc-devel.i686 ia32-libs

```

4. INSTALE OPENMPI1.4.5

```

/home/mcnp/ZIPS/openmpi-1.4.5/configure --prefix=/home/mcnp/OpenMPI-1.4.5 F77=f77 FC=f90
*****f90: error #10236: File not found: 'libmpi_f90.so.0'*****
se o f90 for ifort, da erro pois ifort nao tem biblioteca do mpi

```

5. FORMATO DO ARQUIVO .bashRC
 (nao precisa setar MPI_ROOT e MPI_NAME pois --with-MPILIB="está especificado")
 DATAPATH=/home/mcnp/MCNP_DATA
 export DATAPATH
 PATH=/home/mcnp/gcc-4.4/bin
 PATH=\$PATH:/home/mcnp/mcnp/bin
 PATH=\$PATH:/home/mcnp/gcc-4.4/lib
 PATH=\$PATH:/home/mcnp/gcc-4.4/lib64
 PATH=\$PATH:/home/mcnp/gcc-4.4/include
 PATH=\$PATH:/home/mcnp/OpenMPI-1.4.5/bin
 PATH=\$PATH:/home/mcnp/OpenMPI-1.4.5/include
 PATH=\$PATH:/home/mcnp/OpenMPI-1.4.5/lib
 PATH=\$PATH:/usr/lib64/ccache:/usr/local/bin:/usr/bin:/bin:/usr/games:/usr/local/sbin:/usr/sbin:/sbin
 source /home/mcnp/intel/bin/compilervars.sh intel64
 LD_LIBRARY_PATH=\$LD_LIBRARY_PATH:/home/mcnp/OpenMPI-1.4.5/lib
 INCLUDE=-I\$INCLUDE
 export PATH
6. RODAR O SCRIPT "CONFIGURE"
 /tmp/v270/configure --with-FC=mpif90 --with-CC=mpicc --prefix=/home/mcnp/mcnp
 --x-libraries=/usr/lib64/X11 --x-include=/usr/include/X11 --with-MPILIB='-L/home/mcnp/OpenMPI-1.4.5/lib -lmpi' --with-MPIINC=/home/mcnp/OpenMPI-1.4.5/include
7. RETIRAR ASPAS(") do config.cache DEPOIS RODAR O CONFIGURE DE NOVO
8. MAKE ALL
9. MAKE TESTS
 *****erro no make tests*****
 /bin/cp: cannot stat '/tmp/v270/src/Test/Test.intel.linux.mpic90.mpicc/outp??: No such file or directory

 SOLUÇÃO DESTE PROBLEMA:
 cp -a /tmp/v270/src/Test/Test.intel.linux.ifort.gcc /tmp/v270/src/Test/Test.intel.linux.mpic90.mpicc
10. MAKE INSTALL
 *****erro*****
 make[1]: execvp: /tmp/v270/src/./config/install-sh: Permission denied

 solucao: cd /tmp/v270/src/./config/
 chmod u+x install-sh
11. INSTALAR NFS
 fedoraproject.org/wiki/Administration_Guide_Draft/NFS?rd=Docs/Drafts/AGBeta/NFS
 su -c 'yum install -y nfs-utils system-config-nfs'
 su -c 'systemctl restart nfs-server.service'
 su -c 'mount host_lx.usuarios.cdt.br:/home/mcnp /home/mcnp'
 setsebool -P use_nfs_home_dirs 1
12. INSTALAR O TRUST (CONFORME ORIENTAÇÕES DE http://web.mit.edu/rhel-doc/3/rhel-sag-pt_br-3/s1-openssh-client-config.html)
 ssh-keygen -t rsa
 chmod 755 /.ssh
 chmod 644 /.ssh/authorized_keys

```
chmod 755 /home/mcnp
```

13. CRIAR NOVOS USUÁRIOS EM TODOS OS HOSTS DO CLUSTER

```
useradd -d /home/mcnp -m mcnp  
passwd xxxx
```


Anexos

ANEXO A – Exemplo de arquivo de entrada para o *GB_sample*

```

RA6INPUT
c @@@ P1=normalRange(93,0.02425,0.00025)
c @@@ A1=normalRange(93,0.060075,6.69585E-4)
c @@@ Y1=normalRange(93,0.02533,0.00017)
c @@@ Y2=normalRange(93,0.0745,0.0005)
c CELULAS
c UNIVERSE 1: INTERNAL FUEL PLATE WITH BURNABLE POISONS FOR NFE
c cell card 14 23 36 67
1 1 5.0917E-02 -1 imp:n= 1 u= 1 vol=18.9414 $ MEAT
C $ CLADDING ALTERADO
12 2 A1 1 -2 imp:n= 1 u= 1
13 6 4.6340E-02 -3 imp:n= 1 u= 1 $ CADMIUM WIRE
14 6 4.6340E-02 -4 imp:n= 1 u= 1 $ CADMIUM WIRE
15 2 A1 2 7 9 18 -11 imp:n= 1 u= 1
16 2 A1 2 8 10 19 -12 imp:n= 1 u= 1
17 5 1.0001E-01 2 11 12 #20 #21 #3010 #3011 imp:n= 1 u= 1 $ WATER
18 5 1.0001E-01 3 -7 imp:n= 1 u= 1 $ SLOT FOR CADMIUM WIRE
19 5 1.0001E-01 4 -8 imp:n= 1 u= 1 $ SLOT FOR CADMIUM WIRE
20 5 1.0001E-01 -9 imp:n= 1 u= 1 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING SLOT
21 5 1.0001E-01 -10 imp:n= 1 u= 1 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING SLO
3010 5 1.0001E-01 -18 imp:n= 1 u= 1 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING S
3011 5 1.0001E-01 -19 imp:n= 1 u= 1 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING S
c UNIVERSE 2: INTERNAL FUEL PLATE WITHOUT POISONS FOR NFE
22 1 5.0917E-02 -1 imp:n= 1 u= 2 vol=18.9414$ MEAT
23 2 A1 1 -2 imp:n= 1 u= 2
24 2 A1 2 9 -11 18 imp:n= 1 u= 2
25 2 A1 2 10 -12 19 imp:n= 1 u= 2
26 5 1.0001E-01 2 11 12 #27 #28 #3012 #3013 imp:n= 1 u= 2 $ WATER
27 5 1.0001E-01 -9 imp:n= 1 u= 2 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING SLOT
28 5 1.0001E-01 -10 imp:n= 1 u= 2 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING SLO
3012 5 1.0001E-01 -18 imp:n= 1 u= 2 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING S
3013 5 1.0001E-01 -19 imp:n= 1 u= 2 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING S
c UNIVERSE 3: FUEL PLATE WITH POISONS FOR CFE
31 1 5.0917E-02 -1 imp:n= 1 u= 3 vol=18.9414 $ MEAT
32 2 A1 1 -2 imp:n= 1 u= 3
33 6 4.6340E-02 -3 imp:n= 1 u= 3 $ CADMIUM FOIL
