



**COPPE/UFRJ**

**CÁLCULO DA FUNÇÃO DE ALARGAMENTO DOPPLER UTILIZANDO  
ANÁLISE DE FOURIER**

Alessandro da Cruz Gonçalves

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Nuclear.

Orientadores: Aquilino Senra Martinez  
Fernando Carvalho da Silva

Rio de Janeiro  
Fevereiro de 2010

CÁLCULO DA FUNÇÃO DE ALARGAMENTO DOPPLER UTILIZANDO  
ANÁLISE DE FOURIER

Alessandro da Cruz Gonçalves

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ  
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE)  
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS  
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR  
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:

---

Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc.

---

Prof. Fernando Carvalho da Silva., D.Sc.

---

Prof. Antônio Carlos Marques Alvim, Ph.D.

---

Prof. Eduardo Gomes Dutra do Carmo, D.Sc.

---

Dr. Sérgio de Queiroz Bogado Leite, D.Sc.

---

Dr. Adimir dos Santos, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL  
FEVEREIRO DE 2010

Gonçalves, Alessandro da Cruz

Cálculo da função de alargamento Doppler utilizando análise de Fourier/ Alessandro da Cruz Gonçalves. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2010.

XIII, 102 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Aquilino Senra Martinez

Fernando Carvalho da Silva

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2010.

Referencias Bibliográficas: p. 87-90.

1. Alargamento Doppler. 2. Analise de Fourier. 3. Fator de auto-blindagem. I. Martinez, Aquilino Senra. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Titulo.

## **Dedicatória**

Dedico essa obra a Cristo o Senhor de todo o conhecimento.

Aos meus Pais pela inesgotável dedicação e paciência, em especial a minha querida mãe, que foi a minha grande incentivadora, conduzindo os meus primeiros passos no caminho do conhecimento, ensinando-me a ler e a escrever.

A minha esposa pelo apoio e compreensão incondicional que dispensou a mim durante a elaboração deste trabalho.

## **Agradecimentos**

Ao professor Aquilino Senra Martinez, pela dedicação, paciência, qualidade profissional com que me assistiu e por ter sempre acreditado na realização deste trabalho.

Ao professor Fernando Carvalho da Silva, pelos ensinamentos e sugestões transmitidos.

Ao Programa de Engenharia Nuclear (PEN/COPPE/UFRJ) por sua estrutura e organização.

Ao Laboratório de Monitoração de Processos (LMP) pelo apoio incondicional a elaboração deste trabalho.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro, concedendo a bolsa de estudos, permitindo a realização deste trabalho.

Aos meus amigos, Adilson Costa, Cristiano Silva, Fernando Freire e Zelmo Lima, pelos valiosos momentos de descontração.

Ao meu amigo professor Daniel Artur Pinheiro Palma do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, pelas sugestões brilhantes e a forma árdua com que trabalhou juntamente comigo, para que diversos trabalhos fossem publicados durante a elaboração desta Tese.

Aos meus Pais, por incentivarem os meus estudos, acreditando sempre nos meus sonhos e ideais.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

## CÁLCULO DA FUNÇÃO DE ALARGAMENTO DOPPLER UTILIZANDO ANÁLISE DE FOURIER

Alessandro da Cruz Gonçalves

Fevereiro/2010

Orientadores: Aquilino Senra Martinez  
Fernando Carvalho da Silva

Programa: Engenharia Nuclear

Um método eficiente e preciso para o cálculo da função de alargamento Doppler é de vital importância para determinações acuradas das seções de choque microscópicas medidas nos grupos de energia, fatores de auto-blindagem, integrais de ressonâncias e outros parâmetros de reatores. Nesta tese serão apresentados dois métodos distintos para cálculo da função de alargamento Doppler e do termo de interferência. O principal método é baseado em uma nova representação integral para a função  $\psi(x, \xi)$ , o qual dá a interpretação matemática da aproximação proposta por Bethe e Placzek, como sendo a convolução da função lorentziana com uma função gaussiana. Essa interpretação além de conduzir a uma nova forma integral para  $\psi(x, \xi)$ , possibilitou obter de modo simples uma solução fechada para a função de alargamento do Doppler.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

## CALCULATION OF THE DOPPLER BROADENING FUNCTION USING FOURIER ANALYSIS

Alessandro da Cruz Gonçalves

February/2010

Advisors: Aquilino Senra Martinez  
Fernando Carvalho da Silva

Department: Nuclear Engineering

An efficient and precise method for calculation of Doppler broadening function is very important to obtain average group microscopic cross sections, self-shielding factors, resonance integrals and others reactor physics parameter. In this thesis two different methods for calculation of Doppler broadening function and interference term will be presented. The main method is based on a new integral form for Doppler broadening function  $\psi(x, \xi)$ , which gives a mathematical interpretation of the approximation proposed by Bethe and Placzek, as the convolution of the Lorentzian function with a Gaussian function. This interpretation besides leading to a new integral form for  $\psi(x, \xi)$ , enables to obtain a simple analytic solution for the Doppler broadening function.

## ÍNDICE DE TEXTO

<b>CAPÍTULO I – Introdução</b>	<b>1</b>
<b>CAPÍTULO II – A função de alargamento Doppler e seus principais métodos de aproximação</b>	<b>4</b>
2.1 – Introdução	4
2.2 – Aproximação de Bethe e Plackzec para função de alargamento Doppler	5
2.2.1 – Propriedades da função de alargamento Doppler	9
2.3 – Principais Métodos de cálculo para Função de Alargamento Doppler	14
2.3.1 – Expansão assintótica	14
2.3.2 – Métodos de Beynon e Grant	15
2.3.3 – Método de Campos e Martinez	17
2.3.4 – Aproximação de Padé para a função de alargamento Doppler	18
2.3.5 – Método de Palma, Martinez e Silva	21
2.4 – O termo de interferência	23
<b>CAPÍTULO III - Novas representações integrais para função de alargamento Doppler e o termo de interferência</b>	<b>25</b>
3.1 – Introdução	25
3.2 – Nova representação integral da função de alargamento Doppler	25
3.3 – Nova representação integral do termo de interferência	27
3.4 – Soluções fechadas das novas representações integrais de $\psi(x,\xi)$ e $\chi(x,\xi)$	30
3.4.1 – Solução fechada da nova representação integral da função $\psi(x,\xi)$	30
3.4.2 – Solução fechada da nova representação integral da função $\chi(x,\xi)$	32
3.4.3 – Cálculo de $\psi(x,\xi)$ e $\chi(x,\xi)$ utilizando a série de Fourier	33
3.5 – Nova aproximação assintótica para função de alargamento Doppler $\psi(x,\xi)$	38
<b>CAPÍTULO IV - Aplicações da função de alargamento Doppler</b>	<b>40</b>
4.1 – Introdução	40
4.2 – Cálculo dos fatores de auto-blindagem	40

4.3 – Cálculo da função $J(\xi, \beta)$	42
4.4 – Cálculo da seção de choque microscópica de espalhamento	44
<b>CAPÍTULO V – Apresentação e Análise de Resultados</b>	<b>46</b>
5.1 – Introdução	46
5.2 – Método de referência para as funções $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$	46
5.2.1 – Validação da aproximação da série de Fourier para $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$	48
5.2.2 – Resultados obtidos com os métodos propostos para $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$	51
5.3 – Fator de auto-blindagem	62
5.3.1 – Uma nova aproximação para Gepi	66
5.4 – Função $J(\xi, \beta)$	73
5.5 – Seção de choque espelhamento	79
<b>CAPÍTULO VI – Conclusões e Recomendações</b>	<b>84</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>87</b>
<b>APÊNDICE A – Análise de Fourier</b>	<b>91</b>
<b>APÊNDICE B – Aproximação de Padé</b>	<b>97</b>
<b>APÊNDICE C – Função Erro e Função Erro complementar</b>	<b>100</b>

## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1 – Função de alargamento Doppler para $\psi(x, \xi=0,05)$	10
Figura 2.2 – Função de alargamento Doppler para $\psi(x, \xi=0,30)$	10
Figura 2.3 – Função de alargamento Doppler para $\psi(x, \xi=0,5)$	11
Figura 2.4 – $\psi(x, \xi=0,05)$ , $\psi(x, \xi=0,15)$ e $\psi(x, \xi=0,50)$	13
Figura 2.5 – Termo de interferência para $\chi(x, \xi=0,25)$	24
Figura 5.1 – Calculo da função de alargamento Doppler, através da aproximação da série de Fourier, equação (3.51), para $\xi = 0,05$ e $n = 30$ .	49
Figura 5.2 – Calculo da função de alargamento Doppler, através da aproximação da série de Fourier, equação (3.51), para $\xi = 0,05$ e $n = 50$ .	49
Figura 5.3 – Calculo da função de alargamento Doppler, através da aproximação da série de Fourier, equação (3.51), para $\xi = 0,5$ e $n = 30$ .	50
Figura 5.4 – Calculo da função de alargamento Doppler, através da aproximação da série de Fourier, equação (3.51), para $\xi = 0,5$ e $n = 50$ .	50
Figura 5.5 – Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.29) e (3.51), para $x = 10$ .	56
Figura 5.6 – Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.29) e (3.51), para $x = 20$ .	56
Figura 5.7 – Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.29) e (3.51), para $x = 35$ .	57
Figura 5.8 – Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.29) e (3.51), para $\xi = 0,45$ .	57
Figura 5.9 – Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.29) e (3.51), para $\xi = 0,10$ .	58
Figura 5.10 – Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.29) e (3.51), para $\xi = 0,20$ .	58
Figura 5.11 – Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.35) e (3.56), para $x = 10$ .	59

Figura 5.12 – Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.35) e (3.56), para $x = 20$ .	<b>59</b>
Figura 5.13 – Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.35) e (3.56), para $x = 35$ .	<b>60</b>
Figura 5.14 – Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.35) e (3.56), para $x = 45$ .	<b>60</b>
Figura 5.15 – Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.35) e (3.56), para $\xi = 0,15$ .	<b>61</b>
Figura 5.16 – Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.35) e (3.56), para $\xi = 0,25$ .	<b>61</b>
Figura 5.17 – Integrando de $G_{epi}$ para $\tau = 0.01$ e $\xi = 0,25$ .	<b>63</b>
Figura 5.18 – Integrando de $G_{epi}$ para $\tau = 0.004$ e $\xi = 0,01$ .	<b>63</b>
Figura 5.19 – Termo $\tau^2 \psi^2 E_1(\tau \psi)$ para $\tau = 0.01$ e $\xi = 0,25$ .	<b>67</b>
Figura 5.20 – Integrando da função $J(\xi, \beta)$ para $\beta = 0,001$ e $\xi = 0,25$ .	<b>74</b>
Figura 5.21 – Integrando da função $J(\xi, \beta)$ para $\beta = 0,001$ e $\xi = 0,25$ .	<b>75</b>
Figura 5.22 – Seção de choque de espalhamento do U238 para a ressonância de $E_0 = 6,67$ eV.	<b>80</b>
Figura 5.23 – Erro relativo da seção de choque de espalhamento do U238 para ressonância de $E_0 = 6,67$ eV.	<b>81</b>
Figura 5.24 – Seção de choque de espalhamento do Th232 para a ressonância de $E_0 = 23,43$ eV.	<b>81</b>
Figura 5.25 – Erro relativo da seção de choque de espalhamento do Th232 para ressonância de $E_0 = 23,43$ eV.	<b>82</b>
Figura 5.26 – Seção de choque de espalhamento do Pu240 para a ressonância de $E_0 = 20,45$ eV.	<b>82</b>
Figura 5.27 – Erro relativo da seção de choque de espalhamento do Pu240 para ressonância de $E_0 = 20,45$ eV.	<b>83</b>

## ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1 – Os coeficientes p e q da aproximação de Padé de 4 pólos	20
Tabela 2.2 – Os coeficientes h, a e b da aproximação de Padé de 4 pólos	20
Tabela 5.1 – Pontos Legendre $\eta_j$ e seus respectivos pesos $w_j$ .	47
Tabela 5.2 – Valores de referência para a função de alargamento Doppler.	52
Tabela 5.3 – Valores de referência para o termo de interferência $\chi(x,\xi)$ .	52
Tabela 5.4 – Valores da função de alargamento Doppler $\psi(x,\xi)$ obtidos através da solução fechada, dada pela equação (3.29).	53
Tabela 5.5 – Valores do termo de interferência $\chi(x,\xi)$ obtidos através da solução fechada, dada pela equação (3.35).	53
Tabela 5.6 – Valores da função de alargamento Doppler $\psi(x,\xi)$ obtidos através da solução fechada, dada pela equação (3.51).	54
Tabela 5.7 – Valores do termo de interferência $\chi(x,\xi)$ obtidos através da solução fechada, dada pela equação (3.56).	54
Tabela 5.8 – Valores da função de alargamento Doppler $\psi(x,\xi)$ obtidos através da aproximação de Padé de 4 pólos.	55
Tabela 5.9 – Valores do termo de interferência $\chi(x,\xi)$ obtidos através da aproximação de Padé de 4 pólos.	55
Tabela 5.10 – Resultados obtidos para $G_{epi}$ correspondentes às 20 primeiras ressonâncias do isótopo U238 para $\tau = 0,01$ e $T = 1450K$ Fonte: JENDL – 3.2.	65
Tabela 5.11 – Parâmetros nucleares típicos em reatores PWR.	66
Tabela 5.12 – Resultados obtidos para $G_{epi}$ e $G_{apr}$ correspondentes às 20 primeiras ressonâncias do isótopo U238 para $\tau = 0,01$ e $T = 1450K$ . Fonte: JENDL – 3.2.	68
Tabela 5.13 – Tempo de cálculo computacional para $G_{epi}$ e $G_{apr}$ , utilizando-se dois diferentes métodos para função de alargamento Doppler $\psi(x,\xi)$ .	70

Tabela 5.14 – Cálculo do fator de auto-blindagem ressonante ponderado utilizando três diferentes métodos no cálculo da função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ .	<b>72</b>
Tabela 5.15 – Cálculo do tempo computacional para $\langle G_{\text{epi}} \rangle$ utilizando três diferentes métodos no cálculo da função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ .	<b>72</b>
Tabela 5.16 – Tempo computacional no cálculo da função $J(\xi, \beta)$ para diferentes métodos de cálculo da função $\psi(x, \xi)$ .	<b>76</b>
Tabela 5.17 – Valores para função $J(\xi, \beta)$ utilizando o método proposto no cálculo da função de alargamento Doppler onde $\beta = 2^j \times 10^{-5}$ .	<b>77</b>
Tabela 5.18 – Função $J(\xi, \beta)$ para $\beta = 2^5 \times 10^{-5}$ .	<b>78</b>
Tabela 5.19 – Função $J(\xi, \beta)$ para $\beta = 2^{10} \times 10^{-5}$ .	<b>78</b>
Tabela 5.20 – Função $J(\xi, \beta)$ para $\beta = 2^{15} \times 10^{-5}$ .	<b>78</b>
Tabela 5.17 – Valores para Parâmetros nucleares da seção de choque microscópica de espalhamento para os núclídeos U238 e Pu240 e Th232 a 1500K. FONTE: JENDL – 3.2.	<b>80</b>

# CAPÍTULO I

## INTRODUÇÃO

Esta tese tem como principal objetivo desenvolver dois diferentes métodos de cálculo da função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$  e do termo de interferência  $\chi(x, \xi)$  (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976), baseados em técnicas de análise de Fourier. O primeiro método de cálculo que será apresentado para a função  $\psi(x, \xi)$  é baseado no teorema da convolução, o qual conduz a novas representações integrais para função de alargamento Doppler e para o termo de interferência, possibilitando assim a obtenção de formulações fechadas para ambas as funções, que conduzem a resultados precisos em todas as faixas de energia e temperaturas, nas quais a aproximação de Bethe e Placzek é válida.

A determinação precisa da função de alargamento Doppler é de vital importância para o cálculo das integrais de ressonâncias, fatores de auto-blindagem e para correções das medidas das seções de choque microscópicas utilizando-se a técnica de ativação (BEKURTS, 1964). Para aplicações relacionadas ao cálculo dos fatores de auto-blindagem, Shcherbakov e Harada (SHCHERBAKOV & HARADA, 2002) destacam a necessidade de desenvolverem aproximações precisas para  $\psi(x, \xi)$ , devido ao fato que os modernos sistemas numéricos utilizados para gerar os valores de  $\psi(x, \xi)$  não se aplicam convenientemente a análise de dados experimentais provenientes da técnica de ativação. Com base na necessidade de se encontrar aproximações convenientes para a função de alargamento Doppler, nesta tese são apresentados dois métodos de cálculo, baseados exclusivamente em uma nova representação integral para função de alargamento Doppler, a qual é interpretada como sendo uma transformada cosseno de Fourier (ARFKEN, 1988).

A nova representação integral que será apresentada nesta tese além de conduzir a soluções fechadas para funções  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$ , possibilita ainda que estas funções sejam calculadas através da expansão em série de Fourier.

Aplicações de ordem prática, apresentadas nesta tese, consistem em determinações precisas da função  $J(\xi, \beta)$  (STACEY, 2001), seção de choque ressonante e dos fatores de auto-blindagem (SHCHERBAKOV & HARADA, 2002), os quais se encontram diretamente relacionados com a função  $\psi(x, \xi)$ . Também são apresentadas novas aproximações para o fator de auto-blindagem ressonante e para a função  $J(\xi, \beta)$ . Estas aproximações possibilitaram uma otimização no tempo de cálculo para estas aplicações específicas.

No Capítulo II é feita uma sucinta descrição dos principais fenômenos físicos relacionados à aproximação proposta por Bethe e Placzek para função de alargamento Doppler, assim como os principais métodos de cálculos existentes para a função  $\psi(x, \xi)$ .

No Capítulo III são descritos os métodos empregados para obtenção das novas representações integrais para a função de alargamento Doppler e para o termo de interferência. São apresentados também dois métodos para cálculo da função de alargamento Doppler e do termo de interferência, no qual o principal método de cálculo é baseado na solução fechada das novas representações integrais para  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$ . O outro método consiste em empregar a série de Fourier sobre as novas representações integrais.

No Capítulo IV são descritas de forma objetiva as principais aplicações da função de alargamento Doppler, tais como cálculo das seções de choque

microscópicas de espalhamento, cálculo do fator de auto-blindagem na faixa de energia epitérmica  $G_{epi}$  e o cálculo da função  $J(\zeta, \beta)$ .

No Capítulo V são apresentados os resultados obtidos para os cálculos das funções de alargamento Doppler e do termo de interferência, utilizando os métodos propostos. Tais resultados são validados através de um método de referência estabelecidos para tal finalidade. Os resultados mostraram-se bastante satisfatórios tendo um desvio máximo, com relação ao método de referência de menos de 0.1% para  $\psi(x, \xi)$ . Ainda no capítulo V são discutidos os resultados obtidos para os cálculos das seções de choque microscópicas de espalhamento, do fator de auto-blindagem  $G_{epi}$  e da função  $J(\zeta, \beta)$ , empregando-se as aproximações propostas no capítulo III.

No Capítulo VI são apresentadas as conclusões e recomendações da tese.

# CAPÍTULO II

## A FUNÇÃO DE ALARGAMENTO DOPPLER E SEUS PRINCIPAIS

### MÉTODOS DE APROXIMAÇÃO

#### 2.1 Introdução

Nos reatores nucleares do tipo PWR, os nêutrons são absorvidos na faixa de moderação, logo no projeto desses reatores, é necessário um tratamento acurado das absorções ressonantes, as quais conseqüentemente variam com a temperatura do combustível, devido ao alargamento Doppler das ressonâncias (LAMARSH & BARATTA, 2001).

O movimento de agitação térmica dos núcleos é adequadamente representado pela seção de choque microscópica da interação nêutron-núcleo através da função de alargamento Doppler. Esta função é calculada numericamente em modernos sistemas de cálculo das constantes de macrogrupo, necessárias para determinação da distribuição de potência de um reator nuclear, sendo usada para o cálculo aproximado das integrais de ressonância em células de combustíveis heterogêneas. Outra importante aplicação da função de alargamento Doppler consiste no cálculo dos fatores de auto-blindagem ressonante para correções das medidas das seções de choque microscópicas pela técnica de ativação. Neste tipo de aplicação é necessário desenvolver aproximações precisas (SHCHERBAKOV & HARADA, 2002) para  $\psi(x, \xi)$ , que sejam convenientes para aplicações e processamento de dados experimentais resultantes da técnica de ativação. No artigo publicado por (SHCHERBAKOV & HARADA, 2002) foi realizado um amplo estudo das aproximações existentes até o presente momento, chegando à conclusão que a aproximação de Padé de 4 pólos (MARTIN & DONOSO, 1980) é a que apresentava melhor precisão

quando usada no cálculo do fator de auto-blindagem da ressonância,  $G_{epit\acute{e}rmico}$  (BEKURTS, 1964).

Serão apresentados nesta tese dois novos métodos para cálculo da função de alargamento Doppler, que conduzem a resultados mais precisos que aqueles obtidos através da aproximação de Padé de 4 pólos (KESHAVAMURTHY & HARISH, 1993).

## 2.2 Aproximação de Bethe e Placzec para função de alargamento Doppler

Os movimentos de agitação térmica dos núcleos dentro do reator estão representados através da seção de choque microscópica de interação nêutron-núcleo. Tais movimentos encontram-se diretamente relacionados com a temperatura do meio, que conseqüentemente levam aos aumentos da largura de ressonâncias (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976), sendo esse fenômeno físico conhecido como alargamento Doppler. O fenômeno de alargamento Doppler é de grande importância para cálculo das integrais de ressonâncias e medidas das seções de choque microscópicas.

Como mencionado anteriormente as seções de choque microscópicas são capazes de representar os movimentos de agitação térmica dos núcleos, conseqüentemente esta dependem fortemente das velocidades relativas entre o nêutron e os núcleos alvos. A seção de choques microscópica pode ser representada através de (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976):

$$\bar{\sigma}(v) = \frac{1}{vN} \int |\mathbf{v} - \mathbf{V}| \sigma(|\mathbf{v} - \mathbf{V}|) P(\mathbf{V}) d^3V \quad (2.1)$$

- $v$  = módulo da velocidade do nêutron;
- $\mathbf{v}$  = velocidade do nêutron;
- $\mathbf{V}$  = velocidade do núcleo;

- $P(\mathbf{V})$  = função de distribuição de velocidade dos núcleos;
- $N$  = densidade de nêutrons;

Para um meio a temperatura absoluta  $T$ , em que os núcleos absorvedores encontram-se em equilíbrio térmico com o meio, a distribuição de velocidade  $P(\mathbf{V})$  é apropriadamente representada pela distribuição de Maxwell-Boltzmann (PATHRIA, 1972) de um gás ideal.

$$P(\mathbf{V}) = N \left( \frac{M}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-MV^2/2kT} \quad (2.2)$$

- $k$  = constante de Boltzmann;
- $T$  = temperatura absoluta do meio;
- $M$  = massa do núcleo;

Quando a temperatura absoluta é aproximadamente zero Kelvin (LAMARSH & BARATTA, 2001), é possível descrever a dependência energética da seção de choque de absorção através de uma simples expressão conhecida como seção de choque de captura ressonante de Breit-Wigner, a qual é capaz de descrever adequadamente os efeitos de alargamento Doppler, a mesma é representada pela seguinte expressão:

$$\sigma_{\gamma}(E_{CM}) = \sigma_0 \frac{\Gamma_{\gamma}}{\Gamma} \left( \frac{E_0}{E_{CM}} \right)^{1/2} \frac{1}{1 + \frac{4}{\Gamma^2} (E_{CM} - E_0)^2}, \quad (2.3)$$

sendo  $\sigma_0$  a seção de choque total na energia  $E_0$ , dada por:

$$\sigma_0 = 4\pi\lambda_0^2 \frac{\Gamma_n}{\Gamma} g$$

- $\Gamma_n$  = largura de nêutron;
- $\Gamma_{\gamma}$  = largura de captura;
- $\Gamma$  = largura total da ressonância;
- $\lambda_0$  = comprimento de onda reduzido;
- $g$  = fator de spin estatístico.

sendo  $E_0$  a energia onde a ressonância ocorre e  $E_{CM}$  a energia do nêutron no sistema centro de massa.

Após algumas manipulações algébricas (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976), pode-se escrever a seção de choque média dada pela equação (2.1), como função da velocidade e da temperatura do meio, conforme mostrado abaixo,

$$\bar{\sigma}_\gamma(v, T) = \frac{1}{\sqrt{\pi}v_{th}^2v} \int_0^\infty dv_r v_r^2 \sigma_\gamma(v_r) \left[ e^{-\frac{(v-v_r)^2}{2v_{th}^2}} - e^{-\frac{(v+v_r)^2}{2v_{th}^2}} \right], \quad (2.4)$$

sendo  $v_r = |\mathbf{v} - \mathbf{V}|$  a velocidade relativa nêutron-núcleo,  $v$  a velocidade do nêutron e  $v_{th} = \sqrt{kT/M}$  a velocidade de cada núcleo absorvedor

Substituindo a expressão para a seção de choque de absorção ressonante, equação (2.3), na equação (2.4) obtém-se uma expressão exata para a seção de choque média.

$$\bar{\sigma}_\gamma(v, T) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \frac{1}{\sqrt{\pi}v_{th}^2v} \int_0^\infty dv_r \frac{v_r}{1 + \frac{4}{\Gamma^2}(E_{CM} - E_0)^2} \left[ e^{-\frac{(v-v_r)^2}{2v_{th}^2}} - e^{-\frac{(v+v_r)^2}{2v_{th}^2}} \right]$$

A equação acima pode ser simplificada após algumas manipulações algébricas (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976), admitindo a seguinte representação:

$$\bar{\sigma}_\gamma(E, T) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \left( \frac{E_0}{E} \right)^{1/2} \Psi(x, \xi), \quad (2.5)$$

sendo

$$\Psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2} \int_{-2E/\Gamma}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \left[ e^{-\frac{(v-v_r)^2}{2v_{th}^2}} - e^{-\frac{(v+v_r)^2}{2v_{th}^2}} \right], \quad (2.6)$$

onde,

$$x \equiv \frac{2(E - E_0)}{\Gamma}, \quad y \equiv \frac{2(E_{CM} - E_0)}{\Gamma} \quad \text{e} \quad \xi \equiv \frac{\Gamma}{(4E_0kT/A)^{1/2}}.$$

Os outros parâmetros citados a seguir são bem estabelecidos na literatura (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976) e compõem a expressão exata da função de alargamento Doppler, equação (2.6), assim como a aproximação proposta por Bethe\* e Placzek:

- $A$  = número de massa;
- $E$  = energia do nêutron incidente;
- $E_{CM} = \frac{1}{2} \mu v_r^2$  = energia do centro de massa;
- $\mu \equiv \frac{mM}{m+M}$  = massa reduzida do sistema;
- $E_0$  = energia em que a ressonância ocorre;
- $\Gamma_D \equiv (4E_0 kT / A)^{1/2}$  = largura Doppler da ressonância;

A expressão proposta por Bethe\* e Placzek para a função de alargamento Doppler pode ser obtida a partir da equação (2.6) admitindo que o termo  $(v+v_r)^2$  é muito maior que  $(v-v_r)^2$  (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976), conforme mostrado pela equação a seguir.

$$\Psi(x, \xi) \approx \frac{\xi}{2} \int_{-2E/\Gamma}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} e^{-\frac{(v-v_r)^2}{2v_{th}^2}}, \quad (2.7)$$

Outras simplificações que podem ser introduzidas na equação (2.7), a fim de se obter a aproximação de Bethe e Placzek, consistem considerar  $\Gamma/E \ll 1$ , desta forma o limite inferior de integração pode ser estendido até  $-\infty$  sem erro apreciável, pois neste caso as regiões que contribui para a integral cumprem a condição  $|E - E_0| \ll E$  e conseqüentemente (2.8) é válida. A outra aproximação consiste em substituir o termo  $(v-v_r)$  por  $(v^2 - v_r^2)/2v_r$  na exponencial, essa aproximação é

---

\* Hans Albrecht Bethe (1906-2005) recebeu o prêmio Nobel de Física pelo estudo da produção da energia solar e estelar. Bethe também ficou conhecido por suas teorias sobre as propriedades atômicas.

plausível visto que para núcleos pesados tem-se  $\mu \approx m$  (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976).

As aproximações realizadas conduzem obtenção da representação integral proposta por Bethe e Placzek para a função de alargamento Doppler e garantem aplicação desta formulação na maioria dos casos práticos de interesse, não se aplicando apenas nos casos de baixas energias de ressonância ( $E < 1eV$ ) e temperaturas muito altas (PALMA, 2007).

$$\Psi(x, \xi) \approx \psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2}. \quad (2.8)$$

A representação integral proposta por Bethe e Placzek\* para a função de alargamento Doppler, dada pela equação (2.8), não admite diretamente uma solução fechada, portanto será proposta uma nova representação integral para função  $\psi(x, \xi)$  a qual conduzirá a uma solução fechada de forma funcional simples. Essa nova representação integral possibilitará ainda que a função  $\psi(x, \xi)$  seja calculada utilizando métodos em expansão em série de Fourier (BUTKOV, 1987).

