



AVALIAÇÃO DAS APROXIMAÇÕES DE BETHE-PLACZEK NA FUNÇÃO DE ALARGAMENTO DOPPLER

Felipe Costa de Paiva

Dissertação de Mestrado 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 Mestre em Engenharia Nuclear.

Orientadores: Aquilino Senra Martinez

Daniel Artur Pinheiro Palma

Rio de Janeiro

Fevereiro de 2013

AVALIAÇÃO DAS APROXIMAÇÕES DE BETHE-PLACZEK NA FUNÇÃO DE
ALARGAMENTO DOPPLER

Felipe Costa de Paiva

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

Examinada por:

Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc.

Prof. Daniel Artur Pinheiro Palma, D.Sc.

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc.

Prof. Antônio Carlos de Abreu Mol, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

FEVEREIRO DE 2013

Paiva, Felipe Costa de

Avaliação das Aproximações de Bethe-Placzek na Função de Alargamento Doppler / Felipe Costa de Paiva. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.

XII, 78 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Aquilino Senra Martinez

Daniel Artur Pinheiro Palma

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2013.

Referências Bibliográficas: p. 73 - 76

1. Aproximações de Bethe-Placzek. 2. Alargamento Doppler. 3. Termo Adicional. I. Martinez, Aquilino Senra, et al. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

Dedicatória

Dedico todo o meu trabalho ao Senhor Jesus Cristo, Pai e eterno Mestre.

À minha mãe por todos os dias de minha vida.

Aos amigos, que sempre ao meu lado, fizeram de tudo por mim e continuam fazendo.

Ao amigo Daniel, que depositou confiança e me fez um homem melhor, por seu exemplo.

Agradecimentos

Primeiramente ao Professor e grande mestre Aquilino Senra Martinez, por sua dedicação, trabalho e brilhantismo ao educar e conduzir seus alunos. Por sua paciência e inesgotável esperança de um futuro melhor para aqueles que passaram por sua vida. Agradeço por toda confiança e carinho dedicados a mim.

Ao querido professor Fernando Carvalho da Silva, por sua perspicácia, sugestões e sua enorme disposição de sempre ajudar todos.

Ao Professor e amigo Daniel Artur Pinheiro Palma por seu enorme coração e cuidado. Tenho orgulho de ser aluno e eterno aprendiz deste professor que nunca se cansa de dar o melhor de si na construção e lapidar de cada aluno. Agradeço por sua dedicação, paciência, carinho e amizade que nunca esquecerei.

Ao Programa de Engenharia Nuclear (PEN / COPPE / UFRJ) por sua estrutura sólida que permite o crescimento de cada aluno. Por seus funcionários sempre dispostos a fazer o melhor e ao coordenador Su Jian por sua maestria e destreza ao conduzir magnificamente o programa.

Aos amigos: Haimon, Alessandra, Luciano Nascimento, Ricardo Ferreira, Kaio e Camila. O que seria de mim sem vocês?

À minha Mãe! Sempre ao meu lado para todos os meus planos. Seu inesgotável amor. Obrigado por todos os conselhos, dias em claro, carinho e tudo o que há de bom. Tudo o que eu sou e tenho de bom, certamente veio dela... Um grande amor em minha vida.

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

AVALIAÇÃO DAS APROXIMAÇÕES DE BETHE-PLACZEK NA FUNÇÃO DE ALARGAMENTO DOPPLER

Felipe Costa de Paiva

Fevereiro/2013

Orientadores: Aquilino Senra Martinez

Daniel Artur Pinheiro Palma

Programa: Engenharia Nuclear

O movimento de agitação térmica dos núcleos é representado na seção de choque microscópica da interação nêutron núcleo através da função de alargamento Doppler, sendo de suma importância um tratamento acurado da mesma. Nesta dissertação, o efeito de desconsiderar a primeira das três aproximações propostas por Bethe-Placzek na dedução da forma integral da função de alargamento Doppler $\psi_{x,\xi}$ foi analisado. Como consequência, um termo adicional $\psi_a_{x,\xi}$ foi obtido, também em forma integral. Diferente da função de alargamento Doppler convencional, este termo adicional possui explicitamente em sua forma funcional parâmetros da ressonância a ser levada em consideração. Uma expressão analítica baseada no método de Frobenius foi obtida para este termo adicional e uma análise sistemática identificou sob que circunstâncias $\psi_a_{x,\xi}$ torna-se importante. Os cálculos realizados com este formalismo estendido apresentaram até 67% de discrepância em relação ao usualmente adotado, que leva em consideração todas as aproximações de Bethe-Placzek.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

EVALUATION OF BETHE-PLACZEK APPROXIMATIONS ON THE DOPPLER BROADENING FUNCTION

Felipe Costa de Paiva

February / 2013

Advisors: Aquilino Senra Martinez

Daniel Artur Pinheiro Palma

Department: Nuclear Engineering

The thermal agitation movement in the cores is represented in the microscopic cross section of the neutron-core interaction via the Doppler Broadening function, where its accurate treatment is of paramount importance. This dissertation studies the effects from disregarding the first of the three approximations proposed by Bethe-Placzek in the deducting of the integral form of the Doppler Broadening function $\psi(x, \xi)$. As a result, an additional term $\psi_a(x, \xi)$ was obtained, also in integral form. Differently from the conventional Doppler Broadening function, this additional term is shown to clearly have resonance parameters in its functional form that have to be taken into account. An analytical expression based on the Frobenius Method was obtained for this additional term, where a systematic analysis identified under which circumstances the $\psi_a(x, \xi)$ term becomes important. The calculations made with this extended formalism showed a discrepancy of up to 67% in relation to that which is usually adopted, which considers all the Bethe-Placzek approximations.

SUMÁRIO

CAPÍTULO I – Introdução.....	1
CAPÍTULO II – A função de alargamento Doppler considerando as aproximações de Bethe – Placzek.....	5
2.1 - Equação do alargamento Doppler com base nas aproximações de Bethe-Placzek	5
2.2 - Propriedades da função do alargamento Doppler.....	16
2.3 - Aproximações analíticas para a função de alargamento Doppler.....	18
2.3.1 - Expansão assintótica.....	19
2.3.2 - Métodos de Beynon e Grant.....	20
2.3.3 – Métodos de Campos e Martinez.....	21
2.3.4 – Método de Padé de 4 – polos.....	25
2.3.5 - Método de Frobenius.....	29
2.3.6 - Método da Transformada de Fourier.....	35
2.3.7 - Método da série de Fourier.....	38
2.3.8 - Representação da função $\psi(x, \xi)$ utilizando as expansões de Salzer	40
2.3.9 – Método de Mamedov.....	41
CAPÍTULO III – Relaxação da primeira aproximação de Bethe – Placzek.....	44
3.1 - Obtenção de uma expressão para o termo adicional proveniente da relaxação das aproximações de Bethe-Placzek.....	44
3.2 - Aproximação analítica do termo adicional.....	47
3.3 - Expansão em forma de séries da função de alargamento Doppler.....	49
CAPÍTULO IV – Resultados.....	53
4.1 - Resultados numéricos da função do alargamento Doppler.....	53
4.2 - Análises da expansão da função de alargamento Doppler.....	60

4.3 - A influência do termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ aplicado ao cálculo da seção de choque de absorção ressonante.....	66
CAPÍTULO V – Conclusões e perspectivas futuras.....	70
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	73
APÊNDICE A	77

SUMÁRIO DE FIGURAS

Figura 1 - Ressonâncias da função do alargamento Doppler (Gonçalves, 2010).....	16
Figura 2 - Comportamento da função do alargamento Doppler $\psi_{x,\xi}$ (azul) e do termo adicional $\psi_a_{x,\xi}$ (vermelho), considerando a primeira ressonância do ^{238}U	63
Figura 3 - Função de alargamento Doppler $\psi_{x,\xi}$ e do termo adicional $\psi_a_{x,\xi}$ variando o parâmetro x e fixando $\xi = 0.01$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U	64
Figura 4 - Função de alargamento Doppler $\psi_{x,\xi}$ e do termo adicional $\psi_a_{x,\xi}$ variando o parâmetro x e fixando $\xi = 0.02$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U	65
Figura 5 - Comportamento das funções de alargamento Doppler e do termo adicional fixando $\xi = 0.03$ e variando x	65
Figura 6 - Seção de choque de absorção, considerando a ressonância $E_0=6.673\text{eV}$ do ^{238}U e $\xi = 0.02$	67
Figura 7 - Seção de choque de absorção, considerando a ressonância $E_0=6.673\text{eV}$ do ^{238}U e $\xi = 0.03$	68
Figura 8 - Seção de choque de absorção considerando a ressonância $E_0=36.8\text{eV}$ do ^{238}U , e $\xi = 0.01$	68
Figura 9 - Seção de choque de absorção considerando a ressonância $E_0=36.8\text{eV}$ do ^{238}U , e $\xi = 0.02$	69
Figura 10 - Seção de choque de absorção considerando a ressonância $E_0=102.47\text{eV}$ do ^{238}U , e $\xi = 0.01$	69

SUMÁRIO DE TABELAS

Tabela 1 - Os coeficientes p e q da aproximação de Padé de 4 polos.....	26
Tabela 2 - Os coeficientes h , a e b da aproximação de Padé de 4 pólos.....	27
Tabela 3 - Função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ segundo as aproximações de Bethe-Placzek, calculada a partir da equação (2.28).....	54
Tabela 4 - Termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.6), considerando a primeira ressonância do ^{238}U	55
Tabela 5 - Função de alargamento Doppler completa $\psi_c(x, \xi) = \psi(x, \xi) - \psi_a(x, \xi)$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U	56
Tabela 6 - Desvio percentual entre as funções de alargamento Doppler completa e a função de alargamento Doppler convencional calculado pela fórmula $\% = 100 \times \left \frac{\psi(x, \xi) - \psi_c(x, \xi)}{\psi(x, \xi)} \right $, considerando a primeira ressonância do ^{238}U	57
Tabela 7 - Termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.11), considerando a primeira ressonância do ^{238}U	59
Tabela 8 - Desvio percentual calculado a partir da fórmula $\% = 100 \times \left \frac{\psi_a(x, \xi) - \psi_{\text{numerico}}(x, \xi)}{\psi_a(x, \xi)} \right $, considerando a primeira ressonância do ^{238}U	59
Tabela 9 - Termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\text{max}} = 5$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U	61
Tabela 10 - Termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\text{max}} = 10$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U	61

Tabela 11 - Termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\max} = 15$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U	61
Tabela 12 - Desvio percentual entre os valores obtidos para o termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\max} = 5$ e o método numérico de referência (Tabela 4), considerando a primeira ressonância do ^{238}U	62
Tabela 13 - Desvio percentual entre os valores obtidos para o termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\max} = 10$ e o método numérico de referência (Tabela 4), considerando a primeira ressonância do ^{238}U	62
Tabela 14 - Desvio percentual entre os valores obtidos para o termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\max} = 10$ e o método numérico de referência (Tabela 4), considerando a primeira ressonância do ^{238}U	62
Tabela 15 - Parâmetros nucleares de diferentes ressonâncias do isótopo ^{238}U	67

Capítulo 1

Introdução

O processo da fissão nuclear se dá por uma reação em cadeia, onde surgem novos núclídeos, que são chamados de produtos de fissão, nêutrons, radiação gama e uma grande quantidade de energia, que é utilizada pelas usinas nucleares na geração de energia elétrica. Os nêutrons originados da fissão colidem com outros núcleos fissionáveis dando continuidade ao processo de fissão.

No Brasil, estão em operação reatores nucleares do tipo PWR (Pressurized Water Reactor), que são reatores projetados para operar com nêutrons de baixa energia, na faixa térmica, por isso são chamados de reatores térmicos. Os nêutrons originados da fissão nascem com média de energia de 2 MeV e por isso precisam passar por uma moderação energética para alcançarem a faixa de energia necessária para a fissão (Lamarsh & Baratta, 2001). Neste caso, o projeto do PWR utiliza água leve como moderador, por ser um excelente redutor de energia dos nêutrons e refrigerante para o núcleo.

Em todos os reatores nucleares, uma parcela dos nêutrons em movimento térmico pode ser absorvida na região de ressonância e o tratamento das absorções ressonantes é essencial no projeto desses reatores. Este processo varia de acordo com a temperatura no reator e por isso deve ser tratado com bastante precisão devido à sua importância no processo de controle do reator. Isso se deve ao alargamento Doppler das ressonâncias (Duderstadt & Hamilton, 1976). Controlar as reações em cadeia dentro do núcleo para evitar acidentes por um evento imprevisto

e garantir a máxima eficiência energética do reator é uma das principais tarefas do físico de reatores.

O movimento de agitação térmica dos núcleos é adequadamente representado na seção de choque microscópica da interação nêutron-núcleo através da função de alargamento Doppler (Duderstadt & Hamilton, 1976) que é escrita da seguinte forma:

$$\Psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2} \int_{-2E/\Gamma}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \left[\exp\left(-\frac{(v-v_r)^2}{2v_{th}^2}\right) - \exp\left(-\frac{(v+v_r)^2}{2v_{th}^2}\right) \right], \quad (1.1)$$

onde v_r é a velocidade relativa nêutron-núcleo, v é o módulo da velocidade do nêutron, $v_{th} = \sqrt{\frac{kT}{M}}$ é o módulo da velocidade de cada átomo do alvo,

$\xi \equiv \frac{\Gamma}{(4E_0 kT / A)^{1/2}}$, com A sendo o número de Massa, T a temperatura absoluta, E_0 a energia que ocorre a ressonância e Γ a Largura total da ressonância média nas coordenadas do laboratório.

O comportamento da função $\Psi_{x,\xi}$ é bem conhecido na literatura e diferentes metodologias de cálculo numérico, analítico e semi-analítico (Kiusalaas, 2005) foram propostas nos últimos anos para o seu cálculo, o que prova que o assunto ainda está em pauta na comunidade científica. Ocorre que a equação (1.1), que será deduzida em detalhes no próximo capítulo, é proveniente de três

aproximações propostas por Bethe e Placzek considerando o formalismo de Briet-Wigner *single level* (Duderstadt & Hamilton, 1976).

O objetivo desta dissertação de mestrado é avaliar o efeito de desconsiderar uma das aproximações propostas por Bethe-Placzek, buscando um maior realismo na predição do comportamento neutrônico no núcleo do reator.

Basicamente, existem três aplicações principais que são diretamente relacionadas com a função $\Psi_{x,\xi}$, a saber: o cálculo das seções de choque de absorção ressonante, dos fatores de autoproteção (Palma et. al., 2006) e das integrais de ressonância (Stacey, 2001). As seções de choque de espalhamento também dependem do cálculo acurado da função $\Psi_{x,\xi}$, porém como também possuem dependência explícita do termo de interferência (Duderstadt & Hamilton, 1976), foge ao escopo desta dissertação.

Além de um maior refinamento do cálculo da função $\Psi_{x,\xi}$ ser, pelo menos do ponto de vista teórico, desejável, espera-se que todas as aplicações mencionadas no parágrafo anterior sejam impactadas positivamente. Nesta dissertação de mestrado, propõe-se estudar o efeito de relaxar uma das aproximações de Bethe-Placzek nas seções de choque de absorção, estudando sistematicamente os efeitos na variação de temperatura e energia dos nêutrons incidentes em ressonâncias isoladas.

A estrutura textual desta dissertação será organizada como a seguir.

No Capítulo 2, serão apresentadas as aproximações de Bethe-Placzec assim como a dedução da forma integral da função $\Psi_{x,\xi}$. Serão apresentadas também as propriedades bem estabelecidas desta função assim como os principais métodos de cálculo existentes na literatura.

No Capítulo 3, será apresentado o efeito de desprezar uma das três aproximações propostas por Bethe-Placzek, o que acarretará em um termo adicional à função $\Psi_{x,\xi}$. Este novo termo, também na forma de uma integral, será analisado e terá uma expressão analítica apresentada. Essa solução analítica é baseada na expressão da função de alargamento agora chamada convencional obtida a partir do Método de Frobenius (Palma, 2007).

No Capítulo 4, serão apresentados os resultados obtidos nesta dissertação. Uma análise sistemática das regiões de temperatura e energia típicas em reatores do tipo PWR mostrará a importância deste termo adicional, historicamente, negligenciado na literatura.

