

TEMPERATURA EFETIVA DO MEIO PARA CÁLCULO DA FUNÇÃO DE
ALARGAMENTO DOPPLER USANDO DISTRIBUIÇÃO ESTATÍSTICA DE
KANIADAKIS

Marcelo Vilela da Silva

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
Alessandro da Cruz Gonçalves

Rio de Janeiro
Agosto de 2022

TEMPERATURA EFETIVA DO MEIO PARA CÁLCULO DA FUNÇÃO DE
ALARGAMENTO DOPPLER USANDO DISTRIBUIÇÃO ESTATÍSTICA DE
KANIADAKIS

Marcelo Vilela da Silva

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

Orientadores: Aquilino Senra Martinez
Alessandro da Cruz Gonçalves

Aprovada por: Prof. Alessandro da Cruz Gonçalves
Prof. Aquilino Senra Martinez
Prof. Adilson Costa da Silva
Prof. Hermes Alves Filho
Prof. Sérgio de Oliveira Vellozo
Prof. Zelmo Rodrigues de Lima

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
AGOSTO DE 2022

Silva, Marcelo Vilela da

Temperatura efetiva do meio para cálculo da função de alargamento Doppler usando distribuição estatística de Kaniadakis/Marcelo Vilela da Silva. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2022.

XVIII, 115 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Aquilino Senra Martinez

Alessandro da Cruz Gonçalves

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Nuclear, 2022.

Referências Bibliográficas: p. 97 – 100.

1. Temperatura efetiva do meio. 2. Função deformada de alargamento Doppler. 3. Distribuição de Maxwell-Boltzmann. 4. Distribuição de Kaniadakis. I. Senra Martinez, Aquilino *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*À minha esposa e amada, Ana
Beatriz da Silva, pelo apoio
sempre presente, ao meu filho
Malcolm Akins, fonte da minha
alegria e motivação.*

Agradecimentos

À Oyá, Lissá/Mawu e Iemanjá, voduns que me acompanham, orientam e que, durante o processo de doutorado, me deram o equilíbrio e a sabedoria para que eu pudesse seguir em frente.

À Roça, Rumpame Dan Kwe Lemin, pela religiosidade iniciada por Amauri D'Odé (in memoriam), fundada pela sacerdotisa da nação Jeje-Mahi, Luiza Franquelina da Rocha (in memoriam), Gaiaku Luiza D'Oyá, que na condição de Ogã, confirmado por Gaiaku Elenice D'Oyá, que segue o respeito pela religião de Matriz Africana Jeje-Mahi, estendo os meus agradecimentos aos irmãos e irmãs de santo. Os meus agradecimentos a todas as pessoas que, de alguma forma, permitiram e/ou contribuíram para que essa tese se materializasse. A seguir explico os motivos dessa trajetória.

A minha formação acadêmica começou em 2006, quando iniciei o curso de Graduação em Física-Licenciatura Plena, realizado no Instituto Federal do Rio de Janeiro (IFRJ). O meu interesse pelos temas abordados nas diferentes disciplinas do curso levou-me a participar de vários debates e discussões acerca da profissão docente. A graduação foi significativa na minha formação à medida em que me ofereceu subsídios para ampliação de conhecimentos no campo das ciências exatas e da natureza que concluí em março de 2014.

O papel desempenhado pelos professores e professoras, nas diferentes disciplinas de minha graduação, foi fundamental para o meu envolvimento com as questões da didática e pesquisa em ensino de física. Comecei a ampliar o meu repertório com leituras direcionadas ao fazer pedagógico e interdisciplinar. Naquela época, já me interessava bastante por cursos de aperfeiçoamento e extensão voltados para formação de professores.

As experiências que adquiri em minha formação acadêmica refletiram na minha atuação como profissional da educação e fizeram com que eu adquirisse um suporte teórico e metodológico para a condução de uma pesquisa nas áreas das ciências exatas e da natureza, como monitor de cálculos e física básica. Posteriormente, atuei como monitor de física, nas exposições interativas. Esta trata-se de um projeto com atividades de física voltadas para o público em geral nos municípios do Estado do Rio de Janeiro. Ainda nesse período fui contemplado com Programa de Iniciação Ci-

entífica (PIC), com proposta de Projeto "Praça da Ciência Itinerante: Contribuição para Formação de Futuro Professor", com bolsa da FAPERJ.

Percebi que deveria investir novamente na minha qualificação e diante desses fatores decidi escolher o curso de Iniciação Tecnológica (PIBIT), no Instituto de Radioproteção e Dosimetria (IRD) que norteou e sistematizou melhor as minhas leituras e direcionou meus objetivos de estudo, no campo da física das radiações, com destaque nas aplicações das técnicas fluoroscópicas em radiologia diagnóstica, intervencionista e dosimetria em profissionais.

Logo após a conclusão do curso de física, fui aprovado para cursar a pós-graduação. Em 2014, ao ingressar no curso de pós-graduação "strictu sensu", nível mestrado, na área de conhecimento da engenharia nuclear, do Instituto Militar de Engenharia (IME). A realização deste curso para organização dos conhecimentos veiculados na graduação bem como para aprimoramento do ferramental, foram necessários para pesquisa.

Ao longo desse período, foquei minhas energias no trabalho/pesquisa e desenvolvimento de metodologia de nêutrons provenientes de aceleradores de partículas (Detecção e Instrumentação Nuclear). Voltar a estudar, nessa área do conhecimento, sobre aspectos relevantes e pertinentes no campo da história e da ciência foram fortalecendo minha prática educativa, bem como minhas expectativas até ingressar em 2018 para o curso de Doutorado em Engenharia Nuclear (COPPE/UFRJ), na área de concentração: Física de Reatores.

Acredito que a escolha do programa de pós-graduação – doutorado em engenharia nuclear deve ser pautado em critérios que definam a confiabilidade e segurança ao candidato. Outro motivo que considero relevante é oportunidade de estar em contato com uma diversidade de conhecimento que possibilitaram situações de aprendizagem tanto para a minha vida acadêmica quanto profissional.

Infelizmente em 2019, a Organização Mundial da Saúde (OMS) foi alertada sobre casos de pneumonia na cidade de Wuhan, província de Hubei, na República Popular da China. Naquele momento, tratava-se de uma nova cepa (tipo) de coronavírus que não havia sido identificada antes em seres humanos.

Uma vez que, no início de janeiro de 2020, o governo chinês confirmou que havia identificado um novo tipo de coronavírus. Diante desse cenário de incertezas, no dia 12 de março de 2020, a UFRJ suspendeu todas as atividades por causa do COVID-19, da mesma forma, o prefeito na época, declarou situação de emergência no município do Rio de Janeiro para conter o coronavírus. É importante fazer esse relato porque foi difícil manter a saúde mental e a tranquilidade na pesquisa devido às incertezas, perdas de entes queridos e até a superação da "síndrome do impostor" (tendência à autossabotagem, indivíduo que constrói, dentro da cabeça dele, uma percepção de si mesmo de incompetência ou insuficiência).

Em virtude disso, agradeço às inúmeras pessoas que me ajudaram nesse processo de acolhimento, que tornaram um ambiente saudável e de estímulo para que eu desse continuidade ao doutorado, pois precisei buscar atendimento psicológico, meditação, exercícios físicos , entre outros.

À Minha avó paterna Regina Pereira de Oliveira (in memoriam) pelos abraços, carinhos, conselhos, pelos incentivos intermináveis, à minha mãe Claudia de Castro Vilela, minha avó materna, Juraci de Castro, mulheres negras que com muita luta, mesmo em momentos de ausência, sempre me acolheram , principalmente com amor.

Aos meus familiares (Nana, Valéria, Adriana, Nina, Marquinho, Moacir, Jaziel e as primas Nayana e Nayane) que me deram suporte emocional e ao meu pai que mesmo distante contribuiu para que tudo isso se tornasse realidade.

Aos meus irmãos e irmãs: Johnny, Cinthia, Gabriel, Deco, Alessandra, Bruno, Thiago, Thais, Thaynara e Junior.

Agradeço as tias da minha esposa, Madalena (in memoriam), pelo carinho e dedicação com meu filho, à Luzimar Silva, Terezinha da Silva, e aos tios Vivaldo, Magno e José Emanuel. Aos amigos e amigas que me acompanham nessa caminhada árdua, Leinimar Pires, José Carlos Felix, Aleksandro Maick, Fábio Tavares, Júlio Moraes, Ludmila, Alexandre Martins, Allyne Andrade, Clátia Vieira, Tatiana Martins, Rodrigo Reduzino, Dayse Gomis, Bianca Mendonça, Frédéric Monié, Teodosio Nzualo, Moacir (Cizinho Afreka), Tatiana Portes, Álvaro Nascimento, Renato Noguera, Carla Aparecida, Elisabete, Tereza (in memoriam), Moacir (in memoriam), Li, Junior, Neto, Adriano, Anderson, Cristiane (in memoriam), Vall, Patrícia Carvalho, Lena, Bieta, Lili, Alessandra.

Agradeço imensamente os lugares que me formaram como homem, ao Centro de Educação Comunitária Dom Obá II D'África, pela experiência didática, formação política, sobretudo por esse projeto voltado para formação e ingresso de estudantes em Universidade pública.

À Instituição pelo aprendizado e amizade, ao Centro de Documentação e Informação Coisa de Mulher (atual CASA DAS PRETAS), à Neusa Pereira, Edmeire Exaltação e Ana Beatriz da Silva.

Ao Prof. Dr. Antônio C. F. dos Santos, IF. UFRJ, pela amizade, acolhida e pelo convite em participar do grupo de pesquisa: Afrociência, que potencializa a promoção da equidade racial e a valorização da diversidade na escola.

Aos amigos Prof. Dr. Daniel Palma IEN/CNEN e Prof. Dr. Guilherme Guedes CEFET/RJ, pela amizade, companheirismo na minha jornada acadêmica.

À instituição de ensino, Universidade Federal do Rio de Janeiro, essencial no meu processo de formação profissional, pela dedicação, estrutura e por tudo o que aprendi ao longo dos quatro anos do curso de pós-graduação.

Agradeço ao prof. Dr. Aquilino Senra Martinez pela orientação, dedicação e

contribuição preciosa dada ao desenvolvimento deste trabalho.

Ao prof. Dr. Alessandro da Cruz Gonçalves pela coorientação e proposição do estudo dos coeficientes.

Ao prof. Dr. Sérgio Vellozo, pela amizade demonstrada desde o período do mestrado, pela acolhida e por aceitar em participar da banca de doutorado acreditando em mim e minhas capacidades.

Agradeço aos membros da banca prof. Dr. Hermes Filho, prof. Dr. Zelmo Lima e prof. Dr. Adilson Silva por aceitar compor a banca de defesa de doutorado, pelos ensinamentos e sugestões que engrandeceram a redação final dessa tese.

Aos professores do PEN/COPPE/UFRJ, em especial o prof. Dr. Fernando Carvalho pelo brilhantismo e entusiasmo em ministrar aulas e o prof. Dr. José A. C. Canedo (in memoriam) por apresentar-me a linguagem de programação MATLAB.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pela bolsa de estudo e auxílio financeiro que possibilitou a dedicação integral ao programa de pós-graduação.

Faço um agradecimento também a todos os funcionários da secretaria do Programa de Engenharia Nuclear que sempre foram muito atenciosos em especial: Liliane, Washington, Marco e Cássia.

Aos colegas e amigos do PEN/COPPE/UFRJ: Alexandre Antunes, Marcus Vinicius, Viviane Noronha, Jadna, Willian, Paulo, Maria Vitória, Robson, Edson, Ana Paula, Wemerson, pela ajuda, companheirismo e pelo apoio constante à nossa trajetória profissional e acadêmica. Quero agradecer-lhes os momentos, por vezes magníficos que passamos, ao bom convívio e as boas discussões inerentes aos pesquisadores.

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

TEMPERATURA EFETIVA DO MEIO PARA CÁLCULO DA FUNÇÃO DE
ALARGAMENTO DOPPLER USANDO DISTRIBUIÇÃO ESTATÍSTICA DE
KANIADAKIS

Marcelo Vilela da Silva

Agosto/2022

Orientadores: Aquilino Senra Martinez
Alessandro da Cruz Gonçalves

Programa: Engenharia Nuclear

Apresenta-se nesta tese um método que estabelece uma relação de equivalência entre a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ usando a distribuição de Maxwell-Boltzmann e a função deformada de alargamento Doppler $\psi_\kappa(x, \xi)$, segundo a distribuição generalizada de Kaniadakis, através da temperatura efetiva do meio T_{ef} . A geração de dados nucleares é uma tarefa muito complexa e requer um enorme esforço dos sistemas computacionais. Para superar esse obstáculo, o objetivo é apresentar uma metodologia simples que permita o cálculo da função deformada de alargamento Doppler $\psi_\kappa(x, \xi)$, com a distribuição Kaniadakis baseada na proposição de um mapeamento da função deformada de alargamento Doppler, $\psi(x, \xi)$ via a uma parametrização multidimensional polinomial. A função deformada de alargamento Doppler $\psi_\kappa(x, \xi)$ é aproximada pela função deformada Doppler $\psi(x, \tilde{\xi})$, na qual ξ está associado a temperatura do meio T enquanto $\tilde{\xi}$ está relacionado com a temperatura efetiva do meio T_{ef} . Isto é, nos sistemas de cálculo existentes para determinação das seções de choque multigrupo será necessário apenas substituir T por T_{ef} .

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

EFFECTIVE MEDIUM TEMPERATURE FOR CALCULATING THE
DOPPLER BROADENING FUNCTION USING KANIADAKIS STATISTICAL
DISTRIBUTION

Marcelo Vilela da Silva

August/2022

Advisors: Aquilino Senra Martinez
Alessandro da Cruz Gonçalves

Department: Nuclear Engineering

This work presents a method that establishes a relation of equivalence between the Doppler broadening function $\psi(x, \xi)$ using the Maxwell-Boltzmann distribution and the deformed Doppler broadening function $\psi_\kappa(x, \xi)$, according to the generalised Kaniadakis distribution, through the effective temperature of the medium T_{ef} . The generation of nuclear data is a very complex task and requires a huge effort of computer systems. To overcome this hurdle, the main objective of this paper is to present a simple methodology that allows calculation of the deformed Doppler broadening function $\psi_\kappa(x, \xi)$, with the Kaniadakis distribution based on the idea of a mapping of the deformed Doppler broadening function, $\psi(x, \xi)$ via a polynomial multidimensional parametrization. Deformed Doppler broadening function $\psi_\kappa(x, \xi)$ is approximated by the Doppler broadening function $\psi(x, \tilde{\xi})$, where ξ is associated to the temperature of medium T and $\tilde{\xi}$ relates to the effective temperature of medium T_{ef} . That is, in calculation systems aimed at determining multigroup cross sections, it will only be necessary to replace T with T_{ef} .

Sumário

Lista de Figuras	xiii
Lista de Tabelas	xvii
1 Introdução	1
1.1 Motivação e Contribuição	3
1.2 Objetivos	4
1.3 Organização da Pesquisa	4
2 Distribuição de Maxwell-Boltzmann e de Kaniadakis	6
2.1 Distribuição de Maxwell-Boltzmann	6
2.1.1 Breve Histórico	6
2.2 Distribuição de Kaniadakis	16
2.2.1 Definições Matemáticas	17
3 Alargamento das ressonâncias nucleares	32
3.1 Aproximações de Bethe-Placzek	37
3.2 Função de alargamento Doppler	41
4 Método Proposto	46
4.1 Função deformada de alargamento Doppler segundo a distribuição de Kaniadakis	46
4.2 Temperatura Efetiva do meio T_{ef}	49
5 Resultados Finais	53
5.1 Apresentação e Análise	53
5.1.1 Análise dos Coeficientes I	68
5.1.2 Análise dos Coeficientes II	73
5.2 Aplicação Simples da Física de Reatores	82
5.2.1 Seção de choque média $\bar{\sigma}_{\gamma}(E, T)$	82
5.2.2 Seção de choque média deformada $\bar{\sigma}_{\gamma, \kappa}(E, T)$	83
6 Conclusões Finais	95

Referências Bibliográficas	97
A Algoritmo Genético	101
A.1 Introdução	101
A.2 População e Indivíduos	102
A.3 Operadores Genéticos	102
A.4 Seleção	103
A.5 Cruzamento	103
A.6 Mutação	103
B Regressão Polinomial	105
B.1 Introdução	105
B.1.1 Ajuste linear simples	106
B.1.2 Ajuste Linear Múltiplo	106
B.1.3 Ajuste Polinomial	106
C Análise do Código Desenvolvido	107
C.0.1 Solução do Polinômio para os Parâmetros Nucleares	110
C.0.2 Cálculo de Ponto Específico	112

Lista de Figuras

2.1	Distribuição de Maxwell-Boltzmann para ^4He com diferentes temperaturas.	12
2.2	Distribuição de Maxwell-Boltzmann para ^{20}Ne com diferentes temperaturas.	12
2.3	Distribuição de Maxwell-Boltzmann para ^{40}Ar com diferentes temperaturas.	13
2.4	Distribuição de Maxwell-Boltzmann para ^{132}Xe com diferentes temperaturas.	13
2.5	Distitribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases com temperatura de 300 K	14
2.6	Distitribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases com temperatura de 600 K	14
2.7	Distitribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases com temperatura de 900 K	15
2.8	Distitribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases com temperatura de 1200 K	15
2.9	Distitribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases com temperatura de 1500 K	16
2.10	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^4He com temperatura de 300 K e κ -deformações.	21
2.11	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^4He com temperatura de 600 K e κ -deformações.	21
2.12	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^4He com temperatura de 900 K e κ -deformações.	22
2.13	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^4He com temperaturas de 1200 K e κ -deformações.	22
2.14	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^4He com temperatura de 1500 K e κ -deformações.	23
2.15	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{20}Ne com temperatura de 300 K e diferentes κ -deformações.	23

2.16	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{20}Ne com temperatura de 600 K e diferentes κ -deformações.	24
2.17	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{20}Ne com temperatura de 900 K e diferentes κ -deformações.	24
2.18	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{20}Ne com temperatura de 1200 K e diferentes κ -deformações.	25
2.19	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{20}Ne com temperatura de 1500 K e diferentes κ -deformações.	25
2.20	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{40}Ar com temperatura de 300 K e diferentes κ -deformações.	26
2.21	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{40}Ar com temperatura de 600 K e diferentes κ -deformações.	26
2.22	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{40}Ar com temperatura de 900 K e diferentes κ -deformações.	27
2.23	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{40}Ar com temperatura de 1200 K e diferentes κ -deformações.	27
2.24	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{40}Ar com temperatura de 1500 K e diferentes κ -deformações.	28
2.25	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{132}Xe com temperatura de 300 K e diferentes κ -deformações.	28
2.26	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{132}Xe com temperatura de 600 K e diferentes κ -deformações.	29
2.27	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{132}Xe com temperatura de 900 K e diferentes κ -deformações.	29
2.28	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{132}Xe com temperatura de 1200 K e diferentes κ -deformações.	30
2.29	Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{132}Xe com temperatura de 1500 K e diferentes κ -deformações.	30
3.1	Os núcleos-alvo são fixos para $T = 0\text{ K}$	32
3.2	Os núcleos-alvo tem velocidade constante.	33
3.3	Os núcleos-alvo tem diferente velocidade.	33
3.4	Comportamento da função de alargamento Doppler variando ξ	41
3.5	Ilustração das regiões de ressonâncias.	42
4.1	Comportamento da função $\psi_{\kappa}(x, \xi_{\kappa=0,1})$ variando κ	48
4.2	Relação dos picos da função $\psi_{\kappa}(x, \xi_{\kappa=0,1})$ variando κ	48
4.3	Gráfico da função de alargamento Doppler, $\psi(x, \xi)$	50
4.4	Gráfico da função deformada de alargamento Doppler, $\psi_{\kappa}(x, \xi)$	51
4.5	Gráfico da função de alargamento Doppler, $\psi(x, \tilde{\xi})$	51

4.6	Obtenção das Raízes via interseções.	52
5.1	Comportamento linear para diferentes valores de $x=0$ a $x = 20$	68
5.2	Comportamento de $A(x)$ e $B(x)$ dos valores de $x=0$ a $x = 20$	69
5.3	Comportamento linear para diferentes valores de $x=0$ a $x = 10$	73
5.4	Comportamento de $A(x)$ e $B(x)$ valores de $x= 0$ a $x= 10$	73
5.5	Comportamento linear para os valores de $x = 20$ e $x = 40$	76
5.6	Comportamento de $A(x)$ e $B(x)$ para os valores de $x = 20$ e $x = 40$. .	76
5.7	Comportamento linear para os valores de $x = 20$ e $x = 40$ com os sete primeiros.	77
5.8	Comportamento de $A(x)$ e $B(x)$ para os valores de $x = 20$ e $x = 40$ com os sete primeiros.	78
5.9	Comportamento linear para diferentes valores de $x = 0$ até $x = 40$. .	79
5.10	Comportamento de $A(x)$ e $B(x)$ para os valores de $x = 0$ até $x = 40$. .	80
5.11	Seção de choque de captura ^{238}U	83
5.12	Seção de choque de captura deformada ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,1$	83
5.13	Seção de choque de captura deformada ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,1$	84
5.14	Seção de choque de captura deformada ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,2$	84
5.15	Seção de choque de captura deformada ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,2$	85
5.16	Seção de choque de captura deformada ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,3$	85
5.17	Seção de choque de captura deformada ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,3$	86
5.18	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,1$ com temperatura de 300 K	86
5.19	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,1$ com temperatura de 600 K	87
5.20	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,1$ com temperatura de 900 K	87
5.21	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,1$ com temperatura de 1200 K	88
5.22	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,1$ com temperatura de 1500 K	88
5.23	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,2$ com temperatura de 300 K	89

5.24	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,2$ com temperatura de 600 K	89
5.25	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,2$ com temperatura de 900 K	90
5.26	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,2$ com temperatura de 1200 K	90
5.27	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,2$ com temperatura de 1500 K	91
5.28	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,3$ com temperatura de 300 K	91
5.29	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,3$ com temperatura de 600 K	92
5.30	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,3$ com temperatura de 900 K	92
5.31	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,3$ com temperatura de 1200 K	93
5.32	Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,3$ com temperatura de 1500 K	93
A.1	Fluxograma básico do AG.	104
C.1	Ajuste Polinomial com Pesos.	111
C.2	Ajuste Polinomial sem Pesos.	112

Lista de Tabelas

3.1	Coeficientes p e q da aproximação 4-polo de Padé.	44
5.1	Valores de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.1).	54
5.2	Valores de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 2$ calculados pela Eq. (5.1).	55
5.3	Valores de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 3$ calculados pela Eq. (5.1).	56
5.4	Valores de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 4$ calculados pela Eq. (5.1).	57
5.5	Valores de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 5$ calculados pela Eq. (5.1).	58
5.6	Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 1$ segundo a Eq. (5.4).	62
5.7	Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 2$ segundo a Eq. (5.5).	63
5.8	Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 3$ segundo a Eq. (5.6).	64
5.9	Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 4$ segundo a Eq. (5.7).	65
5.10	Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 5$ segundo a Eq. (5.8).	66
5.11	Tempo de computação para cálculo da função deformada de alargamento Doppler, considerando uma temperatura de 2.000 K	67
5.12	Cálculo da $\psi_{\kappa}(x, \xi)$ e $\psi(x, \xi)$ para uma temperatura de 2000 K	67
5.13	Cálculo da $\psi_{\kappa}(x, \xi)$ e $\psi(x, \xi)$ para uma temperatura de 3000 K	68
5.14	Valores dos coeficientes.	69
5.15	Valores de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.12).	71
5.16	Erro relativo percentual $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.12).	72
5.17	Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.12).	75
5.18	Erro relativo percentual $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.12).	77
5.19	Erro relativo percentual $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.12).	79

5.20	Erro relativo percentual $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.12).	81
5.21	Dados nucleares de ressonância.	82
C.1	Valores de $\tilde{\xi}^{eq}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.4).	108
C.2	Pesos de cada ponto $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 1$ segundo a Eq. (5.4).	109
C.3	Cálculo de ponto específico.	113
C.4	Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 1$ segundo a Eq. (5.4).	114

Capítulo 1

Introdução

A energia nuclear¹ tem papel importante na geração de energia elétrica, pois o consumo de energia tem crescido de forma significativa no Brasil e no mundo. Outro ponto, é que a energia nuclear pode ser utilizada para outros fins, tais como: propulsão naval, aplicações na medicina, na indústria entre outros. A utilização da energia nuclear vislumbrou duas possibilidades: a primeira está associada ao projeto Manhattan para o desenvolvimento de bombas atômicas e a segunda está associada a geração de energia elétrica, tendo como protótipo o Chicago Pile-1 (CP-1), que foi o primeiro reator nuclear construído sob a arquibancada do estádio de futebol americano na Universidade de Chicago (BARROSO, 2009; MIZRAHÍ e GALETTI, 2016).

A operação e controle de um reator nuclear são governados pela distribuição da população de nêutrons no núcleo do reator. Em princípio, a equação de transporte de nêutrons consegue descrever a distribuição de nêutrons no espaço, energia, direção e tempo. No entanto, a solução numérica da equação de transporte é bastante complexa e na prática são introduzidas considerações simplificadoras que afetam sua forma final. Uma aproximação bem conhecida é a fraca dependência angular do fluxo de nêutrons no núcleo do reator que é adequadamente representada pela aproximação P1 (BELL e GLASSTONE, 1970). Essa aproximação se origina da expansão do fluxo angular de nêutrons e das seções de choque de espalhamento em polinômios de Legendre. Entretanto, para solução do sistema de equações resultantes, a variável energia não é tratada como contínua. O espectro de energia é dividido em um número finito de grupos de energia. Surge então o método de multigrupos para descrever a variação da energia dos nêutrons. Para cada grupo de energia aplica-se a equação

¹Energia produzida a partir da fissão do núcleo de um átomo, que libera uma grande quantidade de calor, suficiente para produzir energia considerável. Este fenômeno ficou evidente experimentalmente em dezembro de 1938 e explicado teoricamente em janeiro de 1939, tendo em vista que está na base do funcionamento de todos os reatores nucleares em operação. Vale ressaltar que, em 1942, o físico italiano Enrico Fermi verificou a existência da reação em cadeia, em que foi observado a fissão dos núcleos de urânio.

da difusão de nêutrons para obter a distribuição espacial dos nêutrons no reator nuclear. É importante destacar que a equação da difusão de nêutrons é obtida em função de outras aproximações, tais como: fontes isotrópicas, aproximação a uma velocidade ou energia e a frequência de colisão é muito maior que a taxa de variação temporal da densidade de corrente.

A formulação de grupos de energia é justificada pela simplicidade da solução numérica da equação de difusão de nêutrons. É necessário, no entanto, determinar as seções de choque macroscópica multigrupo presentes na equação de difusão de nêutrons. Essas seções de choque de multigrupo são calculadas utilizando as bibliotecas de dados nucleares, que fornecem as seções de choque microscópicas para as diferentes reações nêutron-núcleo, para cada intervalo de energia. Estes dados nucleares são colapsados com o uso do espectro de nêutrons característicos do reator nuclear.

A composição dos materiais que constituem o núcleo do reator, bem como a distribuição de temperaturas do meio ², tem grande influência sobre o valor das constantes de multigrupos. Os combustíveis nucleares são compostos por núcleos pesados, com estruturas nucleares complexas, cujas seções de choque microscópicas apresentam numerosas ressonâncias nucleares. Devido ao fenômeno de alargamento Doppler, a variação de temperatura provoca, justamente na faixa de energia das ressonâncias nucleares, uma alteração significativa no espectro de nêutrons e, em consequência, no valor das constantes de multigrupos (BELL e GLASSTONE, 1970; DUDERSTADT e HAMILTON, 1976).

As bibliotecas de dados nucleares geralmente fornecem as seções de choque para 0 K e nesta temperatura os núcleos-alvo estão em estado estacionário e a seção de choque pode ser aproximadamente representada pela fórmula de Breit-Wigner de nível único (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976). Entretanto, a fórmula de Breit-Wigner de nível único é usada apenas na região de ressonância não resolvida (CACUCI, 2010).

Na prática, no reator nuclear a temperatura é muito superior a 0 K, portanto o movimento nêutron-núcleo passa a depender das velocidades dos núcleos-alvo. Para superar essa dificuldade classicamente é suposto que a distribuição de velocidades dos núcleos-alvo segue a distribuição de Maxwell-Boltzmann. Essa distribuição é similar a adotada no modelo do gás livre em equilíbrio térmico. O modelo de Maxwell-Boltzmann considera os núcleos de um reator nuclear como sendo um único gás cujas moléculas são termicamente agitadas em diferentes velocidades (PATHRIA, 1996). Esta agitação térmica da molécula é descrita pela distribuição de Maxwell-Boltzmann:

²A seção de choque $\sigma(E, T)$ depende da energia do nêutron incidente e da temperatura do meio.

$$f(V, T) = \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right). \quad (1.1)$$

Na equação (1.1), k_B representa a constante de Boltzmann, M a massa do núcleo alvo, T a temperatura do meio e V a velocidade dos núcleos alvos. A distribuição de Maxwell-Boltzmann descreve com exatidão os fenômenos físicos da interação nêutron-núcleo em condições de equilíbrio térmico.

Entretanto, os fenômenos físicos fora da condição de equilíbrio térmico não podem ser descritos por meio da estatística de Maxwell-Boltzmann, sendo assim se faz necessário o emprego de uma estatística generalizada. Essa generalização vem sendo objeto de pesquisa e contínuo desenvolvimento, como por exemplo, os artigos publicados por Tsallis (1988) e Kaniadakis (2005, 2002).

1.1 Motivação e Contribuição

Os reatores a água pressurizada do tipo PWR são os mais utilizados comercialmente em todo o mundo, sendo uma das tecnologias mais consagradas em termos de reatores comerciais (IAEA, 2022). Além disso, existem vários modelos de PWRs, o de pequeno porte usado na propulsão de submarinos nucleares e reatores de grande porte, empregado para geração de energia elétrica. Sua principal característica é a utilização de água leve pressurizada para remover calor do núcleo do reator.

O projeto neutrônico desses tipos de reatores, bem como dos demais tipos dependem fortemente da acurácia nos processos de geração de dados nucleares. Nesse sentido, diversos sistemas de geração de dados nucleares foram desenvolvidos ao longo das últimas décadas, entre eles podemos destacar, NJOY da Westinghouse e FRENDY (FRom Evaluated Nuclear Data librarY) da Agência de Energia Atômica do Japão (JAEA) entre outros. Ambos os sistemas utilizam o método de $(\psi - \chi)$ no cálculo das seções de choque ressonantes, e, portanto, usam a estatística clássica de Maxwell-Boltzmann (MB) para calcular as funções de alargamento Doppler (ψ) e o termo de interferência (χ). Contudo a estatística clássica de Maxwell-Boltzmann trata fenômenos físicos apenas em equilíbrio térmico, todavia, os reatores nucleares operam inerentemente fora desta condição. Portanto, a motivação e relevância deste trabalho é caracterizada por considerar uma distribuição de velocidades dos núcleos-alvo que possa ser capaz de descrever fenômenos de alargamento Doppler fora do equilíbrio térmico, por meio do método de mapeamento usando a ideia da temperatura efetiva do meio T_{ef} .

1.2 Objetivos

O principal objetivo desta pesquisa, consiste no desenvolvimento de um modelo de temperatura efetiva do meio T_{ef} , que possibilite por meio do ajuste da temperatura do meio determinar os valores análogos da função de alargamento Doppler deformada de Kaniadakis, $\psi_\kappa(x, \xi)$, usando a expressão clássica da função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$, tão somente por meio de um mapeamento de parâmetro multidimensional.

Portanto, o método proposto possibilitará a implementação do cálculo da função de alargamento Doppler deformada de Kaniadakis, $\psi_\kappa(x, \xi)$, nos sistemas de processamento de dados nucleares que utilizam o método de $(\psi - \chi)$, bastando apenas substituir T por T_{ef} .

1.3 Organização da Pesquisa

O presente trabalho foi estruturado em seis capítulos. O primeiro tem por objetivo refletir sobre o conceito de operação e controle de um reator nuclear, bem como pela distribuição da população de nêutrons no núcleo do reator. Ademais, apresenta um panorama por considerar uma distribuição de velocidades dos núcleos-alvo que possa ser capaz de descrever fenômenos fora do equilíbrio térmico.

O segundo capítulo tem por objetivo oferecer um panorama da distribuição de Maxwell-Boltzmann e de Kaniadakis que possui a forma de lei de potências dependente de um parâmetro κ -deformação. Além disso, apresenta-se um breve histórico da teoria cinética dos gases, e o formalismo estatístico para distribuição de velocidades dos núcleos-alvo de forma resgatar a distribuição de Maxwell-Boltzmann quando tomamos o limite $\kappa \rightarrow 0$ na distribuição de Kaniadakis.

Já o terceiro capítulo trabalhará a fenomenologia do alargamento Doppler que consiste no aumento da faixa de energia das regiões de ressonâncias. Em "Aproximações de Bethe-Placzek", primeira seção do capítulo, buscou-se compreender o uso do conceito da função de alargamento Doppler a partir da interpretação matemática da forma intergral, proposto em 1937 por Bethe e Placzek para um único nível energético, como sendo a convolução da função Lorentziana com a função Gaussiana, possibilitando a obtenção de outras integrais. Na segunda seção, "Função de Alargamento Doppler", investigamos algumas pesquisas técnica e científica que serviram de métodos para o cálculo da função de alargamento Doppler. Tal procedimento reconhecidos na literatura, como a expansão assintótica, método de Padé, e o método de Beynon e Grant. Além do mais, métodos mais modernos como o método de Palma, Martinez e Silva e o método da Série de Fourier, que são métodos bastante acurados para o cálculo da função $\psi(x, \xi)$. Esses métodos clássicos e

modernos seguem a aproximação de (BETHE e PLACZEK, 1937).

A seguir, no capítulo quatro, apresentada uma reflexão sobre o conceito de temperatura efetiva (T_{ef}), como o capítulo principal deste trabalho, com a finalidade de estabelecer uma relação de equivalência entre a função de alargamento Doppler, $\psi(x, \xi)$, aplicando a distribuição de Maxwell-Boltzmann e a função alargamento Doppler deformada, $\psi_\kappa(x, \xi)$, conforme a distribuição generalizada de Kaniadakis. A partir disso, na primeira seção deste capítulo, trazemos o conceito e o primeiro uso da distribuição de Kaniadakis no contexto da engenharia nuclear proposto por (GUEDES *et al.*, 2017), que descreve as interações nêutron-núcleo com e sem equilíbrio térmico. Além disso, os resultados obtidos por (GUEDES *et al.*, 2017) e (DE ABREU *et al.*, 2019) contribuíram para investigação em andamento envolvendo a função deformada de alargamento Doppler em engenharia nuclear usando estatísticas de Kaniadakis.

O capítulo cinco está estruturado, na primeira seção, em apresentar os resultados alcançados e análise da metodologia na obtenção dos valores de $\tilde{\xi}$, a partir da expressão $\psi_\kappa(x, \xi) \cong \psi(x, \tilde{\xi})$. Em seguida, foram gerados equações e tabelas de dados com diferentes deformações, e um estudo dos coeficientes para avaliar o comportamento das variáveis ξ e $\tilde{\xi}$. Na segunda seção deste capítulo, são apresentadas aplicações simples da física de reatores para diferentes distribuições. Logo em seguida, são mostradas seções de choque média de captura e seções de choque deformadas de captura para o nuclídeo de ^{238}U e $E_0 = 6,67 \text{ eV}$, que tem relevância em reatores térmicos (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976).

No capítulo seis apresenta algumas reflexões finais ensaios possibilitado por este esforço da pesquisa de tese, revisitando os objetivos, apresentando comentários, conclusões e sugestões de possíveis aplicações da recente possibilidade do emprego da temperatura efetiva do meio (T_{ef}).