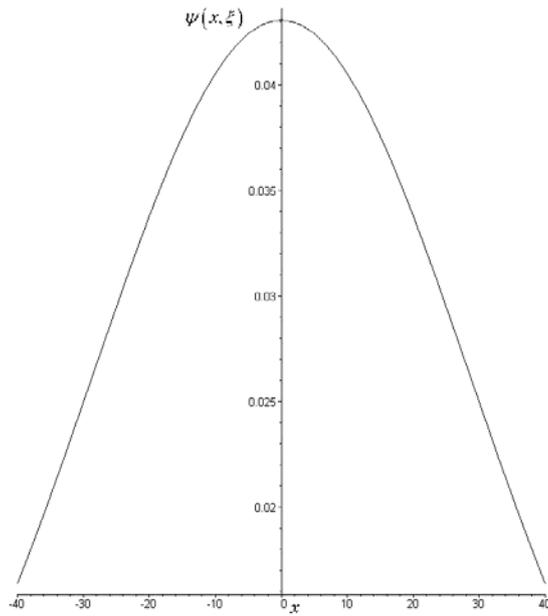
A seguir são apresentadas as principais propriedades da função de alargamento Doppler segundo a aproximação de Bethe e Placzek\*.

### 2.2.1 Propriedades da Função de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$

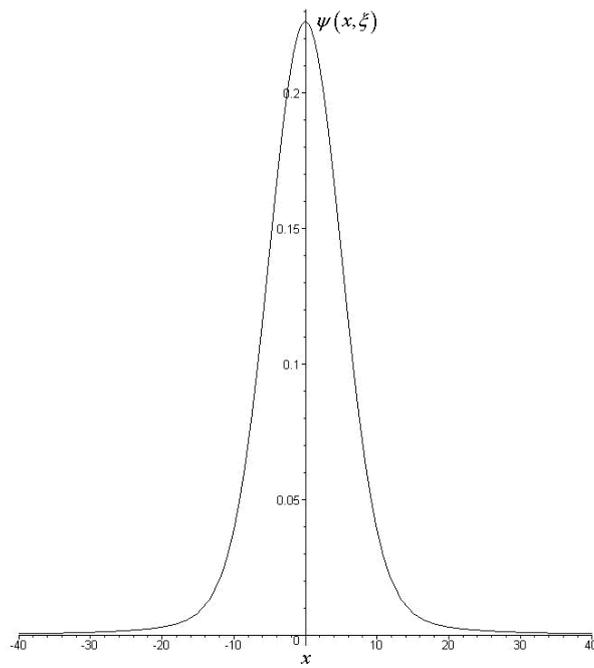
A representação integral proposta pela aproximação de Bethe e Placzek, para a função  $\psi(x, \xi)$ , trata-se de uma função de paridade par, ou seja, uma função simétrica com respeito à variável  $x$ , conforme exemplificado pelas figuras 2.1, 2.2 e 2.3 a seguir:

---

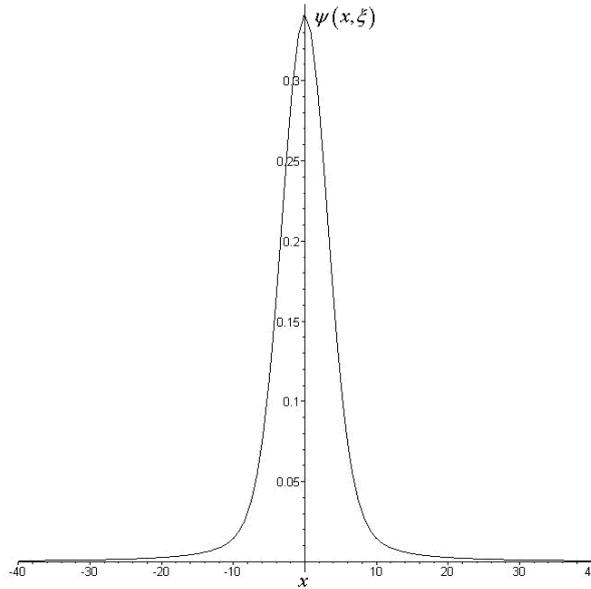
\* Os grandes domínios da atividade científica de Placzek envolveram elementos fundamentais da teoria da espectroscopia Raman, espectroscopia molecular em gases e líquidos, física matemática e física de nêutrons. Juntamente com Otto Frisch, ele sugeriu uma relação experimental direta da fissão nuclear e com Niels Bohr e outros, ele foi fundamental para esclarecer o papel do urânio 235 na reação em cadeia.



**Figura 2.1 - Função de alargamento Doppler para  $\psi(x, \xi = 0,05)$**



**Figura 2.2 - Função de alargamento Doppler para  $\psi(x, \xi = 0,30)$**



**Figura 2.3 - Função de alargamento Doppler para  $\psi(x, \xi = 0,50)$**

Através das figuras 2.1, 2.2 e 2.3 é possível verificar que a função de alargamento Doppler trata-se de uma função estritamente positiva e que a mesma sofre um alargamento à medida que a variável  $\xi$  diminui, ou seja, a função  $\psi(x, \xi)$  varia inversamente com a temperatura absoluta do meio.

Para baixas temperaturas, ou seja, quando a temperatura do meio tende a zero, a função de alargamento Doppler pode ser representada apenas pela função de Lorentz, conforme mostrado abaixo:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \lim_{T \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2\right] = \frac{1}{1+x^2} \quad (2.9)$$

A equação (2.9) é conhecida como aproximação assintótica (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976) da função de alargamento Doppler.

No entanto para altas temperaturas, ou seja, quando a temperatura do meio tende a infinito, a função de alargamento Doppler pode ser representada através da função gaussiana.

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2\right] = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4}x^2\right) \quad (2.10)$$

Outra propriedade importante, que vale ser destacada é que a área sobre a curva da função de alargamento Doppler não depende da temperatura do meio, conforme mostrado na figura 2.4. Através desta propriedade pode-se facilmente demonstrar que a área sobre uma ressonância isolada é constante

Na figura 2.4 são exibidas três curvas diferentes para cada valor de  $\xi$ , as áreas sobre cada uma dessas curvas são iguais a  $\pi$ , como demonstrado a seguir.

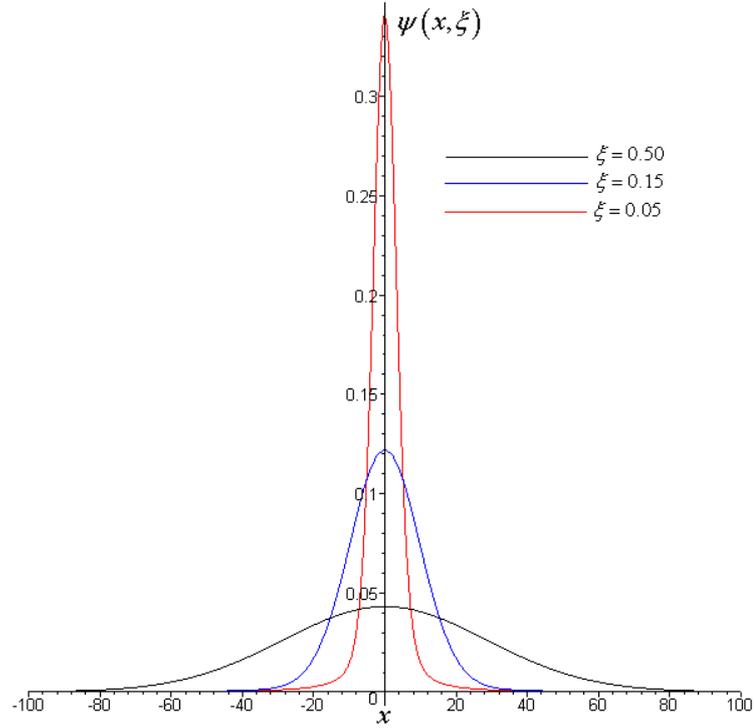
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, \xi) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2} dx. \quad (2.11)$$

Como o lado direito da equação (2.11) trata-se de integrais separáveis, logo se pode escrever que,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, \xi) dx = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2} dx. \quad (2.12)$$

As integrais que surgem na equação (2.12) são conhecidas, e as mesmas fornecem o seguinte resultado para a área sobre a curva da função de alargamento Doppler,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, \xi) dx = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2} dx = \pi. \quad (2.13)$$



**Figura 2.4** –  $\psi(x, \xi = 0,05)$ ,  $\psi(x, \xi = 0,15)$  e  $\psi(x, \xi = 0,5)$

A seguir são apresentados alguns casos particulares em que a função de alargamento Doppler possui solução analítica.

$$\psi(0, \sqrt{2}\xi) = \xi \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left[ 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right) \right]. \quad (2.14)$$

e

$$\psi(x, \xi) \leq \psi(0, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} e^{-\frac{\xi^2}{4}y^2}, \quad (2.15)$$

logo, através da equação (2.15) se pode concluir que:

$$\psi(0, \xi) = \xi \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{-\frac{\xi^2}{4}} \left[ 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{\sqrt{2}}\right) \right] < 1, \quad (2.16)$$

onde  $\operatorname{erf}(x)$  é denominada função erro (ARFKEN, 1988). Ainda na equação (2.16)

quando  $\xi$  é muito pequeno, ou seja,  $\xi \rightarrow 0$ , tem-se que a função de alargamento

Doppler é inversamente proporcional à temperatura do meio.

$$\psi(0, \xi) = \xi \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (2.17)$$

## 2.3 Principais Métodos de Cálculo para Função de Alargamento Doppler

Nesta seção são descritos de forma clara e objetiva os principais métodos de aproximação para função de alargamento Doppler, segundo a aproximação de Bethe e Placzek, equação (2.8).

### 2.3.1 Expansão Assintótica

Um dos métodos de aproximação mais prático para cálculo da função de alargamento Doppler, é conhecido como método da expansão assintótica, o qual consiste na expansão em série de Taylor do termo  $\frac{1}{1+y^2}$  da função de alargamento Doppler, equação (2.8), em torno de  $y = x$ ,

$$\frac{1}{1+y^2} = \frac{1}{1+x^2} - \frac{2x}{(1+x^2)^2}(y-x) + \frac{-1+3x^2}{(1+x^2)^2}(y-x)^2 - \frac{4x(-1+x^2)}{(1+x^2)^4}(y-x)^3 + \dots$$

Substituindo a equação acima na aproximação de Bethe e Placzek para função de alargamento Doppler, equação (2.8), e integrando termo a termo, se obtêm finalmente a expansão assintótica. Essa expressão é válida apenas para  $|x.\xi| > 6$  (BEYNON & GRANT, 1963).

$$\psi(x, \xi) = \frac{1}{1+x^2} \left\{ 1 + \frac{2}{\xi^2} \frac{(3x^2-1)}{(1+x^2)^2} + \frac{12}{\xi^4} \frac{(5x^4-10x^2+1)}{(1+x^2)^4} + \dots \right\} \quad (2.18)$$

Apesar da equação (2.18) possuir algumas limitações, a mesma é bastante útil para se determinar o comportamento da função de alargamento Doppler em condições específicas. Para valores elevados de  $x$ , é possível observar que a função  $\psi(x, \xi)$  apresenta a seguinte forma assintótica:

$$\psi(x, \xi) \approx \frac{1}{1+x^2} \quad (2.19)$$

Através desta mesma equação é possível obter também o comportamento da função de alargamento Doppler para temperaturas próximas de zero Kelvin.

### 2.3.2 Métodos de Beynon e Grant

Beynon e Grant (BEYNON & GRANT, 1963) propuseram dois diferentes métodos de cálculos para a função de alargamento Doppler e para o termo de interferência. O primeiro método consiste em expandir a parte exponencial dos integrandos da função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$  em polinômios de Chebyshev e integrar termo a termo. Esse processo introduz duas novas variáveis  $a = \frac{1}{2}\xi$  e  $b = \xi \cdot x$ , sendo  $x$  e  $\xi$  definido na página 07. Desta forma as séries assumem as seguintes formas:

$$\psi(a, b) = \frac{1}{a} \left\{ \sqrt{\pi} \cos(ab) [1 - E_2(a)] e^{a^2} + J(a, b) \right\} e^{-\frac{1}{4}b^2} \quad (2.20)$$

onde

$$J(a, b) = \frac{1}{a} \left\{ \frac{1}{2!} (ab)^2 - \frac{1}{4!} (ab)^4 + \frac{1}{6!} (ab)^6 \dots \right\} + \frac{1}{2a^3} \left\{ \frac{1}{4!} (ab)^4 - \frac{1}{6!} (ab)^6 \dots \right\} + \dots + \frac{1}{\sqrt{\pi} a^{2n+1}} \Gamma\left(\frac{2n+1}{2}\right) \cdot \left\{ \frac{1}{(2n+2)!} (ab)^{2(n+1)} \dots \right\} +$$

e

$$E_2(a) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^a e^{-y^2} dy.$$

Para valores superiores a  $|x \cdot \xi| > 6$  (BEYNON & GRANT, 1963) utiliza-se da forma assintótica da função  $\psi(x, \xi)$ .

Outro método alternativo proposto por Beynon e Grant (BEYNON & GRANT, 1963) consiste em truncar a expansão em série para a função  $\psi(x, \xi)$  após poucos termos, e calcular o resto da integral através do método da quadratura de Gauss-Hermite. Conforme descrito a seguir:

Truncando a expansão em série em apenas dois termos, obtém-se finalmente as seguintes representação para a função  $\psi(x, \xi)$ .

$$\psi(a,b) = a \left\{ \sqrt{\pi} \left[ 1 - \frac{1}{2}(ab)^2 \right] \left[ 1 - E_2(a) \right] e^{a^2} + \frac{1}{2} ab^2 + K(a,b) \right\} e^{-\frac{1}{4}b^2} \quad (2.21)$$

onde:

$$K(a,b) = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \cosh(by) - 1 - \frac{1}{2}(by)^2 \right] e^{-y^2} \frac{dy}{a+y^2} \quad (2.22)$$

Aplicando-se o método da quadratura de Gauss-Hermite a equação (2.22), obtém-se a seguinte expressão para  $K(a,b)$ .

$$K(a,b) = \frac{2a}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^{10} \left( \frac{\cosh(b\alpha_j) - 1}{a^2 + \alpha_j^2} - \frac{1}{2} \frac{(b\alpha_j)^2}{a^2 + \alpha_j^2} \right) H_j \quad (2.23)$$

onde:

$\alpha_j$  e  $H_j$  são os pontos e pesos da quadratura de Gauss-Hermite (BEYNON & GRANT, 1963).

Segundo Beynon e Grant a quadratura empregada na equação (2.23) com dez termos combinada com a expressão (2.23) é bastante satisfatória para valores para  $|x.\xi| < 8$ , enquanto que para o caso em que  $|x.\xi| > 8$ , utiliza-se a forma assintótica a seguir:

$$\psi = \frac{1}{1+x^2} \sum_{j=1}^{10} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1 + v\alpha_j^2}{(1 + v\alpha_j^2)^2 - (bv\alpha_j)^2} \right) H_j \quad (2.24)$$

onde:

$$v = \frac{4}{\xi^2(1+x^2)}$$

Vale ressaltar que os resultados obtidos pelo primeiro método apresentado tornaram-se referência para vários trabalhos relacionados à função de alargamento Doppler.

### 2.3.3 Método de Campos e Martinez

Neste método a função de alargamento Doppler, é representada através da seguinte equação diferencial parcial (CAMPOS & MARTINEZ, 1987):

$$\frac{4}{\xi^2} \frac{\partial^2 \psi(x, \xi)}{\partial x^2} + 4x \frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} + (\xi^2 x^2 + \xi^2 + 2) \psi(x, \xi) = \xi^2 \quad (2.25)$$

Impondo a equação (2.25) sobre as seguintes condições iniciais (CAMPOS & MARTINEZ, 1987):

$$\psi(x, \xi) \Big|_{x=0} = \psi(0, \xi) = \psi_0 \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0 \quad (2.27)$$

Através da equação (2.25), juntamente com as condições de contorno apresentadas, é possível encontrar uma representação alternativa para função de alargamento Doppler.

Admitindo-se que a função  $\psi(x, \xi)$  possa ser expressa pela seguinte expansão em série

$$\psi(x, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(\xi) x^n \quad (2.28)$$

Substituindo-se a expansão acima para,  $\psi(x, \xi)$ , na equação diferencial dada por (2.25), obtém-se após alguma manipulação algébrica, a seguinte equação polinomial:

$$\left[ \frac{8}{\xi^2} c_2 + (\xi^2 + 2) c_0 \right] + \left[ \frac{24}{\xi^2} c_3 + (\xi^2 + 6) c_1 \right] x + \sum_{n=2}^{\infty} \left[ \frac{4}{\xi^2} (n+2)(n+1) c_{n+2} + (4n + \xi^2 + 2) c_n + \xi^2 c_{n-2} \right] x^n = \xi^2 \quad (2.29)$$

onde:

$$c_0 = \psi_0,$$

$$c_1 = \frac{\xi^2}{8} \left[ \xi^2 - (\xi^2 + 2)\psi_0 \right]$$

e

$$c_{n+1} = -\frac{\xi^2 (4n + \xi^2 + 2)c_n + \xi^2 c_{n-1}}{4(n+2)(n+1)}.$$

A representação em série para função de alargamento Doppler, dada pela equação (2.28), é válida apenas para  $|x.\xi| < 6$ . Para os casos em que  $|x.\xi| > 6$ , (CAMPOS & MARTINEZ, 1987) utilizaram a forma assintótica dada pela equação (2.18).

### 2.3.4 Aproximação de Padé para a Função de Alargamento Doppler

A aproximação de Padé de 4 pólos (MARTIN & DONOSO, 1980 e KESHAVAMURTHY & HARISH, 1993) é uma das aproximações mais utilizadas para o cálculo da função de alargamento Doppler e suas aplicações, tais como: Cálculo das integrais de ressonâncias e determinação da largura prática de ressonância. A aproximação de Padé é uma aproximação capaz de representar de forma eficaz funções com pólos, através de uma aproximação racional, ou seja, uma razão entre polinômios. A formulação matemática para a aproximação de Padé encontra-se descrita com maiores detalhes no apêndice A.

A aproximação de Padé de 4 pólos para função de alargamento Doppler, foi motivada através do trabalho de (MARTIN & DONOSO, 1980), onde propuseram aproximar a função de dispersão de plasma  $Z(t)$ , através de uma aproximação racional.

$$Z(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{z+t} e^{-z^2}, \quad (2.30)$$

onde:

$$t = x + iy$$

Aproximando a função de dispersão de plasma  $Z(t)$  pela aproximação de Padé, obtém-se a seguinte expressão analítica:

$$Z(t) \cong \frac{\sum_{i=0}^{n-1} p_i t^i}{1 + \sum_{j=1}^n q_j t^j}, \quad (2.31)$$

Motivados pela aproximação proposta por (MARTIN & DONOSO, 1980), equação (2.31), (KESHAVAMURTHY & HARISH, 1993) a existência de uma correlação direta entre a função de dispersão de plasma  $Z(t)$  e a função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$ , dada pela expressão abaixo:

$$\psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2} \text{Im} Z(t). \quad (2.32)$$

Utilizando a aproximação da pela equação (2.32), Keshavamurthy & Harish propuseram aproximar de forma analítica a função de alargamento Doppler (KESHAVAMURTHY & HARISH, 1993), através da aproximação de Padé de 4 pólos, qual seja,

$$\psi(x, \xi) = h \frac{a_0 + a_2 (hx)^2 + a_4 (hx)^4 + a_6 (hx)^6}{b_0 + b_2 (hx)^2 + b_4 (hx)^4 + b_6 (hx)^6 + b_8 (hx)^8}. \quad (2.33)$$

Os coeficientes da equação (2.33), utilizados para o cálculo da função de alargamento Doppler são apresentados nas tabelas 2.1 e 2.2.

Tabela 2.1 - Os coeficientes  $p$  e  $q$  da aproximação de Padé de 4 pólos

$p_0 = \sqrt{\pi}$	$q_1 = \frac{\sqrt{\pi}(-9\pi + 28)}{2(6\pi^2 - 29\pi + 32)}$
$p_1 = \frac{-15\pi^2 + 88\pi - 128}{2(6\pi^2 - 29\pi + 32)}$	$q_2 = \frac{36\pi^2 - 195\pi + 256}{6(6\pi^2 - 29\pi + 32)}$
$p_2 = \frac{\sqrt{\pi}(33\pi - 104)}{6(6\pi^2 - 29\pi + 32)}$	$q_3 = \frac{\sqrt{\pi}(-33\pi + 104)}{6(6\pi^2 - 29\pi + 32)}$
$p_3 = \frac{-9\pi^2 + 69\pi - 128}{3(6\pi^2 - 29\pi + 32)}$	$q_4 = \frac{9\pi^2 - 69\pi + 128}{3(6\pi^2 - 29\pi + 32)}$

Tabela 2.2 - Os coeficientes  $h$ ,  $a$  e  $b$  da aproximação de Padé de 4 pólos

$h = \frac{\xi}{2}$
$a_0 = (p_0 + p_1h - p_2h^2 - p_3h^3)(1 - q_1h - q_2h^2 + q_3h^3 + q_4h^4)$
$a_2 = (p_2 + 3p_3h)(1 - q_1h - q_2h^2 + q_3h^3 + q_4h^4) + (p_0 + p_1h - p_2h^2 - p_3h^3)(q_2 - 3q_3h - 6q_4h^2) + (-p_1 + 2p_2h + 3p_3h^2)(q_1 + 2q_2h - 3q_3h^2 - 4q_4h^3)$
$a_4 = q_4(p_0 + p_1h - p_2h^2 - p_3h^3) + (p_2 + 3p_3h)(q_2 - 3q_3h - 6q_4h^2) - p_3(q_1 + 2q_2h - 3q_3h^2 - 4q_4h^3) + (-p_1 + 2p_2h + 3p_3h^2)(q_3 + 4q_4h)$
$a_6 = q_4(p_2 + 3p_3h) - p_3(q_3 + 4q_4h)$
$b_0 = (1 - q_1h - q_2h^2 + q_3h^3 + q_4h^4)^2$
$b_2 = 2(1 - q_1h - q_2h^2 + q_3h^3 + q_4h^4)(q_2 - 3q_3h - 6q_4h^2) + (q_1 + 2q_2h - 3q_3h^2 - 4q_4h^3)^2$
$b_4 = (q_2 - 3q_3h - 6q_4h^2)^2 + 2q_4(1 - q_1h - q_2h^2 + q_3h^3 + q_4h^4) + 2(q_1 + 2q_2h - 3q_3h^2 - 4q_4h^3)(q_3 + 4q_4h)$
$b_6 = 2q_4(q_2 - 3q_3h - 6q_4h^2) + (q_3 + 4q_4h)^2$
$b_8 = q_4^2$

A partir dos coeficientes das tabelas 2.1 e 2.2, e da equação (2.33), obtém-se finalmente a seguinte aproximação analítica para função  $\psi(x, \xi)$ , segundo a aproximação de Padé de 4 pólos:

$$\psi(x, \xi) = \frac{\eta(x, \xi)}{\omega(x, \xi)}, \quad (2.34)$$

onde  $\eta(x, \xi)$  e  $\omega(x, \xi)$  são os seguintes polinômios:

$$\begin{aligned} \eta(x, \xi) = & 2\xi \cdot (7,089815404 \cdot 10^{22} + 1,146750844 \cdot 10^{23} \xi + 8,399725059 \cdot 10^{22} \xi^2 \\ & + 3,622207053 \cdot 10^{22} \xi^3 + 9,957751740 \cdot 10^{21} \xi^4 + 1,749067258 \cdot 10^{21} \xi^5 \\ & + 1,835165213 \cdot 10^{20} \xi^6 + 8,940072699 \cdot 10^{18} \xi^7 - 2,539736657 \cdot 10^{21} \xi^2 x^2 \\ & + 2,069483991 \cdot 10^{21} \xi^3 x^2 + 3,972393548 \cdot 10^{21} \xi^4 x^2 + 1,919319560 \cdot 10^{21} \xi^5 x^2 \\ & + 3,670330426 \cdot 10^{20} \xi^6 x^2 + 2,682021808 \cdot 10^{19} \xi^7 x^2 + 1,048748026 \cdot 10^{19} \xi^4 x^4 \\ & + 1,702523008 \cdot 10^{20} \xi^5 x^4 + 1,835165209 \cdot 10^{20} \xi^6 x^4 + 2,682021806 \cdot 10^{19} \xi^7 x^4 \\ & + 8,940072688 \cdot 10^{18} \xi^7 x^6) \end{aligned} \quad (2.35)$$

e

$$\begin{aligned} \eta(x, \xi) = & (3,490642925 \cdot 10^{23} \xi + 3,464999381 \cdot 10^{23} \xi^2 + 2,050150991 \cdot 10^{23} \xi^3 \\ & + 7,933771118 \cdot 10^{22} \xi^4 + 3,670330427 \cdot 10^{20} \xi^7 x^6 + 1,788014539 \cdot 10^{19} \xi^8 x^8 \\ & + 3,670330426 \cdot 10^{20} \xi^7 + 3,533894806 \cdot 10^{21} \xi^6 + 1,788014541 \cdot 10^{19} \xi^8 \\ & + 2,062859460 \cdot 10^{22} \xi^5 + 3,426843796 \cdot 10^{22} \xi^2 x^2 + 5,586613630 \cdot 10^{22} \xi^4 x^2 \\ & + 2,649703323 \cdot 10^{22} \xi^5 x^2 + 6,613512625 \cdot 10^{22} \xi^3 x^2 + 1,101099129 \cdot 10^{21} \xi^7 x^2 \\ & + 7,301013353 \cdot 10^{21} \xi^6 x^2 + 3,590774413 \cdot 10^{21} \xi^4 x^4 + 1,101099125 \cdot 10^{21} \xi^7 x^4 \\ & + 5,868438581 \cdot 10^{21} \xi^5 x^4 + 4,000342261 \cdot 10^{21} \xi^6 x^4 + 7,152058156 \cdot 10^{19} \xi^8 x^2 \\ & + 2,332237305 \cdot 10^{20} \xi^6 x^6 + 1,072808721 \cdot 10^{20} \xi^8 x^4 + 7,152058152 \cdot 10^{19} \xi^8 x^6) \end{aligned} \quad (2.36)$$

A equação (2.34) juntamente com as equações (2.35) e (2.36) trata-se de uma aproximação amplamente empregada para o cálculo da função de alargamento Doppler.

### 2.3.5 Método de Palma, Martinez e Silva

Neste método a função de alargamento Doppler é representada novamente através de uma equação diferencial parcial, proposta por Campos e Martinez (CAMPOS & MARTINEZ, 1987),

$$\frac{\partial^2 \psi(x, \xi)}{\partial x^2} + x \xi^2 \frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} + \frac{\xi^2}{4} (x^2 \xi^2 + \xi^2 + 2) \psi(x, \xi) = \frac{\xi^4}{4} \quad (2.37)$$

sujeita às seguintes condições iniciais:

$$\psi(x, \xi)|_{x=0} \equiv \psi_0 = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right)\right] \quad (2.38)$$

e

$$\frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0. \quad (2.39)$$

A equação diferencial que rege a função de alargamento Doppler, pode ser resolvida utilizando-se o método de Frobenius para encontrar as soluções homogêneas e o método da variação de parâmetros para se encontrar a solução particular. As soluções linearmente independentes da parte homogênea da equação (2.37), obtidas a partir do método de Frobenius (ARFKEN, 2007), são dadas por:

$$\psi_1(x, \xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \quad (2.40)$$

e

$$\psi_2(x, \xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right). \quad (2.41)$$

Através das soluções linearmente independentes, expressas pelas equações (2.40) e (2.41), juntamente com as condições iniciais expressas pelas equações (2.38) e (2.39), empregando-se o método da variação de parâmetros, é possível encontrar finalmente uma solução para função de alargamento Doppler (PALMA et al., 2007).

$$\psi(x, \xi) = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left[-\frac{1}{4}\xi^2(x^2 - 1)\right] \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \left\{1 + \operatorname{Re} \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) + \tan\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \operatorname{Im} \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right)\right\}. \quad (2.42)$$

A solução proposta por Palma et al. (PALMA et al., 2007) para o cálculo de  $\psi(x, \xi)$ , equação (2.42), é muito mais geral que a solução proposta por Campos & Martinez (CAMPOS & MARTINEZ, 1987), pois a mesma não se limita ao intervalo  $|x \cdot \xi| < 6$ , sendo válida para qualquer faixa de energia e temperatura cuja aproximação de Bethe e Placzek seja válida.

## 2.4 O Termo de Interferência

A seção de choque microscópica média de espalhamento leva em consideração os efeitos de interferência entre a seção choque microscópica de espalhamento ressonante e potencial.

A seção de choque microscópica de espalhamento ressonante é apropriadamente caracterizada pelo formalismo de Breit-Wigner através da seguinte expressão:

$$\sigma_s(E_c) = \sigma_0 \frac{\Gamma_n}{\Gamma} \left( \frac{E_0}{E_c} \right)^{1/2} \frac{1}{1+y^2} + \sigma_0 \frac{2R}{\lambda_0} \frac{y}{1+y^2} + 4\pi R^2 \quad (2.43)$$

sendo,  $R = 1,25 \times 10^{-13} A^{1/3} \text{ cm}$  o raio nuclear.