No Capítulo 5, encontram-se as conclusões obtidas nesta dissertação, assim como sugestões de trabalhos futuros.

Capítulo 2

A função de alargamento Doppler considerando as aproximações de Bethe – Placzek.

2.1 Equação do alargamento Doppler com base nas aproximações de Bethe-Placzek

No Brasil, são utilizados reatores do tipo PWR que utilizam água pesada como moderador, sendo reatores que funcionam com nêutrons moderados para a faixa térmica. Desta forma, ao projetar estes reatores, é necessário fazer um cálculo acurado nas equações que representam a absorção ressonante. É sabido que estas absorções variam com a temperatura do combustível por causa do efeito do alargamento Doppler para as ressonâncias.

Consideremos o combustível do reator em um meio com temperatura T. Este combustível possui núcleos pesados, em movimento térmico, que serão bombardeados pelos nêutrons moderados (Palma, 2007). A função de distribuição de Maxwell-Boltzmann (Pathria, 1972) relaciona estas velocidades com a temperatura da seguinte forma:

$$f(V) = N \left(\frac{M}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{MV^2}{2kT}} \quad (2.1)$$

onde,

- k = constante de Boltzmann;
- M = massa do núcleo;
- N = número de partículas;
- T = temperatura do meio;

O movimento das partículas é descrito pela seção de choque média de interação núcleo-nêutron, ao considerar os nêutrons como um gás ideal em equilíbrio térmico (Duderstadt & Hamilton, 1976), que se dá por:

$$\bar{\sigma}_{v,T} = \frac{1}{vN} \int d^3V (|\vec{v}-\vec{V}|) \sigma(|\vec{v}-\vec{V}|) f(\vec{V}) . \quad (2.2)$$

Observando que $\vec{V} = V\hat{\Omega}$ e $\vec{v}_r = \vec{v} - \vec{V}$. Aplicando uma transformação de variáveis em coordenadas esféricas, de forma que $d^3V = V^2 dV d\hat{\Omega}$ onde $d\hat{\Omega} = \sin\theta d\theta d\phi$ é o ângulo sólido (Palma, 2007), temos:

$$\bar{\sigma}_{v,T} = \frac{1}{vN} \int_0^\infty dV V^2 f(\vec{V}) \int_{4\pi} v_r \sigma(v_r) d\hat{\Omega} . \quad (2.3)$$

Integrando em relação ao ângulo azimutal ϕ , tem-se que:

$$\bar{\sigma}_{v,T} = \frac{2\pi}{vN} \int_0^\infty dV V^2 f(\vec{V}) \int_0^\pi v_r \sigma(v_r) \sin\theta d\theta . \quad (2.4)$$

Uma transformação de variáveis se torna necessária, de modo que $\mu = \cos \theta$.

Por consequência, $d\mu = -\sin \theta d\theta$, logo os limites de integração ficam como

$\left\{ \begin{array}{l} \theta = 0, \Rightarrow \mu = 1 \\ \theta = \pi, \Rightarrow \mu = -1 \end{array} \right\}$, e ao colocar o sinal negativo em evidência, inverte-se os limites

de integração, de modo que a equação (2.4) poderá ser escrita da seguinte forma:

$$\bar{\sigma}_{v,T} = \frac{2\pi}{vN} \int_0^\infty dV V^2 f(\vec{V}) \int_{-1}^1 v_r \sigma(v_r) d\mu. \quad (2.5)$$

A partir da lei dos cossenos aplicada na definição de velocidade relativa, vem que

$$v_r^2 = v^2 + V^2 - 2vV\mu. \quad (2.6)$$

Sendo assim, os limites de integração são alterados de forma que:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu = 1, \Rightarrow v_r^2 = v^2 + V^2 - 2vV = (v - V)^2 \Rightarrow v_r = |v - V| \\ \mu = -1 \Rightarrow v_r^2 = v^2 + V^2 + 2vV = (v + V)^2 \Rightarrow v_r = |v + V| \end{array} \right\}$$

e por consequência,

$$d\mu = -\frac{v_r dv_r}{vV}. \quad (2.7)$$

Substitui-se as equações (2.6) e (2.7) na equação (2.5), para chegar a uma nova expressão para a seção de choque:

$$\bar{\sigma}_{v,T} = \frac{2\pi}{v^2 N} \int_0^\infty dV V f \bar{V} \int_{v-|V|}^{v+|V|} v_r^2 \sigma(v_r) dv_r. \quad (2.8)$$

Pela presença dos módulos, os limites serão sempre positivos. Desta forma, fica evidente a separação da equação (2.8) em duas integrais, uma considerando $v > V$ e outra considerando $v < V$ (Palma, 2007), resultando em:

$$\bar{\sigma}_{v,T} = \frac{2\pi}{v^2 N} \left[\int_0^v dV V f \bar{V} \int_{v-V}^{v+V} v_r^2 \sigma(v_r) dv_r + \int_v^\infty dV V f \bar{V} \int_{V-v}^{v+V} v_r^2 \sigma(v_r) dv_r \right]. \quad (2.9)$$

Ao lembrar que a massa do núcleo alvo é muito maior do que a massa do nêutron incidente é possível alterar os limites de integração de forma que $V = v_r$, logo:

$$\bar{\sigma}_{v,T} = \frac{2\pi}{v^2 N} \left[\int_0^v dV V f \bar{V} \int_{v-v_r}^{v+v_r} v_r^2 \sigma(v_r) dv_r + \int_v^\infty dV V f \bar{V} \int_{v_r-v}^{v+v_r} v_r^2 \sigma(v_r) dv_r \right]. \quad (2.10)$$

Neste momento, é conveniente que façamos a substituição da expressão da função de distribuição de Maxwell-Boltzmann na equação (Palma, 2007). Sendo assim, a equação (2.10) fica com a forma:

$$\bar{\sigma}_{v,T} = \frac{2\pi}{v^2} \left(\frac{M}{2\pi kT} \right)^{3/2} \left[\int_0^v dV V e^{-\frac{MV^2}{2kT}} \int_{v-v_r}^{v+v_r} v_r^2 \sigma(v_r) dv_r + \int_v^\infty dV V e^{-\frac{MV^2}{2kT}} \int_{v_r-v}^{v+v_r} v_r^2 \sigma(v_r) dv_r \right]. \quad (2.11)$$

É conveniente denotar $\beta^2 = \frac{M}{2kT}$ de modo que

$$\bar{\sigma}_{v,T} = \frac{2\beta^3}{v^2\sqrt{\pi}} \left[\int_0^v dVVe^{-\beta^2V^2} \int_{v-v_r}^{v+v_r} v_r^2 \sigma(v_r) dv_r + \int_v^\infty dVVe^{-\beta^2V^2} \int_{v_r-v}^{v+v_r} v_r^2 \sigma(v_r) dv_r \right]. \quad (2.12)$$

Substituir-se-á as variáveis de velocidade reduzidas $\varpi = \beta v$ e $\varpi_r = \beta v_r$, de forma que $\varpi_r = \beta v_r \Rightarrow d\varpi_r = \beta dv_r$ e $v \pm v_r = (\varpi \pm \varpi_r) / \beta$. Para facilitar os cálculos, os limites de integração foram trocados nas integrais, pois desta forma é notada uma resolução mais cômoda, uma vez que conhecemos o comportamento da função. Desta forma percebe-se que:

$$\bar{\sigma}_{v,T} = \frac{2\beta^2}{\varpi^2\sqrt{\pi}} \left[\int_{(\varpi-\varpi_r)/\beta}^{(\varpi+\varpi_r)/\beta} dVVe^{-\beta^2V^2} \int_0^{\varpi/\beta} \varpi_r^2 \sigma(\varpi_r) d\varpi_r + \int_{(\varpi_r-\varpi)/\beta}^{(\varpi+\varpi_r)/\beta} dVVe^{-\beta^2V^2} \int_{\varpi/\beta}^\infty \varpi_r^2 \sigma(\varpi_r) d\varpi_r \right]. \quad (2.13)$$

Integrando apenas na velocidade dos núcleos alvos (V), a equação (2.13) pode ser re-escrita da seguinte forma:

$$\bar{\sigma}_{v,T} = \frac{1}{\varpi^2\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \varpi_r^2 \sigma(\varpi_r) \left[e^{-(\varpi-\varpi_r)^2} - e^{-(\varpi+\varpi_r)^2} \right] d\varpi_r. \quad (2.14)$$

Para os níveis de energias ressonantes, é possível descrever como a seção de choque depende da energia, conhecida como a fórmula de Breit-Wigner que é válida para $T = 0K$ (Duderstadt & Hamilton, 1976). Esta fórmula é função da energia do centro de massa que é conhecida por

$$\sigma_\gamma(E_{CM}) = \sigma_0 \frac{\Gamma\gamma}{\Gamma} \left(\frac{E_0}{E_{CM}} \right)^{1/2} \frac{1}{1 + \frac{4}{\Gamma^2} (E_{CM} - E_0)^2}, \quad (2.15)$$

onde E_0 é o nível de energia que ocorre a ressonância e E_{CM} é a energia do sistema centro de massa. Nesta expressão, aparece o termo σ_0 que é a representação do valor da seção de choque total $\sigma_{total}(E)$ referente à energia E_0 da ressonância. Escrevendo σ_0 em termos do comprimento de onda reduzido λ_0 , resulta em:

$$\sigma_0 = 4\pi\lambda_0^2 \frac{\Gamma_n}{\Gamma} g = 2.608 \times 10^6 \frac{(A+1)^2}{A^2 E(eV)} \frac{\Gamma_n}{\Gamma} g . \quad (2.16)$$

Na expressão de σ_0 , aparece o termo g que se refere ao spin estático que é dado por $g = \frac{2J+1}{2(2I+1)}$, onde o spin nuclear é representado por I e o spin total por J (Sakurai, 1994).

Agora é possível obter uma expressão que vale para qualquer temperatura (Palma, 2007), para isso, basta fazer as substituições da equação (2.16) na equação (2.15). Lembrando que $\varpi = \beta v$, $\varpi_r = \beta v_r$ e $\varpi_r = \beta v_r \Rightarrow d\varpi_r = \beta dv_r$, tem-se que:

$$\bar{\sigma}_{v,T} = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \frac{\beta}{v^2 \sqrt{\pi}} \int_0^\infty dv_r \left(\frac{E_0}{E_{CM}} \right)^{1/2} \frac{v_r^2}{1 + \frac{4}{\Gamma^2} (E_{CM} - E_0)^2} \left[\frac{e^{-\beta^2(v-v_r)^2} - e^{-\beta^2(v+v_r)^2}}{2} \right], \quad (2.17)$$

onde a energia cinética no centro de massa E_{CM} depende explicitamente de v_r , em um sistema de dois corpos, da seguinte forma:

$$E_{CM} = \frac{M_r v_r^2}{2}, \quad (2.18)$$

sendo $M_r = \frac{mM}{m+M}$ a massa reduzida. Para um sistema em equilíbrio térmico sob a temperatura T , é plausível aproximar $v \approx v_r$ (Palma, 2007). Agora sim, é possível escrever a razão das energias como $\frac{E_{CM}}{E_0} = \frac{A+1}{A}$, sendo A a massa atômica do núcleo alvo. Fazendo:

$$y = \frac{2}{\Gamma} (E_{CM} - E_0) \quad (2.19.a)$$

$$x = \frac{2}{\Gamma} (E - E_0), \quad (2.19.b)$$

e considerando $\beta^2 = \frac{1}{2v_{th}^2}$, tem-se, a seguir, a expressão da seção de choque de captura radioativa, na vizinhança de uma ressonância resolvida centrada na energia E_0 (Canright et. al., 1972):

$$\bar{\sigma}_\gamma = (E, T) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \left(\frac{E_0}{E} \right)^{1/2} \Psi(x, \xi), \quad (2.20)$$

onde

$$\Psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2} \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \left[\exp\left(-\frac{(v-v_r)^2}{2v_{th}^2}\right) - \exp\left(-\frac{(v+v_r)^2}{2v_{th}^2}\right) \right]. \quad (2.21)$$

e:

- v_r = velocidade relativa nêutron-núcleo;
- v = módulo da velocidade no nêutron;
- $\xi \equiv \frac{\Gamma}{\Gamma_D}$;
- $\Gamma_D = (4E_0kT / A)^{1/2}$;
- T = Temperatura absoluta;
- v = Módulo da velocidade do nêutron;
- $v_r = |v - V|$ = Módulo da velocidade relativa entre o movimento do nêutron e o de movimentação do alvo;
- $v_{th} = \sqrt{\frac{kT}{M}}$ = Módulo da velocidade de cada átomo do alvo;
- E = Energia do nêutron incidente;
- E_{CM} = Energia do centro de massa.

Os parâmetros nucleares utilizados são:

- A = Número de massa;

- E_0 = Energia que ocorre a ressonância;
- Γ = Largura total da ressonância média nas coordenadas do laboratório;
- Γ_D = Largura Doppler da ressonância;

Para a maioria dos casos de interesse prático, utiliza-se as aproximações propostas por Bethe e Placzek (Duderstadt & Hamilton, 1976), a saber:

- 1- A segunda exponencial será ignorada, pois a mesma decresce rapidamente e se torna desprezível em relação à primeira, tendo em vista que $(v+v_r)^2 \gg (v-v_r)^2$.
- 2- Observa-se que a razão entre a energia e a largura total da ressonância é muito grande, sendo assim, podemos fazer com que o limite de integração inferior seja estendido até $-\infty$.
- 3- Há uma relação entre a energia do nêutron e a energia do centro de massa, a saber:

$$\sqrt{E_{CM}} = \sqrt{E} \left(1 + \frac{E_{CM} - E}{E} \right)^{1/2}. \quad (2.22)$$

Essas aproximações não se tornam convenientes para baixas energias de ressonâncias (Martinez et. al., 1985) e para altas temperaturas (Martinez et. al., 1989).

Definindo $\eta = \frac{E_{CM} - E}{E}$, é possível expandir a expressão em série de Taylor

até primeira ordem, de modo que :

$$\sqrt{E_{CM}} = \sqrt{E} \left(1 + \frac{\eta}{2} - \frac{\eta^2}{4} + \dots \right) \approx \sqrt{E} \left(1 + \frac{E_{CM} - E}{2E} \right). \quad (2.23)$$

Escrevendo a equação (2.23) em função das massas, teremos:

$$\sqrt{\frac{M_r v_r^2}{2}} = \sqrt{\frac{mv^2}{2}} \left(1 + \frac{\frac{M_r v_r^2}{2} - \frac{mv^2}{2}}{\frac{mv^2}{2}} \right). \quad (2.24)$$

Como o sistema em questão possui núcleos pesados, a seguinte aproximação é válida: $M_r \approx m$. Sendo assim, a equação (2.24) ficará reduzida à:

$$v_r = \frac{v_r^2 + v^2}{2v}. \quad (2.25)$$

Baseado neste fato, torna-se possível obter uma relação de $v - v_r$, que será substituída na primeira exponencial da equação (2.21).

Substituindo a equação (2.25) no expoente da primeira exponencial da equação (2.21), multiplicando o numerador e o denominador por M e lembrando que $v_{th} = \sqrt{\frac{kT}{M}}$, vem que:

$$\frac{1}{2v_{th}} \left(\frac{v^2 - v_r^2}{2v} \right)^2 = \frac{1}{2 \frac{kT}{M} v^2 M} \left(\frac{Mv^2 - Mv_r^2}{2} \right)^2. \quad (2.26)$$

Substituindo a equação (2.18) na equação (2.26) e lembrando que $\Gamma_D = (4E_0 kT / A)^{1/2}$ e que no contexto deste problema $M = A$:

$$\frac{1}{2v_{th}} \left(\frac{v^2 - v_r^2}{2v} \right)^2 = \frac{1}{4kTE / A} E - E_{CM}^2 = \frac{1}{\Gamma_D^2} E - E_{CM}^2. \quad (2.27)$$

Substituindo as equações (2.19a) e (2.19b) na equação (2.27), a primeira integral da equação (2.21), conhecida como a função do alargamento Doppler, pode ser escrita como:

$$\Psi(x, \xi) \approx \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \exp \left[-\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2 \right]. \quad (2.28)$$

2.2 Propriedades da função do alargamento Doppler

A função do alargamento Doppler possui um comportamento simétrico e sempre positivo, como representado na Figura 1.