Por fim, nos apêndices são apresentados os roteiros que auxiliaram no desenvolvimento e análise desta pesquisa.

Capítulo 2

Distribuição de Maxwell-Boltzmann e de Kaniadakis

2.1 Distribuição de Maxwell-Boltzmann

2.1.1 Breve Histórico

A teoria cinética dos gases tem por objetivo descrever as propriedades macroscópicas de um gás por meio de grandezas microscópicas que estão associadas às partículas e moléculas que constituem o gás. O início da teoria atômica da matéria remonta na Grécia antiga. Após um longo período histórico e de desenvolvimento, hoje a teoria é conhecida como teoria elementar e teve como pioneiros: Daniel Bernoulli (1700-1782), que deduziu a lei de Boyle -Robert Boyle (1627-1691): $pV_R = \text{constante}$, em que p é pressão e V_R o volume do recipiente ocupado pelo gás e mostrou que a pressão é proporcional à média do quadrado do módulo das velocidades das moléculas; Rudolf Clausius (1822-1888) que introduziu o conceito de livre caminho médio e James Clerk Maxwell (1831-1879) que inseriu o conceito de função de distribuição das velocidades, conhecida como função de distribuição de Maxwell e calculou o coeficiente de viscosidade de cisalhamento de um gás ideal (KREMER, 2005).

As bases da teoria cinética moderna foram sedimentadas por Maxwell, que propôs em 1867 uma equação geral de transporte para uma grandeza macroscópica qualquer definida em função de uma média de uma grandeza microscópica associada às partículas do gás. Além disso a teoria cinética dos gases teve um novo impulso em 1872 quando Ludwig Boltzmann (1844-1906) propôs uma equação para função de distribuição das velocidades das partículas na forma de uma equação integro-diferencial e provou, com base nesta equação, a segunda lei da termodinâmica (KREMER, 2005).

Para algumas aplicações na descrição de um gás de galáxias, plasma eletrônico, é suposto que nos estados de equilíbrio térmico a função de distribuição das partículas

constituente seja descrita pela distribuição clássica de Maxwell-Boltzmann. Com isso é importante destacar que a lei de velocidades Maxwelliana, assim como a dedução do famoso teorema-H por Boltzmann, foram rigorosamente estabelecidas apenas para o modelo de esferas rígidas, nêutrons, movendo-se livremente e interagindo somente durante as colisões. Além disso, esses resultados-estímulos são para toda Mecânica Estatística clássica, incluindo a teoria de Josiah Willard Gibbs (1839-1903) dos “Ensembles”.

No tocante ao desenvolvimento da Termodinâmica, Boltzmann estabeleceu uma conexão entre as propriedades macroscópicas (entropia) e microscópicas (número de microestados acessíveis) dos sistemas. A conexão entre a mecânica estatística e a termodinâmica é estabelecida por meio de uma definição microscópica para entropia, que é o potencial termodinâmico relevante em sistema com energia fixa. O postulado fundamental da mecânica estatística estabelece que todos os estados microscópicos acessíveis a um sistema fechado em equilíbrio são igualmente prováveis, uma vez que sua base teórica fundamental é o chamado princípio de Boltzmann (SEKERKA, 2015):

$$S = k_B \log \Omega, \quad (2.1)$$

no qual S é a entropia do sistema, Ω é a probabilidade obtida com os argumentos combinatórios ligados ao número de microestados acessíveis que são compatíveis com o macroestado e k_B é uma constante universal, chamada por Max Planck, de constante de Boltzmann (EVANGELISTA, 2014).

A teoria cinética clássica considera os gases constituídos de um número grande de partícula (da ordem do número de Avogadro) que na maior parte do tempo se movem independente através do volume que as contém. O movimento de cada partícula obedece às leis da mecânica (na escala atômica, levando em conta os efeitos quânticos).

Nessa perspectiva, propõe-se no caso de um gás, uma distribuição estatística; de acordo com a mecânica estatística para distribuição das velocidades moleculares. Para um gás ideal algumas hipóteses são impostas:

- i) o espaço é isotrópico (não há velocidades privilegiadas). Isto é, todas as distribuições em diferentes direções são iguais, todas as distribuições têm as mesmas velocidades média e todas as direções são igualmente prováveis;
- ii) as componentes x, y e z das velocidades são independentes, ou seja,

$$F(V) = f(V_x, V_y, V_z) = n f(V_x) f(V_y) f(V_z), \quad (2.2)$$

onde n representa a densidade do número de partículas. Além disso, o termo, $f(V_x)dV_x f(V_y)dV_y f(V_z)dV_z$, representa a probabilidade de encontrar a partícula com as componentes das velocidades nos intervalos entre V_x e $V_x + dV_x$, V_y e $V_y + dV_y$, V_z e $V_z + dV_z$. Vale ressaltar que não existe distinção entre as direções. Neste sentido, $F(V_x, V_y, V_z)$ depende de V_x , V_y e V_z simplesmente através da velocidade $V = \sqrt{V_x^2 + V_y^2 + V_z^2}$ e se tomarmos o logaritmo do termo descrito anteriormente, resulta que:

$$\ln F(V) = \ln(n) + \ln f(V_x) + \ln f(V_y) + \ln f(V_z) = \ln f(V). \quad (2.3)$$

Diferenciando sucessivamente a equação (2.3) com relação a V_x, V_y e V_z , tem-se que:

$$\frac{1}{V} \frac{d \ln F(V)}{dV} = \frac{1}{V_x} \frac{d \ln f(V_x)}{dV_x} = \frac{1}{V_y} \frac{d \ln f(V_y)}{dV_y} = \frac{1}{V_z} \frac{d \ln f(V_z)}{dV_z} = \frac{1}{V} \frac{d \ln f(V)}{dV}. \quad (2.4)$$

Dessa forma a derivada em relação a V_x resulta em:

$$\frac{1}{V F(V)} \frac{dF(V)}{dV} = \frac{1}{V_x f(V_x)} \frac{df(V_x)}{dV_x}. \quad (2.5)$$

Fazendo as seguintes definições, tem-se que:

$$F(V) \equiv \frac{1}{V f(V)} \frac{df(V)}{dV},$$

e

$$f(V_x) \equiv \frac{1}{V_x f(V_x)} \frac{df(V_x)}{dV_x}.$$

Sendo assim, a equação resultante assume a forma

$$F(V) = f(V_x), \quad (2.6)$$

continuando com a diferenciação com respeito a V_y e V_z implica que:

$$\begin{cases} df(V_y) = 0 \rightarrow f(V_y) = c_0 \\ df(V_z) = 0 \rightarrow f(V_z) = c_0 \end{cases} \quad (2.7)$$

Supondo $c_0 = -2a$ em que o sinal foi introduzido para satisfazer a condição de normalização e o fator 2 por conveniência matemática segue da equação (KREMER, 2005):

$$\Phi(V) = \phi(V_x). \quad (2.8)$$

$$\phi(V_x) = -2a \rightarrow \frac{1}{V_x f(V_x)} \frac{df(V_x)}{dV_x} = 2a(V_x),$$

integrando em ambos os lados, chega-se a expressão $\ln f(V_x) = c_1 - 2a(V_x)$, em que c_1 é uma constante de integração. A partir dessa expressão e exponenciando em ambos os lados chega-se ao resultado:

$$f(V_x) = b e^{-a V_x^2}, \quad (2.9)$$

sendo b a constante de integração. Como $f(V_x)$ é uma função positiva e limitada, segue que as constantes a e b devem ser positivas. A determinação destas constantes apoia-se no fato de que o equilíbrio termodinâmico é caracterizado por duas variáveis de estado: densidade do número de partículas n e temperatura T . Assim, para encontrar a componente (V_x) da velocidade no intervalo de $(-\infty, +\infty)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(V_x) dV_x = 1. \quad (2.10)$$

Resolvendo a integral, temos:

$$b = \sqrt{\frac{a}{\pi}}. \quad (2.11)$$

Consequentemente, a determinação da constante a aplica-se a energia média de $\frac{3}{2}k_B T$ por grau de liberdade. Logo, é possível chegar ao resultado:

$$a = \frac{M}{2k_B T}. \quad (2.12)$$

De modo que, a equação (2.11) pode ser reescrita:

$$b = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}}. \quad (2.13)$$

Levando estes resultados na equação (2.9), obtém-se finalmente:

$$f(V_x) = \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{MV_x^2}{2k_B T} \right). \quad (2.14)$$

A energia cinética da componente (V_x) é representada por uma Gaussiana, simétrica, em torno do valor médio, ou seja, $\bar{V}_x = 0$. Desse modo, estende-se o mesmo procedimento para as demais componentes V_y e V_z , a forma da função $f(V)$ é representada pela equação:

$$f(V) = \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right). \quad (2.15)$$

Portanto, a probabilidade de encontrar uma partícula com uma velocidade V , em qualquer direção dentro de um volume infinitesimal d^3V do espaço de velocidades é dada por:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi f(V) V^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi dV = 4\pi f(V) V^2 dV. \quad (2.16)$$

Sendo $f(V)d^3V$ a probabilidade de uma molécula de gás tendo logo a distribuição de Maxwell-Boltzmann é dada por (SEKERKA, 2015):

$$f_0(V) \equiv 4\pi f(V) V^2 = 4\pi \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} V^2 \exp \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right). \quad (2.17)$$

A partir da função de probabilidade de Maxwell-Boltzmann, equação (2.17), determina-se a velocidade média da partícula, tal que:

$$\bar{V} = \frac{\int_0^\infty V f_0(V) dV}{\int_0^\infty f_0(V) dV} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi M}}. \quad (2.18)$$

Sob outra perspectiva, o módulo da velocidade que torna a função $f_0(V)$ um máximo é denominado de módulo da velocidade mais provável, ou seja,

$$\left. \frac{df_0(V)}{dV} \right|_{V=V_{mp}} = 0. \quad (2.19)$$

Após derivada com relação a V e igualar a zero, obtém-se que:

$$V_{mp} = \sqrt{\frac{2k_B T}{M}}. \quad (2.20)$$

Por fim, uma outra velocidade característica é a velocidade média quadrática V_{rms} , definida como raiz quadrada do valor médio do quadrado do módulo da velocidade:

$$V_{rms} = \sqrt{\bar{V}^2} = \sqrt{\frac{\int_0^\infty V^2 f_0(V) dV}{\int_0^\infty f_0(V) dV}} = \sqrt{\frac{3k_B T}{M}}. \quad (2.21)$$

A partir das três velocidades, pode-se constatar que:

$$V_{rms} > \bar{V} > V_{mp}. \quad (2.22)$$

Nas figuras (2.1), (2.2), (2.3) e (2.4) são ilustradas a distribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases nobres com diferentes temperaturas. Dessa forma, observa-se que com o aumento da temperatura a distribuição fica mais alargada e consequentemente em um maior valor para a velocidade mais provável.

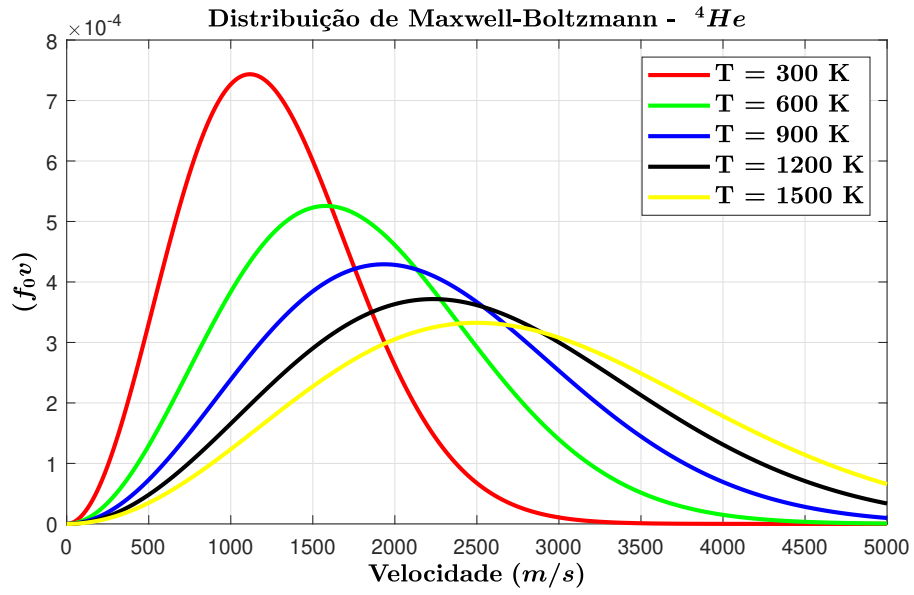


Figura 2.1: Distribuição de Maxwell-Boltzmann para ${}^4\text{He}$ com diferentes temperaturas.

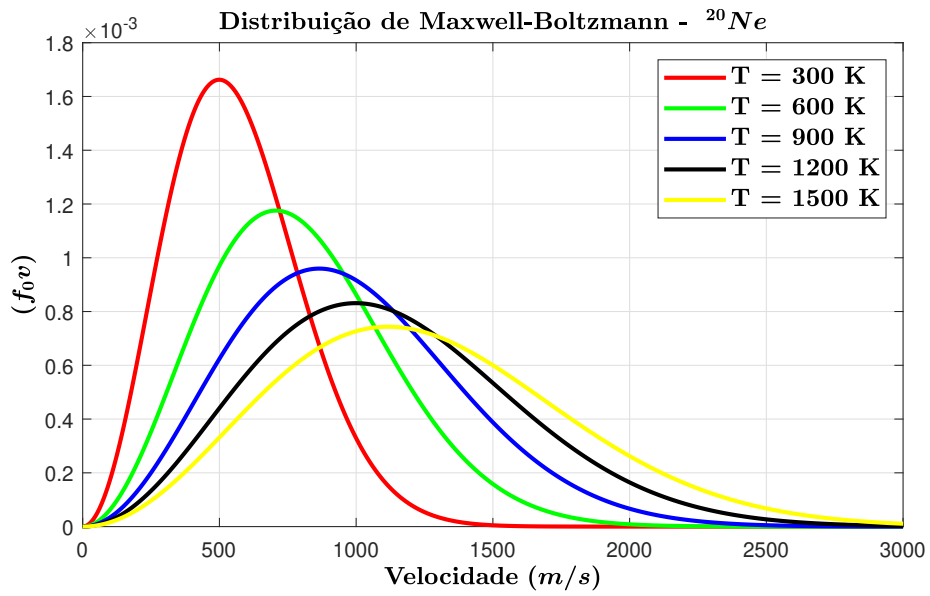


Figura 2.2: Distribuição de Maxwell-Boltzmann para ${}^{20}\text{Ne}$ com diferentes temperaturas.

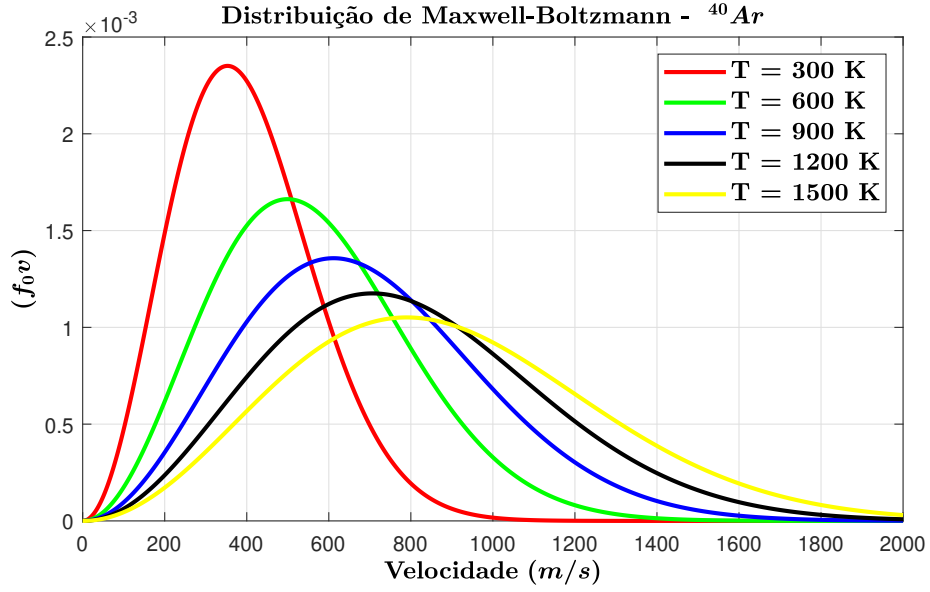


Figura 2.3: Distribuição de Maxwell-Boltzmann para ^{40}Ar com diferentes temperaturas.

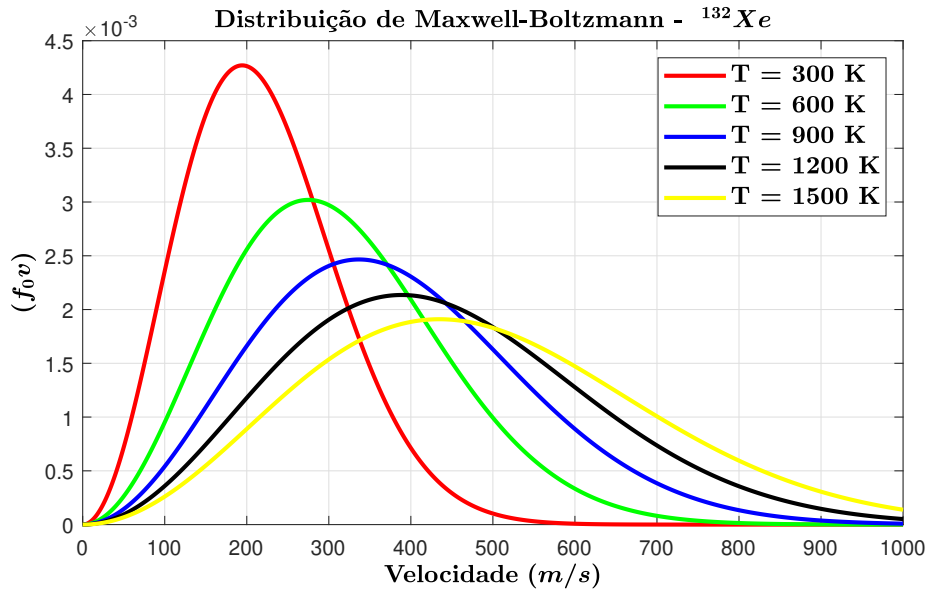


Figura 2.4: Distribuição de Maxwell-Boltzmann para ^{132}Xe com diferentes temperaturas.

Nas figuras (2.5), (2.6), (2.7), (2.8) e (2.9) são ilustradas a distribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases nobres. Observa-se assim, que quanto menor for a massa das moléculas do gás mais alargada fica a distribuição, ou seja, acarretando o deslocamento para direita e o valor da função diminui. Contudo, mais uma vez, percebe-se o quão maior fica a velocidade mais provável.

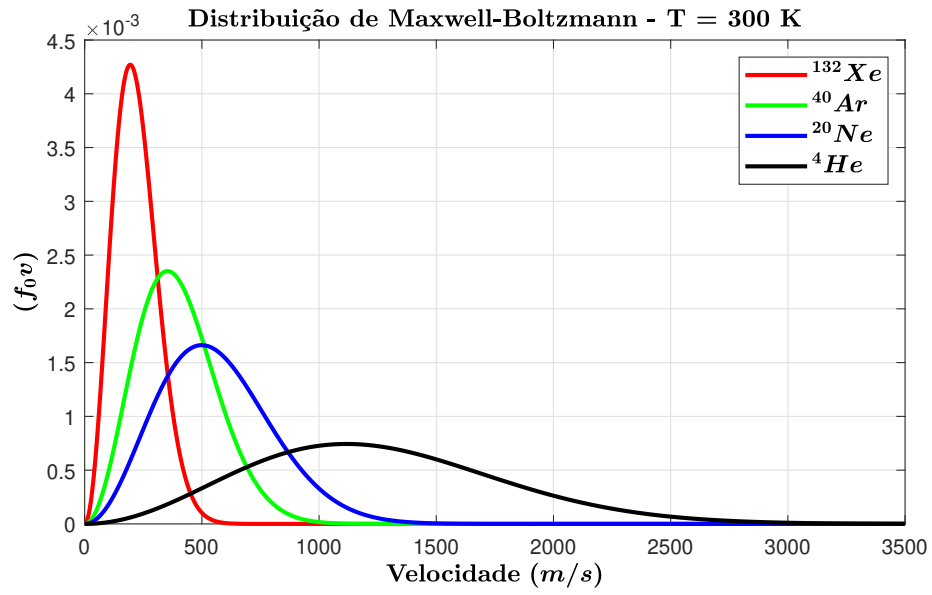


Figura 2.5: Distitribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases com temperatura de 300 K.

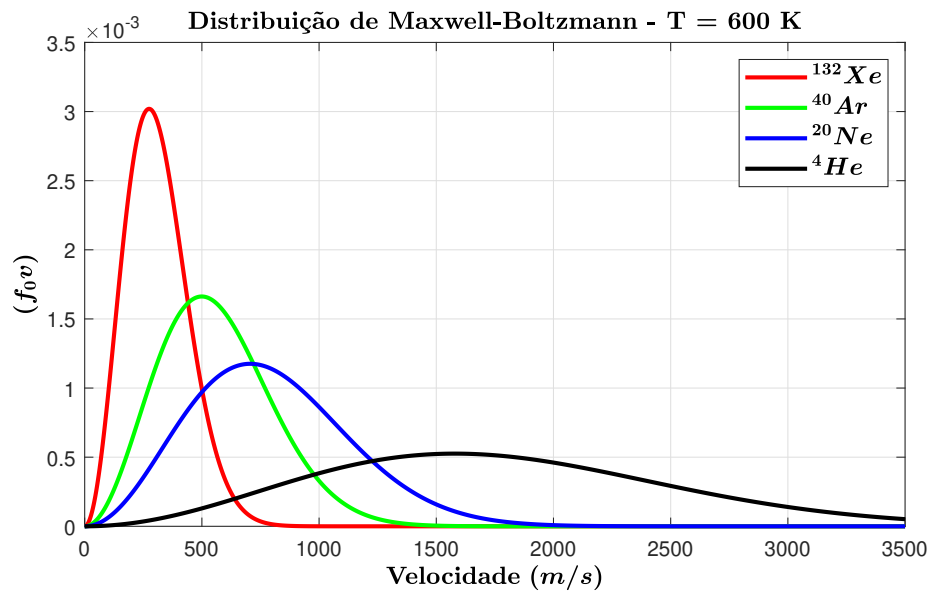


Figura 2.6: Distitribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases com temperatura de 600 K.

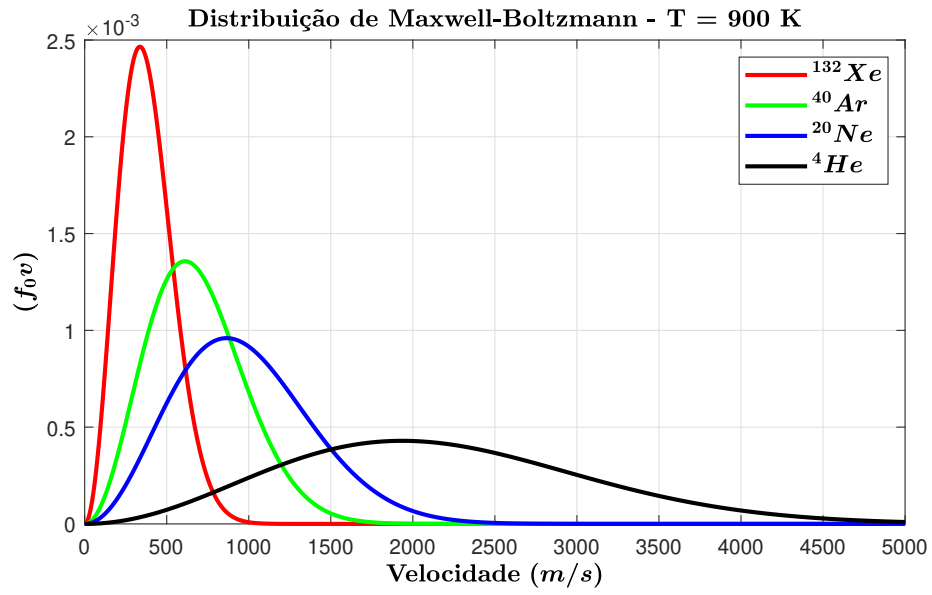


Figura 2.7: Distitribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases com temperatura de 900 K.

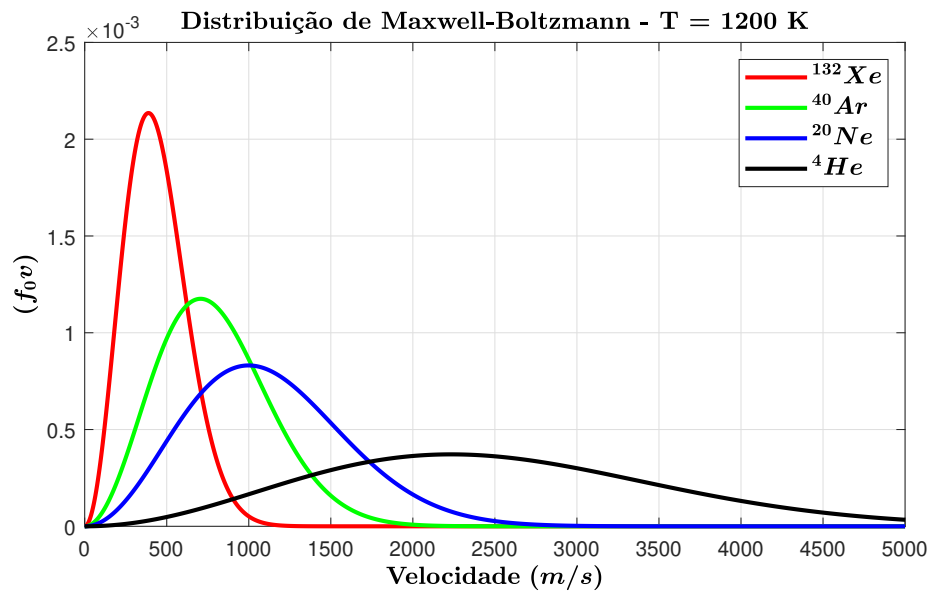


Figura 2.8: Distitribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases com temperatura de 1200 K.

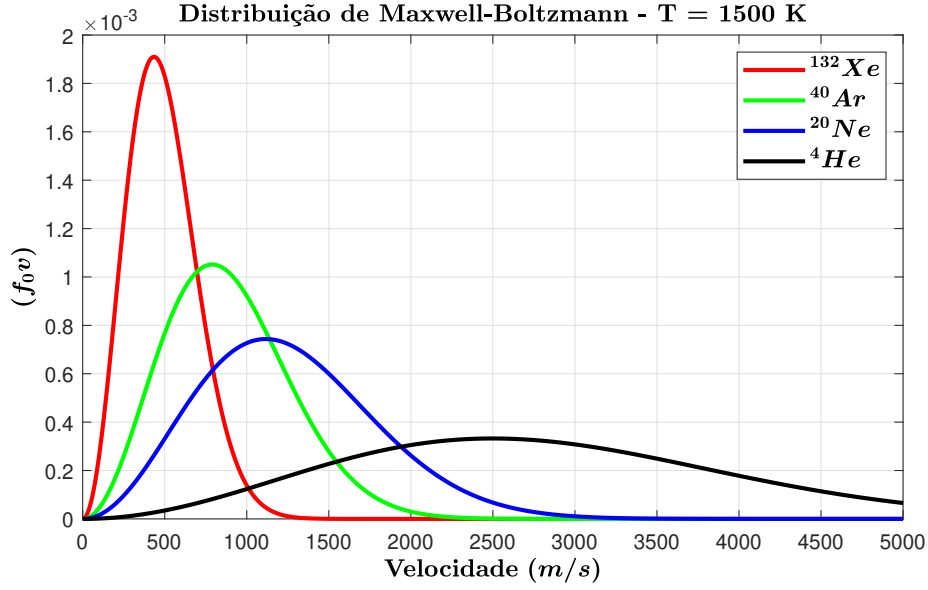


Figura 2.9: Distribuição de Maxwell-Boltzmann para alguns gases com temperatura de 1500 K.

2.2 Distribuição de Kaniadakis

É importante destacar que a Termodinâmica é uma teoria fenomenológica da matéria que sistematiza as leis empíricas sobre o comportamento térmico dos corpos macroscópicos. Já na perspectiva da Mecânica Estatística, tem por objetivo interpretar as leis e os resultados da termodinâmica através da informação microscópica. Isto é, considerando o comportamento de um número enorme de partículas que constituem os corpos macroscópicos (SALINAS, 2018).

O campo de estudo da Mecânica Estatística se divide em duas partes fundamentais: equilíbrio e não-equilíbrio (ou fora do equilíbrio). A primeira está bem desenvolvida e fundamentada na literatura. Através do formalismo de Gibbs é possível estudar com detalhes as propriedades macroscópicas de um sistema em equilíbrio termodinâmico conhecendo-se apenas seu Hamiltoniano. Mas, para os sistemas fora de equilíbrio, não há uma formulação que descreve tais sistemas, mesmo quando estes se encontram em um estado estacionário. Recentemente, surgiram algumas propostas na tentativa de se estudar, microscopicamente, sistemas fora do equilíbrio (DOS SANTOS, 2017).

Estimulado por sistemas que exibem invariância de escala, ou seja, sistemas multifractais, o físico Greco-brasileiro Constantino Tsallis em 1988 apresentou um artigo propondo uma generalização para a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (TSALLIS, 1988). Nesse sentido, a proposta de Kaniadakis surge também como

alternativa para interpretação de fenômenos fora do equilíbrio térmico. Este trabalho de tese baseia-se nas contruibuições proposta por Giorgio Kaniadakis.

Giorgio, engenheiro e físico nuclear Greco-italiano apresentou uma nova proposta à Mecânica Estatística de Maxwell-Boltzmann-Gibbs em 2001, na qual uma generalização é expressa através da variação de um parâmetro deformador, portanto, surge naturalmente dentro da relatividade especial de Einstein, de modo que se pode ver a deformação κ como um efeito puramente relativístico; κ parâmetro Kappa definido como parâmetro de generalização (KANIADAKIS, 2001a,b, 2002). A estatística generalizada de Kaniadakis obedece ao Princípio de Interação Cinética ou do termo em inglês *Kinetical Interaction Principle (KIP)*¹, que descreve o movimento das partículas e impõe um forma para a entropia do sistema. Esse princípio impõe também a forma da entropia generalizada associada ao sistema e permite obter a distribuição estatística dessas partículas (KANIADAKIS, 2001b). Em seu artigo de 2002, intitulado "*Statistical mechanics in the context of special relativity*" (KANIADAKIS, 2002), Kaniadakis apresentou de forma breve e consistente os fundamentos da κ -álgebra. A estatística κ -deformada pode ser usada para explicar uma classe grande de fenômenos observados que sejam descritos por funções distribuições que apresentem as leis de potência.

2.2.1 Definições Matemáticas

Nessa seção, é apresentado o formalismo estatístico de Giorgio Kaniadakis, uma vez que é baseada na generalização do teorema-H de Boltzmann. A distribuição de Kaniadakis (KANIADAKIS *et al.*, 2017), é dada por:

$$f_{\kappa}(V) = A_{\kappa} \exp_{\kappa} \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right). \quad (2.23)$$

Sendo, a função κ -exponencial definida por:

$$\exp_{\kappa}(x) \equiv \left(\sqrt{1 + \kappa^2 x^2} + \kappa x \right)^{\frac{1}{\kappa}}, \quad (2.24)$$

e A_{κ} um parâmetro dependente de κ .

Portanto, a probabilidade de encontrar uma partícula com velocidade V , em qualquer direção dentro do elemento de volume d^3V do espaço de velocidade, é dada por:

¹Segundo Kaniadakis, princípio que governa a dinâmica dos sistemas físicos, em especial, propõe unificar os formalismos estatísticos existentes na literatura.

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi f_\kappa(V) V^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi dV = 4\pi f_\kappa(V) V^2 dV. \quad (2.25)$$

Logo a distribuição de Kaniadakis é dada por:

$$f_{0_\kappa}(V) \equiv 4\pi f_\kappa(V) = 4\pi A_\kappa V^2 \exp_\kappa \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right), \quad (2.26)$$

dessa forma,

$$f_{0_\kappa}(V) = 4\pi A_\kappa V^2 \exp_\kappa \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right). \quad (2.27)$$

Note que a partir da condição de normalização, o parâmetro A_κ pode ser determinado, tal que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_{0_\kappa}(V) dV = 4\pi A_\kappa \int_0^{+\infty} V^2 \exp_\kappa \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV = 1. \quad (2.28)$$

Fazendo a seguinte mudança de variável, tem-se que:

$$u = \left(\frac{MV^2}{2k_B T} \right) \implies du = \left(\frac{MV}{k_B T} \right) dV. \quad (2.29)$$

Após substituição simples (DE ALMEIDA, 2019):

$$2\pi A_\kappa \left(\frac{2k_B T}{M} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{+\infty} (u)^{\frac{1}{2}} \exp_\kappa(-u) du = 1. \quad (2.30)$$

Lembrando que a transformada de Mellin (ZWILLINGER e JEFFREY, 2007) é dada por:

$$\int_0^{+\infty} (u)^{r-1} \exp_\kappa(-u) du = \frac{|2\kappa|^{-r}}{(1+|\kappa|r)} \frac{\Gamma(\frac{1}{2|\kappa|} - \frac{r}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2|\kappa|} + \frac{r}{2})} \Gamma(r); \text{ para } 0 < r < \frac{1}{|\kappa|}. \quad (2.31)$$

Comparando a integral da equação (2.31) com a integral da equação (2.30), conclui-

se que:

$$A_\kappa \equiv \left(\frac{|\kappa|M}{\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 + \frac{3}{2}|\kappa| \right) \frac{\Gamma(\frac{1}{2|\kappa|} + \frac{3}{4})}{\Gamma(\frac{1}{2|\kappa|} - \frac{3}{4})}; \text{ para } |\kappa| < \frac{2}{3}. \quad (2.32)$$

Sendo A_κ o parâmetro de normalização de $f_{0_\kappa}(V)$:

A partir da função distribuição de kaniadakis é possível encontrar a velocidade mais provável, $(V_{\kappa_{mp}})$ (DE ALMEIDA, 2019):

$$\frac{df_{0_\kappa}(V)}{dV} = 4\pi A_\kappa \left[2V - \frac{MV^3}{k_B T \sqrt{\kappa^2 \left(\frac{MV^2}{2k_B T} \right)^2 + 1}} \right] \exp_\kappa \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) = 0. \quad (2.33)$$

Resolvendo-se encontra que:

$$V_{\kappa_{mp}} = \left(\frac{2k_B T}{M \sqrt{1 - \kappa^2}} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.34)$$

Aplicando-se o mesmo raciocínio para o caso da velocidade média (DE ALMEIDA, 2019):

$$\bar{V}_\kappa = \int_0^{+\infty} V f_{0_\kappa}(V) dV = 4\pi A_\kappa \int_0^{+\infty} V^3 \exp_\kappa \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV. \quad (2.35)$$

Substituindo na equação (2.29):

$$\bar{V}_\kappa = 8\pi A_\kappa \left(\frac{k_B T}{M} \right)^2 \int_0^{+\infty} u \exp_\kappa(-u) du. \quad (2.36)$$

Com isso, realiza-se novamente a substituição da equação (2.31), que pode ser representada da seguinte forma:

$$\bar{V}_\kappa = \frac{8\pi A_\kappa}{1 - 4\kappa^2} \left(\frac{k_B T}{M} \right)^2; \text{ para } |\kappa| < \frac{1}{2}. \quad (2.37)$$

Após a substituição da equação (2.32), obtém-se a seguinte relação:

$$\overline{V}_\kappa = \left(\frac{2\sqrt{2}|\kappa|^{\frac{3}{2}}}{1-4\kappa^2} \right) \left(1 + \frac{3}{2}|\kappa| \right) \frac{\Gamma(\frac{1}{2|\kappa|} + \frac{3}{4})}{\Gamma(\frac{1}{2|\kappa|} - \frac{3}{4})} \left(\frac{8k_B T}{\pi M} \right)^{\frac{1}{2}} ; \text{ para } |\kappa| < \frac{1}{2}. \quad (2.38)$$

Levando-se em consideração esses aspectos, portanto, segue a velocidade média quadrática que é dada por:

$$\overline{V}_\kappa^2 = \int_0^{+\infty} V^2 f_{0\kappa}(V) dV = 4\pi A_\kappa \int_0^{+\infty} V^4 \exp_\kappa \left(-\frac{MV^2}{2k_B T} \right) dV. \quad (2.39)$$

Uma vez que, utilizando as equações definidas (2.29), (2.31) e (2.32), o que leva a:

$$\overline{V}_\kappa^2 = \frac{2(4|\kappa|^3(2+3|\kappa|))}{(4-|\kappa|)^2(4-25|\kappa|^2)(2-3|\kappa|)} \left[\frac{\Gamma(\frac{1}{2|\kappa|} + \frac{3}{4})}{\Gamma(\frac{1}{2|\kappa|} - \frac{3}{4})} \right]^2 \left(\frac{3k_B T}{M} \right);$$

para $|\kappa| < \frac{2}{5}$. (2.40)

Finalmente, para a velocidade média quadrática, $V_{\kappa rms}$, definida como raiz quadrada do valor médio do quadrado da velocidade, isto é:

$$\overline{V}_{\kappa rms}^2 = \left[\frac{2(4|\kappa|^3(2+3|\kappa|))}{(4-|\kappa|)^2(4-25|\kappa|^2)(2-3|\kappa|)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\Gamma(\frac{1}{2|\kappa|} + \frac{3}{4})}{\Gamma(\frac{1}{2|\kappa|} - \frac{3}{4})} \left(\frac{3k_B T}{M} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.41)$$

Portanto, igualmente conclui-se que:

$$V_{\kappa rms} < \overline{V}_\kappa < V_{\kappa mp}. \quad (2.42)$$

Note que os resultados dados pelas equações (2.34), (2.38) e (2.41), reduziu-se aos resultados dados pela distribuição de Maxwell-Boltzmann, equações (2.18), (2.20) e (2.21), quando $\kappa \rightarrow 0$. O mesmo ocorre com a própria distribuição de Kaniadakis que tende a distribuição de Maxwell-Boltzmann, quando $\kappa \rightarrow 0$.