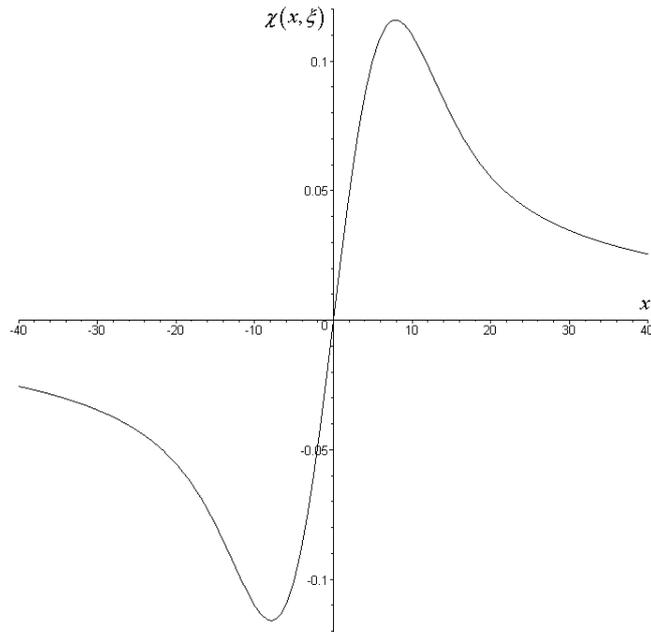
Combinando a seção de choque microscópica de espalhamento ressonante, equação (2.43), com a equação (2.1), é possível obter finalmente uma expressão para a seção de choque microscópica média de espalhamento.

$$\sigma_s(E_c) = \sigma_0 \frac{\Gamma_n}{\Gamma} \psi(x, \xi) + \sigma_0 \frac{2R}{\lambda_0} \chi(x, \xi) + 4\pi R^2 \quad (2.44)$$

onde  $\chi(x, \xi)$  é o termo de interferência, caracterizado por:

$$\chi(x, \xi) = \frac{\xi}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y dy}{1+y^2} e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2} \quad (2.45)$$

O termo de interferência, equação (2.45), trata-se de uma função de paridade ímpar, ou seja, uma função anti-simétrica com respeito à variável  $x$ , conforme exemplificado pela figura 2.5 a seguir:



**Figura 2.5 – Termo de interferência para  $\chi(x, \xi = 0,25)$**

O termo de interferência possui uma aproximação assintótica semelhante aquela apresentada para função  $\psi(x, \xi)$ . Procedendo de forma análoga ao que foi apresentado na seção 2.3.1 pode-se obter a seguinte expressão para  $\chi(x, \xi)$ :

$$\chi(x, \xi) = \frac{2x}{1+x^2} \left\{ 1 + \frac{2}{\xi} \frac{(x^2-3)}{(1+x^2)^2} + \dots \right\}, \quad (2.46)$$

a qual é válida para  $|x \cdot \xi| > 6$ .

No próximo capítulo são apresentados detalhadamente os métodos empregados para obtenção das novas representações integrais para a função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$  e para o termo de interferência  $\chi(x, \xi)$ , assim como as principais ferramentas matemáticas utilizadas.

# CAPÍTULO III

## NOVAS REPRESENTAÇÕES INTEGRAIS PARA FUNÇÃO DE ALARGAMENTO DOPPLER E PARA O TERMO DE INTERFERÊNCIA

### 3.1 Introdução

Neste capítulo são apresentadas as novas representações integrais para função de alargamento Doppler e para o termo de interferência, as quais podem ser interpretadas como sendo as transformadas cosseno e seno de Fourier.

Para uma melhor compreensão da obtenção das novas integrais para  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$ , é sugerido a leitura do Apêndice A desta tese, onde é apresentado um breve resumo sobre a análise de Fourier, considerada a ferramenta central para as soluções fechadas das funções  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$ .

### 3.2 Nova representação integral da função de alargamento Doppler

A função de alargamento Doppler, dada pela equação (2.8), permite obter uma interpretação matemática muito mais elegante que de uma simples integral. Basta para tanto aplicar a seguinte mudança de variáveis,  $u = \frac{\xi}{2}(x - y)$ , a fim de se obter uma representação funcional mais adequada para a função de alargamento Doppler.

$$\psi(x, \xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-u^2} du}{1 + \left(x - 2\frac{u}{\xi}\right)^2} \quad (3.1)$$

A forma integral representada pela equação (3.1) para  $\psi(x, \xi)$  é interpretada como sendo a convolução da função lorentziana com uma função gaussiana, conforme exemplificado pela equação a seguir:

$$\psi(x, \xi) = f * g \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} g(u) f(x-u) du = \mathcal{F}^{-1} \{ \mathcal{F} \{ f(x) \} \mathcal{F} \{ g(x) \} \}, \quad (3.2)$$

onde  $f(x-u) = \frac{1}{1 + \left(x - 2\frac{u}{\xi}\right)^2}$  é a função lorentziana e  $g(u) = \frac{e^{-u^2}}{\sqrt{\pi}}$  a função

gaussiana.

A partir da interpretação matemática dada pela equação (3.2) é possível encontrar uma nova representação integral para  $\psi(x, \xi)$ , bastando apenas observar que a função  $f(x-u)$  admite uma representação integral baseada na transformada cosseno de Fourier (POLYANIN & MANZHIROV, 1998), conforme mostrado a seguir:

$$f(x-u) = \int_0^{\infty} e^{-w} \cos \left[ \left( x - 2\frac{u}{\xi} \right) w \right] dw \quad (3.3)$$

Substituindo a equação (3.3) em (3.2) obtém-se a seguinte expressão para o termo de convolução.

$$f * g \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} g(u) \int_0^{\infty} e^{-w} \cos \left[ \left( x - 2\frac{u}{\xi} \right) w \right] dw du \quad (3.4)$$

Utilizando a propriedade da integral de convolução pode-se trocar a ordem de integração da equação (3.4), a fim de se obter a seguinte expressão,

$$f * g \equiv \int_0^{\infty} e^{-w} \int_{-\infty}^{+\infty} g(u) \cos \left[ \left( x - 2\frac{u}{\xi} \right) w \right] du dw = \int_0^{\infty} e^{-w} I(w) dw \quad (3.5)$$

onde:

$$I(w) \equiv \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \cos \left[ \left( x - 2\frac{u}{\xi} \right) w \right] du . \quad (3.6)$$

A expressão  $I(w)$  dada pela equação (3.6) pode ser simplificada utilizando-se as propriedades da função cosseno (ARFKEN, 1988), conduzindo a seguinte expressão,

$$I(w) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(xw) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \cos\left[\left(2\frac{u}{\xi}\right)w\right] du . \quad (3.7)$$

A integral apresentada na equação (3.7) admite solução fechada (GRADSHTEYN, 1980), logo é possível obter a seguinte expressão para  $I(w)$ .

$$I(w) = e^{-\frac{w^2}{\xi^2}} \cos(xw) . \quad (3.8)$$

Substituindo a equação (3.8) na equação (3.5), obtém-se finalmente a nova representação integral para função de alargamento Doppler (GONÇALVES *et al.*, 2007, 2008).

$$\psi(x, \xi) = \int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} \cos(wx) dw . \quad (3.9)$$

Na próxima seção é realizada uma breve descrição do método de obtenção da nova representação integral do termo de interferência

### 3.3 Nova representação integral do termo de interferência

A representação integral do termo de interferência (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976) é muito semelhante à representação proposta por Bethe & Placzek para função de alargamento Doppler, logo é possível intuir que é possível obter uma nova representação integral para  $\chi(x, \xi)$  semelhante àquela apresentada pela equação (3.23) baseada na transformada de Fourier. Para se obter a nova forma integral para o termo de interferência deve-se proceder de forma análoga ao apresentado na seção 3.2.

$$\chi(x, \xi) = \frac{\xi}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y}{1+y^2} e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2} dy \quad (3.10)$$

A representação integral padrão (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976), representada na equação (3.10) para o termo de interferência, admite também uma interpretação matemática baseada na integral de convolução. Para tanto é necessário

realizar a seguinte mudança de variáveis,  $u = \frac{\xi}{2}(x-y)$ , a fim de se obter uma representação funcional mais adequada para  $\chi(x, \xi)$ .

$$\chi(x, \xi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-u^2} (x - 2u/\xi) du}{1 + \left(x - 2\frac{u}{\xi}\right)^2} \quad (3.11)$$

A representação integral apresentada pela equação (3.11) para  $\chi(x, \xi)$  é matematicamente interpretada como sendo a convolução da função lorentziana com a função gaussiana, conforme exemplificado pela equação a seguir:

$$\chi(x, \xi) = \tilde{f} * \tilde{g} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{g}(u) \tilde{f}(x-u) du = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{F} \{ \tilde{f}(x) \} \mathcal{F} \{ \tilde{g}(x) \} \right\}, \quad (3.12)$$

onde,  $\tilde{f}(x-u) = \frac{(x-2u/\xi)}{1 + \left(x-2\frac{u}{\xi}\right)^2}$  é a função lorentziana e  $\tilde{g}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-u^2}$  a função

gaussiana.

A função  $\tilde{f}(x-u)$  pode ser representada através da transformada seno de Fourier (POLYANIN & MANZHIROV, 1998),

$$\tilde{f}(x-u) = \int_0^{\infty} e^{-w} \sin \left[ \left( x - 2\frac{u}{\xi} \right) w \right] dw. \quad (3.13)$$

Substituindo a equação (3.13) em (3.12) obtém-se a seguinte expressão para o termo de convolução.

$$\tilde{f} * \tilde{g} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{g}(u) \int_0^{\infty} e^{-w} \sin \left[ \left( x - 2\frac{u}{\xi} \right) w \right] dw du \quad (3.14)$$

Aplicando-se a propriedade da integral de convolução, pode-se trocar a ordem de integração da equação (3.14), para obter a seguinte expressão,

$$\tilde{f} * \tilde{g} = \int_0^{\infty} e^{-w} I(w) dw \quad (3.15)$$

sendo,

$$I(w) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \sin \left[ \left( x - 2 \frac{u}{\xi} \right) w \right] du . \quad (3.16)$$

A integral dada pela equação (3.16) pode ser simplificada utilizando-se as propriedades da função seno (ARFKEN, 1988), conduzindo a seguinte expressão,

$$I(w) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sin(xw) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \cos \left[ \left( 2 \frac{u}{\xi} \right) w \right] du - \quad (3.17)$$

$$- \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cos(xw) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \sin \left[ \left( 2 \frac{u}{\xi} \right) w \right] du$$

As integrais apresentadas pela na equação (3.17) admitem as seguintes soluções segundo (GRADSHTEYN, 1980).

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \sin(xw) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \cos \left[ \left( 2 \frac{u}{\xi} \right) w \right] du = 2 e^{-\frac{w^2}{\xi^2}} \sin(xw)$$

e

$$- \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cos(xw) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \sin \left[ \left( 2 \frac{u}{\xi} \right) w \right] du = 0,$$

logo se pode concluir que,

$$I(w) = 2 e^{-\frac{w^2}{\xi^2}} \sin(xw) . \quad (3.18)$$

Substituindo a equação (3.18) na equação (3.15), obtém-se a nova representação integral para o termo de interferência.

$$\chi(x, \xi) = 2 \int_0^{\infty} e^{-w^2 \frac{w^2}{\xi^2}} \sin(xw) dw . \quad (3.19)$$

A integrais dadas pelas equações (3.9) e (3.19) são as novas representações integrais da função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$  e do termo de interferência  $\chi(x, \xi)$ , tais aproximações preservam as mesmas características das funções

originais, além disso, admitem serem interpretadas como sendo as transformadas cosseno e seno de Fourier da função  $e^{-w-\frac{w^2}{\xi^2}}$ .

Na próxima seção são apresentadas as soluções fechadas para as integrais de Fourier, dadas pelas equações (3.9) e (3.19).

### 3.4 Soluções fechadas das novas representações integrais de $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$

Nesta seção são apresentadas de forma objetiva as soluções fechadas para as funções de alargamento Doppler e para o termo de interferência e suas respectivas aproximações baseadas na série de Fourier. É apresentando também uma nova expansão assintótica para a função  $\psi(x, \xi)$ .

#### 3.4.1 Solução fechada da nova representação integral da função $\psi(x, \xi)$

A partir da nova representação integral da função de alargamento Doppler, dada pela equação (3.23), é possível encontrar uma solução fechada para  $\psi(x, \xi)$ . Para tanto, deve-se primeiramente escrever a equação (3.9) da seguinte forma:

$$\psi(x, \xi) = \frac{1}{2} \left[ \int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2wa} dw + \int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2wb} dw \right], \quad (3.20)$$

onde:

$$a \equiv \frac{(1-ix)}{2} \quad (3.21)$$

e

$$b \equiv \frac{(1+ix)}{2}. \quad (3.22)$$

As integrais apresentadas pela equação (3.20) podem ser reescritas de forma ainda mais simplificadas como (GONÇALVES *et al.*, 2007, 2008),

$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2wa} dw = e^{a^2 \xi^2} \int_0^{\infty} e^{-\left(\frac{w}{\xi} + a \xi\right)^2} dw \quad (3.23)$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2wb} dw = e^{b^2 \xi^2} \int_0^{\infty} e^{-\left(\frac{w}{\xi} + b \xi\right)^2} dw. \quad (3.24)$$

Utilizando-se as expressões acima é possível encontrar uma solução fechada para a equação (3.20), bastando apenas aplicar uma simples mudança de variáveis,

$$z = \frac{w}{\xi} + a \xi \text{ e } t = \frac{w}{\xi} + b \xi, \text{ nas integrais do lado direito das equações (3.23) e (3.24)}$$

para obter as seguintes expressões.

$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2wa} dw = \xi e^{a^2 \xi^2} \int_{a\xi}^{\infty} e^{-z^2} dz \quad (3.25)$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2wb} dw = \xi e^{b^2 \xi^2} \int_{b\xi}^{\infty} e^{-t^2} dt. \quad (3.26)$$

As integrais do lado direito das equações (3.25) e (3.26) são conhecidas como funções erro complementar, logo se pode concluir que:

$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2wa} dw = \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} e^{\frac{(xi-1)^2 \xi^2}{4}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\xi - i\xi x}{2} \right) \quad (3.27)$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2wb} dw = \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} e^{\frac{(xi+1)^2 \xi^2}{4}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\xi + i\xi x}{2} \right). \quad (3.28)$$

Substituindo as equações (3.27) e (3.28) na equação (3.20) e utilizando a relação entre função erro e função erro complementar (ARFKEN, 1988), obtém-se finalmente a solução fechada para função de alargamento Doppler a partir da nova representação integral (GONÇALVES *et al.*, 2008).

$$\psi(x, \xi) = \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} e^{\frac{(xi-1)^2 \xi^2}{4}} \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{i\xi x - \xi}{2} \right) \right] + \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} e^{\frac{(xi+1)^2 \xi^2}{4}} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{i\xi x + \xi}{2} \right) \right] \quad (3.29)$$

### 3.4.2 Solução fechada da nova representação integral da função $\chi(x, \xi)$

Para se encontrar a solução fechada para o termo de interferência deve-se proceder de forma análoga ao que foi realizado para função  $\psi(x, \xi)$ . Reescrevendo a equação (3.19), colocando função seno na sua forma exponencial, obtém-se a seguinte expressão:

$$\chi(x, \xi) = \frac{1}{i} \left[ \int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2w\alpha} dw - \int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2w\beta} dw \right], \quad (3.30)$$

onde:

$$\alpha \equiv \frac{(1-ix)}{2} \quad (3.31)$$

e

$$\beta \equiv \frac{(1+ix)}{2}. \quad (3.32)$$

Procedendo de forma análoga ao que foi realizado para equações (3.23) e (3.24) e aplicando-se a transformação de variáveis  $z = \frac{w}{\xi} + \alpha\xi$  e  $t = \frac{w}{\xi} + \beta\xi$ , obtém-se

a seguinte expressão para o termo de interferência,

$$\chi(x, \xi) = \frac{1}{i} \left[ \xi e^{\alpha^2 \xi^2} \int_{\alpha\xi}^{\infty} e^{-z^2} dz - \xi e^{\beta^2 \xi^2} \int_{\beta\xi}^{\infty} e^{-t^2} dt \right], \quad (3.32)$$

As integrais do lado direito das equações (3.32) são conhecidas como funções erro complementar. Logo se pode escrever que:

$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2w\alpha} dw = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} e^{\frac{(xi-1)^2 \xi^2}{4}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\xi - i\xi x}{2} \right) \quad (3.33)$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2w\beta} dw = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} e^{\frac{(xi+1)^2 \xi^2}{4}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\xi + i\xi x}{2} \right). \quad (3.34)$$

Substituindo as equações (3.33) e (3.34) na equação (3.30) e utilizando a relação entre função erro e função erro complementar (ARFKEN, 1988), obtém-se finalmente a solução fechada para o termo de interferência a partir da nova representação integral.

$$\begin{aligned} \chi(x, \xi) = & I \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} e^{\frac{(xi+1)^2 \xi^2}{4}} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{i\xi x + \xi}{2} \right) \right] - \\ & - I \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} e^{\frac{(xi-1)^2 \xi^2}{4}} \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{i\xi x - \xi}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.35)$$

As soluções fechadas obtidas para função de alargamento Doppler e o termo de interferência, dadas pelas equações (3.29) e (3.35), apresentam uma forma funcional bastante simples e conduzem a resultados bastante satisfatórios.

### 3.4.3 Cálculo de $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$ utilizando a série de Fourier

Nesta subseção são apresentados apenas os passos para obtenção da representação da série de Fourier para função de alargamento Doppler, pois a obtenção do termo de interferência é totalmente análoga, sendo assim desnecessária sua apresentação detalhada.

Através da nova representação integral da função de alargamento Doppler é possível encontrar além da solução fechada uma representação em série para  $\psi(x, \xi)$ , empregando-se a técnica da série de Fourier. A fim de facilitar o emprego da série de Fourier para o cálculo de  $\psi(x, \xi)$ , a equação (3.9) deve ser reescrita de forma mais adequada, conforme mostrado a seguir.

$$\psi(x, \xi) = \int_0^{\infty} G(w) e^{-w} \cos(wx) dw, \quad (3.36)$$

onde,

$$G(w) = e^{-\frac{w^2}{\xi^2}}. \quad (3.37)$$

Analisando a função  $G(w)$  é fácil verificar que se trata de uma função de paridade par e seccionalmente contínua, portanto  $G(w)$  encontra-se dentro das características citadas no **Teorema 1** do Apêndice A, logo se pode concluir que a função  $G(w)$  possui uma representação em série de Fourier uniformemente convergente.

Como a função  $G(w)$  é par, logo sua representação em série de Fourier pode ser escrita como:

$$G(w) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{n\pi w}{L}\right), \quad (3.38)$$

onde,

$$a_0 = \frac{1}{L} \int_{-L}^L G(w) dw \quad (3.39)$$

e

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L G(w) \cos\left(\frac{n\pi w}{L}\right) dw, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.40)$$

A escolha do semi-período  $L$  da equação (3.38) será realizada posteriormente no capítulo V, através ensaios numéricos que indicará qual será o valor  $L$  que fará com que a série de Fourier dada pela equação (3.38) represente adequadamente a função  $\psi(x, \xi)$ .

Os termos  $a_0$  e  $a_n$  podem ser facilmente calculados empregando-se propriedades das funções especiais. O cálculo das integrais (3.39) e (3.40) pode ser encontrado na referência (GRADSHTEYN, 1980).

$$a_0 = \frac{\xi \sqrt{\pi}}{L} \operatorname{erf}\left(\frac{L}{\xi}\right) \quad (3.41)$$

e

$$a_n = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2L} e^{-\left(\frac{n\pi\xi}{2L}\right)^2} \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{2L+n\pi\xi^2 i}{2\xi L}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{2L-n\pi\xi^2 i}{2\xi L}\right) \right], \quad n=1,2,3,\dots \quad (3.42)$$

Substituindo as equações (3.41) e (3.42) na equação (3.38) obtém-se a representação em série de Fourier para função  $G(w)$ , conforme mostrado a seguir.

$$G(w) = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2L} \operatorname{erf}\left(\frac{L}{\xi}\right) + \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2L} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\left(\frac{n\pi\xi}{2L}\right)^2} \cos\left(\frac{n\pi w}{L}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{n\pi\xi^2 i + 2L^2}{2\xi L}\right) - \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2L} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\left(\frac{n\pi\xi}{2L}\right)^2} \cos\left(\frac{n\pi w}{L}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{n\pi\xi^2 i - 2L^2}{2\xi L}\right) \quad (3.43)$$

Substituindo-se a equação (3.43) na equação (3.36) é possível obter finalmente uma representação em série de Fourier para função de alargamento Doppler, conforme mostrado a seguir.

$$\psi(x, \xi) = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2L} \operatorname{erf}\left(\frac{L}{\xi}\right) A_1(x) + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\left(\frac{n\pi\xi}{2L}\right)^2} \operatorname{erf}\left(\frac{n\pi\xi^2 i + 2L^2}{2\xi L}\right) A_2(x) - \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\left(\frac{n\pi\xi}{2L}\right)^2} \operatorname{erf}\left(\frac{n\pi\xi^2 i - 2L^2}{2\xi L}\right) A_2(x) \quad (3.44)$$

onde:

$$A_1(x) = \int_0^{\infty} e^{-w} \cos(wx) dw \quad (3.45)$$

e

$$A_2(x) = \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi w}{L}\right) e^{-w} \cos(wx) dw. \quad (3.46)$$

As integrais apresentadas pelas equações (3.45) e (3.46) podem ser resolvidas utilizando a identidade de Euler\* para expressar a função cosseno como uma combinação linear de exponenciais e podem ser escritas, respectivamente, por

---

\* Leonhard Euler (1707-1783) deu contribuições a várias áreas da ciência, incluindo dinâmica dos fluidos, mecânica celeste, "A teoria matemática do investimento" (seguros, anuidades, pensões), entre outras. O trabalho ativo de Euler provocou uma tremenda demanda da academia de São Petesburgo, que continuou publicando seus trabalhos por mais de 30 anos após sua morte.

$$A_1(x) = \frac{1}{1+x^2} \quad (3.47)$$

$$A_2(x) = \frac{L^2(1+x^2) + (n\pi)^2}{L^2(1+x^2)^2 + (n\pi)^2(2-2x^2 + (n\pi/L)^2)} \quad (3.48)$$

Substituindo as equações (3.47) e (3.48) na equação (3.44) e utilizando as propriedades das funções erro,

$$\operatorname{erf}\left(\frac{n\pi\xi^2 i + 2L}{2\xi L}\right) = \bar{a} + \bar{b}i \quad (3.49)$$

$$\operatorname{erf}\left(\frac{n\pi\xi^2 i - 2L}{2\xi L}\right) = a + bi \quad (3.50)$$

Embora sendo,  $a = -\bar{a}$  e  $b = \bar{b}$ , obtém-se a representação em série de Fourier para função de alargamento Doppler (GONÇALVES *et al.*, 2008),

$$\psi(x, \xi) = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2L(1+x^2)} \operatorname{erf}\left(\frac{L}{\xi}\right) + \frac{\xi\sqrt{\pi}}{L} \sum_{n=1}^{\infty} F_n(x, \xi, L) \operatorname{Re} [Z(\xi, L)] \quad (3.51)$$

onde,

$$Z(n, \xi, L) = \operatorname{erf}\left(\frac{n\pi\xi^2 i + 2L^2}{2\xi L}\right) \quad (3.52)$$

e

$$F_n(x, \xi, L) \equiv \frac{\left[(n\pi)^2 + L^2(1+x^2)\right] e^{-\left(\frac{n\pi\xi}{2L}\right)^2}}{L^2(1+x^2)^2 + (n\pi)^2(2-2x^2 + (n\pi/L)^2)} \quad (3.53)$$

Procedendo de forma análoga para o termo de interferência conforme mostrado anteriormente, pode-se escrever que

$$\chi(x, \xi) = 2 \int_0^{\infty} G(w) e^{-w} \sin(wx) dw, \quad (3.54)$$

Substituindo-se a equação (3.43) na equação (3.54) é possível obter finalmente uma representação em série de Fourier para o termo de interferência.

$$\begin{aligned} \chi(x, \xi) = & \frac{\xi\sqrt{\pi}}{L} \operatorname{erf}\left(\frac{L}{\xi}\right) B_1(x) + \frac{\xi\sqrt{\pi}}{L} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\left(\frac{n\pi\xi}{2L}\right)^2} \operatorname{erf}\left(\frac{n\pi\xi^2 i + 2L^2}{2\xi L}\right) B_2(x) \\ & - \frac{\xi\sqrt{\pi}}{L} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\left(\frac{n\pi\xi}{2L}\right)^2} \operatorname{erf}\left(\frac{n\pi\xi^2 i - 2L^2}{2\xi L}\right) B_2(x) \end{aligned} \quad (3.53)$$

onde:

$$B_1(x) = \int_0^{\infty} e^{-w} \sin(wx) dw = \frac{x}{1+x^2} \quad (3.54)$$

e

$$B_2(x) = \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi w}{L}\right) e^{-w} \sin(wx) dw = \frac{x \left[ L^2 (1+x^2) - (n\pi)^2 \right]}{L^2 (1+x^2)^2 + (n\pi)^2 (2-2x^2 + (n\pi/L)^2)} \quad (3.55)$$

Substituindo as equações (3.54) e (3.55) na equação (3.53) e utilizando as propriedades das funções erro, dada pelas equações (3.49) e (3.50), obtém-se a seguinte expressão para o termo de interferência (GONÇALVES *et al.*, 2009):

$$\chi(x, \xi) = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{L(1+x^2)} \operatorname{erf}\left(\frac{L}{\xi}\right) + \frac{2\xi\sqrt{\pi}}{L} \sum_{n=1}^{\infty} f_n(x, \xi, L) \operatorname{Re} [Z(\xi, L)] \quad (3.56)$$

onde  $Z(n, \xi, L)$  é dado pela equação (3.52) e  $f_n(x, \xi, L)$  dado pela equação a seguir,

$$f_n(x, \xi, L) \equiv \frac{x \left[ L^2 (1+x^2) - (n\pi)^2 \right] e^{-\left(\frac{n\pi\xi}{2L}\right)^2}}{L^2 (1+x^2)^2 + (n\pi)^2 (2-2x^2 + (n\pi/L)^2)}. \quad (3.57)$$

As equações (3.58) e (3.59) possibilitam que as funções  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$  sejam calculadas para diversos valores de  $x$  e  $\xi$ , desde que os parâmetros  $L$  e  $n$  da série de Fourier sejam escolhidos adequadamente com base em testes de convergências.

### 3.5 Nova aproximação assintótica para função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$

A nova representação integral da função de alargamento Doppler, dada pela equação (3.9), possibilita outra representação em série além daquela apresentada pela equação (3.51). Para tanto, deve-se iniciar integrando a equação (3.9) por partes, conforme mostrando a seguir.

$$\psi(x, \xi) = \int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} \cos(wx) dw = \lim_{w \rightarrow \infty} \frac{\sin(wx)}{x} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} - \int_0^{\infty} \frac{\sin(wx)}{x} \frac{d}{dw} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} dw \quad (3.58)$$

Integrando mais uma vez por partes, a integral que surge do lado direito da equação (3.58), obtém-se.

$$\begin{aligned} - \int_0^{\infty} \frac{\sin(wx)}{x} \frac{d}{dw} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} dw &= \lim_{w \rightarrow \infty} \frac{\cos(wx)}{x^2} \frac{d}{dw} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} - \frac{1}{x^2} \frac{d}{dw} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} \Big|_{w=0} - \\ &- \int_0^{\infty} \frac{\cos(wx)}{x^2} \frac{d^2}{dw^2} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} dw \end{aligned} \quad (3.59)$$

Substituindo a equação (3.59) na equação (3.58) e tomando os limites em que  $w \rightarrow \infty$ , chega-se a seguinte expressão:

$$\psi(x, \xi) = \int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} \cos(wx) dw = - \frac{1}{x^2} \frac{d}{dw} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} \Big|_{w=0} - \int_0^{\infty} \frac{\cos(wx)}{x^2} \frac{d^2}{dw^2} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} dw \quad (3.60)$$

Procedendo de forma análoga, conforme foi realizado na equação (3.60) é possível generalizar a expressão acima para n-ésimas integrações por partes.

$$\psi(x, \xi) = \sum_{k=1}^n \frac{(-1)^k}{x^{2k}} \frac{d^{2k-1}}{dw^{2k-1}} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} \Big|_{w=0} + \frac{(-1)^n}{x^{2n}} \int_0^{\infty} \frac{d^{2n}}{dw^{2n}} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} \cos(wx) dw \quad (3.61)$$

A série apresentada pela equação (3.61) conduz a uma nova expansão assintótica. Para tanto, basta considerar o limite  $|x| \rightarrow \infty$ . Nessa condição é possível desprezar o segundo termo da equação (3.61), em comparação ao primeiro, com base tão somente no lema de Riemann-Lebesgue (CHURCHILL, 1963), que garante que a transformada cosseno de Fourier de uma função  $f(w)$  converge para zero quando

$|x| \rightarrow \infty$ , ou seja,  $\lim_{x \rightarrow \infty} \int_R f(w) \cos(wx) dw = 0$ . Sendo assim, obtém-se uma nova

expansão assintótica para a função de alargamento Doppler.

$$\psi(x, \xi) \approx \tilde{\psi}(x, \xi) = \sum_{k=1}^n \frac{(-1)^k}{x^{2k}} F^{(2k-1)}(0), \quad (3.62)$$

sendo,

$$F^{(2k-1)}(0) \equiv \left. \frac{d^{2k-1}}{dw^{2k-1}} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - w} \right|_{w=0} \quad (3.63)$$

onde,

$$\begin{aligned} F^1(0) &= -1 \\ F^3(0) &= \frac{6}{\xi^2} - 1 \\ F^5(0) &= -\frac{60}{\xi^4} + \frac{20}{\xi^2} - 1 \\ F^7(0) &= \frac{840}{\xi^6} - \frac{420}{\xi^4} + \frac{42}{\xi^2} - 1. \end{aligned} \quad (3.64)$$

A expansão assintótica apresentada pela equação (3.62), proveniente da nova representação integral de  $\psi(x, \xi)$  é uma nova representação assintótica para função de alargamento Doppler, diferente daquela encontrada na literatura (DRESNER, 1960).