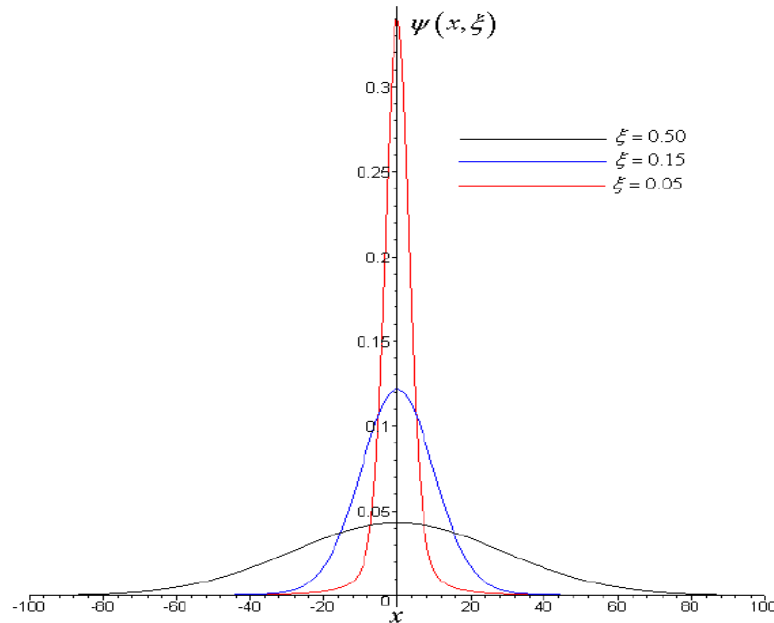


Figura 1: Ressonâncias da função do alargamento Doppler (Gonçalves, 2010).

A variável ξ é inversamente proporcional à temperatura absoluta T , e diretamente proporcional à largura da função. Assim, quanto maior for a temperatura, maior será a largura da ressonância de absorção para o nêutron incidente. A variável x representa a diferença das energias entre o nêutron incidente e a energia do máximo da função da ressonância.

Quando a temperatura do núcleo do reator se aproximar de zero, ou seja, $\xi \rightarrow \infty$, a função do alargamento Doppler pode ser representada pela equação (2.29), que também tenderá a zero, diminuindo, assim, a absorção ressonante.

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} \psi(x, \xi) = \lim_{\xi \rightarrow \infty} \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2\right] \frac{dy}{1+y^2} = \frac{1}{1+y^2} \quad (2.29)$$

Lembrando que a equação (2.29) só é válida para baixas temperaturas, exceto quando a energia do nêutron incidente for igual a energia do centro de massa ($x = y$).

Por outro lado, quando a temperatura tender ao infinito, a função $\psi(x, \xi)$ será representada pela função gaussiana, uma vez que a exponencial decresce muito rápido, logo:

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} \psi(x, \xi) \approx \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\xi^2 x^2}{4}}}{1+y^2} dy = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} e^{-\frac{(E-E_0)^2}{\Gamma_D^2}} \quad (2.30)$$

Uma propriedade muito importante da função do alargamento Doppler é a área sob a curva da seção de choque média $\bar{\sigma}_\gamma(E, T)$, definida por:

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} dE \bar{\sigma}_\gamma(E, T) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(\frac{E_0}{E}\right)^{1/2} \psi(x, \xi) \quad (2.31)$$

Essas áreas podem variar com a temperatura do núcleo, porém para as regiões de energia e temperatura dos reatores térmicos podem ser consideradas

constante visto que quando a condição $\left(\frac{E_0}{E}\right)^{1/2} \approx 1$ é satisfeita, pode-se fazer uma simples substituição na equação (2.31), de forma que:

$$\begin{aligned}
 A &= \int_{-\infty}^{\infty} dE \bar{\sigma}_{\gamma}(E, T) \\
 &= \sigma_0 \frac{\Gamma_{\gamma} \xi}{4\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{1+y^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2\right] dx
 \end{aligned} \tag{2.32}$$

As integrais existentes na equação (2.32) são triviais e a área sob a curva pode ser calculada analiticamente:

$$A = \sigma_0 \frac{\Gamma_{\gamma} \xi}{4\sqrt{\pi}} \pi \left(\sqrt{\pi} \frac{2}{\xi} \right) = \frac{\sigma_0 \pi \Gamma_{\gamma}}{2}. \tag{2.33}$$

onde não há mais a relação com a temperatura.

2.3 Aproximações analíticas para a função de alargamento Doppler

Nesta seção, são descritos os principais métodos de aproximação para função de alargamento Doppler, segundo as aproximações de Bethe e Placzek, equação (2.28).

2.3.1 Expansão assintótica

Uma opção prática para o cálculo da função de alargamento Doppler é a sua expressão assintótica decorrente da expansão do termo $\frac{1}{1+y^2}$ na equação (2.28) em séries de Taylor em torno de $y = x$ (Palma et. al., 2009).

$$\frac{1}{1+y^2} = \frac{1}{1+x^2} - \frac{2x}{1+x^2}^2 (y-x) + \frac{-1+3x^2}{1+x^2}^2 (y-x)^2 - \frac{4x-1+x^2}{1+x^2}^4 (y-x)^3 + \dots \quad (2.34)$$

Substituindo a equação (2.34) na equação (2.28), e integrando termo a termo, obtém-se, finalmente, a expansão assintótica:

$$\psi(x, \xi) = \frac{1}{1+x^2} \left\{ 1 + \frac{2}{\xi^2} \frac{3x^2-1}{1+x^2}^2 + \frac{12}{\xi^4} \frac{5x^4-10x^2-1}{1+x^2}^4 + \dots \right\}. \quad (2.35)$$

Apesar da equação (2.35) ser válida apenas para $|x\xi| > 6$ (Palma, 2007), a mesma é bastante útil para se determinar o comportamento da função de alargamento Doppler em condições específicas (Palma et. al., 2009). Para valores elevados de x , é possível observar que a função $\psi(x, \xi)$ apresenta a seguinte forma assintótica:

$$\psi(x, \xi) \approx \frac{1}{1+x^2} \quad (2.36)$$

2.3.2 Métodos de Beynon e Grant

Beynon e Grant (Beynon & Grant, 1963) propuseram um método de cálculo para a função de alargamento Doppler que consiste em expandir a parte exponencial do integrando da função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ em polinômios de Chebyshev (Gonçalves, 2010) e integrar termo a termo a expressão resultante, permitindo escrever:

$$\psi(a, b) = \frac{1}{a} \sqrt{\pi} \cos(ab) {}_1F_2 \left(a, e^{a^2} + J(a, b) e^{-\frac{1}{4}b^2} \right), \quad (2.37)$$

onde $a = \frac{1}{2}\xi$ e $b = \xi \cdot x$ e ainda

$$J(a, b) = \frac{1}{a} \frac{1}{2!} ab^2 - \frac{1}{4!} ab^4 + \frac{1}{6!} ab^6 \dots + \frac{1}{2a^3} \frac{1}{4!} ab^4 - \frac{1}{6!} ab^6 \dots + \dots + \frac{1}{\sqrt{\pi} a^{2n+1}} \Gamma\left(\frac{2n+1}{2}\right) \cdot \left\{ \frac{1}{(2n+2)!} ab^{2n+1} \dots \right\} + \quad (2.38)$$

e

$$E_2 \quad a = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^a e^{-y^2} dy. \quad (2.39)$$

Para valores em que a condição $|x, \xi| > 6$ era satisfeita recomendava a utilização da expressão assintótica da função $\psi(x, \xi)$, equação (2.36). Vale ressaltar que os resultados obtidos por este método tornaram-se referência para vários trabalhos relacionados à função de alargamento Doppler (Beynon & Grant, 1963).

2.3.3 Métodos de Campos e Martinez

A ideia central do método proposto por Campos e Martinez (Campos & Martinez, 1987) é transformar a função de alargamento Doppler de sua forma integral em uma equação diferencial parcial sujeita a condições iniciais. Diferenciando a equação (2.30) em relação à x obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} &= \frac{\xi^2}{2} - \frac{\xi x}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{1+y^2} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2\right] + \\ &\frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y dy}{1+y^2} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2\right]. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Reconhecendo na equação (2.40) a própria função de alargamento Doppler e o termo de interferência, definido pela integral

$$\chi(x, \xi) = \frac{\xi}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y dy}{1+y^2} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2\right], \quad (2.41)$$

pode-se escrever:

$$\frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} = \frac{\xi^2}{2} \left[-x \psi(x, \xi) + \frac{\chi(x, \xi)}{2} \right]. \quad (2.42)$$

Derivando a equação (2.42) novamente em relação a x , após explicitar a função $\chi(x, \xi)$ na mesma equação, tem-se:

$$\frac{\partial^2 \psi(x, \xi)}{\partial x^2} + x \xi^2 \frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} + \frac{\xi^2}{4} (x^2 \xi^2 + 2) \psi(x, \xi) = \frac{\xi^5}{8\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y^2 dy}{1+y^2} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2\right). \quad (2.43)$$

O lado direito da equação (2.43) pode ser escrito de outra forma, visto que

$$\frac{y^2}{1+y^2} = 1 - \frac{1}{1+y^2}:$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y^2 dy}{1+y^2} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2\right) = \frac{2\sqrt{\pi}}{\xi} [1 - \psi(x, \xi)]. \quad (2.44)$$

Substituindo o resultado obtido em (2.44) na equação (2.43), obtém-se a equação diferencial que a qual Campos e Martinez se basearam para a obtenção de uma aproximação analítica para a função de alargamento $\psi(x, \xi)$:

$$\frac{4}{\xi^2} \frac{\partial^2 \psi(x, \xi)}{\partial x^2} + 4x \frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} + (\xi^2 x^2 + \xi^2 + 2) \psi(x, \xi) = \xi^2, \quad (2.45)$$

sujeita as condições iniciais:

$$\psi(x, \xi)|_{x=0} \equiv \psi_0 = \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right)\right] \quad (2.46a)$$

e

$$\frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0. \quad (2.46b)$$

Admitindo-se que a função $\psi(x, \xi)$ possa ser expandida em série

$$\psi(x, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi x^n, \quad (2.47)$$

e substituindo-se a equação (2.47) na equação diferencial dada pela equação (2.45), obtém-se, após alguma manipulação algébrica, a seguinte equação polinomial:

$$\left[\frac{8}{\xi^2} c_2 + \xi^2 + 2 c_0 \right] + \left[\frac{24}{\xi^2} c_3 + \xi^2 + 6 c_1 \right] x + \sum_{n=2}^{\infty} \left[\frac{4}{\xi^2} (n+2)(n+1) c_{n+2} + (4n + \xi^2 + 2) c_n + \xi^2 c_{n-2} \right] x^n = \xi^2, \quad (2.48)$$

onde:

$$c_0 = \psi_0,$$

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

e todos os outros termos são calculados a partir da seguinte relação de recorrência:

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

A representação em série para função de alargamento Doppler, dada pela equação (2.47), é válida apenas para $|x \cdot \xi| < 6$. Para os casos em que $|x \cdot \xi| > 6$, Campos e Martinez (Campos & Martinez, 1987) utilizaram a forma assintótica dada pela equação (2.35), assim como propuseram Beynon e Grant.

2.3.4 Método de Padé de 4 – polos

A aproximação de Padé é uma das aproximações mais utilizadas para o cálculo da função de alargamento Doppler (Palma, 2007), capaz de representar de forma eficaz funções com polos, através de uma aproximação racional, ou seja, uma razão entre polinômios. Para a aproximação de Padé de 4 polos, Keshavamurthy e Harish (Keshavamurthy & Harish, 1993) propuseram a seguinte razão polinomial:

$$\psi(x, \xi) = h \frac{a_0 + a_2 hx^2 + a_4 hx^4 + a_6 hx^6}{b_0 + b_2 hx^2 + b_4 hx^4 + b_6 hx^6 + b_8 hx^8}, \quad (2.49)$$

Cujos coeficientes são mostrados nas Tabelas 1 e 2

Tabela 1 - Os coeficientes h , a e b da aproximação de Padé de 4 polos.

$h = \frac{\xi}{2}$
$a_0 = p_0 + p_1 h - p_2 h^2 - p_3 h^3 \quad 1 - q_1 h - q_2 h^2 + q_3 h^3 + q_4 h^4$
$a_2 = p_2 + 3p_3 h \quad 1 - q_1 h - q_2 h^2 + q_3 h^3 + q_4 h^4 + p_0 + p_1 h - p_2 h^2 - p_3 h^3 \quad q_2 - 3q_3 h - 6q_4 h^2 +$ $-p_1 + 2p_2 h + 3p_3 h^2 \quad q_1 + 2q_2 h - 3q_3 h^2 - 4q_4 h^3$
$a_4 = q_4 \quad p_0 + p_1 h - p_2 h^2 - p_3 h^3 + p_2 + 3p_3 h \quad q_2 - 3q_3 h - 6q_4 h^2 -$ $p_3 \quad q_1 + 2q_2 h - 3q_3 h^2 - 4q_4 h^3 + -p_1 + 2p_2 h + 3p_3 h^2 \quad q_3 + 4q_4 h$
$a_6 = q_4 \quad p_2 + 3p_3 h - p_3 \quad q_3 + 4q_4 h$
$b_0 = 1 - q_1 h - q_2 h^2 + q_3 h^3 + q_4 h^4$
$b_2 = 2 \quad 1 - q_1 h - q_2 h^2 + q_3 h^3 + q_4 h^4 \quad q_2 - 3q_3 h - 6q_4 h^2 + q_1 + 2q_2 h - 3q_3 h^2 - 4q_4 h^3$
$b_4 = q_2 - 3q_3 h - 6q_4 h^2 + 2q_4 \quad 1 - q_1 h - q_2 h^2 + q_3 h^3 + q_4 h^4 +$ $2 \quad q_1 + 2q_2 h - 3q_3 h^2 - 4q_4 h^3 \quad q_3 + 4q_4 h$
$b_6 = 2q_4 \quad q_2 - 3q_3 h - 6q_4 h^2 + q_3 + 4q_4 h$
$b_8 = q_4^2$

Tabela 2 - Os coeficientes p e q da aproximação de Padé de 4 polos

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

A partir dos coeficientes das Tabelas 1 e 2, e da equação (2.49), obtém-se finalmente a seguinte aproximação analítica para função $\psi_{x,\xi}$, segundo a aproximação de Padé de 4 polos:

$$\psi_{x,\xi} = \frac{\eta_{x,\xi}}{\omega_{x,\xi}}, \quad (2.50)$$

onde $\eta_{x,\xi}$ e $\omega_{x,\xi}$ são os seguintes polinômios:

$$\begin{aligned}
\eta_{x,\xi} = & 2\xi \cdot 7,089815404 \cdot 10^{22} + 1,146750844 \cdot 10^{23} \xi + 8,399725059 \cdot 10^{22} \xi^2 \\
& + 3,622207053 \cdot 10^{22} \xi^3 + 9,957751740 \cdot 10^{21} \xi^4 + 1,749067258 \cdot 10^{21} \xi^5 \\
& + 1,835165213 \cdot 10^{20} \xi^6 + 8,940072699 \cdot 10^{18} \xi^7 - 2,539736657 \cdot 10^{21} \xi^2 x^2 \\
& + 2,069483991 \cdot 10^{21} \xi^3 x^2 + 3,972393548 \cdot 10^{21} \xi^4 x^2 + 1,919319560 \cdot 10^{21} \xi^5 x^2 \\
& + 3,670330426 \cdot 10^{20} \xi^6 x^2 + 2,682021808 \cdot 10^{19} \xi^7 x^2 + 1,048748026 \cdot 10^{19} \xi^4 x^4 \\
& + 1,702523008 \cdot 10^{20} \xi^5 x^4 + 1,835165209 \cdot 10^{20} \xi^6 x^4 + 2,682021806 \cdot 10^{19} \xi^7 x^4 \\
& + 8,940072688 \cdot 10^{18} \xi^7 x^6
\end{aligned} \quad , \quad (2.51)$$

e

$$\begin{aligned}
\eta_{x,\xi} = & 3,490642925 \cdot 10^{23} \xi + 3,464999381 \cdot 10^{23} \xi^2 + 2,050150991 \cdot 10^{23} \xi^3 \\
& + 7,933771118 \cdot 10^{22} \xi^4 + 3,670330427 \cdot 10^{20} \xi^7 x^6 + 1,788014539 \cdot 10^{19} \xi^8 x^8 \\
& + 3,670330426 \cdot 10^{20} \xi^7 + 3,533894806 \cdot 10^{21} \xi^6 + 1,788014541 \cdot 10^{19} \xi^8 \\
& + 2,062859460 \cdot 10^{22} \xi^5 + 3,426843796 \cdot 10^{22} \xi^2 x^2 + 5,586613630 \cdot 10^{22} \xi^4 x^2 \\
& + 2,649703323 \cdot 10^{22} \xi^5 x^2 + 6,613512625 \cdot 10^{22} \xi^3 x^2 + 1,101099129 \cdot 10^{21} \xi^7 x^2 \\
& + 7,301013353 \cdot 10^{21} \xi^6 x^2 + 3,590774413 \cdot 10^{21} \xi^4 x^4 + 1,101099125 \cdot 10^{21} \xi^7 x^4 \\
& + 5,868438581 \cdot 10^{21} \xi^5 x^4 + 4,000342261 \cdot 10^{21} \xi^6 x^4 + 7,152058156 \cdot 10^{19} \xi^8 x^2 \\
& + 2,332237305 \cdot 10^{20} \xi^6 x^6 + 1,072808721 \cdot 10^{20} \xi^8 x^4 + 7,152058152 \cdot 10^{19} \xi^8 x^6
\end{aligned} \quad . \quad (2.52)$$

2.3.5 Método de Frobenius

Neste método, a parte homogênea da equação diferencial que rege a função de alargamento Doppler, equação (2.45), é resolvida utilizando o método de Frobenius [George Ferdinand Frobenius, (1849 - 1917)] que consiste fundamentalmente em procurar uma solução da equação diferencial na forma de série em torno do ponto $x = x_0$, com um parâmetro livre (Palma, 2007), isto é, da seguinte forma:

$$\psi(x, \xi) = x^s \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi x^n = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi x^{n+s}, \quad (2.53)$$

com $c_0 \neq 0$ e onde s é o parâmetro que fornece flexibilidade ao método.