A seguir são apresentadas as figuras (2.10 a 2.14) para o isótopo ^4He , já as figuras

(2.15 a 2.19) para ^{20}Ne , nas figuras (2.20 a 2.24) o isotópo ^{40}Ar e nas figuras (2.25 a 2.29) é simbolizada o ^{132}Xe , que representa o comportamento da distribuição de Kaniadakis, equação (2.27) e com diferentes temperaturas e κ -deformações.

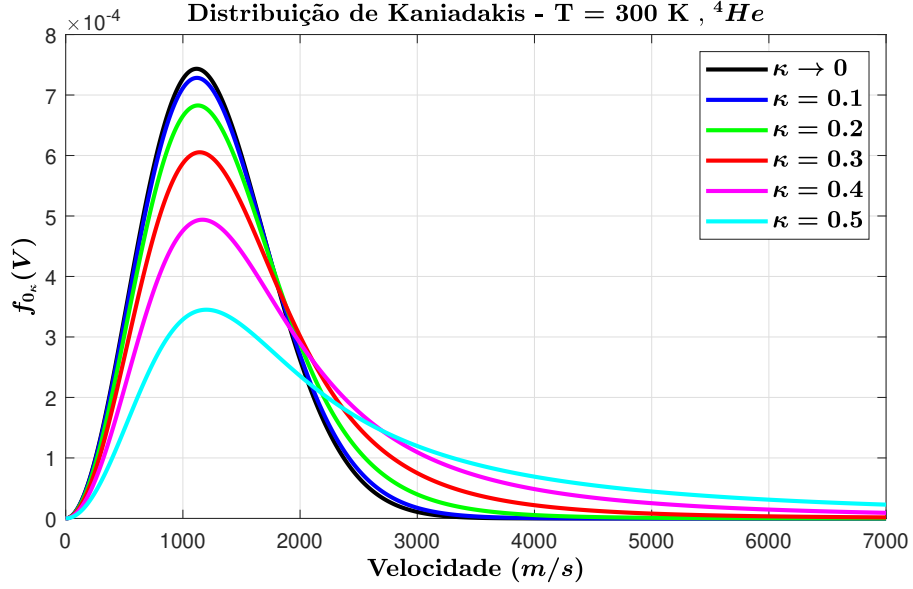


Figura 2.10: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^4He com temperatura de 300 K e κ -deformações.

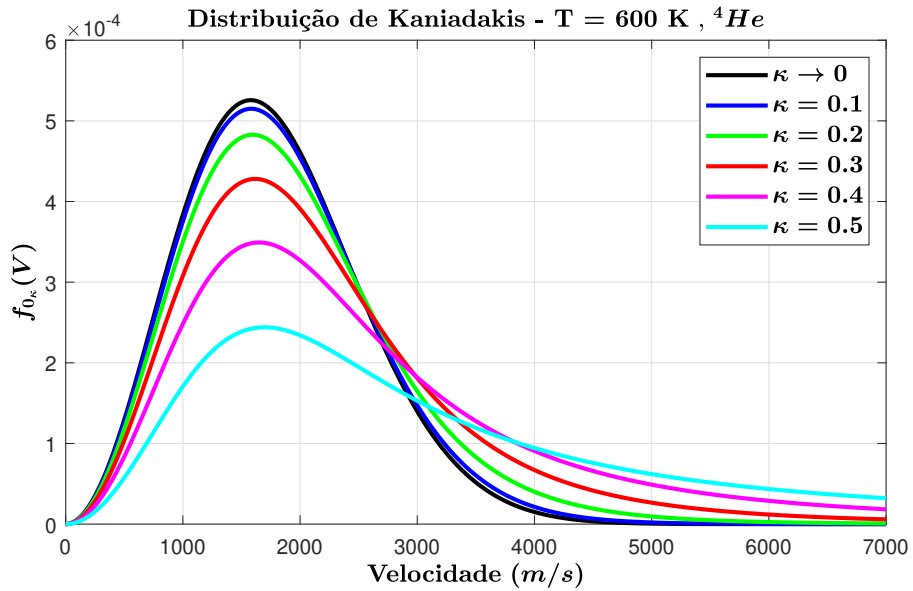


Figura 2.11: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^4He com temperatura de 600 K e κ -deformações.

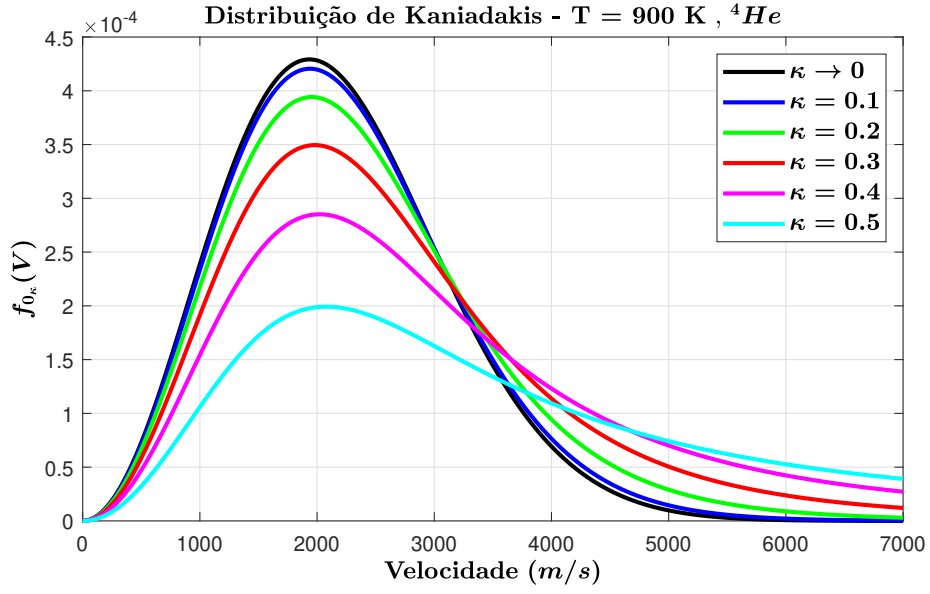


Figura 2.12: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ${}^4\text{He}$ com temperatura de 900 K e κ -deformações.

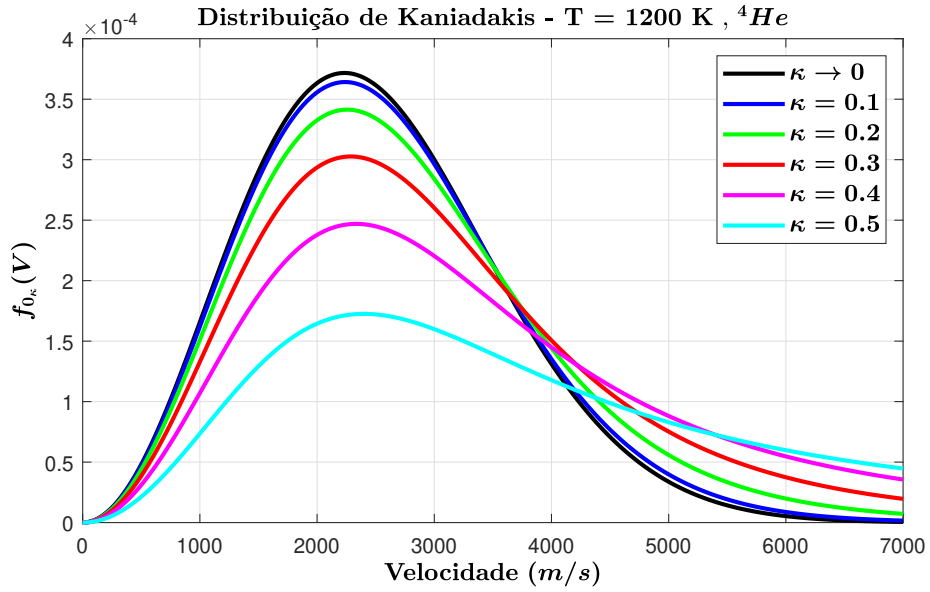


Figura 2.13: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ${}^4\text{He}$ com temperaturas de 1200 K e κ -deformações.

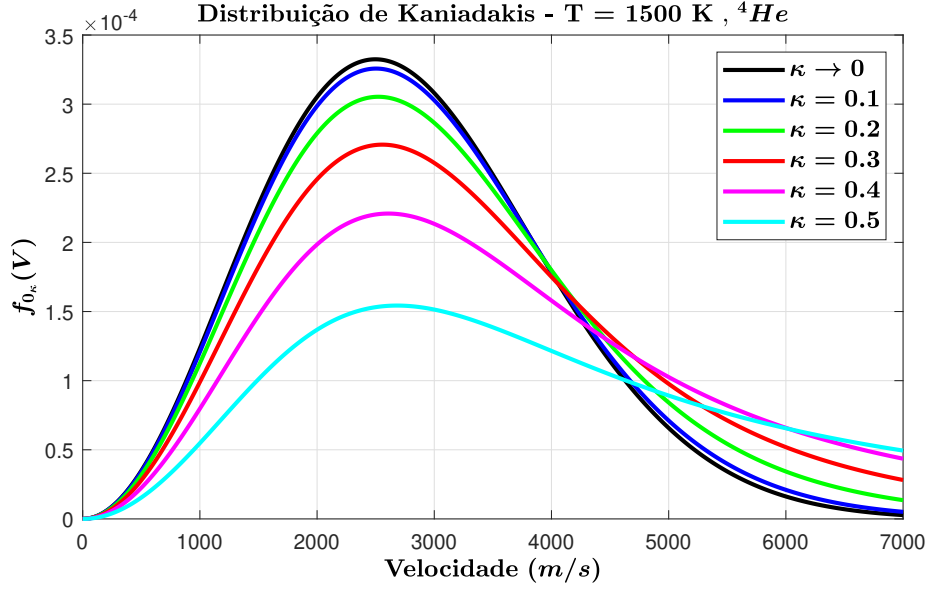


Figura 2.14: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ${}^4\text{He}$ com temperatura de 1500 K e κ -deformações.

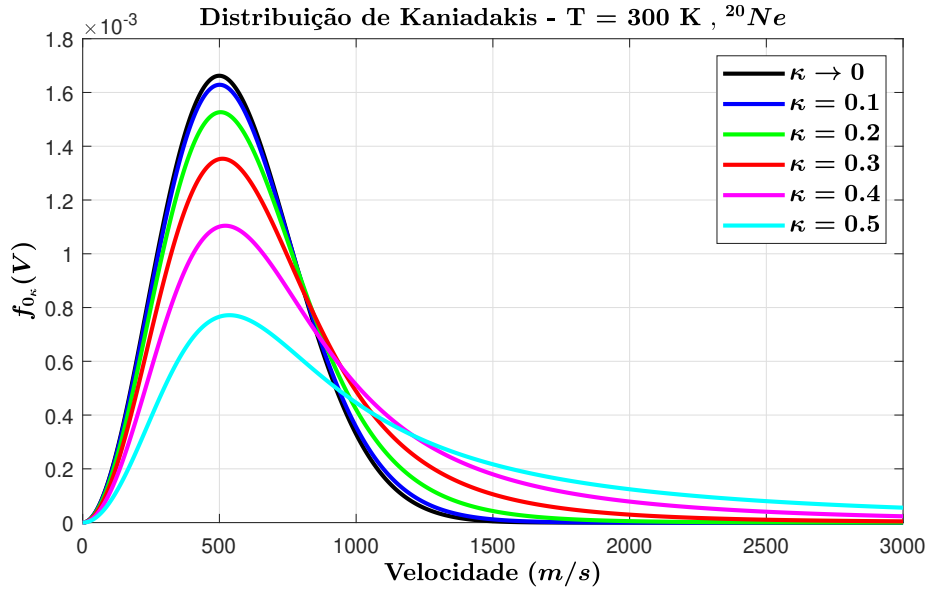


Figura 2.15: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ${}^{20}\text{Ne}$ com temperatura de 300 K e diferentes κ -deformações.

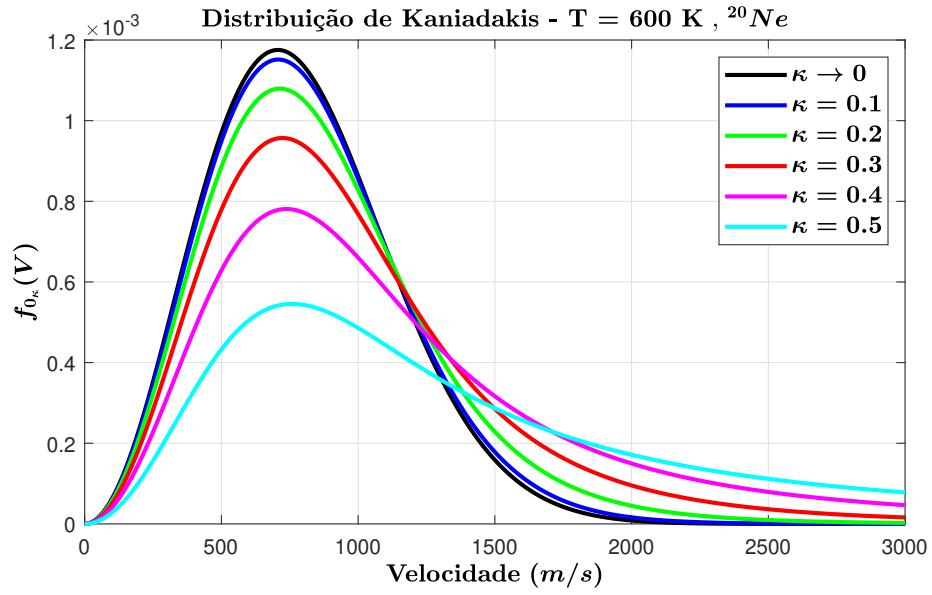


Figura 2.16: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{20}Ne com temperatura de 600 K e diferentes κ -deformações.

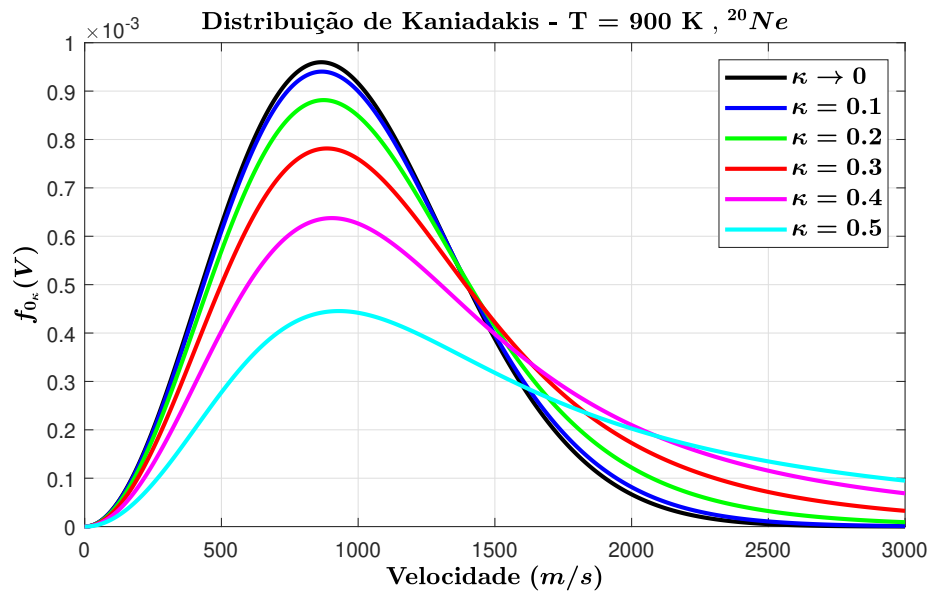


Figura 2.17: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{20}Ne com temperatura de 900 K e diferentes κ -deformações.

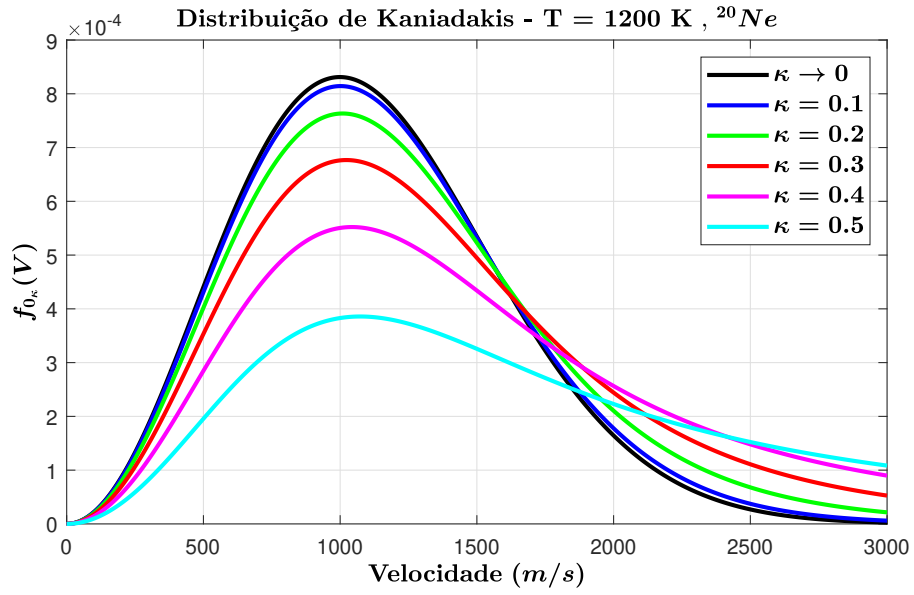


Figura 2.18: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{20}Ne com temperatura de 1200 K e diferentes κ -deformações.

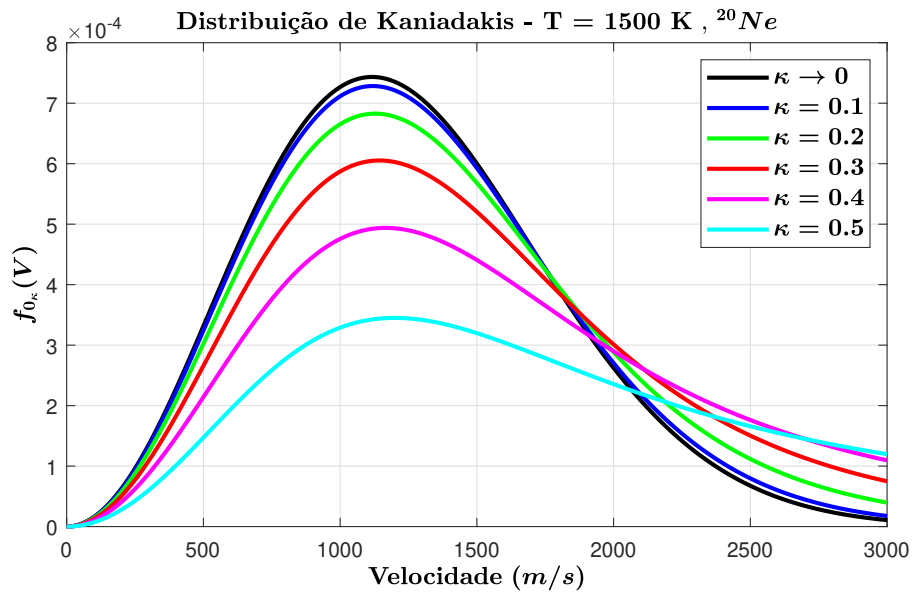


Figura 2.19: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{20}Ne com temperatura 1500 K e diferentes κ -deformações.

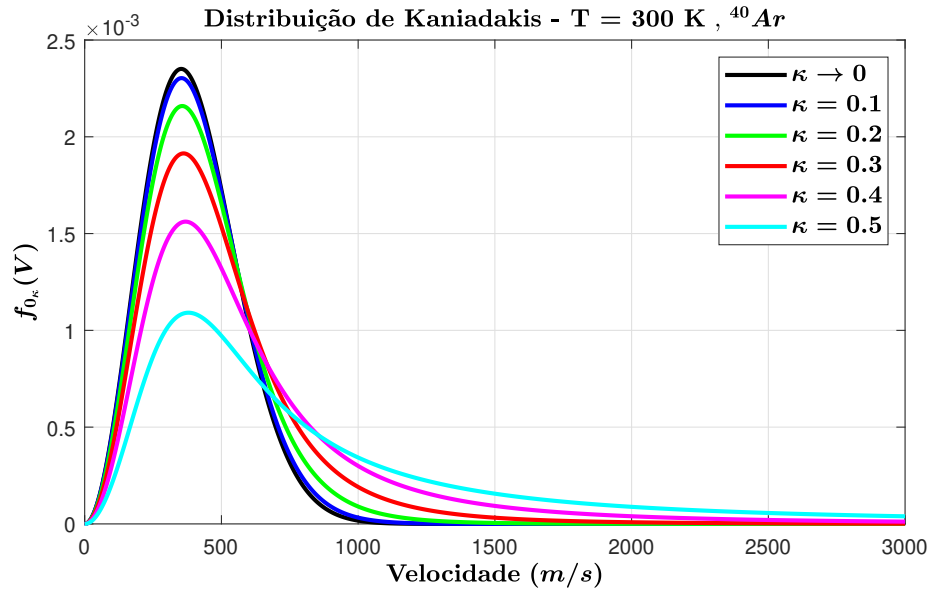


Figura 2.20: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{40}Ar com temperatura de 300 K e diferentes κ -deformações.

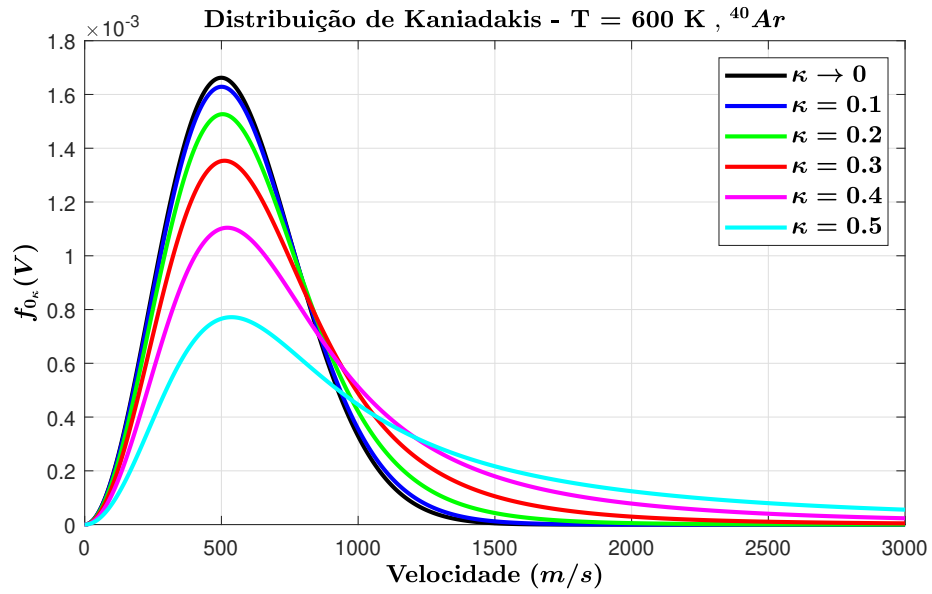


Figura 2.21: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{40}Ar com temperatura de 600 K e diferentes κ -deformações.

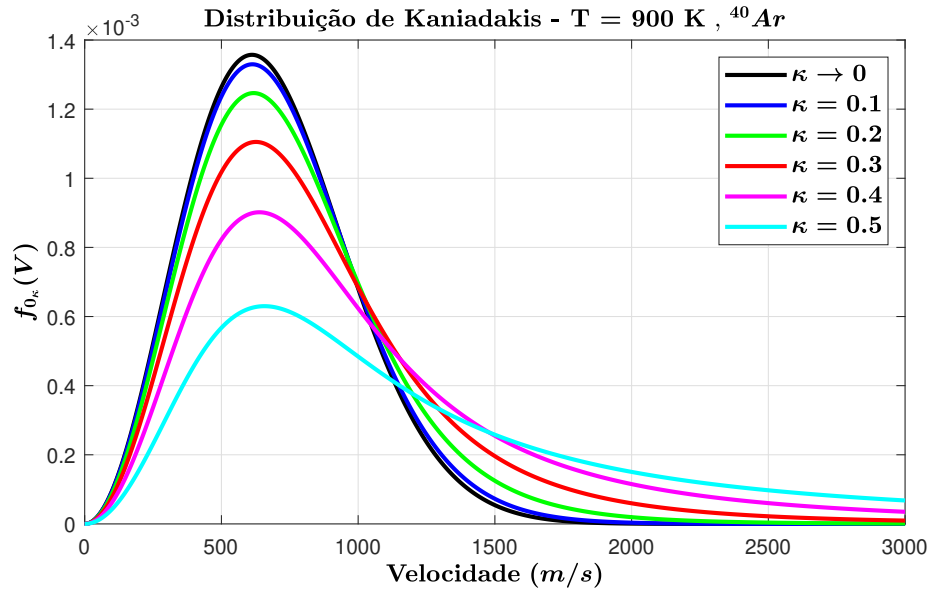


Figura 2.22: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{40}Ar com temperatura de 900 K e diferentes κ -deformações.

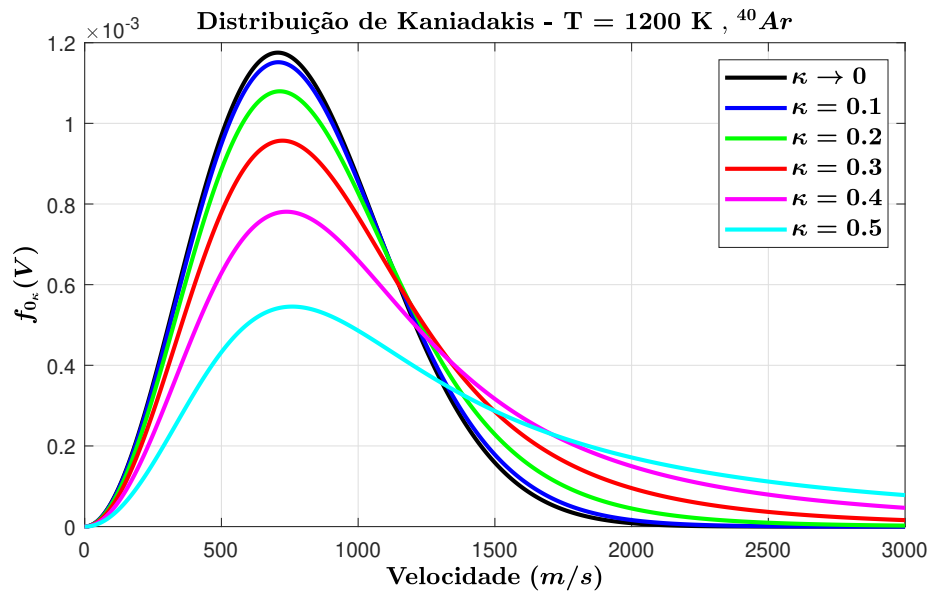


Figura 2.23: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{40}Ar com temperatura de 1200 K e diferentes κ -deformações.

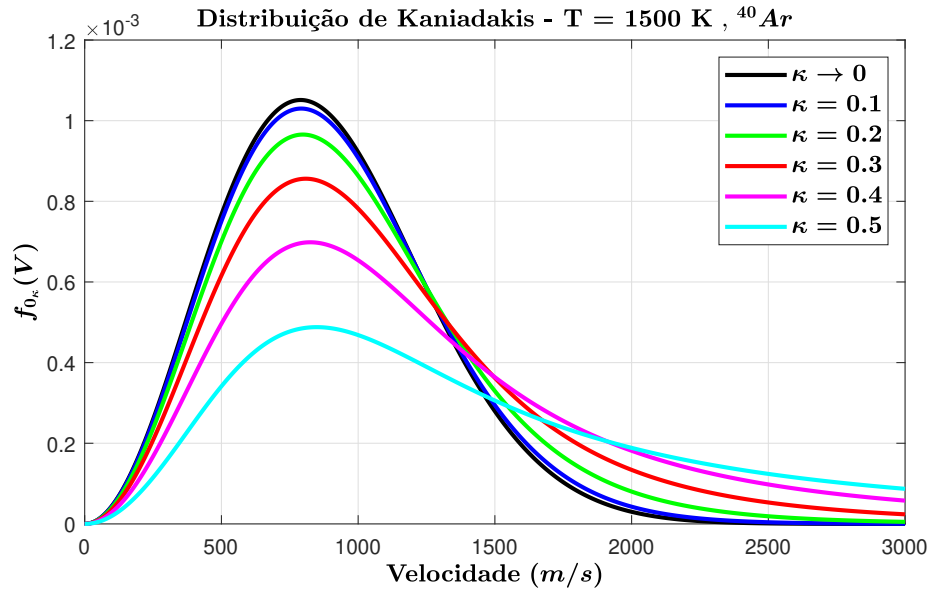


Figura 2.24: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{40}Ar com temperatura de 1500 K e diferentes κ -deformações.

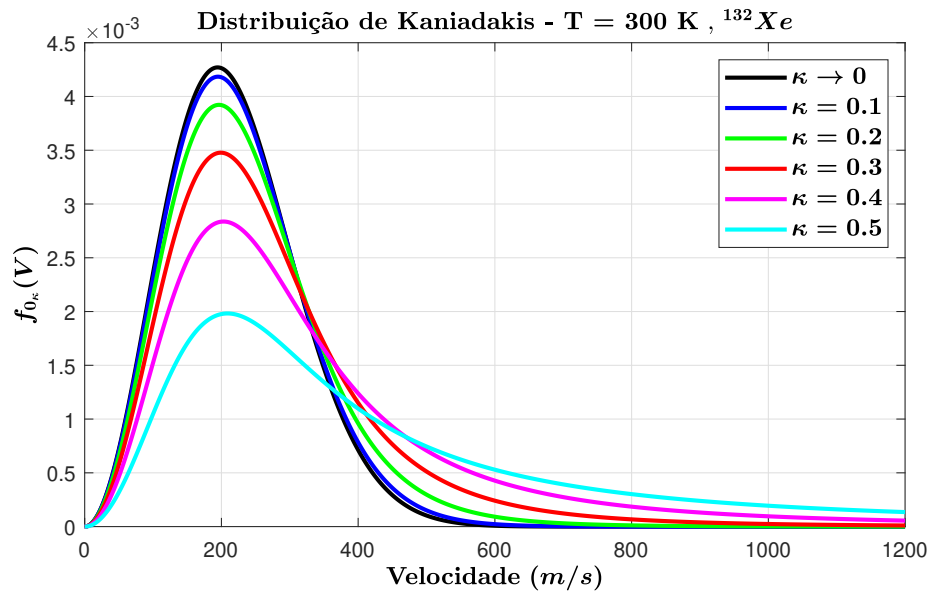


Figura 2.25: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{132}Xe com temperatura de 300 K e diferentes κ -deformações.

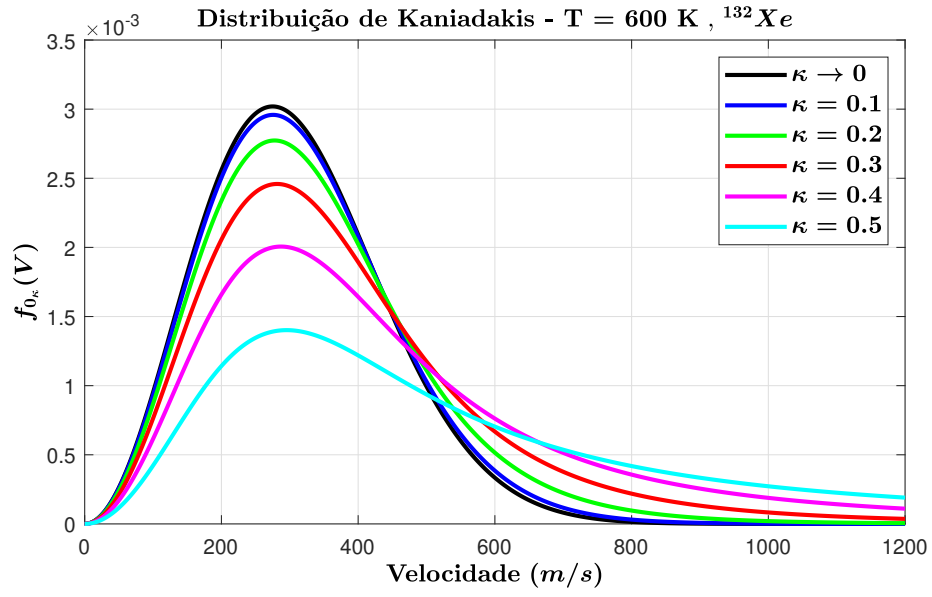


Figura 2.26: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{132}Xe com temperatura de 600 K e diferentes κ -deformações.