34 6 4.6340E-02 -4 imp:n= 1 u= 3 $ CADMIUM FOIL
35 2 A1 2 25 23 -21 29 imp:n= 1 u= 3
36 2 A1 2 26 24 -22 30 imp:n= 1 u= 3
37 5 1.0001E-01 2 21 22 #40 #41 #3014 #3015 imp:n= 1 u= 3 $ WATER
38 5 1.0001E-01 3 -25 imp:n= 1 u= 3 $ SLOT FOR CADMIUM FOIL
39 5 1.0001E-01 4 -26 imp:n= 1 u= 3 $ SLOT FOR CADMIUM FOIL
40 5 1.0001E-01 -23 imp:n= 1 u= 3 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING SLO
41 5 1.0001E-01 -24 imp:n= 1 u= 3 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING SLO
3014 5 1.0001E-01 -29 imp:n= 1 u= 3 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING S
3015 5 1.0001E-01 -30 imp:n= 1 u= 3 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING S
c UNIVERSE 4: FUEL PLATE WITHOUT POISONS FOR CFE
42 1 5.0917E-02 -1 imp:n= 1 u= 4 vol=18.9414 $ MEAT
43 2 A1 1 -2 imp:n= 1 u= 4

```

```

44 2 A1 2 -21 23 29 imp:n= 1 u= 4
45 2 A1 2 -22 24 30 imp:n= 1 u= 4
46 5 1.0001E-01 2 21 22 #47 #48 imp:n= 1 u= 4 $ WATER
47 5 1.0001E-01 -23 imp:n= 1 u= 4 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING SLO
48 5 1.0001E-01 -24 imp:n= 1 u= 4 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING SLO
3016 5 1.0001E-01 -29 imp:n= 1 u= 4 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING S
3017 5 1.0001E-01 -30 imp:n= 1 u= 4 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING S
c UNIVERSE 5: FUEL PLATE ARRANGEMENT FOR NFE
51 5 1.0001E-01 31 -32 35 -36 33 -34 imp:n= 1 lat=1 u=5 fill= 0:0 -10:10 0:0
5 9 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 2 9 5 $ ARRANGEMENT
52 5 1.0001E-01 #51 imp:n= 1 u=5 $ OUT
c UNIVERSE 6: FUEL PLATE ARRANGEMENT FOR CFE
61 5 1.0001E-01 31 -32 37 -38 33 -39 imp:n= 1 lat=1 u= 6 fill= 0:0 -7:6 0:0
3 4 3 4 3 4 3 3 4 3 4 3 4 3 4 3 $ ARRANGEMENT
62 5 1.0001E-01 -31 32 -37 38 -33 39 imp:n= 1 u= 6 $ OUT
c UNIVERSE 7: INTERNAL CONTROL GUIDE PLATE
71 2 A1 -5 imp:n= 1 u= 7
72 2 A1 5 -21 23 29 imp:n= 1 u= 7
73 2 A1 5 -22 24 30 imp:n= 1 u= 7
74 5 1.0001E-01 5 21 22 #75 #76 #77 #78 imp:n= 1 u= 7 $ WATER
75 5 1.0001E-01 -23 imp:n= 1 u= 7 $ WATER IN THE GUIDE PLATE HOLDING
76 5 1.0001E-01 -24 imp:n= 1 u= 7 $ WATER IN THE GUIDE PLATE HOLDING
77 5 1.0001E-01 -29 imp:n= 1 u= 7 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING
78 5 1.0001E-01 -30 imp:n= 1 u= 7 $ WATER IN THE FUEL PLATE HOLDING
c UNIVERSE 77: EXTERNAL CONTROL GUIDE PLATE
771 2 A1 -6 imp:n= 1 u= 77
772 2 A1 6 -21 27 imp:n= 1 u= 77
773 2 A1 6 -22 28 imp:n= 1 u= 77
774 5 1.0001E-01 6 21 22 #778 #779 imp:n= 1 u= 77 $ WATER
778 5 1.0001E-01 -27 imp:n= 1 u= 77 $ WATER IN THE GUIDE PLATE HOLDING
779 5 1.0001E-01 -28 imp:n= 1 u= 77 $ WATER IN THE GUIDE PLATE HOLDING
c UNIVERSE 8: ABSORBENT PLATE
81 4 5.6146E-02 (-41:-44:-45) 46 imp:n= 1 u= 8 $ AG-IN-CD PLATE
82 0 -43 #81 imp:n= 1 u= 8 $ VOID
83 3 8.7488E-02 43 -42 imp:n= 1 u= 8 $ CLADDING
84 5 1.0001E-01 42 imp:n= 1 u= 8 $ WATER
c UNIVERSE 9: EXTERNAL FUEL PLATE FOR NFE
91 1 5.0917E-02 -1 imp:n= 1 u= 9 vol=18.9414 $ MEAT
92 2 A1 1 -13 imp:n= 1 u= 9 $ CLADDING
93 6 4.6340E-02 -3 imp:n= 1 u= 9 $ CADMIUM FOIL
94 6 4.6340E-02 -4 imp:n= 1 u= 9 $ CADMIUM FOIL
95 2 A1 13 14 16 -11 imp:n= 1 u= 9
96 2 A1 13 15 17 -12 imp:n= 1 u= 9
97 5 1.0001E-01 13 11 12 #3000 #3001 imp:n= 1 u= 9 $ WATER
98 5 1.0001E-01 3 -14 imp:n= 1 u= 9 $ SLOT FOR CADMIUM FOIL
99 5 1.0001E-01 4 -15 imp:n= 1 u= 9 $ SLOT FOR CADMIUM FOIL
3000 5 1.0001E-01 -16 imp:n= 1 u= 9 $ WATER IN FUEL PLATE HOLDI
3001 5 1.0001E-01 -17 imp:n= 1 u= 9 $ WATER IN FUEL PLATE HOLDI
c UNIVERSE 10: CONTROL FUEL ELEMENT NUMBER 1, WITH CONTROL ELEME
101 5 1.0001E-01 -51 fill= 6 ( 0 -0.205 0 ) imp:n= 1 u= 10 $ FU
102 5 1.0001E-01 -52 fill= 7 ( 0 -3.075 0 ) imp:n= 1 u= 10 $ IN
103 2 A1 -53 imp:n= 1 u= 10
104 2 A1 -54 imp:n= 1 u= 10
105 5 1.0001E-01 -55 fill= 8 ( 0 -3.445 63.25 ) imp:n= 1 u= 10 $ ABSORB
106 5 1.0001E-01 -56 fill= 77 ( 0 -3.815 0 ) imp:n= 1 u= 10 $ EXTERNAL
107 5 1.0001E-01 -57 fill= 7 ( 0 3.075 0 ) imp:n= 1 u= 10 $ INTERNAL GU
108 2 A1 -58 imp:n= 1 u= 10

```

109 2 **A1** -59 imp:n= 1 u= 10
110 5 1.0001E-01 -60 fill= 8 (0 3.445 63.25) imp:n= 1 u= 10 \$ ABSORBE
111 5 1.0001E-01 -61 fill= 77 (0 3.815 0) imp:n= 1 u= 10 \$ EXTERNAL G
112 5 1.0001E-01 -62 #101 #102 #103 #104 #105 #106 #107 #108 #109 #110 #111
#508 #509 imp:n= 1 u= 10 \$ OUT
508 5 1.0001E-01 -200 imp:n=1 u= 10 \$ WATER INSIDE THE NOZZLE
509 2 **A1** 200 -201 imp:n=1 u= 10
c UNIVERSE 11: CONTROL FUEL ELEMENT NUMBER 2, WITH CE