Nesta seção foram apresentadas duas aproximações em série para função de alargamento Doppler, sendo uma delas integralmente baseada na série de Fourier e a outra uma aproximação assintótica proveniente de um processo de integração por partes.

No próximo capítulo são apresentadas as principais aplicações da função de alargamento Doppler e do termo de interferência.

# CAPÍTULO IV

## APLICAÇÕES DA FUNÇÃO DE ALARGAMENTO DOPPLER

### 4.1 Introdução

Neste capítulo são apresentadas as principais aplicações da função de alargamento Doppler, tais como: cálculo das seções de choque microscópicas de espalhamento, cálculo dos fatores de auto-blindagem ressonante e cálculo da função  $J(\xi, \beta)$ .

### 4.2 Cálculo dos Fatores de Auto-blindagem

Em reatores de pesquisa, uma técnica muito utilizada para medir a potência nuclear é a técnica de ativação. Também conhecida como técnica da razão de Cádmiu ( $Cd^{113}$ ), a técnica de ativação consiste na obtenção absoluta do fluxo de nêutrons térmicos no núcleo do reator a partir da ativação de folhas de ouro irradiadas com ou sem cobertura de Cádmiu. O isótopo  $Cd^{113}$ , devido à sua altíssima seção de choque de absorção de nêutrons térmicos, age como filtro neutrônico absorvendo os nêutrons térmicos, fazendo com que a folha de ouro irradiada dentro de uma diminuta caixa de cádmio, seja ativada neutronicamente apenas por nêutrons epitérmicos. A folha nua, por sua vez irradiada sem o cádmio, tem toda a sua atividade devido aos nêutrons térmicos e epitérmicos. A subtração das atividades induzidas na folha nua em relação à coberta com cádmio permite conhecer a fração da atividade na folha de ouro, irradiadas em uma determinada posição do núcleo, devida somente à contribuição dos nêutrons térmicos, responsáveis em grande parte pelas fissões nos átomos de  $U^{235}$  e conseqüentemente a potência do reator. Uma descrição mais detalhada da técnica pode ser encontrada na literatura (BEKURTS & WIRTZ, 1964).

Durante a utilização da técnica de ativação, é muito importante que se calcule, de forma eficiente, o fator de auto-blindagem ressonante  $G_{epi}$ , na faixa epitérmica. A dificuldade de se obter aproximações analíticas acuradas para a função de alargamento Doppler faz com que seja necessário o uso da integração gaussiana no cálculo dos fatores de auto-blindagem, isso conseqüentemente leva a um alto custo computacional para se calcular  $G_{epi}$  para várias ressonâncias.

Admitindo que o objeto de ativação seja uma chapa circular, de espessura infinitesimal. Expondo esta chapa a um fluxo de nêutrons isotrópico com o espectro na vizinhança de uma ressonância e assumindo que o espalhamento de nêutrons é desprezível comparado a absorção, o fator de auto-blindagem para uma ressonância isolada situada na faixa epitérmica de energia é determinado por (HARADA & SHCHERBAKOV, 2002):

$$G_{epi}(\xi, \tau) = \frac{\tau}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{y^3} \int \left\{ 1 - e^{-y\psi(x, \xi)} \right\} dx \quad (4.1)$$

onde  $\tau = t\Sigma_0$  é denominada espessura efetiva.

- $t$  = Espessura da chapa
- $\Sigma_0$  = seção de choque macroscópica da ressonância na energia na  $E_0$ .

Em recente trabalho (PALMA, et al., 2007) propuseram uma nova formulação para os fatores de auto-blindagem ressonantes, baseada numa integral unidimensional no qual a função de alargamento Doppler aparece como argumento explícito da integral,

$$G_{epi}(\xi, \tau) = \frac{1}{\pi\tau} \int_0^{+\infty} \left[ 1 - (1 - \tau\psi) e^{-\tau\psi(x, \xi)} - \tau^2\psi^2 E_1(\tau\psi) \right] dx \quad (4.2)$$

sendo  $E_1(\tau\psi)$  a função exponencial integral de ordem 1, dada por:

$$E_1(\mu) = \int_1^{\infty} \frac{dy}{y} e^{-\mu y}. \quad (4.3)$$

Observando a equação (4.2) é possível verificar que a função de alargamento Doppler é de vital importância para a determinação precisa do fator de auto-blindagem. No capítulo V, serão apresentados os resultados obtidos para o cálculo do fator de auto-blindagem ressonante, empregando-se as aproximações fechadas da função de alargamento Doppler, equações (3.29) e (3.35), utilizando-se a aproximação dada pela equação (4.2) para o fator de auto-blindagem.

### 4.3 Cálculo da função $J(\zeta, \beta)$

Na análise de um reator nuclear verifica-se que o cálculo das taxas de absorção ressonante não é trivial. Essa afirmação se baseia no fato que a análise física do problema deve levar em consideração a variação da energia do nêutron, o comportamento ressonante das seções de choque dos núcleos, a variação do fluxo de neutros na presença dos núcleos absorvedores, o efeito da auto-blindagem espacial que impede a penetração dos nêutrons em regiões mais internas do combustível, entre outros fenômenos (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976).

Para determinar as taxas de reação em uma estrutura de poucos grupos de energia, é necessário determinar com precisão o fluxo de nêutrons nas regiões da célula de combustível onde se encontram os isótopos absorvedores. A forma exata de fazê-lo é através da solução numérica da equação de transporte de nêutrons nessas regiões. Como a solução numérica da equação de transporte é muito dispendiosa e geralmente são utilizadas apenas como padrões, muitas vezes é mais interessante determinar as taxas de reação através de aproximações baseadas nas integrais de ressonância.

A integral de ressonância é definida de forma que ao ser multiplicada pelo fluxo assintótico, a ressonância deverá reproduzir a taxa de reação no interior desta. O caráter fortemente heterogêneo dos reatores térmicos é um dos complicadores do cálculo da integral de ressonância. Um outro fator importante é que o movimento dos

núcleos deve ser considerado nesses cálculos, o que é feito levando em consideração o alargamento Doppler das ressonâncias.

A dificuldade em calcular analiticamente as integrais de ressonância consiste no fato que para um meio homogêneo, tais integrais são proporcionais à função  $J(\xi, \beta)$ , que por sua vez é definida da seguinte forma:

$$J(\xi, \beta) \equiv \int_0^{\infty} \frac{\psi(x, \xi)}{\psi(x, \xi) + \beta} dx. \quad (4.4)$$

O parâmetro  $\beta$ , assim como a função  $J(\xi, \beta)$ , são amplamente estudados e os mesmos podem ser encontrados tabelados na literatura (DRESNER, 1960). Uma forma útil de expressar o parâmetro  $\beta$  é escrevê-lo na forma  $\beta = 2^j \times 10^{-5}$  sendo  $j$  tipicamente dado no intervalo [0,30].

É um fato que expressões complicadas para a função de alargamento Doppler acarretam em uma impossibilidade de determinar expressões analíticas precisas para a função  $J(\xi, \beta)$  e conseqüentemente para as integrais de ressonância. Entretanto, alguns trabalhos têm sido publicados apresentando novas aproximações analíticas no cálculo das integrais de ressonância isoladas (CAMPOS & MARTINEZ, 1989 e KESHAVAMURTHY & HARISH, 1993). Os métodos mais aplicados para avaliação desta função consistem na técnica de quadratura gaussiana e método de aproximação de Padé de 4 pólos.

O método proposto nesta tese consiste tão somente empregar a solução fechada dada pela equação (3.29) e aproximação de Padé de 4 pólos no cálculo da função  $J(\xi, \beta)$ , utilizando-se a técnica da quadratura gaussiana, a fim de avaliar quais das aproximações oferece melhor acurácia e desempenho computacional.

#### 4.4 Cálculo da Seção de Choque Microscópica de Espalhamento

Outra aplicação das funções de alargamento Doppler refere-se à determinação da seção de choque microscópica de espalhamento, a qual pode ser representada pelo formalismo de Briet-Wigner por:

$$\bar{\sigma}_s(E, T) = \sigma_0 \frac{\Gamma_n}{\Gamma} \psi(x, \xi) + \sigma_0 \frac{2R}{\lambda} \chi(x, \xi) + \sigma_{pot} \quad (4.5)$$

Nesta aplicação escolheu-se calcular apenas seção de choque de espelhamento, visto que a mesma está diretamente relacionada tanto com função de alargamento Doppler quanto com termo de interferência.

Para o cálculo da seção de espalhamento, dada pela equação (4.5), escolheu-se analisar apenas os núclídeos  $U^{238}$ ,  $Pu^{240}$  e  $Th^{232}$  nas regiões de temperatura e energia em que a aproximação de Briet-Wigner é válida. Para tanto, empregou-se os métodos propostos de cálculos para as funções  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$ , utilizando as equações (3.29), (3.35), (3.51) e (3.56) apresentadas no capítulo III.

Através das equações (3.29) e (3.35) é possível escrever uma aproximação fechada para a seção de choque de espalhamento dada por (GONÇALVES *et al.*, 2009):

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_s(E, T) = & \sigma_0 \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} \left[ \frac{\Gamma_n}{\Gamma} - \frac{2R}{\lambda} I \right] \left[ e^{\frac{(xi-1)^2 \xi^2}{4}} \operatorname{erf} \left( \frac{i\xi x - \xi}{2} \right) - e^{\frac{(xi+1)^2 \xi^2}{4}} \operatorname{erf} \left( \frac{i\xi x + \xi}{2} \right) \right] \\ & + \sigma_0 \frac{\Gamma_n}{\Gamma} \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} \left[ e^{\frac{(xi+1)^2 \xi^2}{4}} + e^{\frac{(xi-1)^2 \xi^2}{4}} \right] + \sigma_0 \frac{R}{\lambda} \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} I \left[ e^{\frac{(xi+1)^2 \xi^2}{4}} + e^{\frac{(xi-1)^2 \xi^2}{4}} \right] + \sigma_{pot} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Procedendo de forma análoga para as equações (3.51) e (3.56), é possível obter a seguinte aproximação para a seção de choque de espalhamento utilizando a série de Fourier (GONÇALVES *et al.*, 2009),

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_s(E, T) = & \frac{\sigma_0 \xi \sqrt{\pi}}{2L(1+x^2)} \operatorname{erf} \left( \frac{L}{\xi} \right) \left( \frac{\Gamma_n}{\Gamma} + \frac{4Rx}{\lambda} \right) + \frac{\sigma_0 \xi \sqrt{\pi}}{L} \left\{ \frac{\Gamma_n}{\Gamma} \sum_{n=1}^{N_{\max}} F_n(x, \xi, L) \operatorname{Re} [ Z(n, \xi, L) ] \right. \\ & \left. + \frac{4R}{\lambda} \sum_{n=1}^{N_{\max}} f_n(x, \xi, L) \operatorname{Re} [ Z(n, \xi, L) ] \right\} + \sigma_{pot} \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde os termos  $F_n(x, \xi, L)$ ,  $f_n(x, \xi, L)$  e  $Z(n, \xi, L)$  são apresentados no capítulo III e  $N_{\max}$  é o número de termos utilizado na expansão.

No capítulo V são apresentados os resultados obtidos para o cálculo da seção de choque microscópica de espalhamento para várias ressonâncias dos núclídeos  $U^{238}$ ,  $Pu^{240}$  e  $Th^{232}$ .

# CAPÍTULO V

## APRESENTAÇÃO E ANÁLISE DOS RESULTADOS

### 5.1 Introdução

Neste capítulo são apresentados de forma detalhada, os resultados obtidos para o cálculo da função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$  e para o termo de interferência  $\chi(x, \xi)$ , utilizando as soluções fechadas dadas pelas equações (3.29) e (3.35). Também são discutidos, para ambas as funções, os resultados obtidos com as aproximações em séries de Fourier.

### 5.2 Método de Referência para as Funções $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$

Esta seção tem como principal objetivo validar as formulações fechadas para as funções  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$  apresentadas no capítulo III, assim como comparar os resultados obtidos com o método da aproximação de Padé de 4 pólos. Os testes de validação das soluções fechadas dadas pelas equações (3.29) e (3.35) são realizados com base no cálculo da integração numérica das equações (2.8) e (2.45) utilizando-se o método de Gauss-Legendre. Este método é escolhido como referência por se tratar de um método bastante acurado, pois possibilita uma escolha adequada do infinito numérico e do número de partições utilizado no processo de integração, apesar de ser um método bastante acurado ele requer um esforço computacional alto, inviabilizando assim sua utilização nos cálculos em que existe aplicabilidade das funções  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$ .

O método da quadratura de Gauss-Legendre consiste basicamente em aproximar uma integral definida através da seguinte expressão:

$$\int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}\eta + \frac{b+a}{2}\right) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^N w_i f\left(\frac{b-a}{2}\eta_i + \frac{b+a}{2}\right) \quad (5.1)$$

sendo  $N$  a ordem da quadratura,  $\eta_i$  é o ponto da quadratura e  $w_i$  o peso correspondente ao ponto de quadratura (SUSTER, 2003). Os pontos de quadratura de Gauss-Legendre são as raízes dos polinômios de Legendre (ARFKEN, 1985) no intervalo  $[-1,1]$ , gerados a partir da fórmula de Rodrigues,

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left\{ (x^2 - 1)^n \right\}. \quad (5.2)$$

No cálculo da função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$ , equação (2.8), e do termo de interferência  $\chi(x, \xi)$ , equação (2.45), utilizou-se um infinito numérico  $y = 200$  e uma quadratura de ordem 15 conforme mostrado na tabela 5.1.

**Tabela 5.1 - Pontos de Legendre  $\eta_i$  e seus respectivos pesos  $w_i$ .**

$i$	$\eta_i$	$w_i$
1	0,9879925	0,0307532
2	0,9372734	0,0703660
3	0,8482066	0,1071592
4	0,7244177	0,1395707
5	0,5709722	0,1662692
6	0,3941513	0,1861610
7	0,2011941	0,1984315
8	0,0000000	0,2025782
9	-0,2011941	0,1984315
10	-0,3941513	0,1861610
11	-0,5709722	0,1662692
12	-0,7244177	0,1395707
13	-0,8482066	0,1071592
14	-0,9372734	0,0703660
15	-0,9879925	0,0307532

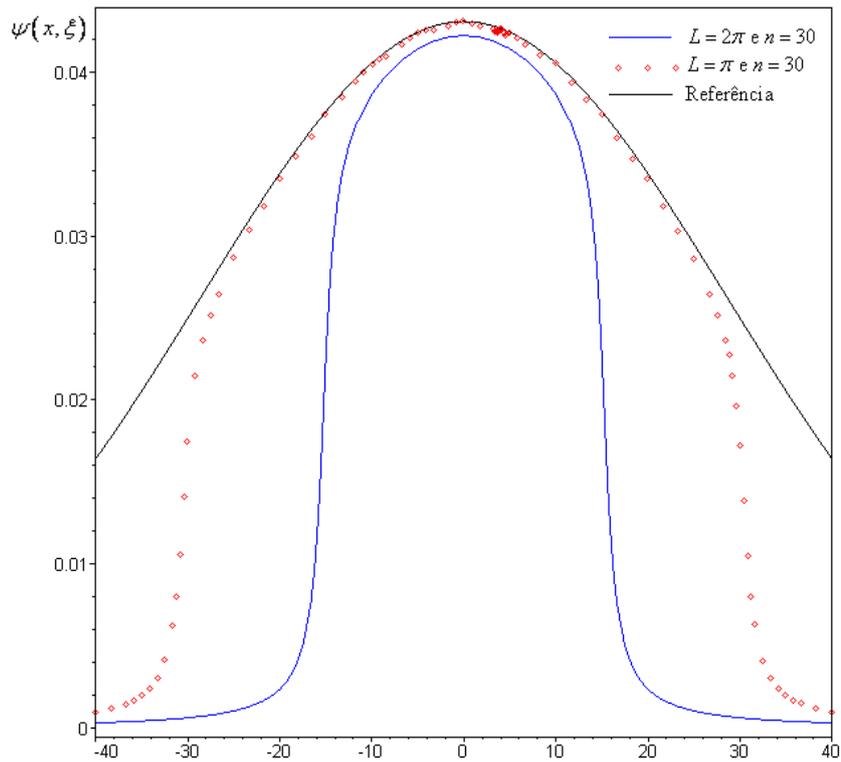
Vale destacar que o infinito numérico  $y = 200$ , foi escolhido através de testes com o comportamento das funções dos integrandos das equações (2.8) e (2.45).

### 5.2.1 Validação da Aproximação da Série de Fourier para $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$

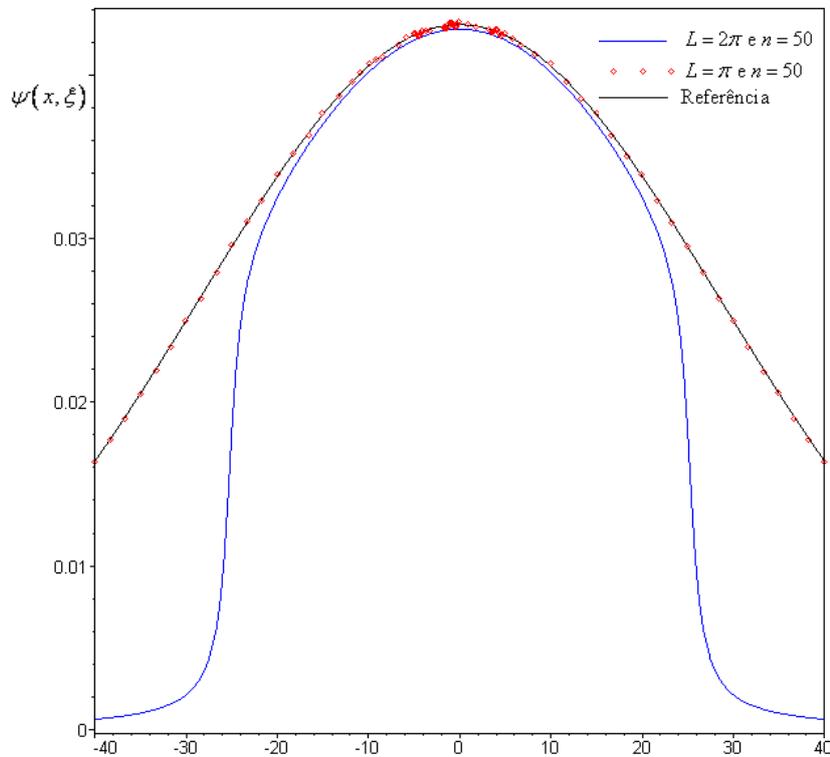
Nesta subsecção são realizados alguns ensaios numéricos, que ajudaram a subsidiar a escolher adequadamente do semi-período  $L$  e do número de termos  $n$  da aproximação em série de Fourier apresentada no capítulo III para  $\psi(x, \xi)$  dada pela equação (3.51) através da comparação com o método numérico de referência (Quadratura de Gauss).

Os ensaios numéricos para se determina  $L$  e  $n$  foram realizados de forma garantir a precisão nos cálculos de  $\psi(x, \xi)$  através da equação (3.51), variando-se  $x = [-40, 40]$  e  $\xi = [0, 05, 0, 5]$  dentro do intervalo de interesse.

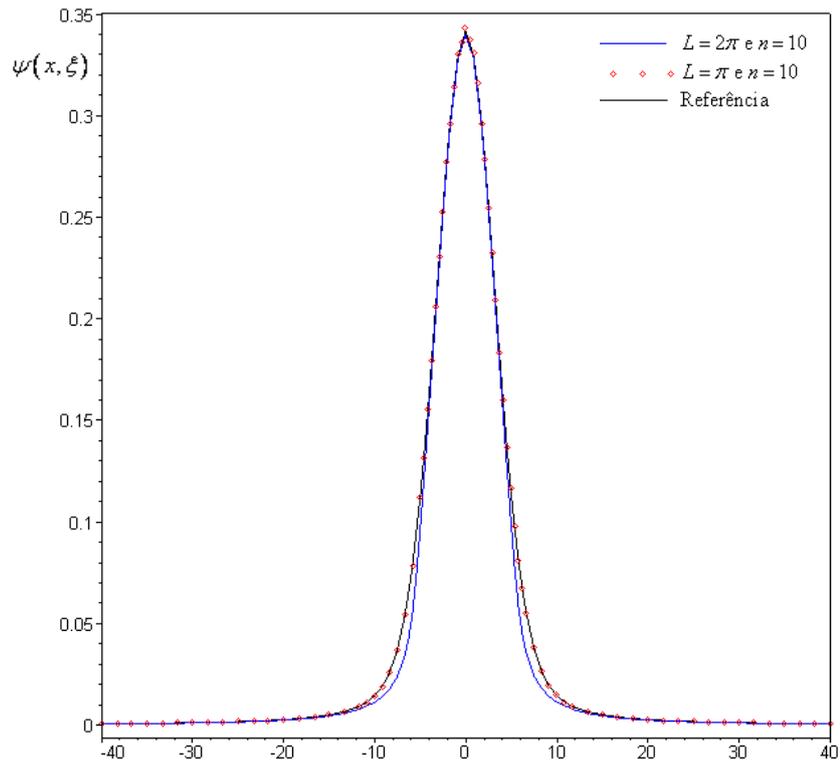
Analisando-se apenas o valor máximo ( $\xi = 0,05$ ) e mínimo ( $\xi = 0,5$ ) da temperatura absoluta, variando-se  $x$  no intervalo  $[-40, 40]$  e fazendo  $L = \pi$  e  $L = 2\pi$  é possível determinar com base nas figuras 5.1 a 5.4 qual é o valor ótimo de  $L$  e  $n$  para a maior temperatura dentro da nossa faixa de interesse.



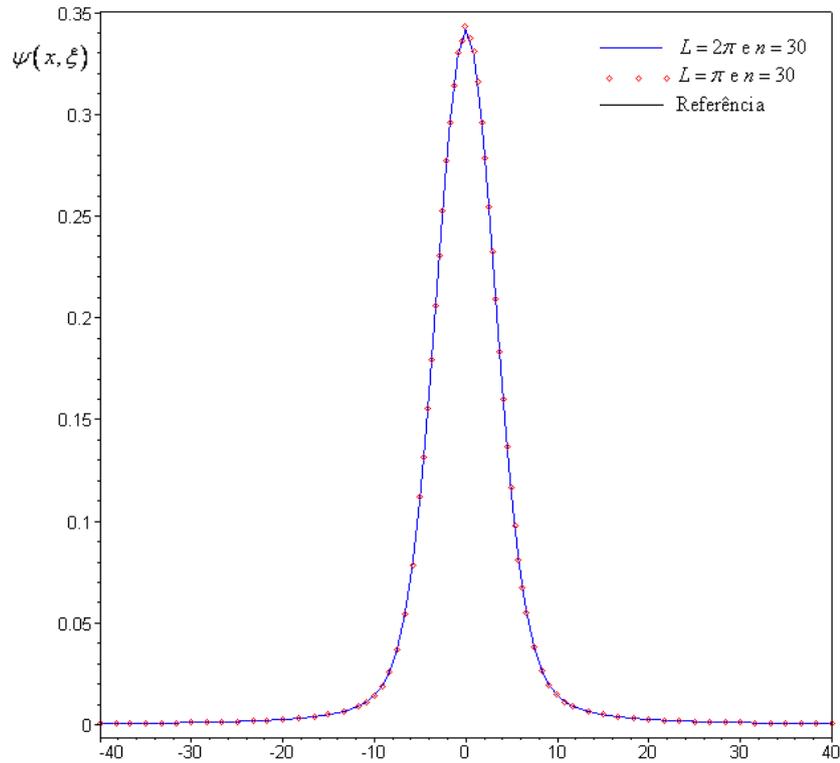
**Figura 5.1 – Cálculo da função de alargamento Doppler, através da aproximação da série de Fourier, equação (3.51), para  $\xi = 0,05$  e  $n = 30$ .**



**Figura 5.2 – Cálculo da função de alargamento Doppler, através da aproximação da série de Fourier, equação (3.51), para  $\xi = 0,05$  e  $n = 50$ .**



**Figura 5.3 – Cálculo da função de alargamento Doppler, através da aproximação da série de Fourier, equação (3.51), para  $\xi = 0,5$  e  $n = 10$ .**



**Figura 5.4 – Cálculo da função de alargamento Doppler, através da aproximação da série de Fourier, equação (3.51), para  $\xi = 0,5$  e  $n = 30$ .**

Analisando as figuras 5.1, 5.2, 5.3 e 5.4, pode-se verificar que, o parâmetro  $L = \pi$ , na equação (3.51), reproduz muito melhor o comportamento da função de alargamento do que para  $L = 2\pi$ . Também pode se verificar que, à medida que a temperatura diminui, ou seja,  $\xi$  aumenta é necessário que haja um número menor de termos na série de Fourier para descrever adequadamente a função  $\psi(x, \xi)$ . As figuras 5.2 e 5.4 evidenciam claramente que para temperaturas menores é necessário um número menor de termos na equação (3.51).

Vala ressaltar que durante a pesquisa de tese dentro da nossa faixa de interesse, ou seja,  $x = [-40, 40]$  e  $\xi = [0, 05, 0, 5]$  foram testados diversos valores de semi-período com números inteiros de  $\pi$  e  $\pi/2$  que não constam registrados neste trabalho. Contudo o semi-período  $L = \pi$  mostrou-se a melhor a escolha em todos os testes realizados.

Para os resultados que são apresentados na próxima subseção, adotou-se  $L = \pi$  e  $n = 50$  para função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$ , a fim de garantir a convergência da equação (3.51) dentro da nossa região de interesse. Procedendo de forma análoga, pode-se adotar os mesmos critérios ( $L = \pi$  e  $n = 50$ ) para a aproximação em série de Fourier do termo de interferência  $\chi(x, \xi)$ , equação (3.56).

### 5.2.2 Resultados Obtidos com os Métodos Propostos para $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$

Nas tabelas 5.2 e 5.3 são mostrados os resultados de referência para as funções  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$ , obtidos através do método da quadratura de Gauss-Legendre.

Tabela 5.2 - Valores de referência para a função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$ .

$x \backslash \xi$	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
<b>0,05</b>	0,04309	0,04308	0,04306	0,04298	0,04267	0,04215	0,04145	0,04055	0,03380	0,01639
<b>0,10</b>	0,08384	0,08379	0,08364	0,08305	0,08073	0,07700	0,07208	0,06623	0,03291	0,00262
<b>0,15</b>	0,12239	0,12223	0,12176	0,11989	0,11268	0,10165	0,08805	0,07328	0,01695	0,00080
<b>0,20</b>	0,15889	0,15854	0,15748	0,15331	0,13777	0,11540	0,09027	0,06614	0,00713	0,00069
<b>0,25</b>	0,19347	0,19281	0,19086	0,18324	0,15584	0,11934	0,08277	0,05253	0,00394	0,00067
<b>0,30</b>	0,22624	0,22516	0,22197	0,20968	0,16729	0,11571	0,07042	0,03880	0,00314	0,00065
<b>0,35</b>	0,25731	0,25569	0,25091	0,23271	0,17288	0,10713	0,05724	0,02815	0,00289	0,00064
<b>0,40</b>	0,28679	0,28450	0,27776	0,25245	0,17359	0,09604	0,04566	0,02109	0,00277	0,00064
<b>0,45</b>	0,31477	0,31168	0,30261	0,26909	0,17052	0,08439	0,03670	0,01687	0,00270	0,00064
<b>0,50</b>	0,34135	0,33733	0,32557	0,28286	0,16469	0,07346	0,03025	0,01446	0,00266	0,00063

Tabela 5.3 - Valores de referência para o termo de interferência  $\chi(x, \xi)$ .

$x \backslash \xi$	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
<b>0,05</b>	0,0	0,00120	0,00239	0,00478	0,00951	0,01415	0,01865	0,02297	0,04076	0,05221
<b>0,10</b>	0,0	0,00458	0,00915	0,01821	0,03573	0,05192	0,06626	0,07833	0,10132	0,05957
<b>0,15</b>	0,0	0,00986	0,01968	0,03894	0,07470	0,10460	0,12690	0,14096	0,12219	0,05341
<b>0,20</b>	0,0	0,01680	0,03344	0,06567	0,12219	0,16295	0,18538	0,19091	0,11754	0,05170
<b>0,25</b>	0,0	0,02515	0,04994	0,09714	0,17413	0,21909	0,23168	0,22043	0,11052	0,05103
<b>0,30</b>	0,0	0,03470	0,06873	0,13219	0,22694	0,26757	0,26227	0,23199	0,10650	0,05069
<b>0,35</b>	0,0	0,04529	0,08940	0,16976	0,27773	0,30564	0,27850	0,23236	0,10437	0,05049
<b>0,40</b>	0,0	0,05674	0,11160	0,20890	0,32442	0,33286	0,28419	0,22782	0,10316	0,05037
<b>0,45</b>	0,0	0,06890	0,13498	0,24880	0,36563	0,35033	0,28351	0,22223	0,10238	0,05028
<b>0,50</b>	0,0	0,08165	0,15927	0,28875	0,40075	0,35998	0,27979	0,21729	0,10185	0,05022

Nas tabelas 5.4 e 5.5 são mostrados os resultados obtidos através das soluções fechadas dadas pelas equações (3.29) e (3.35).