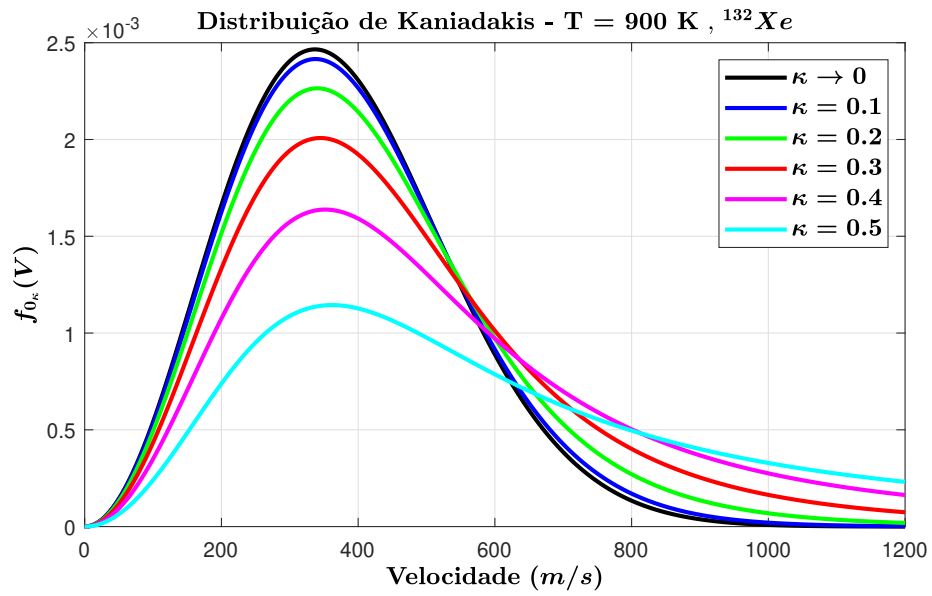


Figura 2.27: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{132}Xe com temperatura de 900 K e diferentes κ -deformações.

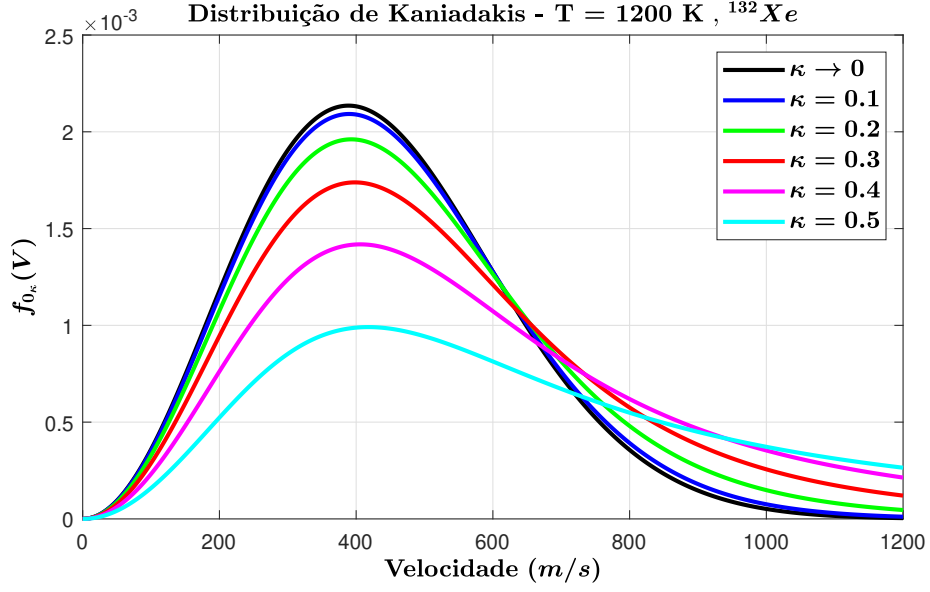


Figura 2.28: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{132}Xe com temperatura de 1200 K e diferentes κ -deformações.

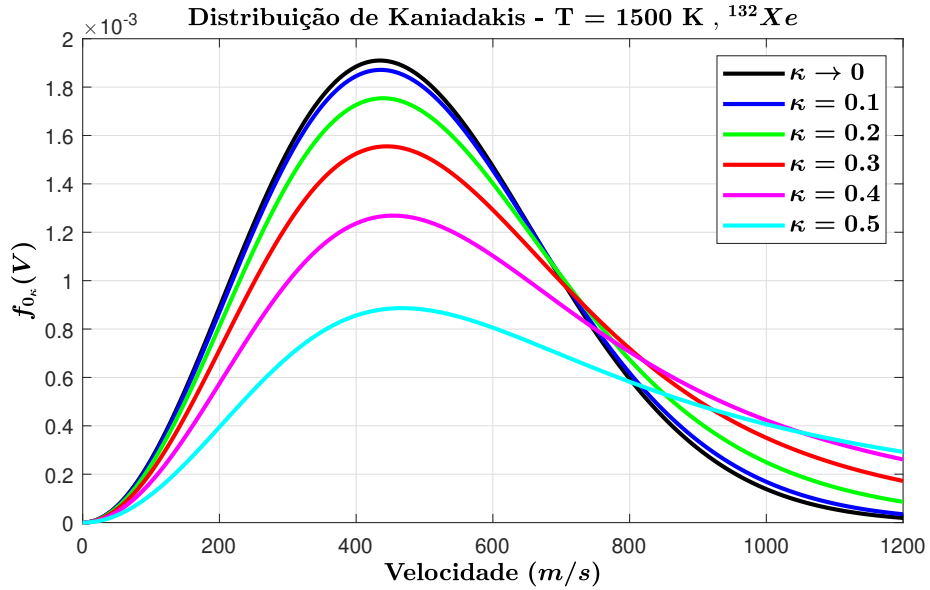


Figura 2.29: Distribuição de velocidades de Kaniadakis ^{132}Xe com temperatura de 1500 K e diferentes κ -deformações.

Nas figuras (2.10 a 2.29), nota-se o comportamento da função de probabilidade das velocidades para um conjunto governado via à distribuição estatística de Kaniadakis, considerando diferentes núclídeos com temperaturas distintas. Assim como proposto por DE ALMEIDA (2019) ao conjecturar a existência de uma temperatura efetiva ao relacionar gráficos similares da teoria de Tsallis e Kaniadakis em comparação com a teoria de Maxwell-Boltzmann. De fato, observa-se semelhanças com os

gráficos mostrados nas figuras (2.5), (2.6), (2.7), (2.8) e (2.9), na qual é apresentada a distribuição de Maxwell-Boltzmann para os mesmos isótopos e temperaturas.

Desse modo, tais semelhanças evidencia a proposta em desenvolvimento desta tese, um modelo de temperatura efetiva, possibilitando um mapeamento da teoria κ -deformada na teoria de Maxwell-Boltzmann. O próximo capítulo apresentará um estudo da fenomenologia das ressonâncias nucleares.

Capítulo 3

Alargamento das ressonâncias nucleares

O movimento térmico dos núcleos se torna relevante quando os nêutrons alcançam energias $\sim k_B T$. Nessa conformidade a seção de choque sofre influência do movimento térmico dos núcleos. Mas, existe uma circunstância que o movimento térmico dos núcleos deve ser levado em conta, mesmo quando os nêutrons têm energias cinéticas muito maiores que $k_B T$. É o caso dos núcleos mais pesados nos quais as ressonâncias são muito estreitas (muito menores que 1 eV).

A fenomenologia do alargamento Doppler consiste no aumento da faixa de energia das regiões de ressonâncias, onde ocorre essa absorção como consequência de um aumento na temperatura. Além disso, é importante destacar o seu funcionamento como forma de controle intrínseco para reatores de potência, porque mais nêutrons podem ser absorvidos na região de ressonâncias, fazendo com que haja uma redução da reatividade, contribuindo portanto, para o controle do reator e até para o desenvolvimento de projetos nucleares térmicos.

Na figura (3.1) os núcleos-alvo são fixos, consequentemente esses isótopos apresentam a mesma aparência da seção choque.

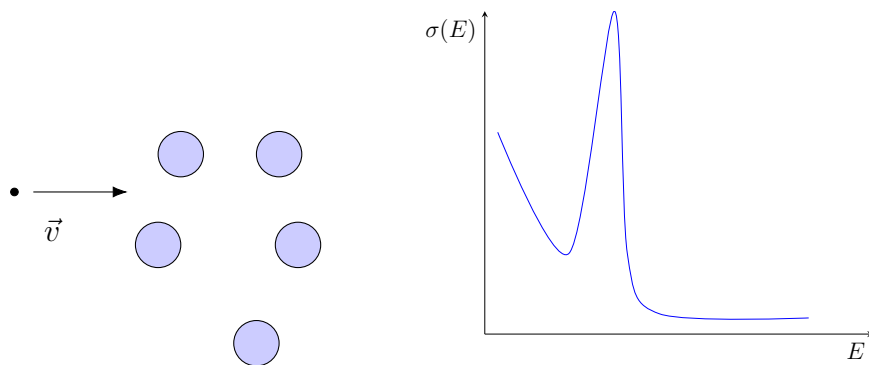


Figura 3.1: Os núcleos-alvo são fixos para $T = 0\text{ K}$.

Se o núcleo-alvo não estiver em repouso, uma velocidade relativa surge no sistema. Consequentemente, haverá um deslocamento da seção de choque, em função da energia, conforme figura (3.2) a seguir:

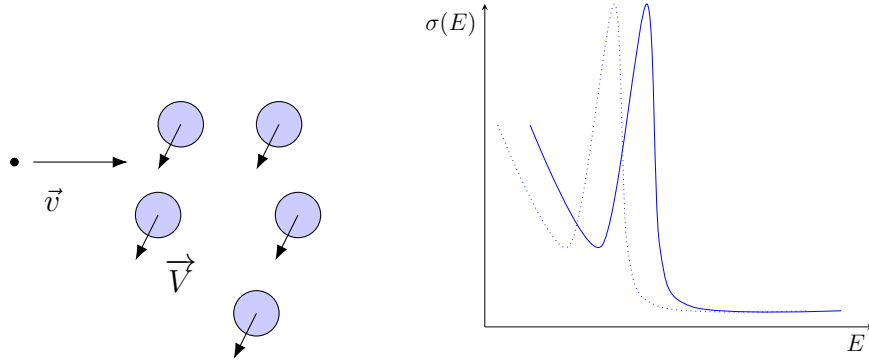


Figura 3.2: Os núcleos-alvo tem velocidade constante.

No entanto para velocidade diferente, a seção choque resulta da média ponderada de todos os átomos com a mesma velocidade relativa. Essa mudança tem valores diferentes e sua direção depende do sinal da velocidade relativa representada pela figura (3.3)

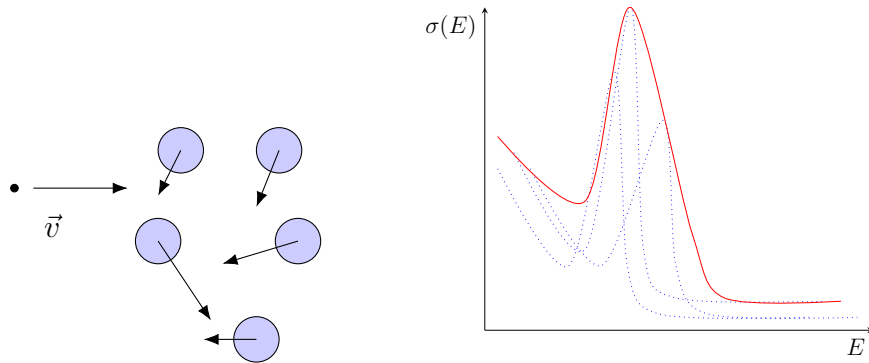


Figura 3.3: Os núcleos-alvo tem diferente velocidade.

Nesse sentido, o efeito do alargamento Doppler sobre a seção de choque microscópica nas regiões de ressonâncias pode ser quantificado matematicamente. Além disso, calcula-se a seção de choque média próximo dessa região usando a fórmula de Breit-Wigner, admitindo que os núcleos-alvo possam ser tratados como um gás livre em equilíbrio térmico, regidos pela distribuição de velocidade de Maxwell-Boltzmann, de modo que a seção de choque média de interação nêutron-núcleo é definida pela seguinte expressão matemática (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976):

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{1}{v} \int \left| \vec{v} - \vec{V} \right| \sigma(\left| \vec{v} - \vec{V} \right|) F(V, T) d^3V, \quad (3.1)$$

sendo \vec{V} a velocidade do núcleo-alvo, \vec{v} a velocidade do nêutron e $\sigma(|\vec{v} - \vec{V}|)$ a seção de choque.

Tendo a velocidade entre nêutron e o núcleo como definido por: $\vec{v}_r = \vec{v} - \vec{V}$. Ainda com a condição isotrópica das velocidades definidas no Capítulo 2, tem-se que:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{1}{v} \int_0^\infty \int_{4\pi} V^2 F(V, T) v_r \sigma(v_r) d\hat{\Omega} dV, \quad (3.2)$$

sendo, $d\hat{\Omega} \equiv \sin(\theta) d\theta d\varphi$.

Resolvendo a integral o ângulo sólido (θ e φ) em relação ao ângulo azimutal φ . Finalmente, tem-se:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{2\pi}{v} \int_0^\infty \int_0^\pi V^2 F(V, T) v_r \sigma(v_r) \sin(\theta) d\theta dV \quad (3.3)$$

Definindo θ como o ângulo entre as velocidades do nêutron, \vec{v} e o núcleo-alvo, \vec{V} . Conclui-se que:

$$v_r = |\vec{v} - \vec{V}| = \sqrt{v^2 + V^2 - 2Vv \cos(\theta)}. \quad (3.4)$$

Derivando a equação (3.4) em relação a θ , tem-se que:

$$\frac{dv_r}{d\theta} = \frac{vV}{v_r} \sin(\theta) \implies \sin(\theta) d\theta \approx \frac{1}{vV} v_r dv_r. \quad (3.5)$$

Sendo assim, muda-se a variável de integração e com uma pequena manipulação algébrica, a equação (3.3) pode ser reescrita da seguinte forma (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976):

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{2\pi}{v^2} \int_0^\infty \int_{|v-V|}^{v+V} V F(V, T) v_r^2 \sigma(v_r) dv_r dV. \quad (3.6)$$

Contudo, para resolver a integral na variável de integração v_r é preciso satisfazer as condições do módulo em duas integrais (DE ALMEIDA, 2019). Esse método foi desenvolvido via integração de regiões com mudança da ordem de integração, tendo

em vista que a distribuição de Maxwell-Boltzmann satisfaz a seguinte propriedade de paridade:

$$\int_{-a_1}^{a_2} VF(V, T)dV = \int_{a_1}^{a_2} VF(V, T)dV, \quad (3.7)$$

finalmente, a equação é reescrita como segue:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{2\pi}{v^2} \int_0^\infty \int_{v-v_r}^{v+v_r} VF(V, T)v_r^2 \sigma(v_r) dV dv_r. \quad (3.8)$$

Quando a temperatura absoluta é aproximadamente 0 K é possível descrever a dependência energética da seção de choque de captura (LAMARSH e BARATTA, 2001), para energias próximas à ressonância, através da expressão conhecida como seção de choque microscópica de captura ressonante de Breit-Wigner de nível único, na qual é capaz de descrever adequadamente os efeitos de alargamento Doppler e é representada por:

$$\sigma_\gamma(E_{CM}) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \left(\frac{E_0}{E_{CM}} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{1 + \frac{4}{\Gamma^2} (E_{CM} - E_0)^2} \right]. \quad (3.9)$$

- $E_0 \rightarrow$ é a energia onde ocorre o pico de ressonância no referencial do laboratório;
- $E_{CM} \rightarrow$ é a energia no sistema nêutron núcleo-alvo no sistema referencial do centro de massa;
- $\Gamma \rightarrow$ é a largura total da ressonância ;
- $\Gamma_\gamma \rightarrow$ é a largura da linha radioativa;
- $\sigma_0 \rightarrow$ é o valor da seção de choque na energia E_0 .

sendo:

$$E_{CM} = \frac{1}{2} \mu v_r^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{A}{A+1} \right) m_n v_r^2, \quad (3.10)$$

definindo a equação das massas¹:

$$\frac{m_n}{(\mu)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{\sqrt{M}} = \sqrt{\frac{(M + m_n)^2}{M m_n}} \sqrt{\frac{(M + m_n)}{M}}. \quad (3.11)$$

Ao considerar a mudança na variável de integração de V_r para E_{CM} e sendo a energia cinética do nêutron definida por:

$$E = \frac{1}{2} m_n v^2, \quad (3.12)$$

satisfaz a seguinte equação:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_\gamma(E, T) = \frac{\sqrt{2}\pi}{\sqrt{M}} (\sigma_0) \frac{\sqrt{\frac{M+m_n}{M} E_0}}{\sqrt{E}} \left(\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \right) \frac{2\sqrt{k_B T}}{\sqrt{\frac{M m_n}{(M+m_n)^2} 4k_B T E}} \times \\ \times \int_0^\infty \frac{1}{1 + \frac{4}{\Gamma^2} (E_{CM} - E_0)^2} \int_{v-v_r}^{v+v_r} V F(V) dE_{CM}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Quando $M = A m_n$, com aproximação:

$$\Gamma_D \equiv \sqrt{\frac{4k_B T E}{A}}. \quad (3.14)$$

Para energia nas proximidades da ressonância, faz-se novamente aproximação $E \approx E_0$. Dessa forma, tem-se:

$$\Gamma_D \equiv \sqrt{\frac{4k_B T E_0}{A}}, \quad (3.15)$$

sendo Γ_D é definido como largura Doppler de ressonância. A partir da equação (3.13) e com algumas substituições, conforme expressões abaixo:

Tal que x , y e ξ são definidos por:

- $x \equiv \frac{2}{\Gamma} (E - E_0);$

¹Lembrando que a massa reduzida do sistema: $\mu = \frac{M m}{M + m}$

- $\xi \equiv \frac{\Gamma}{\Gamma_D} = \frac{\Gamma}{(4E_0 k_B T/A)^{\frac{1}{2}}};$

- $y \equiv \frac{2}{\Gamma}(E_{CM} - E_0);$

- Para o caso de núcleos pesados, $M \gg m_n$.

Em que E é a energia do nêutron incidente, E_{CM} é a energia do centro de massa, E_0 é a energia onde ocorre a ressonância, Γ é a largura total de ressonância, Γ_D é a largura Doppler de ressonância, T é temperatura do meio e A o número de massa do núcleo alvo.

Assim sendo,

$$\bar{\sigma}_\gamma(E, T) = \sigma_0 \left(\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \right) \left(\frac{E_0}{E} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi(x, \xi). \quad (3.16)$$

Portanto, a função de alargamento Doppler, após as devidas substituições pode ser definida como segue:

$$\Psi(x, \xi) = \pi \xi \left(\frac{2k_B T}{M} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\frac{2E_0}{\Gamma}}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \int_{v(x)-v_r(y)}^{v(x)+v_r(y)} F(V, T) V dV. \quad (3.17)$$

Usando finalmente a distribuição de Maxwell-Boltzmann, tem-se que:

$$\Psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\frac{2E_0}{\Gamma}}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \left[e^{-\frac{[v(x)-v_r(y)]^2}{2v_{th}^2}} - e^{-\frac{[v(x)+v_r(y)]^2}{2v_{th}^2}} \right] \quad (3.18)$$

Nota-se que na equação (3.18), $v_{th} \equiv \left(\frac{k_B T}{M} \right)^{\frac{1}{2}}$, é a velocidade térmica (MARGUET, 2017).

3.1 Aproximações de Bethe-Placzek

Nessa seção será apresentada a função de alargamento Doppler a partir da interpretação matemática da forma integral, proposta em 1937 por Bethe e Placzek para um único nível energético (BETHE e PLACZEK, 1937), como sendo a convolução da função Lorentziana com a função Gaussiana, possibilitando a obtenção de outras

integrais. Entretanto, não possui solução analítica e sua forma integral é onerosa (MARGUET, 2017). Dessa forma, Bethe-Placzek propuseram algumas aproximações para energia nas proximidades do pico ressonante. Esses efeitos de ressonância em processos nucleares sugerem as seguintes aproximações:

- i) A partir da equação (3.18) constata-se que é possível desconsiderar a segunda exponencial. Isso é porque o segundo termo é desprezível frente ao primeiro em muitas faixas de energia de interesse. Então, considera-se que:

$$[v(x) + v_r(y)]^2 \gg [v(x) - v_r(y)]^2; \quad (3.19)$$

- ii) Estender o limite de integração inferior para $-\infty$ na equação (3.18). Isso ocorre, porque a razão entre a energia (onde ocorre o ponto mais elevado de ressonância) e a largura prática pode ser grande.

$$-\frac{2E_0}{\Gamma} \longrightarrow -\infty; \quad (3.20)$$

- iii) Pode-se fazer uma expansão do termo da energia do centro de massa em série de Taylor e utilizar somente dois termos iniciais, porque os núcleos alvos são considerados massivos.

$$\begin{aligned} (E_{CM})^{\frac{1}{2}} &\approx (E)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{E + E_{CM}}{2E} \right)^{\frac{1}{2}} = \\ &= (E)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{E - E_{CM}}{2E} \right) = \left(\frac{E + E_{CM}}{2\sqrt{E}} \right) \end{aligned} \quad (3.21)$$

Em termos matemáticos, fazendo : $\eta = \left(\frac{E_{CM} - E}{E} \right)$,

e utilizando a série de Taylor.

$$(E_{CM}) \approx (E)^{\frac{1}{2}} (1 + \eta)^{\frac{1}{2}} \approx (E)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{\eta}{2} - \frac{\eta^2}{4} + \dots \right) \quad (3.22)$$

Assim, a equação (3.18) assume a seguinte forma:

$$\Psi(x, \xi) \approx \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \left[e^{-\frac{[v(x)-v_r(y)]^2}{2v_{th}^2}} \right]; \quad (3.23)$$

Considerando núcleos pesados tem-se que $\mu \approx m_n$ e $M \gg m_n$. Assim sendo, a equação (3.21) torna-se:

$$\left(\frac{\mu v_r^2}{2} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{m_n v^2}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{\mu v_r^2 - m_n v^2}{2m_n v^2} \right) \quad (3.24)$$

$$v_r \left(\frac{\mu}{2} \right)^{\frac{1}{2}} = v \left(\frac{m_n}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\frac{1}{2}m_n v^2 + \frac{1}{2}\mu v_r^2}{m_n v^2} \right] \quad (3.25)$$

Após simplificações,

$$\begin{aligned} v_r &= \cancel{v} \left[\frac{\frac{1}{2}(v^2 + v_r^2)}{\cancel{v^2}} \right] = \\ &= \frac{v^2 + v_r^2}{2v} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Todavia,

$$\begin{aligned} v + v_r &= v - \frac{v_r^2 + v^2}{2v} = \\ &= \frac{v^2 - v_r^2}{2v} \end{aligned} \quad (3.27)$$

e com a inclusão da equação (3.10), esta é redefinida como:

$$\begin{aligned}
v_r &= \frac{(E + E_{CM})}{2\sqrt{\frac{\mu}{2}}\sqrt{E}} = \frac{(E + E_{CM})}{\sqrt{4E(\frac{\mu}{2})}} = \\
&= \frac{(E + E_{CM})}{(2m_n E)^{\frac{1}{2}}}
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Repetindo o procedimento acima, usa-se a equação (3.12), para obtenção da expressão:

$$\begin{aligned}
v(x) - v_r(y) &= \left(\frac{2E}{m_n}\right)^{\frac{1}{2}} - \frac{(E + E_{CM})}{(2m_n E)^{\frac{1}{2}}} = \\
&= \frac{(E - E_{CM})}{(2m_n E)^{\frac{1}{2}}}
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Quando substitui a equação (3.29) com o argumento da função exponencial que aparece na equação (3.23) (DE ALMEIDA, 2019), vem:

$$\begin{aligned}
\frac{[v(x) - v_r(y)]^2}{2v_{th}^2} &\approx \frac{M}{2k_B T} \frac{(E - E_{CM})^2}{2m_n E} = \\
&= \frac{(M/m_n)}{4Ek_B T} [(E - E_0) - (E_{CM} - E_0)]^2 = \\
&= \frac{A}{4Ek_B T} \left[\frac{(\Gamma x - \Gamma y)}{2} \right]^2 = \frac{A\Gamma^2}{4Ek_B T} \left[\frac{(x - y)^2}{4} \right],
\end{aligned} \tag{3.30}$$

dessa forma, observa-se portanto:

$$\frac{[v(x) - v_r(y)]^2}{2v_{th}^2} \approx \frac{\xi^2}{4} (x - y)^2. \tag{3.31}$$

Substituindo a equação (3.31) em (3.23), obtém-se finalmente a função de alargamento Doppler, segundo o formalismo de Bethe-Placzek:

$$\boxed{\Psi(x, \xi) \approx \psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1 + y^2} \exp \left[-\frac{\xi^2}{4} (x - y)^2 \right]}. \tag{3.32}$$

A figura (3.4) apresenta o comportamento da função de alargamento doppler, $\psi(x, \xi)$, para diferentes valores de ξ , utilizando a equação (3.32) tem-se que:

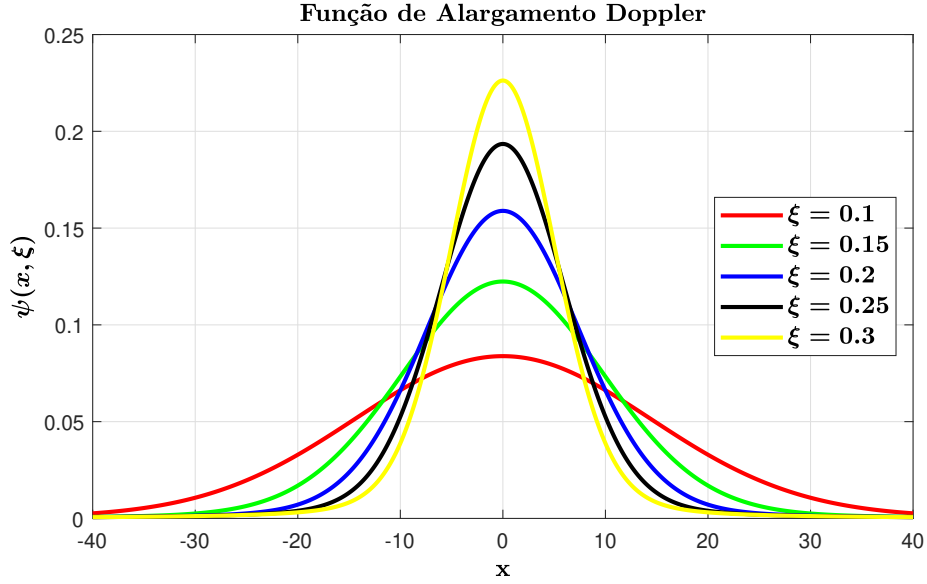


Figura 3.4: Comportamento da função de alargamento Doppler variando ξ .

A partir da análise da figura (3.4) pode-se observar que $\psi(x, \xi)$, tem as seguintes características:

- i) A função contém valores positivos.
- ii) A função é simétrica em relação ao eixo vertical, ou seja, $\psi(x, \xi) = \psi(-x, \xi)$.
- iii) A curva se alarga à medida que ξ diminui. Isto é, à medida que a temperatura real do meio aumenta.

3.2 Função de alargamento Doppler

Essa seção apresentará algumas pesquisas técnica e científica que serviram de referência de métodos para o cálculo da função de alargamento Doppler. Alguns procedimentos são reconhecidos na literatura, a saber: a expansão assintótica, método de Padé, e o método de Beynon e Grant. Além do mais, métodos mais modernos como o método de Palma, Martinez e Silva e o método da Série de Fourier, que são métodos bastante acurados para o cálculo da função $\psi(x, \xi)$. Esses métodos clássicos e modernos seguem a aproximação de Bethe e Placzek (1937).

A função de alargamento Doppler usando a distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann, conforme exemplificada na seção anterior, é representada por Duderstadt e Hamilton (1976),

$$\psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \exp \left[\frac{-\xi^2}{4} (x-y)^2 \right] \quad (3.33)$$

A função de alargamento Doppler é usada apenas no método psi-chi (ψ - χ) (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976; YESILYURT *et al.*, 2012). Esse método usa a representação de ressonância de nível único das seções de choque com base nos parâmetros de ressonância. Usando o método psi-chi, as seções de choque em 0 K são consideradas compostas por uma série de ressonâncias Breit-Wigner de nível único, portanto, na figura (3.5)² é apresentada de forma didática para exemplificar o fenômeno físico nas regiões onde ocorrem as ressonâncias. A equação (3.33) é usada em códigos existentes para calcular as seções de choque microscópica para vários grupos de energia, como por exemplo Hutchins *et al.* (1971); Greene *et al.* (1976); Tada *et al.* (2018).

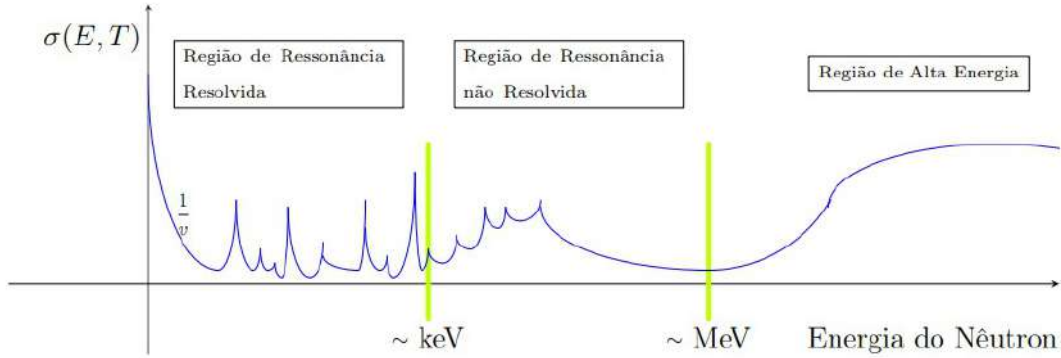


Figura 3.5: Ilustração das regiões de ressonâncias.

A solução numérica da equação (3.33) demanda muito tempo de processamento computacional e por isso diversos métodos foram desenvolvidos com a finalidade de obter aproximações analíticas para a função de alargamento Doppler considerando a estatística padrão de Maxwell-Boltzmann. Entre esses diversos métodos encontram-se as aproximações propostas por (CAMPOS e MARTINEZ, 1987); (PALMA *et al.*, 2006); (GONÇALVES *et al.*, 2008); (KESHAVAMURTHY e HARISH, 1993). Nos três primeiros artigos os autores diferenciaram a expressão integral da função de

²Com o objetivo de apresentar as regiões de ressonâncias nucleares, essa figura foi manipulada via L^AT_EX, que é um software gratuito para processamento de textos, figuras, equações e etc.

alargamento Doppler em relação a x , chegando à seguinte equação diferencial:

$$\frac{4}{\xi^2} \frac{\partial^2 \psi(x, \xi)}{\partial x^2} + 4x \frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} + \psi(x, \xi)(2 + \xi^2 x^2 + \xi^2) = \xi^2 \quad (3.34)$$

sujeita às seguintes condições iniciais:

$$\left. \frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} \right|_{x=0} = \psi_0 = \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} e^{\frac{\xi^2}{4}} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{\xi}{2} \right) \right] \quad (3.35)$$

$$\left. \frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \quad (3.36)$$

Resolvendo a equação (3.33) usando expansão em séries de potência e de Fourier, os autores obtiveram expressões analíticas para a função de alargamento Doppler.

No artigo de Keshavamurthy e Harish (1993) o método de Padé 4-polo foi usado para obter uma aproximação analítica para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$. A aproximação 4-polo de Padé para $\psi(x, \xi)$ tem a seguinte expressão:

$$\psi(x, \xi) \cong \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} \mathbb{R}[w(z)], \quad (3.37)$$

em que $\mathbb{R}[w(z)]$ simboliza a parte real da função $w(z)$.

Sendo,

$$z = u + ih, \quad (3.38)$$

e

$$\begin{cases} u = \frac{\xi x}{2} \\ h = \frac{\xi}{2} \end{cases} \quad (3.39)$$

A função $w(z)$ pode ser expressa em termos dos polinômios de 4-polo de Padé (KESHAVAMURTHY e HARISH, 1993) resultando que:

$$w(z) = \frac{i}{\sqrt{\pi}} \frac{p_0 + p_1 z + p_2 z^2 + p_3 z^3}{1 + q_1 z + q_2 z^2 + q_3 z^3 + q_4 z^4}. \quad (3.40)$$

Substituindo a equação (3.40) na equação (3.37), temos a seguinte expressão para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$:

$$\psi(x, \xi) \cong \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} \Re \left[\frac{i}{\sqrt{\pi}} \frac{p_0 + p_1 z + p_2 z^2 + p_3 z^3}{1 + q_1 z + q_2 z^2 + q_3 z^3 + q_4 z^4} \right]. \quad (3.41)$$

Os coeficientes p_j e q_j necessários para o cálculo da função de alargamento Doppler estão definidos na tabela (3.1).

Tabela 3.1: Coeficientes p e q da aproximação 4-polo de Padé.

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

Em 1892, o matemático francês Henri Padé publicou um artigo sobre: "a representação aproximada de uma função por frações racionais". Com o advento dos computadores, levou os cientistas a considerar vários métodos de funções, especialmente de funções de convergência rápida (CABANNES, 1976).

Em um artigo publicado em 1955, Shanks mostrou as vantagens do método de Padé, que permite deduzir de qualquer série de potências convergentes ou divergentes uma tabela de aproximações racionais das funções representadas por séries. Desde então, físicos, matemáticos e engenheiros aplicados estudaram a representação de funções por meio de frações racionais, tendo como objetivo principal obter algoritmos computacionais cada vez mais rápidos (CABANNES, 1976; SHANKS, 1955).

Nesse sentido, a aproximação de Padé é um método conveniente para obtenção de resultados numéricos em engenharia e ciências matemáticas e da natureza. Além disso, 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 (KESHAVAMURTHY e HARISH, 1993; MARTÍN *et al.*, 1980). No entanto, é importante ressaltar que, tão somente a partir de 1981, essa técnica de convergência foi amplamente disseminado em trabalhos sobre fenômenos críticos. Desse modo, aproximação de Padé é um método capaz de representar de forma eficaz funções com pólos, por intermédio de uma aproximação racional, ou seja, uma razão entre polinômios (GONÇALVES, 2010; PALMA, 2007).

Capítulo 4

Método Proposto

Nesta seção apresentada a metodologia proposta com o objetivo do desenvolvimento de um modelo que estabelece uma relação de equivalência entre a função de alargamento Doppler, $\psi(x, \xi)$, empregando a distribuição de Maxwell-Boltzmann e a função deformada de alargamento Doppler, $\psi_\kappa(x, \xi)$, conforme a distribuição generalizada de Kaniadakis, através da temperatura efetiva do meio T_{ef} .

4.1 Função deformada de alargamento Doppler segundo a distribuição de Kaniadakis

Um primeiro uso da distribuição Kaniadakis no contexto da engenharia nuclear foi feito por (GUEDES *et al.*, 2017). Nessa proposta de tese foi apresentada uma função deformada de alargamento Doppler usando a distribuição Kaniadakis que descreve as interações nêutrons-núcleo com e sem o equilíbrio térmico.

Os resultados obtidos por (GUEDES *et al.*, 2017) e (DE ABREU *et al.*, 2019) contribuíram para a investigação em andamento envolvendo a função deformada de alargamento Doppler em engenharia nuclear usando estatísticas de Kaniadakis.

