

FORMULAÇÕES ANALÍTICAS PARA AS FUNÇÕES DE ALARGAMENTO DOPPLER.

Daniel Artur Pinheiro Palma

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Aprovada por:

Prof. Aquilino Senra Martinez, D. Sc.

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D. Sc .

Prof. Eduardo Gomes Dutra do Carmo, D. Sc

Prof. Roberto Schirru, D. Sc

Dr. Roberto David Martinez Garcia, Ph.D.

Dr. Sergio de Queiroz Bogado Leite, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

AGOSTO DE 2007

PALMA, DANIEL ARTUR PINHEIRO

Uma aproximação analítica para a
função de alargamento Doppler utilizando
o método de Frobenius [Rio de Janeiro]
2007

XI, 75p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, D.Sc.,
Engenharia Nuclear, 2007)

Tese – Universidade Federal do Rio de
Janeiro, COPPE

1. Função de alargamento Doppler

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

Dedico essa obra a minha avó materna.
Sem ela eu não chegaria
aonde cheguei e não sairia de onde eu vim.
Ela sem dúvida é a pessoa mais importante na minha vida.

AGRADECIMENTOS

A vida é feita de várias fases. Mais uma fase da minha vida está terminando com a obtenção do título de doutorado em ciências. Outras com certeza estão por vir. Como o ser humano não nasceu para ser só, várias pessoas nos cercam e sempre devemos agradecimentos a algumas delas.

Agradeço em primeiro lugar a minha avó Maria. Uma mulher que me ajuda muito e que me apoia incondicionalmente em qualquer empreitada que eu possa assumir. Sem ela não chegaria aonde cheguei. Talvez daqui pra frente possa me virar sem ela.

Agradeço a minha mãe, que mesmo não estando mais entre nós, me tornou um ser humano capaz de cuidar de outras pessoas. Ela não entendia nada do que eu fazia e mesmo assim achava bonito.

Agradeço a minha esposa por me aturar depois de um dia de muito trabalho. Com seu pezinho junto do meu consegui acordar cedo e começar tudo novamente.

No campo profissional agradeço ao Professor Aquilino por me oferecer um tema de tese solucionável. Agradeço por confiar na minha capacidade e corrigir minha trajetória nas vezes em que saí da linha. Ao Professor Fernando por saber extrair das minhas limitações resultados numéricos.

Agradeço aos meus alunos por aceitarem minhas faltas quando os prazos ficavam curtos. Em especial, agradeço ao Vinícius, meu primeiro aluno de iniciação científica que me tornou um orientador. Sua ajuda na redação e formatação final deste trabalho foram importantes.

Por último, pois sei que esse não se aborrece comigo nunca, agradeço a DEUS. Obrigado por tudo.

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

FORMULAÇÕES ANALÍTICAS PARA AS FUNÇÕES DE ALARGAMENTO DOPPLER

Daniel Artur Pinheiro Palma

Agosto/2007

Orientadores: Aquilino Senra Martinez
Fernando Carvalho da Silva

Programa: Engenharia Nuclear

Aproximações analíticas das funções de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e $\chi(x, \xi)$ são propostas. A aproximação para a função $\psi(x, \xi)$ é baseada na solução da equação diferencial para esta função utilizando os métodos de Frobenius e de variação de parâmetros. O termo de interferência $\chi(x, \xi)$ pode ser obtido diretamente da expressão de $\psi(x, \xi)$. A forma analítica de $\psi(x, \xi)$ em termos de funções elementares é muito simples. De posse dessas funções obtém-se expressões analíticas para as seções de choque de absorção ressonante. Pode-se aplicar estas aproximações no tratamento de dados nucleares, principalmente para o cálculo das constantes de multigrupos e fatores de auto-proteção ressonantes, sendo a última utilizada na medição correta da seção de choque microscópica pela técnica de ativação.

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

ANALYTICAL FORMULATION FOR DOPPLER BROADENING FUNCTIONS

Daniel Artur Pinheiro Palma

August/2007

Advisors: Aquilino Senra Martinez
Fernando Carvalho da Silva

Department: Nuclear Engineering

An analytical approximation of the Doppler broadening functions $\psi(x, \xi)$ and $\chi(x, \xi)$ is proposed. The approximation is based in the differential equation solution to $\psi(x, \xi)$ using both methods the Frobenius and the parameters variation. The interference term $\chi(x, \xi)$ can be obtained direct from the $\psi(x, \xi)$ expression. The analytical form of $\psi(x, \xi)$ in terms of the elementar functions is very simple. Once with these functions one can obtain the analytical expressions to the resonant absorption cross sections. One can apply these approximations in the nuclear data treatment, mainly for the multigroups constants calculations and the resonant self-protection factors, being the last one used in the correct microscopic cross section measurement by the activation technique.

Sumário

CAPÍTULO 1	1
Introdução	1
CAPÍTULO 2	5
As funções de alargamento Doppler	5
2.1 As aproximações de Bethe e Placzek	10
2.2 Propriedades da função de alargamento Doppler	12
2.3 Aproximações analíticas para a função de alargamento Doppler.....	15
2.4 A função do termo de interferência	18
CAPÍTULO 3	21
Formulação matemática do problema	21
3.1 Obtenção da equação diferencial que rege $\psi(x, \xi)$	21
3.2 Obtenção da equação diferencial que rege $\chi(x, \xi)$	23
3.3 Aplicação do método de Frobenius a parte homogênea da equação.....	24
3.4 Determinação das soluções particulares e gerais	27
3.5 Método alternativo para determinação do termo de interferência.....	37
CAPÍTULO 4	40
Aplicações: Seções de choque de espalhamento ressonante e fatores de auto-proteção	40
4.1 Determinação das seções de choque de absorção ressonante e de espalhamento.	40
4.2. Cálculo de fatores de auto-proteção	41
CAPÍTULO 5	46
Análise dos dados obtidos	46
5.1 A função de alargamento Doppler	46
5.2. O termo de interferência.....	51
5.3 Seções de choque de absorção ressonante e de espalhamento.	54
5.4 Resultados para os fatores de auto-proteção.....	60
CAPÍTULO 6	65
Conclusões e perspectivas futuras de trabalho	65

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	67
APÊNDICE A.....	69
O método de Frobenius e o método de variação de parâmetros.....	69
A.1 O método de Frobenius.....	69
A.2 O método de variação de parâmetros	72
APÊNDICE B.....	74
A função erro	74

Sumário de Figuras

Figura 1: Função de alargamento Doppler para $\xi = 0.5$	12
Figura 2: Função de alargamento Doppler para $\xi = 0.05$	13
Figura 3.: Termo de interferência para $\xi = 0.5$	19
Figura 4.: Seção de choque microscópica de espalhamento para $\xi = 0.5$	20
Figura 5.: Chapa exposta a um fluxo de nêutrons isotrópico	42
Figura 6.: Representação gráfica da função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ segundo o método de Frobenius.	47
Figura 7.: Erro percentual do método de Padé de 4 pólos e do método de Frobenius para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$, fixando $x = 8$ e variando ξ	48
Figura 8.: Erro percentual do método de Padé de 4 pólos e do método de Frobenius para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$, fixando $x = 10$ e variando ξ	49
Figura 9.: Erro percentual do método de Padé de 4 pólos e do método de Frobenius para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$, fixando $x = 20$ e variando ξ	49
Figura 10.: Erro percentual do método de Padé de 4 pólos e do método de Frobenius para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$, fixando $x = 40$ e variando ξ	50
Figura 11.: Representação gráfica da função do termo de interferência $\chi(x, \xi)$ segundo o método de Frobenius.	51
Figura 12.: Erro percentual da aproximação proposta para o termo de interferência $\chi(x, \xi)$, fixando $x = 8$ e variando ξ	52

Figura 13.: Erro percentual da aproximação proposta para o termo de interferência $\chi(x, \xi)$, fixando $x = 10$ e variando ξ	53
Figura 14.: Erro percentual da aproximação proposta para o termo de interferência $\chi(x, \xi)$, fixando $x = 20$ e variando ξ	53
Figura 15.: Erro percentual da aproximação proposta para o termo de interferência $\chi(x, \xi)$, fixando $x = 40$ e variando ξ	54
Figura 16.: Seções de choque totais do U^{238} para a ressonância $E_0=6.674\text{eV}$	57
Figura 17.: Seções de choque totais do U^{238} para a ressonância $E_0=20.87\text{eV}$	58
Figura 18.: Seções de choque totais do U^{238} para a ressonância $E_0=36.80\text{eV}$	59
Figura 19.: Seções de choque totais do U^{238} para a ressonância $E_0=66.54\text{eV}$	59
Figura 20.: Seções de choque totais do U^{238} para a ressonância $E_0=102.47\text{eV}$	60
Figura 21.: Integrando do fator de auto-proteção para $\tau = 0.01$ e $\xi = 0.25$	61
Figura 22.: Integrando do fator de auto-proteção para $\tau = 5.0$ e $\xi = 0.25$	61
Figura 23.: Integrando do fator de auto-proteção para $\tau = 10$ e $\xi = 0.25$	62
Figura 24.: A função erro.....	74

Sumário de Tabelas

Tabela 1.: Coeficientes p e q no método de Padé de 4 pólos.	16
Tabela 2.: Coeficientes h , a e b no método de Padé de 4 pólos.....	17
Tabela 3.: Ressonâncias do U^{238}	55
Tabela 4.: Parâmetros nucleares fixos utilizados na determinação das seções de choque de captura, espalhamento e total para o U^{238} na ressonância.....	56
Tabela 5.: Parâmetros nucleares variáveis utilizados na determinação das seções de choque de captura, espalhamento e total para o U^{238} na ressonância.	56
Tabela 6.: Fatores de auto-proteção para diferentes temperaturas utilizando o método de Frobenius no cálculo da função de alargamento Doppler.	64

Capítulo 1

Introdução

Em todos os reatores nucleares alguns nêutrons podem ser absorvidos na região de ressonância e, no projeto desses reatores, um acurado tratamento das absorções ressonantes é essencial. Além disso, a absorção ressonante varia com a temperatura do combustível, devido ao alargamento Doppler das ressonâncias [1]. A dependência com a temperatura da reatividade freqüentemente desempenha um papel importante no controle do reator.

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. Esta função é calculada numericamente em modernos sistemas de cálculo das constantes de macrogrupo, necessárias para determinação da distribuição de potência de um reator nuclear. Esta função também tem sido usada para o cálculo aproximado das integrais de ressonância em células de combustíveis heterogêneas [2,3]. Há também sua aplicação no cálculo de fatores de auto-proteção para correção das medidas das seções de choque microscópicas pela técnica de ativação. Neste tipo de aplicação recentemente [4,5] foi destacada a necessidade de desenvolver aproximações analíticas precisas para a função de alargamento Doppler. Foi também enfatizado que os códigos de cálculo usados para obter os valores desta função, ou tabelas geradas a partir destes códigos, não são convenientes para aplicações e processamento de dados experimentais resultantes da técnica de ativação. Na referência [4] Shcherbakov e Harada fizeram um estudo amplo das aproximações existentes à época, chegando a conclusão

que a aproximação de Padé de 4 pólos [6,7] é a que apresentava melhor precisão quando usada no cálculo do fator de auto-proteção da ressonância G_{epi} . A motivação básica desta tese é aplicar argumentos de análise complexa, a saber, o método de Frobenius, a fim de obter expressões analíticas para algumas funções presentes na forma funcional das seções de choque de absorção ressonante que se encontram em forma integral [8, 9]. Entre essas funções estão a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ e o termo de interferência $\chi(x, \xi)$. Ambas estão relacionadas diretamente, como é bem estabelecido na literatura, e serão discutidas nesta tese. Juntamente com outras técnicas matemáticas, como o método de variação de parâmetros, pretende-se obter uma formulação analítica para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ que forneça resultados precisos em todas as faixas de energia e de temperatura nas quais a aproximação de Bethe e Placzek seja válida, visto que a integração numérica ainda hoje é tida como padrão de referência para tal função. Prova disso é que o método numérico, para as funções na forma integral, ainda hoje é muito utilizado nos códigos de Física de Reatores. Existem alguns métodos de aproximação da integral que rege $\psi(x, \xi)$, sendo que mesmo os mais atuais como o método de Padé de 4 pólos, por exemplo, ainda apresentam desvios percentuais consideráveis em relação ao valor de referência, mesmo não fornecendo uma expressão de fácil uso e/ou implementação computacional.

Para alcançar tal objetivo será utilizado o método de Frobenius, lançando mão de argumentos de análise complexa e séries de potências generalizadas [10] para obter soluções linearmente independentes para a parte homogênea da equação diferencial que rege $\psi(x, \xi)$ [11]. De posse dessas soluções aplicou-se o método de variação de parâmetros a fim de obter uma solução particular e, conseqüentemente, a solução geral da equação diferencial. Utilizando a mesma metodologia determinou-se uma expressão

analítica, tão simples quanto da função de alargamento Doppler, para o termo de interferência $\chi(x, \xi)$. Com isso, ficam determinadas as seções de choque de absorção ressonante e de espalhamento para ressonâncias bem resolvidas.

Uma outra aplicação prática para as novas aproximações analíticas da função de alargamento Doppler vem do fato que nem todos os detectores de nêutrons existentes determinam satisfatoriamente a intensidade de um fluxo de nêutrons estacionário. Porém, é comum utilizar os chamados indicadores radioativos, já que é sempre possível ativar o sensor do detector e então contar sua radioatividade. Esse é o princípio da técnica de ativação [12,13] que permite medidas muito precisas da intensidade de nêutrons, sejam elas relativas ou absolutas. Na técnica de ativação é necessário o conhecimento da função de alargamento Doppler para determinar os fatores de auto-proteção ressonantes. Formulações analíticas simples e precisas seriam um avanço nesse sentido pois demandariam menor processamento computacional. Isso é importante visto que no cálculo de fatores de auto-proteção tem-se uma integral dupla com limites no infinito na qual a função de alargamento Doppler aparece como argumento de funções mais complexas.

No capítulo 2 é feita uma breve revisão teórica dos fenômenos envolvidos na obtenção da expressão da função de alargamento Doppler segundo as aproximações de Bethe-Placzek.

No capítulo 3 são obtidas expressões analíticas para a função de alargamento Doppler e o termo de interferência utilizando os métodos de Frobenius e de variação de parâmetros. Os resultados obtidos são comparados com outros métodos, inclusive o numérico, o que demonstra a compatibilidade do método proposto.

No capítulo 4 os resultados obtidos no capítulo 3 são aplicados nos cálculos de seções de choque microscópicas de absorção ressonante e de espalhamento. Como

exemplo, são tratadas as principais ressonâncias do ^{238}U . Os resultados obtidos são validados pelos valores estabelecidos na literatura. Esses resultados são reportados no capítulo 5. Uma outra aplicação, ainda no capítulo 4, é o cálculo de fatores de auto-proteção, no qual a função de alargamento Doppler apresenta um papel fundamental. Como o fator de auto-proteção é fornecido na forma de uma integral dupla, um dos avanços desta tese é transformar a sua forma funcional em uma integral simples com o intuito de aplicar o método de integração gaussiana. O método apresentou bons resultados com um infinito numérico muito menor do que o habitual, o que se converte em economia de tempo computacional.

No capítulo 5 são reportados os resultados obtidos para a função de alargamento Doppler e para o termo de interferência, assim como suas aplicações nos cálculos das seções de choque de absorção ressonante e de espalhamento. Os resultados obtidos para a determinação dos fatores de auto-proteção são encontrados nesse capítulo.

O capítulo 6 trata das conclusões e de sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

As funções de alargamento Doppler

Consideremos um meio com temperatura T onde os núcleos alvo estão em movimento térmico. Em um estado de equilíbrio térmico à temperatura T , as velocidades são distribuídas pela função de distribuição de Maxwell-Boltzmann [14]

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

onde N é o número de partículas, M é a massa da partícula e k é a constante de Boltzmann.