**Tabela 5.4 - Valores da função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$  obtidos através da solução fechada, dada pela equação (3.29).**

$\xi \backslash x$	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
<b>0,05</b>	0,04309	0,04308	0,04306	0,04298	0,04267	0,04215	0,04144	0,04055	0,03380	0,01639
<b>0,10</b>	0,08384	0,08379	0,08364	0,08305	0,08073	0,07700	0,07208	0,06623	0,03291	0,00262
<b>0,15</b>	0,12239	0,12223	0,12176	0,11989	0,11268	0,10165	0,08805	0,07328	0,01695	0,00080
<b>0,20</b>	0,15889	0,15854	0,15748	0,15331	0,13777	0,11540	0,09027	0,06614	0,00712	0,00069
<b>0,25</b>	0,19347	0,19281	0,19086	0,18324	0,15584	0,11934	0,08277	0,05253	0,00394	0,00067
<b>0,30</b>	0,22624	0,22516	0,22197	0,20968	0,16729	0,11571	0,07043	0,03881	0,00314	0,00065
<b>0,35</b>	0,25731	0,25569	0,25091	0,23271	0,17288	0,10712	0,05726	0,02816	0,00289	0,00064
<b>0,40</b>	0,28679	0,28450	0,27776	0,25245	0,17359	0,09604	0,04569	0,02110	0,00277	0,00064
<b>0,45</b>	0,31477	0,31168	0,30261	0,26909	0,17051	0,08439	0,03670	0,01687	0,00270	0,00064
<b>0,50</b>	0,34135	0,33733	0,32557	0,28285	0,16469	0,07346	0,03025	0,01446	0,00266	0,00063

**Tabela 5.5 - Valores do termo de interferência  $\chi(x, \xi)$  obtidos através da solução fechada, dada pela equação (3.35).**

$\xi \backslash x$	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
<b>0,05</b>	0,0	0,00120	0,00239	0,00478	0,00951	0,01415	0,01865	0,02297	0,04076	0,05221
<b>0,10</b>	0,0	0,00458	0,00915	0,01821	0,03573	0,05192	0,06626	0,07833	0,10132	0,05957
<b>0,15</b>	0,0	0,00986	0,01968	0,03894	0,07470	0,10460	0,12690	0,14096	0,12219	0,05341
<b>0,20</b>	0,0	0,01680	0,03344	0,06567	0,12219	0,16295	0,18538	0,19091	0,11754	0,05170
<b>0,25</b>	0,0	0,02515	0,04994	0,09714	0,17413	0,21909	0,23168	0,22043	0,11052	0,05103
<b>0,30</b>	0,0	0,03470	0,06873	0,13219	0,22694	0,26757	0,26227	0,23199	0,10650	0,05069
<b>0,35</b>	0,0	0,04529	0,08940	0,16976	0,27773	0,30564	0,27850	0,23236	0,10437	0,05049
<b>0,40</b>	0,0	0,05674	0,11160	0,20890	0,32442	0,33286	0,28419	0,22782	0,10316	0,05037
<b>0,45</b>	0,0	0,06890	0,13498	0,24880	0,36563	0,35033	0,28351	0,22223	0,10238	0,05028
<b>0,50</b>	0,0	0,08165	0,15927	0,28875	0,40075	0,35998	0,27979	0,21729	0,10185	0,05022

Nas tabelas 5.6 a 5.7 são mostrados os resultados obtidos através das aproximações em série de Fourier para as funções  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$ , equações (3.51) e (3.56) respectivamente.

**Tabela 5.6 - Valores da função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$  obtidos através da solução fechada, dada pela equação (3.51).**

$\xi \backslash x$	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
<b>0,05</b>	0,04309	0,04308	0,04306	0,04298	0,04267	0,04215	0,04144	0,04055	0,03380	0,01639
<b>0,10</b>	0,08384	0,08379	0,08364	0,08305	0,08073	0,07700	0,07208	0,06623	0,03291	0,00262
<b>0,15</b>	0,12239	0,12223	0,12176	0,11989	0,11268	0,10165	0,08805	0,07328	0,01695	0,00080
<b>0,20</b>	0,15889	0,15854	0,15748	0,15331	0,13777	0,11540	0,09027	0,06614	0,00712	0,00069
<b>0,25</b>	0,19347	0,19281	0,19086	0,18324	0,15584	0,11934	0,08277	0,05253	0,00394	0,00067
<b>0,30</b>	0,22624	0,22516	0,22197	0,20968	0,16729	0,11571	0,07043	0,03881	0,00314	0,00065
<b>0,35</b>	0,25731	0,25569	0,25091	0,23271	0,17288	0,10712	0,05726	0,02816	0,00289	0,00064
<b>0,40</b>	0,28679	0,28450	0,27776	0,25245	0,17359	0,09604	0,04569	0,02110	0,00277	0,00064
<b>0,45</b>	0,31477	0,31168	0,30261	0,26909	0,17051	0,08439	0,03670	0,01687	0,00270	0,00064
<b>0,50</b>	0,34135	0,33733	0,32557	0,28285	0,16469	0,07346	0,03025	0,01446	0,00266	0,00063

**Tabela 5.7 - Valores do termo de interferência  $\chi(x, \xi)$  obtidos através da solução fechada, dada pela equação (3.56).**

$\xi \backslash x$	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
<b>0,05</b>	0,0	0,00120	0,00239	0,00478	0,00951	0,01415	0,01865	0,02297	0,04076	0,05221
<b>0,10</b>	0,0	0,00458	0,00915	0,01821	0,03573	0,05192	0,06626	0,07833	0,10132	0,05957
<b>0,15</b>	0,0	0,00986	0,01968	0,03894	0,07470	0,10460	0,12690	0,14096	0,12219	0,05341
<b>0,20</b>	0,0	0,01680	0,03344	0,06567	0,12219	0,16295	0,18538	0,19091	0,11754	0,05170
<b>0,25</b>	0,0	0,02515	0,04994	0,09714	0,17413	0,21909	0,23168	0,22043	0,11052	0,05103
<b>0,30</b>	0,0	0,03470	0,06873	0,13219	0,22694	0,26757	0,26227	0,23199	0,10650	0,05069
<b>0,35</b>	0,0	0,04529	0,08940	0,16976	0,27773	0,30564	0,27850	0,23236	0,10437	0,05049
<b>0,40</b>	0,0	0,05674	0,11160	0,20890	0,32442	0,33286	0,28419	0,22782	0,10316	0,05037
<b>0,45</b>	0,0	0,06890	0,13498	0,24880	0,36563	0,35033	0,28351	0,22223	0,10238	0,05028
<b>0,50</b>	0,0	0,08165	0,15927	0,28875	0,40075	0,35998	0,27979	0,21729	0,10185	0,05022

Nas tabelas 5.8 a 5.9 são mostrados os resultados obtidos através do método da aproximação de Padé de 4 pólos

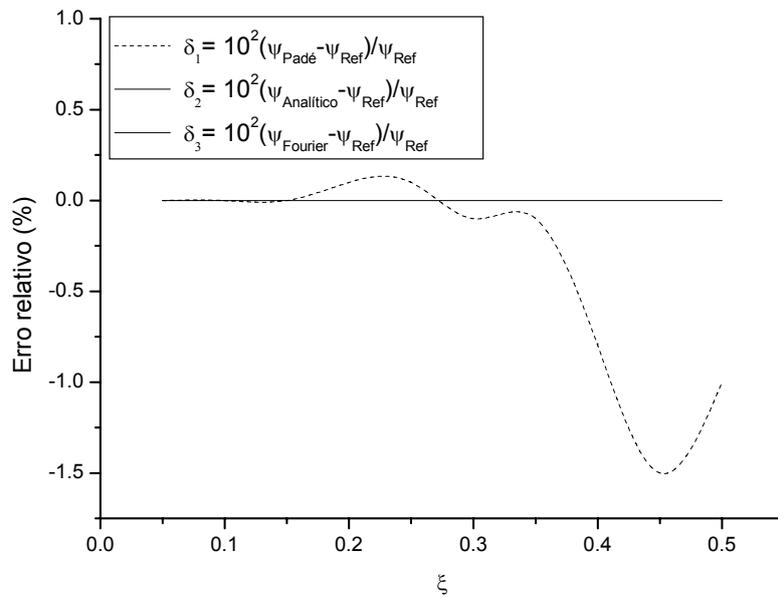
**Tabela 5.8 - Valores da função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$  obtidos através da aproximação de Padé de 4 pólos.**

$x \backslash \xi$	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
<b>0,05</b>	0,04308	0,04308	0,04306	0,04298	0,04267	0,04215	0,04144	0,04055	0,03380	0,01637
<b>0,10</b>	0,08384	0,08379	0,08364	0,08305	0,08073	0,07700	0,07208	0,06623	0,03288	0,00274
<b>0,15</b>	0,12239	0,12223	0,12176	0,11989	0,11268	0,10165	0,08805	0,07328	0,01696	0,00075
<b>0,20</b>	0,15889	0,15854	0,15748	0,15331	0,13777	0,11540	0,09025	0,06609	0,00732	0,00065
<b>0,25</b>	0,19347	0,19281	0,19086	0,18324	0,15584	0,11933	0,08271	0,05246	0,00402	0,00065
<b>0,30</b>	0,22624	0,22516	0,22197	0,20968	0,16729	0,11567	0,07035	0,03885	0,00306	0,00064
<b>0,35</b>	0,25731	0,25569	0,25091	0,23270	0,17287	0,10705	0,05724	0,02838	0,00278	0,00064
<b>0,40</b>	0,28679	0,28450	0,27776	0,25245	0,17356	0,09596	0,04582	0,02141	0,00268	0,00064
<b>0,45</b>	0,31477	0,31168	0,30261	0,26909	0,17046	0,08462	0,03697	0,01713	0,00264	0,00064
<b>0,50</b>	0,34135	0,33733	0,32557	0,28285	0,16462	0,07353	0,03059	0,01459	0,00262	0,00064

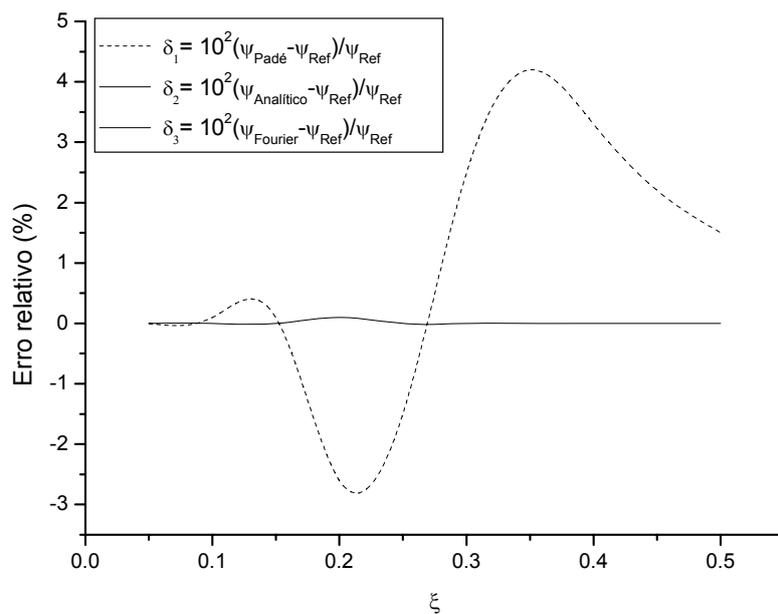
**Tabela 5.9 - Valores do termo de interferência  $\chi(x, \xi)$  obtidos através da aproximação de Padé 4 pólos.**

$x \backslash \xi$	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
<b>0,05</b>	0	0,00120	0,00239	0,00478	0,00951	0,01415	0,01865	0,02297	0,04076	0,05221
<b>0,10</b>	0	0,00458	0,00915	0,01821	0,03573	0,05192	0,06626	0,07833	0,10133	0,05958
<b>0,15</b>	0	0,00986	0,01968	0,03894	0,07469	0,10460	0,12691	0,14098	0,12194	0,05357
<b>0,20</b>	0	0,01680	0,03344	0,06567	0,12219	0,16296	0,18540	0,19091	0,11756	0,05169
<b>0,25</b>	0	0,02514	0,04994	0,09714	0,17413	0,21911	0,23168	0,22025	0,11090	0,05099
<b>0,30</b>	0	0,03470	0,06873	0,13219	0,22695	0,26758	0,26211	0,23161	0,10679	0,05066
<b>0,35</b>	0	0,04529	0,08940	0,16976	0,27775	0,30558	0,27813	0,23206	0,10449	0,05047
<b>0,40</b>	0	0,05674	0,11160	0,20891	0,32442	0,33265	0,28376	0,22785	0,10316	0,05035
<b>0,45</b>	0	0,06890	0,13498	0,24881	0,36562	0,34995	0,28325	0,22262	0,10234	0,05027
<b>0,50</b>	0	0,08164	0,15927	0,28875	0,40068	0,35952	0,27983	0,21787	0,10179	0,05021

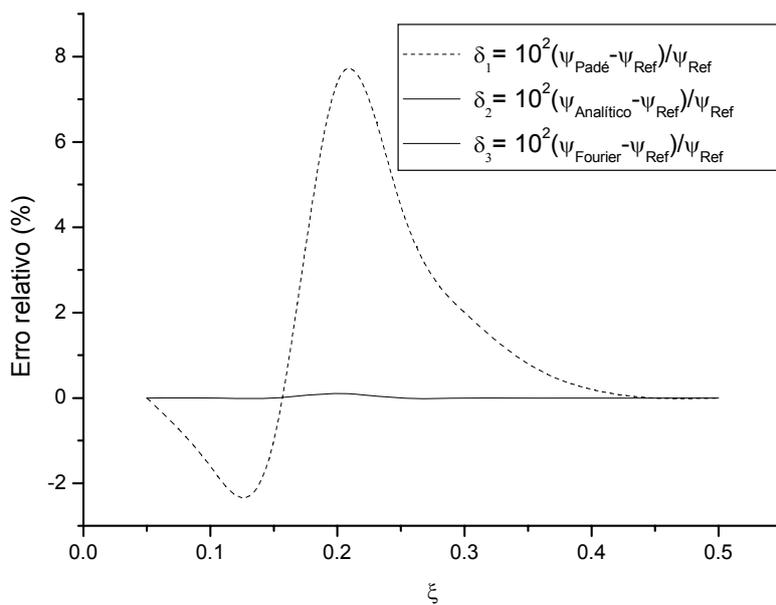
Nas figuras de 5.5 a 5.10 são apresentados os erros relativos para o cálculo da função de alargamento Doppler, utilizando os métodos propostos no capítulo III, equações (3.29), (3.51) e método de Padé de 4 pólos, tomando-se como referência o método da quadratura de Gauss-Legendre.



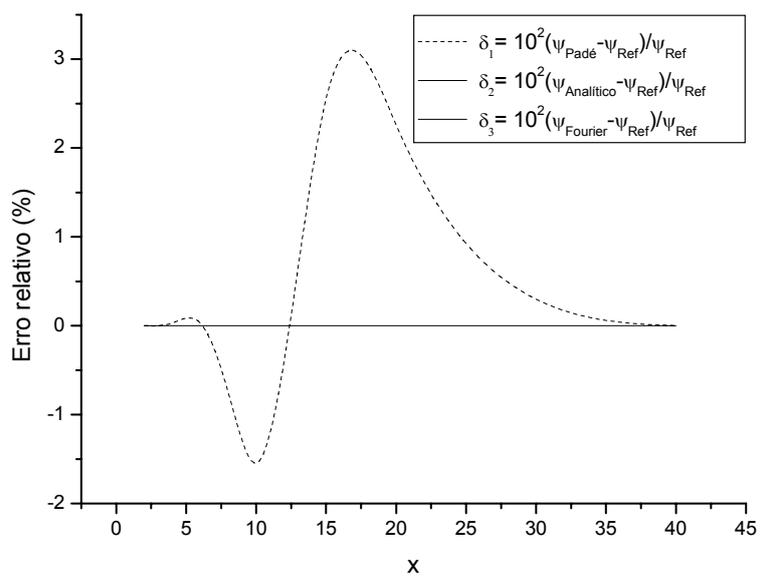
**Figura 5.5 - Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.29) e (3.51), para  $x = 10$ .**



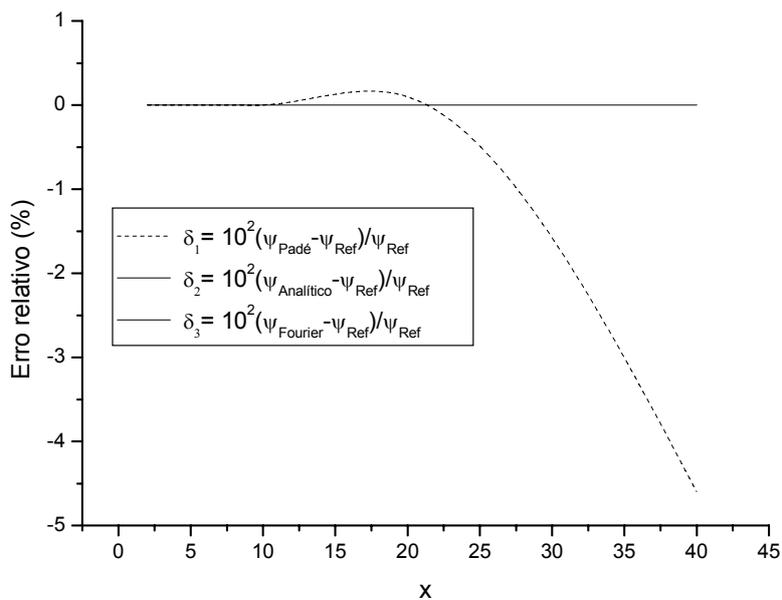
**Figura 5.6 - Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.29) e (3.51), para  $x = 20$ .**



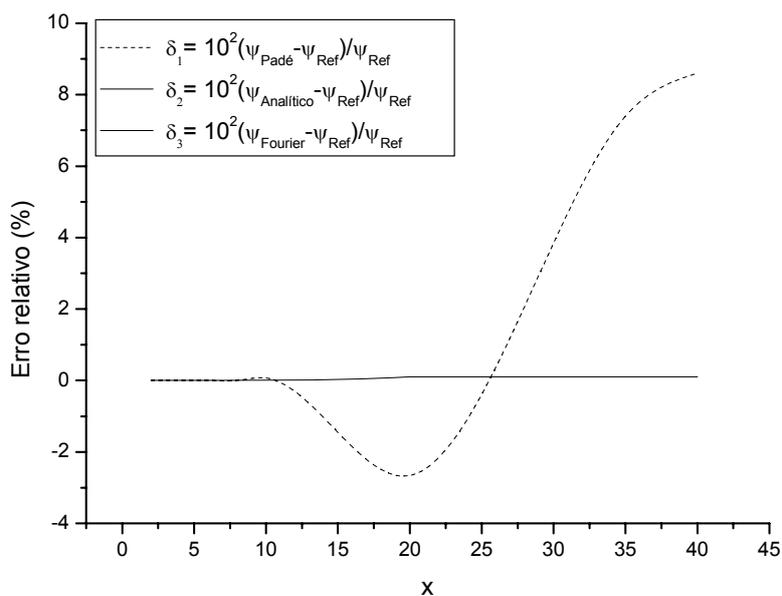
**Figura 5.7 - Erro relativo do método da aproximação de Padé 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.29) e (3.51), para  $x = 35$ .**



**Figura 5.8 - Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.29) e (3.51), para  $\xi = 0,45$ .**



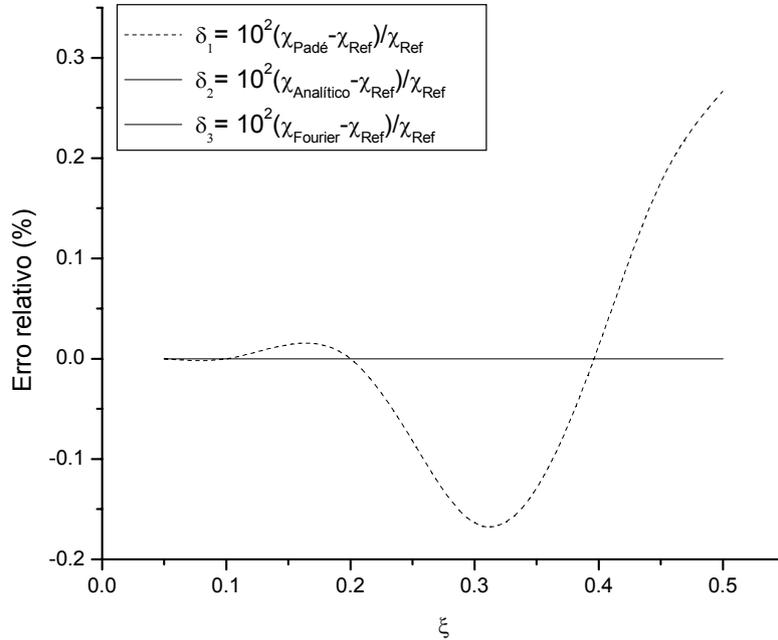
**Figura 5.9 - Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.29) e (3.51), para  $\xi = 0,10$ .**



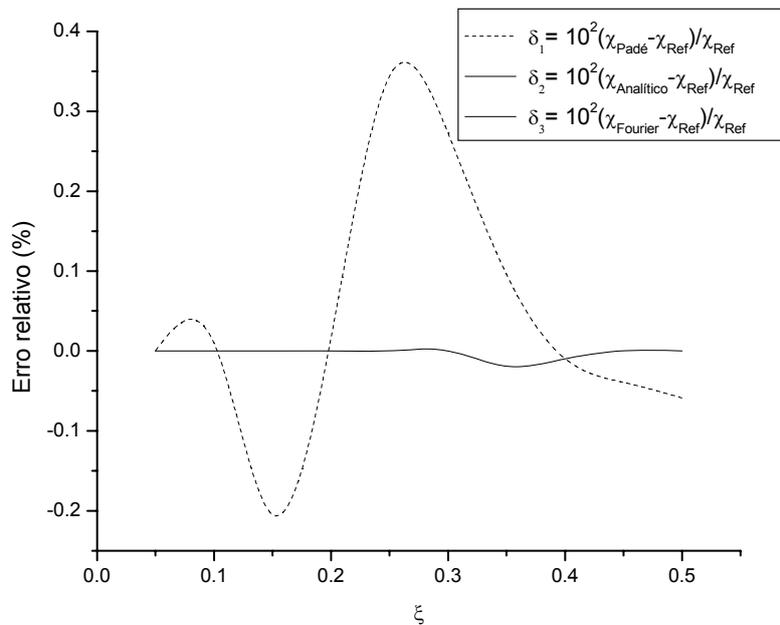
**Figura 5.10 - Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.29) e (3.51), para  $\xi = 0,20$ .**

Nas figuras de 5.11 a 5.16 são apresentados os erros relativos para o cálculo do termo de interferência  $\chi(x, \xi)$ , utilizando os métodos propostos no capítulo III,

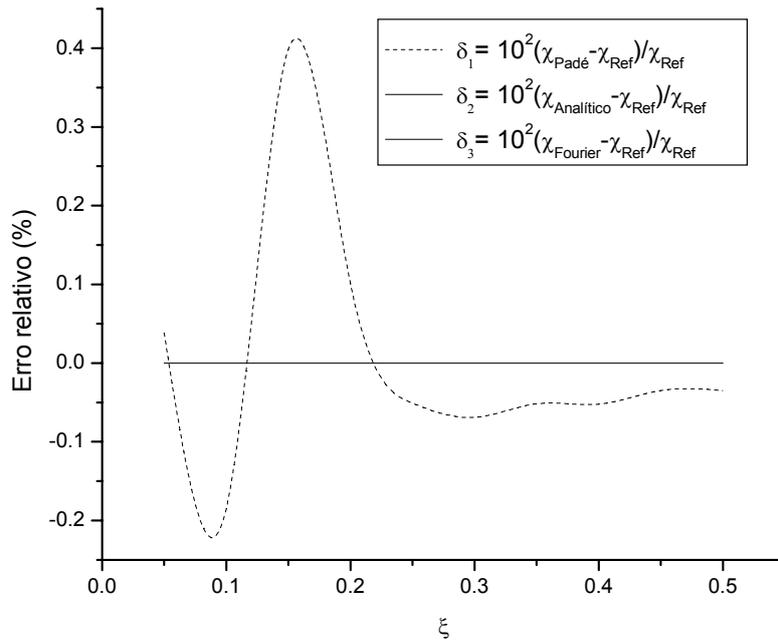
equações (3.35) e (3.56) e método de Padé de 4 pólos, tomando-se como referência o método da quadratura de Gauss-Legendre.



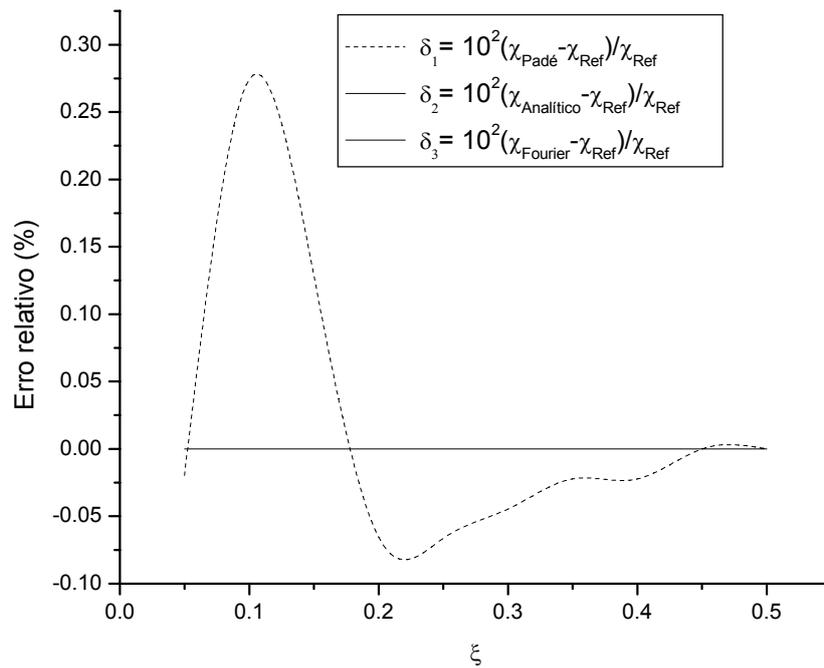
**Figura 5.11 - Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.35) e (3.56), para  $x = 10$ .**



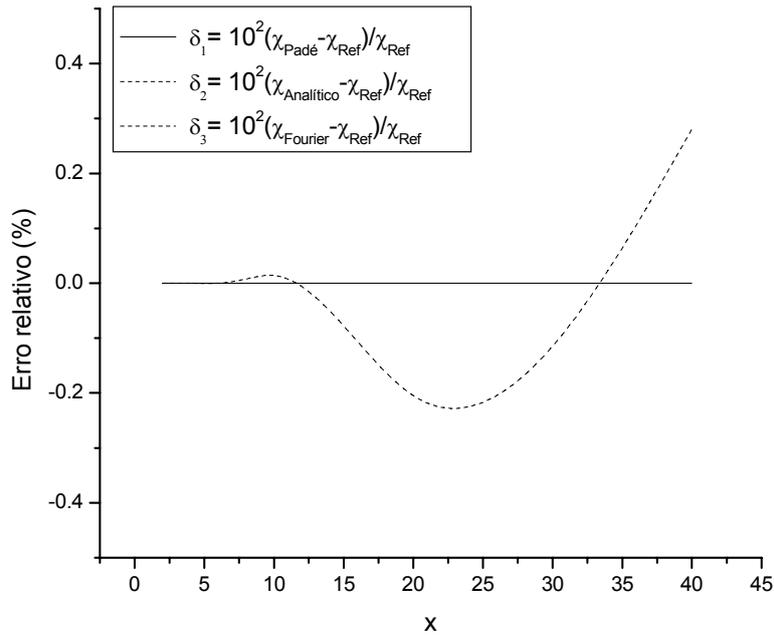
**Figura 5.12 - Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.35) e (3.56), para  $x = 20$ .**



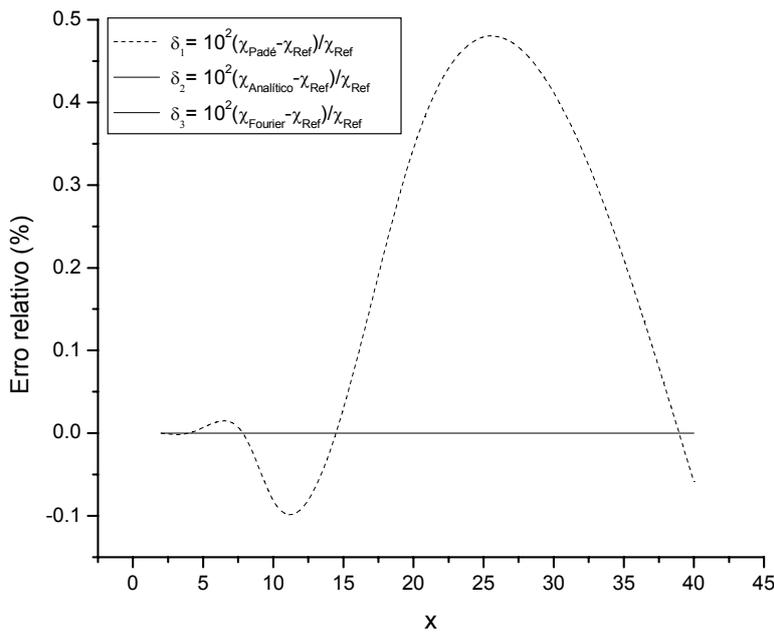
**Figura 5.13 - Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.35) e (3.56), para  $x = 35$ .**



**Figura 5.14 - Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.35) e (3.56), para  $x = 45$ .**



**Figura 5.15 - Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.35) e (3.56), para  $\xi = 0,15$ .**



**Figura 5.16 - Erro relativo do método da aproximação de Padé de 4 pólos e os métodos propostos, equação (3.35) e (3.56), para  $\xi = 0,25$ .**

Os resultados apresentados nas tabelas 5.4 a 5.7 mostram que os métodos propostos para função de alargamento Doppler, equações (3.29) e (3.51), e para o

termo de interferência, equações (3.35) e (3.56), estão de acordo com os valores de referência apresentados nas tabelas 5.2 e 5.3.