As propostas apresentadas por (GUEDES *et al.*, 2017) e (DE ABREU *et al.*, 2019) que forneceram aproximações numéricas e analíticas, respectivamente, para a função deformada de alargamento Doppler usando a quase-Maxwelliana estatística de Kaniadakis, representada por $\psi_\kappa(x, \xi)$. A distribuição Kaniadakis é representada da seguinte forma:

$$f_\kappa(V, T) = A(\kappa) \exp_\kappa \left(\frac{-MV^2}{2k_B T} \right). \quad (4.1)$$

Sendo,

$$A(\kappa) = \left(\frac{|\kappa| M}{\pi K_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 + \frac{3|\kappa|}{2} \right) \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2|\kappa|} + \frac{3}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2|\kappa|} - \frac{3}{4}\right)}. \quad (4.2)$$

Além disso, a função \exp_κ (κ -exponencial) é definida por Kaniadakis *et al.* (2017):

$$\exp_\kappa(x) = \left(\sqrt{1 + \kappa^2 x^2} + \kappa x \right)^{\frac{1}{\kappa}}. \quad (4.3)$$

Usando a aproximação de Bethe-Placzek (GUEDES *et al.*, 2017) obteve-se a função deformada de alargamento Doppler, considerando a distribuição de Kaniadakis:

$$\psi_\kappa(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} B(\kappa) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \exp_\kappa \left[\frac{-\xi^2 (x-y)^2}{4} \right], \quad (4.4)$$

tendo,

$$\begin{aligned} \exp_\kappa \left(\frac{-\xi^2 (x-y)^2}{4} \right) &\equiv \frac{\kappa^2 \left(\frac{\xi^2 (x-y)^2}{4} \right) + \sqrt{1 + \kappa^2 \left(\frac{\xi^2 (x-y)^2}{4} \right)^2}}{1 - \kappa^2} \times \\ &\times \exp_\kappa \left(\frac{-\xi^2 (x-y)^2}{4} \right) \end{aligned} \quad (4.5)$$

e

$$B(\kappa) = (2|\kappa|)^{\frac{3}{2}} \left(1 + \frac{1}{2} 3|\kappa| \right) \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2|\kappa|} + \frac{3}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2|\kappa|} - \frac{3}{4}\right)}. \quad (4.6)$$

Nos códigos de computador já existentes para projeto de reator nuclear, o processo de alargamento Doppler requer um tempo computacional relativamente longo para o cálculo da equação (3.33) ou equação (3.34) e muito mais tempo para o cálculo da equação (4.4). Deve-se lembrar que a função de alargamento Doppler para cálculo da seção de choque de nêutrons deve ser calculada para cada energia do nêutron, cada isótopo, e para diferentes temperaturas.

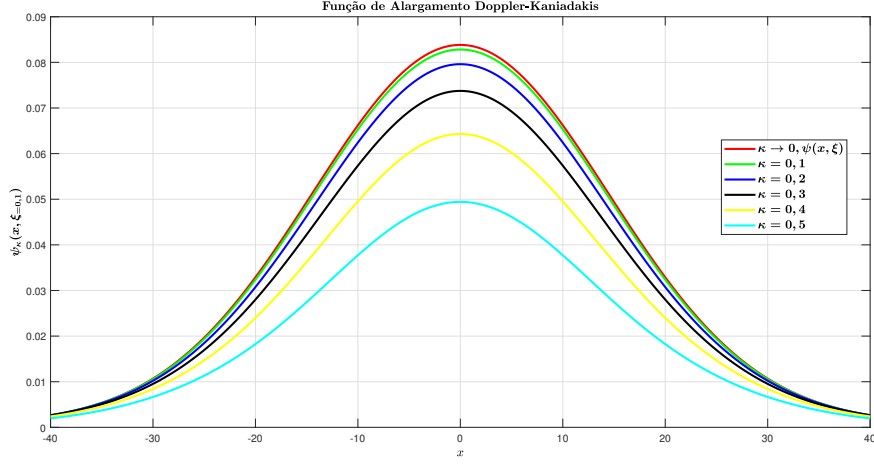


Figura 4.1: Comportamento da função $\psi_\kappa(x, \xi_{\kappa=0,1})$ variando κ .

Uma análise preliminar do comportamento da função de alargamento Doppler deformada, usando a distribuição estatística de Kaniadakis, constata-se que o valor de κ -deformada quando é ampliado, ocorre uma atenuação no pico de ressonância, em outras palavras, diminui-se a amplitude da função. Além disso, também é ilustrado na figura (4.1) a qual retoma a função de alargamento Doppler clássica quando é tomado o limite $\kappa \rightarrow 0$. Além do mais, é apresentada a figura (4.2) para ilustrar o comportamento dos picos da função $\psi_\kappa(x, \xi_{\kappa=0,1})$, à medida que κ -deformação vai se modificando.

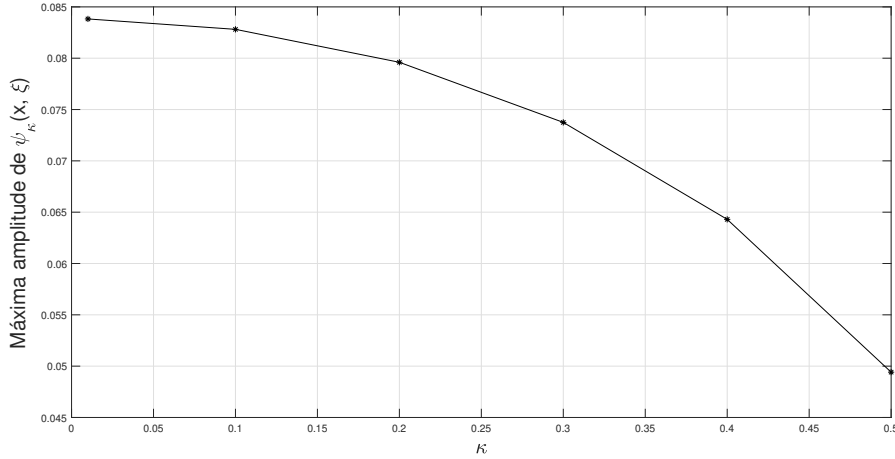


Figura 4.2: Relação dos picos da função $\psi_\kappa(x, \xi_{\kappa=0,1})$ variando κ .

Portanto, em relação a essas motivações, esta tese propõe uma metodologia simples para mapear a função de alargamento Doppler deformada na função de alargamento Doppler clássica feita através de uma parametrização polinomial multidimensional.

4.2 Temperatura Efetiva do meio T_{ef}

Pode ser notado que para sistemas fora do equilíbrio térmico a solução da equação (4.4) difere da equação (3.33). No entanto, a equação (3.33) é largamente usada nos códigos existentes para cálculo das constantes de multigrupos. A modificação desses códigos para incorporar a solução numérica da equação (3.41) não é uma tarefa simples; por isso, esta proposta de tese apresenta o modelo da temperatura efetiva do meio T_{ef} . Tal proposta é exatamente não acrescentar demanda computacional em sua implementação nos sistemas de processamentos de dados nucleares, de quem já calcula a função de alargamento Doppler, seguindo a distribuição de Maxwell-Boltzmann.

O modelo da temperatura efetiva do meio T_{ef} consiste em determinar a temperatura T_{ef} que faça a função de alargamento Doppler convencional $\psi(x, \xi)$ reproduzir os valores da função de alargamento Doppler segundo a distribuição de Kaniadakis na temperatura real (T) do meio, ou seja:

$$\psi_{\kappa}(x, \xi) \cong \psi(x, \tilde{\xi}), \quad (4.7)$$

sendo:

$$\tilde{\xi} \equiv \frac{\Gamma}{\left(\frac{4E_0 k_B T_{ef}}{A}\right)^{1/2}} \quad (4.8)$$

e

$$\xi \equiv \frac{\Gamma}{\left(\frac{4E_0 k_B T}{A}\right)^{1/2}}. \quad (4.9)$$

Usando a aproximação dada pela equação (3.41) será obtido o valor de $\tilde{\xi}$ que satisfaz a seguinte equação:

$$\psi_{\kappa}(x, \xi) \cong \frac{\tilde{\xi}\sqrt{\pi}}{2} \mathcal{R} \left[\frac{i}{\sqrt{\pi}} \frac{p_0 + p_1 \tilde{z} + p_2 \tilde{z}^2 + p_3 \tilde{z}^3}{1 + q_1 \tilde{z} + q_2 \tilde{z}^2 + q_3 \tilde{z}^3 + q_4 \tilde{z}^4} \right] \quad (4.10)$$

sendo,

$$\tilde{z} = \tilde{u} + i\tilde{h} \quad (4.11)$$

visto que,

$$\begin{cases} \tilde{u} = \frac{\tilde{\xi}x}{2} \\ \tilde{h} = \frac{\tilde{\xi}}{2} \end{cases} \quad (4.12)$$

Na equação (4.10), os valores de $\psi_k(x, \xi)$ são previamente determinados através da solução numérica da equação (4.4). Generalizando, foram obtidas tabelas de $\tilde{\xi}$ em função de intervalos distintos das variáveis κ , x e ξ , ou seja:

$$\tilde{\xi} = p_\kappa(x, \xi) \begin{cases} 0,1 \leq \kappa \leq 0,5 \\ 0 \leq x \leq 40 \\ 0,05 \leq \xi \leq 0,5 \end{cases} \quad (4.13)$$

Desse modo, com a finalidade de avaliar a solução numérica e compará-los com as distintas distribuições $\psi(x, \xi)$, $\psi_\kappa(x, \xi)$ e $\psi(x, \tilde{\xi})$ foram gerados gráficos, conforme descritos nas respectivas figuras (4.3, 4.4 e 4.5).

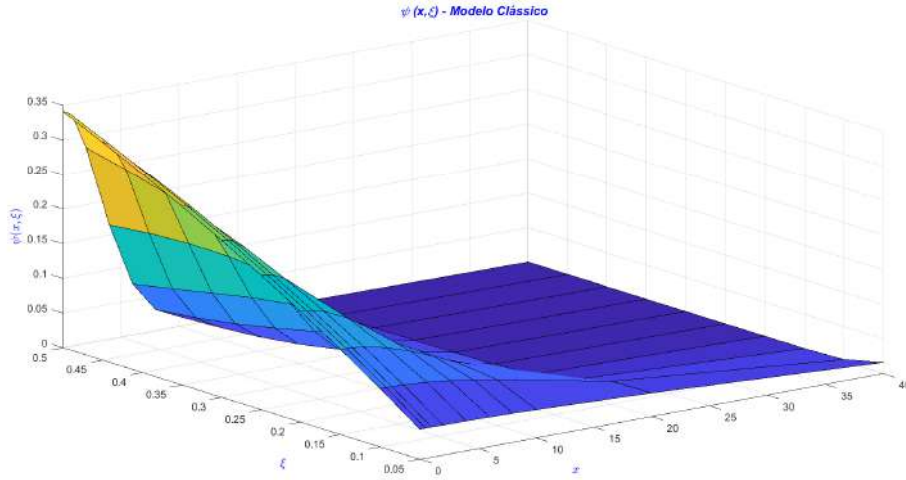


Figura 4.3: Gráfico da função de alargamento Doppler, $\psi(x, \xi)$.

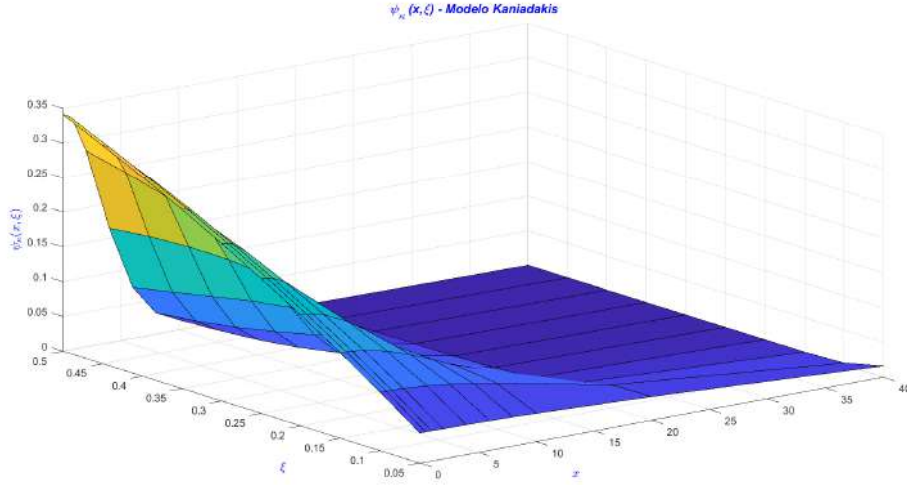


Figura 4.4: Gráfico da função deformada de alargamento Doppler, $\psi_{\kappa}(x, \xi)$.

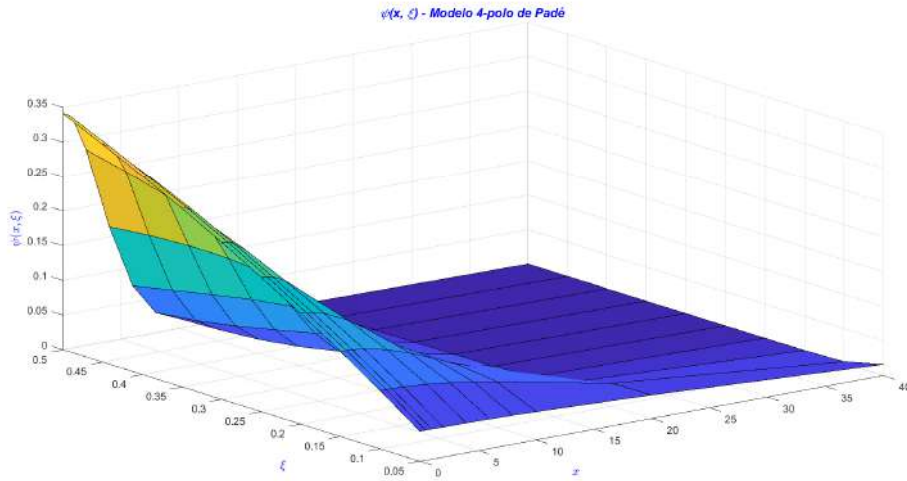


Figura 4.5: Gráfico da função de alargamento Doppler, $\psi(x, \xi)$.

Assim sendo, a obtenção dos valores das raízes ($\tilde{\xi}$) via interseções é apresentada na figura (4.6), para o caso $x = 0$, e estendido para os demais valores o procedimento metodológico.

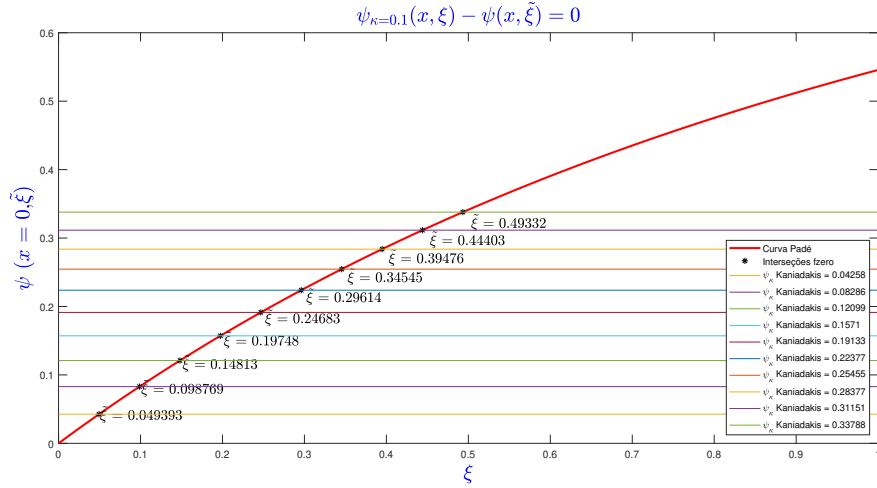


Figura 4.6: Obtenção das Raízes via interseções.

Na seção de resultados serão apresentados os valores obtidos para $\tilde{\xi}$ para os intervalos indicados na equação (4.13). Assim sendo a função deformada de alargamento Doppler $\psi_\kappa(x, \xi)$ segundo a distribuição de Kaniadakis poderá ser obtida diretamente da função clássica de alargamento Doppler, substituindo a temperatura do meio T pela temperatura efetiva do meio T_{ef} . Isto é:

$$\psi_\kappa(x, \xi) \cong \psi(x, \tilde{\xi}). \quad (4.14)$$

Capítulo 5

Resultados Finais

5.1 Apresentação e Análise

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos para a função de alargamento Doppler usando a distribuição Maxwell-Boltzmann $\psi(x, \xi)$ e a função de alargamento doppler deformada $\psi_\kappa(x, \xi)$, segundo a distribuição generalizada de Kaniadakis. Para obter os valores de $\tilde{\xi}$ que serão usados na aproximação representada pela equação (4.14) deve-se reescrever a equação (4.10) da seguinte forma DA SILVA *et al.* (2021):

$$\psi_\kappa(x, \xi) - \frac{\tilde{\xi}\sqrt{\pi}}{2} \mathbb{R} \left[\frac{i}{\sqrt{\pi}} \frac{p_0 + p_1\tilde{z} + p_2\tilde{z}^2 + p_3\tilde{z}^3}{1 + q_1\tilde{z} + q_2\tilde{z}^2 + q_3\tilde{z}^3 + q_4\tilde{z}^4} \right] = 0. \quad (5.1)$$

A equação (5.1) foi numericamente resolvida para os valores de κ , x e ξ indicados na equação (4.13), sendo a variável \tilde{z} definida nas equações (4.11) e (4.13). Os coeficientes p_j e q_j estão definidos na tabela (3.1). Os resultados da solução numérica da equação (5.1) são retratados nas tabelas (5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5), para os valores de $\kappa = 0, 1; 0, 2; 0, 3; 0, 4$ e $0, 5$; respectivamente.

Para reduzir ainda mais o tempo de computação necessária para calcular a função deformada de alargamento Doppler com os sistemas de computação atuais, em vez de obter $\tilde{\xi}$ diretamente das tabelas (5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5) através de interpolações, pode-se fazer um ajuste polinomial por regressão polinomial dos valores de cada tabela e usar diretamente a expressão obtida para o valor de $\tilde{\xi}$ para cálculo da função de alargamento Doppler. Como explicitado anteriormente a variável $\tilde{\xi}$ está relacionada com a temperatura efetiva do meio (T_{ef}).

Tabela 5.1: Valores de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.1).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,049	0,049	0,049	0,049	0,049	0,049	0,049	0,049	0,049	0,049
0,10	0,099	0,099	0,099	0,098	0,098	0,098	0,098	0,098	0,099	0,098
0,15	0,148	0,148	0,148	0,148	0,148	0,148	0,148	0,157	0,148	0,139
0,20	0,197	0,197	0,197	0,197	0,197	0,195	0,204	0,199	0,196	0,159
0,25	0,247	0,247	0,247	0,247	0,246	0,267	0,249	0,247	0,243	0,170
0,30	0,296	0,296	0,296	0,296	0,293	0,301	0,297	0,296	0,283	0,190
0,35	0,345	0,345	0,345	0,345	0,337	0,348	0,345	0,344	0,315	0,190
0,40	0,395	0,395	0,395	0,394	0,415	0,396	0,394	0,393	0,344	0,403
0,45	0,444	0,444	0,444	0,443	0,452	0,445	0,443	0,441	0,375	0,403
0,50	0,493	0,493	0,493	0,491	0,498	0,493	0,491	0,488	0,414	0,716

Tabela 5.2: Valores de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 2$ calculados pela Eq. (5.1).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,047	0,047	0,047	0,047	0,047	0,047	0,047	0,047	0,046	0,049
0,10	0,095	0,095	0,094	0,094	0,094	0,094	0,094	0,093	0,092	0,091
0,15	0,142	0,142	0,142	0,142	0,141	0,14	0,137	0,17	0,142	0,124
0,20	0,19	0,19	0,189	0,189	0,188	0,182	0,215	0,198	0,182	0,146
0,25	0,237	0,237	0,237	0,236	0,232	0,209	0,248	0,241	0,22	0,162
0,30	0,284	0,284	0,284	0,283	0,274	0,306	0,29	0,284	0,253	0,177
0,35	0,331	0,331	0,331	0,329	0,308	0,344	0,333	0,326	0,282	0,19
0,40	0,378	0,378	0,377	0,375	0,449	0,387	0,376	0,367	0,309	0,403
0,45	0,425	0,425	0,424	0,42	0,465	0,43	0,418	0,406	0,336	0,403
0,50	0,472	0,472	0,471	0,464	0,499	0,474	0,459	0,444	0,365	0,403

Tabela 5.3: Valores de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 3$ calculados pela Eq. (5.1).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,044	0,044	0,044	0,044	0,043	0,043	0,043	0,043	0,041	0,049
0,10	0,088	0,088	0,087	0,087	0,087	0,086	0,085	0,083	0,099	0,082
0,15	0,132	0,132	0,131	0,131	0,13	0,127	0,122	0,109	0,133	0,105
0,20	0,175	0,175	0,175	0,174	0,171	0,162	0,235	0,2	0,165	0,122
0,25	0,219	0,219	0,218	0,217	0,209	0,185	0,251	0,233	0,191	0,134
0,30	0,262	0,262	0,261	0,259	0,244	0,322	0,283	0,267	0,214	0,145
0,35	0,305	0,305	0,304	0,3	0,271	0,346	0,318	0,301	0,234	0,153
0,40	0,348	0,348	0,347	0,34	0,287	0,378	0,352	0,332	0,252	0,159
0,45	0,391	0,391	0,389	0,38	0,498	0,413	0,385	0,361	0,268	0,17
0,50	0,434	0,433	0,431	0,418	0,514	0,448	0,417	0,389	0,284	0,177

Tabela 5.4: Valores de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 4$ calculados pela Eq. (5.1).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,038	0,038	0,038	0,038	0,038	0,038	0,037	0,037	0,036	0,052
0,10	0,076	0,076	0,076	0,076	0,076	0,074	0,073	0,07	0,104	0,074
0,15	0,114	0,114	0,114	0,114	0,112	0,108	0,102	0,091	0,126	0,089
0,20	0,152	0,152	0,151	0,15	0,146	0,135	0,117	0,212	0,148	0,099
0,25	0,189	0,189	0,189	0,186	0,176	0,154	0,267	0,231	0,166	0,107
0,30	0,226	0,226	0,225	0,221	0,203	0,359	0,284	0,254	0,181	0,114
0,35	0,263	0,263	0,261	0,256	0,224	0,366	0,307	0,278	0,193	0,119
0,40	0,3	0,299	0,297	0,288	0,238	0,383	0,331	0,299	0,203	0,123
0,45	0,336	0,336	0,333	0,32	0,566	0,405	0,354	0,319	0,213	0,128
0,50	0,373	0,371	0,368	0,35	0,566	0,429	0,376	0,338	0,221	0,131

Tabela 5.5: Valores de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 5$ calculados pela Eq. (5.1).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,029	0,029	0,029	0,029	0,029	0,029	0,029	0,029	0,026	0,058
0,10	0,058	0,058	0,058	0,058	0,057	0,056	0,055	0,053	0,118	0,069
0,15	0,087	0,087	0,086	0,086	0,084	0,08	0,075	0,067	0,127	0,078
0,20	0,115	0,115	0,115	0,114	0,108	0,099	0,087	0,244	0,139	0,084
0,25	0,143	0,143	0,143	0,14	0,13	0,113	0,311	0,249	0,149	0,088
0,30	0,171	0,171	0,17	0,166	0,148	0,433	0,314	0,259	0,157	0,092
0,35	0,198	0,198	0,196	0,19	0,163	0,428	0,323	0,271	0,164	0,095
0,40	0,226	0,225	0,222	0,213	0,174	0,431	0,334	0,283	0,17	0,097
0,45	0,252	0,251	0,248	0,235	0,182	0,438	0,346	0,294	0,175	0,099
0,50	0,279	0,277	0,273	0,255	0,695	0,448	0,358	0,305	0,18	0,101

Para exemplificar o ajuste polinomial consideram-se os valores das tabelas (5.1), (5.2), (5.3), (5.4) e (5.5) e aplicamos o método da regressão polinomial com otimização dos pesos através da técnica de algoritmo genético (HOLLAND *et al.*, 1992; KIUSALAAS, 2015), ou seja, método heurístico de busca e otimização matemática, ver os apêndices A e B para maior detalhamento da metodologia. Os resultados obtidos para o ajuste de regressão polinomial ponderada, segundo a seguinte definição dos resíduos:

$$res_i = \sqrt{\omega_i} \left| \tilde{\xi}_i - \tilde{\xi}_i^{eq} \right| \quad (5.2)$$

em que res_i é o resíduo relativo ao ponto i da matriz $\tilde{\xi}$. Nesse sentido, $\tilde{\xi}_i$ são os valores de $\tilde{\xi}$ para o ponto i retonado da base de dados, $\tilde{\xi}_i^{eq}$ são os valores de $\tilde{\xi}$ para o ponto i retornado pela equação de ajuste. Sendo que ω_i é o peso atribuído para o ponto i , para $i=1,2,\dots,100$, cada ponto de $\tilde{\xi}$, com cada peso contido no intervalo $(0,1]$.

O desafio a ser solucionado pelo método de algoritmo genético é encontrar o conjunto de pesos que minimize o erro acumulado dos pontos:

$$erro = \sum_{i=1}^{100} \frac{\sqrt{\omega_i} \left| \tilde{\xi}_i - \tilde{\xi}_i^{eq} \right|}{\tilde{\xi}_i} \quad (5.3)$$

Aplicando o método da regressão polinomial otimizado pela técnica do algoritmo genético aos valores das tabelas (5.1), (5.2), (5.3), (5.4) e (5.5) obtivemos as seguinte expressões:

$$\begin{aligned} \tilde{\xi}_{\kappa=0,1}(x, \xi) = & -0,0095668 + 0,0042817x + 1,2301\xi + 0,00025628x^2 - 0,1449x\xi - \\ & -1,2704\xi^2 - 6,1751 \times 10^{-5}x^3 + 0,0062072x^2\xi + 0,92537x\xi^2 + 0,76292\xi^3 + \\ & +2,9873 \times 10^{-6}x^4 - 0,00010748x^3\xi - 0,023709x^2\xi^2 - 2,1902x\xi^3 + 6,4376\xi^4 - \\ & -4,1619 \times 10^{-8}x^5 + 8,0913 \times 10^{-7}x^4\xi + 0,00015675x^3\xi^2 + 0,023925x^2\xi^3 + \\ & +1,7734x\xi^4 - 9,4704\xi^5, \end{aligned} \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\xi}_{\kappa=0,2}(x, \xi) = & 0,0046822 + 0,0030388x^1 + 0,73111\xi - 0,00042548x^2 \\
& -0,057383x\xi + 2,8556\xi^2 + 1,4651 \times 10^{-5}x^3 + 0,0066264x^2\xi + 0,25925x\xi^2 - \\
& -14,631\xi^3 + 1,8425 \times 10^{-8}x^4 - 0,00025003x^3\xi - 0,011772x^2\xi^2 - \\
& -0,61369x\xi^3 + 31,818\xi^4 - 4,1333 \times 10^{-9}x^5 + 2,9973 \times 10^{-6}x^4\xi + \\
& +0,00013975x^3\xi^2 + 0,0080984x^2\xi^3 + 0,50658x\xi^4 - 24,629\xi^5,
\end{aligned} \tag{5.5}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\xi}_{\kappa=0,3}(x, \xi) = & -0,015316 + 0,0028454x^1 + 1,4058\xi - 0,00020029x^2 - 0,069982x\xi \\
& -5,7737\xi^2 + 3,2077 \times 10^{-6}x^3 + 0,004753x^2\xi + 0,32807x\xi^2 + 27,528\xi^3 \\
& -6,9846 \times 10^{-5}x^3\xi - 0,021364x^2\xi^2 - 0,21569x\xi^3 - 60,257\xi^4 \\
& +0,00025552x^3\xi^2 + 0,01184x^2\xi^3 - 0,21352x\xi^4 + 48,394\xi^5,
\end{aligned} \tag{5.6}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\xi}_{\kappa=0,4}(x, \xi) = & -0,0070791 + 0,003751x + 0,96124\xi - 0,00082957x^2 - 0,043002x\xi \\
& -1,9105\xi^2 + 5,6421 \times 10^{-5}x^3 + 0,0077231x^2\xi + 0,023042x\xi^2 + 8,5471\xi^3 \\
& -9,411 \times 10^{-7}x^4 - 0,00040652x^3\xi - 0,0062703x^2\xi^2 + 0,073253x\xi^3 - 18,083\xi^4 \\
& +5,9662 \times 10^{-6}x^4\xi + 0,00011107x^3\xi^2 + 0,00032586x^2\xi^3 \\
& -0,058181x\xi^4 + 14,104\xi^5,
\end{aligned} \tag{5.7}$$

e

$$\begin{aligned}
\tilde{\xi}_{\kappa=0,5}(x, \xi) = & -0.041278 + 0.023145x + 1.2742\xi - 0.0050174x^2 - 0.18559x\xi \\
& -4.4617\xi^2 + 0.00051391x^3 + 0.01495x^2\xi + 0.55455x\xi^2 + 13.646\xi^3 - 2.0959 \times 10^{-5}x^4 \\
& -0.00074199x^3\xi - 0.010087x^2\xi^2 - 0.71532x\xi^3 - 20.637\xi^4 + 2.7287 \times 10^{-7}x^5 \\
& +1.1838 \times 10^{-5}x^4\xi - 7.5517 \times 10^{-5}x^3\xi^2 + 0.016175x^2\xi^3 \\
& +0.049738x\xi^4 + 12.386\xi^5.
\end{aligned} \tag{5.8}$$

Para exemplificar a precisão do ajuste polinomial apresentam-se as tabelas (5.6,

5.7, 5.8, 5.9 e 5.10), com os erros relativos percentuais dos valores resultantes das equações (5.4, 5.5, 5.6, 5.7 e 5.8), em comparação com os respectivos valores de referência das tabelas (5.1 , 5.2, 5.3, 5.4 e 5.5).

Tabela 5.6: Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 1$ segundo a Eq. (5.4).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,78	0,78	1,85	1,15	0,98	1,86	1,48	1,63	1,53	1,66
0,10	0,98	0,46	0,88	0,34	0,99	0,78	1,28	0,64	0,96	0,33
0,15	1,17	0,79	0,57	0,17	0,06	0,01	0,14	0,76	0,28	0,48
0,20	0,21	0,16	0,07	0,01	0,12	0,19	1,98	0,25	0,31	0,2
0,25	0,17	0,13	0,37	0,23	0,81	1	0,34	0,25	0,76	0,55
0,30	0,42	0,14	0,38	0,09	0,12	0,16	1,05	0,27	0,2	0,48
0,35	0,15	0,15	0,08	0,14	1	0,32	0,32	0,09	0,15	0,12
0,40	0,03	0,24	0,28	0,46	1,4	0,12	0,11	0,65	0,98	1,96
0,45	0,09	0,13	0,38	0,13	0,93	0,2	0,09	0,19	0,53	1,17
0,50	0,18	0,23	0,15	0,02	0,22	0,08	0,17	0,01	1,28	0,16

Tabela 5.7: Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 2$ segundo a Eq. (5.5).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,28	0,29	0,19	0,59	1,01	0,12	0,02	0,15	0,25	0,06
0,10	0,18	0,00	0,39	1,13	1,23	0,72	0,11	1,73	0,36	0,39
0,15	0,78	0,18	0,01	0,04	0,00	0,02	1,86	0,29	0,82	0,00
0,20	0,78	0,31	0,04	0,07	0,11	1,33	0,21	1,51	0,91	0,85
0,25	0,23	0,18	0,36	0,70	0,01	0,03	0,52	0,01	0,15	0,21
0,30	0,06	0,53	0,40	0,01	1,96	0,53	0,79	0,09	0,27	1,55
0,35	0,00	0,42	0,82	0,21	1,79	0,03	0,26	0,01	0,20	1,08
0,40	0,44	0,07	0,11	0,01	0,06	0,60	0,06	0,20	0,06	1,12
0,45	0,17	0,31	0,01	0,33	0,46	0,07	0,95	0,14	0,39	0,58
0,50	0,14	0,09	0,33	0,25	0,24	0,36	0,54	1,03	0,01	0,04

Tabela 5.8: Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0,3$ segundo a Eq. (5.6).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,81	0,06	0,10	0,26	0,05	0,34	0,20	0,17	1,38	0,85
0,10	1,32	1,23	0,12	0,08	0,50	0,60	1,05	0,57	1,52	1,06
0,15	0,11	0,20	0,58	1,02	0,16	0,09	1,11	0,63	1,14	0,01
0,20	0,09	0,53	0,41	0,01	1,55	1,45	1,39	0,72	0,03	0,42
0,25	0,60	0,20	0,27	1,28	0,42	1,37	0,31	1,17	0,90	0,07
0,30	0,58	0,09	0,59	0,49	1,31	1,34	0,48	0,81	0,54	0,16
0,35	0,30	0,34	0,22	0,38	0,93	0,95	1,44	1,10	1,85	0,20
0,40	0,64	0,19	0,35	1,84	0,52	1,07	0,34	1,01	1,51	0,02
0,45	0,24	0,14	0,49	0,99	0,67	0,25	0,80	1,01	0,60	0,43
0,50	0,60	0,48	0,86	1,15	0,23	1,31	0,02	0,38	0,63	0,03

Tabela 5.9: Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 4$ segundo a Eq. (5.7).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,97	0,71	0,23	1,64	1,10	1,11	1,95	0,31	0,04	0,19
0,10	0,11	0,10	0,14	0,25	0,86	0,34	1,31	0,44	0,08	0,13
0,15	0,51	0,03	0,24	0,89	0,32	1,18	0,03	1,18	0,48	0,48
0,20	0,25	0,39	1,16	0,11	0,21	1,65	1,29	0,38	0,14	0,05
0,25	0,66	0,12	0,55	0,35	1,25	1,05	0,55	0,23	0,38	0,36
0,30	0,67	0,15	0,31	0,54	0,45	0,33	0,34	1,78	0,11	0,34
0,35	0,45	0,28	0,13	0,07	1,74	0,79	0,45	1,80	0,35	0,10
0,40	0,09	0,68	0,56	1,07	0,16	0,19	0,93	1,41	0,05	0,42
0,45	0,05	0,69	0,21	1,01	0,13	0,79	1,27	1,34	0,23	0,16
0,50	0,30	0,14	0,11	0,45	1,13	0,68	0,98	0,02	0,03	0,14

Tabela 5.10: Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 5$ segundo a Eq. (5.8).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,54	0,19	0,35	0,46	1,69	1,02	0,08	1,75	0,22	0,47
0,10	1,50	1,67	0,01	1,66	1,57	0,14	0,12	1,97	0,44	0,48
0,15	0,25	1,05	1,62	0,30	1,55	1,99	0,33	1,90	0,27	0,05
0,20	0,09	0,27	0,00	0,01	0,63	1,82	0,09	0,24	1,41	0,08
0,25	0,23	0,00	0,09	0,10	0,12	1,45	0,18	0,08	0,33	0,27
0,30	0,11	0,56	0,09	0,06	0,98	0,04	0,08	0,09	0,10	0,18
0,35	0,00	0,48	0,02	0,80	1,64	1,22	0,47	0,64	1,30	0,00
0,40	0,39	0,74	0,03	0,81	0,15	0,31	0,11	0,23	0,32	0,17
0,45	0,68	0,22	1,35	1,21	0,30	0,69	0,29	0,77	0,61	0,31
0,50	1,48	0,62	1,75	0,85	0,32	1,76	1,81	0,70	0,44	0,16

A metodologia proposta também é muito mais rápida e simples para o cálculo da função deformada de alargamento Doppler com distribuição de Kaniadakis do que a solução numérica da equação (4.4), conforme mostrado na tabela (5.11). Os resultados apresentados na tabela (5.11) são relativos ao cálculo da função deformada de alargamento Doppler utilizando a equação (4.4) e tal proposta, baseada na temperatura efetiva do meio (T_{ef}), combinando as equações (5.1) e (5.4).

Vale destacar que os cálculos consideraram uma temperatura de 2.000 K e cem mil pontos da malha de energia, ou seja, o tempo médio de computação para o cálculo da equação (4.4) usando uma regra de quadratura de Gauss-Legendre com ordem igual a 15 foi de aproximadamente 120 segundos (s). O mesmo cálculo utilizando a metodologia proposta, obteve um tempo médio de computação de aproximadamente 2,12 segundos (s). O método proposto requer apenas 1,76% do tempo de computação gasto pelo método convencional da quadratura de Gauss-Legendre. Os resultados foram obtidos utilizando o programa FORTRAN77 e um PC Intel 3.0 Ghz com 16 Gb de ram.