Derivando a equação (2.53) e a substituindo na equação homogênea associada à equação (2.45), obtém-se, após agrupar os termos semelhantes:

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n (n+s)(n+s-1) x^{n+s-2} + \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^2 \left[n+s + \frac{\xi^2+2}{4} \right] x^{n+s} + \frac{\xi^2}{4} \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^{n+s+2} = 0. \quad (2.54)$$

A equação inicial do problema, obtida quando $n=0$, lembrando que $c_0 \neq 0$, é

$$c_0 s(s-1) = 0. \quad (2.55)$$

Da equação (2.55), como $c_0 \neq 0$, obtém-se que $s=0$ ou $s=1$. Utilizando primeiramente $s=0$ e $c_0 \neq 0$ obtém-se as seguintes relações de recorrência:

$$c_n = -\frac{\xi^2 (4n + \xi^2 - 6)}{4n(n-1)} c_{n-2}, \quad \text{válida para } n=2 \text{ ou } n=3 \quad (2.56)$$

$$c_n = -\frac{\xi^2 [c_{n-2} \cdot 4n + \xi^2 - 6 + c_{n-4} \xi^2]}{4n \cdot n-1}, \text{ , válida para } n \geq 4 \quad (2.57)$$

Considerando o caso em que $s=1$, obtém-se a outra série linearmente independente com o primeiro termo, não nulo, denotado por \tilde{c}_0 :

$$c_n = -\frac{\xi^2 \cdot 4n + \xi^2 - 2}{4n \cdot n+1} c_{n-2}, \text{ , válida para } n=2 \text{ ou } n=3. \quad (2.58)$$

$$c_n = -\frac{\xi^2 [c_{n-2} \cdot 4n + \xi^2 - 2 + c_{n-4} \xi^2]}{4n \cdot n+1}, \text{ , válida para } n \geq 4 \quad (2.59)$$

Com isso, a solução homogênea assume a seguinte forma:

$$\psi_h(x, \xi) = c_0 + c_2 x^2 + c_4 x^4 + \dots + \tilde{c}_0 x + \tilde{c}_2 x^3 + \tilde{c}_4 x^5 + \dots, \quad (2.60)$$

onde os coeficientes são todos obtidos a partir das relações de recorrência, equações (2.56) a (2.59). Escrevendo a função $\psi_h(x, \xi)$ como:

$$\begin{aligned}
\psi_h(x, \xi) &= \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \sum_{n=0}^{\infty} A_n x^n = \left(1 - \frac{\xi^2 x^2}{4} + \frac{\xi^4 x^4}{32} + \dots\right) \sum_{n=0}^{\infty} A_n x^n \\
&= A_0 + A_1 x + \left(A_2 - \frac{\xi^2}{4} A_0\right) x^2 + \left(A_3 - \frac{\xi^2}{4} A_1\right) x^3 + \left(A_4 - \frac{\xi^2}{4} A_2 + \frac{\xi^4}{32} A_0\right) x^4 + \\
&\left(A_5 - \frac{\xi^2}{4} A_3 + \frac{\xi^4}{32} A_1\right) x^5 + \left(A_6 - \frac{\xi^2}{4} A_4 + \frac{\xi^4}{32} A_2 - \frac{\xi^6}{384} A_0\right) + \left(A_7 - \frac{\xi^2}{4} A_5 + \frac{\xi^4}{32} A_3 - \frac{\xi^6}{384} A_1\right) + \dots
\end{aligned} \tag{2.61}$$

É possível determinar todos os coeficientes A_n , igualando, termo a termo, as equações (2.60) e (2.61) de forma a escrever:

$$\begin{aligned}
\psi_h(x, \xi) &= k_1 \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)^2 + \frac{1}{24} \left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)^4 + \frac{1}{720} \left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)^6 + \dots\right] \\
&+ k_2 \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \left[\frac{\xi^2 x}{2} - \frac{1}{6} \left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)^3 + \frac{1}{120} \left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)^5 + \frac{1}{5040} \left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)^7 + \dots\right],
\end{aligned} \tag{2.62}$$

Reconhecendo a expansão das funções cosseno e seno, obtém-se uma forma analítica para a solução da parte homogênea das equações diferenciais que regem a função de alargamento Doppler e o termo de interferência:

$$\psi_h(x, \xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \left[k_1 \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) + k_2 \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \right]. \tag{2.63}$$

Para obter as soluções particulares da equação (2.45), e conseqüentemente sua solução geral, pode-se aplicar o método de variação de parâmetros a partir das soluções linearmente independentes:

$$\psi_1(x, \xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \quad (2.64)$$

$$\psi_2(x, \xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right), \quad (2.65)$$

supondo uma solução da forma

$$\psi_p(x, \xi) = u_1(x) \psi_1(x, \xi) + u_2(x) \psi_2(x, \xi), \quad (2.66)$$

onde as funções $u_1(x)$ e $u_2(x)$ são determinadas após a imposição das condições iniciais expressas pelas equações (2.46a) e (2.46b) e da imposição da nulidade da expressão:

$$u_1'(x) \psi_1(x, \xi) + u_2'(x) \psi_2(x, \xi) = 0, \quad (2.67)$$

que juntamente com a condição

$$u_1'(x) \psi_1'(x, \xi) + u_2'(x) \psi_2'(x, \xi) = \frac{\xi^4}{4}, \quad (2.68)$$

proveniente da própria equação (2.45), formam um sistema linear, cuja solução é dada pelas equações:

$$u_1 \cdot x = -\frac{\xi^2}{2} \exp\left(\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \Rightarrow u_1 \cdot x = -\frac{\xi^2}{2} \int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 x'^2}{4}\right) \sin\left(\frac{\xi^2 x'}{2}\right) \quad (2.69)$$

e

$$u_2 \cdot x = \frac{\xi^2}{2} \exp\left(\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \Rightarrow u_2 \cdot x = \frac{\xi^2}{2} \int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 x'^2}{4}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x'}{2}\right). \quad (2.70)$$

Efetuada as integrais nas equações (2.69) e (2.70),

$$u_1 \cdot x = \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) + 2\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) \right] \quad (2.71)$$

e

$$u_2 \cdot x = -i \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) \right]. \quad (2.72)$$

Com isso, pode-se escrever a solução particular da equação (2.45) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \psi_p(x, \xi) = & -i \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4} x^2 - 1\right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) \right] + \\ & \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4} x^2 - 1\right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) + 2\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Como a solução geral da equação diferencial (2.45) é a soma da solução das equações homogênea e particular, impõem-se as condições iniciais expressas pelas equações (2.46a) e (2.46b), para determinar as constantes:

$$k_1 = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right)\right] \quad (2.74)$$

$$k_2 = 0. \quad (2.75)$$

Finalmente, segundo o método de Frobenius, a função de alargamento Doppler pode ser escrita da seguinte forma:

$$\psi(x, \xi) = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left[-\frac{1}{4}\xi^2 x^2 - 1\right] \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \times \left\{1 + \operatorname{Re} \phi(x, \xi) + \tan\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \operatorname{Im} \phi(x, \xi)\right\}, \quad (2.76)$$

onde $\phi(x, \xi) = \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right)$.

2.3.6 Método da Transformada de Fourier

Fazendo a transformação de variáveis $u = \frac{\xi}{2} x - y$ na representação integral da função de alargamento Doppler (Gonçalves, 2010), equação (2.28), obtém-se a expressão,

$$\psi(\zeta, x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-u^2} du}{1 + \left(x - 2\frac{u}{\zeta}\right)^2}, \quad (2.77)$$

Que pode ser matematicamente interpretada como a convolução da função lorentziana com uma função gaussiana, conforme exemplificado pela equação a seguir:

$$\psi(\zeta, x) = f * g \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} g(u) f(x-u) du, \quad (2.78)$$

sendo $f(x-u) = \frac{1}{1 + \left(x - 2\frac{u}{\zeta}\right)^2}$ a função lorentziana e $g(u) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-u^2}$ a função gaussiana.

A função $f(x-u)$ admite uma representação integral através da transformada cosseno de Fourier (Polyanin & Manzhirov, 1998), como sendo

$$f(x-u) = \int_0^{\infty} e^{-w} \cos \left[\left(x - 2\frac{u}{\zeta}\right) w \right] dw. \quad (2.79)$$

Substituindo-se a equação (2.79) na integral de convolução, dada pela equação (2.78), aplicando as propriedades das integrais de convolução chega-se a seguinte expressão:

$$\psi(\zeta, x) = f * g \equiv \int_0^{\infty} e^{-w} \int_{-\infty}^{+\infty} g(u) \cos \left[\left(x - 2 \frac{u}{\zeta} \right) w \right] du dw = \int_0^{\infty} e^{-w} I(w) dw, \quad (2.80)$$

onde,

$$\begin{aligned} I(w) &\equiv \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \cos \left[\left(x - 2 \frac{u}{\zeta} \right) w \right] du \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(xw) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \cos \left[\left(2 \frac{u}{\zeta} \right) w \right] du = e^{-\frac{w^2}{\zeta^2}} \cos(xw). \end{aligned} \quad (2.81)$$

Substituindo a equação (2.81) na equação (2.80), obtém-se uma nova representação integral da função de alargamento Doppler interpretada como uma transformada cosseno de Fourier (Arfken, 1985):

$$\psi(\zeta, x) = \int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\zeta^2} - w} \cos(wx) dw = \frac{1}{2} \left[\int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\zeta^2} - 2wa} dw + \int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\zeta^2} - 2wb} dw \right], \quad (2.82)$$

onde $a \equiv \frac{1-ix}{2}$ e $b \equiv \frac{1+ix}{2}$.

As integrais do lado direito da equação (2.82) são conhecidas como funções erro complementar, logo se pode concluir que:

$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2wa} dw = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} e^{-\frac{xi-1}{4}\xi^2} \operatorname{erfc}\left(\frac{\xi - i\xi x}{2}\right) \quad (2.83)$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\xi^2} - 2wb} dw = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} e^{-\frac{xi+1}{4}\xi^2} \operatorname{erfc}\left(\frac{\xi + i\xi x}{2}\right). \quad (2.84)$$

Substituindo as equações (2.83) e (2.84) na equação (2.82) pode-se escrever a seguinte expressão para a função de alargamento Doppler:

$$\begin{aligned} \psi(x, \xi) &= \frac{\xi\sqrt{\pi}}{4} e^{-\frac{xi-1}{4}\xi^2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) \right] \\ &+ \frac{\xi\sqrt{\pi}}{4} e^{-\frac{xi+1}{4}\xi^2} \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) \right] \end{aligned} \quad (2.85)$$

Com alguma manipulação algébrica, é fácil provar que o método da transformada de Fourier (Gonçalves, 2010) e de Frobenius (Plma, 2007), equações (2.85) e (2.76) respectivamente, provêm resultados idênticos.

2.3.7 Método da série de Fourier

A partir da representação da função de alargamento Doppler em uma transformada de Fourier em cossenos com período “L”, equação (2.82), pode-se escrever:

$$\psi(\zeta, x) = \int_0^{\infty} e^{-\frac{w^2}{\zeta^2} - w} \cos(wx) dw = \int_0^{\infty} G(w) e^{-w} \cos(wx) dw, \quad (2.86)$$

onde a função $G(w) = e^{-\frac{w^2}{\zeta^2}}$ é par e passível de ser expandida em uma série de Fourier em cossenos (Gonçalves, 2010):

$$G(w) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{n\pi w}{L}\right), \quad (2.87)$$

onde

$$a_0 = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{L} \operatorname{erf}\left(\frac{L}{\xi}\right) \quad (2.88)$$

$$a_n = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2L} e^{-\left(\frac{n\pi\xi}{2L}\right)^2} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{2L+n\pi\xi^2 i}{2\xi L}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{2L-n\pi\xi^2 i}{2\xi L}\right) \right]. \quad (2.89)$$

Substituindo a equação (2.87) na equação (2.86) e integrando, pode-se escrever a seguinte expressão para a função de alargamento Doppler em forma de séries de Fourier (Gradshteyn & Ryzhik, 1980):

$$\psi_{x,\xi} = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2L} \frac{1}{1+x^2} \operatorname{erf}\left(\frac{L}{\xi}\right) + \frac{\xi\sqrt{\pi}}{L} \sum_{n=1}^{\infty} F_n(x,\xi,L) \operatorname{Re} Z_{n,\xi,L}, \quad (2.90)$$

sendo

$$F_n(x,\xi,L) \equiv \frac{\left[n\pi^2 + L^2(1+x^2) \right] e^{-\left(\frac{n\pi\xi}{2L}\right)^2}}{L^2(1+x^2)^2 + n\pi^2(2-2x^2) + n\pi/L^2} \quad (2.91)$$

e

$$Z_{n,\xi,L} = \operatorname{erf}\left(\frac{n\pi\xi^2 i + 2L^2}{2\xi L}\right). \quad (2.92)$$

2.3.8 Representação da função $\psi_{x,\xi}$ utilizando as expansões de Salzer

Embora as formulações obtidas para a função $\psi_{x,\xi}$ a partir dos métodos de Frobenius, transformada de Fourier e série de Fourier, contenham apenas funções bem conhecidas na literatura, pode ser inconveniente trabalhar com funções erro que contenham argumento imaginário. Uma das maneiras de contornar essa situação é calcular as partes real e imaginária da função $\phi_{x,\xi}$, utilizando as expansões propostas por Salzer (Salzer, 1951)

$$\phi_{x,\xi} = \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) = \operatorname{Re}\phi_{x,\xi} + \operatorname{Im}\phi_{x,\xi} i, \quad (2.93)$$

onde:

$$\operatorname{Re}\phi_{x,\xi} \cong -\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) + \exp\left(-\frac{\xi^2}{4}\right) \times \left\{ \frac{1}{\pi\xi} \left[\cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) - 1 \right] + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{n_{\max}} \frac{\exp(-n^2/4)}{n^2 + \xi^2} f_n(x,\xi) \right\} \quad (2.94)$$

$$\operatorname{Im}\phi_{x,\xi} \cong \exp\left(-\frac{\xi^2}{4}\right) \left\{ \frac{1}{\pi\xi} \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{n_{\max}} \frac{\exp(-n^2/4)}{n^2 + \xi^2} g_n(x,\xi) \right\}, \quad (2.95)$$

sendo as funções auxiliares $f_n(x,\xi)$ e $g_n(x,\xi)$ escritas por:

$$f_n(x, \xi) = -\xi + \xi \cosh\left(\frac{n\xi x}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) - n \sinh\left(\frac{n\xi x}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \quad (2.96)$$

$$g_n(x, \xi) = \xi \cosh\left(\frac{n\xi x}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) + n \sinh\left(\frac{n\xi x}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right). \quad (2.97)$$