Analisando os resultados apresentadas pela figuras 5.5 a 5.16, é possível observar que os métodos propostos, através das soluções fechadas e da série de Fourier, para as funções  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$ , apresentaram resultados bastante acurados, com erro relativo máximo absoluto de 0,1% para  $\psi(x, \xi)$  e 0,01% para  $\chi(x, \xi)$ . Já o método da aproximação de Padé de 4 pólos apresentou erro relativo máximo de 8% para  $\psi(x, \xi)$  e 0,5% para  $\chi(x, \xi)$ .

Através dos resultados obtidos, pode-se concluir que os métodos propostos apresentam resultados mais acurados que aqueles obtidos através do método de Padé de 4 pólos, os resultados obtidos tanto pelas soluções fechadas quanto pelas aproximações em série de Fourier podem ser considerados exatos, visto que os mesmos apresentaram erros relativos desprezíveis. Desta forma os métodos propostos podem ser adotados como referência para futuras aplicações.

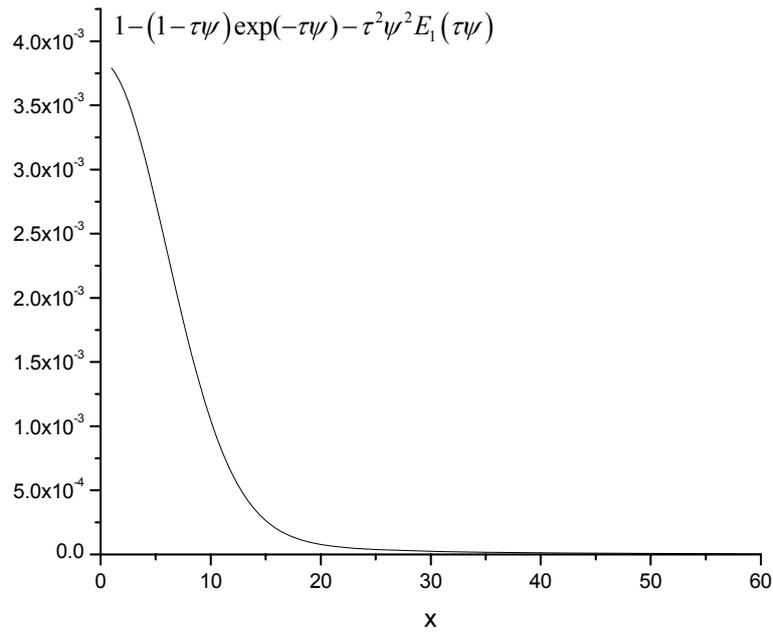
Na próxima seção são apresentados os resultados obtidos com a solução fechada da função de alargamento Doppler, equação (3.29), e a aproximação em série de Fourier, equação (3.51).

### 5.3 Fator de Auto-blindagem

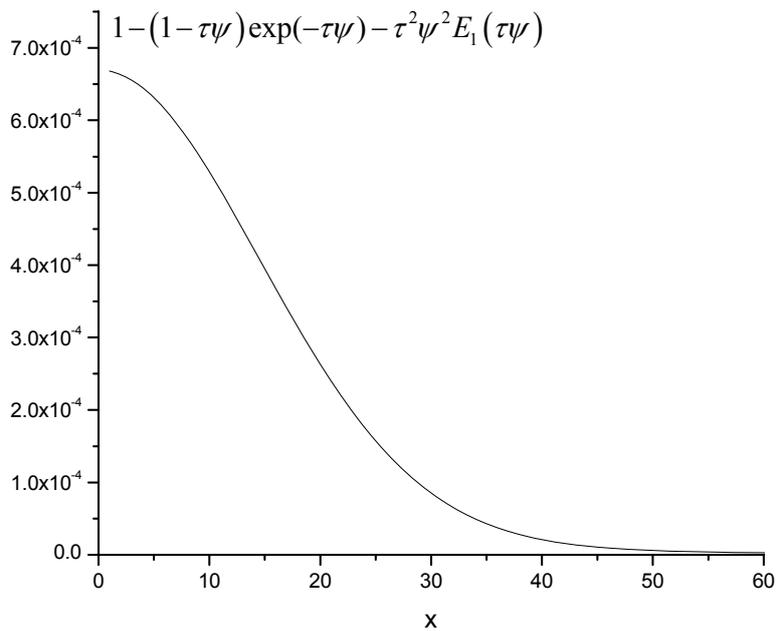
No capítulo anterior foi apresentado uma expressão para fator de auto-blindagem ressonante proposta por Palma, et. al. (PALMA, et al., 2007), equação (4.2), a qual pode ser escrita como:

$$G_{epi}(\xi, \tau) = \frac{1}{\pi\tau} \int_0^{+\infty} \left[ 1 - (1 - \tau\psi) e^{-\tau\psi(x, \xi)} - \tau^2 \psi^2 E_1(\tau\psi) \right] dx \quad (5.3)$$

A partir da equação (5.3) deve-se determinar um infinito numérico, a fim de calcular o fator de auto-blindagem. Isso pode ser feito mais facilmente analisando as figura (5.17) e (5.18) a seguir.



**Figura 5.17 – Integrande de  $G_{epi}(\xi, \tau)$  para  $\tau = 0,01$  e  $\xi = 0,25$ .**



**Figura 5.18 – Integrande  $G_{epi}(\xi, \tau)$  para  $\tau = 0,004$  e  $\xi = 0,01$ .**

Analisando as figuras 5.17 e 5.18, pode-se observar que o integrando da equação (5.3), tende a zero à medida que a energia aumenta. Para valores de  $x$  superiores a 50, tem-se que  $1 - (1 - \tau\psi) e^{-\tau\psi(x, \xi)} - \tau^2 \psi^2 E_1(\tau\psi) \approx 0$ , desta forma pode-

se adotar, para fins de cálculos computacionais, um infinito numérico  $x = 100$ , pois para valores acima de  $x = 100$  o integrando da equação (5.3) trará contribuições desprezíveis para o cálculo do fator de auto-blindagem ressonante  $G_{epi}(\xi, \tau)$ . Desta forma o fator de auto-blindagem pode ser escrito como:

$$G_{epi}(\xi, \tau) = \frac{1}{\pi\tau} \int_0^{100} \left[ 1 - (1 - \tau\psi) e^{-\tau\psi(x, \xi)} - \tau^2 \psi^2 E_1(\tau\psi) \right] dx. \quad (5.4)$$

A seguir são apresentados os resultados obtidos para as 20 primeiras ressonâncias do isótopo  $U^{238}$ , utilizando os métodos propostos para função de alargamento Doppler, dadas pelas equações (3.29) e (3.51), e pelo método da aproximação de Padé de 4 pólos. Foi tomado como referência o método da quadratura de Gauss-Legendre para  $\psi(x, \xi)$ .

No cálculo da integral da equação (5.4) empregou-se o método da quadratura de Gauss-Legendre de ordem 15, subdividindo o intervalo de integração em 80 partes, a fim de tornar os cálculos ainda mais precisos.

**Tabela 5.10 - Resultados obtidos para  $G_{epi}(\xi, \tau)$  correspondentes às 20 primeiras**

**ressonâncias do isótopo  $U^{238}$  para  $\tau = 0,01$  e  $T = 1450K$ . Fonte: JENDL – 3.2.**

$E_0 (eV)$	$\Gamma_\gamma \times 10^{-3} eV$	$\Gamma_n \times 10^{-3} eV$	$\xi$	$G_{epi}(\xi, \tau)$ $\psi_{Gauss}$	$G_{apr.}(\xi, \tau)$ $\psi_{Analítico}$ Eq. (3.49)	$G_{apr.}(\xi, \tau)$ $\psi_{Série\_Fourier}$ Eq. (3.72)	$G_{apr.}(\xi, \tau)$ $\psi_{Padé}$
6,67	23,00	1,49	0,2041	0,98950	0,98950	0,98950	0,98948
20,87	22,91	10,26	0,1563	0,99011	0,99011	0,99012	0,99009
36,68	22,89	34,13	0,2026	0,98950	0,98950	0,98950	0,98948
66,03	23,36	24,68	0,1272	0,99060	0,99060	0,99061	0,99058
80,75	23,00	1,87	0,0596	0,99160	0,99160	0,99160	0,99230
102,56	23,42	71,70	0,2021	0,98950	0,98950	0,98950	0,98948
116,90	22,99	25,49	0,0965	0,99110	0,99110	0,99111	0,99114
145,66	23,00	0,85	0,0425	0,98656	0,98656	0,98623	0,98679
165,29	23,00	3,37	0,0441	0,98656	0,98656	0,98623	0,98679
189,67	22,38	173,20	0,3056	0,98815	0,98815	0,98815	0,98814
208,51	23,94	51,11	0,1119	0,99094	0,99094	0,99094	0,99094
237,38	24,54	27,16	0,0722	0,99155	0,99155	0,99155	0,99198
257,22	23,00	0,03	0,0309	0,95710	0,95710	0,95540	0,95681
273,66	22,10	25,79	0,0623	0,99160	0,99160	0,99160	0,99230
291,00	22,12	16,87	0,0492	0,99115	0,99115	0,99112	0,99192
311,32	23,00	1,09	0,0294	0,95710	0,95710	0,95540	0,95681
347,79	22,51	82,00	0,1206	0,99077	0,99077	0,99077	0,99076
353,45	23,00	0,02	0,0264	0,95710	0,95710	0,95540	0,95681
376,93	23,00	1,13	0,0267	0,95710	0,95710	0,95540	0,95681
397,62	22,38	173,20	0,2111	0,98935	0,98935	0,98935	0,98934

Os dados apresentados na tabela 5.10, demonstram que tanto a solução com o método de Padé de 4 pólos para  $\psi(x, \xi)$  quanto os métodos propostos são métodos precisos para o cálculo de  $G_{epi}(\xi, \tau)$ . Entretanto, o emprego da solução fechada para  $\psi(x, \xi)$  no cálculo de do fator de auto-blindagem ressonante mostrou-se

rigorosamente igual ao método de referência. Na próxima seção é apresentada uma nova aproximação para o fator de auto-blindagem ressonante.

### 5.3.1 Uma nova aproximação para $G_{epi}(\xi, \tau)$

Nas referências (DUDERSTAD & HAMILTON, 1976) e (SHCHERBAKOV & HARADA, 2002) encontram-se tabelas com valores típicos de concentração de núcleos absorvedores em reatores PWR e de espessura dos discos alvos utilizados na técnica de ativação.

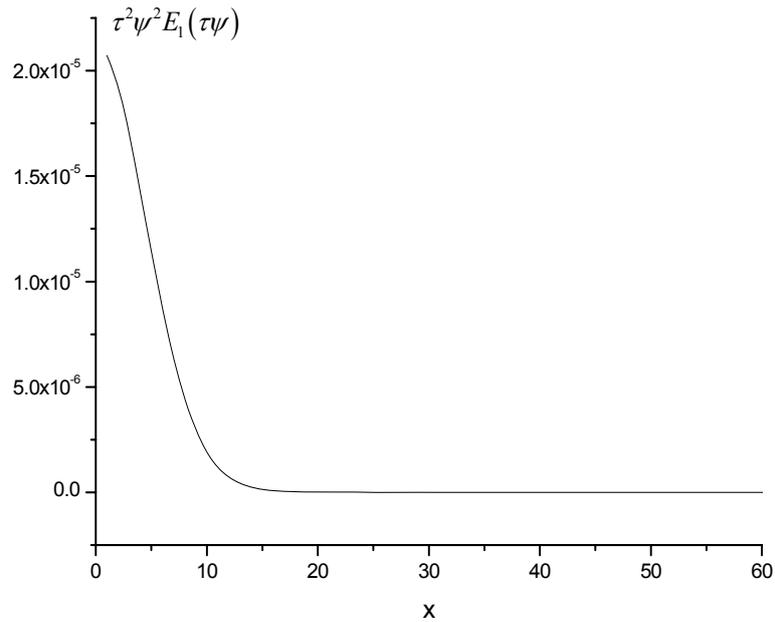
**Tabela 5.11 - Parâmetros nucleares típicos em reatores PWR.**

Constante de grupo	2 grupos		4 grupos			
$\Sigma_a (cm^{-1})$	1 de 2	2 de 2	1 de 4	2 de 4	3 de 4	4 de 4
		0,01207	0,1210	0,004946	0,002840	0,03053
Intervalo típico da espessura do disco alvo (t em cm)						
$2 \times 10^{-6} - 8 \times 10^{-2}$						

Através dos dados mostrados na tabela 5.11 é possível estimar o intervalo de interesse da espessura efetiva  $\tau = t\Sigma_0$  como sendo  $[5,6 \times 10^{-9}, 9,7 \times 10^{-3}]$ . Com base na utilização de valores típicos da espessura  $\tau$ , citados acima, é proposta uma nova aproximação para o cálculo dos fatores de auto-blindagem, a qual consiste em desprezar o termo  $-\tau^2\psi^2 E_1(\tau\psi)$  em relação aos demais termos do integrando da equação (5.4). Sendo assim, o fator de auto-blindagem ressonante assume a seguinte aproximação, dada por:

$$G_{epi}(\xi, \tau) \approx G_{apr.}(\xi, \tau) = \frac{1}{\pi\tau} \int_0^{100} 1 - (1 - \tau\psi) e^{-\tau\psi(x, \xi)} dx. \quad (5.5)$$

A figura 5.19 mostra o comportamento como o termo  $\tau^2\psi^2 E_1(\tau\psi)$  com respeito à variável  $x$ .



**Figura 5.19 – Termo  $\tau^2 \psi^2 E_1(\tau \psi)$  para  $\tau = 0.01$  e  $\xi = 0.25$ .**

Analisando-se as figuras 5.17 e 5.19 é possível verificar que o termo  $\tau^2 \psi^2 E_1(\tau \psi)$  da equação (5.4) tem uma contribuição desprezível no cálculo do fator de auto-blindagem ressonante, visto que o mesmo tende rapidamente à zero após  $x = 15$ . Isso corrobora as considerações relacionadas à escolha do um infinito numérico proposto.

Na tabela 5.12 encontram-se resultados para o cálculo do fator de auto-blindagem ressonante empregando-se a aproximação dada pela equação (5.5), para as 20 primeiras ressonâncias do isótopo  $U^{238}$ . Para este cálculo utilizou-se apenas a formulação fechada para  $\psi(x, \xi)$ , visto que esta é mais precisa.

**Tabela 5.12 - Resultados obtidos para  $G_{epi}(\xi, \tau)$  e  $G_{apr.}(\xi, \tau)$  correspondentes às 20**

**primeiras ressonâncias do isótopo  $U^{238}$  para  $\tau = 0,01$  e  $T = 1450K$ . Fonte: JENDL – 3.2.**

$E_0 (eV)$	$\Gamma_\gamma \times 10^{-3} eV$	$\Gamma_n \times 10^{-3} eV$	$\xi$	$G_{epi}(\xi, \tau)$	$G_{apr.}(\xi, \tau)$	Desvio percentual (%)
6,67	23,00	1,49	0,2041	0,98950	0,99280	-0,33
20,87	22,91	10,26	0,1563	0,99011	0,99292	-0,28
36,68	22,89	34,13	0,2026	0,98950	0,99280	-0,33
66,03	23,36	24,68	0,1272	0,99060	0,99300	-0,24
80,75	23,00	1,87	0,0596	0,99160	0,99290	-0,13
102,56	23,42	71,70	0,2021	0,98950	0,99280	-0,33
116,90	22,99	25,49	0,0965	0,99110	0,99306	-0,20
145,66	23,00	0,85	0,0425	0,98656	0,98748	-0,09
165,29	23,00	3,37	0,0441	0,98656	0,98748	-0,09
189,67	22,38	173,20	0,3056	0,98815	0,99249	-0,44
208,51	23,94	51,11	0,1119	0,99094	0,99305	-0,21
237,38	24,54	27,16	0,0722	0,99155	0,99302	-0,15
257,22	23,00	0,03	0,0309	0,95710	0,95783	-0,08
273,66	22,10	25,79	0,0623	0,99160	0,99290	-0,13
291,00	22,12	16,87	0,0492	0,99115	0,99227	-0,11
311,32	23,00	1,09	0,0294	0,95710	0,95783	-0,08
347,79	22,51	82,00	0,1206	0,99077	0,99303	-0,23
353,45	23,00	0,02	0,0264	0,95710	0,95783	-0,08
376,93	23,00	1,13	0,0267	0,95710	0,95783	-0,08
397,62	22,38	173,20	0,2111	0,98935	0,99276	-0,34

Na tabela 5.12  $G_{epi}(\xi, \tau)$  representa o cálculo do fator de auto-blindagem através da equação (5.4), utilizando-se a solução fechada para  $\psi(x, \xi)$  e  $G_{apr.}(\xi, \tau)$  representa o cálculo do fator de auto-blindagem através da equação (5.5), utilizando-se a mesma solução fechada para  $\psi(x, \xi)$ .

Analisando os resultados apresentados na tabela 5.12, é possível observar que a aproximação proposta para o cálculo do fator de auto-blindagem ressoante, dada

pela equação (5.5), apresentou bons resultados, levando a um desvio percentual máximo de 0,44 %, para um valor de  $\tau$  dentro da faixa de interesse prático.

Com relação ao tempo computacional dos métodos apresentados, foram realizados ensaios numéricos de cálculo dos fatores de auto-blindagem utilizando dois métodos de cálculo da função de alargamento Doppler existentes na literatura, a saber, o método da quadratura gaussiana de ordem 15 e o método da solução fechada (GONÇALVES, et al., 2008), equação (3.29). Não se utilizou o método da série de Fourier para  $\psi(x, \xi)$ , visto que este não é tão preciso quanto à solução fechada. Foram efetuados os cálculos também para a nova aproximação proposta dada pela equação (5.5).

No cálculo do tempo computacional do fator de auto-blindagem ressonante para as 20 primeiras ressonâncias do isótopo  $U^{238}$ , utilizou-se a sub-rotina "CPUTIME" do compilador Visual Fortran. E para se ter uma quantidade apreciável de dados para uma boa estatística, repetiu-se os cálculos dos fatores de auto-blindagem das 20 ressonâncias 2000 vezes, totalizando 40000 cálculos. Os valores de tempo computacional para os casos estudados encontram-se na tabela 5.10. Cada tomada de tempo foi repetida 10 vezes para que um estudo estatístico pudesse ser efetuado. A máquina utilizada nos testes foi um Intel Core 2 Duo de 2.66 GHZ com 2 GB de memória RAM.

**Tabela 5.13 - Tempo de cálculo computacional para  $G_{epi}(\xi, \tau)$  e  $G_{apr.}(\xi, \tau)$ , utilizando-se dois diferentes métodos para função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$ .**

<b>Método empregado para o cálculo de <math>G_{epi}(\xi, \tau)</math> e <math>G_{apr.}(\xi, \tau)</math>, com <math>\psi(x, \xi)</math>.</b>	<b>Tempo computacional médio (s)</b>	<b>Desvio padrão (s)</b>
$G_{epi}(\xi, \tau)$ com $\psi(x, \xi)$ analítico, eq. (3.49).	9,416	0,011
$G_{apr.}(\xi, \tau)$ com $\psi(x, \xi)$ analítico, eq. (3.49).	8,172	0,007
$G_{epi}(\xi, \tau)$ com $\psi(x, \xi)$ integrado c/ (Q.G.)*.	85,364	0,079
$G_{apr.}(\xi, \tau)$ com $\psi(x, \xi)$ integrado c/ (Q.G.)*.	83,927	0,028

\*Q.G. indica o método da quadratura de Gauss-Legendre.

Através dos dados da tabela 5.10, pode-se concluir que a aproximação proposta apresenta economia considerável de tempo computacional para ambos os métodos de cálculo da função de alargamento Doppler. O ganho relativo de tempo é maior para o método utilizando a solução fechada (13.21%) que para o método da quadratura gaussiana (1.68%). Além disso, quando a função de alargamento Doppler é calculada a partir da equação (3.29) as medidas de tempo tornam-se mais confiáveis que utilizando a quadratura gaussiana para o mesmo fim, visto que apresenta um desvio-padrão menor. A dispersão das medidas de tempo computacional em relação à média fica ainda mais reduzida quando se utiliza a aproximação no integrando dada pela equação (5.5), independentemente do método utilizado no cálculo da função de alargamento Doppler. Essa redução foi de 36,36% quando se utilizou a solução fechada dada pela equação (5.5), e de 64,55% no caso da quadratura gaussiana.

O cálculo do fator de auto-blindagem ressonante pode ser melhorado ainda mais, desde que existam aproximações para função de alargamento que garantam a precisão e a rapidez computacional. Com base na solução fechada, equação (3.29), apresentada nesta tese, pode-se propor uma aproximação que eleve o ganho de tempo computacional sem comprometer a credibilidade dos cálculos no fator de auto-blindagem, para tanto se deve reescrever a equação (3.29), utilizando-se a relação de

Euler e as propriedades da função erro (apêndice C). Obtém-se a seguinte representação funcional para  $\psi(x, \xi)$ :

$$\psi(x, \xi) = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left[-\frac{1}{4}\xi^2(x^2-1)\right] \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \left\{ 1 + \operatorname{Re} \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) + \tan\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \operatorname{Im} \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) \right\} \quad (5.6)$$

Baseado na equação (5.6) é possível aproximar a função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$  para o cálculo do fator de auto-blindagem ressonante na faixa epitérmica de energia (PALMA, et al., 2008). A aproximação consiste em aproximar a função  $\psi(x, \xi)$  como

$$\psi_{apr}(x, \xi) = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left[-\frac{1}{4}\xi^2(x^2-1)\right] \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right), \quad (5.7)$$

válida somente quando

$$1 + \operatorname{Re} \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) + \tan\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \operatorname{Im} \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) \approx 0. \quad (5.8)$$

Os resultados obtidos com a aproximação dada pela equação (5.7), para cálculo do fator de auto-blindagem, são apresentados na tabela 5.14, considerando as 20 primeiras ressonâncias dos nuclídeos  $\text{Th}^{232}$  e  $\text{Pu}^{240}$  e as 56 primeiras ressonâncias do nuclídeo  $\text{Au}^{197}$ , para uma temperatura de 300K. Os parâmetros nucleares necessários para os cálculos podem ser encontrados na literatura (TALAMO, 2007) e (MUGHABGHAB & GARBER, 1973). A ponderação dos fatores de auto-blindagem foi efetuada segundo a expressão utilizada por (SHCHERBAKOV & HARADA, 2002):

$$\langle G_{epi} \rangle = \frac{1}{I_0} \sum_i \frac{\sigma_{0i} \Gamma_{0i}}{E_{0i}} (G_{apr}), \quad (5.9)$$

onde,  $I_0 = \sum_i \sigma_{0i} \Gamma_{0i} / E_{0i}$  e sendo  $\sigma_{0i}$  o pico de ressonância da  $i$ -ésima ressonância

$E_{0i}$  de largura de captura radiativa  $\Gamma_{0i}$ .

**Tabela 5.14 - Cálculo do fator de auto-blindagem ressonante ponderado utilizando três diferentes métodos no cálculo da função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$ .**

Isótopos	$\langle G_{epi} \rangle$ com Equação (3.49)	$\langle G_{epi} \rangle$ com Equação (3.72)	$\langle G_{epi} \rangle$ com Equação (5.7)	$\langle G_{epi} \rangle$ com Padé 4-pólos
Th <sup>232</sup>	0,99258	0,99258	0,99871	0,99257
Pu <sup>240</sup>	0,99063	0,99063	0,99461	0,99064
Au <sup>197</sup>	0,98899	0,98899	0,99553	0,98909

Na tabela 5.15 são apresentados os tempos de processamento nos cálculos dos fatores de auto-blindagem encontrados na tabela 1 sendo utilizado um computador do tipo Intel Core 2 Duo de 2.66 GHZ com 2 GB de memória RAM.

**5.15 - Cálculo do tempo computacional para  $\langle G_{epi} \rangle$  utilizando três diferentes métodos no cálculo da função de alargamento Doppler  $\psi(x, \xi)$ .**

Isótopos	$\langle G_{epi} \rangle$ com Equação (3.49) (ms)	$\langle G_{epi} \rangle$ com Equação (3.72) (ms)	$\langle G_{epi} \rangle$ com Equação (5.7) (ms)	$\langle G_{epi} \rangle$ com Padé 4-pólos (ms)
Th <sup>232</sup>	3,44	12,5	0,31	1,56
Pu <sup>240</sup>	3,44	12,5	0,31	1,56
Au <sup>197</sup>	12,8	22,8	0,94	4,02

A partir das tabelas 5.14 e 5.15, pode-se concluir que a aproximação proposta para a função de alargamento Doppler dada pela equação (5.7), apresenta bons resultados para o cálculo de  $\langle G_{epi} \rangle$ , com um desvio percentual médio de aproximadamente de 1,0% em relação à de referência. Já o método de Padé de 4 pólos mostrou-se um pouco mais preciso, obtendo um desvio percentual médio de 0,3%, porém a aproximação proposta pela equação (5.7) mostrou-se muito mais

eficiente do ponto de vista do tempo computacional, tendo um ganho de tempo computacional relativo de 78% com respeito ao método de Padé de 4 pólos.

Na próxima seção são apresentados os resultados obtidos para o cálculo da função  $J(\xi, \beta)$ , empregando a solução fechada da função de alargamento Doppler dada pela equação (3.29).

#### 5.4 Função $J(\xi, \beta)$ .

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos para o cálculo da função  $J(\xi, \beta)$ , função esta que é empregada diretamente no cálculo das integrais de ressonâncias para um meio homogêneo. Para o cálculo da função  $J(\xi, \beta)$  não se utilizou o método da série de Fourier para  $\psi(x, \xi)$ , visto que o mesmo não se mostrou adequado do ponto de vista numérico e nem de tempo computacional.

$$J(\xi, \beta) = \int_0^{\infty} \frac{\psi(x, \xi)}{\psi(x, \xi) + \beta} dx. \quad (5.10)$$

Uma breve análise gráfica do integrando da função  $J(\xi, \beta)$  ajuda a subsidiar a decisão de quais métodos de cálculo da função de alargamento Doppler deve-se empregar no cálculo da função  $J(\xi, \beta)$  (GONÇALVES *et al.*, 2007). A figura 5.20 ajuda no entendimento dessa escolha.

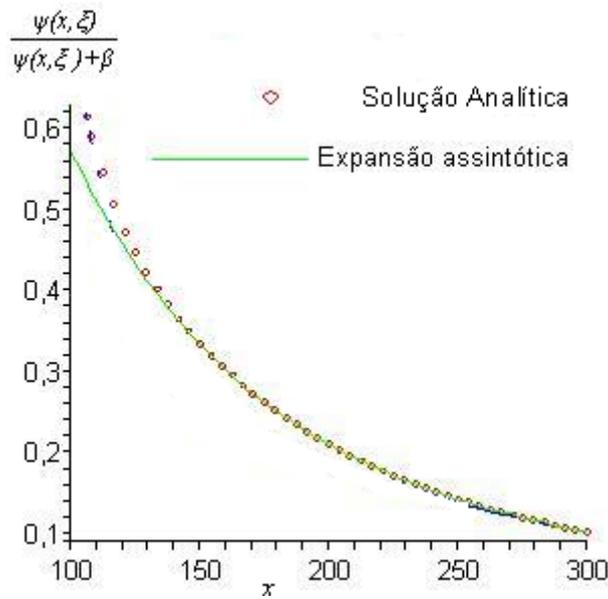


Figura 5.20 – Integrando da função  $J(\xi, \beta)$  para  $\beta = 0,001$  e  $\xi = 0,25$ .