Tabela 5.11: Tempo de computação para cálculo da função deformada de alargamento Doppler, considerando uma temperatura de 2.000 K .

Tempo computacional usando quadratura de Gauss-Legendre (s)	Tempo computacional usando o método proposto (s)
120,1	2,12

Outros resultados relevantes e pertinentes podem ser vistos nas tabelas (5.12) e (5.13). Nessas tabelas são apresentadas a comparação da função de alargamento Doppler usando a distribuição de Maxwell-Boltzmann e a função de alargamento Doppler usando a distribuição Kaniadakis para diferentes temperaturas.

Tabela 5.12: Cálculo da $\psi_\kappa(x, \xi)$ e $\psi(x, \xi)$ para uma temperatura de 2000 K .

x	0	0,5	1	2	4	6	8
$\psi_\kappa(x, \xi)$	0,150086	0,149771	0,148831	0,145133	0,131308	0,111354	0,088812
$\psi(x, \xi)$	0,157463	0,157119	0,156087	0,152037	0,136894	0,115048	0,090403
$\frac{ \psi - \psi_\kappa 10^2}{\psi}$	4,68%	4,68%	4,65%	4,54%	4,08%	3,21%	1,76%

Tabela 5.13: Cálculo da $\psi_\kappa(x, \xi)$ e $\psi(x, \xi)$ para uma temperatura de 3000 K.

x	0	0,5	1	2	4	6	8
$\psi_\kappa(x, \xi)$	0,124871	0,124693	0,124159	0,12205	0,113991	0,101809	0,08707
$\psi(x, \xi)$	0,13108	0,130886	0,130302	0,127991	0,119163	0,105818	0,089683
$\frac{ \psi - \psi_\kappa 10^2}{\psi}$	4,74%	4,73%	4,71%	4,64%	4,34%	3,79%	2,91%

Os resultados apresentados nas tabelas (5.12) e (5.13) demonstram claramente que para temperaturas mais altas a função deformada de alargamento Doppler é bastante diferente da função de alargamento Doppler original.

5.1.1 Análise dos Coeficientes I

Nesta seção apresenta-se uma análise do comportamento dos coeficientes que indicam a variação natural dos dados. Dessa forma, plotando ξ em função de $\tilde{\xi}$ a fim de encontrar os diferentes polinômios que descrevem o comportamento dos pontos.

Considerando os pontos de x variando de 0 a 20:

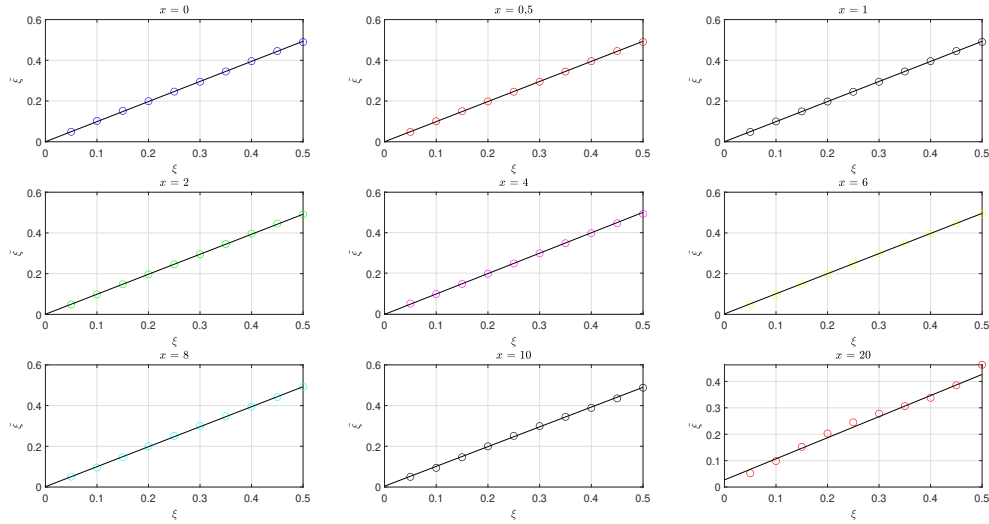


Figura 5.1: Comportamento linear para diferentes valores de $x=0$ a $x = 20$.

Na figura (5.1) foram obtidos diferentes gráficos de $x = 0$ até $x = 20$. Foi observado o comportamento linear, sendo que os coeficientes são:

1. $A(x) = (a_0, \dots, a_{20})$.

2. $B(x) = (b_0, \dots, b_{20})$.

Tabela 5.14: Valores dos coeficientes.

x	$A(X)$	$B(X)$
0	0,9868	$1,4467 \times 10^{-4}$
0,5	0,9863	$1,7400 \times 10^{-4}$
1	0,9857	$2,5400 \times 10^{-4}$
2	0,9821	$7,4467 \times 10^{-4}$
4	1,0085	-0,0039
6	0,9879	0,0024
8	0,9816	0,0018
10	0,9706	0,0043
20	0,7990	0,0270
40	1,1592	-0,0669

Dada uma equação de 1º grau sendo: $y = ax + b$, tem-se os seguintes valores de coeficientes, onde a segunda coluna refere-se aos coeficientes a e a terceira o b .

Nesse sentido, plotando os coeficientes a e b em função do x , têm-se os seguintes gráficos:

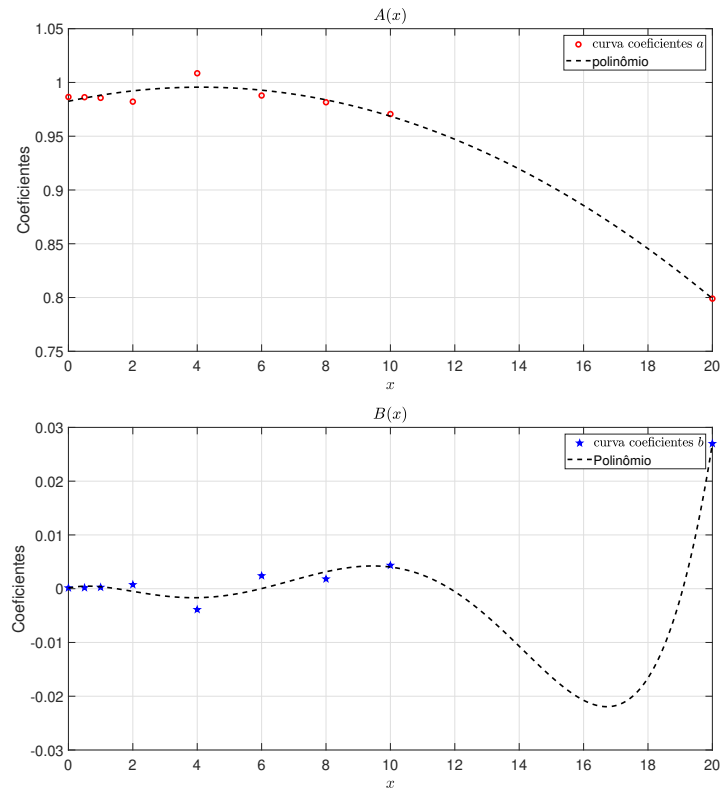


Figura 5.2: Comportamento de $A(x)$ e $B(x)$ dos valores de $x=0$ a $x = 20$.

Para os coeficientes de a utiliza-se um polinômio de grau 2 para descrever o comportamento e para os coeficientes b utiliza-se um polinômio de grau 5.

$$A(x) = -7,7802 \times 10^{-4}x^2 + 0,0064x + 0,9825, \quad (5.9)$$

e

$$B(x) = 6,94241 \times 10^{-7}x^5 - 2,66093 \times 10^{-5}x^4 + 0,0003216x^3 - 0,001339x^2 + \\ + 0,0013x + 0,0001155. \quad (5.10)$$

Dessa forma,

$$\tilde{\xi}_{ajuste}(x, \xi) = A(x)\xi + B(x). \quad (5.11)$$

Então, pode-se estudar esses coeficientes com respeito a variável x :

$$\tilde{\xi}_{ajuste}(x, \xi) = \sum_{i=0}^2 (n_i x^i) \xi + \sum_{j=0}^5 (m_j x^j). \quad (5.12)$$

Tabela 5.15: Valores de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0,1$ calculados pela Eq. (5.12).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	
0,05	0,0492	0,0497	0,0498	0,0491	0,0481	0,0497	0,0523	0,0525	0,0669	
0,10	0,0984	0,0990	0,0992	0,0987	0,0979	0,0993	0,1015	0,1009	0,1069	
0,15	0,1475	0,1483	0,1486	0,1483	0,1477	0,1489	0,1507	0,1493	0,1469	
0,20	0,1966	0,1976	0,1980	0,1979	0,1975	0,1986	0,1999	0,1977	0,1868	
0,25	0,2457	0,2468	0,2474	0,2475	0,2472	0,2482	0,2491	0,2462	0,2268	
0,30	0,2949	0,2961	0,2968	0,2972	0,2970	0,2979	0,2983	0,2946	0,2667	
0,35	0,3440	0,3454	0,3462	0,3468	0,3468	0,3475	0,3475	0,3430	0,3067	
0,40	0,3931	0,3947	0,3956	0,3964	0,3966	0,3972	0,3967	0,3915	0,3466	
0,45	0,4422	0,4439	0,4450	0,4460	0,4464	0,4468	0,4459	0,4399	0,3866	
0,50	0,4914	0,4932	0,4944	0,4956	0,4961	0,4964	0,4951	0,4883	0,4265	

Tabela 5.16: Erro relativo percentual $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.12).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	
0,05	0,3039	0,7048	0,7614	0,5572	0,5711	0,5808	6,0335	6,2980	36,3704	
0,10	0,4108	0,2455	0,4060	0,0379	0,8404	0,6771	3,0961	2,7472	7,4574	
0,15	0,4330	0,0991	0,3079	0,1623	0,1687	0,9549	2,9648	5,0267	0,6206	
0,20	0,4391	0,0411	0,2638	0,2828	0,2541	1,6898	1,9180	0,6399	4,8455	
0,25	0,4427	0,0144	0,2496	0,3836	0,6844	7,1305	0,1011	0,4304	6,7132	
0,30	0,4317	0,0034	0,2469	0,4678	1,3065	0,9273	0,4250	0,3702	5,8406	
0,35	0,4238	0,0103	0,2536	0,5601	2,8960	0,1083	0,5886	0,3761	2,6381	
0,40	0,4179	0,0104	0,2663	0,6601	4,5099	0,2560	0,6634	0,3756	0,8686	
0,45	0,4043	0,0083	0,2830	0,7676	1,2848	0,4983	0,7149	0,2531	2,9807	
0,50	0,3975	0,0025	0,3004	0,8989	0,4653	0,6643	0,7768	0,1319	3,0150	

5.1.2 Análise dos Coeficientes II

Considerando os pontos de x variando de 0 a 10:

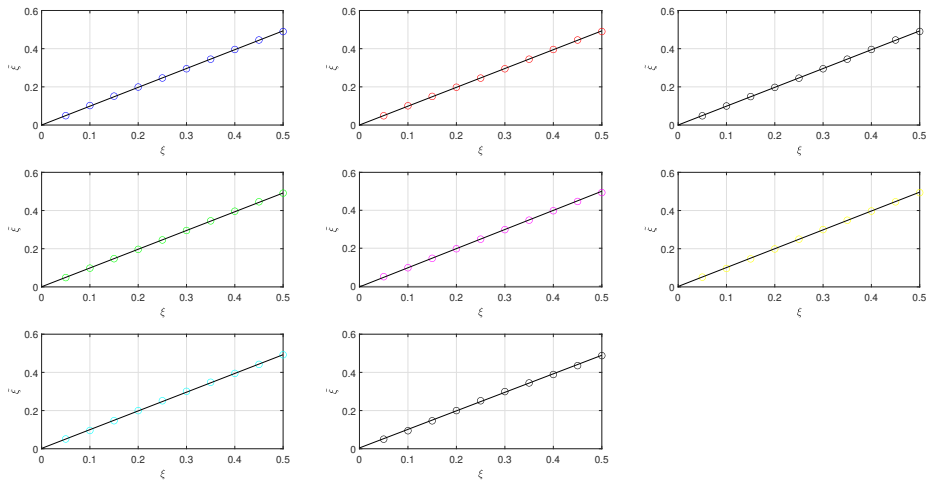


Figura 5.3: Comportamento linear para diferentes valores de $x=0$ a $x=10$.

Fazendo os mesmos cálculos de interpolação apresentados anteriormente, têm-se que os dois gráficos de coeficientes, conforme 5.4.

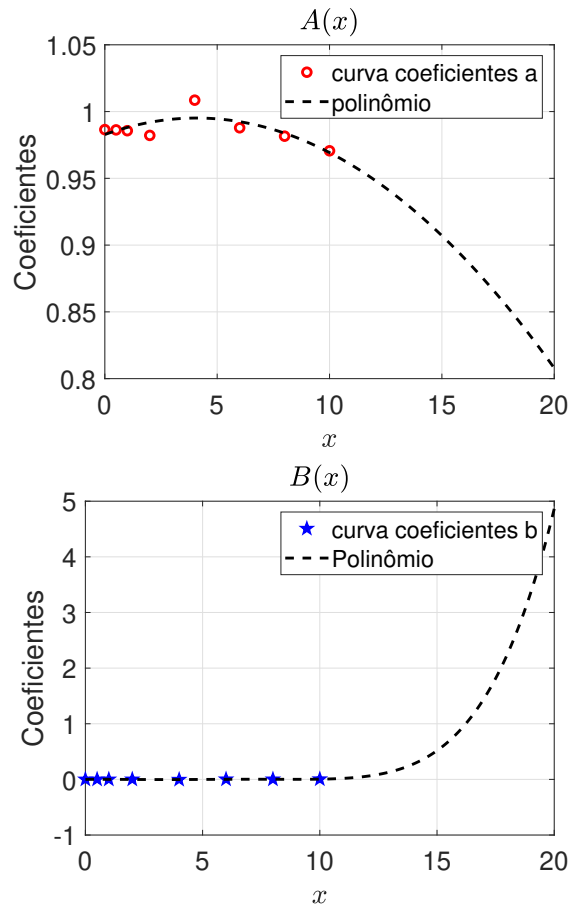


Figura 5.4: Comportamento de $A(x)$ e $B(x)$ valores de $x=0$ a $x=10$.

Para os coeficientes de a utiliza-se um polinômio de grau 2 para descrever o comportamento e para os coeficientes b utiliza-se um polinômio de grau 5.

$$A(x) = -0,000739x^2 + 0,00604x + 0,98281, \quad (5.13)$$

e

$$B(x) = 0,000007587x^5 - 0,000191296 \times 10^{-5}x^4 + 0,001668x^3 - 0,005670x^2 + 0,005811x - 0,000562. \quad (5.14)$$

Desta forma, calcula-se o erro relativo percentual, seguindo a equação (5.12). Os resultados obtidos estão destacados na tabela (5.17):

Tabela 5.17: Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.12).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10		
0,05	1,64339	2,05453	2,18264	1,80195	4,29185	3,60466	3,94655	6,90881		
0,10	1,06409	0,92857	1,11743	0,67155	1,72427	2,17123	2,04975	3,08909		
0,15	0,85758	0,55999	0,78273	0,26771	0,77413	1,94077	2,26066	4,79147		
0,20	0,74928	0,39092	0,62041	0,04544	0,21222	2,42467	2,42384	0,43687		
0,25	0,68428	0,29757	0,53521	0,11641	0,30101	6,60075	0,31332	0,25311		
0,30	0,62752	0,23531	0,48518	0,24135	0,97764	0,46279	0,07773	0,21039		
0,35	0,58697	0,19664	0,45816	0,36267	2,60314	0,28753	0,28989	0,22898		
0,40	0,55654	0,17269	0,44552	0,48438	4,75307	0,58878	0,40147	0,23789		
0,45	0,52392	0,15633	0,44247	0,60873	1,51327	0,79934	0,48172	0,12269		
0,50	0,50184	0,14729	0,44411	0,75348	0,67716	0,93183	0,56656	0,25685		

Agora, considera-se apenas os pontos 20 e 40.

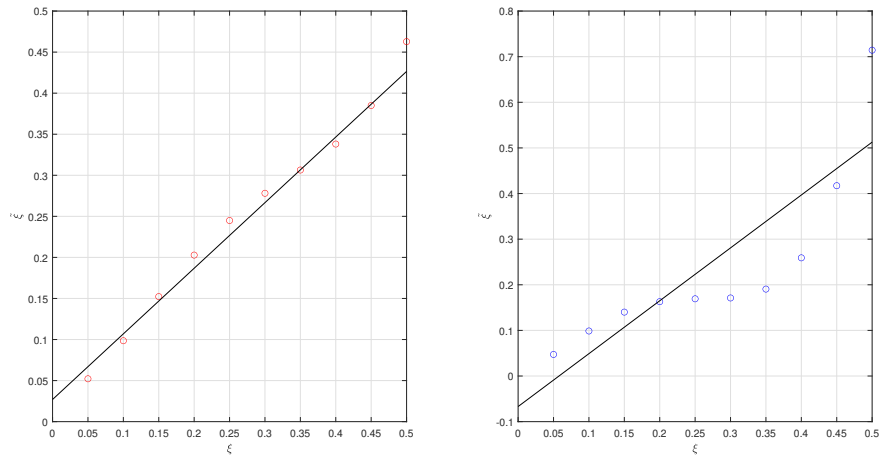


Figura 5.5: Comportamento linear para os valores de $x = 20$ e $x = 40$.

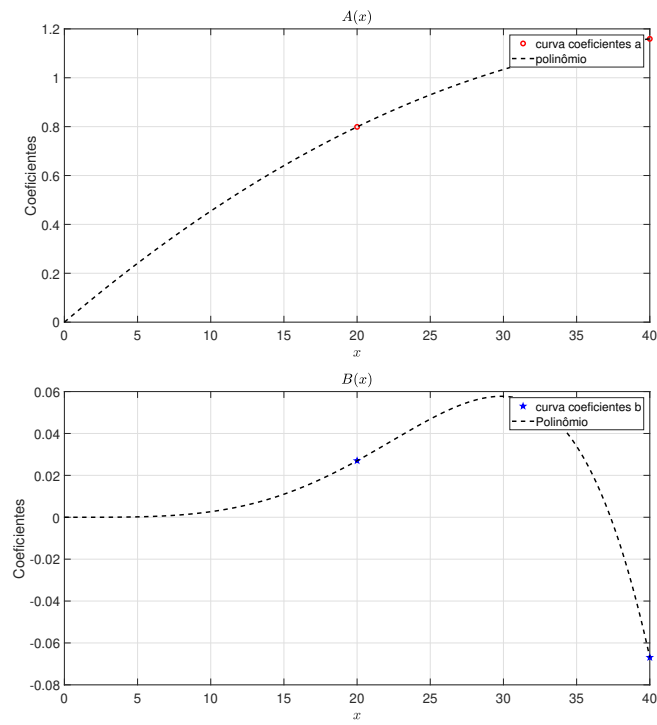


Figura 5.6: Comportamento de $A(x)$ e $B(x)$ para os valores de $x = 20$ e $x = 40$.

Com esses elementos, portanto, as equações com os respectivos coeficientes a e b , têm-se que:

$$A(x) = -0,0005484x^2 + 0,050916878x \quad (5.15)$$

e

$$B(x) = -0.00974061x^5 + 0,363491x^4. \quad (5.16)$$

Para o cálculo do erro percentual, a tabela (5.18) é apresentada a seguir:

Tabela 5.18: Erro relativo percentual $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.12).

ξ	x	
	20	40
0,05	36,35623	117,9735
0,10	7,444591	50,04009
0,15	0,633089	23,25035
0,20	4,857839	3,554746
0,25	6,725483	31,00362
0,30	5,853173	48,04878
0,35	2,651308	78,60102
0,40	0,854823	1,6442332
0,45	2,966547	12,72535
0,50	3,000779	28,38401

Considerando apenas $x = 20$ e $x = 40$ e os sete primeiros valores de ξ :

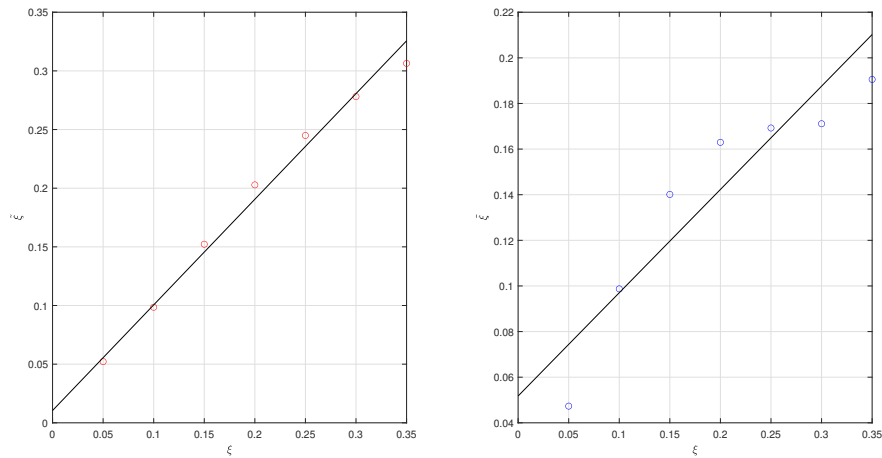


Figura 5.7: Comportamento linear para os valores de $x = 20$ e $x = 40$ com os sete primeiros.

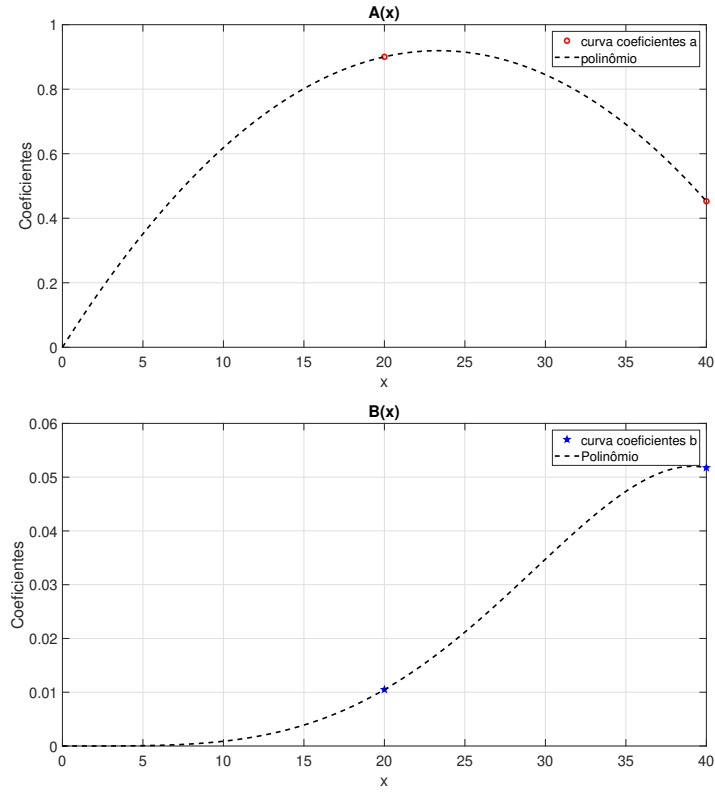


Figura 5.8: Comportamento de $A(x)$ e $B(x)$ para os valores de $x = 20$ e $x = 40$ com os sete primeiros.

Para os coeficientes de a utiliza-se um polinômio de grau 2 para descrever o comportamento e para os coeficientes b utiliza-se um polinômio de grau 5. Segue o modelo:

$$A(x) = -0,001685026785714x^2 + 0,078719821428571x \quad (5.17)$$

e

$$B(x) = -0,002267829241071x^5 + 0,110928013392857x^4. \quad (5.18)$$

Então, obtém o seguinte resultado para o erro relativo percentual:

Tabela 5.19: Erro relativo percentual $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.12).

ξ	x	
	20	40
0,05	13,07948	49,55267
0,10	1,055489	1,11598
0,15	1,502818	14,15274
0,20	2,929619	10,66047
0,25	3,082172	3,063473
0,30	0,936545	1,125402
0,35	3,380033	10,80728

Caso seja considerando todos os pontos. Isto é, $x = 0$ até $x = 40$.

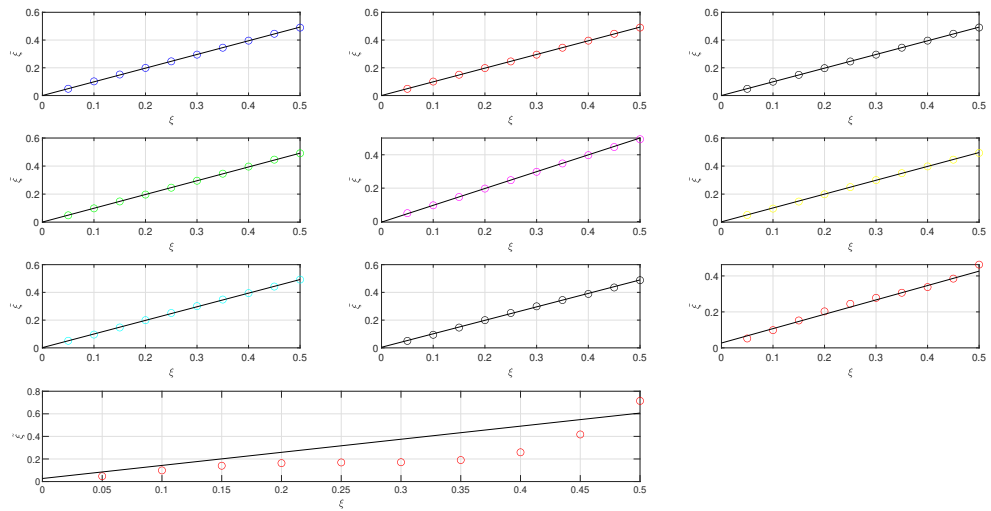


Figura 5.9: Comportamento linear para diferentes valores de $x = 0$ até $x = 40$.

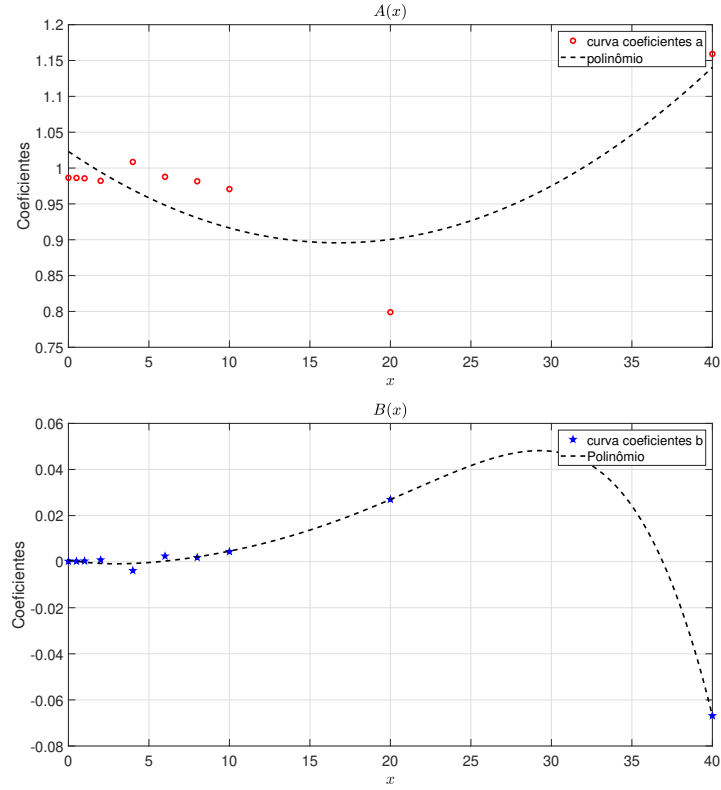


Figura 5.10: Comportamento de $A(x)$ e $B(x)$ para os valores de $x = 0$ até $x = 40$.

Dessa forma, os coeficientes de a e b ficam:

$$A(x) = 0,000453283548766x^2 - 0.015196429575936x + 1.023097479925890. \quad (5.19)$$

Além disso,

$$B(x) = -0,000000011909177x^5 + 0,000000715417393x^4 - 0,001221061889258x + 0,000730968343085. \quad (5.20)$$

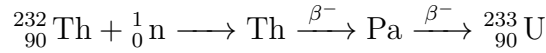
Fazendo o cálculo do erro relativo percentual, seguindo a Eq. (5.12) observa-se que:

Tabela 5.20: Erro relativo percentual $\tilde{\xi}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.12).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	5,05334	3,18991	1,59467	0,87685	3,41760	3,49303	1,55722	2,09671	46,67526	119,85490
0,10	4,32390	3,01319	1,84806	0,07816	2,58245	3,62227	3,41372	2,01874	17,63872	51,94774
0,15	4,09478	2,96122	1,95317	0,21521	2,21145	3,43036	3,23475	9,66106	9,66442	25,26467
0,20	3,98545	2,95087	2,01092	0,38230	1,94109	2,76476	7,67747	5,61051	5,47842	1,20434
0,25	3,91984	2,95300	2,05798	0,51114	1,60650	11,21906	5,68672	5,48575	3,71045	28,25329
0,30	3,89012	2,95442	2,09626	0,61411	1,05619	5,30353	5,32088	5,47849	4,89425	45,08865
0,35	3,86889	2,96140	2,13249	0,71985	0,45446	4,53124	5,12311	5,51994	8,62518	75,14753
0,40	3,85296	2,97185	2,16744	0,82996	6,80475	4,19091	5,01979	5,54633	12,66782	3,49841
0,45	3,84993	2,98230	2,20154	0,94537	3,68053	3,96554	4,94560	5,45127	15,13248	10,63726
0,50	3,84329	2,99484	2,23299	1,08311	2,89978	3,81178	4,86674	5,10326	15,25659	29,69138

5.2 Aplicação Simples da Física de Reatores

Dado um conjunto isotópico de elemento natural, os isótopos estáveis e instáveis (radioativos) que compõem o conjunto não são encontrados na natureza com a mesma proporção. Por exemplo, o isótopo urânio (símbolo U, $Z = 92$) encontrado na natureza, principalmente na forma de minério, aproximadamente 99,27% naturais do urânio são isótopo ^{238}U , 0,72% é o isótopo ^{235}U e 0,005% é o isótopo ^{234}U . Os principais elementos fisséis são ^{235}U , ^{233}U e ^{239}Pu (MURRAY e HOLBERT, 2014). No entanto, os dois últimos isótopos são produzidos artificialmente dentro de reatores nucleares, tendo em vista que o isótopo ^{235}U é único fissil encontrado na natureza. É importante observar que, o ^{238}U pode ser utilizado para a produção do plutônio-239. O ^{233}U é produzido a partir da captura de um nêutron pelo $^{232}_{90}\text{Th}$, segundo a cadeia descrita abaixo:



Nesta seção são apresentados os resultados obtidos para o cálculo da seção de choque média de captura para o nuclídeo de ^{238}U e $E_0 = 6,67 \text{ eV}$, que tem relevância em reatores térmicos (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976). A seguir são apresentadas na tabela (5.21) os parâmetros nucleares de ressonância.

Tabela 5.21: Dados nucleares de ressonância.

$E_0 \text{ (eV)}$	$\Gamma_n \text{ (eV)}$	$\Gamma_\gamma \text{ (eV)}$	$\sigma_0 \text{ (10}^4\text{b)}$
6,67	0,00152	0,026	2,4

Fonte: (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976).

5.2.1 Seção de choque média $\bar{\sigma}_\gamma(E, T)$

Para o cálculo da seção de choque média de captura para o nuclídeo de ^{238}U , considerando o método de solução para as função clássica $\psi(x, \xi)$, utilizando a equação (3.33) com intervalo de temperatura de 300 K a 1500 K , os resultados são mostrados na figura 5.11.

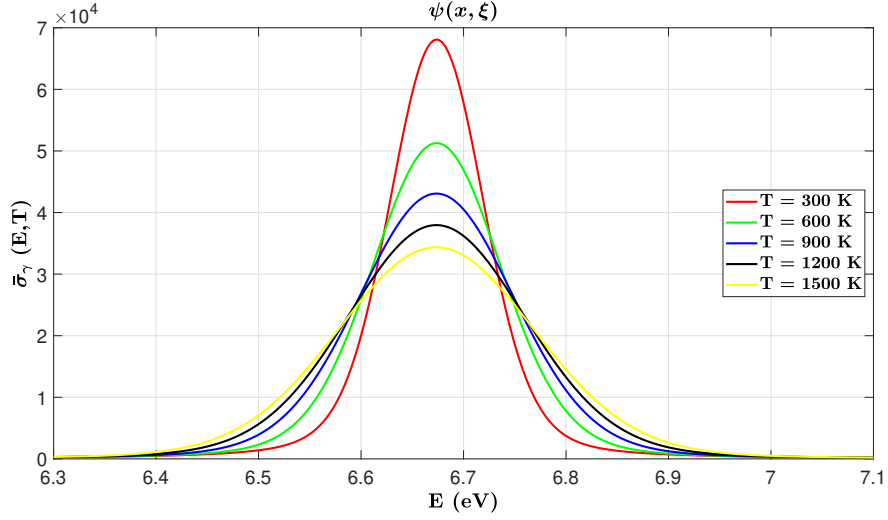


Figura 5.11: Seção de choque de captura ^{238}U .

5.2.2 Seção de choque média deformada $\bar{\sigma}_{\gamma,\kappa}(E, T)$

Nessa seção são apresentados os resultados obtidos para o cálculo da seção de choque média de captura para o nuclídeo de ^{238}U . Nesse cálculo foram empregados o método de solução para as funções deformadas $\psi_\kappa(x, \xi)$ e $\psi(x, \tilde{\xi})$. Logo, para o cálculo dessas seções de choque de capturas, foram utilizadas as equações (4.4) e (5.1) da função de alargamento Doppler, sob a ótica da estatística de Kaniadakis generalizada.

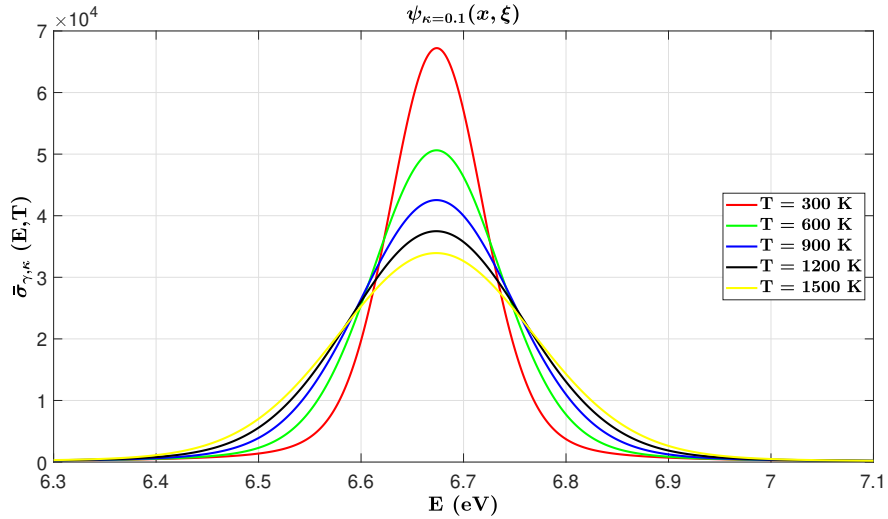


Figura 5.12: Seção de choque de captura deformada ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67\text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0, 1$.