113 5 1.0001E-01 -51 fill= 6 (0 -0.205 0) imp:n= 1 u= 11 \$ FUEL ARRAG
114 5 1.0001E-01 -52 fill= 7 (0 -3.075 0) imp:n= 1 u= 11 \$ INTERNAL G
115 2 **A1** -53 imp:n= 1 u= 11
116 2 **A1** -54 imp:n= 1 u= 11
117 5 1.0001E-01 -55 fill= 8 (0 -3.445 63.25) imp:n= 1 u= 11 \$ ABSORB
118 5 1.0001E-01 -56 fill= 77 (0 -3.815 0) imp:n= 1 u= 11 \$ EXTERNAL
119 5 1.0001E-01 -57 fill= 7 (0 3.075 0) imp:n= 1 u= 11 \$ INTERNAL GU
120 2 **A1** -58 imp:n= 1 u= 11
121 2 **A1** -59 imp:n= 1 u= 11
122 5 1.0001E-01 -60 fill= 8 (0 3.445 63.25) imp:n= 1 u= 11 \$ ABSORBE
123 5 1.0001E-01 -61 fill= 77 (0 3.815 0) imp:n= 1 u= 11 \$ EXTERNAL G
124 5 1.0001E-01 -62 #113 #114 #115 #116 #117 #118 #119 #120 #121 #122 #123
#506 #507 imp:n= 1 u= 11 \$ OUT
506 5 1.0001E-01 -200 imp:n=1 u= 11 \$ WATER INSIDE THE NOZZLE
507 2 **A1** 200 -201 imp:n=1 u= 11
c UNIVERSE 12: CONTROL FUEL ELEMENT NUMBER 3, WITH CE
125 5 1.0001E-01 -51 fill= 6 (0 -0.205 0) imp:n= 1 u= 12 \$ FUEL ARRAG
126 5 1.0001E-01 -52 fill= 7 (0 -3.075 0) imp:n= 1 u= 12 \$ INTERNAL G
127 2 **A1** -53 imp:n= 1 u= 12
128 2 **A1** -54 imp:n= 1 u= 12
129 5 1.0001E-01 -55 fill= 8 (0 -3.445 63.25) imp:n= 1 u= 12 \$ ABSORB
130 5 1.0001E-01 -56 fill= 77 (0 -3.815 0) imp:n= 1 u= 12 \$ EXTERNAL
131 5 1.0001E-01 -57 fill= 7 (0 3.075 0) imp:n= 1 u= 12 \$ INTERNAL GU
132 2 **A1** -58 imp:n= 1 u= 12
133 2 **A1** -59 imp:n= 1 u= 12
134 5 1.0001E-01 -60 fill= 8 (0 3.445 63.25) imp:n= 1 u= 12 \$ ABSORBE
135 5 1.0001E-01 -61 fill= 77 (0 3.815 0) imp:n= 1 u= 12 \$ EXTERNAL G
136 5 1.0001E-01 -62 #125 #126 #127 #128 #129 #130 #131 #132 #133 #134 #135
#504 #505 imp:n= 1 u= 12 \$ OUT
504 5 1.0001E-01 -200 imp:n=1 u=12 \$ WATER INSIDE NOZZLE
505 2 **A1** 200 -201 imp:n=1 u=12
c UNIVERSE 13: CONTROL FUEL ELEMENT NUMBER 4, WITH CONTROL ELEMENT
138 5 1.0001E-01 -51 fill= 6 (0 -0.205 0) imp:n= 1 u= 13 \$ FUEL ARRAG
139 5 1.0001E-01 -52 fill= 7 (0 -3.075 0) imp:n= 1 u= 13 \$ INTERNAL G
140 2 **A1** -53 imp:n= 1 u= 13
141 2 **A1** -54 imp:n= 1 u= 13
142 5 1.0001E-01 -55 fill= 8 (0 -3.445 37.735) imp:n= 1 u= 13 \$ ABSORB
143 5 1.0001E-01 -56 fill= 77 (0 -3.815 0) imp:n= 1 u= 13 \$ EXTERNAL
144 5 1.0001E-01 -57 fill= 7 (0 3.075 0) imp:n= 1 u= 13 \$ INTERNAL GU
145 2 **A1** -58 imp:n= 1 u= 13
146 2 **A1** -59 imp:n= 1 u= 13
147 5 1.0001E-01 -60 fill= 8 (0 3.445 37.735) imp:n= 1 u= 13 \$ ABSORBE
148 5 1.0001E-01 -61 fill= 77 (0 3.815 0) imp:n= 1 u= 13 \$ EXTERNAL G
149 5 1.0001E-01 -62 #138 #139 #140 #141 #142 #143 #144 #145 #146 #147 #148
#502 #503 imp:n= 1 u= 13 \$ OUT
502 5 1.0001E-01 -200 imp:n=1 u=13 \$ WATER INSIDE THE NOZZLE
503 2 **A1** 200 -201 imp:n=1 u=13
c UNIVERSE 15: NORMAL FUEL ELEMENT
151 5 1.0001E-01 -71 fill= 5 imp:n=1 u=15 \$ FUEL ARRAGEMENT

```

152 5 1.0001E-01 71 #153 #154 #155 #156 #157 #158 #159 #500 #501 imp:n=1 u=15
153 2 A1 -72 imp:n=1 u=15
154 2 A1 -73 imp:n=1 u=15
155 2 A1 -74 imp:n=1 u=15
156 2 A1 -75 imp:n=1 u=15
157 2 A1 110 -111 114 -115 34 -39 imp:n=1 u=15
158 2 A1 112 -113 114 -115 34 -39 imp:n=1 u=15
159 2 A1 -116 111 -112 imp:n=1 u=15 $ CROSSBAR
500 5 1.0001E-01 -200 imp:n=1 u=15 $ WATER INSIDE THE NOZZLE
501 2 A1 200 -201 imp:n=1 u=15
c UNIVERSE 16: FUEL ELEMENT ARRAGEMENT
161 5 1.0001E-01 -81 imp:n= 1 lat= 1 u= 16 fill=-3:4 -4:4 0:0
16 16 16 16 16 16 16 16 $ B
16 16 16 15 15 15 16 16 $ C
16 16 15 11 15 10 15 16 $ D
16 16 15 15 15 15 16 $ E
16 16 15 12 15 13 15 16 $ F
16 16 16 15 15 16 16 16 $ G
16 16 16 16 16 16 16 16 $ H
16 16 16 16 16 16 16 16 $ I
16 16 16 16 16 16 16 16 $ J
c
c 8 7 6 5 4 3 2 1
c $ ARRANGEMENT
c UNIVERSE 17: NEAR LEFT-UPPER (L-U) CORNER OF THE GRID
171 7 6.0262E-02 -101 106 102 imp:n= 1 u= 17 $ ALUMINUM
172 5 1.0001E-01 -102 imp:n= 1 u= 17 $ PRIMARY HOLE
173 5 1.0001E-01 -106 imp:n= 1 u= 17 $ R-L SECONDARY HOLE
174 5 1.0001E-01 101 106 imp:n= 1 u= 17 $ OUT
c UNIVERSE 18: NEAR RIGHT-UPPER (R-U) CORNER OF THE GRID
181 7 6.0262E-02 -101 105 102 imp:n= 1 u= 18 $ ALUMINUM
182 5 1.0001E-01 -102 imp:n= 1 u= 18 $ PRIMARY HOLE
183 5 1.0001E-01 -105 imp:n= 1 u= 18 $ L-L SECONDARY HOLE
184 5 1.0001E-01 101 105 imp:n= 1 u= 18 $ OUT
c UNIVERSE 19: NEAR LEFT-LOWER (L-L) CORNER OF THE GRID
191 7 6.0262E-02 -101 104 102 imp:n= 1 u= 19 $ ALUMINUM
192 5 1.0001E-01 -102 imp:n= 1 u= 19 $ PRIMARY HOLE
193 5 1.0001E-01 -104 imp:n= 1 u= 19 $ R-U SECONDARY HOLE
194 5 1.0001E-01 101 104 imp:n= 1 u= 19 $ OUT
c UNIVERSE 20: NEAR RIGHT-LOWER (R-L) CORNER OF THE GRID
201 7 6.0262E-02 -101 103 102 imp:n= 1 u= 20 $ ALUMINUM