2.3.9 O método de Mamedov

Mamedov propôs uma formulação analítica para calcular a função $\psi(x, \xi)$ baseada em sua representação na forma de uma transformada de Fourier, equação (2.82). Utilizando as expansões em série das funções exponencial e cosseno (Mamedov, 2009),

$$e^{-x} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N \frac{-1^i x^i}{i!}, \quad (2.98)$$

$$\cos x = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^N \frac{-1^i x^{2i}}{2i!}, \quad (2.99)$$

e a bem conhecida expansão binomial

$$x \pm y^n = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{m=0}^N \pm 1^m F_m^n x^{n-m} y^m, \quad (2.100)$$

Mamedov propôs as seguintes expressões para a função de alargamento

Doppler:

Para $\xi > 1$ e $x > 1$

$$\begin{aligned} \psi(x, \xi) &= \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^L F_i^{-1} \left\{ \frac{1}{x^2 + 1} \sum_{j=0}^i F_j^{-1} \left[1 + (-1)^j \right] \right. \\ &\times \frac{2^{2i} x^j}{\xi^{2i-j+1}} \gamma \left(\frac{2i-j+1}{2}, \frac{\xi^2 x^2 + 1}{4} \right) + x^2 + 1 \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^M F_k^{-1-i} \\ &\times \left[1 + (-1)^k \right] \frac{x^k \xi^{2i+k+1}}{2^{2i+2}} \Gamma \left(-\frac{2i+k+1}{2}, \frac{\xi^2 x^2 + 1}{4} \right) \left. \right\}, \end{aligned} \quad (2.101)$$

Para $\xi \leq 1$ e $x \leq 1$

$$\psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^L \sum_{j=0}^M \frac{-1^{i+j} x^{2j} \xi^{2j+i+1}}{2i! 2j!} \Gamma \left(\frac{i+2j+1}{2} \right), \quad (2.102)$$

Para $\xi \leq 1$ e $x = 0$

$$\psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^L \frac{-1^i \xi^{i+1}}{2i!} \Gamma \left(\frac{i+1}{2} \right), \quad (2.103)$$

onde $\Gamma(x, \xi)$, $\gamma(x, \xi)$ e $\Gamma(x)$ são as bem conhecidas funções Gamma incompletas e

F_m^n são os coeficiente binomiais definidos por:

$$F_m n = \begin{cases} \frac{n(n-1)\dots(n-m+1)}{m!}, & \text{para } n \text{ inteiro} \\ \frac{-1^m \Gamma(m-n)}{m! \Gamma(-n)}, & \text{para } n \text{ não inteiro} \end{cases} \quad (2.104)$$

Capítulo 3

Relaxação da primeira aproximação de Bethe – Placzek

A equação (2.28) é a conhecida forma integral da função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ considerando as tradicionais aproximações propostas por Bethe-Placzek. Neste capítulo, será apresentada uma nova expressão onde a primeira das três aproximações de Bethe-Placzek não é considerada. A aproximação é transcrita abaixo:

“A segunda exponencial será ignorada, pois a mesma decresce rapidamente e se torna desprezível em relação à primeira, tendo em vista que $(v+v_r)^2 \gg (v-v_r)^2$.”

O ato de desconsiderar a primeira aproximação de Bethe-Placzek acarreta em um termo adicional na expressão da função $\psi(x, \xi)$ que será obtido e calculado numericamente. Aproximações analíticas serão propostas e avaliadas para este novo termo.

3.1 Obtenção de uma expressão para o termo adicional proveniente da relaxação das aproximações de Bethe-Placzek

Ao não desprezar a segunda integral da equação (2.21), porém já considerando a extensão do limite inferior proposta na aproximação 2 de Bethe-Placzek, tem-se que $\Psi(x, \xi) = \psi(x, \xi) - \psi_a(x, \xi)$, sendo $\psi_a(x, \xi)$ a seguinte integral:

$$\psi_a(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \exp\left(-\frac{(v+v_r)^2}{2v_{th}^2}\right), \quad (3.1)$$

onde o subscrito “a” se refere à este termo **adicional**.

Para calcular a integral (3.1) é necessário obter uma expressão que contenha as variáveis “x” e “y” ao invés da soma das variáveis “v” e “v_r”. Essa operação é importante para que ambas integrais existentes na equação (2.21) sejam expressas, utilizando as mesmas variáveis e, portanto, possam ter suas expressões analíticas combinadas.

Substituindo a equação (2.25) e $v_{th} = \sqrt{\frac{kT}{M}}$ no expoente da exponencial na equação (3.1), tem-se:

$$\frac{1}{2v_{th}} \left(\frac{v^2 + v_r^2}{2v} \right)^2 = \frac{1}{2kTv^2/M} \left(\frac{3v^2 + v_r^2}{2} \right)^2 = \frac{1}{2kTM^2v^2/M} \left(\frac{3Mv^2 + Mv_r^2}{2} \right)^2, \quad (3.2)$$

onde tanto o numerador, quanto o denominador, foram multiplicados pelo termo M^2 .

Na equação (3.2), é possível reconhecer o termo $\Gamma_D = (4E_0kT/A)^{1/2}$, lembrando que no contexto deste estudo, a massa do núcleo pesado M também é comumente denotada com a letra A , ou seja, de tal forma que $M \rightarrow A$. Multiplicando e dividindo o denominador da equação (3.2) por 2 pode-se escrever:

$$\frac{1}{2v_{th}} \left(\frac{v^2 + v_r^2}{2v} \right)^2 = \frac{1}{A \cdot 4kTE / A} (3E + E_{CM})^2. \quad (3.3)$$

Ao multiplicar a equação (2.19.b) por 3 e somar o resultado à equação (2.19a), tem-se:

$$(3x + y) = \frac{2}{\Gamma} (3E + E_{CM} - 4E_0). \quad (3.4)$$

Com isso, substituindo a equação (3.4) na equação (3.3) e multiplicando o numerador e o denominador por Γ^2 , obtém-se a seguinte expressão:

$$\frac{1}{2v_{th}} \left(\frac{v^2 + v_r^2}{2v} \right)^2 = \frac{1}{A \cdot \Gamma_D^2} \left(\frac{3x + y}{2} \Gamma + 4E_0 \right)^2 = \frac{\xi^2}{A} \left(\frac{3x + y}{2} + \frac{4E_0}{\Gamma} \right)^2. \quad (3.5)$$

Finalmente, pode-se escrever a equação (3.1) da seguinte forma:

$$\psi_a(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1 + y^2} \exp \left[-\frac{\xi^2}{A} \left(\frac{3x + y}{2} + \frac{4E_0}{\Gamma} \right)^2 \right]. \quad (3.6)$$

A equação (3.6), proposta neste trabalho, pode ser considerada como um termo adicional proveniente da segunda integral da equação (2.21), obtida ao relaxar a primeira aproximação de Bethe-Placzek. Ao contrário da função de alargamento

Doppler tradicional $\psi(x, \xi)$, onde todos os parâmetros nucleares da ressonância a ser estudada estão contidos na variável ξ , a equação (3.6) apresenta **explicitamente**, em sua forma funcional, três deles: A , Γ e E_0 . Este fato impossibilita tratar $\psi_a(x, \xi)$ como uma função matemática isolada como a função $\psi(x, \xi)$ (Palma et. al., 2011).

3.2 Aproximação analítica do termo adicional

Nesta seção, é feita uma aproximação da equação (3.6) de forma a obter resultados numéricos para a função do alargamento Doppler proposta nesta dissertação.

Definindo as constantes auxiliares k_1 e k_2

$$k_1 = \frac{1}{4A} \quad (3.7.a)$$

$$k_2 = \frac{8E_0}{\Gamma} + 3x, \quad (3.7.b)$$

a equação (2.8) pode ser escrita de uma maneira mais conveniente:

$$\psi_a(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \left[\exp -\xi^2 k_1 (k_2 + y^2) \right]. \quad (3.8)$$

Desta forma, a integral da equação (3.8) adquire uma forma parecida com a equação (2.28), que possui solução conhecida e bem estabelecida. A partir da expressão analítica proposta por Palma (Palma et. al., 2006), é possível estabelecer uma associação que permita a obtenção de uma expressão analítica para a equação (3.8). Igualando as equações (2.28) e (2.76), segue que:

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

$$\pi \exp\left[-\frac{1}{4}\xi^2 x^2 - 1\right] \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \left\{1 + \operatorname{Re} \phi(x, \xi) + \tan\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \operatorname{Im} \phi(x, \xi)\right\} \quad . \quad (3.9)$$

As seguintes associações matemáticas

$$x \rightarrow -k_2$$

$$\xi^2 \rightarrow 4k_1\xi^2 \Leftrightarrow \xi \rightarrow 2\sqrt{k_1}\xi,$$

permitem escrever a integral na equação (3.8), após algum trabalho algébrico, da seguinte forma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \exp\left[-\xi^2 k_1(k_2 + y)^2\right] =$$

$$\pi \exp\left[-\xi^2 k_1 k_2^2 - 1\right] \cos 2\xi^2 k_1 k_2 \left[1 + \operatorname{Re} \eta(x, \xi) + \tan 2\xi^2 k_1 k_2 \operatorname{Im} \eta(x, \xi)\right], \quad (3.10)$$

onde $\eta(x, \xi) = \text{erf} \left[-\xi \sqrt{k_1} (ik_2 + 1) \right]$ e a dependência em x está inserida em k_2 .

Logo, a função $\psi_a(x, \xi)$ é escrita multiplicando a equação (3.10) pelo fator

$$\frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} :$$

$$\begin{aligned} \psi_a(x, \xi) &= \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \left[\exp \left[-\xi^2 k_1 (k_2 + y^2) \right] \right] = \\ &= \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} \exp \left[-\xi^2 k_1 (k_2 - 1) \right] \cos \left[2\xi^2 k_1 k_2 \left[1 + \text{Re} \eta(x, \xi) + \tan \left[2\xi^2 k_1 k_2 \text{Im} \eta(x, \xi) \right] \right] \right]. \end{aligned} \quad (3.11)$$

A expressão para $\psi_a(x, \xi)$ obtida nesta dissertação, equação (3.11), é válida para quaisquer valores das variáveis x e ξ . Os resultados obtidos a partir da equação (3.11) serão apresentados na seção de resultados.

3.3 Expansão da função de alargamento Doppler em forma de séries

Embora a equação (3.11) forneça uma expressão simples, é possível separar a função erro com argumento complexo existente na forma funcional da função $\psi_a(x, \xi)$ em suas partes real e imaginária, segundo a expansão proposta por Salzer já apresentada no Capítulo 2. De acordo com Salzer, a função erro com argumento complexo pode ser expandida em forma de séries infinitas:

$$\text{erf} \left[A + Bi \right] = F_{\text{Re.}} + F_{\text{Im.}} i, \quad (3.12)$$

onde são definidos,

$$F_{\text{Re.}} = \text{erf } A + \frac{\exp -A^2}{\pi} \left[\frac{1 - \cos(2AB)}{2A} + 2 \sum_{n=1}^{n_{\text{max}}} \frac{\exp -n^2 / 4}{n^2 + 4A^2} f_n(A, B) \right] \quad (3.13)$$

e

$$F_{\text{Im.}} = \frac{\exp -A^2}{\pi} \left[\frac{\sin(2AB)}{2A} + 2 \sum_{n=1}^{n_{\text{max}}} \frac{\exp -n^2 / 4}{n^2 + 4A^2} g_n(A, B) \right], \quad (3.14)$$

e também as função auxiliares

$$f_n(A, B) = 2A - 2A \cosh nB \cos 2AB + n \sinh nB \sin 2AB \quad (3.15)$$

e

$$g_n(A, B) = 2A \cosh nB \sin 2AB + n \sinh nB \cos 2AB . \quad (3.16)$$

Denotando $A = -\xi \sqrt{k_1}$ e $B = -\xi k_2 \sqrt{k_1}$ é possível separar a função $\eta(x, \xi)$ em suas partes real e imaginária:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}[\eta(x, \xi)]_{Ap.} &\cong \operatorname{erf}[-\xi\sqrt{k_1}] + \\ &+ \frac{\exp[-\xi^2 k_1]}{\pi} \left[\frac{1 - \cos(2\xi^2 k_1 k_2)}{-2\xi\sqrt{k_1}} + 2 \sum_{n=1}^{n_{\max}} \frac{\exp[-n^2/4]}{n^2 + 4\xi^2 k_1} f_n(A, B) \right] \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\operatorname{Im}[\eta(x, \xi)]_{Ap.} \cong \frac{\exp[-\xi^2 k_1]}{\pi} \left[\frac{\sin(2\xi^2 k_1 k_2)}{-2\xi\sqrt{k_1}} + 2 \sum_{n=1}^{n_{\max}} \frac{\exp[-n^2/4]}{n^2 + 4\xi^2 k_1} g_n(A, B) \right], \quad (3.18)$$

sendo as funções auxiliares $f_n(x, \xi)$ e $g_n(x, \xi)$ reescritas por:

$$\begin{aligned} f_n(x, \xi) &= 2\xi\sqrt{k_1} - 2\xi\sqrt{k_1} \cosh[-n\xi k_2 \sqrt{k_1}] \cos 2\xi^2 k_1 k_2 + \\ &+ n \sinh[-n\xi k_2 \sqrt{k_1}] \sin 2\xi^2 k_1 k_2 \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} g_n(x, \xi) &= 2\xi\sqrt{k_1} \cosh[-n\xi k_2 \sqrt{k_1}] \sin 2\xi^2 k_1 k_2 + \\ &+ n \sinh[-n\xi k_2 \sqrt{k_1}] \cos 2\xi^2 k_1 k_2 \end{aligned} \quad (3.20)$$

Substituindo as equações (3.17) e (3.18) na expressão da função de alargamento Doppler $\psi_a(x, \xi)$, equação (3.11), é possível escrever a seguinte expressão para a função de alargamento Doppler:

$$\begin{aligned} \psi_a(x, \xi) &= \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp[-\xi^2 k_1 (k_2^2 - 1)] \cos 2\xi^2 k_1 k_2 \times \\ &\left[1 + \operatorname{Re} \eta(x, \xi) + \tan 2\xi^2 k_1 k_2 \operatorname{Im} \eta(x, \xi) \right]. \end{aligned} \quad (3.21)$$

A expressão para $\psi_a(x, \xi)$, dada pela equação (3.21), é uma expressão válida para todos os valores dos parâmetros x e ξ . Segundo Zukeran (Zukeran & Nakagawa, 2005), o erro de truncamento ε da expansão em série, equações (3.17) e (3.18), são da ordem de $\varepsilon \approx 10^{-16} \left| \operatorname{erf} \left[-i \sqrt{A + Bi} \right] \right|$ para $n_{\max} \rightarrow \infty$. Um estudo sistemático sobre que valor de n_{\max} deverá ser utilizado de modo a balancear o tempo computacional e a precisão dos resultados obtidos será efetuado no próximo capítulo.

Capítulo 4

Resultados

A proposta desta dissertação é a análise do comportamento da função do alargamento Doppler não levando em consideração a primeira aproximação proposta por Bethe-Placzek, o que gera um termo adicional $\psi_a(x, \xi)$, historicamente negligenciado. Neste capítulo, será analisada a influência de $\psi_a(x, \xi)$ e se realmente o mesmo poderia ser desprezado em aplicações práticas.