Considerando os nêutrons como um gás ideal em equilíbrio térmico, pode-se escrever a seção de choque média de interação nêutron-núcleo levando em consideração o movimento dos nêutrons e dos núcleos como:

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

onde $f(\vec{V})$ é a função de distribuição de Maxwell-Boltzmann dada pela equação (2.1) e

$\vec{V} = V \hat{\Omega}$ é a velocidade dos núcleos alvo. Denotando $\vec{v}_r = \vec{v} - \vec{V}$ a velocidade relativa entre o movimento do nêutron e o movimento do núcleo alvo e considerando o espaço isotrópico, ou seja, sem direção privilegiada, pode-se separar a integração contida na equação (2.2) na integral dupla:

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

Na equação (2.3) vê-se claramente que a seção de choque depende da velocidade relativa entre os nêutrons e os núcleos alvo. Como os núcleos estão em movimento térmico, a velocidade relativa pode aumentar ou diminuir. Essa diferença entre as velocidades relativas dão origem ao efeito de desvio Doppler no comportamento da seção de choque.

Após integrar a equação (2.3) em relação ao ângulo azimutal ϕ , a seção de choque média de interação nêutron-núcleo pode ser escrita por:

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

Denotando $\mu = \cos \theta$, de modo que $d\mu = -\sin \theta d\theta$, a equação (2.4) toma a forma:

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

A partir da definição da velocidade relativa tem-se a relação

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

e, por consequência,

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

Procedendo uma substituição simples, utilizando as relações (2.6) e (2.7), a equação (2.5) é escrita por:

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

Na equação (2.8), os limites de integração são sempre positivos devido à presença do módulo. Por isso, deve-se separar a integral presente na equação (2.8) em duas integrais distintas, a saber,

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

É possível modificar os limites de integração da equação (2.9) lembrando que a massa do núcleo alvo é muito maior que a massa do nêutron incidente. Em termos da velocidade relativa, a equação (2.9) pode ser escrita como:

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

Substituindo a expressão da função distribuição de Boltzmann, equação (2.1), na equação (2.10) tem-se:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{2\beta^3}{v^2 \sqrt{\pi}} \left[\int_{v-v_r}^{v+v_r} v_r^2 \sigma(v_r) dv_r \int_0^v dVVe^{-\beta^2 V^2} + \int_{v_r-v}^{v+v_r} v_r^2 \sigma(v_r) dv_r \int_v^\infty dVVe^{-\beta^2 V^2} \right], \quad (2.11)$$

onde denotou-se $\beta^2 = \frac{M}{2kT}$. Introduzindo as variáveis de velocidades reduzidas $\varpi_r = \beta v_r$

e $\varpi = \beta v$, a equação (2.11) fica escrita por:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{2\beta^2}{\varpi^2 \sqrt{\pi}} \left[\int_0^{\varpi/\beta} \varpi_r^2 \sigma(\varpi_r) d\varpi_r \int_{(\varpi-\varpi_r)/\beta}^{(\varpi+\varpi_r)/\beta} dVVe^{-\beta^2 V^2} + \int_{\varpi/\beta}^\infty \varpi_r^2 \sigma(\varpi_r) d\varpi_r \int_{(\varpi_r-\varpi)/\beta}^{(\varpi_r+\varpi)/\beta} dVVe^{-\beta^2 V^2} \right]. \quad (2.12)$$

Integrando a equação (2.12) em relação a V chega-se a expressão:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{1}{\varpi^2 \sqrt{\pi}} \int_0^\infty \varpi_r^2 \sigma(\varpi_r) \left[e^{-(\varpi-\varpi_r)^2} - e^{-(\varpi+\varpi_r)^2} \right] d\varpi_r. \quad (2.13)$$

Para ressonâncias (isto é, para os níveis de energia do núcleo composto) é possível descrever a dependência energética da seção de choque de absorção por uma fórmula simples, válida para $T = 0K$, conhecida como fórmula de Breit-Wigner de captura ressonante [1], expressa em função da energia do centro de massa por

$$\sigma_\gamma(E_{CM}) = \sigma_0 \frac{\Gamma \gamma}{\Gamma} \left(\frac{E_0}{E_{CM}} \right)^{1/2} \frac{1}{1 + \frac{4}{\Gamma^2} (E_{CM} - E_0)^2}, \quad (2.14)$$

onde E_0 é a energia onde a ressonância ocorre e E_{CM} é a energia do centro de massa do sistema nêutron-núcleo. Além disso, na equação (2.14) aparece o termo σ_0 , que é o

valor da seção de choque total $\sigma_{total}(E)$ na ressonância E_0 que pode ser escrito em termos do comprimento de onda reduzido λ_0 por:

$$\sigma_0 = 4\pi\lambda_0^2 \frac{\Gamma_n}{\Gamma} g = 2.608 \times 10^6 \frac{(A+1)^2}{A^2 E (eV)} \frac{\Gamma_n}{\Gamma} g, \quad (2.15)$$

onde o fator de spin estatístico g é dado pela expressão:

$$g = \frac{2J+1}{2(2I+1)}, \quad (2.16)$$

sendo I o spin nuclear e J o spin total [15].

Substituindo a expressão (2.14) na equação (2.13) encontra-se uma expressão exata para a seção de choque média nas variáveis originais, válida para qualquer temperatura:

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

Em um sistema de dois corpos pode-se escrever a energia cinética, no sistema centro de massa, por

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

onde $M_R = \frac{mM}{m+M}$ é a massa reduzida do sistema. Para o problema em questão, de um nêutron incidindo em um sistema em equilíbrio térmico com temperatura T , é uma boa aproximação $v \approx v_r$. Sendo assim, a razão entre a energia cinética do nêutron incidente e a energia cinética do sistema centro de massa é escrita por

$$\frac{E_{CM}}{E_0} = \frac{A+1}{A}, \quad (2.19)$$

onde A é a massa atômica do núcleo alvo.

Fazendo:

$$y = \frac{2}{\Gamma}(E_{CM} - E_0) \quad (2.20a)$$

$$x = \frac{2}{\Gamma}(E - E_0), \quad (2.20b)$$

e denotando $\beta^2 = \frac{1}{2v_{th}^2}$ obtém-se, finalmente, a expressão da seção de choque de captura radioativa próxima à uma ressonância isolada qualquer com energia de pico E_0 , escrita por

$$\bar{\sigma}_\gamma(E, T) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \left(\frac{E_0}{E} \right)^{1/2} \Psi(x, \xi), \quad (2.21)$$

sendo

$$\Psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2} \int_{-2E/\Gamma}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \left[\exp\left(-\frac{(v-v_r)^2}{2v_{th}^2}\right) - \exp\left(-\frac{(v+v_r)^2}{2v_{th}^2}\right) \right], \quad (2.22)$$

onde v_r é o módulo da velocidade relativa nêutron-núcleo, v é o módulo da velocidade do nêutron e

$$\xi \equiv \frac{\Gamma}{\Gamma_D}. \quad (2.23)$$

O comprimento Doppler da ressonância Γ_D é expresso por:

$$\Gamma_D = (4E_0 kT / A)^{1/2}. \quad (2.24)$$

Todos os outros parâmetros nucleares elencados a seguir são bem estabelecidos na literatura:

- A = Número de massa;
- T = Temperatura absoluta;
- E = Energia do nêutron incidente;
- E_{CM} = Energia do centro de massa;

- E_0 = Energia em que a ressonância ocorre;
- Γ = Largura total da ressonância medida nas coordenadas do laboratório;
- $\Gamma_D = (4E_0kT / A)^{1/2}$ = Comprimento Doppler da ressonância;
- 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;
- $v_{th} = \sqrt{\frac{2kT}{M}}$ = Módulo da velocidade de cada átomo do alvo

2.1 As aproximações de Bethe e Placzek

A expressão proposta por Bethe e Placzek para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ é obtida a partir de algumas aproximações, a saber:

1) Ignora-se a segunda exponencial na equação (2.22), visto que esta decresce exponencialmente e é desprezível em relação a primeira integral na equação (2.22) já que

$$(v + v_r)^2 \gg (v - v_r)^2;$$

2) É uma boa aproximação estender o limite inferior de integração até $-\infty$ na equação (2.22), visto que a razão entre a energia de incidência do nêutron e a largura prática é grande.

3) Sendo E_{CM} a energia do sistema no referencial centro de massa e E a energia do nêutron incidente, a seguinte relação é sempre satisfeita:

$$E_{CM}^{1/2} = E^{1/2} \left(1 + \frac{E_{CM} - E}{E} \right)^{1/2} = E^{1/2} (1 + \eta)^{1/2}, \quad (2.25)$$

onde denotou-se $\eta = \frac{E_{CM} - E}{E}$. A equação (2.23) pode ser expandida em série de Taylor,

sendo escrita por

$$E_{CM}^{1/2} = E^{1/2} \left(1 + \frac{\eta}{2} - \frac{\eta^2}{4} + \dots \right). \quad (2.26)$$

Até primeira ordem, a relação (2.26) fica escrita como

$$E_{CM}^{1/2} \approx E^{1/2} \left(1 + \frac{E_{CM} - E}{2E} \right). \quad (2.27)$$

Em termos das massas e das velocidades, a equação (2.27) fica escrita por

$$\left(\frac{M_R v_r^2}{2} \right)^{1/2} = \left(\frac{mv^2}{2} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{\frac{M_R v_r^2}{2} - \frac{mv^2}{2}}{mv^2} \right), \quad (2.28)$$

onde M_R é a massa reduzida do sistema. Para núcleos pesados $M_R \approx m$ e a equação (2.27) fica reduzida a relação:

$$v_r = \frac{v_r^2 + v^2}{2v}, \quad (2.29)$$

de tal forma que:

$$v - v_r = v - \frac{v_r^2 + v^2}{2v} = \frac{v^2 - v_r^2}{2v}. \quad (2.30)$$

Substituindo a aproximação (2.29) na exponencial restante da equação (2.22) obtém-se, finalmente, a função de alargamento Doppler que será tratada nesta tese:

$$\psi(x, \xi) \approx \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2\right]. \quad (2.31)$$

As aproximações feitas nesta seção se aplicam quase que na totalidade dos casos práticos, não se aplicando apenas nas situações de baixas energias de ressonância ($E < 1eV$) e temperaturas muito altas.

Na próxima seção algumas propriedades e limites especiais serão abordados para a função de alargamento Doppler.

2.2 Propriedades da função de alargamento Doppler

A função de alargamento Doppler para temperaturas fixas (ou seja, para um ξ fixo), escrita pela equação (2.31), é representada graficamente nas figuras 1 e 2:

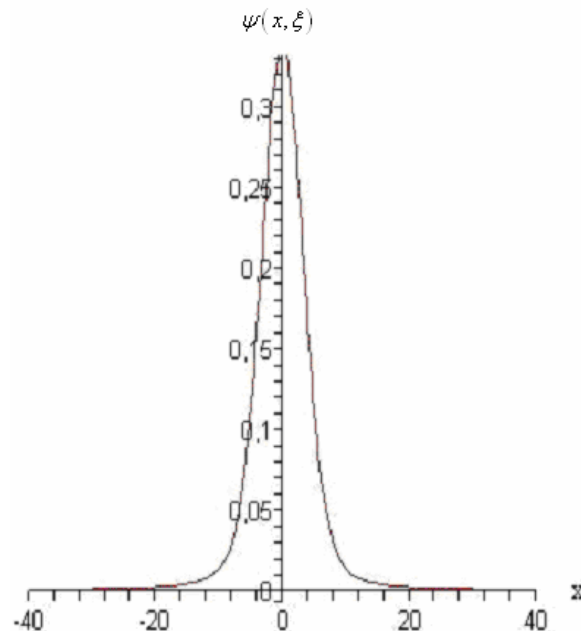


Figura 1: Função de alargamento Doppler para $\xi = 0.5$.

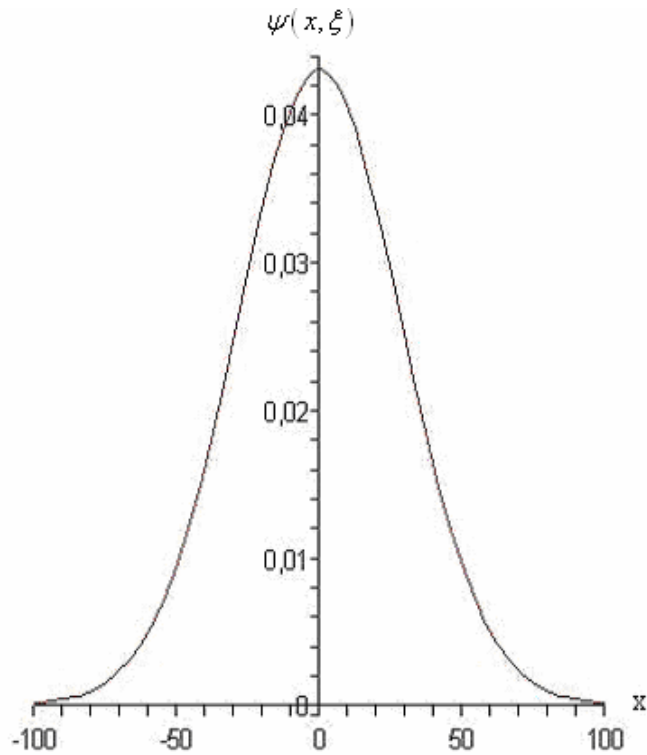


Figura 2: Função de alargamento Doppler para $\xi = 0.05$.

A partir das figuras 1 e 2 pode-se constatar facilmente a simetria da função $\psi(x, \xi)$, assim como o alargamento da mesma a medida que ξ diminui, ou seja, a medida que a temperatura absoluta T aumenta. É fácil verificar que a função de alargamento Doppler assume apenas valores positivos.

Quando a temperatura do núcleo do reator é muito baixa, ou seja, quando $\xi \rightarrow \infty$, a função de alargamento Doppler também tende para

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} \psi(x, \xi) = \lim_{\xi \rightarrow \infty} \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \times \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\lim_{\xi \rightarrow \infty} e^{-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2} \right] \frac{dy}{1+y^2} = 0, \quad (2.32)$$

visto que a exponencial decresce mais rápido que o crescimento de ξ . O limite expresso na equação (2.32) é sempre válido, exceto, quando $x = y$.

Partindo da própria formulação integral (2.31) da função de alargamento Doppler e utilizando o fato de que a exponencial decresce muito rápido tem-se a seguinte expressão limite para temperaturas muito altas:

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} \psi(x, \xi) \approx \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{\xi^2 x^2}{4}}}{1+y^2} dy = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} e^{-\frac{(E-E)^2}{\Gamma_b^2}}. \quad (2.33)$$

A função de alargamento Doppler possui uma outra propriedade interessante relativa ao cálculo das áreas sob as curvas da seção de choque média $\bar{\sigma}_\gamma(E, T)$ para ressonâncias isoladas. Teoricamente essas áreas variam com a temperatura T do meio, porém para os intervalos de temperatura e energia de interesse para os reatores térmicos essa variação pode ser considerada desprezível.

Utilizando a expressão para a função de alargamento Doppler, equação (2.31), e a relação expressa pela equação (2.18), obtém-se a área sob uma ressonância isolada calculando a integral

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{\sigma}_\gamma(E, T) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(\frac{E_0}{E} \right)^{1/2} \psi(x, \xi). \quad (2.34)$$

Para energias próximas a ressonância $\left(\frac{E_0}{E} \right)^{1/2} \approx 1$. A partir da equação (2.20b)

procede-se uma substituição simples, escrevendo a equação (2.34) por:

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{\sigma}_\gamma(E, T) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma \xi}{4\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2\right]. \quad (2.35)$$

As integrais que aparecem na equação (2.35) são conhecidas e fornecem para a área sob a curva

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \bar{\sigma}_\gamma(E, T) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma \xi}{4\sqrt{\pi}} (\pi) \left(\sqrt{\pi} \frac{2}{\xi} \right) = \frac{\sigma_0 \pi \Gamma_\gamma}{2}, \quad (2.36)$$

que independe da temperatura e é constante. A equação (2.36) mostra que mesmo o fenômeno de alargamento das ressonâncias à medida que a temperatura varia não altera a área sob a curva.