202 5 1.0001E-01 -102 imp:n= 1 u= 20 $ PRIMARY HOLE
203 5 1.0001E-01 -103 imp:n= 1 u= 20 $ L-U SECONDARY HOLE
204 5 1.0001E-01 101 103 imp:n= 1 u= 20 $ OUT
c UNIVERSE 21: UPPER SIDE OF THE GRID
211 7 6.0262E-02 -101 105 102 106 imp:n= 1 u= 21 $ ALUMINUM
212 5 1.0001E-01 -102 imp:n= 1 u= 21 $ PRIMARY HOLE
213 5 1.0001E-01 -105 imp:n= 1 u= 21 $ L-L SEC. HOLE
214 5 1.0001E-01 -106 imp:n= 1 u= 21 $ R-L SEC. HOLE
215 5 1.0001E-01 101 105 106 imp:n= 1 u= 21 $ OUT
c UNIVERSE 22: RIGHT SIDE OF THE GRID
221 7 6.0262E-02 -101 105 102 103 imp:n= 1 u= 22 $ ALUMINUM
222 5 1.0001E-01 -102 imp:n= 1 u= 22 $ PRIMARY HOLE
223 5 1.0001E-01 -105 imp:n= 1 u= 22 $ L-L SEC. HOLE
224 5 1.0001E-01 -103 imp:n= 1 u= 22 $ L-U SEC. HOLE
225 5 1.0001E-01 101 105 103 imp:n= 1 u= 22 $ OUT
c UNIVERSE 23: LOWER SIDE OF THE GRID

```

231 7 6.0262E-02 -101 103 102 104 imp:n= 1 u= 23 \$ ALUMINUM
 232 5 1.0001E-01 -102 imp:n= 1 u= 23 \$ PRIMARY HOLE
 233 5 1.0001E-01 -103 imp:n= 1 u= 23 \$ L-U SEC. HOLE
 234 5 1.0001E-01 -104 imp:n=1 u=23 \$ R-U SEC. HOLE
 235 5 1.0001E-01 101 103 104 imp:n=1 u=23 \$ OUT
 c UNIVERSE 24: LEFT SIDE OF THE GRID
 241 7 6.0262E-02 -101 104 102 106 imp:n=1 u=24 \$ ALUMINUM
 242 5 1.0001E-01 -102 imp:n=1 u=24 \$ PRIMARY HOLE
 243 5 1.0001E-01 -106 imp:n=1 u=24 \$ R-L SEC. HOLE
 244 5 1.0001E-01 -104 imp:n=1 u=24 \$ R-U SEC. HOLE
 245 5 1.0001E-01 101 104 106 imp:n=1 u=24 \$ OUT
 c UNIVERSE 25: INTERNAL POSITIONS OF THE GRID WITHOUT FE
 251 7 6.0262E-02 -101 102 103 104 105 106 imp:n= 1 u=25 \$ ALUMINUM
 252 5 1.0001E-01 -102 imp:n=1 u=25 \$ PRIMARY HOLE
 253 5 1.0001E-01 -103 imp:n=1 u=25 \$ SEC. HOLE
 254 5 1.0001E-01 -104 imp:n=1 u=25 \$ SEC. HOLE
 255 5 1.0001E-01 -105 imp:n=1 u=25 \$ SEC. HOLE
 256 5 1.0001E-01 -106 imp:n=1 u=25 \$ SEC. HOLE
 257 5 1.0001E-01 101 102 103 104 105 106 imp:n= 1 u= 25 \$ OUT
 c UNIVERSE 26: INTERNAL POSITIONS OF THE GRID WITH FUEL ELEMENT
 261 7 6.0262E-02 -101 107 103 104 105 106 108 imp:n= 1 u=26 \$ ALUMINUM
 262 5 1.0001E-01 -107 imp:n=1 u=26 \$ PRIMARY HOLE WITH NOZZLE
 263 5 1.0001E-01 -103 imp:n=1 u=26 \$ SEC. HOLE
 264 5 1.0001E-01 -104 imp:n=1 u=26 \$ SEC. HOLE
 265 5 1.0001E-01 -105 imp:n=1 u=26 \$ SEC. HOLE
 266 5 1.0001E-01 -106 imp:n=1 u=26 \$ SEC. HOLE
 267 5 1.0001E-01 101 107 103 104 105 106 108 imp:n=1 u=26 \$ OUT
 268 5 1.0001E-01 -108 imp:n=1 u=26 \$ PRIMARY HOLE WITHOUT NOZZLE
 c UNIVERSE 27: GRID
 271 7 6.0262E-02 -101 imp:n= 1 U= 27 lat= 1 fill=-3:4 -5:4 0:0
 28 19 23 23 23 23 20 28 \$ A
 19 31 25 25 25 25 32 20 \$ B
 24 25 25 26 26 26 25 22 \$ C
 24 25 26 26 26 26 22 \$ D
 24 25 26 26 26 26 22 \$ E
 24 25 26 26 26 26 22 \$ F
 24 25 25 26 26 25 25 22 \$ G
 24 25 25 25 25 25 22 \$ H
 17 29 25 25 25 25 30 18 \$ I
 28 17 21 21 21 21 18 28 \$ J
 c
 c 1 2 3 4 5 6 7 8
 c \$ ARRANGEMENT
 c UNIVERSE 28: CORNER OF THE GRID
 281 7 6.0262E-02 -101 102 imp:n= 1 u= 28 \$ ALUMINUM
 282 5 1.0001E-01 -102 imp:n= 1 u= 28 \$ PRIMARY HOLE
 283 5 1.0001E-01 101 102 imp:n= 1 u= 28 \$ OUT
 c UNIVERSE 29: COMPLEMENT OF L-U CORNER OF THE GRID
 291 7 6.0262E-02 -101 104 105 106 102 imp:n= 1 u= 29 \$ ALUMINUM
 292 5 1.0001E-01 -102 imp:n= 1 u= 29 \$ PRIMARY HOLE
 293 5 1.0001E-01 -104 imp:n= 1 u= 29 \$ R-U SEC. HOLE
 294 5 1.0001E-01 -105 imp:n= 1 u= 29 \$ L-L SEC. HOLE
 295 5 1.0001E-01 -106 imp:n= 1 u= 29 \$ R-L SEC. HOLE
 296 5 1.0001E-01 101 104 105 106 102 imp:n= 1 u= 29 \$ OUT
 c UNIVERSE 30: COMPLEMENT OF R-U CORNER OF THE GRID
 301 7 6.0262E-02 -101 103 105 106 102 imp:n= 1 u= 30 \$ ALUMINUM
 302 5 1.0001E-01 -102 imp:n= 1 u= 30 \$ PRIMARY HOLE

```

303 5 1.0001E-01 -103 imp:n= 1 u= 30 $ L-U SEC. HOLE
304 5 1.0001E-01 -105 imp:n= 1 u= 30 $ L-L SEC. HOLE
305 5 1.0001E-01 -106 imp:n= 1 u= 30 $ R-L SEC. HOLE
306 5 1.0001E-01 101 103 105 106 102 imp:n= 1 u= 30 $ OUT
c UNIVERSO 31: COMPLEMENT OF L-L CORNER OF THE GRID
311 7 6.0262E-02 -101 102 103 104 106 imp:n= 1 u= 31 $ ALUMINUM
312 5 1.0001E-01 -102 imp:n= 1 u= 31 $ PRIMARY HOLE
313 5 1.0001E-01 -103 imp:n= 1 u= 31 $ L-U SEC. HOLE
314 5 1.0001E-01 -104 imp:n= 1 u= 31 $ R-U SEC. HOLE
315 5 1.0001E-01 -106 imp:n= 1 u= 31 $ R-L SEC. HOLE
316 5 1.0001E-01 101 102 103 104 106 imp:n= 1 u= 31 $ OUT
c UNIVERSO 32: COMPLEMENT OF R-L CORNER OF THE GRID
321 7 6.0262E-02 -101 102 103 104 105 imp:n= 1 u= 32 $ ALUMINUM
322 5 1.0001E-01 -102 imp:n= 1 u= 32 $ PRIMARY HOLE
323 5 1.0001E-01 -103 imp:n= 1 u= 32 $ L-U SEC. HOLE