4.1 Resultados numéricos da função do alargamento Doppler

O método da Quadratura de Gauss-Legendre, método numérico interpolatório que fornece bom grau de precisão e permite aproximar uma integral definida, foi utilizado na presente dissertação para obter os resultados numéricos da função do alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ em uma faixa maior do que a encontrada na literatura (Duderstadt & Hamilton, 1976). O mesmo foi utilizado como método de referência para o cálculo da função do alargamento Doppler e do termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ proposto nesta dissertação. Sendo assim, foi possível construir as Tabelas 3 à 6 com valores calculados para a função do alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$, do termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ proposto nesta dissertação, da função de alargamento Doppler completa $\psi_c(x, \xi) = \psi(x, \xi) - \psi_a(x, \xi)$ e o desvio percentual entre a função de alargamento Doppler completa e a função de alargamento Doppler convencional $\psi(x, \xi)$.

Tabela 3: Função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ segundo as aproximações de Bethe-Placzek, calculada a partir da equação (2.28).

ξ	X								
	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
0.01	0.0084687	0.0086174	0.0087252	0.0087905	0.0088124	0.0087905	0.0087252	0.0086174	0.0084687
0.02	0.0149622	0.0160340	0.0168464	0.0173536	0.0175260	0.0173536	0.0168464	0.0160340	0.0149622
0.03	0.0183563	0.0214252	0.0239289	0.0255704	0.0261423	0.0255704	0.0239289	0.0214252	0.0183563
0.04	0.0185708	0.0243902	0.0296458	0.0333333	0.0346625	0.0333333	0.0296458	0.0243902	0.0185708
0.05	0.0163863	0.0249763	0.0338004	0.0405483	0.0430879	0.0405483	0.0338004	0.0249763	0.0163863
0.10	0.0026215	0.0106850	0.0329056	0.0662251	0.0838349	0.0662251	0.0329056	0.0106850	0.0026215
0.15	0.0007972	0.0025343	0.0169503	0.0732767	0.1223898	0.0732767	0.0169503	0.0025343	0.0007972
0.20	0.0006951	0.0014078	0.0071254	0.0661417	0.1588905	0.0661417	0.0071254	0.0014078	0.0006951
0.25	0.0006664	0.0012571	0.0039433	0.0525317	0.1934653	0.0525317	0.0039433	0.0012571	0.0006664
0.30	0.0006526	0.0012042	0.0031391	0.0388129	0.2262335	0.0388129	0.0031391	0.0012042	0.0006526
0.35	0.0006447	0.0011764	0.0028895	0.0281614	0.2573059	0.0281614	0.0028895	0.0011764	0.0006447
0.40	0.0006398	0.0011595	0.0027734	0.0211030	0.2867857	0.0211030	0.0027734	0.0011595	0.0006398
0.45	0.0006365	0.0011485	0.0027049	0.0168715	0.3147692	0.0168715	0.0027049	0.0011485	0.0006365
0.50	0.0006342	0.0011408	0.0026597	0.0144605	0.3413459	0.0144605	0.0026597	0.0011408	0.0006342

Tabela 4: Termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.6), considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

ξ	X								
	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
0.01	0.0056755	0.0056018	0.0055281	0.0054542	0.0053804	0.0053065	0.0052327	0.0051589	0.0050852
0.02	0.0029872	0.0028352	0.0026890	0.0025483	0.0024133	0.0022836	0.0021593	0.0020402	0.0019263
0.03	0.0004886	0.0004348	0.0003864	0.0003428	0.0003036	0.0002685	0.0002371	0.0002091	0.0001841
0.04	0.0000334	0.0000279	0.0000233	0.0000195	0.0000164	0.0000138	0.0000117	0.0000100	0.0000086
0.05	0.0000050	0.0000046	0.0000043	0.0000041	0.0000039	0.0000038	0.0000036	0.0000035	0.0000034
0.10	0.0000038	0.0000037	0.0000036	0.0000034	0.0000034	0.0000033	0.0000032	0.0000031	0.0000030
0.15	0.0000037	0.0000036	0.0000035	0.0000034	0.0000033	0.0000032	0.0000031	0.0000030	0.0000030
0.20	0.0000037	0.0000036	0.0000035	0.0000034	0.0000033	0.0000032	0.0000031	0.0000030	0.0000029
0.25	0.0000037	0.0000036	0.0000035	0.0000034	0.0000033	0.0000032	0.0000031	0.0000030	0.0000029
0.30	0.0000037	0.0000035	0.0000034	0.0000034	0.0000033	0.0000032	0.0000031	0.0000030	0.0000029
0.35	0.0000036	0.0000035	0.0000034	0.0000033	0.0000033	0.0000032	0.0000031	0.0000030	0.0000029
0.40	0.0000036	0.0000035	0.0000034	0.0000033	0.0000033	0.0000032	0.0000031	0.0000030	0.0000029
0.45	0.0000036	0.0000035	0.0000034	0.0000033	0.0000033	0.0000032	0.0000031	0.0000030	0.0000029
0.50	0.0000036	0.0000035	0.0000034	0.0000033	0.0000033	0.0000032	0.0000031	0.0000030	0.0000029

Tabela 5: Função de alargamento Doppler completa $\psi_c(x, \xi) = \psi(x, \xi) - \psi_a(x, \xi)$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

ξ	X								
	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
0.01	0.0027945	0.0030182	0.0032019	0.0033358	0.0034296	0.0034835	0.0034973	0.0034611	0.0033848
0.02	0.0119728	0.0131948	0.0141610	0.0148017	0.0151167	0.0150664	0.0146907	0.0139898	0.0130337
0.03	0.0178714	0.0209952	0.0235436	0.0252272	0.0258364	0.0253015	0.0236929	0.0212209	0.0181759
0.04	0.0185374	0.0243623	0.0296225	0.0333138	0.0346462	0.0333195	0.0296341	0.0243802	0.0185623
0.05	0.0163813	0.0249717	0.0337961	0.0405442	0.0430840	0.0405446	0.0337968	0.0249728	0.0163829
0.10	0.0026177	0.0106813	0.0329020	0.0662216	0.0838316	0.0662218	0.0329024	0.0106819	0.0026185
0.15	0.0007935	0.0025307	0.0169468	0.0732733	0.1223865	0.0732735	0.0169471	0.0025313	0.0007942
0.20	0.0006914	0.0014042	0.0071219	0.0661383	0.1588872	0.0661385	0.0071223	0.0014048	0.0006922
0.25	0.0006627	0.0012536	0.0039399	0.0525283	0.1934621	0.0525285	0.0039403	0.0012541	0.0006635
0.30	0.0006489	0.0012007	0.0031356	0.0388096	0.2262302	0.0388098	0.0031360	0.0012012	0.0006497
0.35	0.0006411	0.0011728	0.0028861	0.0281580	0.2573026	0.0281582	0.0028864	0.0011734	0.0006418
0.40	0.0006362	0.0011560	0.0027700	0.0210996	0.2867825	0.0210998	0.0027703	0.0011565	0.0006369
0.45	0.0006329	0.0011449	0.0027014	0.0168682	0.3147660	0.0168684	0.0027018	0.0011455	0.0006336
0.50	0.0006306	0.0011372	0.0026563	0.0144571	0.3413426	0.0144573	0.0026566	0.0011378	0.0006313

Tabela 6: Desvio percentual entre as funções de alargamento Doppler completa e a função de alargamento Doppler convencional calculado pela fórmula

$$\% = 100 \times \left| \frac{\psi(x, \xi) - \psi_c(x, \xi)}{\psi(x, \xi)} \right|, \text{ considerando a primeira ressonância do } {}^{238}\text{U}.$$

ξ	X								
	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
0.01	67.0	65.0	63.3	62.1	61.1	60.4	59.9	59.8	60.0
0.02	20.0	17.7	16.0	14.7	13.8	13.2	12.8	12.7	12.9
0.03	2.7	2.0	1.6	1.3	1.2	1.1	1.0	1.0	1.0
0.04	0.2	0.1	0.1	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.05	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.10	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.1
0.15	0.5	0.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.1	0.4
0.20	0.5	0.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.4
0.25	0.5	0.3	0.1	0.0	0.0	0.0	0.1	0.2	0.4
0.30	0.6	0.3	0.1	0.0	0.0	0.0	0.1	0.2	0.4
0.35	0.6	0.3	0.1	0.0	0.0	0.0	0.1	0.3	0.5
0.40	0.6	0.3	0.1	0.0	0.0	0.0	0.1	0.3	0.5
0.45	0.6	0.3	0.1	0.0	0.0	0.0	0.1	0.3	0.5
0.50	0.6	0.3	0.1	0.0	0.0	0.0	0.1	0.3	0.5

A partir dos desvios percentuais encontrados na tabela 6, conclui-se que, para os valores de ξ compreendidos entre 0.01 e 0.03, o termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ proposto nesta dissertação não deveria ser desprezado. Sendo assim, com intuito de não sobrecarregar o texto com tabelas que contemplem energias e temperaturas fora da região de interesse desta dissertação, apenas os resultados obtidos para $\xi \in 0.01, 0.03$ serão demonstrados.

Nas tabelas 7 e 8, encontram-se, respectivamente, os valores do termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ obtidos a partir da expressão analítica proposta nesta dissertação, equação (3.11) e os desvios percentuais em relação ao método numérico de referência, qual seja, o método da quadratura de Gauss-Legendre.

Tabela 7: Termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.11), considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

ξ	X								
	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
0.01	0.0056755	0.0056018	0.0055281	0.0054542	0.0053804	0.0053065	0.0052327	0.0051589	0.0050852
0.02	0.0029872	0.0028352	0.0026890	0.0025483	0.0024133	0.0022836	0.0021593	0.0020402	0.0019263
0.03	0.0004886	0.0004348	0.0003864	0.0003428	0.0003036	0.0002685	0.0002371	0.0002091	0.0001841

Tabela 8: Desvio percentual calculado a partir da fórmula $\% = 100 \times \left| \frac{\psi_a(x, \xi) - \psi_{\text{numerico}}(x, \xi)}{\psi_a(x, \xi)} \right|$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

ξ	X								
	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
0.01	0.1	0.0	0.0	0.1	0.0	0.1	0.1	0.0	0.1
0.02	0.1	0.2	0.0	0.1	0.1	0.2	0.0	0.0	0.2
0.03	0.2	1.1	1.0	0.9	1.3	0.4	1.3	0.5	2.2

A partir dos desvios percentuais visualizados na tabela 8 conclui-se que a aproximação analítica proposta apresenta bons resultados no cálculo de $\psi_a(x, \xi)$ na faixa de interesse.

4.2 Análises da expansão da função de alargamento Doppler

Embora a equação (3.11) forneça uma expressão simples e precisa para o cálculo de $\psi_a(x, \xi)$, pode ser conveniente obter uma expressão que seja livre de funções especiais em sua forma funcional, como a função erro com argumento imaginário, que pode ser facilmente calculada em *softwares* comerciais tais como o MAPLE® e MATLAB®.

Nesta dissertação, foi utilizada a equação (3.21), uma expansão em forma de séries para a função $\eta(x, \xi) = \text{erf}\left[-\xi\sqrt{k_1}(ik_2 + 1)\right]$, segundo a metodologia proposta por Salzer. O número de termos desta expansão pode influenciar na acurácia e no tempo de processamento computacional.

Nas tabelas 9 a 11, encontram-se os valores obtidos para diferentes valores de n_{\max} para o termo adicional, calculados a partir da equação (3.21). Nas tabelas 12 a 14, encontram-se os desvios percentuais da aproximação proposta em relação aos valores numéricos de referência, Tabela 4.

Tabela 9: Termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\max} = 5$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

ξ	X								
	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
0.01	0.0056694	0.0055957	0.0055220	0.0054481	0.0053743	0.0053005	0.0052266	0.0051529	0.0050792
0.02	0.0029716	0.0028200	0.0026740	0.0025337	0.0023990	0.0022697	0.0021457	0.0020269	0.0019133
0.03	0.0004747	0.0004216	0.0003737	0.0003307	0.0002921	0.0002575	0.0002266	0.0001990	0.0001745

Tabela 10: Termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\max} = 10$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

ξ	X								
	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
0.01	0.0056694	0.0055957	0.0055219	0.0054481	0.0053743	0.0053005	0.0052266	0.0051529	0.0050792
0.02	0.0029716	0.0028200	0.0026740	0.0025337	0.0023990	0.0022696	0.0021457	0.0020269	0.0019133
0.03	0.0004745	0.0004214	0.0003735	0.0003304	0.0002918	0.0002572	0.0002263	0.0001987	0.0001742

Tabela 11: Termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\max} = 15$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

ξ	X								
	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
0.01	0.0056694	0.0055957	0.0055219	0.0054481	0.0053743	0.0053005	0.0052266	0.0051529	0.0050792
0.02	0.0029716	0.0028200	0.0026740	0.0025337	0.0023990	0.0022696	0.0021457	0.0020269	0.0019133
0.03	0.0004745	0.0004214	0.0003735	0.0003304	0.0002918	0.0002572	0.0002263	0.0001987	0.0001742

Tabela 12: Desvio percentual entre os valores obtidos para o termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\max} = 5$ e o método numérico de referência (Tabela 4), considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

ξ	X								
	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
0.01	0.2	0.1	0.1	0.0	0.1	0.2	0.1	0.1	0.2
0.02	0.6	0.7	0.6	0.6	0.5	0.5	0.7	0.6	0.9
0.03	3.2	4.4	4.4	2.8	2.7	4.8	5.9	5.5	3.2

Tabela 13: Desvio percentual entre os valores obtidos para o termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\max} = 10$ e o método numérico de referência (Tabela 4), considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

ξ	X								
	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
0.01	0.2	0.1	0.1	0.0	0.1	0.2	0.1	0.1	0.2
0.02	0.6	0.7	0.6	0.6	0.5	0.5	0.7	0.6	0.9
0.03	3.3	4.4	4.4	2.9	2.8	5.0	6.1	5.7	3.4

Tabela 14: Desvio percentual entre os valores obtidos para o termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\max} = 10$ e o método numérico de referência (Tabela 4), considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

ξ	X								
	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
0.01	0.2	0.1	0.1	0.0	0.1	0.2	0.1	0.1	0.2
0.02	0.6	0.7	0.6	0.6	0.5	0.5	0.7	0.6	0.9
0.03	3.3	4.4	4.4	2.9	2.8	5.0	6.1	5.7	3.4

A partir dos desvios percentuais observados nas tabelas 12 a 14 conclui-se que aumentar o número de termos na expansão não acarreta necessariamente em um aumento de precisão na aproximação. Sendo assim, recomenda-se utilizar $n_{\max} = 5$ nos cálculos do termo adicional para $\xi = 0.01$ e $\xi = 0.02$, região onde o termo adicional deveria ser levado em consideração.

Demonstrado a validade do termo adicional proposto nesta dissertação, equação (3.6) e a acurácia de sua formulação analítica, equação (3.11), o seu comportamento gráfico pode ser visualizado na figura 2, juntamente com a função de alargamento Doppler convencional.