2.3 Aproximações analíticas para a função de alargamento Doppler

Nesta seção é feito um breve resumo de duas das mais conhecidas aproximações para a função de alargamento Doppler, a saber, a aproximação assintótica [2] e a aproximação de Padé de 4 pólos.

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 (2.31) em séries de Taylor em torno de $y = x$. Essa expressão é válida desde que $|x\xi| > 6$ [2]:

$$\psi(x, \xi) = \frac{1}{1+x^2} \left\{ 1 + \frac{2}{\xi^2} \frac{(3x^2-1)}{(1+x^2)^2} + \frac{12}{\xi^4} \frac{(5x^4-10x^2-1)}{(1+x^2)^4} + \dots \right\}. \quad (2.37)$$

Embora existam limitações na utilização da equação (2.37) esta é muito útil, por exemplo, quando se quer determinar o comportamento da função de alargamento Doppler em situações especiais. Para valores grandes de x vê-se que a função $\psi(x, \xi)$ tem comportamento assintótico tal que:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x, \xi) \approx \frac{1}{1+x^2}. \quad (2.38)$$

2.3.2 As aproximações de Padé

As aproximações de Padé [6,7] são muito utilizadas para determinar valores para a função de alargamento Doppler e para o cálculo de integrais de ressonância. Essas aproximações descrevem funções que possuem pólos melhor do que as séries de Taylor por utilizarem funções racionais, ou seja, razão entre polinômios. Este é o caso da função de alargamento Doppler.

Nesta seção é feito um breve resumo da aproximação de Padé 4 pólos, que consiste em aproximar $\psi(x, \xi)$ pela função racional:

$$\psi(x, \xi) = h \frac{a_0 + a_2 (hx)^2 + a_4 (hx)^4 + a_6 (hx)^6}{b_0 + b_2 (hx)^2 + b_4 (hx)^4 + b_6 (hx)^6 + b_8 (hx)^8}. \quad (2.39)$$

Os coeficientes estão descritos nas referências [6,7] e são dependentes de potências elevadas de ξ . Os coeficientes necessários para o cálculo da função de alargamento Doppler dado pela equação (2.39) são encontrados nas tabelas 1 e 2:

Tabela 1.: Coeficientes p e q no método de Padé de 4 pólos.

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

Tabela 2.: Coeficientes h , a e b no método de Padé de 4 pólos.

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

A expressão final, segundo a aproximação de Padé de 4 pólos, é dada por:

$$\psi(x, \xi) = \frac{F(x, \xi)}{G(x, \xi)}, \quad (2.40)$$

sendo os polinômios $F(x, \xi)$ e $G(x, \xi)$ escritos por:

$$\begin{aligned}
F(x, \xi) = & 2\xi \cdot (7,089815404 \cdot 10^{22} + 1,146750844 \cdot 10^{23} \xi + 8,399725059 \cdot 10^{22} \xi^2 \\
& + 3,622207053 \cdot 10^{22} \xi^3 + 9,957751740 \cdot 10^{21} \xi^4 + 1,749067258 \cdot 10^{21} \xi^5 \\
& + 1,835165213 \cdot 10^{20} \xi^6 + 8,940072699 \cdot 10^{18} \xi^7 - 2,539736657 \cdot 10^{21} \xi^2 x^2 \\
& + 2,069483991 \cdot 10^{21} \xi^3 x^2 + 3,972393548 \cdot 10^{21} \xi^4 x^2 + 1,919319560 \cdot 10^{21} \xi^5 x^2 \\
& + 3,670330426 \cdot 10^{20} \xi^6 x^2 + 2,682021808 \cdot 10^{19} \xi^7 x^2 + 1,048748026 \cdot 10^{19} \xi^4 x^4 \\
& + 1,702523008 \cdot 10^{20} \xi^5 x^4 + 1,835165209 \cdot 10^{20} \xi^6 x^4 + 2,682021806 \cdot 10^{19} \xi^7 x^4 \\
& + 8,940072688 \cdot 10^{18} \xi^7 x^6),
\end{aligned} \tag{2.41a}$$

e

$$\begin{aligned}
G(x, \xi) = & (3,490642925 \cdot 10^{23} \xi + 3,464999381 \cdot 10^{23} \xi^2 + 2,050150991 \cdot 10^{23} \xi^3 \\
& + 7,933771118 \cdot 10^{22} \xi^4 + 3,670330427 \cdot 10^{20} \xi^7 x^6 + 1,788014539 \cdot 10^{19} \xi^8 x^8 \\
& + 3,670330426 \cdot 10^{20} \xi^7 + 3,533894806 \cdot 10^{21} \xi^6 + 1,788014541 \cdot 10^{19} \xi^8 \\
& + 2,062859460 \cdot 10^{22} \xi^5 + 3,426843796 \cdot 10^{22} \xi^2 x^2 + 5,586613630 \cdot 10^{22} \xi^4 x^2 \\
& + 2,649703323 \cdot 10^{22} \xi^5 x^2 + 6,613512625 \cdot 10^{22} \xi^3 x^2 + 1,101099129 \cdot 10^{21} \xi^7 x^2 \\
& + 7,301013353 \cdot 10^{21} \xi^6 x^2 + 3,590774413 \cdot 10^{21} \xi^4 x^4 + 1,101099125 \cdot 10^{21} \xi^7 x^4 \\
& + 5,868438581 \cdot 10^{21} \xi^5 x^4 + 4,000342261 \cdot 10^{21} \xi^6 x^4 + 7,152058156 \cdot 10^{19} \xi^8 x^2 \\
& + 2,332237305 \cdot 10^{20} \xi^6 x^6 + 1,072808721 \cdot 10^{20} \xi^8 x^4 + 7,152058152 \cdot 10^{19} \xi^8 x^6 \\
& + 1,600000000 \cdot 10^{20}).
\end{aligned} \tag{2.41b}$$

Na próxima seção a função do termo de interferência será apresentada e sua aplicação na determinação das seções de choque microscópicas de espalhamento.

2.4 A função do termo de interferência

No caso do espalhamento, a seção de choque deve contabilizar também os efeitos de interferência [1]. Seguindo o formalismo de Breit–Wigner, a seção de choque microscópica de espalhamento ressonante é escrita por:

$$\sigma_s(E_c) = \sigma_0 \frac{\Gamma_n}{\Gamma} \frac{1}{1+y^2} + \sigma_0 \frac{2R}{\lambda_0} \frac{y}{1+y^2} + 4\pi R^2, \tag{2.42}$$

onde a relação (2.20a) foi utilizada e R é o raio nuclear dado aproximadamente por $R = 1,25 \times 10^{-13} A^{1/3} \text{cm}$. Nesta seção será dada uma atenção especial ao segundo termo da equação (2.42).

Ao substituir a seção de choque de espalhamento ressonante, equação (2.42), na equação (2.13), chega-se a seguinte expressão para a seção de choque média de espalhamento:

$$\sigma(E) = \sigma_0 \frac{\Gamma_n}{\Gamma} \psi(x, \xi) + \sigma_0 \frac{2R}{\lambda_0} \chi(x, \xi) + 4\pi R^2, \quad (2.43)$$

onde denota-se o termo de interferência por:

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

O termo de interferência para uma temperatura fixa (ξ fixo) é representado graficamente pela figura 3, onde se percebe que a função $\chi(x, \xi)$ apresenta uma anti-simetria:

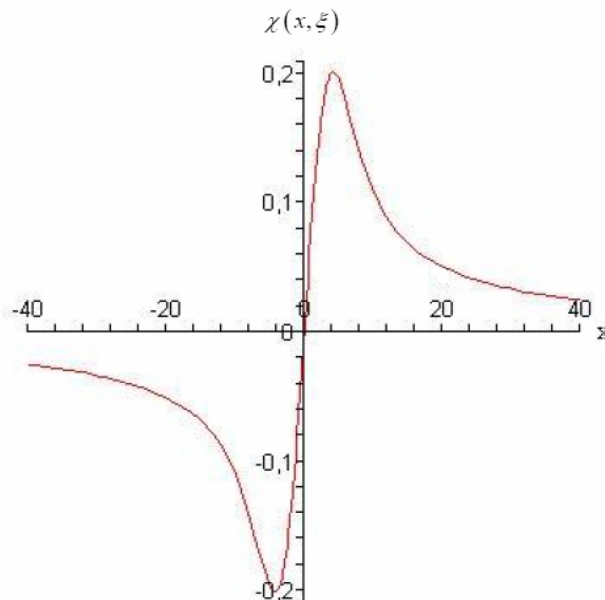


Figura 3.: Termo de interferência para $\xi = 0.5$.

Quando $E < E_0$, este termo é negativo, e quando $E > E_0$, o mesmo é positivo. Como consequência direta da anti-simetria do termo de interferência, a seção de choque de espalhamento, equação (2.43), apresenta uma pronunciada assimetria, como pode ser visto na figura 4:

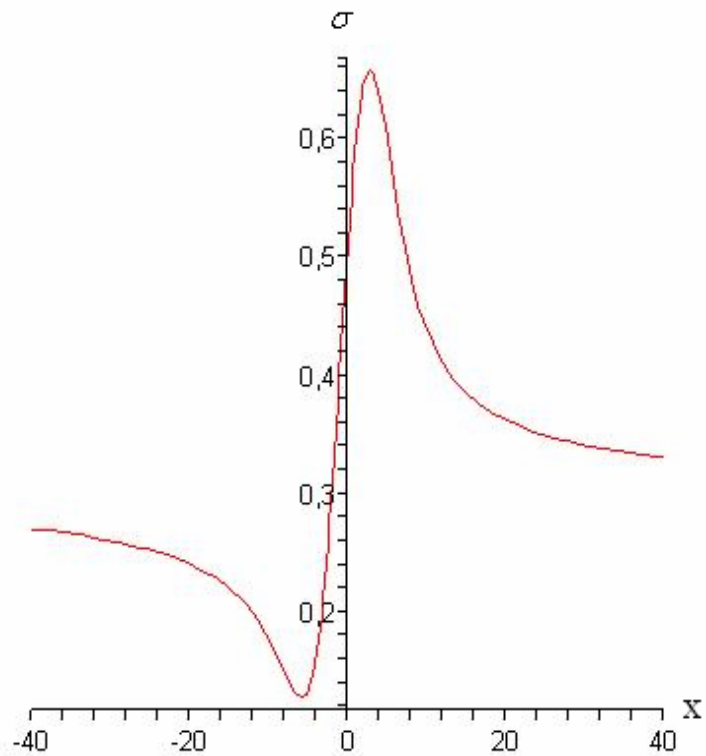


Figura 4.: Seção de choque microscópica de espalhamento para $\xi = 0.5$.

Capítulo 3

Formulação matemática do problema

No capítulo 2 apresentou-se, de maneira sucinta, a física do problema. Neste capítulo a função de alargamento Doppler e o termo de interferência, ambos em forma integral, serão transformados em equações diferenciais ordinárias sujeitas a condições iniciais obtidas a partir de suas formulações originais. A seguir, os métodos de Frobenius e de variação de parâmetros serão utilizados, respectivamente, para a determinação da solução da parte homogênea das equações e para a determinação de soluções particulares. Após a imposição das condições iniciais acima citadas obtém-se a solução geral da equação e conseqüentemente o valor das integrais.

3.1 Obtenção da equação diferencial que rege $\psi(x, \xi)$.

Ao invés de usar efetivamente a equação (2.31) será utilizada uma forma alternativa da função $\psi(x, \xi)$. A estratégia será transformar essa integral em uma equação diferencial ordinária sujeita a condições iniciais de modo que o Método de Frobenius, descrito no apêndice A, possa ser aplicado. Diferenciando (2.31) em relação a x obtém-se:

$$\frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} = \frac{\xi^2}{2} \left\{ -\frac{\xi x}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{1+y^2} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2\right] + \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y dy}{1+y^2} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2\right] \right\}. \quad (3.1)$$

Reconhecendo na equação (3.1) a própria função de alargamento Doppler e o termo de interferência, dado pela equação (2.44), pode-se escrever:

$$\frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} = \frac{\xi^2}{2} \left[-x\psi(x, \xi) + \frac{\chi(x, \xi)}{2} \right]. \quad (3.2)$$

Derivando a equação (3.1) novamente em relação a x , após explicitar a função $\chi(x, \xi)$, pode-se escrever:

$$\frac{\partial^2 \psi(x, \xi)}{\partial x^2} + x\xi^2 \frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} + \frac{\xi^2}{4}(x^2 \xi^2 + 2)\psi(x, \xi) = \frac{\xi^5}{8\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y^2 dy}{1+y^2} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2\right). \quad (3.3)$$

O lado direito da equação (3.3) pode ser escrito de outra forma notando que

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y^2 dy}{1+y^2} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2\right) = \frac{2\sqrt{\pi}}{\xi} [1 - \psi(x, \xi)]. \quad (3.4)$$

Substituindo o resultado obtido em (3.4) na equação (3.3) obtém-se a equação diferencial que será usada neste trabalho para a obtenção da função de alargamento $\psi(x, \xi)$:

$$\frac{\partial^2 \psi(x, \xi)}{\partial x^2} + x\xi^2 \frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} + \frac{\xi^2}{4}(x^2 \xi^2 + \xi^2 + 2)\psi(x, \xi) = \frac{\xi^4}{4} \quad (3.5)$$

sujeita as condições iniciais:

$$\psi(x, \xi)|_{x=0} \equiv \psi_0 = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right)\right] \quad (3.6a)$$

e

$$\frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0. \quad (3.6b)$$

Na próxima seção procede-se de maneira análoga com o termo de interferência com o intuito de encontrar uma equação diferencial nos mesmos moldes da equação (3.5).

3.2 Obtenção da equação diferencial que rege $\chi(x, \xi)$.

O objetivo desta seção é obter a equação diferencial ordinária que rege a função $\chi(x, \xi)$ analogamente ao que foi feito para a função de alargamento Doppler com o intuito de aplicar o método de Frobenius. Sendo assim, diferenciando a equação (2.44) em relação a x tem-se:

$$\frac{\partial \chi(x, \xi)}{\partial x} = \frac{\xi}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y dy}{1+y^2} \left(-\frac{\xi^2}{2} (x-y) \right) \left[\exp\left(-\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2 \right) \right] \quad (3.7)$$

Separando os termos obtém-se:

$$\frac{\partial \chi(x, \xi)}{\partial x} = -\xi^2 \left[\frac{\xi x}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y dy}{1+y^2} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2 \right) - \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y^2 dy}{1+y^2} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4} (x-y)^2 \right) \right], \quad (3.8)$$

onde é possível reconhecer no primeiro termo entre colchetes o próprio termo de interferência e no segundo termo uma integral conhecida e já calculada na seção anterior, representada na equação (3.4). A partir da expressão (3.4), a equação (3.8) toma a forma:

$$\frac{\partial \chi(x, \xi)}{\partial x} = -\xi^2 \left[\frac{x\chi(x, \xi)}{2} - 1 + \psi(x, \xi) \right] \quad (3.9)$$

Derivando (3.9) em relação à x :

$$\frac{\partial^2 \chi(x, \xi)}{\partial x^2} = -\xi^2 \left[\frac{\chi(x, \xi)}{2} + \frac{x}{2} \frac{\partial \chi(x, \xi)}{\partial x} + \frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} \right] \quad (3.10)$$

Nota-se que ainda existe uma derivada da função de alargamento Doppler indesejada. Porém, derivando a forma integral da função de alargamento Doppler em relação à x têm-se a expressão (3.2). Substituindo a equação (3.2) na equação (3.10) têm-se:

$$\frac{\partial^2 \chi(x, \xi)}{\partial x^2} = -\xi^2 \left\{ \frac{\chi(x, \xi)}{2} + \frac{x}{2} \frac{\partial \chi(x, \xi)}{\partial x} - \frac{\xi^2}{2} \left[x\psi(x, \xi) - \frac{\chi(x, \xi)}{2} \right] \right\} \quad (3.11)$$

Com o intuito de eliminar o termo que contém a função de alargamento Doppler pode-se isolar $\psi(x, \xi)$ na equação (3.9) e substituí-lo na equação (3.11). Após algumas simplificações algébricas obtém-se a seguinte equação diferencial a ter sua parte homogênea resolvida através do método de Frobenius:

$$\frac{\partial^2 \chi(x, \xi)}{\partial x^2} + \xi^2 x \frac{\partial \chi(x, \xi)}{\partial x} + \frac{\xi^2}{4} [\xi^2 x^2 + \xi^2 + 2] \chi(x, \xi) = \frac{\xi^4 x}{2}, \quad (3.12)$$

sujeita as condições iniciais:

$$\chi(x, \xi)|_{x=0} = \frac{\xi}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y dy}{1+y^2} \exp\left(-\frac{\xi^2 y^2}{4}\right) = 0, \quad (3.13a)$$

e, a partir de (3.11)

$$\frac{\partial \chi(x, \xi)}{\partial x} \Big|_{x=0} = -\xi^2 [-1 + \psi(x, \xi)|_{x=0}] = \xi^2 \left[1 - \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) \right] \right]. \quad (3.13b)$$

Nota-se que tanto a função de alargamento Doppler quanto o termo de interferência possuem equações diferenciais ordinárias com partes homogêneas idênticas. Esse fato é muito favorável visto que basta aplicar o método de Frobenius uma única vez a fim de encontrar soluções linearmente independentes da parte homogênea. Após a obtenção destas soluções o método de variação de parâmetros será aplicado a cada caso separadamente.