324 5 1.0001E-01 -104 imp:n= 1 u= 32 $ R-U SEC. HOLE
325 5 1.0001E-01 -105 imp:n= 1 u= 32 $ L-L SEC. HOLE
326 5 1.0001E-01 101 102 103 104 105 imp:n= 1 u= 32 $ OUT
c REACTOR
1000 5 1.0001E-01 -91 fill= 16 ( 0 0 2.4) imp:n= 1 $ FUEL ELEMENT
1001 7 6.0262E-02 -92 95 imp:n= 1 $ BNCT FILTER: 1ST ALUMINUM
1002 6 4.6340E-02 -92 -95 96 imp:n= 1 $ BNCT FILTER: 1ST CADMIUM
1003 7 6.0262E-02 -92 -96 97 imp:n= 1 $ BNCT FILTER: 2ND ALUMINUM
1004 6 4.6340E-02 -92 -97 98 imp:n= 1 $ BNCT FILTER: 2ND CADMIUM
1005 8 1.1694E-01 -92 -93 -98 imp:n= 1 $ BNCT FILTER: ALUMINA
1006 5 1.0001E-01 -93 91 92 94 imp:n= 1 $ WATER
1007 7 6.0262E-02 -94 fill= 27 ( 0 0 -48.35 ) imp:n= 1 $ GRID
1008 0 93 imp:n= 0 $ OUT

c SUPERFÍCIES UTILIZADAS NA MONTAGEM DA GEOMETRIA
c 0- FUEL PLATES: GENERAL
C $ MEAT. X: WIDTH Y: THICK Z: LARGE ALTERADO
1 rpp -3 3 -Y1 Y1 -31.15 31.15
C $ CLADDING ALTERADO
2 rpp -3.525 3.525 -Y2 Y2 -33.55 33.55
C $ CADMIUM FOIL ALTERADO
3 rcc -3.58 0 -25 0 0 50 P1
C $ CADMIUM FOIL ALTERADO
4 rcc 3.58 0 -25 0 0 50 P1
5 rpp -3.525 3.525 -0.065 0.065 -33.55 33.55 $ INTERNAL CONTROL GUIDE P
6 rpp -3.525 3.525 -0.065 0.065 -38.35 39.65 $ EXTERNAL CONTROL GUIDE P
7 rpp -3.61 -3.55 -0.025 0.025 -33.85 31.65 $ CD WIRE HOLDING SLOT IN E
8 rpp 3.55 3.61 -0.025 0.025 -33.85 31.65 $ CD WIRE HOLDING SLOT IN EXT
9 rpp -3.55 -3.525 -0.08 0.08 -33.85 39.65 $ INTERNAL FUEL PLATE HOLDIN
10 rpp 3.525 3.55 -0.08 0.08 -33.85 39.65 $ INTERNAL FUEL PLATE HOLDING
c 1- NFE
11 rpp -3.8 -3.3 -0.21 0.21 -38.35 39.65 $ SIDE PLATE
12 rpp 3.3 3.8 -0.21 0.21 -38.35 39.65 $ SIDE PLATE
13 rpp -3.525 3.525 -0.0745 0.0745 -38.35 35.15 $ EXTERNAL FUEL PLATE C
14 rpp -3.61 -3.55 -0.025 0.025 -38.35 31.65 $ CD WIRE HOLDING SLOT IN
15 rpp 3.55 3.61 -0.025 0.025 -38.35 31.65 $ CD WIRE HOLDING SLOT IN EX
16 rpp -3.55 -3.525 -0.08 0.08 -38.35 39.65 $ EXTERNAL FUEL PLATE HOLDI
17 rpp 3.525 3.55 -0.08 0.08 -38.35 39.65 $ EXTERNAL FUEL PLATE HOLDING
18 rpp -3.525 -3.3 -0.08 0.08 33.55 39.65 $ INTERNAL FUEL PLATE HOLDING
19 rpp 3.3 3.525 -0.08 0.08 33.55 39.65 $ INTERNAL FUEL PLATE HOLDING S
c 2- CFE
21 rpp -3.8 -3.3 -0.205 0.205 -38.35 39.65 $ SIDE PLATE

```

22 rpp 3.3 3.8 -0.205 0.205 -38.35 39.65 \$ SIDE PLATE
23 rpp -3.55 -3.525 -0.08 0.08 -33.85 39.65 \$ FUEL PLATE AND INTERNAL G
24 rpp 3.525 3.55 -0.08 0.08 -33.85 39.65 \$ FUEL PLATE AND INTERNAL GUI
25 rpp -3.61 -3.55 -0.025 0.025 -33.85 39.65 \$ CD WIRE HOLDING SLOT IN
26 rpp 3.55 3.61 -0.025 0.025 -33.85 39.65 \$ CD WIRE HOLDING SLOT IN EX
27 rpp -3.55 -3.525 -0.08 0.08 -38.35 39.65 \$ EXTERNAL GUIDE PLATE HOLD
28 rpp 3.525 3.55 -0.08 0.08 -38.35 39.65 \$ EXTERNAL GUIDE PLATE HOLDIN
29 rpp -3.525 -3.3 -0.08 0.08 33.55 39.65 \$ FUEL PLATE AND INTERNAL GUI
30 rpp 3.3 3.525 -0.08 0.08 33.55 39.65 \$ FUEL PLATE AND INTERNAL GUIDE
c 3- FUEL ELEMENTS: LIMITS
31 px -3.85 \$ WIDTH
32 px 3.85 \$ WIDTH
33 pz -38.35 \$ LARGE
34 pz 35.15 \$ LARGE, FOR NFE, WITHOUT CROSSBAR
35 py -0.21 \$ THICK FOR NFE
36 py 0.21 \$ THICK FOR NFE
37 py -0.205 \$ THICK FOR CFE
38 py 0.205 \$ THICK FOR CFE
39 pz 39.65 \$ LARGE, FOR NFE, WITH CROSSBAR
c 4- ABSORBENT PLATE
41 rpp -2.98 2.98 -0.11 0.11 -31.7 31.7 \$ AG-IN-CD PLATE
42 rpp -3.2 3.2 -0.215 0.215 -32.8 53.9 \$ CLADDING
43 rpp -3.13 3.13 -0.145 0.145 -31.7 31.7 \$ VOID
44 rcc -2.98 0 -31.7 0 0 63.4 0.11 \$ SEMICIRCULAR EDGE
45 rcc 2.98 0 -31.7 0 0 63.4 0.11 \$ SEMICIRCULAR EDGE
46 rcc 0 0.1725 -31.7 0 0 63.4 0.1625 \$ CENTRAL SLOT
c 5-6- CFE ASSEMBLY
51 rpp -3.85 3.85 -2.87 2.87 -38.35 39.65 \$ FUEL ELEMENTS
52 rpp -3.85 3.85 -3.23 -2.87 -38.35 39.65 \$ INTERNAL GUIDE PLATE
53 rpp -3.8 -3.3 -3.66 -3.23 -38.35 39.65 \$ MISSING SIDE PLATE
54 rpp 3.3 3.8 -3.66 -3.23 -38.35 39.65 \$ MISSING SIDE PLATE
55 rpp -3.3 3.3 -3.66 -3.23 -33.15 118.25 \$ ABSORBENT PLATE
56 rpp -3.85 3.85 -4 -3.66 -38.35 39.65 \$ EXTERNAL GUIDE PLATE
57 rpp -3.85 3.85 2.87 3.23 -38.35 39.65 \$ INTERNAL GUIDE PLATE
58 rpp -3.8 -3.3 3.23 3.66 -38.35 39.65 \$ MISSING SIDE PLATE
59 rpp 3.3 3.8 3.23 3.66 -38.35 39.65 \$ MISSING SIDE PLATE
60 rpp -3.3 3.3 3.23 3.66 -33.15 118.25 \$ ABSORBENT PLATE
61 rpp -3.85 3.85 3.66 4 -38.35 39.65 \$ EXTERNAL GUIDE PLATE
62 so 1000 \$ OUT
c 7- NFE ASSEMBLY
71 rpp -3.8 3.8 -3.99 3.99 -38.35 35.15 \$ FUEL PLATES
72 rpp -3.8 -3.3 -4 -3.99 -38.35 35.15 \$ MISSING SIDE PLATE
73 rpp 3.3 3.8 -4 -3.99 -38.35 35.15 \$ MISSING SIDE PLATE
74 rpp -3.8 -3.3 3.99 4 -38.35 35.15 \$ MISSING SIDE PLATE