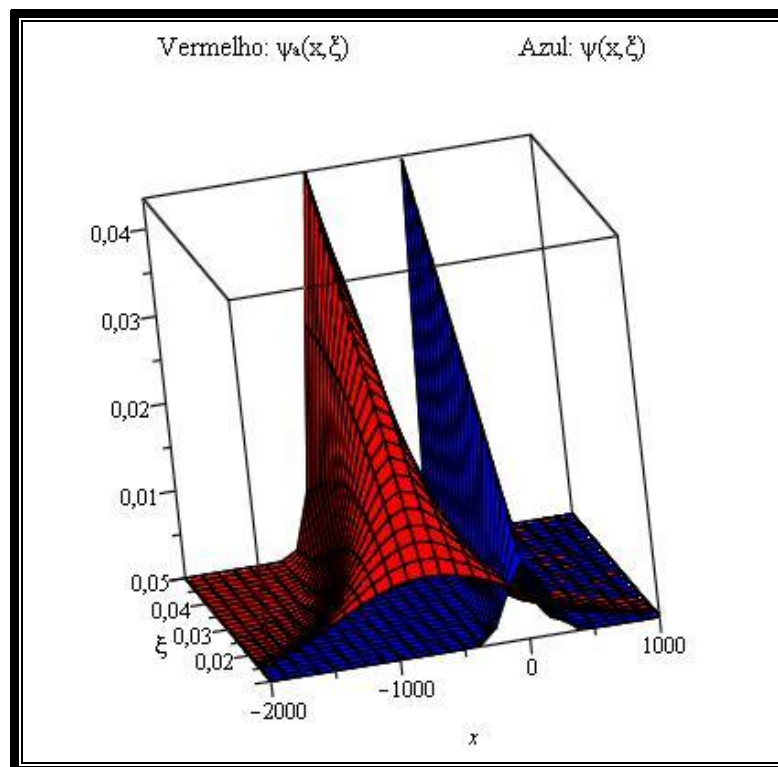


Figura 2: Comportamento da função do alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ (em azul) e do termo adicional

$\psi_a(x, \xi)$ (em vermelho), considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

As figuras 3, 4 e 5 mostram o comportamento da função do alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e do termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ variando o parâmetro x para valores fixos de ξ , considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

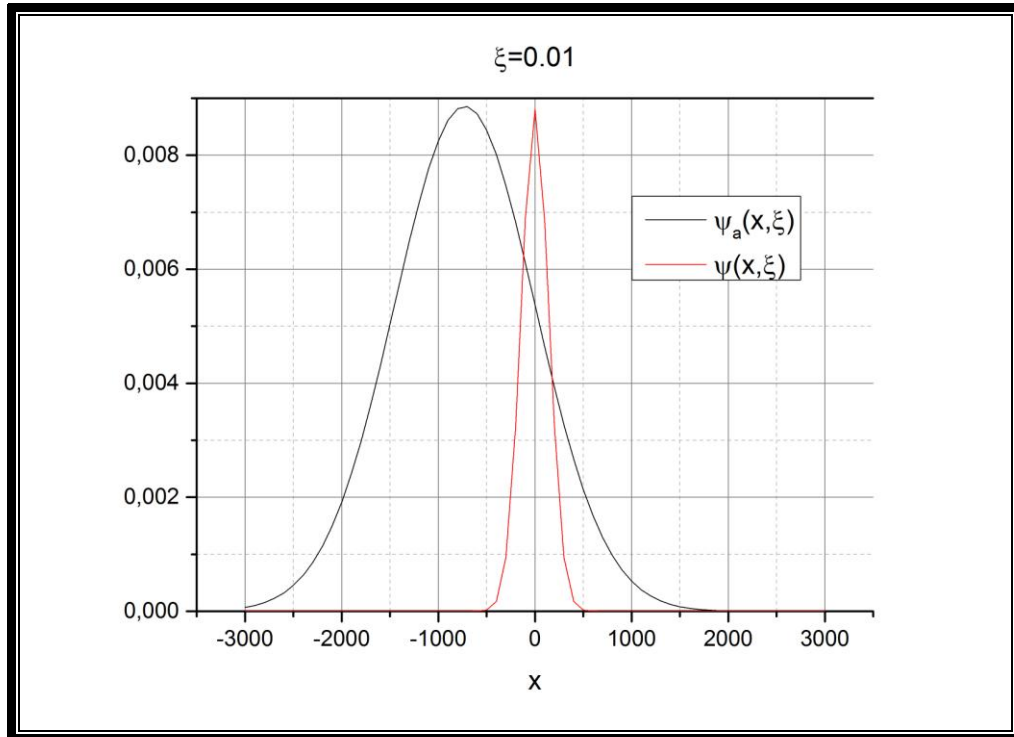


Figura 3: função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e do termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ variando o parâmetro x e fixando $\xi = 0.01$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

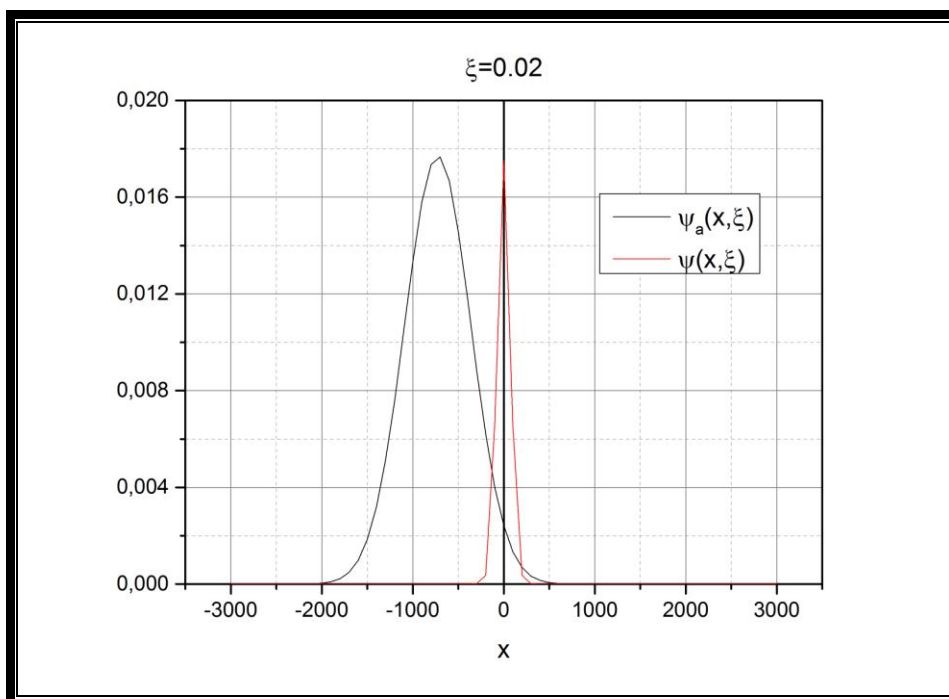


Figura 4: função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e do termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ variando o parâmetro x e fixando $\xi = 0.02$, considerando a primeira ressonância do ^{238}U .

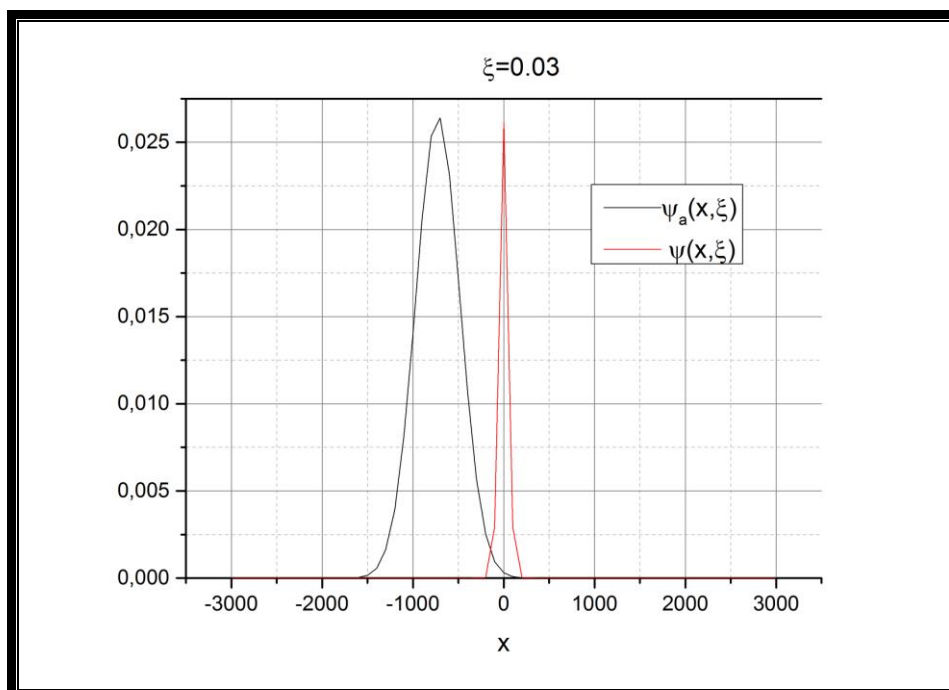


Figura 5: Comportamento das funções de alargamento Doppler e do termo adicional fixando $\xi = 0.03$ e variando x .

A partir dos gráficos das figuras 3 a 5, é possível observar que as funções $\psi_{x,\xi}$ e $\psi_a(x,\xi)$ apresentam comportamento semelhante, porém não na mesma região, vide o deslocamento em relação ao eixo vertical da função $\psi_a(x,\xi)$. A região de intersecção entre as funções, obviamente próximo de $x=0$, onde a ressonância ocorre, não é simétrica em relação ao eixo vertical. Nota-se que para valores negativos de x , ou seja, quando $E < E_0$, o termo adicional contribui mais para o cálculo da função completa. Conclui-se também que, à medida que o parâmetro ξ diminui, o efeito de não realizar a primeira aproximação de Bethe-Placzek torna-se mais importante no cálculo de $\psi_c(x,\xi)$.

4.3 A influência do termo adicional $\psi_a(x,\xi)$ aplicado ao cálculo da seção de choque de absorção ressonante

Segundo a equação (2.20), a seção de choque de absorção ressonante é proporcional à função de alargamento Doppler completa $\psi_c(x,\xi)$. Sendo assim, refinamentos no cálculo da função do alargamento Doppler acarretam em uma melhor precisão no cálculo da seção de choque microscópica de absorção.

Com intuito de demonstrar a aplicabilidade da aproximação proposta nesta dissertação, serão calculadas as seções de choque de absorção de diferentes ressonâncias do ^{238}U , levando em consideração o termo adicional $\psi_a(x,\xi)$ e também desprezando-o. A função de alargamento Doppler convencional $\psi_{x,\xi}$ foi calculada utilizando o método de Frobenius, equação (2.76), e o termo adicional foi calculado a partir da equação (3.21) com $n_{\max} = 5$.

Os parâmetros utilizados nesta análise podem ser visualizados na tabela 15.

Tabela 15: Parâmetros nucleares de diferentes ressonâncias do isótopo ^{238}U .

E_0 eV	Γ eV	Γ_γ eV	Γ_n eV	Γ_γ/Γ	Γ_n/Γ
6.674	0.0245	0.0230	0.0015	0.939	0.061
36.80	0.0570	0.0250	0.0320	0.439	0.561
102.47	0.0960	0.0260	0.0700	0.271	0.729

As figuras 6 a 10 mostram o efeito de considerar (método proposto) ou não (método de Frobenius) o termo adicional no cálculo da seção de choque de absorção para as ressonâncias do isótopo ^{238}U mostradas na tabela 15.

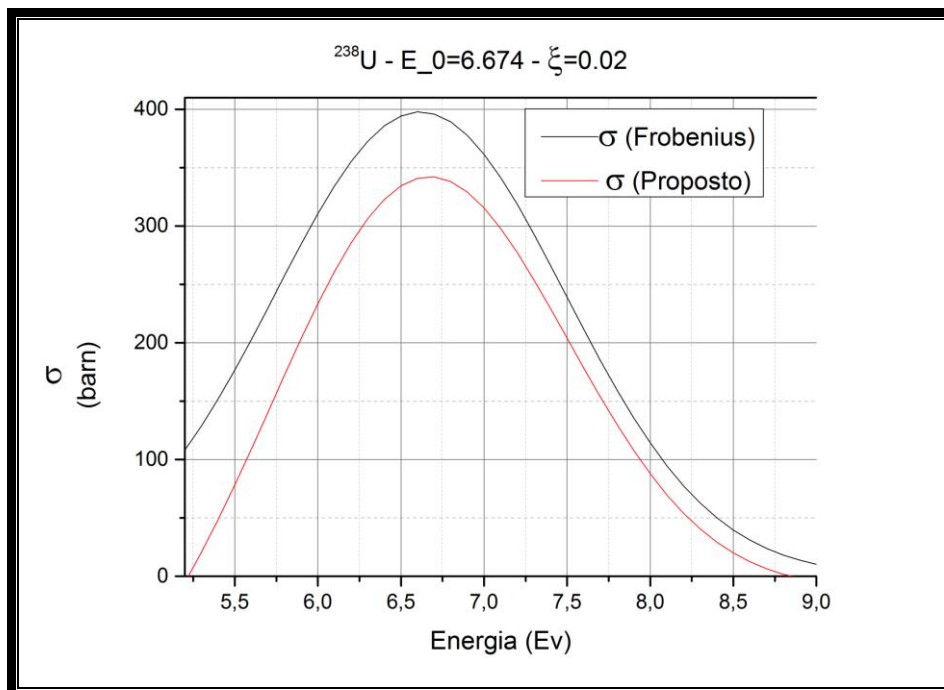


Figura 6: Seção de choque de absorção considerando a ressonância $E_0=6.673\text{eV}$ do ^{238}U e $\xi = 0.02$.

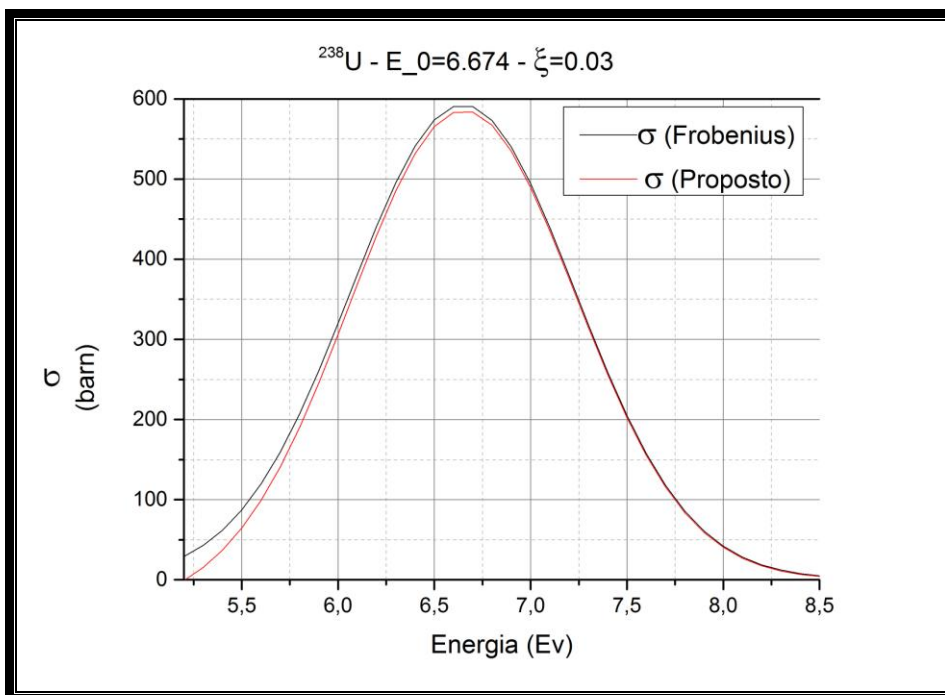


Figura 7: Seção de choque de absorção considerando a ressonância $E_0=6.673\text{eV}$ do ^{238}U e $\xi = 0.03$.

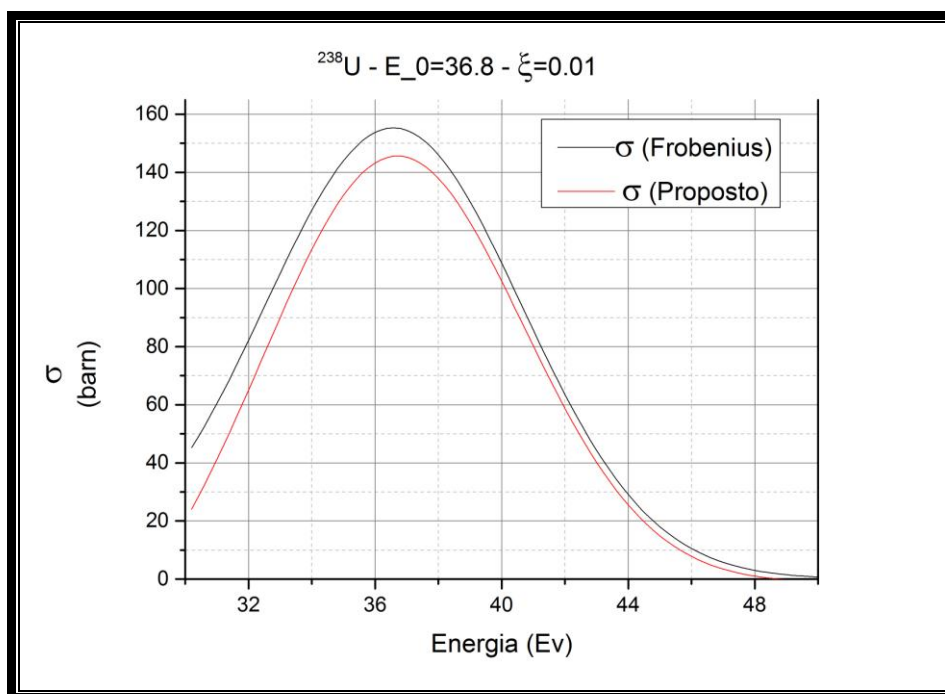


Figura 8: Seção de choque de absorção considerando a ressonância $E_0=36.8\text{eV}$ do ^{238}U , e $\xi = 0.01$.