3.3 Aplicação do método de Frobenius a parte homogênea da equação

Nesta seção o método de Frobenius será aplicado a parte homogênea das equações (3.5) e (3.12). Como visto na seção precedente a parte homogênea é a mesma para ambas as funções (alargamento Doppler e termo de interferência). Derivando a equação

(A.2) (apêndice A) e a substituindo na equação homogênea associada as equações (3.5) ou (3.12) obtém-se, após agrupar os termos semelhantes:

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n (n+s)(n+s-1)x^{n+s-2} + \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^2 \left[(n+s) + \frac{\xi^2 + 2}{4} \right] x^{n+s} + \frac{\xi^2}{4} \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^{n+s+2} = 0. \quad (3.14)$$

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

$$c_0 s(s-1) = 0 \Rightarrow s = 0 \text{ ou } s = 1. \quad (3.15)$$

Da equação (3.15), como $c_0 \neq 0$, obtém-se que $s = 0$ e $s = 1$. Utilizando primeiramente $s = 0$ e $c_0 \neq 0$ obtém-se a seguinte relação de recorrência válida para $n = 2$ e $n = 3$:

$$c_n = -\frac{\xi^2 (4n + \xi^2 - 6)}{4n(n-1)} c_{n-2}. \quad (3.16)$$

Ainda quando $s = 0$ e para $n \geq 4$ tem-se a seguinte relação de recorrência de três termos:

$$c_n = -\frac{\xi^2 [c_{n-2} (4n + \xi^2 - 6) + c_{n-4} \xi^2]}{4n(n-1)}. \quad (3.17)$$

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 . Para os casos em que $n = 2$ e $n = 3$ tem-se a seguinte relação de recorrência:

$$c_n = -\frac{\xi^2 (4n + \xi^2 - 2)}{4n(n+1)} c_{n-2}. \quad (3.18)$$

Ainda quando $s = 1$ e para $n \geq 4$ obtém-se novamente uma relação de recorrência de três termos:

$$c_n = -\frac{\xi^2 [c_{n-2} (4n + \xi^2 - 2) + c_{n-4} \xi^2]}{4n(n+1)}. \quad (3.19)$$

Com isso a solução homogênea assume a seguinte forma:

$$\psi_h(x, \xi) = (c_0 + c_2 x^2 + c_4 x^4 + \dots) + (\tilde{c}_0 x + \tilde{c}_2 x^3 + \tilde{c}_4 x^5 + \dots). \quad (3.20)$$

onde os coeficientes são todos conhecidos a partir das relações de recorrência.

Um importante passo para a obtenção de uma solução analítica para a equação (3.5)

é notar que a integral na equação (2.31) é proporcional a $\exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right)$. Assim é possível

escrever a equação (3.20) como:

$$\psi_h(x, \xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \sum_{n=0}^{\infty} A_n x^n. \quad (3.21)$$

Utilizando a expansão em séries de Taylor para a função $\exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right)$ resulta em:

$$\psi_h(x, \xi) = \left(1 - \frac{\xi^2 x^2}{4} + \frac{\xi^4 x^4}{32} + \dots\right) \sum_{n=0}^{\infty} A_n x^n \quad (3.22)$$

ou

$$\begin{aligned} \psi_h(x, \xi) = & A_0 + A_1 x + \left(A_2 - \frac{\xi^2}{4} A_0\right) x^2 + \left(A_3 - \frac{\xi^2}{4} A_1\right) x^3 + \left(A_4 - \frac{\xi^2}{4} A_2 + \frac{\xi^4}{32} A_0\right) x^4 + \\ & \left(A_5 - \frac{\xi^2}{4} A_3 + \frac{\xi^4}{32} A_1\right) x^5 + \left(A_6 - \frac{\xi^2}{4} A_4 + \frac{\xi^4}{32} A_2 - \frac{\xi^6}{384} A_0\right) + \left(A_7 - \frac{\xi^2}{4} A_5 + \frac{\xi^4}{32} A_3 - \frac{\xi^6}{384} A_1\right) + \dots \end{aligned} \quad (3.23)$$

Comparando os termos de mesma potência nas equações (3.20) e (3.23) e com alguma manipulação algébrica pode-se determinar os coeficientes e escrever $\psi_h(x, \xi)$ da seguinte forma :

$$\begin{aligned} \psi_h(x, \xi) = & k_1 \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)^2 + \frac{1}{24} \left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)^4 + \frac{1}{720} \left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)^6 + \dots\right] \\ & + k_2 \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \left[\frac{\xi^2 x}{2} - \frac{1}{6} \left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)^3 + \frac{1}{120} \left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)^5 + \frac{1}{5040} \left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)^7 + \dots\right], \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde k_1 e k_2 são, respectivamente, as constantes c_0 e \tilde{c}_0 .

Reconhecendo a expansão das funções cosseno e seno, obtem-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:

$$\psi_h(x, \xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \left[k_1 \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) + k_2 \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \right]. \quad (3.25)$$

Na próxima seção será aplicado o método de variação de parâmetros para cada caso separadamente com o intuito de obter as respectivas soluções particulares.

3.4 Determinação das soluções particulares e gerais

Nesta seção o método de variação de parâmetros será aplicado para a obtenção da solução particular, e posterior solução geral após imposição das condições iniciais, para a função de alargamento Doppler e para o termo de interferência de forma totalmente análoga.

3.4.1 Função de alargamento Doppler

Pode-se encontrar uma solução particular da equação (3.5) de posse das soluções linearmente independentes de sua parte homogênea, a saber:

$$\psi_1(x, \xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \quad (3.26a)$$

e

$$\psi_2(x, \xi) = \exp\left(-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right), \quad (3.26b)$$

e aplicando o método da variação de parâmetros, descrito brevemente no apêndice A. O referido método consiste em procurar uma solução da forma:

$$\psi_p(x, \xi) = u_1(x)\psi_1(x, \xi) + u_2(x)\psi_2(x, \xi), \quad (3.27)$$

onde $u_1(x)$ e $u_2(x)$ são determinadas após a imposição das condições expressas pelas equações (3.6a) e (3.6b). A partir daí é imposta uma condição de nulidade da expressão:

$$u_1'(x)\psi_1(x, \xi) + u_2'(x)\psi_2(x, \xi) = 0, \quad (3.28)$$

que juntamente com a condição

$$u_1'(x)\psi_1'(x, \xi) + u_2'(x)\psi_2'(x, \xi) = \frac{\xi^4}{4}, \quad (3.29)$$

proveniente da própria equação (3.5) formam um sistema linear. Resolvendo o sistema formado pelas equações (3.28) e (3.29) obtém-se:

$$u_1'(x) = -\frac{\xi^2}{2} \exp\left(\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \quad (3.30a)$$

e

$$u_2'(x) = \frac{\xi^2}{2} \exp\left(\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right). \quad (3.30b)$$

Integrando as equações (3.30) determinam-se $u_1(x)$ e $u_2(x)$:

$$u_1(x) = -\frac{\xi^2}{2} \int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 x'^2}{4}\right) \sin\left(\frac{\xi^2 x'}{2}\right) \quad (3.31a)$$

e

$$u_2(x) = \frac{\xi^2}{2} \int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 x'^2}{4}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x'}{2}\right). \quad (3.31b)$$

Colocando as funções seno e cosseno em suas respectivas formas exponenciais:

$$\cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) = \left[\exp\left(\frac{\xi^2 x}{2} i\right) + \exp\left(-\frac{\xi^2 x}{2} i\right) \right] / 2 \quad (3.32a)$$

e

$$\sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) = \left[\exp\left(\frac{\xi^2 x}{2} i\right) - \exp\left(-\frac{\xi^2 x}{2} i\right) \right] / 2i, \quad (3.32b)$$

, onde $i = \sqrt{-1}$ é a unidade imaginária, pode-se tratar cada integral separadamente.

Com isso $u_1(x)$ e $u_2(x)$ podem ser escritos por:

$$u_1(x) = -\frac{\xi^2}{4i} \left[\int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 x'^2}{4} + \frac{i\xi^2 x'}{2}\right) - \int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 x'^2}{4} - \frac{i\xi^2 x'}{2}\right) \right] \quad (3.33a)$$

e

$$u_2(x) = \frac{\xi^2}{4} \left[\int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 x'^2}{4} + \frac{i\xi^2 x'}{2}\right) + \int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 x'^2}{4} - \frac{i\xi^2 x'}{2}\right) \right] \quad (3.33b)$$

Completando quadrados nas integrais (3.33a) e (3.33b) é possível escrever $u_1(x)$ e $u_2(x)$ da seguinte maneira:

$$u_1(x) = -\frac{\xi^2}{4i} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[\int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 (x'+i)^2}{4}\right) - \int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 (x'-i)^2}{4}\right) \right] \quad (3.34a)$$

e

$$u_2(x) = \frac{\xi^2}{4} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[\int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 (x'+i)^2}{4}\right) + \int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 (x'-i)^2}{4}\right) \right] \quad (3.34b)$$

A forma das funções $u_1(x)$ e $u_2(x)$ são parecidas e é conveniente resolver separadamente cada integral, denotadas por:

$$I_1 = \int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 (x' + i)^2}{4}\right), \quad (3.35a)$$

e

$$I_2 = \int_0^x dx' \exp\left(\frac{\xi^2 (x' - i)^2}{4}\right), \quad (3.35b)$$

separadamente, utilizando as respectivas transformações $u = \frac{\xi(x' \pm i)}{2}$. Procedendo

desta forma, pode-se escrever:

$$I_1 = \frac{2}{\xi} \int_{i\xi/2}^{\xi(x+i)/2} du \exp(u^2) = \frac{2}{\xi} \left[-\int_0^{i\xi/2} du \exp(u^2) + \int_0^{\xi(x+i)/2} du \exp(u^2) \right], \quad (3.36a)$$

e

$$I_2 = \frac{2}{\xi} \int_{-i\xi/2}^{\xi(x-i)/2} du \exp(u^2) = \frac{2}{\xi} \left[-\int_0^{-i\xi/2} du \exp(u^2) + \int_0^{\xi(x-i)/2} du \exp(u^2) \right]. \quad (3.36b)$$

Pode-se reconhecer as funções erro imaginário (apêndice B), definidas por:

$$\operatorname{erfi}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dt \exp(t^2), \quad (3.37)$$

que se relacionam com a função erro através de $\operatorname{erfi}(x) = -i \operatorname{erf}(ix)$. Sendo assim, as

integrais I_1 e I_2 podem ser escritas por:

$$I_1 = -\frac{i\sqrt{\pi}}{\xi} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) \right] \quad (3.38a)$$

e

$$I_2 = -\frac{i\sqrt{\pi}}{\xi} \left[-\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) \right], \quad (3.38b)$$

onde a propriedade $\operatorname{erf}\left(-\frac{\xi}{2}\right) = -\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right)$ foi utilizada. Substituindo os valores de I_1 e

I_2 nas expressões de $u_1(x)$ e $u_2(x)$, chega-se finalmente a

$$u_1(x) = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{4} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) + 2\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) \right] \quad (3.39a)$$

e

$$u_2(x) = -i \frac{\xi\sqrt{\pi}}{4} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) \right]. \quad (3.39b)$$

De posse das expressões de $u_1(x)$ e $u_2(x)$ dadas pelas equações (3.39a) e (3.39b)

pode-se escrever a solução particular por:

$$\begin{aligned} \psi_p(x, \xi) = & -i \frac{\xi\sqrt{\pi}}{4} \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) \right] + \\ & \frac{\xi\sqrt{\pi}}{4} \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) + 2\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Lembrando que a solução geral da equação diferencial (3.5) é a soma da solução da equação diferencial homogênea (3.25) com a solução particular (3.40) e impondo as condições (3.6a) e (3.6b), as constantes k_1 e k_2 ficam determinadas:

$$k_1 = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) \right] \quad (3.41a)$$

e

$$k_2 = 0. \quad (3.41b)$$

Com isso, a solução geral da equação (3.5) toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \psi(x, \xi) = & \frac{\xi\sqrt{\pi}}{4} \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) + 2 \right] \\ & - \frac{i\xi\sqrt{\pi}}{4} \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Embora a equação (3.42) forneça um resultado analítico simples, é possível modificá-la para uma melhor representação. Para isso serão utilizadas as propriedades conhecidas:

$$\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) = a + bi \quad (3.43a)$$

e

$$\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) = \bar{a} + \bar{b}i \quad (3.43b)$$

onde $a = -\bar{a}$ e $b = \bar{b}$ e são definidas as variáveis auxiliares:

$$\frac{\xi\sqrt{\pi}}{4} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \equiv C_1 \quad (3.44a)$$

e

$$\frac{\xi\sqrt{\pi}}{4} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \equiv C_2. \quad (3.44b)$$

Sendo assim, pode-se escrever (3.42) como:

$$\psi(x, \xi) = C_1(2 + a + bi - \bar{a} - \bar{b}i) - iC_2(a + bi + \bar{a} + \bar{b}i). \quad (3.45)$$

Lembrando que $a = -\bar{a}$ e $b = \bar{b}$ chega-se a conclusão que realmente a parte imaginária da função de alargamento Doppler é nula. Com isso, pode-se simplificar ainda mais o resultado obtido:

$$\psi(x, \xi) = 2\left[C_1(1 + \operatorname{Re}\phi(\xi, x)) + C_2 \operatorname{Im}\phi(\xi, x)\right], \quad (3.46)$$

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

Uma forma útil, como será visto posteriormente, é escrever o resultado (3.46) como:

$$\psi(x, \xi) = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left[-\frac{1}{4}\xi^2(x^2 - 1)\right] \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \left\{1 + \operatorname{Re}\phi(x, \xi) + \tan\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \operatorname{Im}\phi(x, \xi)\right\}. \quad (3.47)$$

A expressão analítica obtida em (3.47) tem uma forma funcional bastante simples. É necessário um estudo mais aprofundado de suas aplicações comparando os resultados obtidos para a função de alargamento Doppler a partir da expressão (3.47) com os resultados provenientes de outros métodos existentes, inclusive, o método numérico. Os resultados obtidos são reportados no capítulo 5.