75 rpp 3.3 3.8 3.99 4 -38.35 35.15 \$ MISSING SIDE PLATE
c 8- FUEL ELEMENT ARRAGEMENT
81 rpp -3.85 3.85 -4.05 4.05 -40.75 118.4549305 \$ FUEL ELEMENT
c 20- NOZZLE OUTSIDE THE GRID
200 rcc 0 0 -40.75 0 0 2.4 2.4895 \$ INNER DIAMETER
201 rcc 0 0 -40.75 0 0 2.4 3.0895 \$ OUTER DIAMETER
c 9- REACTOR
91 rpp -26.95 34.65 -36.45 36.45 -38.35 120.8549305 \$ FUEL ELEMENTS
92 rpp -34.7 42.4 -122.95 -36.45 -38.35 44 \$ BNCT FILTER
93 rcc 3.85 -4.05 -200 0 0 1040 120 \$ WATER
94 rpp -26.95 34.65 -44.55 36.45 -58.35 -38.35 \$ GRID
95 py -53.45 \$ 1ST CADMIUM OF BNCT FILTER
96 py -53.6 \$ 2ND ALUMINUM OF BNCT FLITER

97 py -63.6 \$ 2ND CADMIUM OF BNCT FILTER
 98 py -63.75 \$ ALUMINA OF BNCT FILTER
 c 10- GRID
 101 rpp -3.85 3.85 -4.05 4.05 -10 10 \$ ALUMINUM
 102 rcc 0 0 -10 0 0 20 3.0895 \$ PRIMARY HOLE
 103 rcc -3.85 4.05 -10 0 0 20 1.1125 \$ L-U SEC. HOLE
 104 rcc 3.85 4.05 -10 0 0 20 1.1125 \$ R-U SEC. HOLE
 105 rcc -3.85 -4.05 -10 0 0 20 1.1125 \$ L-L SEC. HOLE
 106 rcc 3.85 -4.05 -10 0 0 20 1.1125 \$ R-L SEC. HOLE
 107 rcc 0 0 -1.1 0 0 11.1 2.4895 \$ UPPER LEVEL OF PRIMARY HOLE
 108 rcc 0 0 -10 0 0 8.9 3.0895 \$ LOWER LEVEL OF PRIMARY HOLE WI
 c 11- CROSSBAR
 110 px -3.8 \$ SIDE PLATE
 111 px -3.3 \$ SIDE PLATE
 112 px 3.3 \$ SIDE PLATE
 113 px 3.8 \$ SIDE PLATE
 114 py -4 \$ SIDE PLATE
 115 py 4 \$ SIDE PLATE
 116 c/x 0 37.65 0.625 \$ CROSSBAR

kcode 32000 1 20 275

PRDMP 55 5 -1 0 0 \$ ndp resumo a cada x ciclos

c ——LISTA DE MATERIAIS E COMPOSIÇÃO ISOTÓPICA——

c Meat

m1 92234.66c 1.7680E-05

92235.66c 2.4170E-03

92236.66c 1.3635E-05

92238.66c 9.6538E-03

14028.66c 7.7125E-03

14029.66c 3.9160E-04

14030.66c 2.5814E-04

13027.66c 3.0451E-02

5010.66c 3.8206E-07

5011.66c 1.5476E-06

c Al6061

m2 13027.66c 5.8811E-02

29063.66c 4.6017E-05

29065.66c 2.0510E-05

24050.66c 1.4946E-06

24052.66c 2.8822E-05

24053.66c 3.2682E-06

24054.66c 8.1352E-07

12000.66c 6.6229E-04

14028.66c 3.5775E-04

14029.66c 1.8165E-05

14030.66c 1.1974E-05

26054.66c 4.5947E-06

26056.66c 7.2127E-05

26057.66c 1.6657E-06

26058.66c 2.2168E-07

25055.66c 2.6637E-05

22000.66c 3.3959E-06

5010.66c 2.9779E-07

5011.66c 1.2062E-06

48106.66c 9.0404E-10

48108.66c 6.4368E-10

48110.66c 9.0332E-09

48111.66c 9.2574E-09
48112.66c 1.7452E-08
48113.66c 8.8379E-09
48114.66c 2.0778E-08
48116.66c 5.4170E-09
27059.66c 1.6554E-06
3006.66c 1.7780E-08
3007.66c 2.1648E-07

c

c STAINLESS STEEL AISI 304L

m3 6000.66c 6.0091E-05

25055.66c 8.7583E-04 \$Mn55
14028.66c 5.9254E-04 \$Si28
14029.66c 3.0086E-05 \$Si29
14030.66c 1.9833E-05 \$Si30
24050.66c 7.6396E-04 \$Cr50
24052.66c 1.4732E-02 \$Cr52
24053.66c 1.6705E-03 \$Cr53
24054.66c 4.1582E-04 \$Cr54
28058.66c 5.5812E-03 \$Ni58
28060.66c 2.1499E-03 \$Ni60
28061.66c 9.3462E-05 \$Ni61
28062.66c 2.9793E-04 \$Ni62
28064.66c 7.5917E-05 \$Ni64
26054.66c 3.5011E-03 \$Fe54
26056.66c 5.4960E-02 \$Fe56
26057.66c 1.2693E-03 \$Fe57
26058.66c 1.6892E-04 \$Fe58
16000.66c 2.2505E-05 \$S
15031.66c 3.4953E-05 \$P31
7014.66c 1.7113E-04 \$N14
7015.66c 6.2865E-07 \$N15

c Ag-In-Cd ALLOY

m4 47107.66c 2.3517E-02 \$Ag107

47109.66c 2.1848E-02 \$Ag109
49000.66c 7.9476E-03 \$In113
48106.66c 3.5414E-05 \$Cd106
48108.66c 2.5215E-05 \$Cd108
48110.66c 3.5386E-04 \$Cd110
48111.66c 3.6264E-04 \$Cd111
48112.66c 6.8364E-04 \$Cd112
48113.66c 3.4621E-04 \$Cd113
48114.66c 8.1396E-04 \$Cd114
48116.66c 2.1220E-04 \$Cd116

c WATER

m5 1001.66c 2

8016.66c 1

mt5 lwtr.60t

c CADMIUM (dens=8.65 g/cm3)

m6 48106.66c 0.0125 \$ Cd106

48108.66c 0.0089 \$ Cd108
48110.66c 0.1249 \$ Cd110
48111.66c 0.1280 \$ Cd111
48112.66c 0.2413 \$ Cd112
48113.66c 0.1222 \$ Cd113
48114.66c 0.2873 \$ Cd114
48116.66c 0.0749 \$ Cd116

c ALUMINUM

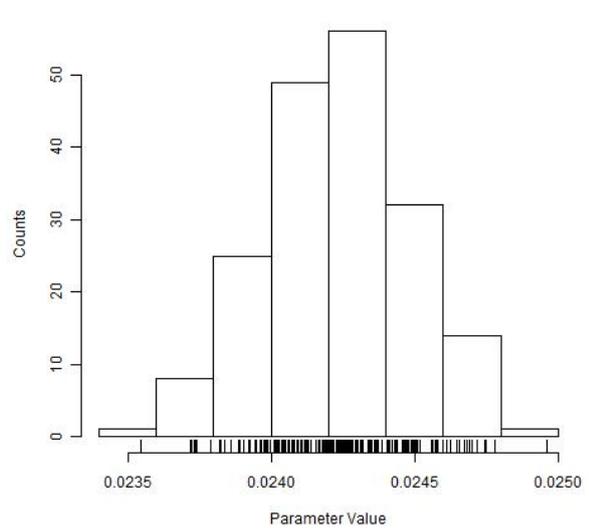
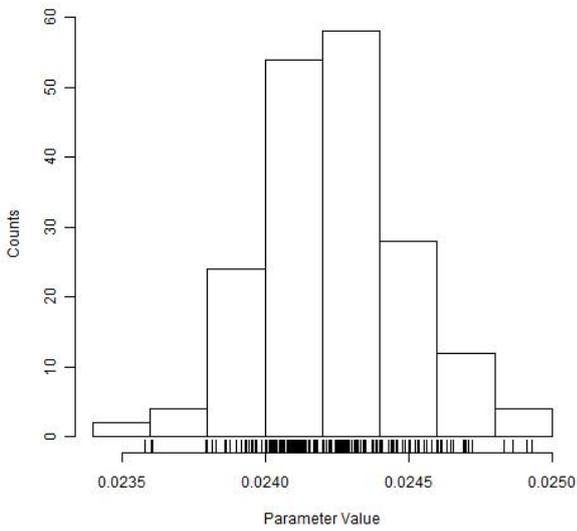
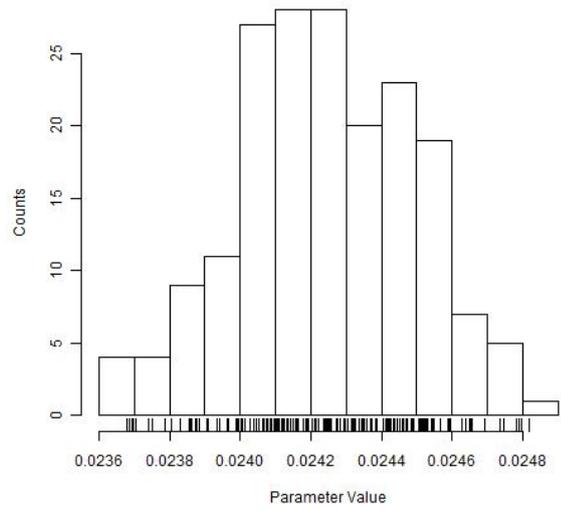
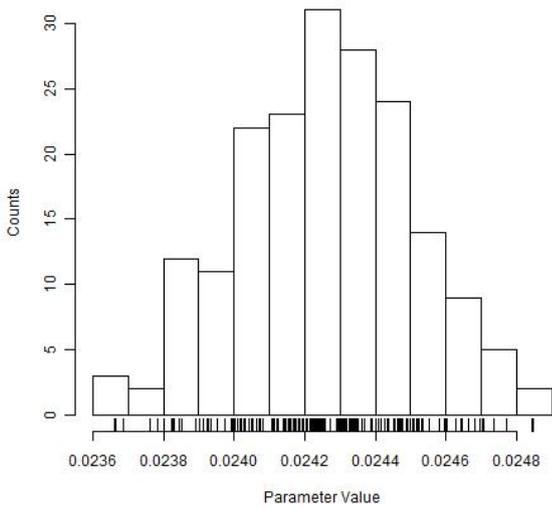
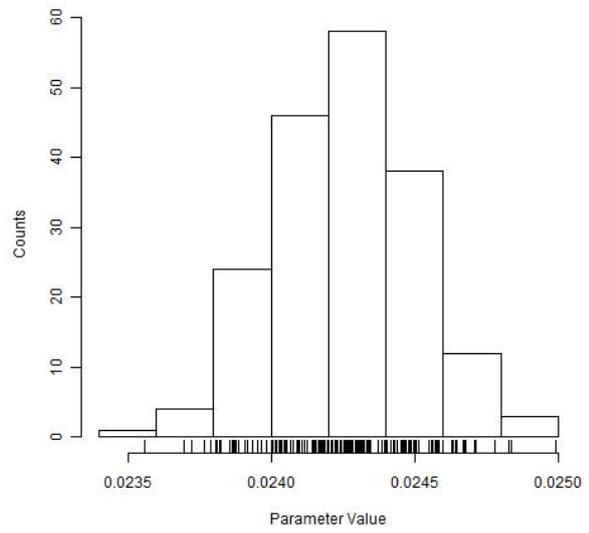
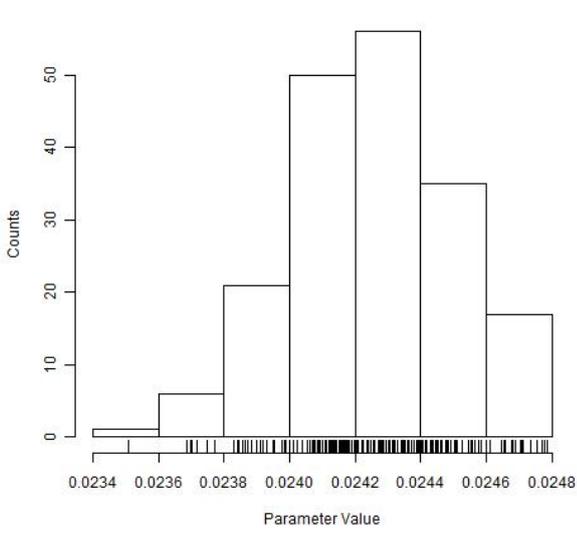
m7 13027.66c 6.0262E-02

c ALUMINA

m8 13027.66c 4.6778E-02

8016.66c 7.0166E-02

ANEXO B – Distribuições da seção 4.3.3



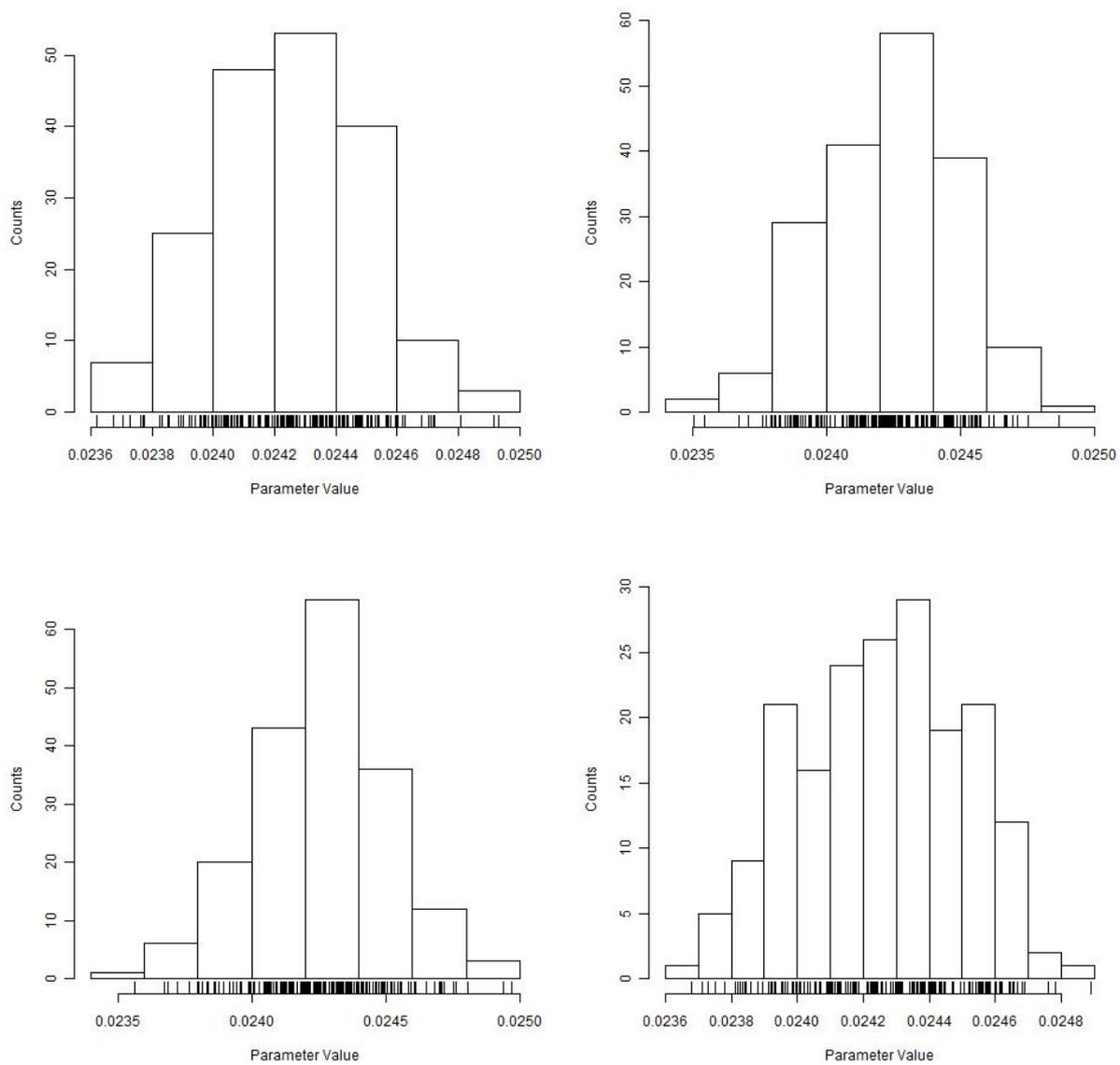
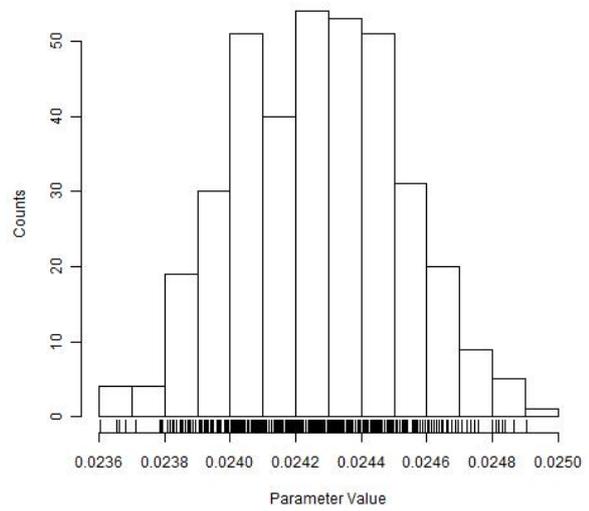
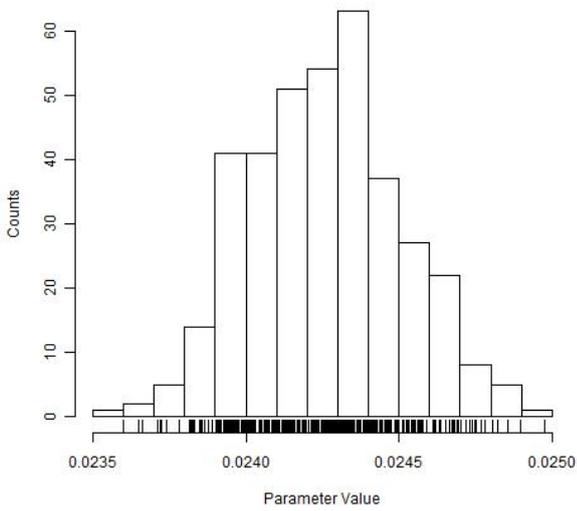
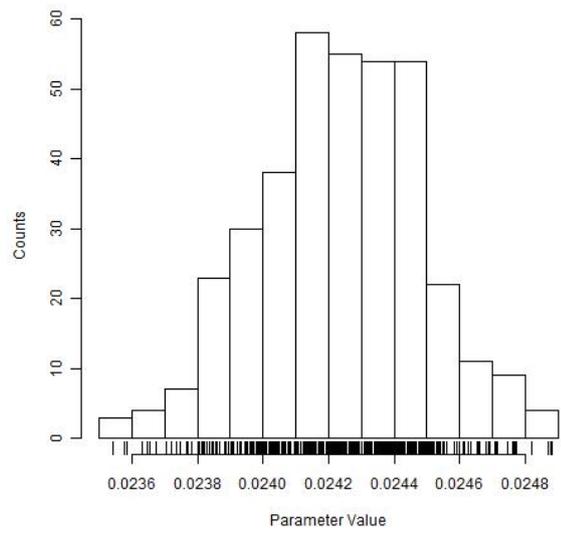
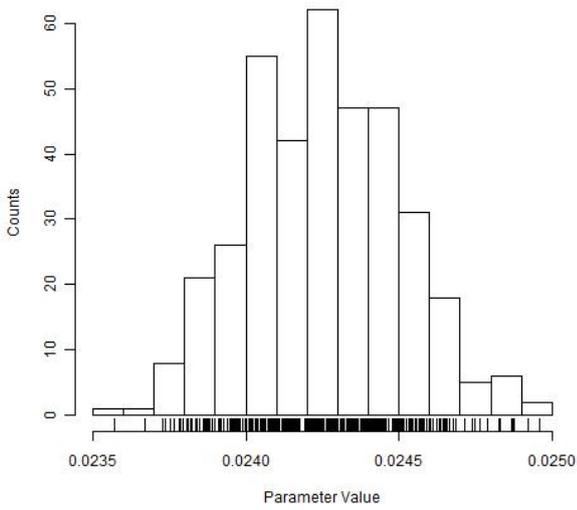
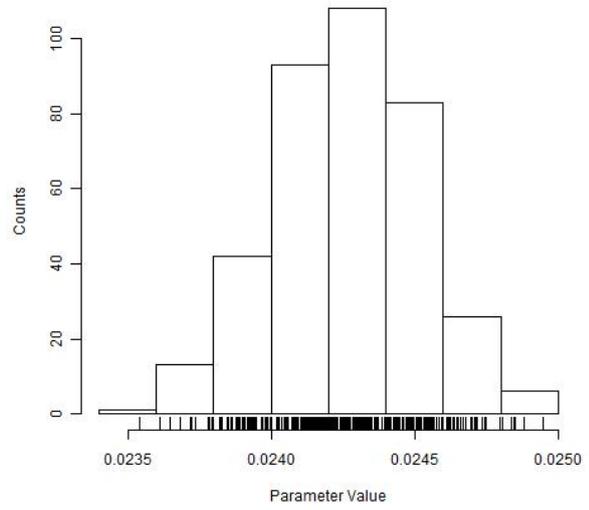
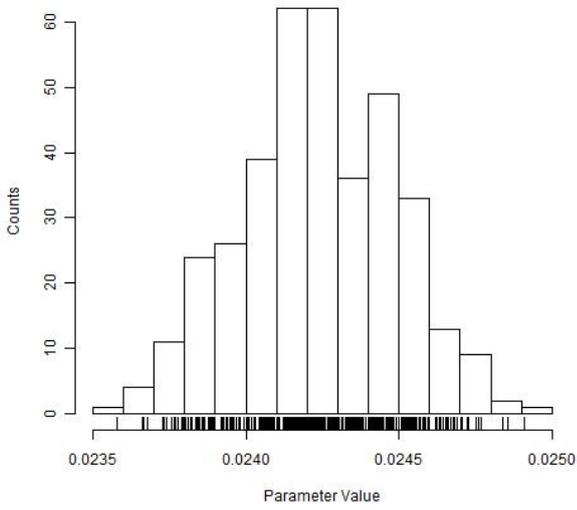


Figura 29 – Distribuição do raio do veneno queimável e incerteza associada. Distribuições ID 31 até ID 40.