Seguindo na metodologia proposta, nesses cálculos foram empregados o método

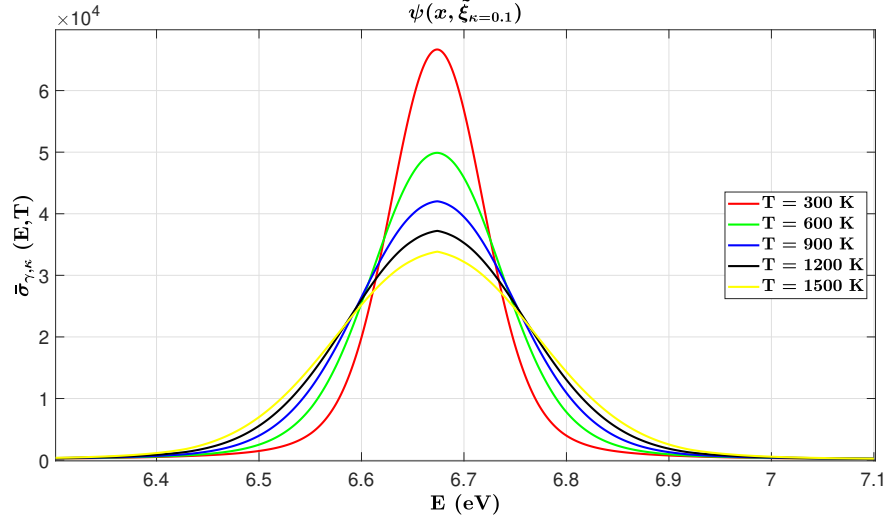


Figura 5.13: Seção de choque de captura deformada ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67$ (eV) considerando $\kappa = 0, 1$.

de solução para as funções deformadas $\psi_{\kappa=0,2}(x, \xi)$ e $\psi(x, \tilde{\xi}_{\kappa=0,2})$, conforme figuras a seguir:

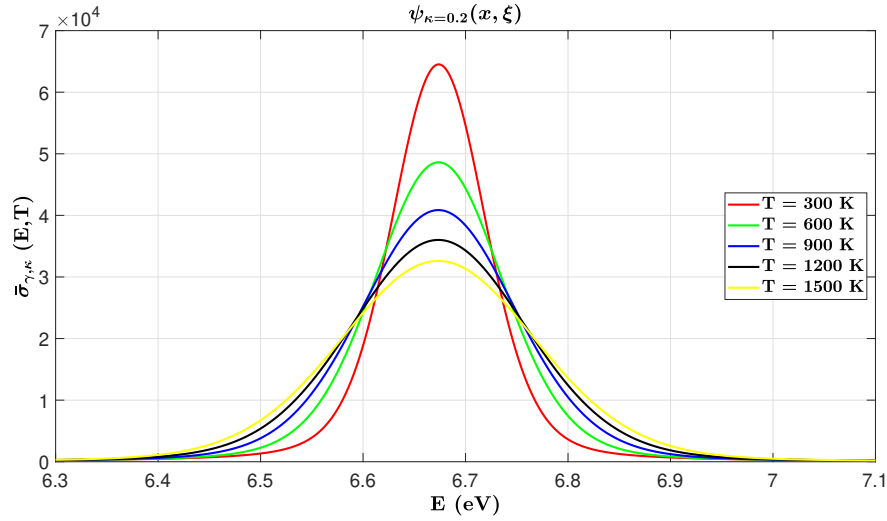


Figura 5.14: Seção de choque de captura deformada ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67$ (eV) considerando $\kappa = 0, 2$.

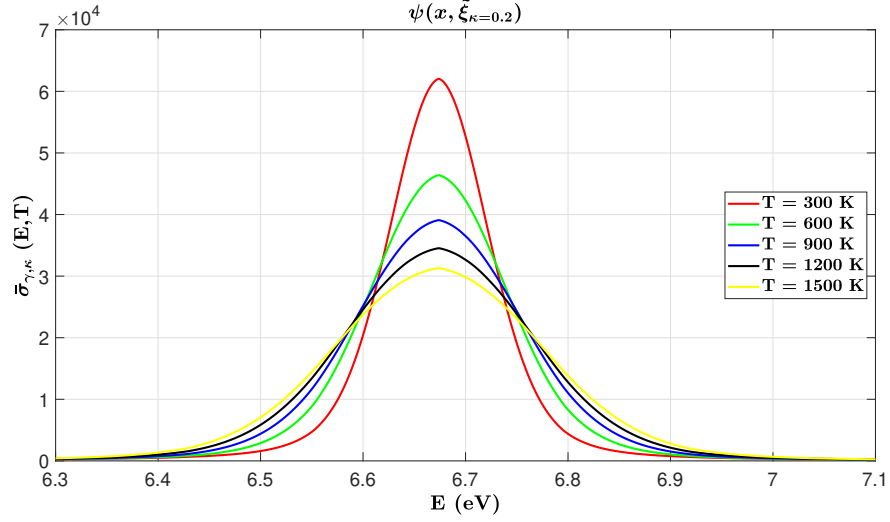


Figura 5.15: Seção de choque de captura deformada ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67$ (eV) considerando $\kappa = 0,2$.

Para as funções deformadas $\psi_{\kappa=0,3}(x, \xi)$ e $\psi(x, \tilde{\xi}_{\kappa=0,3})$, observa-se os seguintes comportamentos:

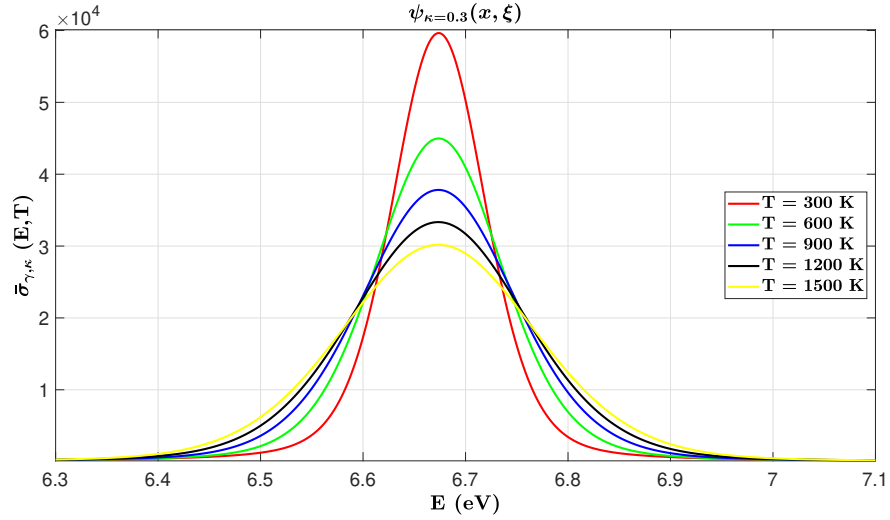


Figura 5.16: Seção de choque de captura deformada ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67$ (eV) considerando $\kappa = 0,3$.

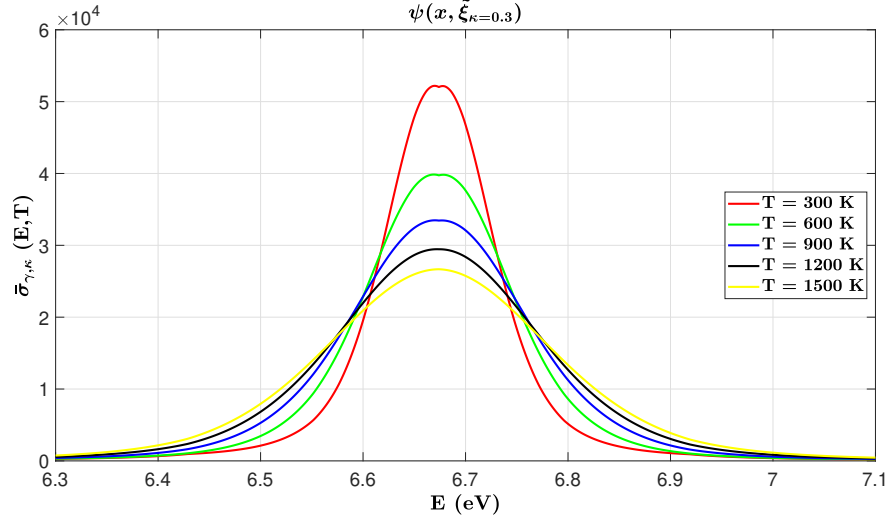


Figura 5.17: Seção de choque de captura deformada ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67$ (eV) considerando $\kappa = 0, 3$.

Agora, apresentaremos os resultados obtidos para seção de choque de captura utilizando as diferentes distribuições e deformações, a fim de avaliar o comportamento qualitativo. Esses gráficos são apresentados a seguir:

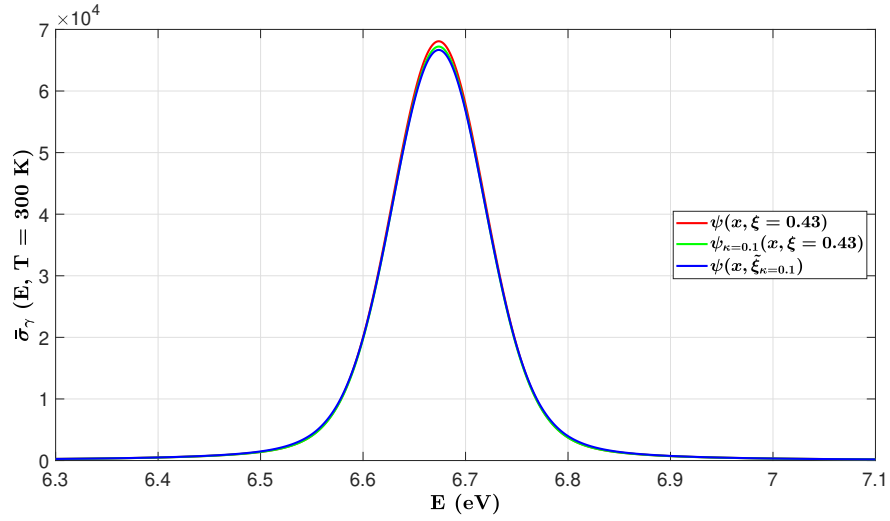


Figura 5.18: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67$ (eV) considerando $\kappa = 0, 1$ com temperatura de 300 K .

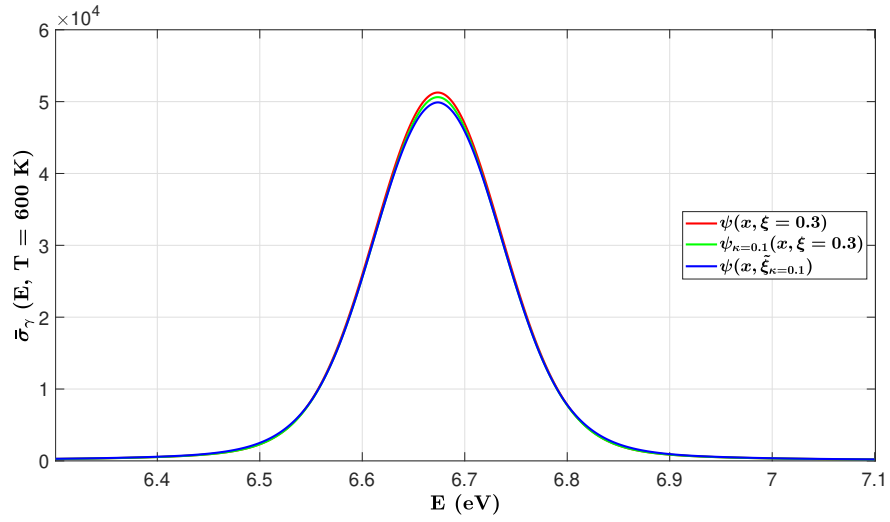


Figura 5.19: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67$ (eV) considerando $\kappa = 0, 1$ com temperatura de 600 K .

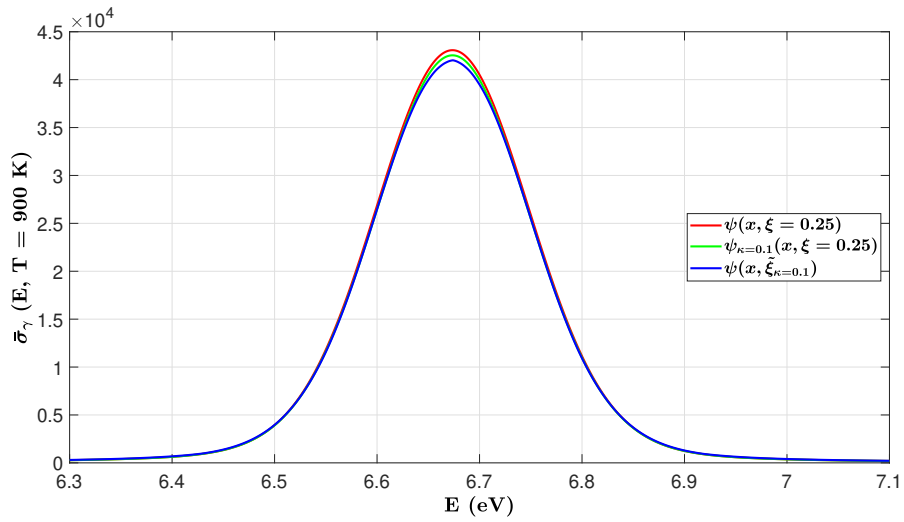


Figura 5.20: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67$ (eV) considerando $\kappa = 0, 1$ com temperatura de 900 K .

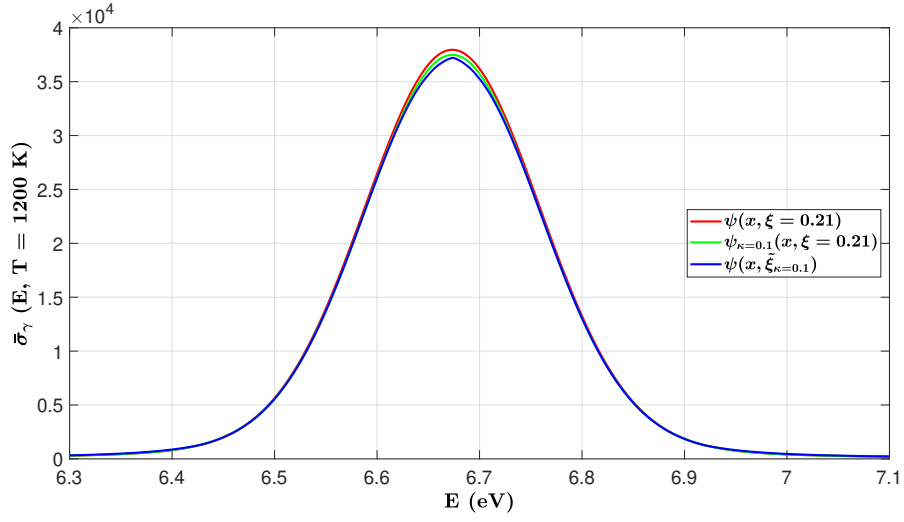


Figura 5.21: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67$ (eV) considerando $\kappa = 0, 1$ com temperatura de 1200 K .

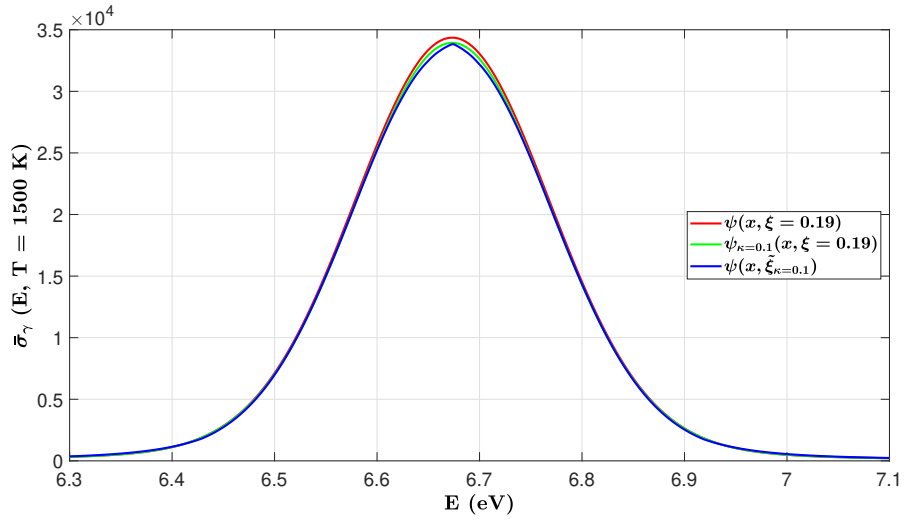


Figura 5.22: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67$ (eV) considerando $\kappa = 0, 1$ com temperatura de 1500 K .

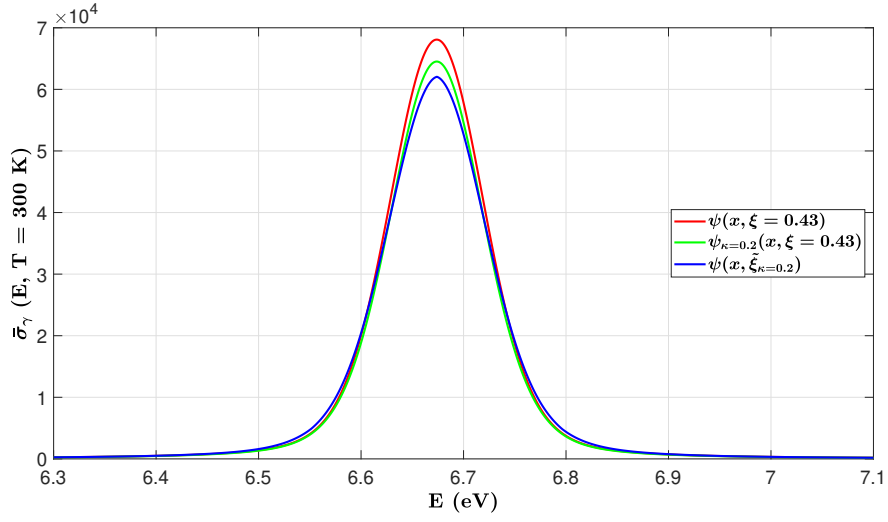


Figura 5.23: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,2$ com temperatura de 300 K .

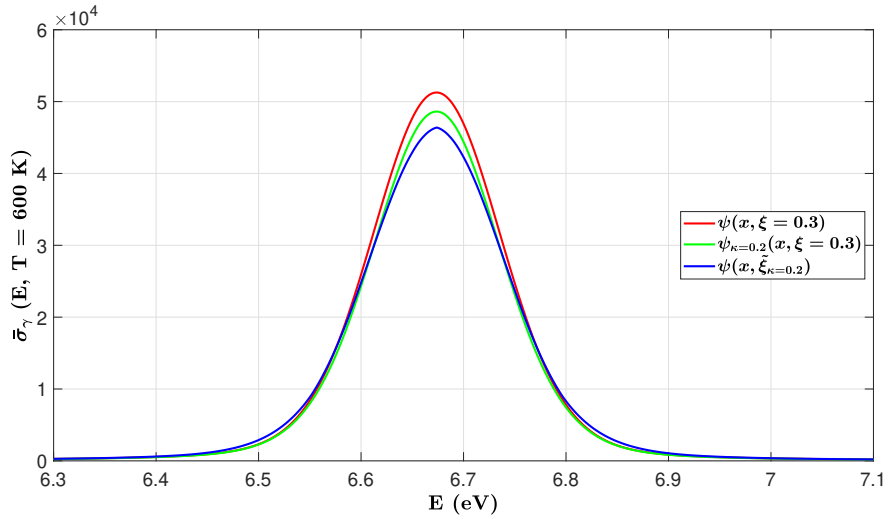


Figura 5.24: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,2$ com temperatura de 600 K .

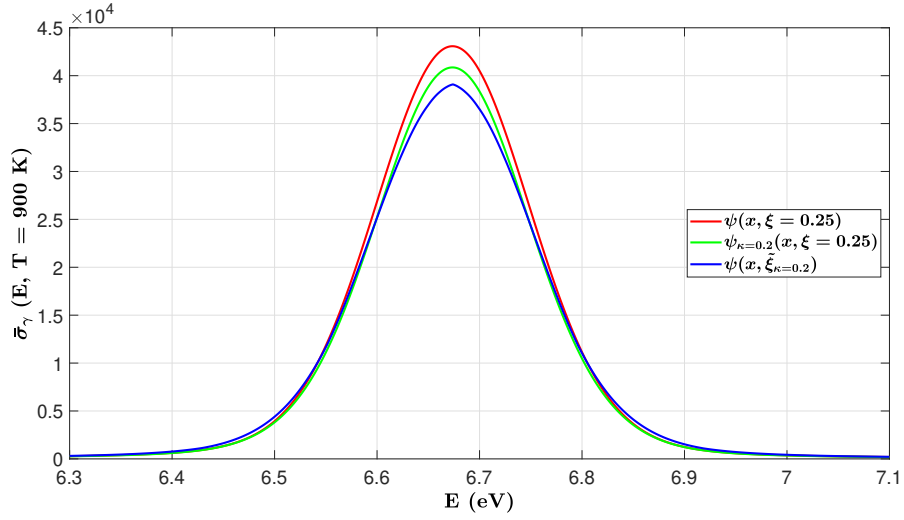


Figura 5.25: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67$ (eV) considerando $\kappa = 0,2$ com temperatura de 900 K .

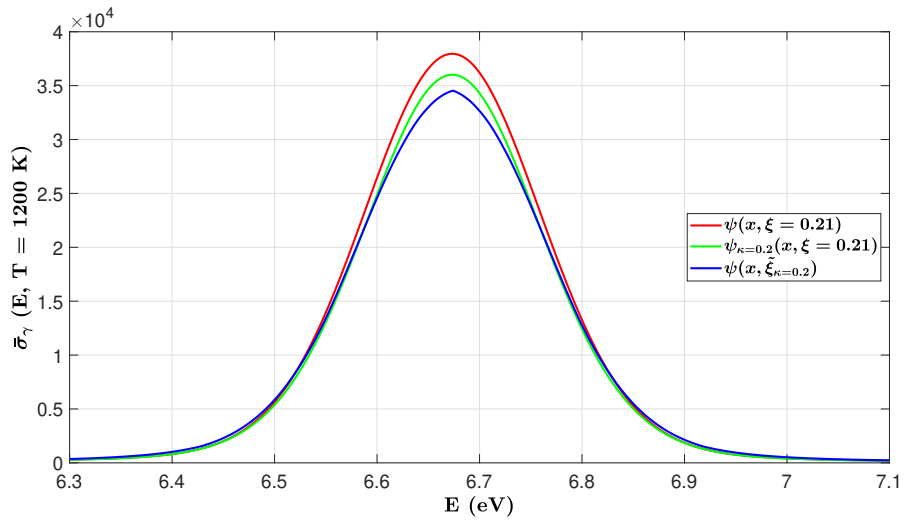


Figura 5.26: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67$ (eV) considerando $\kappa = 0,2$ com temperatura de 1200 K .

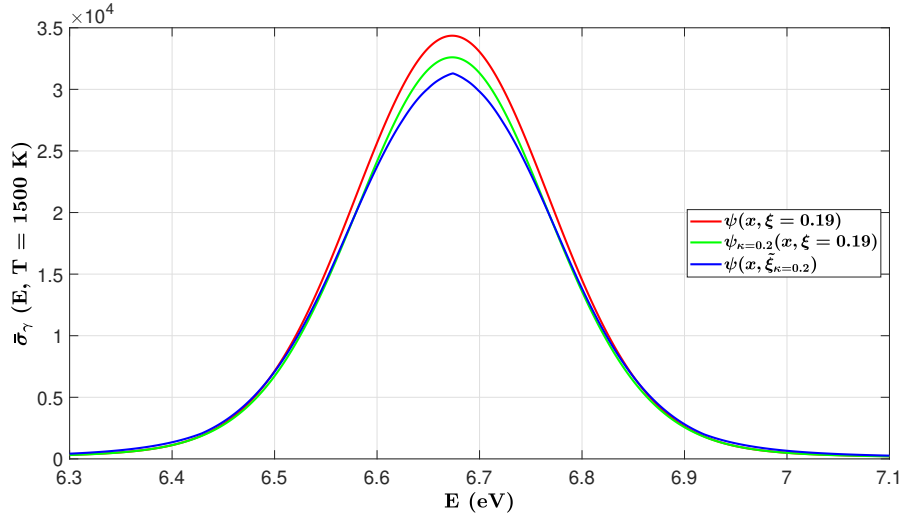


Figura 5.27: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,2$ com temperatura de 1500 K .

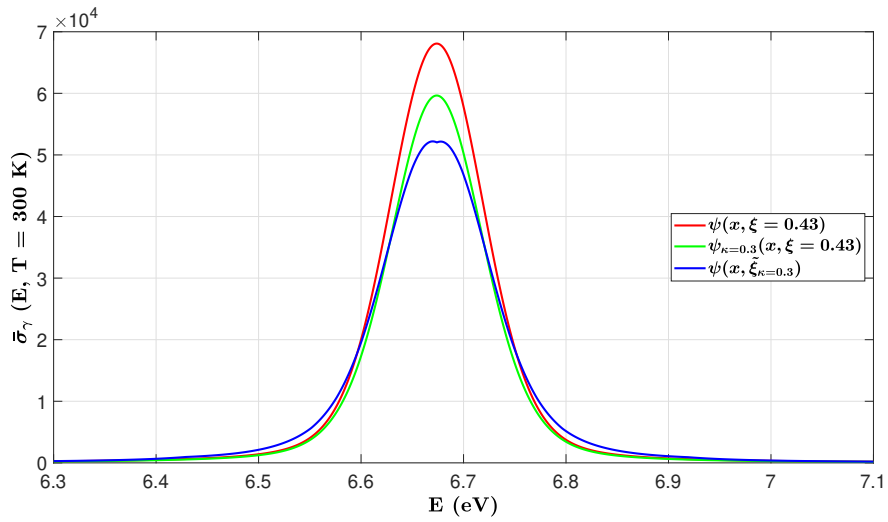


Figura 5.28: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,3$ com temperatura de 300 K .

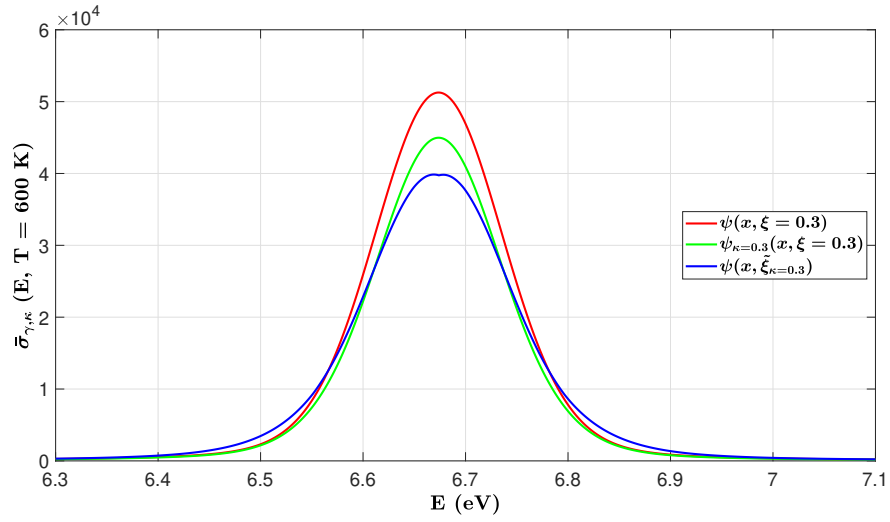


Figura 5.29: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,3$ com temperatura de 600 K .

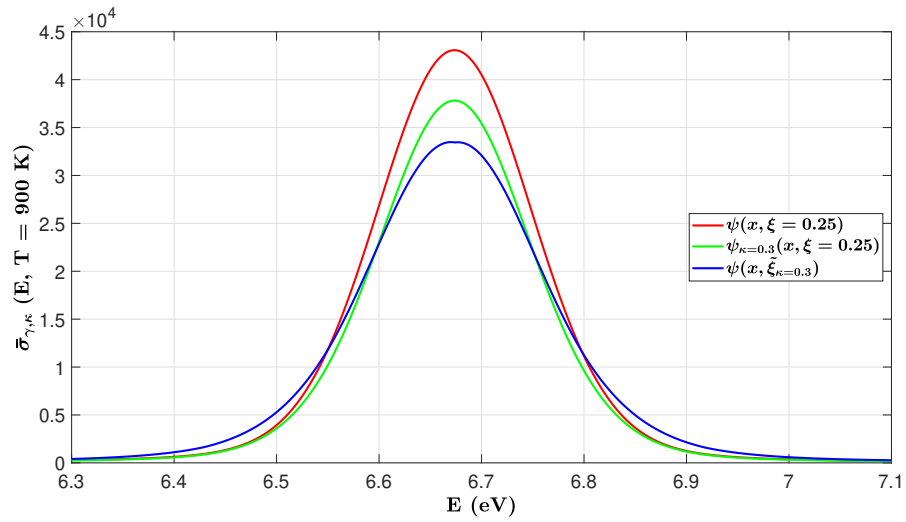


Figura 5.30: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,3$ com temperatura de 900 K .

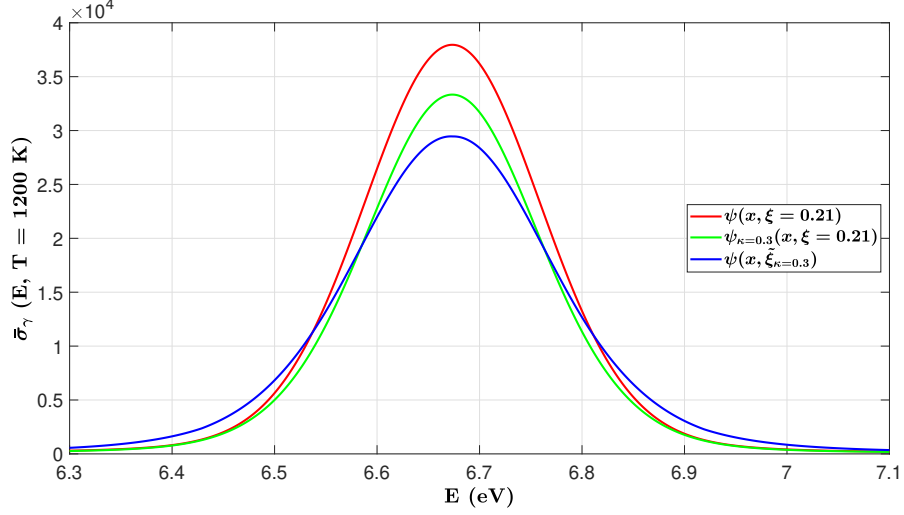


Figura 5.31: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,3$ com temperatura de 1200 K .

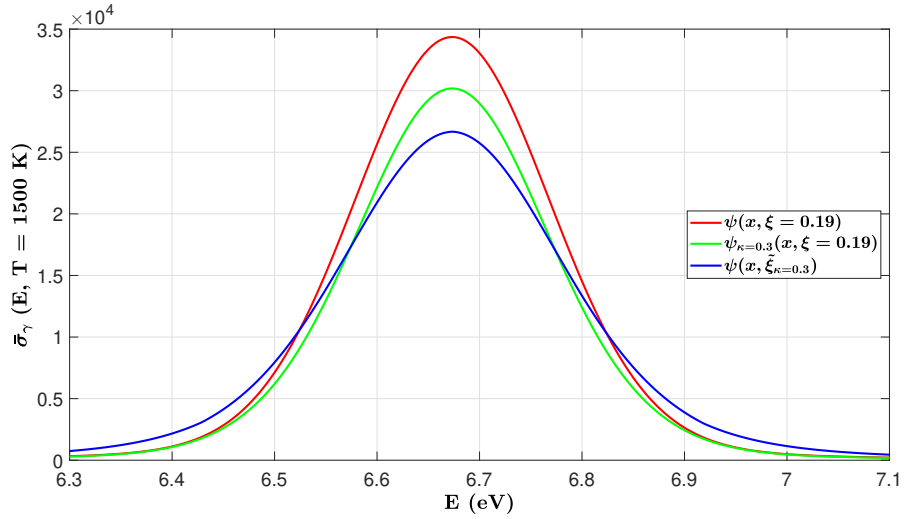


Figura 5.32: Seção de choque de captura ^{238}U para ressonância de $E_0 = 6,67 \text{ (eV)}$ considerando $\kappa = 0,3$ com temperatura de 1500 K .

Considerando que o meio está em equilíbrio térmico é válido usar a estatística de Maxwell-Boltzmann para representar a distribuição das velocidades dos núcleos-alvo para obter a função de alargamento Doppler, $\psi(x, \xi)$. No entanto, esta pesquisa propõe uma alternativa simples em considerar fenômenos físicos fora do equilíbrio térmico usando a distribuição estatística de Kaniadakis da função de alargamento Doppler deformada $\psi_\kappa(x, \xi)$, mas usando a temperatura efetiva T_{ef} do meio em vez da temperatura real T do meio.

Essa distribuição é uma das representações que modifica a distribuição padrão de Maxwell-Boltzmann, governada pela deformação κ . Percebe-se que, para uma dada ressonância do ^{238}U , se os parâmetros ξ e $\tilde{\xi}$ variam, o fenômeno de alargamento

Doppler é intensificado conforme κ aumenta, pois o parâmetro de deformação κ introduz um alargamento adicional e como consequência, ocorre uma redução na amplitude da distribuição de Kaniadakis.

Capítulo 6

Conclusões Finais

Em um meio com temperatura T os núcleos vibram com uma energia média $3k_B T/2$ onde k_B é a constante de Boltzmann; logo, a velocidade relativa do movimento nêutron-núcleo varia com as velocidades dos núcleos-alvo no sistema laboratório. Para determinar a seção de choque efetiva de interação nêutron-núcleo é indispensável usar uma distribuição de velocidades dos núcleos de forma que essa seção de choque possa ser unicamente determinada pela energia do nêutron incidente e a temperatura real do meio T . Considerando o meio em equilíbrio térmico é válido usar a estatística de Maxwell-Boltzmann para representar a distribuição de velocidades dos núcleos-alvo para obter a função de alargamento Doppler, $\psi(x, \xi)$.

Diversas pesquisas têm sido realizadas no desenvolvimento de modelos que generalizam a distribuição de Maxwell-Boltzmann, no intuito de abranger fenômenos físicos fora do equilíbrio térmico. Partindo dessas distribuições generalizadas, foi proposta recentemente uma função deformada de alargamento Doppler, $\psi_\kappa(x, \xi)$, usando a distribuição de Kaniadakis.

A troca da função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ pela função deformada de alargamento Doppler $\psi_\kappa(x, \xi)$, de acordo com a distribuição de Kaniadakis, nos sistemas computacionais existentes para projeto de um reator nuclear é uma tarefa complexa por causa do aumento do tempo computacional e pela necessidade de um novo processo de certificação desses sistemas por órgãos reguladores da energia nuclear. Para superar essa dificuldade foi proposta nesta tese uma alternativa simples para considerar fenômenos físicos fora do equilíbrio térmico, mantendo o uso da função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$, mas em função da temperatura efetiva do meio (T_{ef}), em vez da temperatura real (T) do meio.

Pela simplicidade e precisão foi usada a aproximação de 4-polos de Padé para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \tilde{\xi})$, a fim de igualar a função deformada de alargamento Doppler, $\psi_\kappa(x, \xi)$ e obter o valor da temperatura efetiva do meio T_{ef} através da variável $\tilde{\xi}$. A partir desse procedimento foram obtidas tabelas com valores de $\tilde{\xi}$ para diferentes valores do fator de deformação κ . Dessa forma a função de

alargamento Doppler com a distribuição de Maxwell-Boltzmann, através do uso da temperatura efetiva do meio, reproduz a mesma função com a distribuição generalizada de Kaniadakis.