3.4.2 O termo de interferência

A aplicação do método de variação de parâmetros ao termo de interferência é análoga ao da função de alargamento Doppler, como apresentado na seção anterior visto que apenas as partes não homogêneas das equações diferem. Com isso, além da condição de nulidade imposta pelo método, equação (3.28), a relação

$$u_1'(x)\psi_1'(x, \xi) + u_2'(x)\psi_2'(x, \xi) = \frac{\xi^4 x}{2}, \quad (3.48)$$

também deve ser satisfeita. Resolvendo o sistema formado pelas equações (3.28) e (3.48) encontram-se os parâmetros variáveis $u_1(x)$ e $u_2(x)$, respeitando as seguintes relações:

$$u_1'(x) = -\xi^2 x \exp\left(\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \quad (3.49a)$$

e

$$u_2'(x) = \xi^2 x \exp\left(\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right). \quad (3.49b)$$

Integrando as equações (3.49a) e (3.49b) determinam-se $u_1(x)$ e $u_2(x)$:

$$u_1(x) = -\xi^2 \int_0^x dx' x' \exp\left(\frac{\xi^2 x'^2}{4}\right) \sin\left(\frac{\xi^2 x'}{2}\right) \quad (3.50a)$$

e

$$u_2(x) = \xi^2 \int_0^x dx' x' \exp\left(\frac{\xi^2 x'^2}{4}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x'}{2}\right). \quad (3.50b)$$

Colocando as funções seno e cosseno em suas respectivas formas exponenciais, analogamente ao que foi feito na seção anterior e completando quadrados têm-se:

$$u_1(x) = -\frac{\xi^2}{2i} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[\int_0^x dx' x' \exp\left(\frac{\xi^2 (x'+i)^2}{4}\right) - \int_0^x dx' x' \exp\left(\frac{\xi^2 (x'-i)^2}{4}\right) \right] \quad (3.51a)$$

e

$$u_2(x) = \frac{\xi^2}{2} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[\int_0^x dx' x' \exp\left(\frac{\xi^2 (x'+i)^2}{4}\right) + \int_0^x dx' x' \exp\left(\frac{\xi^2 (x'-i)^2}{4}\right) \right] \quad (3.51b)$$

A forma das funções $u_1(x)$ e $u_2(x)$ são parecidas como no caso da função de alargamento Doppler e também é conveniente resolver cada integral separadamente, denotando-as por:

$$I_3 = \int_0^x dx' x' \exp\left(\frac{\xi^2 (x'+i)^2}{4}\right) \quad (3.52a)$$

e

$$I_4 = \int_0^x dx' x' \exp\left(\frac{\xi^2 (x'-i)^2}{4}\right). \quad (3.52b)$$

Utilizando as respectivas transformações $u = \frac{\xi(x' \pm i)}{2}$ nas integrais (3.52a) e (3.52b),

como na seção anterior, pode-se escrever

$$I_3 = \frac{4}{\xi^2} \int_{i\xi/2}^{\xi(x+i)/2} du u \exp(u^2) - \frac{2i}{\xi} \int_{i\xi/2}^{\xi(x+i)/2} du \exp(u^2) = \frac{4}{\xi^2} \int_{i\xi/2}^{\xi(x+i)/2} du u \exp(u^2) - iI_1 \quad (3.53a)$$

e

$$I_4 = \frac{4}{\xi^2} \int_{-i\xi/2}^{\xi(x-i)/2} duu \exp(u^2) + \frac{2i}{\xi} \int_{-i\xi/2}^{\xi(x-i)/2} du \exp(u^2) = \frac{4}{\xi^2} \int_{-i\xi/2}^{\xi(x-i)/2} duu \exp(u^2) + iI_2, \quad (3.53b)$$

onde também foi levada em consideração as definições (3.38a) e (3.38b) para I_1 e I_2 .

Para resolver as integrais resultantes basta proceder a substituição simples

$z = u^2 \Rightarrow \frac{dz}{2} = udu$. Procedendo desta maneira encontram-se as seguintes expressões

para I_3 e I_4 :

$$I_3 = \frac{2}{\xi^2} \left[\exp\left(\frac{\xi^2(x+i)^2}{4}\right) - \exp\left(-\frac{\xi^2}{4}\right) \right] - \frac{\sqrt{\pi}}{\xi} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) \right], \quad (3.54a)$$

e

$$I_4 = \frac{2}{\xi^2} \left[\exp\left(\frac{\xi^2(x-i)^2}{4}\right) - \exp\left(-\frac{\xi^2}{4}\right) \right] + \frac{\sqrt{\pi}}{\xi} \left[-\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) \right]. \quad (3.54b)$$

Com isso, as funções $u_1(x)$ e $u_2(x)$ ficam escritas por:

$$u_1(x) = -2 \exp\left(\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) - \frac{i\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) \right], \quad (3.55a)$$

e

$$u_2(x) = 2 \exp\left(\frac{\xi^2 x^2}{4}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) - \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) + 2\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) \right] - 2. \quad (3.55b)$$

De posse das expressões para $u_1(x)$ e $u_2(x)$ dadas por (3.55a) e (3.55b) pode-se escrever a solução particular por:

$$\begin{aligned} \chi_p(x, \xi) = & -\frac{i\xi\sqrt{\pi}}{2} \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) \right] \\ & - \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) + 2\operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right) \right] \\ & - 2 \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2 x^2}{4}\right]. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Novamente lembrando que a solução geral da equação diferencial é a soma da solução da homogênea com a solução particular e impondo as condições expressas pelas equações (3.13a) e (3.13b), as constantes k_1 e k_2 ficam determinadas:

$$k_1 = 0 \quad (3.57a)$$

e

$$k_2 = 2 - \xi\sqrt{\pi} \exp\left(\frac{\xi^2}{4}\right) \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2}\right)\right]. \quad (3.57b)$$

Com isso, a solução geral da equação (3.12) toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \chi(x, \xi) = & -\frac{i\xi\sqrt{\pi}}{2} \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) \right] \\ & - \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x + \xi}{2}\right) + 2 \right]. \end{aligned} \quad (3.58)$$

A expressão para o termo de interferência (3.58), assim como a expressão para a função de alargamento Doppler, é um resultado analítico. Este resultado também pode ser melhorado utilizando as propriedades (3.43a), (3.43b) e as definições dadas pelas equações (3.44) e (3.45). Procedendo desta maneira, escreve-se a expressão (3.58) por:

$$\chi(x, \xi) = -iC_1 \left[a + bi + \bar{a} + \bar{b}i \right] - C_2 \left[a + bi - \bar{a} - \bar{b}i + 2 \right]. \quad (3.59)$$

Lembrando que $a = -\bar{a}$ e $b = \bar{b}$ chega-se a conclusão que a parte imaginária do termo de interferência é nula. Com isso, pode-se simplificar ainda mais o resultado obtido:

$$\chi(x, \xi) = 2 \left[C_1 \operatorname{Im} \phi(x, \xi) - C_2 (\operatorname{Re} \phi(x, \xi) + 1) \right], \quad (3.60)$$

onde $\phi(x, \xi) = \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right)$. Uma forma útil de expressar o termo de interferência

$\chi(x, \xi)$ dado pela equação (3.60) é:

$$\chi(x, \xi) = \xi \sqrt{\pi} \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[\operatorname{Im} \phi(x, \xi) - \tan\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) (\operatorname{Re} \phi(x, \xi) + 1) \right]. \quad (3.61)$$

A expressão (3.61) é um resultado analítico simples para o termo de interferência que foi obtido a partir da aplicação direta do método de Frobenius e do método de variação de parâmetros. Assim como na determinação de uma expressão para a função de alargamento Doppler, é necessário um estudo aprofundado das aplicações do termo de interferência, comparando os resultados obtidos a partir da expressão (3.61) com os resultados provenientes de outros métodos existentes, inclusive o método numérico. Na próxima seção, uma forma alternativa para determinação do termo de interferência a partir da expressão da função de alargamento será demonstrada. Os resultados obtidos também estarão reportados no capítulo 5.

3.5 Método alternativo para determinação do termo de interferência

O objetivo desta seção é determinar de forma alternativa uma expressão para o termo de interferência [11]. Partindo da equação (3.2), pode-se isolar o termo de interferência escrevendo-o como:

$$\chi(x, \xi) = \frac{4}{\xi^2} \frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} + 2x\psi(x, \xi), \quad (3.62)$$

onde a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ é dada pela expressão (3.42), embora a expressão (3.47) seja de mais fácil implementação computacional. As propriedades básicas de derivação da função erro encontram-se no apêndice A. Utilizando as propriedades básicas de derivação e o fato de que:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x \pm \xi}{2}\right) \right] = \frac{i\xi}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-\left(\frac{i\xi x \pm \xi}{2}\right)^2\right], \quad (3.63)$$

efetuam-se os cálculos. Basicamente, a dificuldade existente é na obtenção da derivada primeira da função de alargamento Doppler. Aplicando a regra do produto sucessivas vezes e a identidade (3.63) têm-se

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} = & -\frac{\xi^3 \sqrt{\pi}}{8} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[x \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) + \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \right] [\varphi_- - \varphi_+ + 2] \\
& + i \frac{\xi^3 \sqrt{\pi}}{8} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[x \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) - \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \right] [\varphi_- + \varphi_+] \\
& + i \frac{\xi^2}{4} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{1}{4}(i\xi x - \xi)^2\right] - \exp\left[-\frac{1}{4}(i\xi x + \xi)^2\right] \right\} \\
& + \frac{\xi^2}{4} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[\sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \right] \left\{ \exp\left[-\frac{1}{4}(i\xi x - \xi)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{4}(i\xi x + \xi)^2\right] \right\},
\end{aligned} \tag{3.63}$$

onde denotou-se $\varphi_{\pm} = \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x \pm \xi}{2}\right)$. Notando que:

$$\exp\left[-\frac{1}{4}(i\xi x - \xi)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{4}(i\xi x + \xi)^2\right] = 2 \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(1 - x^2)\right] \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \tag{3.64a}$$

$$\exp\left[-\frac{1}{4}(i\xi x - \xi)^2\right] - \exp\left[-\frac{1}{4}(i\xi x + \xi)^2\right] = 2i \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(1 - x^2)\right] \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right), \tag{3.64b}$$

é possível simplificar a equação (3.63) escrevendo-a da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x} = & -\frac{\xi^3 \sqrt{\pi}}{8} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[x \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) + \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \right] (\varphi_- - \varphi_+ + 2) \\
& + i \frac{\xi^3 \sqrt{\pi}}{8} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[x \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) - \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \right] (\varphi_- + \varphi_+).
\end{aligned} \tag{3.65}$$

É imediato verificar a partir da equação (3.65), que $\frac{\partial \psi(x, \xi)}{\partial x}$ se anula quando $x = 0$,

o que corrobora com a condição (3.6b). A partir da relação (3.62) e da equação (3.42) obtém-se a expressão:

$$\begin{aligned}
\chi(x, \xi) = & \frac{4}{\xi^2} \left\{ -\frac{\xi^3 \sqrt{\pi}}{8} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[x \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) + \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \right] (\varphi_- - \varphi_+ + 2) \right. \\
& + i \frac{\xi^3 \sqrt{\pi}}{8} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] \left[x \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) - \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \right] (\varphi_- + \varphi_+) \left. \right\} \\
& + 2x \left\{ \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] (\varphi_- - \varphi_+ + 2) \right. \\
& \left. + i \frac{\xi \sqrt{\pi}}{4} \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] (\varphi_- + \varphi_+) \right\}
\end{aligned} \tag{3.66}$$

Efetuada os cálculos obtém-se:

$$\begin{aligned}
\chi(x, \xi) = & -\frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} x \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] (\varphi_- - \varphi_+ + 2) \\
& - \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] (\varphi_- - \varphi_+ + 2) \\
& + i \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} x \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] (\varphi_- + \varphi_+) \\
& - i \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] (\varphi_- + \varphi_+) \\
& + \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} x \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] (\varphi_- - \varphi_+ + 2) \\
& - i \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} x \sin\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x^2 - 1)\right] (\varphi_- + \varphi_+)
\end{aligned} \tag{3.67}$$

Simplificando a expressão (3.67) chega-se à equação (3.61), como esperado. No capítulo 4 algumas aplicações dos resultados obtidos no presente capítulo serão apresentadas.

Capítulo 4

Aplicações: Seções de choque de espalhamento ressonante e fatores de auto-proteção

Neste capítulo aplicam-se os resultados obtidos até aqui a dois problemas distintos, a saber, a determinação das seções de choque de absorção ressonante e de espalhamento e o cálculo dos fatores de auto-proteção, parâmetro importante na determinação das seções de choque de nêutrons térmicos, integrais de ressonância e fluxo de nêutrons pelo método de ativação.

4.1 Determinação das seções de choque de absorção ressonante e de espalhamento.

Levando em consideração o termo de interferência na obtenção da seção de choque de espalhamento, demonstra-se que a mesma pode ser escrita pela expressão (2.43) [1]. Nesta seção são utilizados os resultados obtidos no capítulo 3 para a função de alargamento Doppler e para o termo de interferência e compõe-se o valor das seções de choque microscópica de espalhamento e de absorção ressonante para um tipo de combustível, o isótopo ^{238}U . Comparam-se esses resultados com valores existentes na literatura [17,18], com o intuito de validar os valores das seções de choque obtidas com as aproximações das funções de alargamento Doppler e de interferência, propostas nesta tese, para faixas de energia e temperatura para o qual a aproximação de Bethe-Placzek é

válida. A partir das equações (3.47) e (3.61) as seguintes expressões para as seções de choque de absorção e espalhamento podem ser escritas [19]:

$$\sigma_{\gamma}(E) = \sigma_0 \frac{\Gamma_{\gamma} \left(\frac{E_0}{E} \right)^{1/2}}{\Gamma} \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} \cos \left(\frac{\xi^2 x}{2} \right) \exp \left[-\frac{\xi^2}{4} (x^2 - 1) \right] \left[1 + \operatorname{Re} \phi(x, \xi) + \tan \left(\frac{\xi^2 x}{2} \right) \operatorname{Im} \phi(x, \xi) \right], \quad (4.1a)$$

e

$$\sigma_s(E) = \sigma_0 \frac{\xi \sqrt{\pi}}{2} \cos \left(\frac{\xi^2 x}{2} \right) \exp \left[-\frac{\xi^2}{4} (x^2 - 1) \right] \left\{ \frac{\Gamma_n}{\Gamma} \left[1 + \operatorname{Re} \phi(x, \xi) + \tan \left(\frac{\xi^2 x}{2} \right) \operatorname{Im} \phi(x, \xi) \right] + \frac{4R}{\lambda_0} \left[\operatorname{Im} \phi(x, \xi) - \tan \left(\frac{\xi^2 x}{2} \right) (\operatorname{Re} \phi(x, \xi) + 1) \right] \right\} + 4\pi R^2, \quad (4.1b)$$

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

No capítulo 5 os resultados desta validação para diferentes ressonâncias do isótopo ^{238}U são reportados.

4.2. Cálculo de fatores de auto-proteção

O método de ativação é amplamente utilizado na medição das seções de choque de nêutrons térmicos, integrais de ressonância e fluxo de nêutrons. Uma descrição detalhada do método de ativação, incluindo cálculos de fatores de auto-proteção G_{epi} , pode ser encontrada em [12]. A dificuldade de obter uma expressão analítica para a função de alargamento Doppler, e funções mais complicadas desta, acarreta numa dificuldade de obter expressões para o fator de auto-proteção G_{epi} , sendo utilizados dados tabelados [20] para ambos em códigos de física de reatores. Nesta seção apresentam-se alguns

avanços no sentido de superar a limitação que as tabelas existentes para $\psi(x, \xi)$ e G_{epi} apresentam, já que muitas vezes elas não são convenientes para cálculos que necessitam ser processados de forma precisa e rápida.

É bem estabelecido na literatura que os fatores de auto-proteção são proporcionais as integrais de ressonância que, por sua vez, dependem das funções de alargamento Doppler [5]. Recentemente (2005) Zukeran e Nakagawa sugeriram uma formulação para os fatores de auto-proteção baseada em expansões algébricas e polinômios de Hermite [5]. Uma breve descrição do método será feita a seguir.