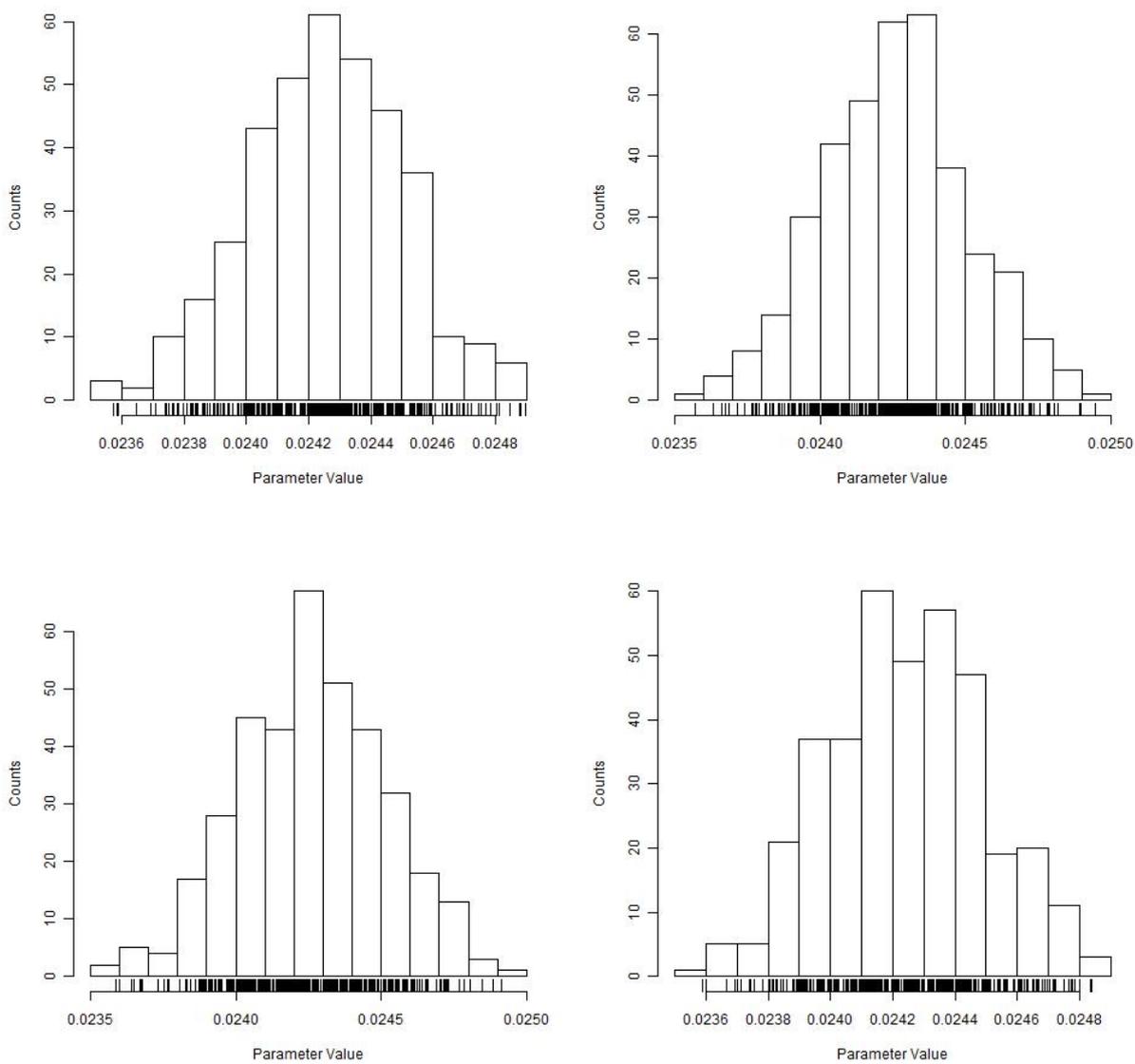
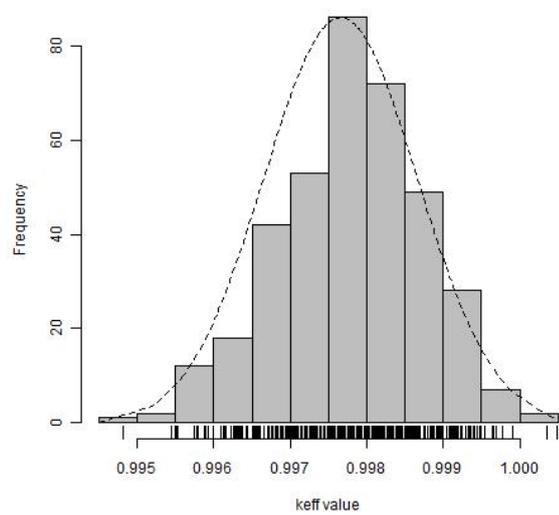
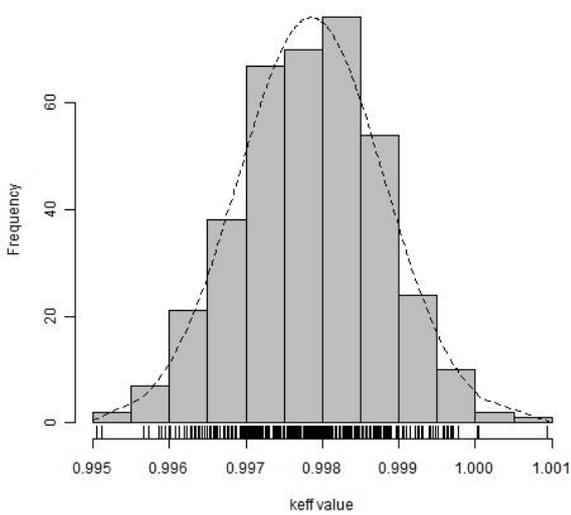
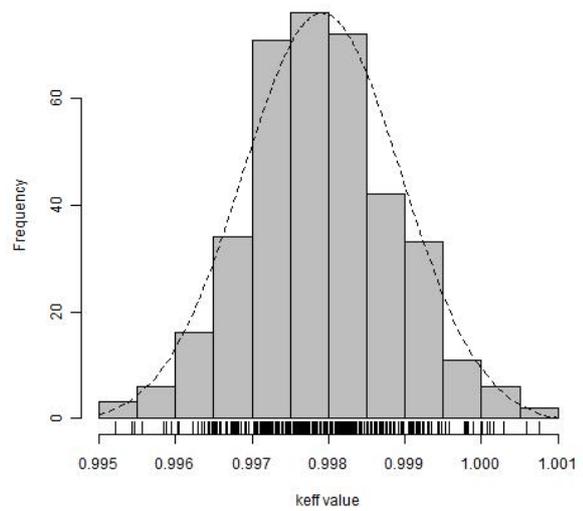
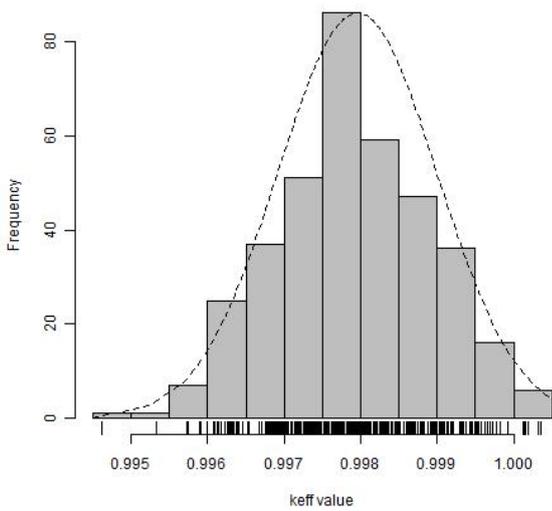
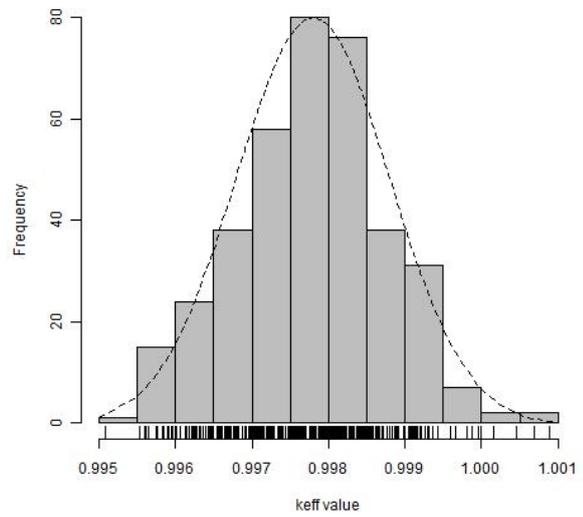
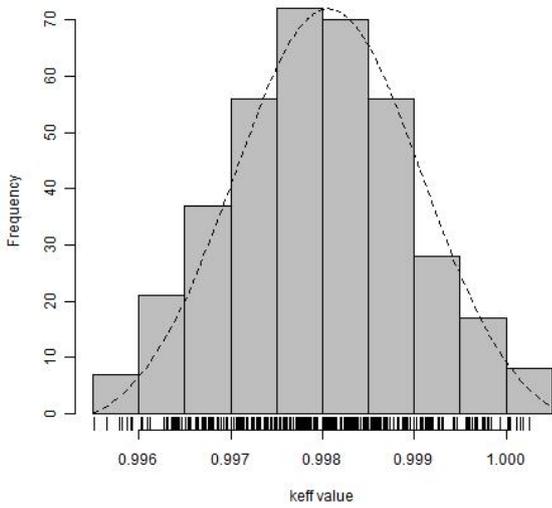


Figura 30 – Distribuição do raio do veneno queimável e incerteza associada. Distribuições ID 41 até ID 50.