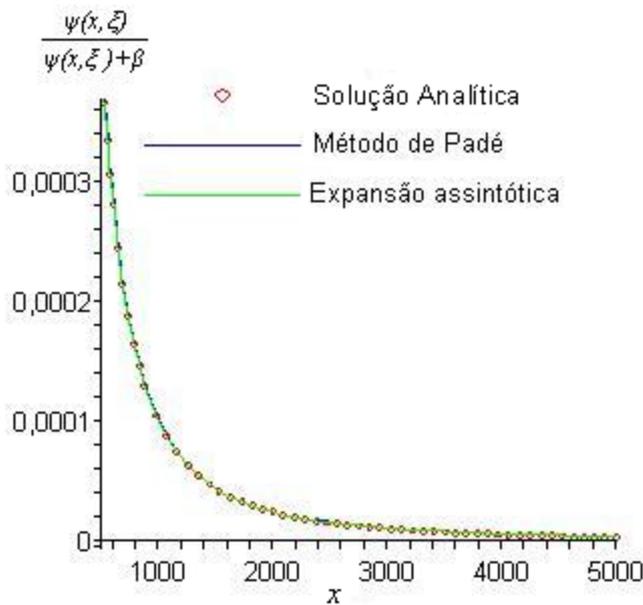
Analisando a figura 5.20, pode-se observar que para valores grandes de  $x$  a expansão assintótica dada pela equação (3.62) convergem para os valores da solução fechada dada pela equação (3.29), porém para um intervalo entre  $x = 100$  e  $x = 130$ , o método da expansão assintótica apresenta resultados menos acurados. Sendo assim, a metodologia de cálculo proposta para cálculo da função  $J(\xi, \beta)$  consiste na conjugação do método da solução fechada, equação (3.29), com o método da expansão assintótica, equação (3.62), no cálculo da função de alargamento Doppler, através da equação a seguir (GONÇALVES *et al.*, 2007):

$$\psi(x, \xi) = \begin{cases} \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left[-\frac{1}{4}\xi^2(x^2-1)\right] \cos\left(\frac{\xi^2x}{2}\right) \\ \left\{ 1 + \operatorname{Re} \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) + \tan\left(\frac{\xi^2x}{2}\right) \operatorname{Im} \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) \right\} \text{ se } |x \cdot \xi| \leq 30 \\ \sum_{k=1}^4 \frac{(-1)^k}{x^{2k}} F^{(2k-1)} \text{ se } |x \cdot \xi| \geq 30 \end{cases} \quad (5.11)$$

onde:

$$\begin{aligned}
 F^1 &= -1 \\
 F^3 &= \frac{6}{\xi^2} - 1 \\
 F^5 &= -\frac{60}{\xi^4} + \frac{20}{\xi^2} - 1 \\
 F^7 &= \frac{840}{\xi^6} - \frac{420}{\xi^4} + \frac{42}{\xi^2} - 1.
 \end{aligned}
 \tag{5.12}$$

A integral unidimensional da equação (5.10) é calculada utilizando o método da quadratura Gauss-Legendre de ordem 15. A figura 5.21 ajuda na decisão de adotar o infinito numérico no ponto  $x=5000$ , visto que o integrando vai à zero rapidamente nas imediações deste ponto.



**Figura 5.21 – Integrando da função  $J(\xi, \beta)$  para  $\beta = 0,001$  e  $\xi = 0,25$ .**

Na Tabela 5.16 estão os resultados referentes aos tempos computacionais gastos pelos diferentes métodos no cálculo da função de alargamento Doppler. Cada célula desta tabela equivale ao tempo gasto para calcular a função  $J(\xi, \beta)$  para um dado valor de  $\xi$ , variando  $j$  no intervalo  $[0,31]$  com passo igual a 1, sendo,  $\beta = 2^j \times 10^{-5}$ . Mais especificamente, cada célula da tabela mostra o tempo gasto para reproduzir uma coluna completa da tabela de referência (DRESNER, 1960).

**Tabela 5-16 - Tempo computacional no cálculo da função  $J(\xi, \beta)$  para diferentes métodos de cálculo da função  $\psi(x, \xi)$ .**

$\xi$	Método proposto (seg.)	Padé (seg.)	Gauss (seg.)
0,1	0,141	0,219	394,594
0,2	0,125	0,203	357,641
0,3	0,125	0,219	346,219
0,4	0,109	0,203	340,828
0,5	0,109	0,219	337,781
0,6	0,094	0,203	341,641
0,7	0,094	0,219	338,453
0,8	0,094	0,203	341,766
0,9	0,078	0,219	336,922
1,0	0,094	0,203	337,047

A partir dos dados da tabela 5.17 conclui-se que o método proposto é consideravelmente mais rápido que o método de Padé de 4-pólos. Para reproduzir toda a tabela de referência (DRESNER, 1960) o método de Padé gastou 98,50% mais tempo que o método proposto. Na tabela 5.17 encontram-se os resultados obtidos no cálculo da função  $J(\xi, \beta)$  utilizando o método proposto no cálculo da função de alargamento Doppler.

**Tabela 5.17 - Valores para função  $J(\xi, \beta)$  utilizando o método proposto no cálculo da função de alargamento Doppler onde  $\beta = 2^j \times 10^{-5}$ .**

$j$	$\xi = 0,1$	$\xi = 0,2$	$\xi = 0,3$	$\xi = 0,4$	$\xi = 0,5$	$\xi = 0,6$	$\xi = 0,7$	$\xi = 0,8$	$\xi = 0,9$	$\xi = 1,0$
0	4,783E+02	4,771E+02	4,769E+02	4,768E+02						
1	3,435E+02	3,418E+02	3,415E+02	3,414E+02	3,413E+02	3,413E+02	3,413E+02	3,413E+02	3,413E+02	3,413E+02
2	2,466E+02	2,441E+02	2,437E+02	2,435E+02	2,435E+02	2,434E+02	2,434E+02	2,434E+02	2,434E+02	2,434E+02
3	1,778E+02	1,742E+02	1,736E+02	1,734E+02	1,733E+02	1,732E+02	1,732E+02	1,732E+02	1,732E+02	1,732E+02
4	1,295E+02	1,244E+02	1,236E+02	1,233E+02	1,232E+02	1,231E+02	1,230E+02	1,230E+02	1,230E+02	1,230E+02
5	9,609E+01	8,931E+01	8,810E+01	8,768E+01	8,750E+01	8,740E+01	8,734E+01	8,730E+01	8,727E+01	8,725E+01
6	7,326E+01	6,470E+01	6,304E+01	6,247E+01	6,221E+01	6,207E+01	6,199E+01	6,193E+01	6,190E+01	6,187E+01
7	5,759E+01	4,762E+01	4,546E+01	4,469E+01	4,434E+01	4,415E+01	4,403E+01	4,396E+01	4,391E+01	4,387E+01
8	4,641E+01	3,581E+01	3,320E+01	3,222E+01	3,176E+01	3,150E+01	3,135E+01	3,125E+01	3,118E+01	3,113E+01
9	3,779E+01	2,755E+01	2,467E+01	2,350E+01	2,293E+01	2,261E+01	2,241E+01	2,228E+01	2,219E+01	2,213E+01
10	3,045E+01	2,151E+01	1,865E+01	1,739E+01	1,673E+01	1,636E+01	1,612E+01	1,596E+01	1,585E+01	1,577E+01
11	2,368E+01	1,675E+01	1,422E+01	1,301E+01	1,234E+01	1,193E+01	1,167E+01	1,150E+01	1,137E+01	1,128E+01
12	1,732E+01	1,268E+01	1,073E+01	9,713E+00	9,114E+00	8,734E+00	8,479E+00	8,299E+00	8,169E+00	8,072E+00
13	1,166E+01	9,079E+00	7,812E+00	7,085E+00	6,626E+00	6,319E+00	6,104E+00	5,948E+00	5,831E+00	5,742E+00
14	7,178E+00	6,013E+00	5,340E+00	4,913E+00	4,623E+00	4,418E+00	4,267E+00	4,153E+00	4,065E+00	3,996E+00
15	4,090E+00	3,658E+00	3,370E+00	3,168E+00	3,021E+00	2,911E+00	2,825E+00	2,759E+00	2,706E+00	2,662E+00
16	2,204E+00	2,067E+00	1,966E+00	1,889E+00	1,829E+00	1,781E+00	1,743E+00	1,712E+00	1,687E+00	1,665E+00
17	1,148E+00	1,109E+00	1,078E+00	1,053E+00	1,032E+00	1,016E+00	1,002E+00	9,902E-01	9,804E-01	9,720E-01
18	5,862E-01	5,757E-01	5,670E-01	5,598E-01	5,538E-01	5,487E-01	5,444E-01	5,407E-01	5,375E-01	5,348E-01
19	2,963E-01	2,936E-01	2,913E-01	2,893E-01	2,877E-01	2,863E-01	2,850E-01	2,840E-01	2,831E-01	2,823E-01
20	1,490E-01	1,483E-01	1,477E-01	1,472E-01	1,467E-01	1,464E-01	1,460E-01	1,458E-01	1,455E-01	1,453E-01
21	7,469E-02	7,451E-02	7,436E-02	7,423E-02	7,412E-02	7,402E-02	7,394E-02	7,387E-02	7,380E-02	7,374E-02
22	3,739E-02	3,735E-02	3,731E-02	3,728E-02	3,725E-02	3,723E-02	3,721E-02	3,719E-02	3,717E-02	3,716E-02
23	1,871E-02	1,870E-02	1,869E-02	1,868E-02	1,867E-02	1,867E-02	1,866E-02	1,866E-02	1,865E-02	1,865E-02
24	9,358E-03	9,355E-03	9,353E-03	9,351E-03	9,349E-03	9,348E-03	9,346E-03	9,345E-03	9,344E-03	9,343E-03
25	4,680E-03	4,679E-03	4,679E-03	4,678E-03	4,678E-03	4,677E-03	4,677E-03	4,677E-03	4,676E-03	4,676E-03
26	2,340E-03	2,340E-03	2,340E-03	2,340E-03	2,340E-03	2,340E-03	2,339E-03	2,339E-03	2,339E-03	2,339E-03
27	1,170E-03									
28	5,851E-04	5,851E-04	5,851E-04	5,851E-04	5,850E-04	5,850E-04	5,850E-04	5,850E-04	5,850E-04	5,850E-04
29	2,925E-04									
30	1,463E-04									
31	7,314E-05									

Nas tabelas 5.18, 5.19 e 5.20 o método proposto e os métodos de Padé de 4 pólos e da quadratura gaussiana são comparados tomando como referência os valores obtidos por (DRESNER, 1960).

**Tabela 5.18 - Função  $J(\xi, \beta)$  para  $\beta = 2^5 \times 10^{-5}$ .**

Função $J(\xi, \beta)$					Desvio percentual (%)		
$\xi$	Referência (Dresner)	Método proposto	Padé de 4-pólos	Gauss	Método proposto	Padé de 4 pólos	Gauss
0,1	96,670	96,086	94,802	95,150	-0,60	-1,97	-1,60
0,2	89,930	89,312	89,061	88,377	-0,69	-0,98	-1,76
0,3	88,720	88,095	88,053	87,160	-0,70	-0,76	-1,79
0,4	88,310	87,683	87,686	86,747	-0,71	-0,71	-1,80
0,5	88,120	87,496	87,508	86,560	-0,71	-0,70	-1,80
0,6	88,020	87,396	87,408	86,459	-0,71	-0,70	-1,81
0,7	87,960	87,336	87,346	86,399	-0,71	-0,70	-1,81
0,8	87,920	87,297	87,306	86,360	-0,71	-0,70	-1,81
0,9	87,900	87,270	87,278	86,334	-0,72	-0,71	-1,81
1,0	87,880	87,251	87,257	86,315	-0,72	-0,71	-1,81

**Tabela 5.19 - Função  $J(\xi, \beta)$  para  $\beta = 2^{10} \times 10^{-5}$ .**

Função $J(\xi, \beta)$					Desvio percentual (%)		
$\xi$	Referência (Dresner)	Método proposto	Padé de 4 pólos	Gauss	Método proposto	Padé de 4 pólos	Gauss
0,1	30,450	30,452	30,434	30,423	0,01	-0,05	-0,09
0,2	21,530	21,511	21,468	21,482	-0,09	-0,29	-0,22
0,3	18,670	18,646	18,600	18,617	-0,13	-0,38	-0,29
0,4	17,410	17,387	17,346	17,358	-0,13	-0,37	-0,30
0,5	16,750	16,734	16,701	16,705	-0,09	-0,29	-0,27
0,6	16,380	16,356	16,330	16,327	-0,15	-0,31	-0,32
0,7	16,140	16,120	16,100	16,091	-0,12	-0,25	-0,31
0,8	15,980	15,962	15,947	15,933	-0,11	-0,21	-0,29
0,9	15,870	15,852	15,841	15,823	-0,11	-0,18	-0,29
1,0	15,790	15,773	15,764	15,744	-0,11	-0,16	-0,29

**Tabela 5.20 - Função  $J(\xi, \beta)$  para  $\beta = 2^{15} \times 10^{-5}$ .**

Função $J(\xi, \beta)$					Desvio percentual (%)		
$\xi$	Referência (Dresner)	Método proposto	Padé de 4 pólos	Gauss	Método proposto	Padé de 4 pólos	Gauss
0,1	4,088	4,090	4,090	4,089	0,05	0,05	0,02
0,2	3,658	3,658	3,658	3,657	0,00	0,00	-0,03
0,3	3,371	3,370	3,370	3,369	-0,03	-0,03	-0,06
0,4	3,169	3,168	3,168	3,167	-0,03	-0,03	-0,06
0,5	3,022	3,021	3,021	3,020	-0,03	-0,03	-0,07
0,6	2,911	2,911	2,910	2,910	0,00	-0,03	-0,03
0,7	2,826	2,825	2,825	2,825	-0,04	-0,04	-0,04
0,8	2,759	2,759	2,705	2,758	0,00	-0,02	-0,04
0,9	2,706	2,706	2,705	2,705	0,00	-0,04	-0,04
1,0	2,663	2,662	2,662	2,662	-0,04	-0,04	-0,04

As tabelas de 5.18 a 5.20 mostram que os valores obtidos com o método proposto através da equação (5.11) são compatíveis com os existentes na literatura superando sistematicamente os outros métodos de cálculo da função de alargamento Doppler em termos de tempo computacional. Uma outra conclusão que pode se tomar a partir da análise das tabelas é que o método proposto para o cálculo da função de alargamento Doppler é, em média, bem melhor que o método de Padé de 4 pólos em termos de acurácia.

### 5.5 Seção de Choque de Espalhamento.

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos para o cálculo da seção de choque média de espalhamento, para os nuclídeos de  $U^{238}$  e  $Pu^{240}$  e  $Th^{232}$ . No cálculo da seção de choque média de espalhamento foram empregados os dois métodos de solução para as funções  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$  apresentadas no capítulo III, as quais conduzem às seguintes representações para  $\bar{\sigma}_s(E, T)$ :

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{s,analytico}(E, T) = & \sigma_0 \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} \left[ \frac{\Gamma_n}{\Gamma} - \frac{2R}{\lambda} I \right] \left[ e^{\frac{(xi-1)^2 \xi^2}{4}} \operatorname{erf} \left( \frac{i\xi x - \xi}{2} \right) - e^{\frac{(xi+1)^2 \xi^2}{4}} \operatorname{erf} \left( \frac{i\xi x + \xi}{2} \right) \right] \\ & + \sigma_0 \frac{\Gamma_n}{\Gamma} \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} \left[ e^{\frac{(xi+1)^2 \xi^2}{4}} + e^{\frac{(xi-1)^2 \xi^2}{4}} \right] + \sigma_0 \frac{R}{\lambda} \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} I \left[ e^{\frac{(xi+1)^2 \xi^2}{4}} + e^{\frac{(xi-1)^2 \xi^2}{4}} \right] + \sigma_{pot} \end{aligned} \quad (5.13)$$

e

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{s,Fourier}(E, T) = & \frac{\sigma_0 \xi \sqrt{\pi}}{2L(1+x^2)} \operatorname{erf} \left( \frac{L}{\xi} \right) \left( \frac{\Gamma_n}{\Gamma} + \frac{4Rx}{\lambda} \right) + \frac{\sigma_0 \xi \sqrt{\pi}}{L} \left\{ \frac{\Gamma_n}{\Gamma} \sum_{n=1}^{N_{max}} F_n(x, \xi, L) \operatorname{Re} [ Z(n, \xi, L) ] \right. \\ & \left. + \frac{4R}{\lambda} \sum_{n=1}^{N_{max}} f_n(x, \xi, L) \operatorname{Re} [ Z(n, \xi, L) ] \right\} + \sigma_{pot} \end{aligned} \quad (5.14)$$

As equações (5.13) e (5.14) representam a seção de choque de espalhamento utilizando as soluções fechadas e o método da série de Fourier. O cálculo de  $\bar{\sigma}_s(E, T)$ , a partir das equações (5.13) e (5.14) foi sistematicamente comparado com os valores de referência (DUDERSTADT & HAMILTON, 1976). A seção de choque

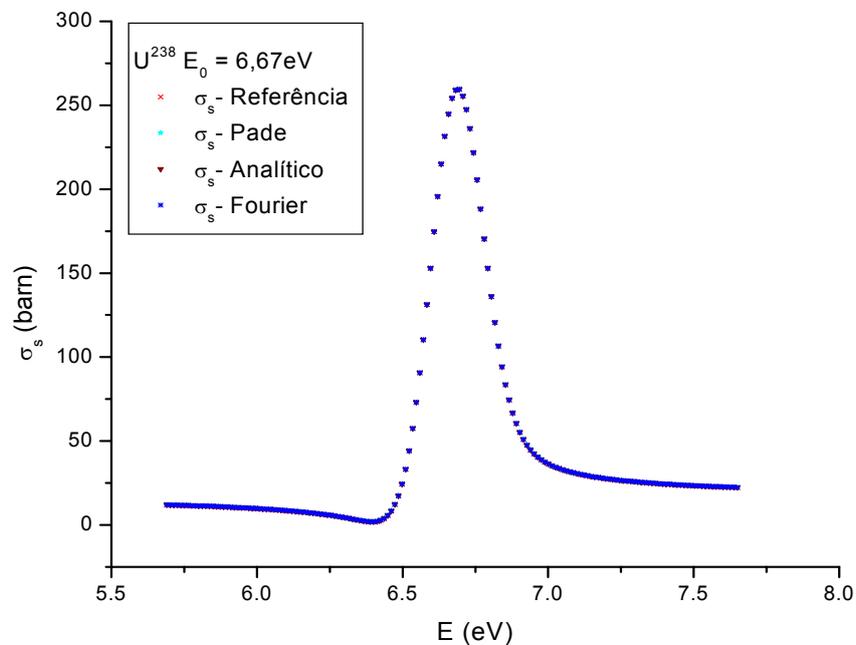
média de espalhamento foi calculada também empregando-se o método de Padé de 4-pólos.

Na tabela 5.21 são apresentados os parâmetros nucleares referentes às ressonâncias dos núclídeos  $U^{238}$  e  $Pu^{240}$  e  $Th^{232}$  (TALAMO, 2007).

**Tabela 5.21 - Parâmetros nucleares da seção de choque microscópica de espalhamento para os núclídeos  $U^{238}$  e  $Pu^{240}$  e  $Th^{232}$  a 1500K. FONTE: JENDL – 3.2.**

Isótopo	$E_0 (eV)$	$\Gamma_n (eV)$	$\Gamma_\gamma (eV)$	$\xi$	$\lambda_0 (m)$	$\sigma_0 (b)$
$U^{238}$	6,67	0,0015	0,0230	0,20	177,14	$2,4 \times 10^4$
$Th^{232}$	23,43	0,0039	0,0261	0,13	94,51	$1,5 \times 10^4$
$Pu^{240}$	20,45	0,0027	0,0322	0,17	101,16	$1,0 \times 10^4$

Através dos dados da tabela 5.21 são construídos diferentes gráficos das seções de choques médias de espalhamento. As figuras 5.22 a 5.27 ilustram as seção de choque de espalhamento utilizando-se as equações (5.13) e (5.14) e seus respectivos erros relativos, comparados com o método de Padé de 4 pólos.



**Figura 5.22 – Seção de choque de espalhamento do  $U^{238}$  para a ressonância de  $E_0 = 6,67eV$ .**

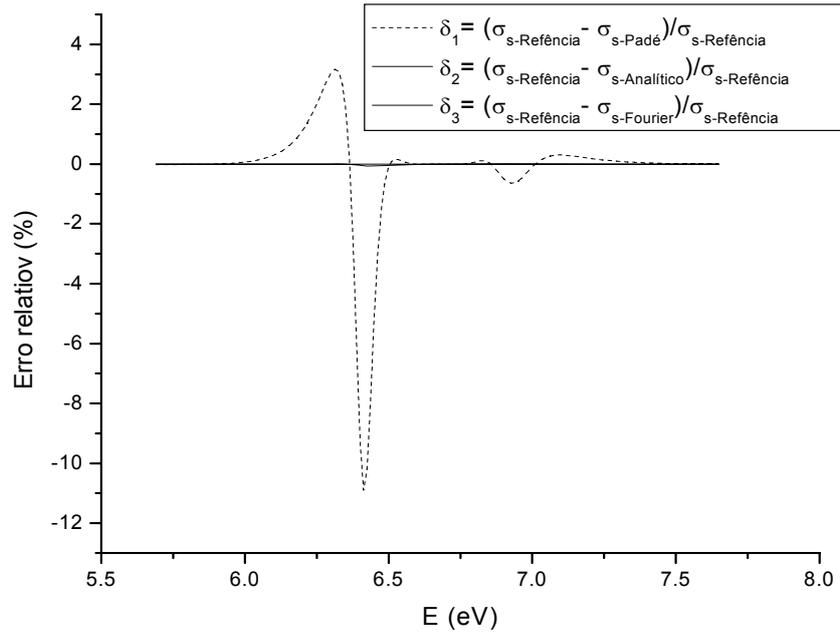


Figura 5.23 – Erro relativo da seção de choque de espalhamento do  $U^{238}$  para ressonância de  $E_0 = 6,67eV$ .

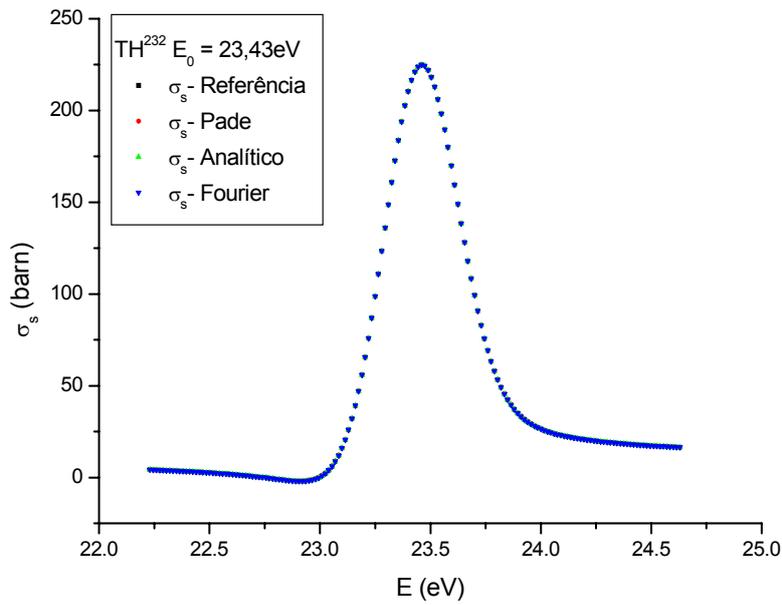


Figura 5.24 – Seção de choque de espalhamento do  $Th^{232}$  para a ressonância de  $E_0 = 23,43 eV$ .

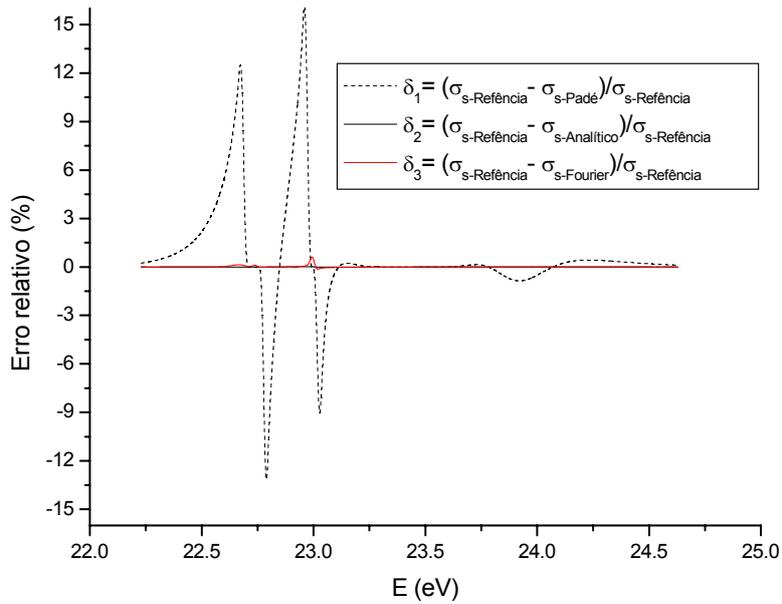


Figura 5.25 – Erro relativo da seção de choque de espalhamento do  $\text{Th}^{232}$  para ressonância de  $E_0 = 23,43 \text{ eV}$ .

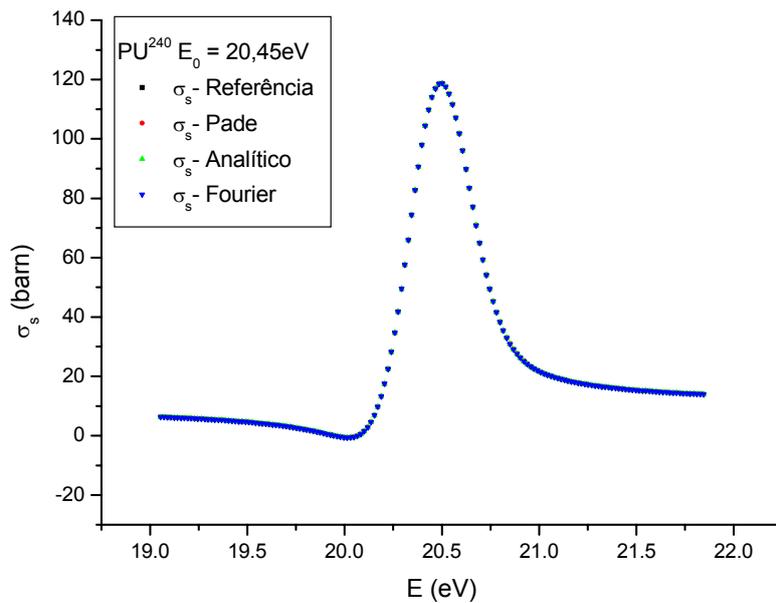
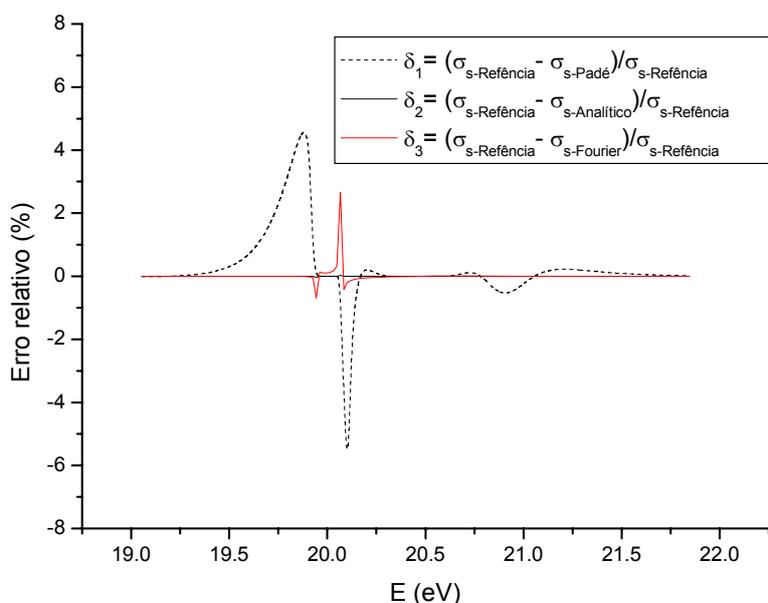


Figura 5.26 – Seção de choque de espalhamento do  $\text{Pu}^{240}$  para a ressonância de  $E_0 = 20,45 \text{ eV}$ .



**Figura 5.27 – Erro relativo da seção de choque de espalhamento do  $\text{Pu}^{240}$  para ressonância de  $E_0 = 20,45 \text{ eV}$ .**

As figuras (5.22), (5.24) e (5.26) mostram que todos os métodos exibem corretamente o comportamento da seção de choque de espalhamento, porém as figuras (5.23), (5.25) e (5.27) demonstram claramente que os métodos propostos são bastante acurados e estáveis, ao contrário do método de Padé que apresentou imprecisão e instabilidade relevante no cálculo da seção de choque média de espalhamento.

O cálculo da seção de choque média de espalhamento através das equações (5.13) e (5.14), apresentam uma grande vantagem em relação ao método de Padé de 4 pólos, visto que as mesmas fornecem uma fórmula exata e de fácil implementação computacional, as quais são válidas para todos os valores de energia dos nêutrons incidentes e temperaturas onde a aproximação de Bethe-Placzek é válida.

# CAPÍTULO VI

## CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Na simulação do comportamento da evolução dos nêutrons em um reator nuclear, o fenômeno de alargamento Doppler desempenha um papel relevante, tanto para a determinação de parâmetros operacionais quanto para determinação de limites de parâmetros relacionados com a segurança.

A nova representação integral para função de alargamento Doppler, apresentada nesta tese, surge a partir da interpretação matemática da forma integral proposta por Bethe e Plackzec, como sendo a convolução da função lorentziana com uma função gaussiana. Essa interpretação possibilitou a obtenção de novas formas integrais, tanto para função de alargamento Doppler quanto para o termo de interferência, as quais são identificadas como sendo transformada cosseno e seno de Fourier da função  $\exp\left(-\frac{w^2}{\xi^2} - w\right)$ .

Estas novas formas integrais também possibilitaram obter de modo simples soluções fechadas para  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$ , utilizando-se apenas as propriedades das funções especiais, dispensando assim a utilização de métodos matemáticos mais complexos.