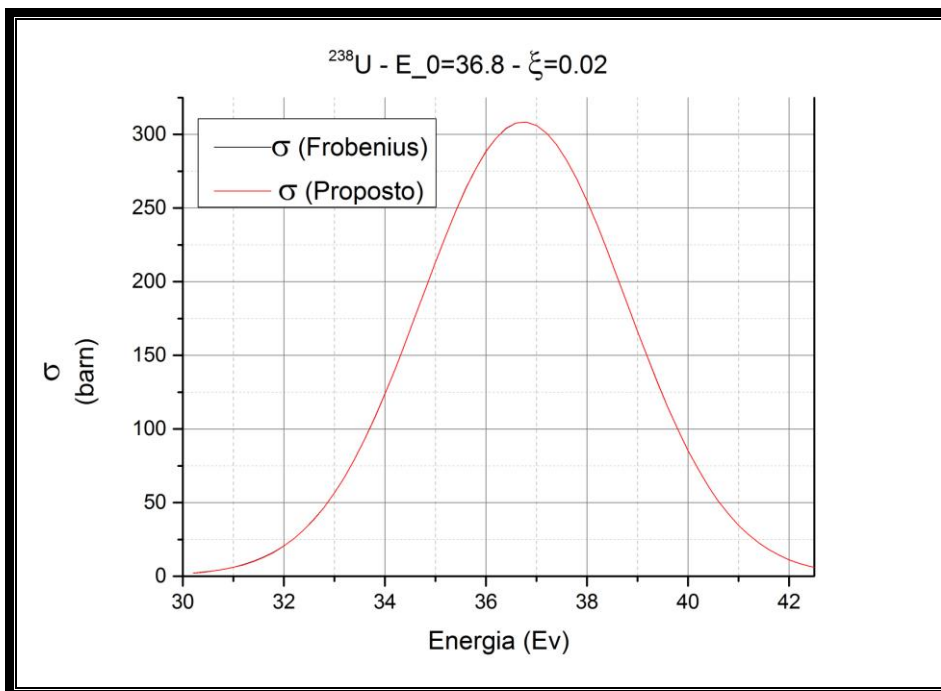


Figura 9: Seção de choque de absorção considerando a ressonância $E_0=36.8\text{eV}$ do ^{238}U , e $\xi = 0.02$.

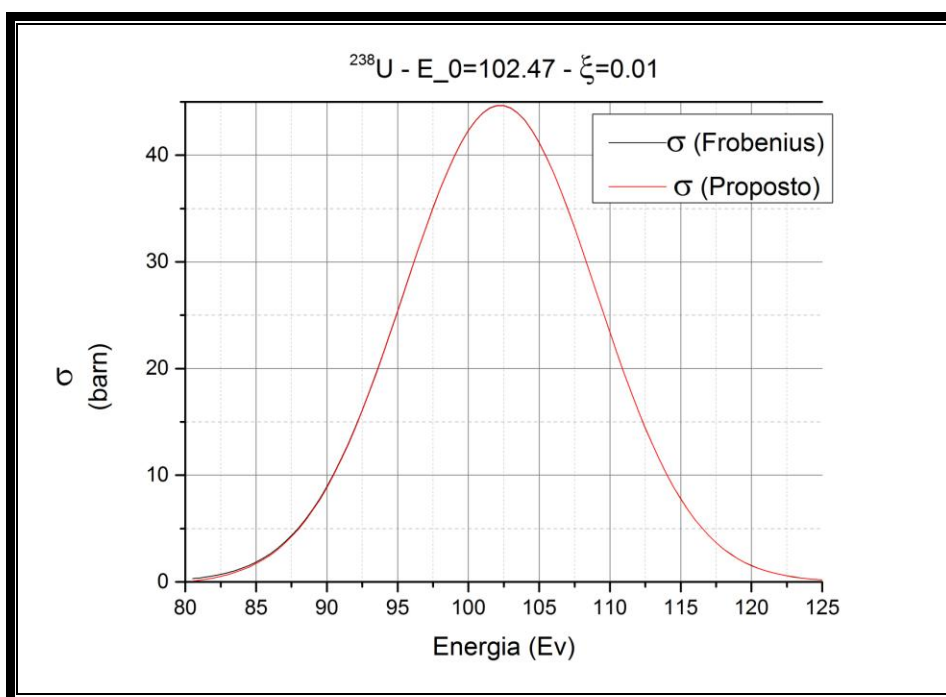


Figura 10: Seção de choque de absorção considerando a ressonância $E_0=102.47\text{eV}$ do ^{238}U , e $\xi = 0.01$.

As figuras 6 a 10 mostram que o efeito de considerar o termo adicional no cálculo da seção de choque de absorção é diferente para cada ressonância do

isótopo ^{238}U . Em todos os gráficos, onde o efeito foi visualizado, o mesmo foi mais evidenciado quando $E < E_0$. Essa constatação se deve ao fato da assimetria na interseção entre a função de alargamento Doppler convencional e o termo adicional, observada nas figuras 3 a 5 e já explicada anteriormente.

No caso das ressonâncias analisadas do isótopo ^{238}U , os resultados obtidos no cálculo das seções de choque levam a crer que as ressonâncias menos energéticas são mais sensíveis ao termo adicional e que ao aumentar o valor o parâmetro ξ em ressonâncias mais energéticas do isótopo ^{238}U fazem com que o termo adicional se torne irrelevante rapidamente.

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas futuras

O efeito de desconsiderar a primeira das três aproximações propostas por Bethe-Placzek na dedução da forma integral da função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ foi analisada nesta dissertação. Como consequência, um termo adicional $\psi_a(x, \xi)$ foi obtido, também em forma integral e escrito pela equação (3.6). Diferente da função de alargamento Doppler convencional, este termo adicional possui explicitamente em sua forma funcional parâmetros da ressonância a ser levada em consideração. Utilizando o método numérico da quadratura de Gauss-Legendre de alta ordem e considerando a primeira ressonância do isótopo ^{238}U , foram geradas tabelas de forma a identificar sob que circunstâncias este termo seria realmente importante. Constatou-se que, para $\xi \in [0.01, 0.03]$, este termo adicional torna-se importante, fazendo com que a função de alargamento Doppler usualmente adotada, considerando todas as aproximações de Bethe-Placzek, divirja em até 67% dos valores da função de alargamento Doppler completa.

Uma solução analítica para este termo adicional foi obtida, equação (3.11), a partir de uma solução bem estabelecida para a função de alargamento Doppler convencional obtida a partir do método de Frobenius e que corrobora com a solução obtida via o método da transformada de Fourier em cossenos. A solução obtida mostrou-se totalmente de acordo com o método numérico de referência, porém ainda continha funções especiais com argumento imaginário em sua forma funcional,

o que motivou a procura de expansões que pudessem contornar esta situação, facilitando a implementação computacional em linguagens compiladas, como o FORTRAN, por exemplo.

Sendo assim, a partir da expansão da função erro proposta por Salzer, foi possível escrever o termo adicional pela equação (3.21). Uma análise numérica constatou que um aumento excessivo no número de termos da expansão não levou necessariamente a um aumento da acurácia dos cálculos, sendo cinco termos um número adequado de termos para a expansão.

Como aplicação prática, foram calculadas as seções de choque de absorção de diferentes ressonâncias do isótopo ^{238}U com o intuito de analisar o quanto a função de alargamento completa $\psi_c(x, \xi) = \psi(x, \xi) - \psi_a(x, \xi)$ desvia-se da calculada da maneira convencional.

Algumas sugestões de trabalhos futuros estão elencadas a seguir:

- Estender os cálculos das seções de choque de absorção ressonantes para um número maior de isótopos e ressonâncias com o intuito de estabelecer um padrão da importância relativa do termo adicional. Esse cálculo poderia ser aplicado também à avaliação da importância do termo adicional nas seções de choque de espalhamento e total.
- Avaliar o impacto da inserção do termo adicional ao cálculo dos fatores de autoproteção na faixa epitérmica $G_{epi}(\tau, \xi)$ (Palma et. al., 2008).

- Avaliar o impacto da inserção do termo adicional ao cálculo da função $J(\xi, \beta)$
(Palma et. al., 2009).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Alvim. A. C. M.. *Métodos Numéricos em Engenharia Nuclear*. Ed Certa. Curitiba, 2007.
2. Arfken, G., *Mathematical Method for Physicists*, London, UK, Academic Press, Inc., 1985.
3. Butkov. E.. *Matemactical Physics*. Ed. Addison-Wesley. Nova York, 1987.
4. Beynon, T.D.; Grant, I.S., *Evaluation of the Doppler-Broadening Single-Level and Interference Functions*, 1963.
5. Campos, T. P. R., Martinez, A. S., *The dependence of pratical width on temperature*, Ann. Nucl. Energy, 14, 241, 1987.
6. Canright. R. Bruce. Jr.. Semler. Thor T.. *Comparison of Numerical Techniques for the Evaluation of the Doppler Broadening Functions $\Psi(x,\theta)$ and $\chi(x,\theta)$* . NASA. Washington. D. C., 1972.
7. Churchill. R. V.. *Fourier Series and Boundary Value Problems*. International Student Edition. 2 ED.. McGraw-Hill Book Company. Inc., 1963.
8. Dresner. L.. *Resonances Absorption in Nuclear Reactors*. Ed. Pergamon. Oxford, 1960.
9. Duderstadt. J. J.. Hamilton. L. J.. *Nuclear Reactor Analysis*. Ed. John Wiley and Sons. Nova York, 1976.
10. Gonçalves. A. C.. *Cálculo da Função de Alargamento Doppler Utilizando Análise de Fourier*. Tese D.Sc.. COPPE/UFRJ. Brasil, 2010.
11. Gradshteyn. I.. Ryzhik. I. M.. *Tables of Integrals. Series and Products*. Academic Press. Inc., 1980.
12. H. E. Salzer, *Formulas for calculating the error function of a complex variable*, Math. Tables and Other Aids to Computation , 1951.
13. John R. Lamarsh, Anthony J. Baratta. *Introduction to Nuclear Engineering*, Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, 2001.
14. Keshavamurthy, R. S., Harish, R., *Use of Padé approximations in the analytical evaluation of the $J(\theta,\beta)$ function and its temperature derivate*, Nuclear Science and Engineering, 115, 81, 1993.

15. Kiusalaas, J., *Numerical Methods in Engineering with MATLAB*, Cambridge University Press, 2005.
16. Mamedov. B. A.. *Analytical Evaluation of Doppler Functions Arising from Resonance Effects in Nuclear Processes*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. a 608. p 336-338. Turkey, 2009.
17. Martin. P.. Donoso. G.. and Cristi. J. Zamudio. "A modified asymptotic Padé method Applications to Multipole approximation for the plasma dispersion Z". J. Math Phys.. 21. 280, 1980.
18. Martinez. A. S.. Campos. T. P. R.. *Approximate Calculation of the Resonance Integral for Isolated Resonances*. Nuclear Science and Engineering. Estados Unidos. v. 102. p. 211-218, 1989.
19. Martinez. A. S.. Magalhães. C. M.. *Uma Aproximação Analítica para a Integral de Ressonância*. Anais do V Encontro de Física de Reatores e Termohidráulica. 1985.
20. Murray. R. L.. "Nuclear Science and Engineerin". n. 26. p. 362, 1966.
21. Palma. D. A. P.. *Formulações Analíticas para as Funções de Alargamento Doppler*. Tese D.Sc.. COPPE/UFRJ. Brasil, 2007.
22. Palma, D. A., Goncalves, A. C., Martinez, A. S., *An alternative analytical formulation for the Voigt function applied to resonant effects in nuclear processes*. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research. Section A, Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, v. 654, p. 406-411, 2011.
23. Palma, D. A., Martinez, A. S., *A faster procedure for the calculation of the $J(\xi, \beta)$* . Annals of Nuclear Energy, v. 36, p. 1516-1520, 2009.
24. Palma. D. A., Martinez. A. S., Silva. F. C., "Aproximação da função de alargamento através do método de Frobenius". International Nuclear Atlantic Conference. Santos, 2005.
25. Palma. D. A. P., Martinez. A. S., Silva. F. C., "Obtendo uma expressão para o termo de interferência a partir da função de alargamento Doppler". I Jornada nacional da produção científica em educação profissional e tecnológica. Brasília, 2006.
26. Palma. D. A. P., Martinez. A. S., Silva. F. C., "An analytical approximation for the interference term using Frobenius method and applications" International Nuclear Atlantic Conference. Santos, 2007.

27. Palma. D. A. P., Gonçalves. A. S., Martinez. A. S., Silva. F. C.. “*New approximations for the Doppler broadening function applied to the calculation of resonance self-shielding factors*”. International Conference on Reactor Physics. Nuclear Power. Interlaken. Switzerland, 2008.
28. Pathria. R. K.. *Statistical Mechanics*. Ed. Pergamon. Oxford, 1972.
29. Polyanin, A. D., Manzhirov, A. V., *Handbook of Integral Equation*, New York, USA, CRC Press, 1998.
30. Roe. G. M., *The absorption of neutrons in Doppler Broadened Resonances*. KAPL-1241, 1954.
31. Sakurai. J. J., *Modern Quantum Mechanics*. Ed. Prentice-Hall. Upper Saddle River, 1994.
32. Sanchez. A.. “*Determinação dos Parâmetros Intermediários de Ressonância no Formalismo de Multigrupo de Energia*”. Dissertação M. Sc. IPEN/CNEN-SP. Brasil, 1996.
33. Shcherbakov. O.. Harada. H.. “*Resonance Self-Shielding Corrections for Activations Cross Sections Measurements*”. Journal of Nuclear science and Technology. Japão. v. 39. n. 5. p. 548-553, 2002.
34. Stacey, W.M., *Nuclear Reactors Physics*. Wiley–Interscience, New York, 2001.
35. Talamo, A., *Analytical calculation of the fuel temperature reactivity coefficient for pebble and prismatic high temperature reactors for plutonium and uranium-thorium fuels*. Ann. Nucl. Energy 34, 68–82, 2007.
36. Zukeran. A., Nakagawa. T., *Criticality and Doppler Reactivity Worth Uncertainty Due To Resolved Resonance Parameter Errors – Formula For Sensitivity Analysis*. Jaeri – Research, 2005.

APÊNDICE A

QUADRATURA DE GAUSS-LEGENDRE

As quadraturas são propriedades interpolatórias que fornecem bons graus de precisão. A quadratura permite aproximar uma integral definida por:

$$I_n = \int_{-1}^{+1} f(x)dx = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i), \quad (\text{A.1})$$

em polinômios de grau igual ou menor que $2n+1$. O polinômio de Legendre $\mathfrak{P}_i(x)$, definido como, ortogonais à função peso $W(x)$ no intervalo $[a,b]$, se apresenta da seguinte forma:

$$\int_b^a W(x) \mathfrak{P}_i(x) \mathfrak{P}_j(x) dx = 0 \quad (\text{A.2})$$

Sendo assim, a quadratura de Gauss-Legendre torna-se:

$$\int_b^a W(x) f(x) dx = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i), \quad (\text{A.3})$$

onde os x_i são os zeros do polinômio de Legendre, definidos por:

$$\alpha_i = \int_b^a W(x) \frac{W_n(x)}{W_n'(x)(x-x_i)} dx \quad (\text{A.4})$$

A Tabela A1 apresenta os zeros do polinômio de Legendre e os pesos correspondentes.

Tabela A1: Zeros e pesos do polinômio.

i	x_i	$\omega(x_i)$
1	0.9879925	0.0307532
2	0.9372734	0.0703660
3	0.8482066	0.1071592
4	0.7244177	0.1395707
5	0.5709722	0.1662692
6	0.3941513	0.1861610
7	0.2011941	0.1984315
8	0.0000000	0.2025782
9	-0.2011941	0.1984315
10	-0.3941513	0.1861610
11	-0.5709722	0.1662692
12	-0.7244177	0.1395707
13	-0.8482066	0.1071592
14	-0.9372734	0.0703660
15	-0.9879925	0.0307532