Com todos esses elementos, portanto, a importância no desenvolvimento de um modelo de temperatura efetiva T_{ef} , o método proposto possibilitará a implementação do cálculo da função de alargamento Doppler deformada de Kaniadakis, $\psi_\kappa(x, \xi)$ nos sistemas de processamento de dados nucleares que utilizam o método de $(\psi - \chi)$, levando em conta apenas substituir T por T_{ef} . A seguir alguns pontos centrais e conclusões da pesquisa:

1. A vantagem fica inteligível quando se compara o tempo de processamento na tabela (5.11) entre o atual método (temperatura efetiva) e o convencional (Gauss-Legendre), $\psi(x, \xi)$ e $\psi_\kappa(x, \xi)$. O método proposto requer apenas 1,76% do tempo de computação gasto pelo método convencional da quadratura de Gauss-Legendre.
2. Quanto a precisão do novo método, as tabelas (5.6) a (5.10) mostram de forma quantitativa os erros percentuais. Uma rápida inspeção visual mostra que estão abaixo de 2% sendo a maioria abaixo de 1%.
3. Resumido a análise acima, conclui-se que o novo método é simples e adequado, rápido, apresenta precisão suficiente e sem perda significativa de acurácia para ser adotado como candidato a incorporação aos códigos de geração de espectro e cálculo das seções de choque em se tratando de projeto do núcleo de um reator.

Referências Bibliográficas

- BARROSO, D. E. G., 2009, *A física dos explosivos nucleares*. Editora Livraria da Física.
- BELL, G. I., GLASSTONE, S., 1970, *Nuclear reactor theory*. Washington, DC (United States), US Atomic Energy Commission.
- BETHE, H. A., PLACZEK, G., 1937, “Resonance Effects in Nuclear Processes”, *Physical Review*, v. 51, n. 6 (mar.), pp. 450–484. doi: 10.1103/physrev.51.450.
- CABANNES, H., 1976, *Padé approximants method and its applications to mechanics*, v. 47. Springer Berlin Heidelberg. doi: 10.1007/bfb0015655.
- CACUCI, D. G., 2010, *Handbook of Nuclear Engineering: Vol. 1: Nuclear Engineering Fundamentals; Vol. 2: Reactor Design; Vol. 3: Reactor Analysis; Vol. 4: Reactors of Generations III and IV; Vol. 5: Fuel Cycles, Decommissioning, Waste Disposal and Safeguards*, v. 1. Springer Science & Business Media.
- CAMPOS, T., MARTINEZ, A., 1987, “The dependence of practical width on temperature”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 14, n. 5 (jan.), pp. 241–247. doi: 10.1016/0306-4549(87)90045-4.
- DA SILVA, M. V., MARTINEZ, A. S., GONÇALVES, A. C., 2021, “Effective medium temperature for calculating the Doppler broadening function using Kaniadakis distribution”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 161, pp. 108500. ISSN: 0306-4549. doi: <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2021.108500>.
- DE ABREU, W. V., GONÇALVES, A. C., MARTINEZ, A. S., 2019, “Analytical solution for the Doppler broadening function using the Kaniadakis distribution”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 126, pp. 262–268. doi: 10.1016/j.anucene.2018.11.023.

- DE ALMEIDA, G. G., 2019, *GENERALIZAÇÕES DO FENÔMENO DE ALARGAMENTO DOPPLER*. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- DOS SANTOS, P. H. G., 2017, *FENÔMENOS DE TRANSPORTE EM SISTEMAS FORA DO EQUILÍBRIO*. Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo.
- DUDERSTADT, J. J., HAMILTON, L. J., 1976, *Nuclear reactor analysis*. New York, Wiley.
- EVANGELISTA, L. R., 2014, *Perspectiva em história da física: da física dos gases à mecânica estatística*, v. 2. São Paulo, Livraria da Física.
- GONÇALVES, A. D. C., MARTINEZ, A. S., DA SILVA, F. C., 2008, “Solution of the Doppler broadening function based on the fourier cosine transform”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 35, n. 10, pp. 1878–1881. doi: 10.1016/j.anucene.2008.04.003.
- GONÇALVES, A. C., 2010, *CÁLCULO DA FUNÇÃO DE ALARGAMENTO DOPPLER UTILIZANDO ANÁLISE DE FOURIER*. Tese de Doutorado, Tese (Doutorado em Engenharia Nuclear)-Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- GREENE, N., LUCIUS, J., PETRIE, L., et al., 1976, *AMPX: A modular code system for generating coupled multigroup neutron-gamma libraries from ENDF/B*. Oak Ridge National Lab., Tenn. (EUA).
- GUEDES, G., GONÇALVES, A. C., PALMA, D. A., 2017, “The doppler broadening function using the kaniadakis distribution”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 110, pp. 453–458. doi: 10.1016/j.anucene.2017.06.057.
- HOLLAND, J. H., OTHERS, 1992, *Adaptation in natural and artificial systems: an introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence*. MIT press.
- HUTCHINS, B., COWAN, C., KELLEY, M., et al., 1971, *ENDRUN-II: A COMPUTER CODE TO GENERATE A GENERALIZED MULTIGROUP DATA FILE FROM ENDF/B*. General Electric Co., Sunnyvale, Calif. Breeder Reactor Dept. doi: 10.2172/4739228.
- IAEA, 2022, *Nuclear Power Reactors in the World 2022 Edition*. Vienna, International Atomic Energy Agency.

- KANIADAKIS, G., 2001a, “H-theorem and generalized entropies within the framework of nonlinear kinetics”, *Physics Letters A*, v. 288, n. 5-6 (out.), pp. 283–291. doi: 10.1016/s0375-9601(01)00543-6.
- KANIADAKIS, G., 2001b, “Non-linear kinetics underlying generalized statistics”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 296, n. 3, pp. 405–425. ISSN: 0378-4371. doi: [https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(01\)00184-4](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(01)00184-4).
- KANIADAKIS, G., 2005, “Statistical mechanics in the context of special relativity. II.” *Physical Review E*, v. 72, n. 3, pp. 036108. doi: 10.1103/PhysRevE.72.036108.
- KANIADAKIS, G., SCARFONE, A., SPARAVIGNA, A., et al., 2017, “Composition law of κ -entropy for statistically independent systems”, *Physical Review E*, v. 95, n. 5, pp. 052112. doi: 10.1103/PhysRevE.95.052112.
- KANIADAKIS, G., 2002, “Statistical mechanics in the context of special relativity”, *Physical review E*, v. 66, n. 5, pp. 056125. doi: 10.1103/PhysRevE.66.056125.
- KESHAVAMURTHY, R., HARISH, R., 1993, “Use of Padé Approximations in the Analytical Evaluation of the $J(\theta, \beta)$ Function and its Temperature Derivative”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 115, n. 1, pp. 81–88. doi: 10.13182/NSE93-A35526.
- KIUSALAAS, J., 2015, *Numerical Methods in Engineering with MATLAB®*. 3 ed. Cambridge, Cambridge University Press. doi: 10.1017/CBO9781316341599.
- KREMER, G. M., 2005, *Uma Introdução à Equação de Boltzmann*. São Paulo, Edusp.
- LAMARSH, J. R., BARATTA, A. J., 2001, *Introduction to nuclear engineering*. 3 ed. New Jersey, Prentice Hall.
- MARGUET, S., 2017, *The Physics of Nuclear Reactors*. 1 ed. France, Springer International Publishing. doi: 10.1007/978-3-319-59560-3.
- MARTÍN, P., DONOSO, G., ZAMUDIO-CRISTI, J., 1980, “A modified asymptotic Padé method. Application to multipole approximation for the plasma dispersion function Z ”, *Journal of Mathematical Physics*, v. 21, n. 2, pp. 280–285. doi: 10.1063/1.524411.

- MIZRAHÍ, S. S., GALETTI, D., 2016, *Física Nuclear e de Partículas - Uma Introdução*. São Paulo, Editora Livraria da Física.
- MOORE, D., MCCABE, G., 1993, *Introduction to the Practice of Statistics*. EUA, Freeman.
- MURRAY, R., HOLBERT, K. E., 2014, *Nuclear energy: an introduction to the concepts, systems, and applications of nuclear processes*. Elsevier.
- PALMA, D. A. P., MARTINEZ, A. S., SILVA, F. C., 2006, “The Derivation of the Doppler Broadening Function using Frobenius Method”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 43, n. 6 (jun.), pp. 617–622. doi: 10.1080/18811248.2006.9711141.
- PALMA, D. A. P., 2007, *FORMULAÇÕES ANALÍTICAS PARA AS FUNÇÕES DE ALARGAMENTO DOPPLER*. Tese de Doutorado, Tese (Doutorado em Engenharia Nuclear)-Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- PATHRIA, R. K., 1996, *Statistical Mechanics*. Butterworth-Heinemann.
- SALINAS, S. R., 2018, *Introdução à Física Estatística*. São Paulo, Edusp.
- SEKERKA, R. F., 2015, *Thermal Physics: Thermodynamics and Statistical Mechanics for Scientists and Engineers*. Elsevier.
- SHANKS, D., 1955, “Non-linear Transformations of Divergent and Slowly Convergent Sequences”, *Journal of Mathematics and Physics*, v. 34, n. 1-4 (abr.), pp. 1–42. doi: 10.1002/sapm19553411.
- TADA, K., KUNIEDA, S., NAGAYA, Y., 2018, “Nuclear data processing code FRENDY version 1”, *Japan Atomic Energy Agency, Ibaraki, Japan, JAEA-Data/Code*, v. 14. doi: 10.11484/jaea-data-code-2018-014.
- TSALLIS, C., 1988, “Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics”, *Journal of Statistical Physics*, v. 52, n. 1-2 (jul.), pp. 479–487. doi: 10.1007/bf01016429.
- VARGAS, J. V., ARAKI, L. K., 2017, *Cálculo numérico aplicado*. Barueri-SP, Manole.
- YESILYURT, G., MARTIN, W. R., BROWN, F. B., 2012, “On-the-Fly Doppler Broadening for Monte Carlo Codes”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 171, n. 3 (jul.), pp. 239–257. doi: 10.13182/nse11-67.
- ZWILLINGER, D., JEFFREY, A., 2007, *Table of integrals, series, and products*. UK, Elsevier.

Apêndice A

Algoritmo Genético

A.1 Introdução

Algoritmos Genético (AGs) foi inventado por John Holland e desenvolveu essa ideia em seu livro: “Adaptação em sistemas naturais e artificiais”, no ano de 1975. Holland propôs AG como método heurístico baseado na “Sobrevivência do mais apto”. O (AG) foi descoberto como uma ferramenta útil para problemas de busca e otimização (HOLLAND *et al.*, 1992).

Os Algoritmos Genéticos (AG) são técnicas de otimização inspirada na teoria da evolução das espécies de Charles Darwin e na estruturação cromossômica das características dos seres vivos, que consiste em um método estocástico de busca que percorre um possível espaço de soluções em busca de uma solução ótima para o problema. Primeiramente, codifica-se um conjunto de soluções candidatas (população), sendo cada candidato desta população um indivíduo. Escolhida a população inicial são aplicados procedimentos de recombinação, mutação e seleção aos indivíduos dessa população, gerando uma nova população de indivíduos que na média seria melhor do que a anterior, de acordo com uma função de adequabilidade que diz o quão adaptados estão (HOLLAND *et al.*, 1992).

Assim como acontece no meio ambiente, em um AG existe um grupo de indivíduos que compete entre si para garantir a própria sobrevivência e assegurar que suas características sejam passadas adiante através da prole. Nessa analogia, cada indivíduo do AG é, de fato, uma solução candidata para o problema em questão que, por sua vez, faz o papel do próprio meio-ambiente, já que estabelece os critérios que permitem avaliar se um indivíduo/solução é adaptado ou não. O processo de solução consiste em selecionar a população que irá gerar novos indivíduos, formando uma população intermediária denominada mating pool e aplicar os operadores de cruzamento e mutação a essa população.

Possivelmente esses operadores podem gerar indivíduos fora da solução viável.

Podem-se descartar esses indivíduos ou transformá-los, por meio de conversão, em indivíduos que estejam dentro do conjunto de soluções viáveis. No caso de problemas onde a solução pode estar frequentemente na fronteira da região viável é consistente utilizar a técnica de penalização de indivíduos que saem dessa região, deste modo, casualmente um indivíduo inviável pode ser escolhido para ser parte do mating pool da nova geração e a partir dele serem gerados indivíduos que caiam dentro da fronteira de solução.

Os parâmetros que podem influenciar o desempenho do algoritmo são apresentadas nas próximas seções.

A.2 População e Indivíduos

População é o conjunto de possíveis soluções para o problema descrito, gerado a priori de forma aleatória e a posteriori através de recombinações da população inicial. Cada uma dessas possíveis soluções é um indivíduo que carrega consigo as informações que o tornam mais ou menos aptos em relação ao critério avaliado. Essas informações por sua vez, estão impressas em seu “código genético” que matematicamente é representado como um vetor numérico. Os principais tipos de representação desses vetores são: a binária, real, permutação inteira ou simbólica. Essa estrutura representativa de cada indivíduo de uma população também é chamada de cromossomo e corresponde a uma codificação da solução do problema proposto. Este cromossomo, por sua vez, é dividido em várias partes que codificam uma característica do indivíduo, chamadas de genes. Cada gene corresponde a um escalar que compõe o vetor-cromossomo (HOLLAND *et al.*, 1992).

As melhores soluções contam com uma maior probabilidade de “sobreviver” e através de operadores genéticos gerar outras soluções (ou “descendentes”) de boa qualidade. Da combinação de bons indivíduos podem surgir outros ainda melhores, que tenham herdado as boas características daqueles que lhes deram origem. Cada iteração do processo é chamada de geração. Após várias gerações existe uma grande probabilidade de que a população tenha aumentado a sua qualidade média, isto é, seja composta por indivíduos melhor adaptados ao ambiente em questão - o problema. Nesse ponto, as soluções candidatas tendem a ser mais parecidas.

A.3 Operadores Genéticos

Os AGs modificam os indivíduos da população, possibilitando a sua evolução através dos operadores genéticos. Seu objetivo é explorar regiões desconhecidas do espaço de busca a fim de encontrar melhores soluções.

A.4 Seleção

A seleção é a responsável pela perpetuação de boas características na espécie. É no estágio de seleção que os indivíduos são escolhidos para posterior cruzamento, formando o *matting pool*. Nesse ponto, faz-se uso do grau de adequação (*fitness*) de cada um, sendo efetuado um sorteio onde os mais aptos têm maiores probabilidades de reprodução. Esse grau é calculado a partir da função de avaliação de cada indivíduo, e determina o quão apto ele está para a reprodução em relação à população que ele pertence.

A.5 Cruzamento

Uma vez selecionados esses indivíduos, eles passam com uma probabilidade pré-estabelecida pelo processo de cruzamento (*crossover*), onde parte dos genes dos pais são combinados para a geração dos filhos. Espera-se obviamente uma evolução da prole em relação aos pais, devido à combinação das boas características tanto do pai quanto da mãe. Porém, pode haver piora de alguns membros resultantes de cruzamento, que neste caso são descartados do *matting pool* seguinte.

A.6 Mutação

O operador mutação é responsável pelo aumento da diversidade da população através da alteração aleatória de um ou mais genes com uma probabilidade denominada taxa de mutação. A importância desse operador está na prevenção da convergência prematura do AG permitindo a exploração de regiões mais afastadas, na qual a maioria da população se encontra.

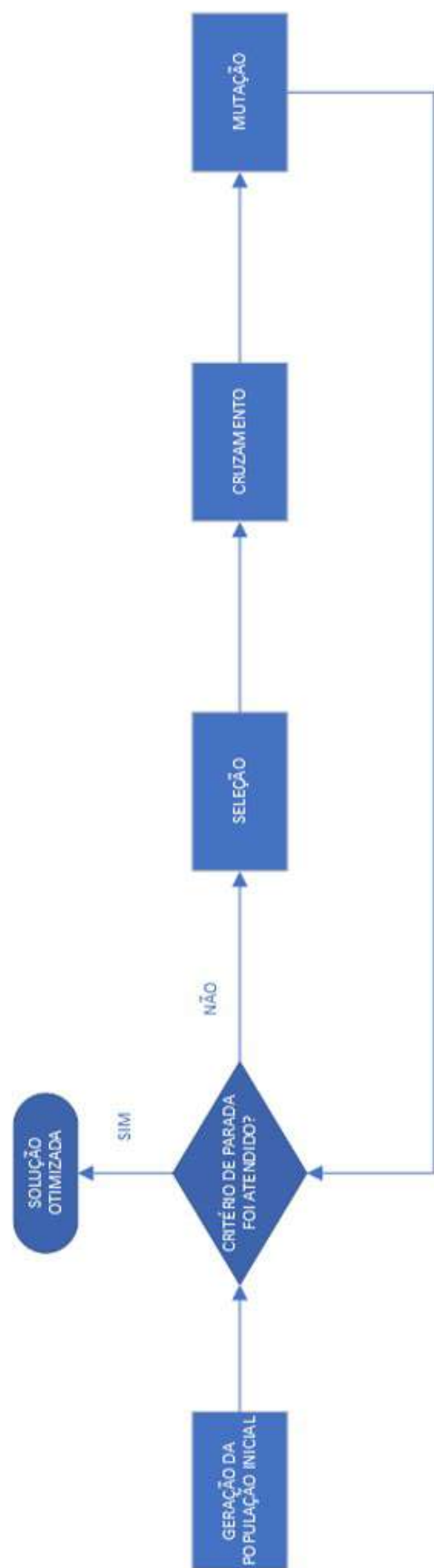


Figura A.1: Fluxograma básico do AG.

Apêndice B

Regressão Polinomial

B.1 Introdução

O propósito principal da regressão na ciência de dados é a previsão. É útil ter isso em mente, já que a regressão, sendo um método estatístico antigo e consagrado na literatura, traz uma bagagem que é mais relevante ao seu papel de modelagem explicativa tradicional do que à previsão.

Algumas técnicas de Regressão → árvore de decisão, floresta aleatória, máquinas de vetores de resposta, redes neurais, algoritmo genético, Machine Learning, Deep Learning entre outros. Na prática, o cálculo da regressão é baseado no seguinte modelo simplificado:

$$\boxed{DADOS = AJUSTE + ERROS} \quad (B.1)$$

As técnicas que buscam analisar e interpretar as informações básicas dos dados coletados fazem parte de um conjunto chamado de Investigação ou Estatística Descritiva. A solução para o problema é uma função de aproximação contínua que represente adequadamente o comportamento da distribuição de pontos dados (MORE e MCCABE, 1993). Há duas técnicas para resolver esse problema (VARGAS e ARAKI, 2017):

- i) Na interpolação, o polinômio gerado irá invariavelmente passar por todos os pontos da tabela utilizada no cálculo, com um polinômio de grau (n-1);
- ii) No ajuste de curvas, o polinômio gerado passa pelo melhor caminho entre os pontos da tabela, mas que não necessita passar exatamente sobre os pontos. O ajuste de curvas normalmente utiliza polinômios de grau menor.

- iii) Se o polinômio gerado no ajuste de curvas for de grau $(n-1)$, ele será idêntico ao polinômio gerado na interpolação. Como as variáveis em um ajuste de curvas são provenientes de experimentos, devemos entender melhor os tipos de relação que temos entre as variáveis.

B.1.1 Ajuste linear simples

O tipo de relação mais simples entre duas variáveis é a relação linear. Nesta relação, temos uma variável independente “ x ” relacionada a uma variável resposta ou dependente “ y ” por meio de um modelo linear, por exemplo:

$$y_i = b_0 + b_1x_i + \epsilon_i, \quad (\text{B.2})$$

em que o resíduo: ϵ_i = observado - estimado.

B.1.2 Ajuste Linear Múltiplo

Quando temos mais de uma variável independente “ x ” para uma única variável dependente “ y ”, devemos utilizar a regressão linear múltipla para relacionarmos todas elas.

O Ajuste linear múltiplo parte do princípio de que é possível encontrar um polinômio, tal qual:

$$y_i = b_0 + b_1x_{i1} + b_2x_{i2} + \dots + b_px_{ip} + \epsilon_i. \quad (\text{B.3})$$

Dessa forma, o objetivo é encontrar os diversos parâmetros $b_0, b_1, b_2 \dots b_p$.

B.1.3 Ajuste Polinomial

Um caso particular do ajuste linear múltiplo é aquele em que queremos ajustar um polinômio de grau “ g ”. Neste caso, teremos somente uma variável independente “ x ” relacionada a uma variável dependente “ y ” através de um polinômio do tipo:

$$y_i = b_0 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_gx^g + \epsilon_i. \quad (\text{B.4})$$

Apêndice C

Análise do Código Desenvolvido

Na tabela $\tilde{\xi}^{eq}$ (C.1) encontra-se o resultado obtido do polinômio para cada um dos pontos especificados. Além disso, é possível estabelecer um ponto exato, ou seja, obter o valor sem precisar interpolar o resultado da tabela (5.1) referencial obtida diretamente da equação (5.1). A tabela (C.2) representa valores dos pesos de cada ponto $\tilde{\xi}$ calculado para $\kappa = 0, 1$ seguindo a equação (5.4).

Tabela C.1: Valores de $\tilde{\xi}^{eq}$ obtidos para $\kappa = 0, 1$ calculados pela Eq. (5.4).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,049	0,049	0,048	0,049	0,050	0,050	0,050	0,050	0,050	0,049
0,10	0,100	0,099	0,100	0,098	0,098	0,098	0,097	0,098	0,099	0,098
0,15	0,150	0,149	0,149	0,148	0,148	0,148	0,147	0,156	0,148	0,140
0,20	0,198	0,198	0,197	0,197	0,197	0,196	0,200	0,200	0,197	0,160
0,25	0,246	0,246	0,246	0,246	0,248	0,265	0,250	0,248	0,245	0,169
0,30	0,295	0,296	0,295	0,295	0,294	0,300	0,300	0,297	0,283	0,189
0,35	0,345	0,345	0,345	0,345	0,340	0,349	0,347	0,345	0,315	0,190
0,40	0,395	0,396	0,396	0,396	0,409	0,397	0,395	0,390	0,340	0,396
0,45	0,444	0,445	0,445	0,443	0,448	0,445	0,442	0,440	0,377	0,408
0,50	0,492	0,492	0,492	0,491	0,497	0,494	0,492	0,488	0,419	0,715

Tabela C.2: Pesos de cada ponto $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 1$ segundo a Eq. (5.4).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,61100	0,2170	0,9070	0,5550	0,9680	0,3300	0,1690	0,9190	0,0591	0,1120
0,10	0,08710	0,0532	0,9180	0,4520	0,3230	0,1280	0,2040	0,0265	0,9910	0,3690
0,15	0,26600	0,3600	0,8940	0,2880	0,0064	0,0002	0,2420	0,0118	0,0087	0,9830
0,20	0,07080	0,3750	0,9690	0,0009	0,7250	0,0121	0,9230	0,4410	0,0089	0,0079
0,25	0,91300	0,1090	0,6250	0,4930	0,8500	0,0236	0,1180	0,0225	0,9830	0,9980
0,30	0,93000	0,0764	0,7130	0,7440	0,0059	0,7910	0,6880	0,0459	0,0123	0,0024
0,35	0,99100	0,8600	0,9990	0,2620	0,0953	0,7830	0,1640	0,8150	0,0032	0,0772
0,40	0,01130	0,7650	0,7110	0,4740	0,1090	0,1290	0,5220	0,4040	0,3670	0,0030
0,45	0,07800	0,1560	0,9870	0,0294	0,5610	0,7220	0,3140	0,0223	0,0415	0,1170
0,50	0,06030	0,1110	0,0775	0,9940	0,0456	0,2400	0,8670	0,0894	0,0118	0,5640

A próxima etapa é comparar os resultados obtidos do polinômio com a tabela referência, ou seja, obter o erro relativo percentual, conforme expressão a seguir:

$$erro_1 = \frac{|\tilde{\xi}_{aj} - \tilde{\xi}|}{\tilde{\xi}} \times 100. \quad (C.1)$$

Se for comparar essa tabela de erro percentual (C.4), com a tabela de erro percentual (5.6) obtido por meio da função "*fit*" verifica-se que, os valores não estão próximos, sendo que o erro percentual é muito maior para a equação (5.4). Isso ocorre porque não foram aplicados os valores dos pesos (C.2). Dessa forma, para aplicar os pesos obtidos por meio do AG, reescreve-se a seguinte relação:

$$erro_{percentual} = \sqrt{w_i} \times erro_1. \quad (C.2)$$

Dessa maneira, se comparar esse erro da função "*fit*" os valores estão muito próximos ou iguais. Outro cálculo que pode ser feito é comparar o resíduo por meio do polinômio e o resíduo da função "*fit*". O resíduo será dado por:

$$\epsilon_i = (\tilde{\xi}_{aj_i} - \tilde{\xi}_i). \quad (C.3)$$

Ajustando o cálculo, usando os pesos, tem-se que:

$$res_i = \sqrt{w_i} \times \epsilon_i, \quad (C.4)$$

os resultados obtidos estão muito próximos. Portanto, pode-se afirmar que foram esses cálculos aplicados na função "*fit*", validando assim, os dados na programação principal.

C.0.1 Solução do Polinômio para os Parâmetros Nucleares

Para obter a solução do polinômio para um ponto específico, é necessário inserir o ponto x e ξ que deseja executar.

O algoritmo irá resolver o polinômio para esses dois pontos. Provavelmente, o erro tende a ser maior que para os pontos especificados, pois não é aplicado aos pesos, visto que não possui dado experimental do ponto que está analisando.

Para essa questão de comparação, a figura (C.1) representa os dados referencias e do polinômio com a presença dos pesos. Nesse sentido, verifica-se que os pontos tendem a coincidir com a superfície na maioria dos casos. Já a figura (C.2) apresenta os resultados sem os pesos e, por isso, a superfície do polinômio não atinge completamente todos os pontos.

Desse modo, temos uma boa representação dos resultados pelo polinômio e pode ser otimizado com a presença de pesos. Caso deseje um ponto intermediário, é importante analisar a superfície e verificar se na região que deseja obter a medida, tem um erro local significativo, como seria o caso de $x = 40$ e $\xi = 0,4$. Logo, o cuidado deve ser maior nas regiões de maiores valores de x e ξ , uma vez que para os demais valores, o polinômio descreve bem os resultados.

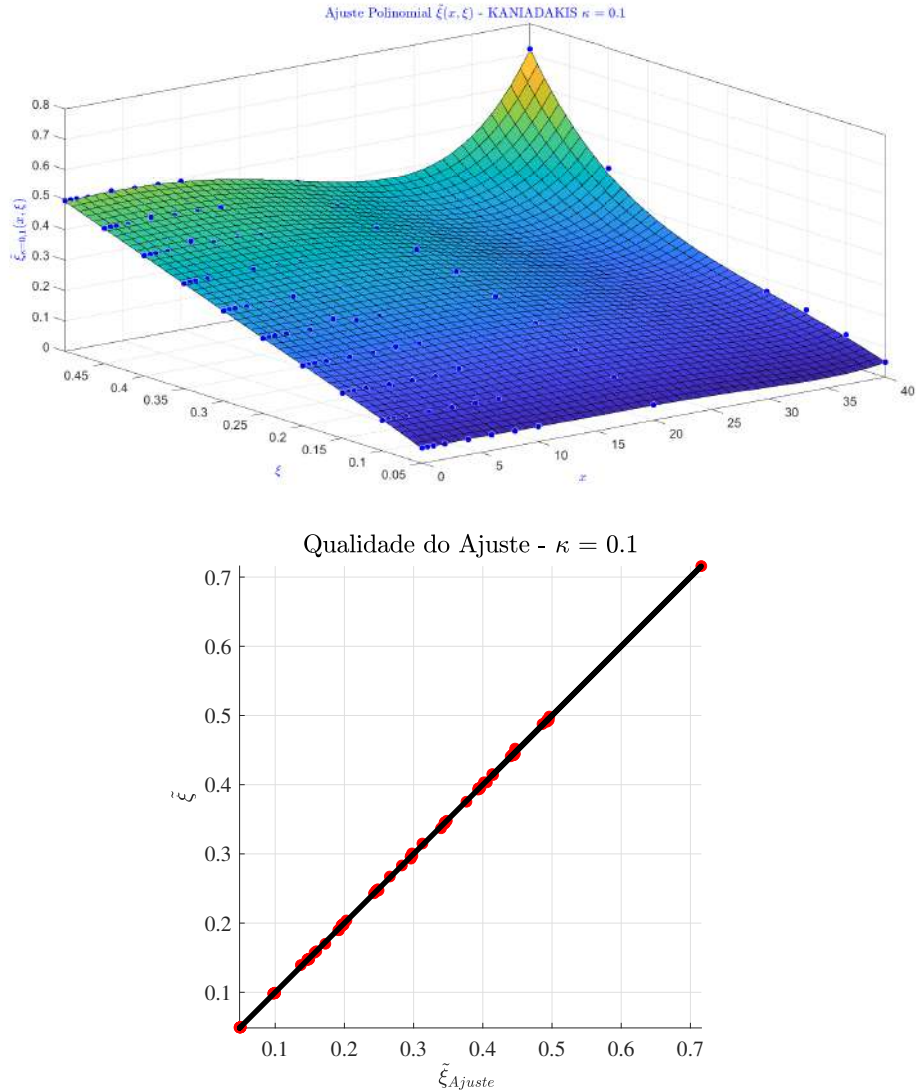


Figura C.1: Ajuste Polinomial com Pesos.

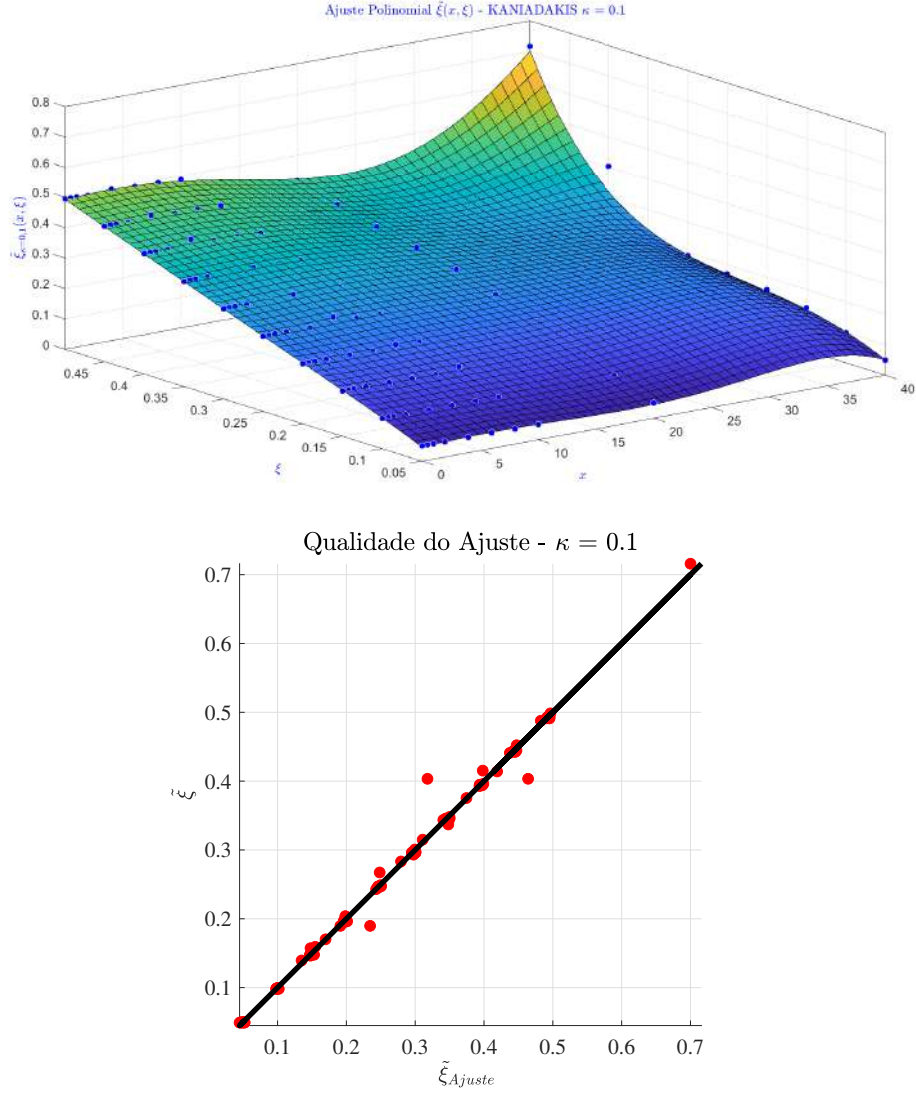


Figura C.2: Ajuste Polinomial sem Pesos.

C.0.2 Cálculo de Ponto Específico

Para justificar a metodologia da regressão polinomial, a equação (C.4) com uma simples manipulação algébrica, pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\epsilon_i = \frac{res_i}{\sqrt{w_i}} \quad (C.5)$$

Como esse erro será a diferença entre o polinômio e o dado de referência, verifica-se que:

$$\epsilon_i = (\tilde{\xi}_i - \tilde{\xi}_{aj_i}). \quad (C.6)$$

Assim,

$$\tilde{\xi}_i = \tilde{\xi}_{aj_i} + \epsilon_i. \quad (C.7)$$

Desse modo, é provado que o polinômio necessita do resíduo e do peso, para obter o resultado exato nos pontos definidos. Assim, essas etapas estão apresentadas na tabela (C.3) conforme precisão da calculadora científica.

Tabela C.3: Cálculo de ponto específico.

Parâmetros nucleares		Pesos	res_i	ϵ	$\tilde{\xi}$	$\tilde{\xi}_{aj}$
$x = 40$	$\xi = 0,40$	0,0030	0,00791	0,144416181	0,40345	$0,25904 + 0,144416181 = 0,40346$
$x = 40$	$\xi = 0,30$	0,00236	0,0009	0,018526206	0,18971	$0,17111 + 0,018526206 = 0,189636206$
$x = 0$	$\xi = 0,10$	0,08710	- 0,00097	- 0,003286719616	{0,09877	$0,10205 - 0,003286719616 = \{0,09876328$
$x = 20$	$\xi = 0,50$	0,01180	- 0,00531	- 0,048882512	{0,41405	$0,46277 - 0,048882512 = 0,41405$

Na tabela (C.4) foram utilizados alguns valores, a fim de estudar melhor a metodologia do ajuste e o processo do programa, visto que esses valores apresentaram erros percentuais altíssimos.

Tabela C.4: Erro relativo percentual de $\tilde{\xi}(x, \xi)$ calculado para $\kappa = 0, 1$ segundo a Eq. (5.4).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	1,01	1,68	1,94	1,56	0,989	3,24	3,58	1,69	6,3	4,86
0,1	3,32	1,98	0,921	0,512	1,73	2,19	2,83	3,92	0,968	0,606
0,15	2,26	1,32	0,605	0,318	0,812	0,495	0,28	6,97	3,03	0,518
0,20	0,775	0,263	0,0754	0,36	0,141	1,7	2,07	0,371	3,32	2,32
0,25	0,183	0,39	0,474	0,327	0,874	6,49	0,986	1,63	0,76	0,534
0,30	0,434	0,491	0,447	0,111	1,62	0,182	1,26	1,25	1,82	9,81
0,35	0,154	0,162	0,0856	0,279	3,23	0,351	0,788	0,0889	2,72	0,44
0,40	0,28	0,271	0,334	0,668	4,25	0,326	0,15	1,03	1,63	35,8
0,45	0,324	0,315	0,378	0,73	1,24	0,231	0,168	1,29	2,56	3,41
0,50	0,745	0,681	0,547	0,0175	1,03	0,15	0,173	0,0226	11,8	0,226

Conclui-se que a metodologia em desenvolvimento se encontra em sintonia com os modelos estatísticos elencadas no Apêndice (B.1), possibilitando assim um aperfeiçoamento desta proposta de tese.