Considere o caso em que o objeto de ativação é uma chapa circular de espessura t , desprezível em relação ao diâmetro da chapa exposta a um fluxo de nêutrons isotrópico com o espectro na vizinhança de uma ressonância.

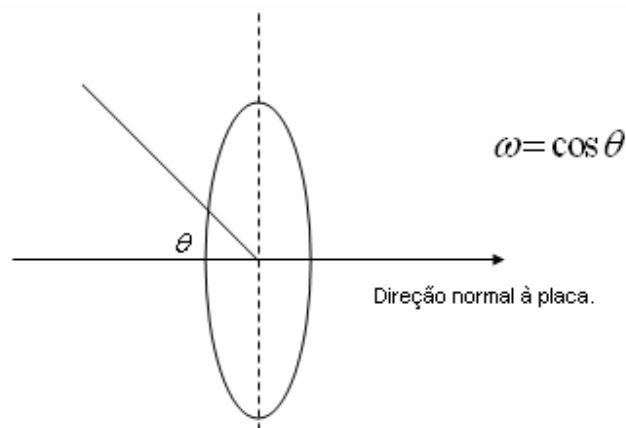


Figura 5.: Chapa exposta a um fluxo de nêutrons isotrópico

Então, assumindo também que o espalhamento de nêutrons é desprezível em comparação com a absorção, a probabilidade de um nêutron incidindo na placa ser absorvido é

$$P_a(t, \xi) = \int_0^1 \omega d\omega \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\omega} N_a \sigma_0 \psi(x, \xi)\right) \right) dx, \quad (4.2)$$

onde:

ω = cosseno do ângulo de incidência do nêutron, θ .

σ_0 = valor máximo da seção de choque total.

N_a = número de núcleos alvo por unidade de volume.

$\psi(x, \xi)$ = função de alargamento Doppler.

Para uma placa infinitamente fina ($t \rightarrow 0$) a probabilidade é igual a $tN_a\sigma_0\pi$ e o fator de auto-proteção ressonante pode ser definido por

$$G_{epi} = \frac{P_a(t, \xi)}{P_a(t \rightarrow 0, \xi)}. \quad (4.3)$$

Para uma ressonância larga, o fator de auto-proteção G_{epi} pode ser escrito de outra maneira utilizando a transformação

$$y = \frac{tN_a\sigma_0}{\omega} \Rightarrow dy = -\frac{tN_a\sigma_0}{\omega^2} d\omega, \quad (4.4)$$

em (4.2). Com isso, trocando os limites de integração e agrupando os termos convenientemente tem-se a probabilidade de absorção que é dada por:

$$P_a(t, \xi) = (tN_a\sigma_0)^2 \int_{tN_a\sigma_0}^{\infty} \frac{dy}{y^3} \int_{-\infty}^{+\infty} (1 - \exp(-y\psi(x, \xi))) dx. \quad (4.5)$$

Definindo $\tau = tN_a\sigma_0$ e a partir da definição (4.3) chega-se a seguinte expressão para o fator de auto-proteção:

$$G_{epi}(\xi, \tau) = \frac{\tau}{\pi} \int_{\tau}^{\infty} \frac{dy}{y^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \{1 - \exp[-y\psi(x, \xi)]\} dx, \quad (4.6)$$

onde:

$\tau = tN_a \times \sigma_0 \left(\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \right)$: espessura da chapa multiplicada pela seção de choque

macroscópica da ressonância na energia E_0 .

Γ = largura total da ressonância.

Γ_γ = largura da ressonância radiativa.

A integração numérica da expressão do fator de auto-proteção utilizando a forma analítica obtida nesta tese é a meta desta seção. Para isso, deve-se melhorar a expressão do fator de auto-proteção no sentido de uma implementação numérica mais simples. Primeiramente transforma-se a integral dupla (4.6) em uma integral simples com o intuito de proceder uma integração numérica unidimensional gaussiana [22].

Como é sabido que o fator de auto-proteção é uma quantidade finita, é possível trocar a ordem das integrais em (4.6) visto que a convergência é garantida, escrevendo-a como:

$$G_{epi}(\xi, \tau) = \frac{\tau}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{\tau}^{\infty} dy \frac{1 - \exp(-y\psi(x, \xi))}{y^3} \right] dx. \quad (4.7)$$

A integral mais interna na equação (4.7) é facilitada já que a mesma é separável. Sendo assim, denotando esta referida integral por I , pode-se escrever:

$$I = \int_{\tau}^{\infty} dy \frac{1 - \exp(-y\psi(x, \xi))}{y^3} = \frac{1}{2\tau^2} - \int_{\tau}^{\infty} dy \frac{\exp(-y\psi(x, \xi))}{y^3}. \quad (4.8)$$

A integral resultante do lado direito da equação (4.8) pode ser resolvida por partes sucessivas vezes. Procedendo a primeira vez e simplificando a notação, fazendo $\psi(x, \xi) \equiv \psi$, tem-se:

$$I = \frac{1}{2\tau^2} - \left[\frac{\exp(-y\psi)}{2\tau^2} - \frac{\psi}{2} \int_{\tau}^{\infty} dy \frac{\exp(-y\psi)}{y^2} \right]. \quad (4.9)$$

Integrando novamente por partes obtém-se:

$$I = \frac{1}{2\tau^2} - \frac{(1 - \psi\tau)\exp(-y\psi)}{2\tau^2} - \frac{\psi^2}{2} \int_{\tau}^{\infty} dy \frac{\exp(-y\psi)}{y}. \quad (4.10)$$

A integral remanescente é denominada função erro integral ou integral exponencial, definida por:

$$\int_x^\infty dy \frac{\exp(-y)}{y^n} = Ei(n, x) = Ei_n(x). \quad (4.11)$$

Logo, a integral I toma a forma:

$$I = \frac{1}{2\tau^2} - \frac{(1-\psi\tau)\exp(-\tau\psi)}{2\tau^2} - \frac{\psi^2 Ei(\tau\psi)}{2}, \quad (4.12)$$

e por consequência, o fator de auto-proteção é escrito por [21]:

$$G_{epi}(\xi, \tau) = \frac{1}{2\pi\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} [1 - (1-\psi\tau)\exp(-\tau\psi) - \psi^2\tau^2 Ei(\tau\psi)] dx. \quad (4.13)$$

O fator de auto-proteção (4.13) é finalmente escrito como uma integral unidimensional na qual a função de alargamento Doppler aparece explicitamente. No capítulo 5 os resultados obtidos para os fatores de auto-proteção a partir da equação (4.13) serão apresentados.

Capítulo 5

Análise dos dados obtidos

Nesta tese foi obtida uma aproximação analítica para a função de alargamento Doppler a partir dos métodos de Frobenius e de variação de parâmetros e uma aproximação analítica para o termo de interferência utilizando os mesmos métodos. O termo de interferência foi obtido diretamente a partir da função de alargamento Doppler, através de uma relação simples existente entre as duas, ratificando as idéias expostas até então. No presente capítulo será feita uma análise sistemática dos resultados obtidos com essas aproximações. A partir das aproximações analíticas obtidas serão feitas comparações com alguns métodos existentes, inclusive o método numérico.

5.1 A função de alargamento Doppler

A partir da equação (3.47), que fornece uma aproximação analítica para a função de alargamento Doppler, a representação gráfica demonstrada na figura 6 foi construída. A partir desta é possível observar que a expressão da função de alargamento Doppler obtida pelo método de Frobenius reproduz o comportamento físico esperado, tendendo a zero quando $x \rightarrow \pm\infty$ e se anulando quando $\xi = 0$. Uma análise mais detalhada de cada corte do gráfico será feita a seguir.

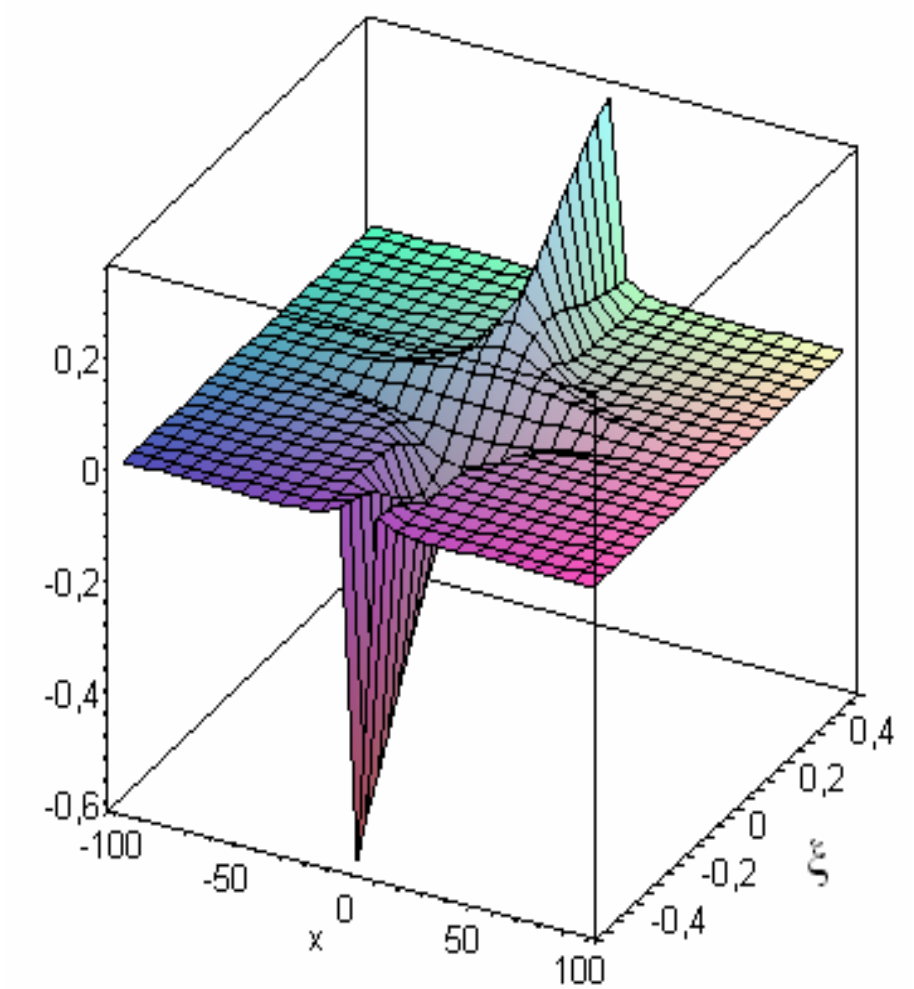


Figura 6.: Representação gráfica da função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ segundo o método de Frobenius.

Nesta seção comparam-se os métodos de Frobenius e Padé para a obtenção da função de alargamento Doppler, tomando como referência a tabela descrita em [1]. As figuras de 7 a 10 são as representações gráficas das comparações entre os métodos de Padé e Frobenius para diferentes valores fixos de x . O eixo vertical indica os erros percentuais em relação aos valores de referência:

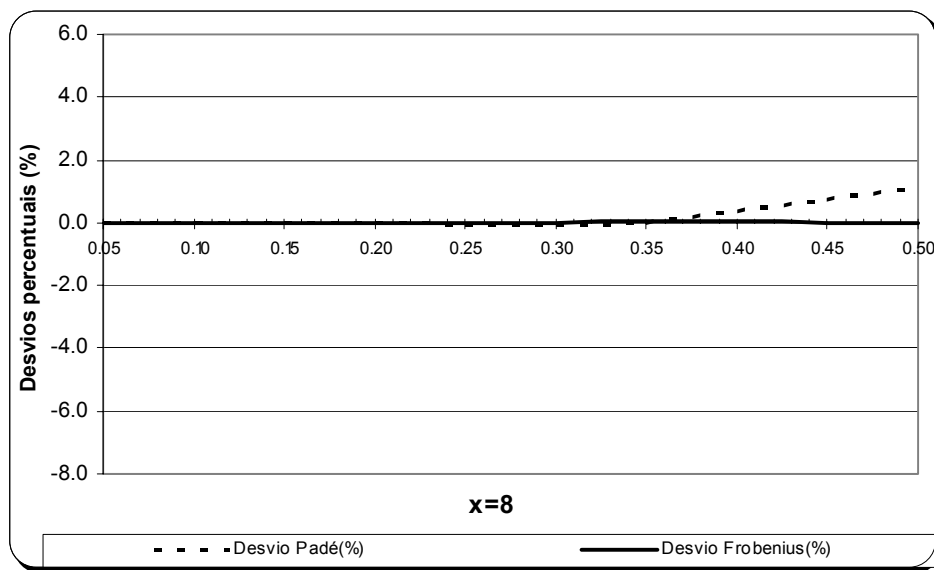


Figura 7.: Erro percentual do método de Padé de 4 pólos e do método de Frobenius para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$, fixando $x = 8$ e variando ξ .

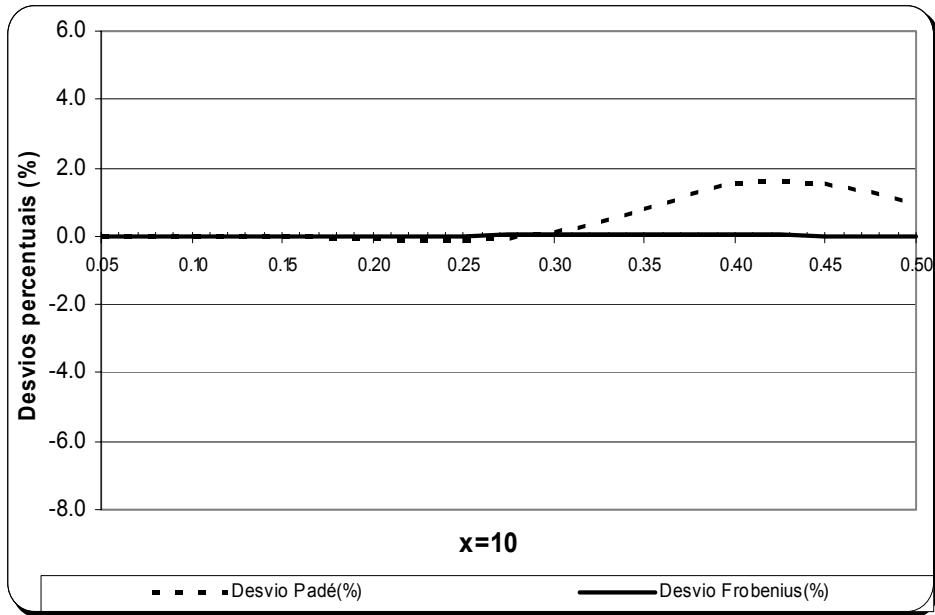


Figura 8.: Erro percentual do método de Padé de 4 pólos e do método de Frobenius para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$, fixando $x = 10$ e variando ξ .

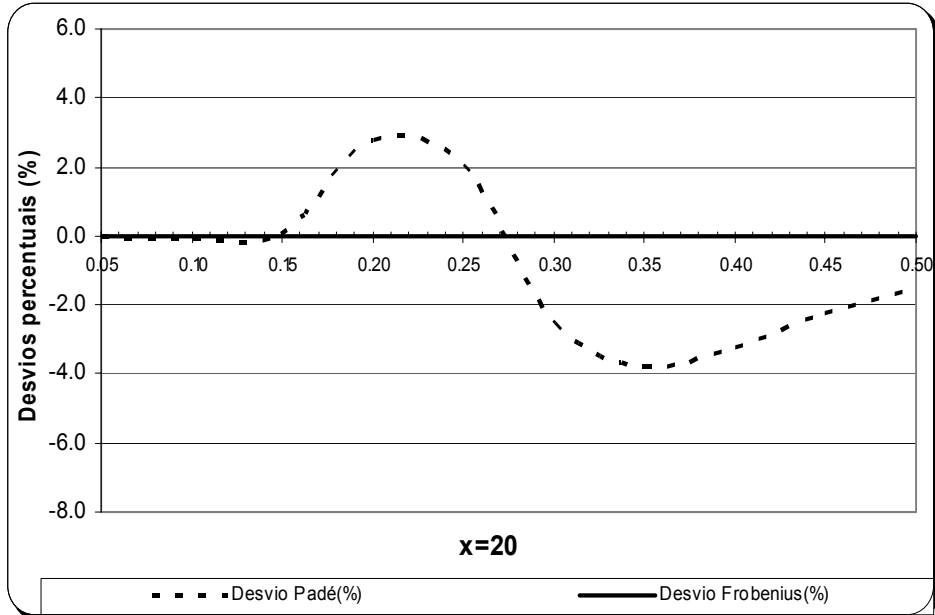


Figura 9.: Erro percentual do método de Padé de 4 pólos e do método de Frobenius para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$, fixando $x = 20$ e variando ξ .