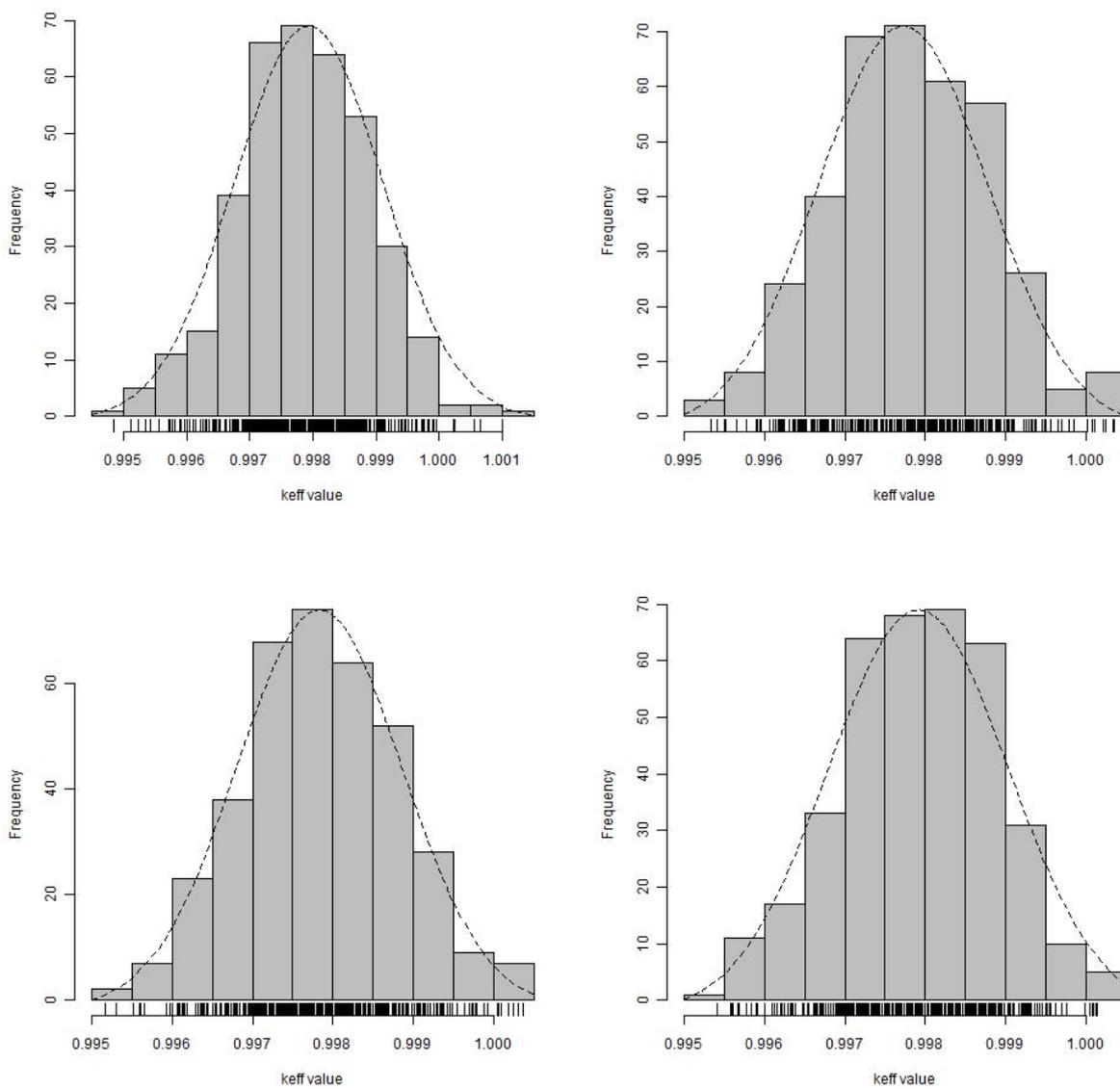
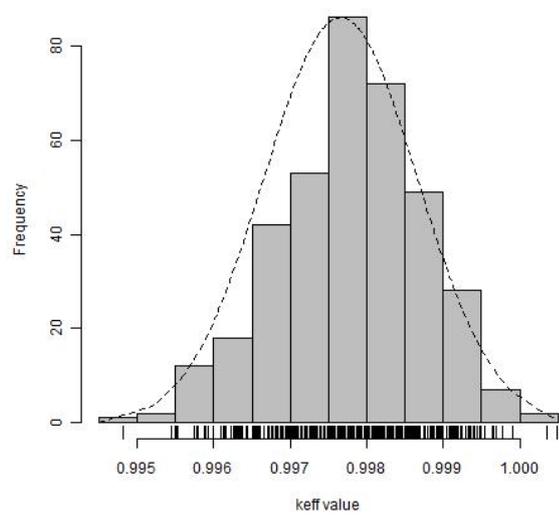
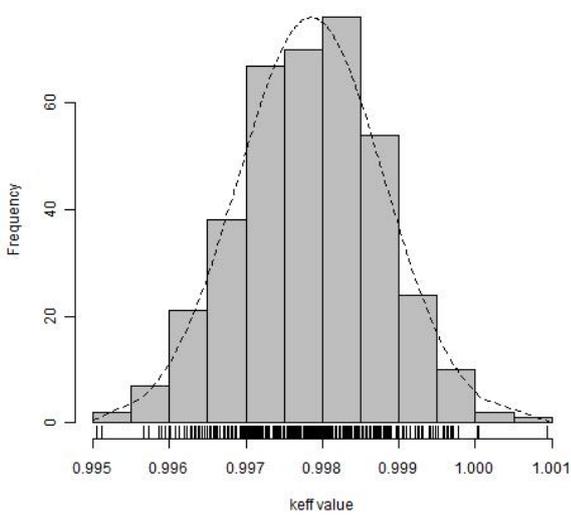
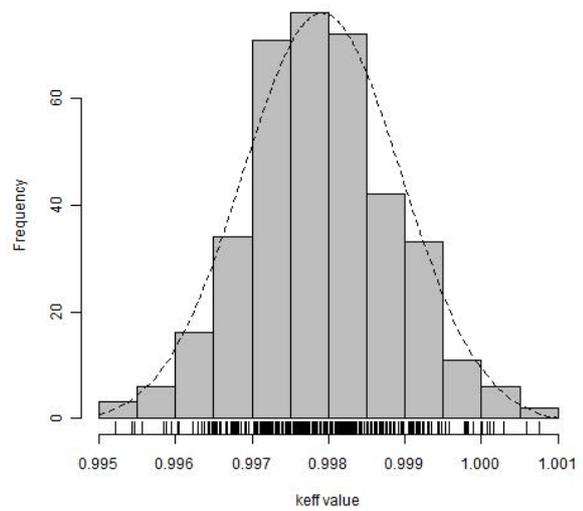
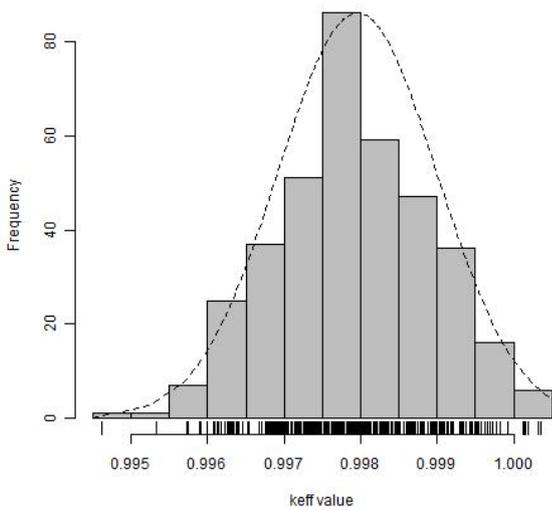
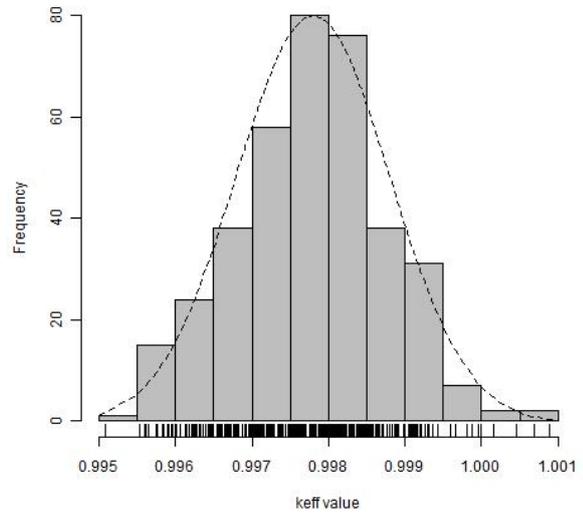
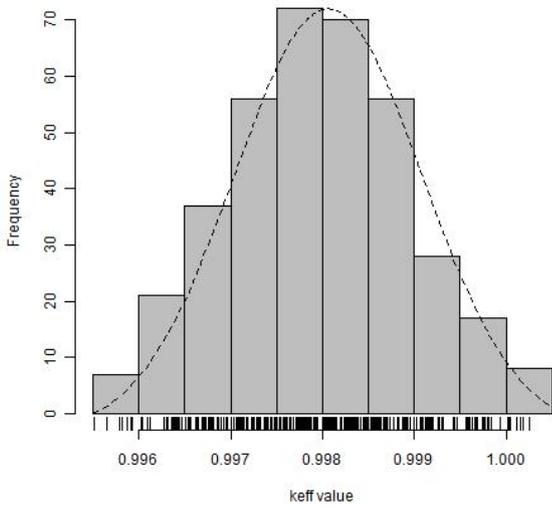


Figura 31 – Distribuição do keff resultante da propagação das distribuições apresentadas na Figura 29.



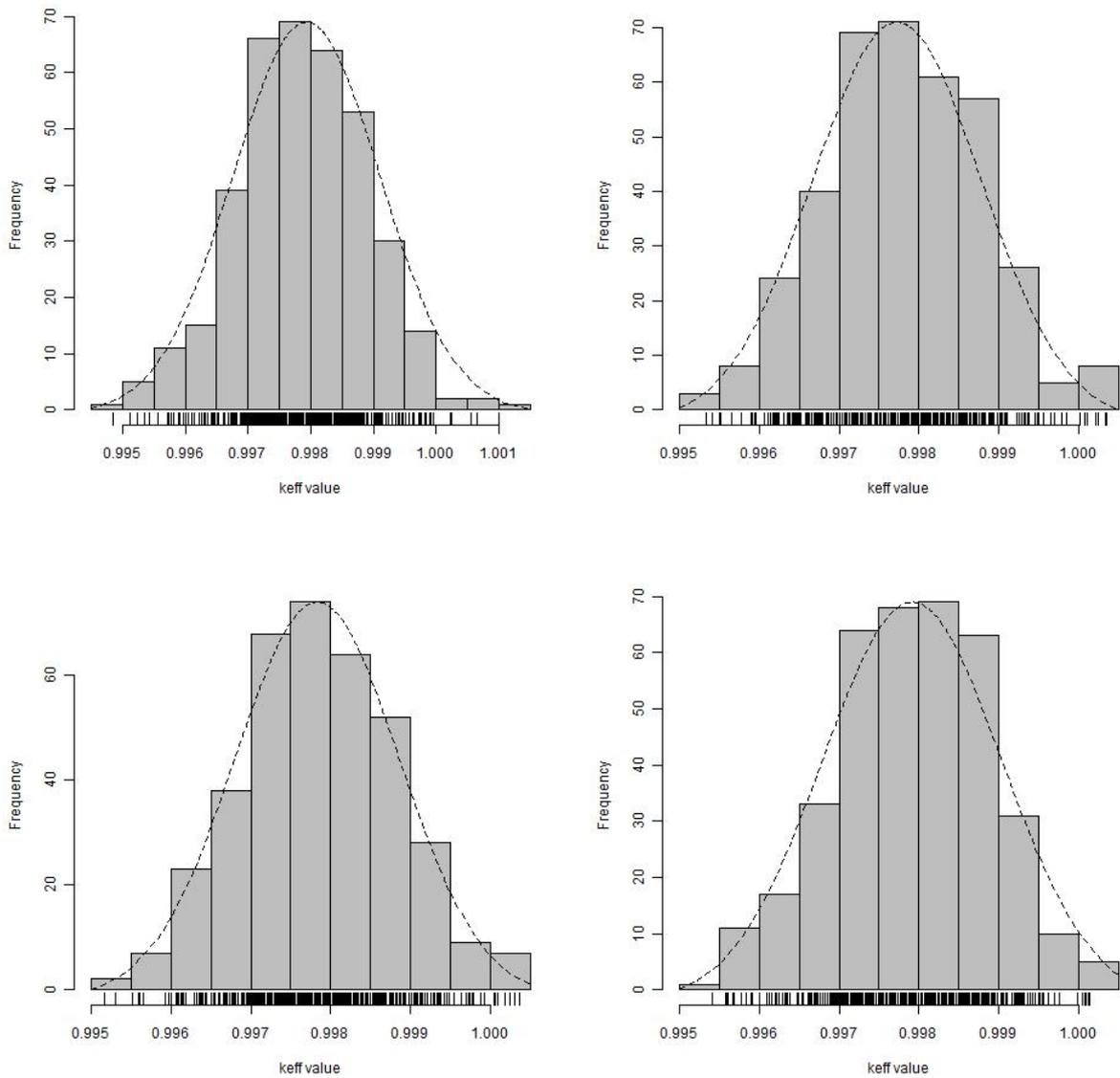


Figura 32 – Distribuição do keff resultante da propagação das distribuições apresentadas na Figura 30.