O método da aproximação de Padé de 4 pólos foi escolhido para fins de comparação por se tratar de um método de aproximação amplamente empregado para as funções  $\psi(x, \xi)$  e  $\chi(x, \xi)$ , entretanto os métodos de soluções propostos nesta tese mostram-se significativamente mais simples que os demais métodos de solução, conduzindo a resultados mais acurados do que aqueles apresentados por Padé de 4 pólos. Tanto as soluções fechadas dadas pelas equações (3.29) e (3.35) quanto às soluções baseadas na série de Fourier, equações (3.51) e (3.56), apresentaram

resultados desvios percentuais máximo de 0,1% para  $\psi(x, \xi)$  e 0,01% para  $\chi(x, \xi)$ , em comparação com os resultados de referência.

Os novos métodos propostos nesta tese para função de alargamento Doppler foram intensivamente aplicadas no cálculo dos fatores de auto-blindagem ressonante  $G_{epi}(\xi, \tau)$ , e os resultados mostram-se bastante acurados, entretanto o emprego da solução fechada para  $\psi(x, \xi)$  no cálculo de do fator de auto-blindagem ressonante mostrou-se rigorosamente igual ao método de referência.

No capítulo V, foi apresentada também uma nova aproximação para o cálculo dos fatores de auto-blindagem ressonante dada pela equação (5.5). No cálculo desta nova aproximação para  $G_{epi}(\xi, \tau)$  empregou-se somente a formulação fechada para  $\psi(x, \xi)$ , visto que esta é mais precisa.

Os resultados obtidos com a nova aproximação para  $G_{epi}(\xi, \tau)$  apresentaram desvios percentuais muito pequenos em relação aos valores de referência, com economia considerável de tempo de processamento computacional. Essas medidas se mostraram bastante estáveis, apresentando decréscimo no desvio-padrão com a aproximação proposta. Os melhores resultados dos fatores de auto-blindagem foram obtidos utilizando a solução fechada no cálculo da função de alargamento Doppler combinado ao método da quadratura gaussiana no integrando aproximado proposto neste trabalho.

Ainda no capítulo V foi apresentada uma aproximação para a solução fechada da função alargamento Doppler, dada pela equação (5.7). Esta aproximação foi proposta a fim de aumentar o ganho no tempo de processamento computacional para o cálculo dos fatores de auto-blindagem. No cálculo dos fatores de auto-blindagem associando-se a nova aproximação para  $G_{epi}$  com a equação (5.7), obteve-se excelentes resultados com um desvio médio percentual de 1,0% e um ganho relativo no tempo computacional com relação ao método de Padé de 78%.

Foi apresentado também nesta tese um método simples e preciso para o cálculo da função  $J(\xi, \beta)$ . Esse método se baseia na conjugação da solução fechada da função de alargamento Doppler, obtida a partir da nova representação integral, com a sua nova expansão assintótica. A integração numérica unidimensional resultante foi efetuada utilizando o método da quadratura gaussiana de ordem 15 com um intervalo de integração reduzido. Essa metodologia foi aplicada com sucesso, apresentando uma acurácia superior a do método de Padé de 4 pólos com significativo ganho de tempo de processamento computacional relativo da ordem de 79,40%, com respeito ao método de Padé de 4 pólos.

Os métodos propostos nesta tese conduziram ainda a obtenção de expressões fechadas para seção de choque média de espalhamento dada pelas equações (5.13) e (5.14), tais expressões reproduziram bem o comportamento de  $\bar{\sigma}_s(E, T)$  para os núclídeos  $U^{238}$  e  $Pu^{240}$  e  $Th^{232}$ , para suas respectivas energias de ressonâncias. As mesmas expressões mostram-se mais estáveis e acuradas que aqueles obtidos pelo método de Padé de 4 pólos  $\bar{\sigma}_s(E, T)$ .

Para se melhorar ainda mais o desempenho do ponto de vista de tempo computacional no cálculo da função de alargamento Doppler para as aplicações apresentadas, propõe-se como trabalhos futuro utilizar a solução fechada para  $\psi(x, \xi)$ , a fim de se gerar um amplo banco de dados para diversos valores distintos de energia e temperatura, o qual poderá ser utilizado juntamente com um algoritmo de busca binária com objetivo de minimizar o tempo de processamento nos cálculos em que a função de alargamento Doppler é de vital importância.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ARFKEN, G., *Mathematical Method for Physicists*, London, UK, Academic Press, Inc, 1985.
- BEKURTS, K. H., WIRTZ, K., *Neutron Physics*, Springer Verlag, New. York, 1964.
- BRIGHAM, E. O., *The Fast Fourier Transform*, Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey, 1974.
- BUTKOV, E. *Matemtical Physics*, Ed. Addison-Wesley, N.Y., (1987).
- CAMPOS, T. P. R., MARTINEZ, A. S., "The dependence of pratical width on temperature", *Ann. Nucl. Energy*, 14, 241, 1987.
- CAMPOS, T. P. R., MARTINEZ, A. S., "Approximate Calculation of the Resonance Integral for Isolated Resonances", *Journal of Nuclear Science and Technology*, 102, 211-218, 1989.
- CHURCHILL, R. V., *Fourier Series and Boundary Value Problems*, International Student Edition, 2 ED., McGraw-Hill Book Company, Inc., 1963.
- COOLEY, J., LEWIS, P., WELCH, P., "Historical notes on the Fast Fourier Transform", *IEEE Transactions on Audio and Electroacoustics*, AU-15, n.2, 76-79, 1967.
- COOLEY, J., TUKEY, J., "Analgorithm for the machinecal culation of complex Fourierseries", *Math.of Comp.*, v. 19, 297–301, 1965.
- DRESNER, L., *Resonances absorption in nuclear reactors*, Pergamon, 1960.
- DUDERSTADT, J. J., HAMILTON, L. J., *Nuclear Reactor Analysis*, John Wiley and Sons, N.Y., 1976.
- GRADSHTEYN, I. S., RYZHIK, I. M., *Tables of Integrals, Series, and Products*, Academic Press, Inc., 1980.

GENTLEMAN, W. M., SANDE, G., "Fast Fourier transforms for fun and profit ", Fall Joint Computer Conf., AFIPS Proc., Washington, v. 29, 563-678, 1966.

GONÇALVES, PALMA, D. A , A. C., MARTINEZ, A. S., SILVA, F. C., "An Efficient Calculation Method For The  $J(\xi, \beta)$  Function", *X Encontro de modelagem computacional*, Friburgo, 2007.

GONÇALVES, A. C., MARTINEZ, A. S., SILVA, F. C., "A new expression for the Doppler broadening function based on the Fourier cosine transform", *International Nuclear Atlantic Conference*, Santos, 2007.

GONÇALVES, A. C., MARTINEZ, A. S., SILVA, F. C., "Solution of the Doppler broadening function based on the Fourier cosine transform", *Annals of Nuclear Energy*, 35, 1871-1881, 2008.

GONÇALVES, PALMA, D. A , A. C., MARTINEZ, A. S., SILVA, F. C., "A New Approximation For The Doppler Broadening Function Using The Fourier Series Method", *XI Encontro de modelagem computacional*, Friburgo, 2008.

GONÇALVES, PALMA, D. A , A. C., MARTINEZ, A. S., SILVA, F. C., "", *International Nuclear Atlantic Conference*, Rio de Janeiro, 2009.

HAYKIN, S., VEEN, B. V., *Signals and Systems*, In: Wiley, Signal and System, 1 ed, New York, USA, 1999.

HWANG, R. N., "Effective Methods for the Treatment of Resonances Cross Sections", *Journal of Nuclear Science and Technology*, 43, 617-622, 1973.

KESHAVAMURTHY, R. S., HARISH, R., "Use of Padé Approximations in the Analytical Evaluation of the  $J(\theta, \beta)$  Function and its Temperature Derivative", *Nuclear Science and Engineering*, v. 115, 81-88, 1993.

LAMARSH, J. R., BARATTA, A. J., *Introduction to Nuclear Engineering*, Prentice Hall, New Jersey, 2001.

MARTIN, P., DONOSO, G., ZAMUDIO, J. C., "A modified asymptotic Padé method. Application to multipole approximation for the plasma dispersion function  $Z$ ", *J. Math Phys.*, 21, 280, 1980.

Mughabghab, S. F., Garber, D. I, "Neutron Cross Sections, Vol. I, Resonance Parameters", 1973.

PALMA, D.A.P., Formulações analítica para as funções de alargamento Doppler. Tese D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2007.

PALMA, D. A., GONÇALVES, A. C., MARTINEZ, A. S., SILVA, F. C., "New approximations for the Doppler broadening function applied to the calculation of resonance self-shielding factors", International Conference on Reactor Physics, Nuclear Power, Interlaken, Switzerland, 2008.

PALMA, D. A., MARTINEZ, A. S., SILVA, F. C., "A new formulation for resonant self-shielding factors", *International Nuclear Atlantic Conference*, Santos, 2007.

PALMA, D. A., GONÇALVES, A. C., MARTINEZ, A. S., SILVA, F. C., "A numerical analysis of new formulations for resonant self-shielding factors", *X Encontro de modelagem computacional*, Friburgo, 2007.

POLYANIN, A. D., MANZHIROV, A.V., *Handbook of Integral Equation*, New York, USA, CRC Press, 1998.

PATHRIA, R. K., *Statistical Mechanics*, Pergamon, Oxford, 1972.

PISKOUNOV, N., *Cálculo Diferencial e Integral*, Edições Lopes da Silva, Porto, 11 ed., v. 2, 1997.

SHCHERBAKOV, O., HARADA, H., "Resonance Self-Shielding Corrections for Activations Cross Section Measurements", *J. Nucl. Sci. Technol*, v. 39, 548-553, 2002.

STACEY, W. M., *Nuclear Reactor Physics*, Prentice Hall, John Wiley and Sons, N.Y., 2001.

SUSTER, L.C., Aproximações para o Espectro Adjunto de Nêutrons em Meios Heterogêneos. Tese D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2003.

TALAMO, A., "Analytical calculation of the fuel temperature reactivity coefficient for pebble bed and prismatic high temperature reactors for plutonium and uranium–thorium fuels", *Annals of Nuclear Energy*, 34, 68-82, 2007.

# APÊNDICE A

## ANÁLISE DE FOURIER

Joseph Fourier (1768-1830), matemático e físico francês, dedicou-se ao estudo de séries trigonométricas, atualmente conhecidas por séries de Fourier. Ele usou estas séries de Fourier no seu trabalho sobre Teoria Analítica do Calor, 1822. Estas novas séries tornaram-se uma ferramenta importante da Física e tiveram também uma influência considerável no desenvolvimento da Matemática. Os seus seguidores Euler, Lagrange, d'Alembert, Daniel Bernoulli, entre outros, solidificaram as técnicas usadas por Fourier que continuam ainda hoje a ser estudadas e melhoradas. Em 1807 Fourier formulou o postulado de que uma função periódica arbitrária  $f(x)$  pode ser representada através de uma série trigonométrica por meio da formulação a seguir:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \{a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)\} \quad (\text{A.1})$$

O resultado obtido por Joseph Fourier foi considerado tão surpreendente e sensacional, que encontrou muitos opositores entre os matemáticos da época, tais com Laplace, Poisson e até mesmo Lagrange que é considerado um dos maiores matemáticos de todos os tempos. O trabalho de Fourier era questionado por causa da falta de rigor e foi provavelmente isto que atrasou a publicação de trabalho de Fourier "Theory of Heat", que só foi publicado em 1822. Desde então o trabalho tornou-se uma fonte de métodos modernos para resolução prática de problemas associados a equações diferenciais parciais. A tarefa de dar mais rigor matemático ao trabalho de Fourier coube a Dirichlet e a Riemann\*.

Atualmente a análise de Fourier é fundamental em muitas aplicações das mais diversas áreas da física e das engenharias (HAYKIN, 1999). As séries de Fourier são

---

\* Georg Friedrich Bernhard Riemann (1826-1866) foi um matemático alemão que deu contribuições importantes para a análise e a geometria diferencial, algumas das quais abriram caminho para o desenvolvimento da relatividade geral.

séries em senos e cossenos que servem para representar funções periódicas. Todavia, tais séries tratam-se de ferramentas importantes na resolução de problemas que envolvam equações diferenciais ordinárias e equações diferenciais parciais. A Teoria, de Fourier é bastante complexa, porém as aplicações das séries de Fourier são bastante simples. As séries de Fourier são de um modo geral mais universal do que as séries de Taylor, uma vez que muitas funções periódicas descontínuas podem ser desenvolvidas em séries de Fourier, mas não podem ser desenvolvidas em série de Taylor.

A técnica da série de Fourier consiste basicamente em representar uma dada função periódica  $f(x)$  como a superposição de funções seno e cosseno. Uma função  $f(x)$  diz-se seccionalmente contínua em um intervalo  $a < x < b$  caso exista um número finito de pontos  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  tais que  $f(x)$  é contínua em cada subintervalo aberto  $a < x < x_1, x_1 < x < x_2, x_2 < x < x_3, \dots, x_n < x < b$ , e tem limites laterais finitos nos extremos de cada intervalo (PISKOUNOV, 1997).

**Teorema 1:** *Seja  $f(x)$  uma função periódica de período  $2L$  seccionalmente contínua no intervalo  $-L < x < L$ , com derivadas laterais esquerda e direita em cada ponto do intervalo, então a série de Fourier de  $f(x)$  é convergente. Nos pontos  $x_0$  onde  $f(x)$  é descontínua a soma da série é a média aritmética dos limites laterais esquerdo e direito de  $f(x)$  em  $x_0$ .*

As condições do **Teorema 1** são condições suficientes para assegurar que a função  $f(x)$  admite desenvolvimento em série de Fourier. Contudo, tais condições não são suficientemente necessárias para assegurar a convergência da série, o que significa que mesmo em situações em que as condições não se verificam pode existir o desenvolvimento em série de Fourier da função e a mesma ser convergente (PISKOUNOV, 1997). Na verdade, ainda hoje não são conhecidas as condições

necessárias para que o desenvolvimento em série de Fourier de uma função seja convergente. Na prática isto não causa grandes problemas, visto que na maior parte dos casos de interesse prático, as funções a serem tratadas são funções que satisfazem as condições exigidas pelo **Teorema 1** (PISKOUNOV, 1997) e conseqüentemente têm desenvolvimento em série de Fourier convergente. Outro ponto de grande importância é saber quantos termos da série devem ser considerados para que se obtenha uma boa aproximação da função. É evidente que tal quantidade de termos será determinada pelos coeficientes de Fourier, bem como pelo modo como estes crescem ou decrescem à medida que  $n$  aumenta.

Seja  $f(x)$  uma função que satisfaz o **Teorema 1** e cujo período é  $2L$ , esta função admite a seguinte representação em série de Fourier (PISKOUNOV, 1997).

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ a_n \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right\}, \quad (\text{A.2})$$

sendo,

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.3})$$

e

$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.4})$$

A expansão em série de Fourier da função  $f(x)$  apresentada pela equação (A.2) admite simplificações consideráveis quando  $f(x)$  é uma função par ou ímpar. Caso  $f(x)$  seja uma função par, a série de Fourier pode ser representada por uma expansão em série de funções cosseno (PISKOUNOV, 1997), conforme mostrado abaixo:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (\text{A.5})$$

sendo,

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.6})$$

De forma semelhante, quando  $f(x)$  é uma função ímpar a série de Fourier pode ser representada por uma expansão em série de funções seno (PISKOUNOV, 1997), conforme mostrado a seguir:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (\text{A.7})$$

sendo,

$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.8})$$

A expansão em série de Fourier apresentada pelas equações (A.5) e (A.7) para funções pares e ímpares são de grande importância para aplicações relacionadas à física-matemática, visto que muitas funções que descrevem os fenômenos da natureza apresentam simetria.

A transformada de Fourier estende as técnicas das séries de Fourier a funções não periódicas. As séries de Fourier são ferramentas poderosas na resolução de problemas que envolvam funções periódicas, contudo existem muitos problemas práticos que envolvem funções não periódicas. A questão que se coloca é como se pode estender os métodos das séries de Fourier a tais funções. O que se pretende a partir de agora é estender a análise de Fourier às funções não periódicas o que será feito através da introdução da Transformada de Fourier. A transformada de Fourier tem muitas aplicações na resolução de equações diferenciais parciais bem como na análise de sinais e sistemas (HAYKIN, 1999).

A transformada de Fourier aplica-se principalmente a resoluções de equações diferenciais, contudo a transformada pode ser empregada para cálculo de integrais bem como para estudar funções definidas por integrais, que é especificamente o caso da função de alargamento Doppler.

**Teorema 2:** Seja  $f(x)$  uma função seccionalmente contínua em todo intervalo finito e absolutamente integrável no intervalo  $[0, \infty)$ , então a transformada de Fourier desta função assim como sua transformada inversa existem e podem ser representadas por:

$$\mathcal{F}_c\{f(x)\} = F(w) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} f(x) \cos(wx) dx \quad (\text{A.9})$$

$$\mathcal{F}_c^{-1}\{F(w)\} = f(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} F(w) \cos(wx) dw \quad (\text{A.10})$$

**Teorema 3:** Seja  $f(x)$  uma função seccionalmente contínua em todo intervalo finito e absolutamente integrável no intervalo  $[0, \infty)$ , então a transformada de Fourier desta função, assim como sua transformada inversa, existem e podem ser representadas por:

$$\mathcal{F}_s\{f(x)\} = F(w) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} f(x) \sin(wx) dx \quad (\text{A.11})$$

$$\mathcal{F}_s^{-1}\{F(w)\} = f(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} F(w) \sin(wx) dw \quad (\text{A.12})$$

As integrais (A.9) e (A.11) recebem o nome de transformada cosseno e seno de Fourier e as integrais (A.10) e (A.12) são suas respectivas transformações inversas.

O próximo teorema a ser enunciado é de grande importância para análise de Fourier, visto que o mesmo estabelece uma relação direta entre a convolução de duas funções e suas respectivas transformadas.

**Teorema da Convolução:** Sejam  $f(x)$  e  $g(x)$  duas funções seccionalmente contínuas, limitadas e absolutamente integráveis em todo seu intervalo, então

$$\mathcal{F}\{f * g\} = \mathcal{F}\{f(x)\} \mathcal{F}\{g(x)\}, \quad (\text{A.13})$$

onde,  $f * g = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(u) f(x-u) du$  é conhecida por integral de convolução.

A partir da equação (A.13) pode-se concluir que a convolução de duas funções  $f(x)$  e  $g(x)$  estão diretamente relacionadas com a transformada de Fourier das respectivas funções, através da seguinte expressão:

$$f * g = \mathcal{F}^{-1} \{ \mathcal{F} \{ f(x) \} \mathcal{F} \{ g(x) \} \} \quad (\text{A.14})$$

Nas próximas seções os métodos de análise de Fourier descritos aqui serão extensivamente aplicados, a fim de se obter a nova representação integral da função de alargamento Doppler e seus respectivos métodos de cálculo.

# APÊNDICE B

## APROXIMAÇÃO DE PADÉ

O método da aproximação de Padé é um método extremamente útil para obtenção de resultados numéricos em muitos problemas da Física, Química e Engenharias. Nesta seção é realizada uma breve descrição matemática do método de Padé.

Uma aproximação de Padé é uma transformação formal dos  $n$  primeiros termos de uma série de potências numa função racional. A função racional, utilizada na aproximação de Padé, é expressa como a razão de dois polinômios, cuja expansão em série de Taylor reproduz completamente a série de potências original até a ordem  $n$ . A aproximação de Padé foi proposta em 1892 pelo matemático francês Padé, para contornar o problema da convergência das séries de potência (raio de convergência). Mas, somente a partir de 1981, este método de convergência ficou amplamente difundido em trabalhos sobre fenômenos críticos.

Seja  $f(z)$  uma série de potência convergente de uma única variável dada por:

$$f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} a_j z^i, \quad a_j \in R. \quad (\text{B.1})$$

O objetivo da aproximação de Padé é definir uma função racional de ordem  $(n, m)$  como sendo o quociente dos polinômios  $p(z)$  e  $q(z)$  de ordem  $n$  e  $m$ , respectivamente, tal que esta aproximação racional coincida com a expansão de  $f(z)$  até o grau  $n-1$ . Desta forma a aproximação para  $f(z)$  é dada por:

$$f(z) = \frac{p(z)}{q(z)} = \frac{p_0 + p_1 z + \dots + p_m z^m}{q_0 + q_1 z + \dots + q_n z^n}. \quad (\text{B.2})$$

Os coeficientes dos polinômios  $p(z)$  e  $q(z)$  são determinados univocamente com uso dos primeiros  $m+n+1$  coeficientes da expansão de  $f(z)$  pela resolução de um sistema de equações lineares. A equação (A.3) pode ser reescrita de forma mais elegante, ou seja,

$$f(z) = \frac{\begin{vmatrix} a_{m-n+1} & a_{m-n+2} & a_{m-n+3} & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_m & a_{m+1} & a_{m+2} & \dots & a_{m+n} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_{k=n}^m a_{k-n} z^k & \sum_{k=n}^m a_{k-n+1} z^k & \sum_{k=n-1}^m a_{k-n+2} z^k & \dots & \sum_{k=0}^m a_k z^k \\ a_{m-n+1} & a_{m-n+2} & a_{m-n+3} & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_m & a_{m+1} & a_{m+2} & \dots & a_{m+n} \\ z^k & z^{k-1} & z^{k-2} & \dots & 1 \end{vmatrix}}, \quad (\text{B.3})$$

onde  $m$  é o grau do polinômio do numerador e  $n$  o grau do polinômio do denominador e  $a_k = 0$  para  $k < 0$ . O somatório também será nulo se o ponto inicial for maior que o ponto final.

Um exemplo é o caso em que  $m = 0$  e  $n = 1$ , ou seja, uma função racional cujo numerador tem grau zero e denominador grau 1, desta forma a equação (B.3) assume a seguinte forma:

$$f(z) = \frac{\begin{vmatrix} a_0 & a_1 \\ 0 & a_0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_0 & a_1 \\ t & 1 \end{vmatrix}} = \frac{a_0}{1 - \frac{a_1}{a_0} z}, \quad (\text{B.4})$$

fazendo,  $a_0 = p_0$  e  $\frac{a_1}{a_0} = q_1$  pode-se escrever que

$$f(z) = \frac{P_0}{1 - q_1 z}. \quad (\text{B.5})$$

Para o caso em que  $m = 1$  e  $n = 2$ , obtém-se a seguinte aproximação:

$$f(z) = \frac{\begin{vmatrix} a_0 & a_1 & a_2 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ 0 & a_0 z & (a_0 + a_1 z) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_0 & a_1 & a_2 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ z^2 & z & 1 \end{vmatrix}}, \quad (\text{B.6})$$

após algumas manipulações algébricas, obtém-se que

$$f(z) = \frac{p_0 + p_1 z}{1 + q_1 z + q_2 z^2}, \quad (\text{B.7})$$

onde:

$$p_0 = a_0 \quad (\text{B.8a})$$

$$p_1 = \frac{2a_0 a_1 a_2 - a_1^3 - a_0^2 a_3}{a_0 a_2 - a_1^2} \quad (\text{B.8b})$$

$$q_1 = \frac{a_1 a_2 - a_0 a_3}{a_0 a_2 - a_1^2} \quad (\text{B.8b})$$

e

$$q_2 = \frac{a_1 a_3 - a_2^2}{a_0 a_2 - a_1^2}. \quad (\text{B.8c})$$

As aplicações realizadas mostram como a aproximação é empregada para a aproximação de funções.

# APÊNDICE C

## FUNÇÃO ERRO E FUNÇÃO ERRO COMPLEMENTAR

Na matemática a função erro é também conhecida como função erro de Gauss, a qual está enquadrada na classe das funções especiais. Esta função ocorre com grande frequência em cálculos de probabilidade e estatística. A função erro é definida como:

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt, \quad (C.1)$$

cuja representação gráfica é dada pela a figura 1 abaixo:

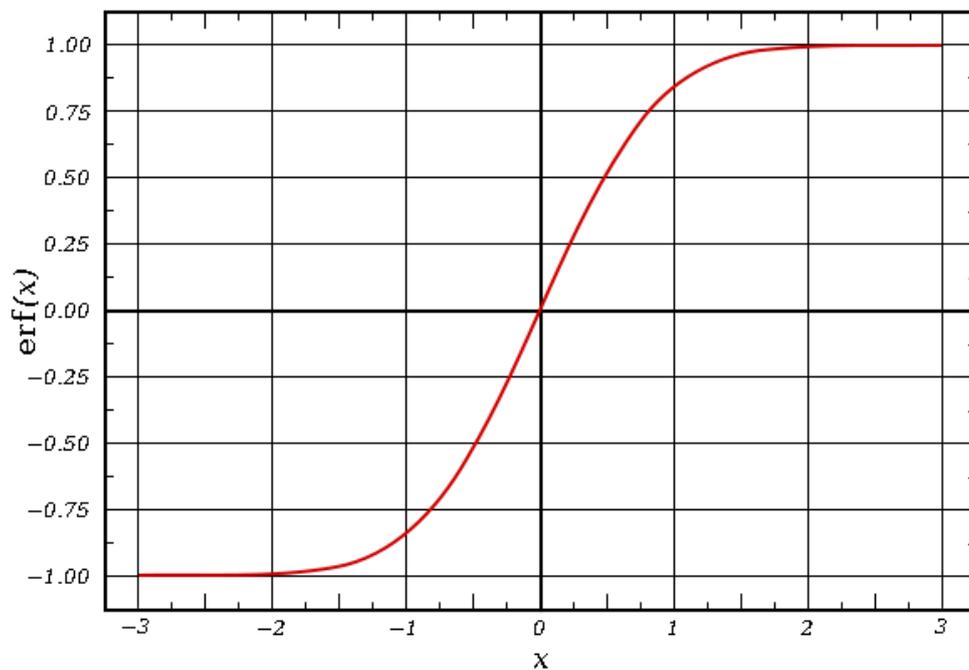


Figura 1 – Função Erro  $erf(x)$ .

Através da figura 1 acima se pode verificar facilmente algumas propriedades da função erro, tais como:

$$erf(0) = 0, \quad (C.2)$$

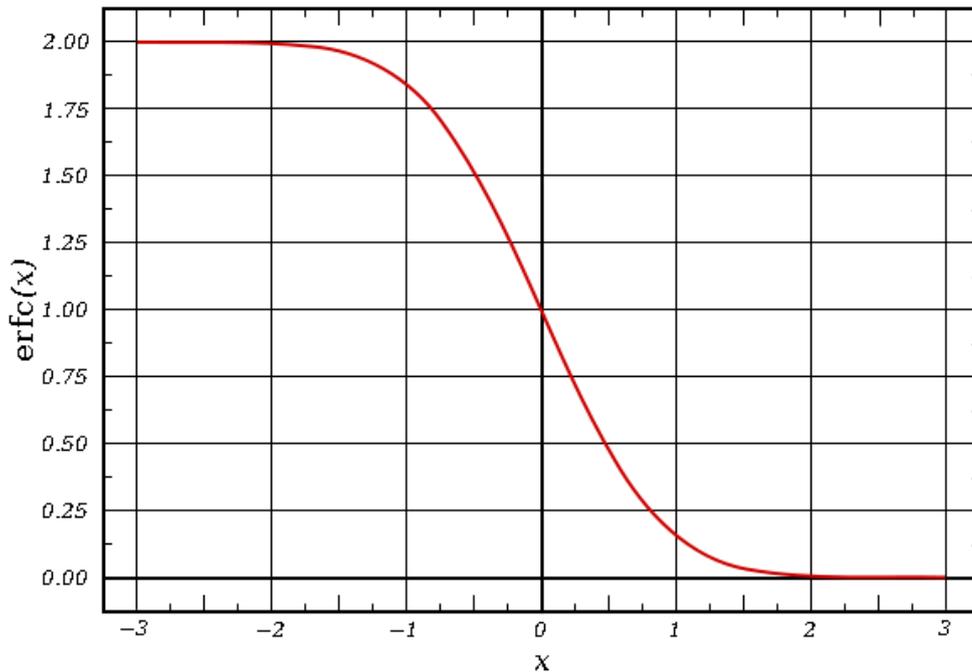
$$\lim_{x \rightarrow \infty} erf(x) = 1, \quad (C.3)$$

O gráfico da figura 1 mostra claramente que a função erro é uma função anti-simétrica, ou seja,  $erf(-x) = -erf(x)$ .

A função erro complementar, denotada por  $erfc(x)$  é definida em termos da função erro dada pela equação (C.1).

$$erfc(x) = 1 - erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt, \quad (C.4)$$

cuja representação gráfica é dada pela a figura 2 abaixo:



**Figura 2 – Função Erro Complementar  $erfc(x)$ .**

Através da figura 2 acima se pode verificar facilmente algumas propriedades da função erro, tais como:

$$erfc(0) = 1, \quad (C.5)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} erfc(x) = 0, \quad (C.6)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} erfc(x) = 2, \quad (C.7)$$

Também é possível definir a função erro complexa, a qual é denotada por:

$$\omega(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz), \quad (\text{C.8})$$

sendo  $z$ , um número complexo dado por:

$$z = a + ib. \quad (\text{C.9})$$

A função erro com argumento complexo mantém as mesmas propriedades da função erro com argumento real.

$$\operatorname{erf}(-z) = -\operatorname{erf}(z), \quad (\text{C.10})$$

para qualquer número complexo  $z$ , pode-se escrever que

$$\operatorname{erf}(z^*) = \operatorname{erf}(z)^*, \quad (\text{C.11})$$

onde  $z^*$  denota o complexo conjugado de  $z$ .