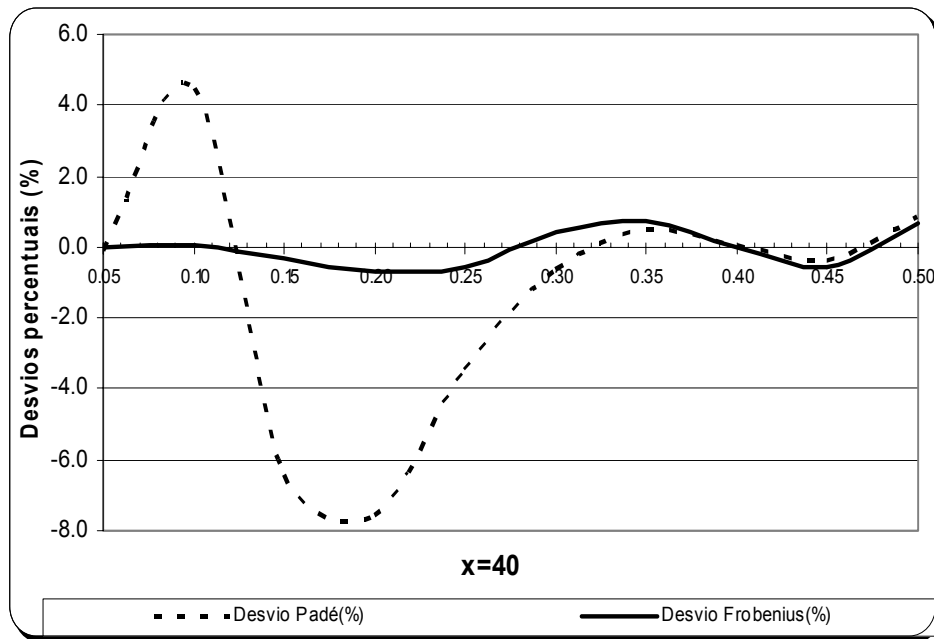


Figura 10.: Erro percentual do método de Padé de 4 pólos e do método de Frobenius para a função de alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$, fixando $x = 40$ e variando ξ .

A partir dos gráficos nas figuras 7 até 10, vê-se que o método de Padé apresenta erros sistematicamente maiores que o método de Frobenius, proposto nesta tese. Os erros obtidos pelo método de Padé crescem com o aumento do parâmetro x , ou seja, a medida que a energia do nêutron incidente se afasta da energia de ressonância ou a medida que a largura total da ressonância medida nas coordenadas do laboratório Γ diminui.

Com os resultados obtidos nesta seção conclui-se que o método de Frobenius, em comparação com os dados de referência [1], apresenta resultados melhores que o método de Padé de 4 pólos no cálculo da função de alargamento Doppler.

5.2. O termo de interferência

A seguinte representação gráfica (figura 11) foi construída a partir da equação (3.61), que fornece esta aproximação analítica para a função do termo de interferência obtida pelo método de Frobenius.

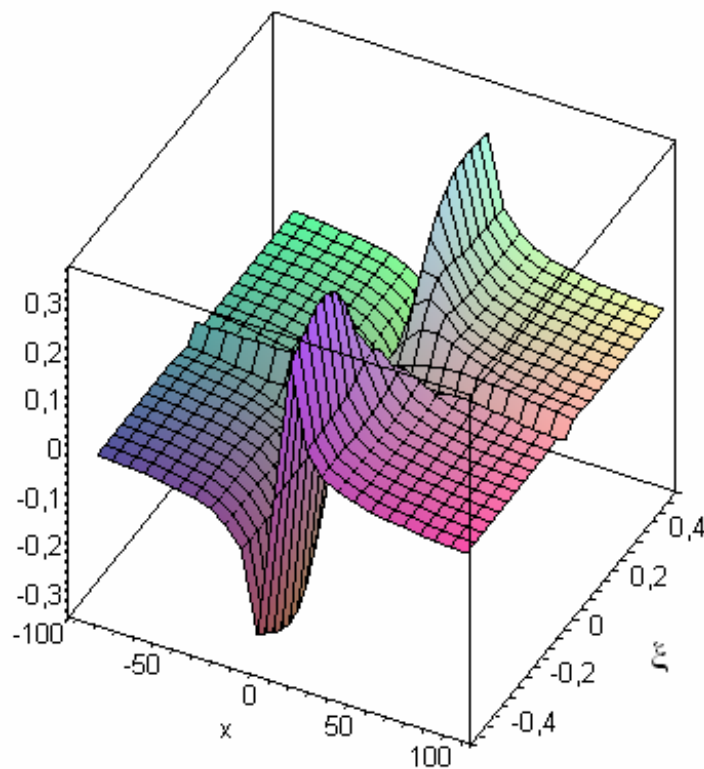
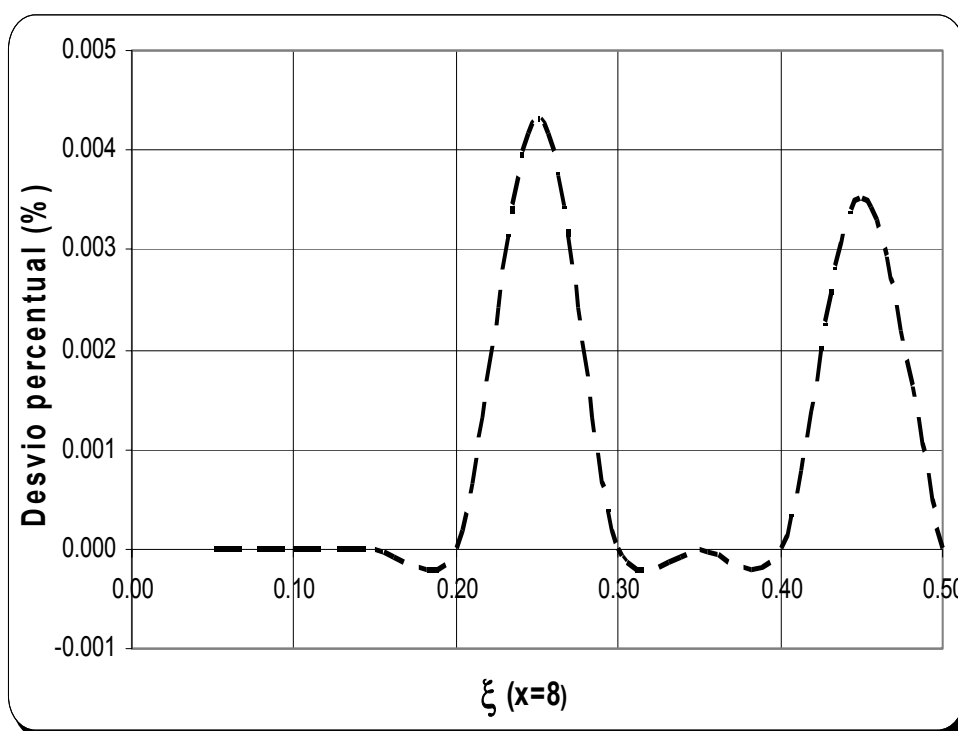


Figura 11.: Representação gráfica da função do termo de interferência $\chi(x, \xi)$ segundo o método de Frobenius.

Análogo ao que foi feito para a função de alargamento Doppler, nesta seção, verifica-se a precisão do método de Frobenius através de comparações com dados existentes na

literatura. Como referência foram utilizados os resultados da referência [1]. Os resultados das discrepâncias percentuais em relação a esses valores de referência são representados graficamente nas figuras 12 a 15, para alguns valores fixos de x :



**Figura 12.: Erro percentual da aproximação proposta para o termo de interferência $\chi(x, \xi)$,
fixando $x = 8$ e variando ξ .**

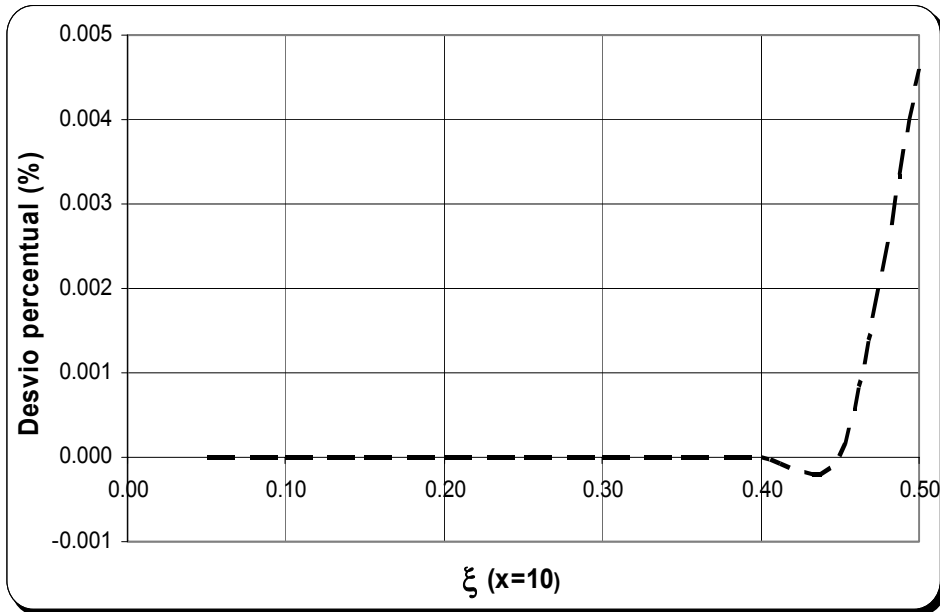


Figura 13.: Erro percentual da aproximação proposta para o termo de interferência $\chi(x, \xi)$,
fixando $x = 10$ e variando ξ .

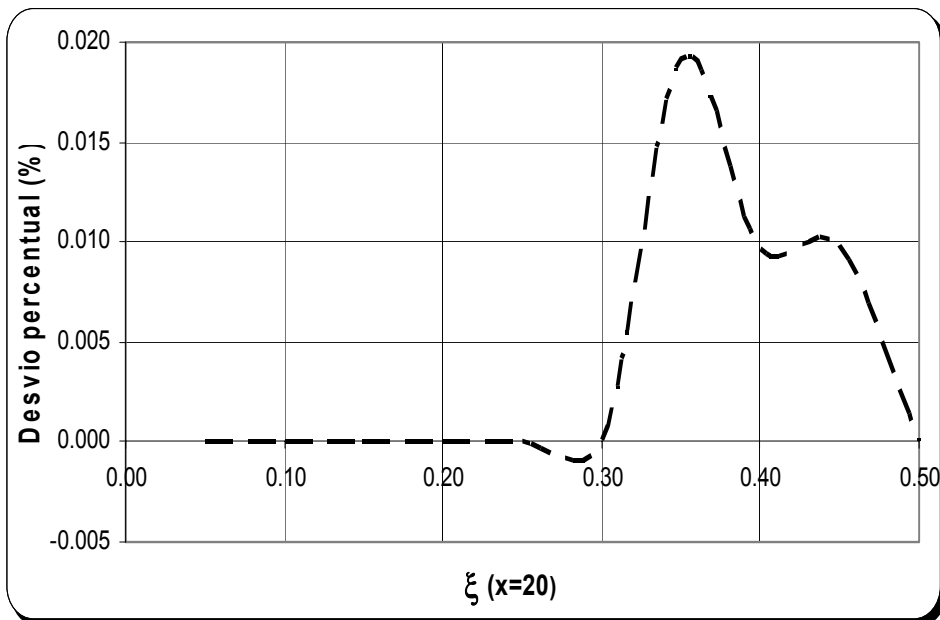


Figura 14.: Erro percentual da aproximação proposta para o termo de interferência $\chi(x, \xi)$,
fixando $x = 20$ e variando ξ .

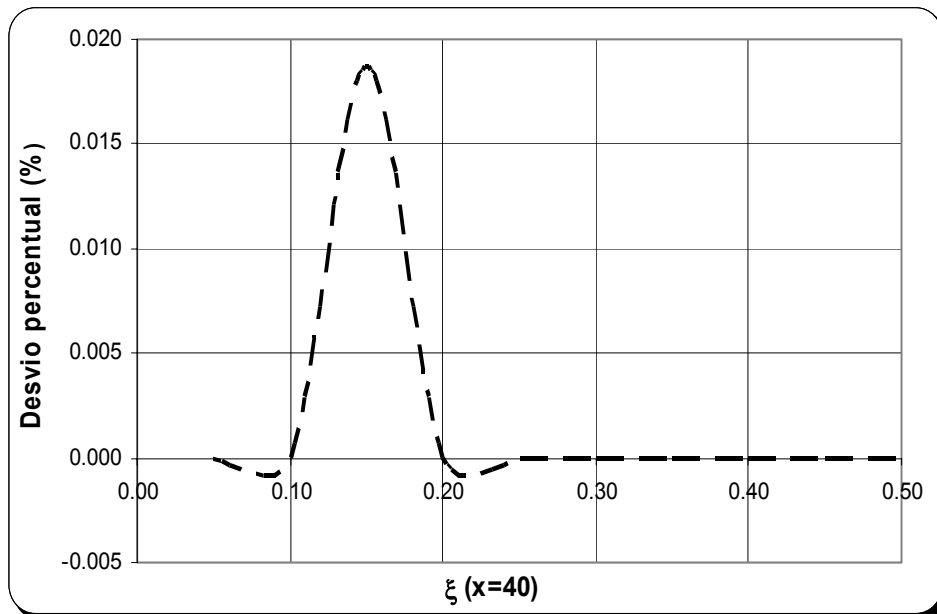


Figura 15.: Erro percentual da aproximação proposta para o termo de interferência $\chi(x, \xi)$, fixando $x = 40$ e variando ξ .

A partir das figuras 12 até 15 é possível ver que os desvios percentuais em relação aos valores de referência [1] são muito pequenos. Visto que existe concordância dos valores do termo de interferência calculados a partir do método de Frobenius com os valores estabelecidos na literatura, na próxima seção uma aplicação desses resultados será feita.

5.3 Seções de choque de absorção ressonante e de espalhamento.

Como forma de validar os resultados obtidos até aqui, as seções de choque de absorção ressonante e de espalhamento são comparadas com os valores obtidos com o método híbrido [17,18]. O método híbrido consiste em conjugar uma integração gaussiana

para pequenos valores de x e a forma assintótica do termo de interferência, dada pela equação (2.37), para valores grandes de x nos quais a condição $x.\xi > 6$ é satisfeita. Com isso, tanto a função de alargamento Doppler, quanto o termo de interferência são validados simultaneamente.

Sendo assim, analisemos algumas ressonâncias que ocorrem no isótopo ^{238}U . As principais ressonâncias e suas respectivas larguras práticas tratadas neste trabalho estão resumidas na tabela 3 [17].

Tabela 3.: Ressonâncias do ^{238}U .

$E_0(eV)$	$\Gamma_\gamma(eV)$	$\Gamma_n(eV)$
6.674	0.0230	0.0015
20.87	0.0291	0.0100
36.80	0.0250	0.0320
66.54	0.0220	0.0260
102.47	0.0260	0.0700

Na tabela 4 encontram-se resumidos os parâmetros nucleares utilizados para os cálculos das ressonâncias indicadas na tabela1[17].

Tabela 4.: Parâmetros nucleares fixos utilizados na determinação das seções de choque de captura, espalhamento e total para o ^{238}U na ressonância.

ISÓTOPO	^{238}U
(Massa atômica) A	238g / mol
T	$1.5 \times 10^3 \text{ K}$
k	$8.6 \times 10^{-5} \text{ eV / K}$
R	$7.7 \times 10^{-1} \text{ m}$
σ_{pot}	10b

Alguns parâmetros que variam de acordo com a ressonância estão resumidos na tabela 5. Estes valores foram calculados a partir dos parâmetros encontrados nas tabelas 3 e 4.

Tabela 5.: Parâmetros nucleares variáveis utilizados na determinação das seções de choque de captura, espalhamento e total para o ^{238}U na ressonância.

$E_0(\text{eV})$	$\tilde{\lambda}_0(\text{m})$	ξ	$\sigma_0(\text{b})$
6.674	177.08	0.20	2.4×10^4
20.87	100.14	0.18	3.2×10^4
36.80	75.41	0.20	4.0×10^4
66.54	56.08	0.13	2.1×10^4
102.47	45.19	0.20	1.9×10^4

Com os parâmetros especificados nas tabelas 3, 4 e 5, compararam-se os valores das seções de choque de captura ressonante e de espalhamento para diferentes ressonâncias com os valores de referência. A seguir, as figuras 16 a 20 são representações gráficas das seções de choque totais construídas a partir dos métodos de Frobenius, cuja expressão é dada pela soma das equações (4.1a) e (4.1b), e o método híbrido para as cinco primeiras ressonâncias do U^{238} :

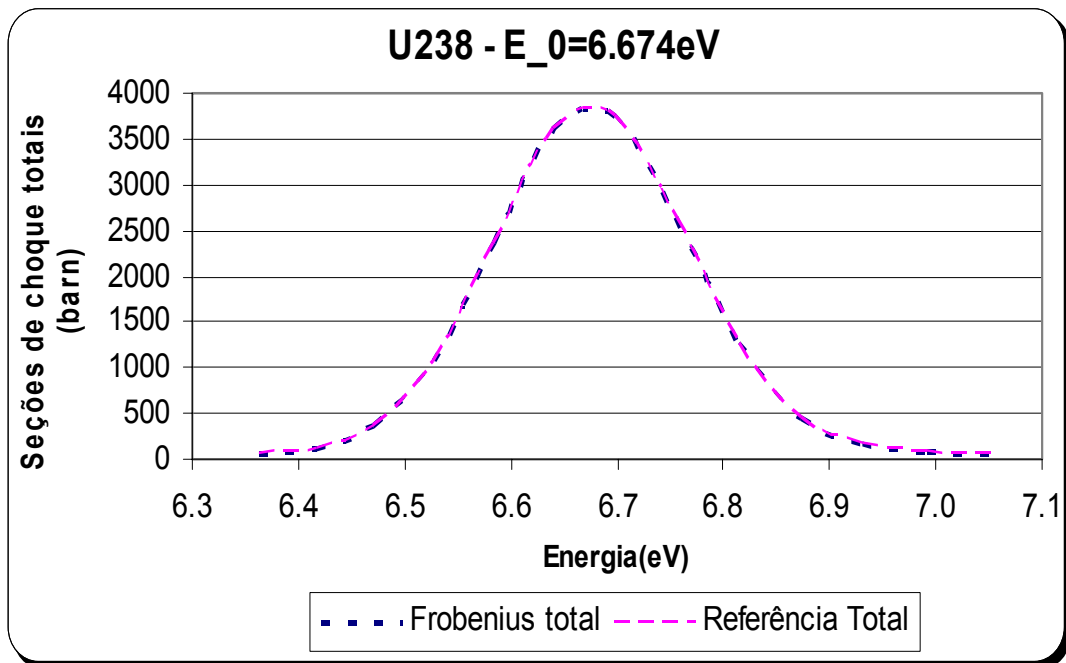


Figura 16.: Seções de choque totais do ^{238}U para a ressonância $E_0=6.674eV$.

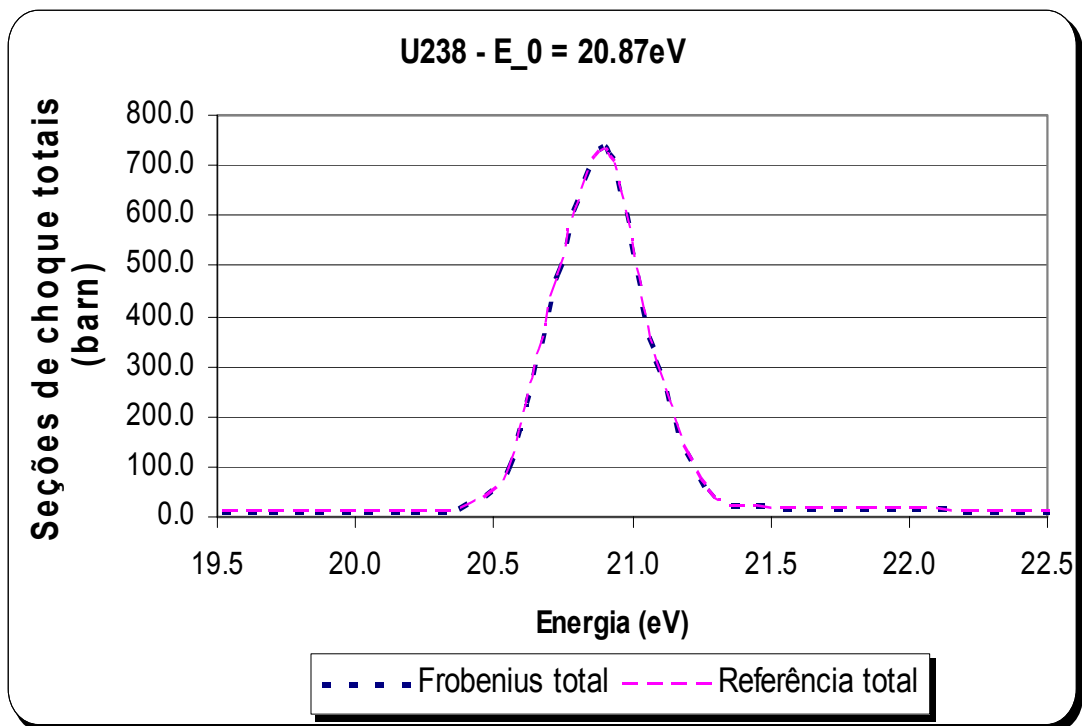


Figura 17.: Seções de choque totais do ^{238}U para a ressonância $E_0=20.87\text{eV}$.

Uma análise dos gráficos das seções de choque totais para as duas primeiras ressonâncias do isótopo ^{238}U , figuras 16 e 17, mostra que existe concordância entre os métodos, uma vez que as curvas obtidas a partir dos métodos de Frobenius e híbrido se sobrepõem, sendo indistinguíveis. Vê-se também que essa concordância independe da largura da ressonância. As figuras 18, 19 e 20 fornecem as seções de choque totais para as outras três ressonâncias posteriores do isótopo ^{238}U , (36.80eV, 66.54eV e 102.47eV) ratificando os bons resultados obtidos para as aproximações da função de alargamento Doppler e para a função do termo de interferência:

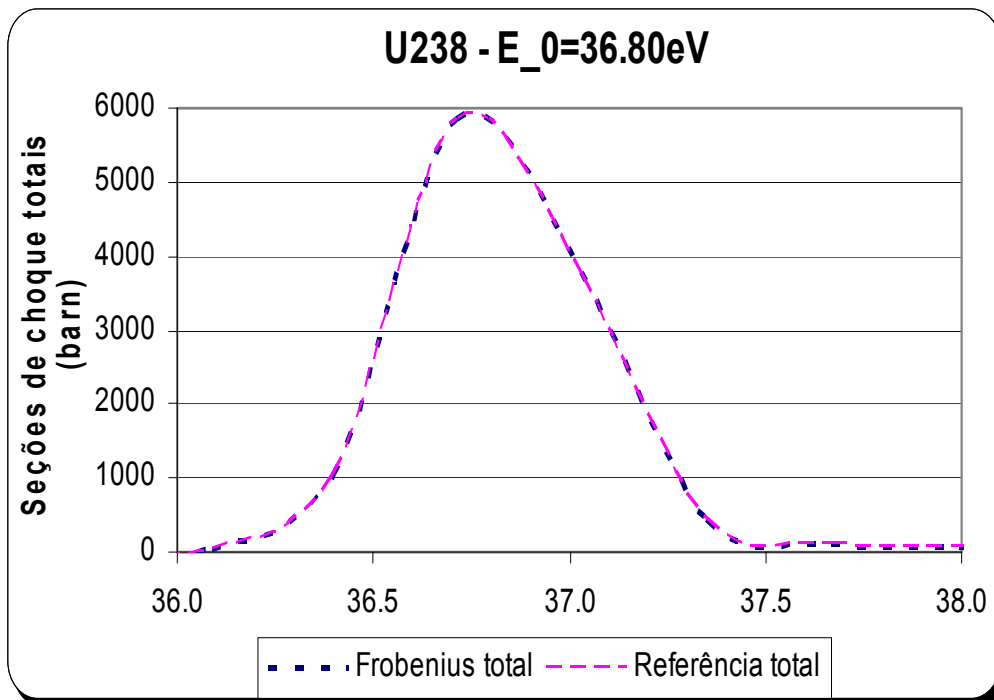


Figura 18.: Seções de choque totais do ^{238}U para a ressonância $E_0=36.80\text{eV}$.

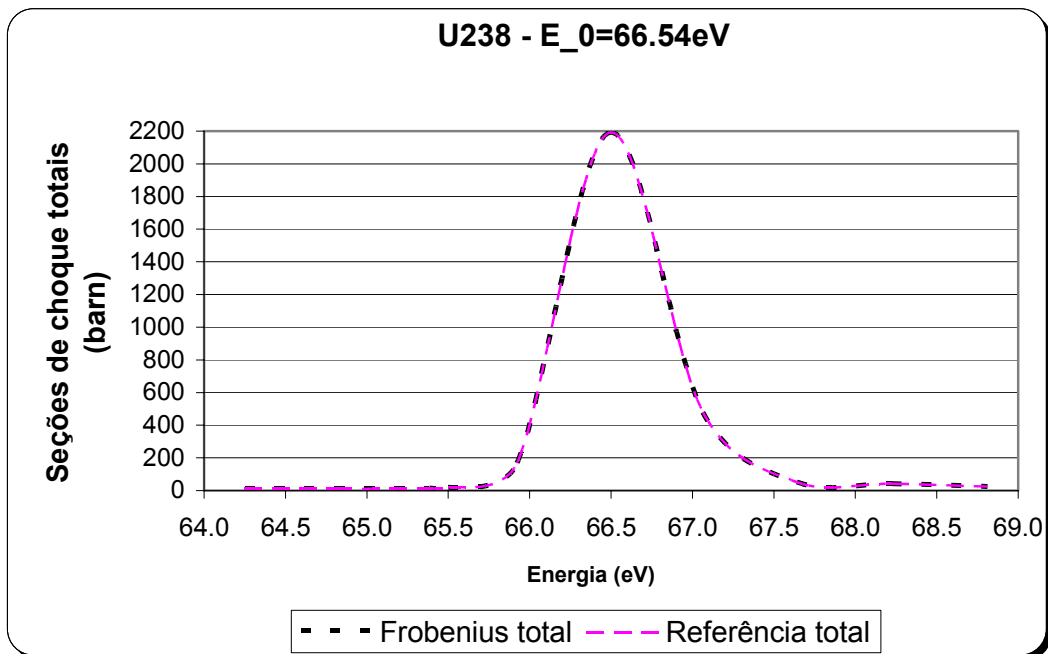


Figura 19.: Seções de choque totais do ^{238}U para a ressonância $E_0=66.54\text{eV}$.

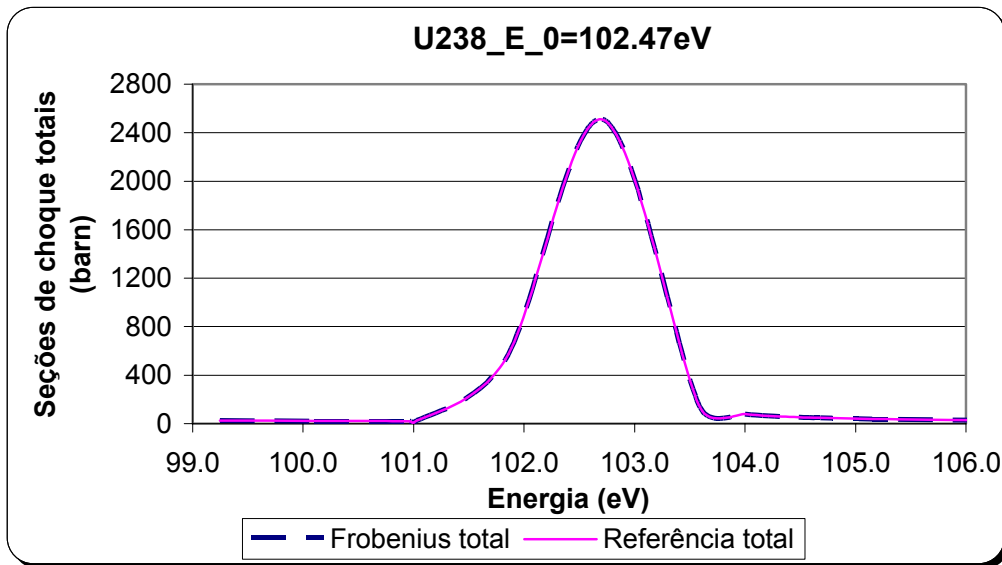


Figura 20.: Seções de choque totais do ^{238}U para a ressonância $E_0=102.47\text{eV}$.

O comportamento das curvas corrobora os bons resultados já apresentados para a função de alargamento Doppler e para o termo de interferência, mostrando a concordância entre o método e a referência.

Os resultados obtidos até aqui para a função de alargamento Doppler e para o termo de interferência, sejam individualmente (seções de choque de captura) ou combinados (seções de choque de espalhamento potencial), nos permitem aplica-los na determinação dos fatores de auto-proteção, o que será feito na próxima seção.

5.4 Resultados para os fatores de auto-proteção

No capítulo 4 desta tese foi obtida uma expressão para os fatores de auto-proteção na forma de uma integral unidimensional dada pela equação (4.13). Nas figuras 20, 21 e 22 são apresentados os integrandos da equação (4.13) para diferentes valores da largura efetiva da chapa alvo τ , variando este de 0.01 a 10:

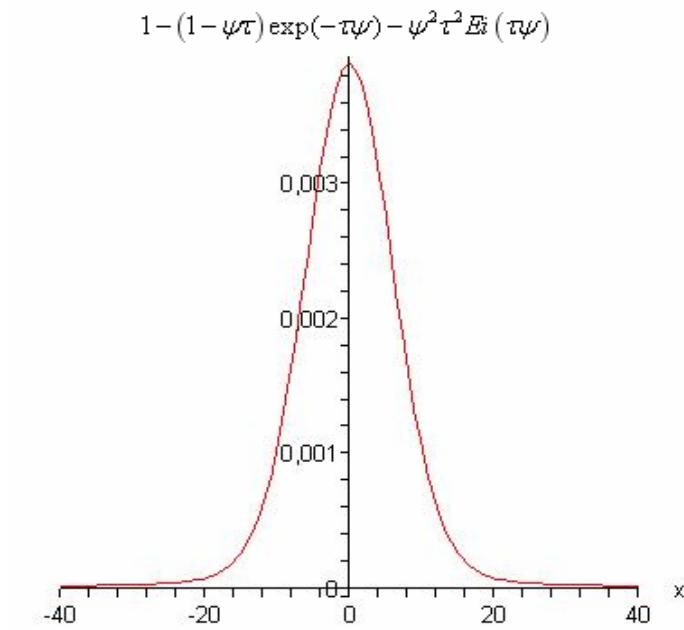


Figura 21.: Integrando do fator de auto-proteção para $\tau = 0.01$ e $\xi = 0.25$

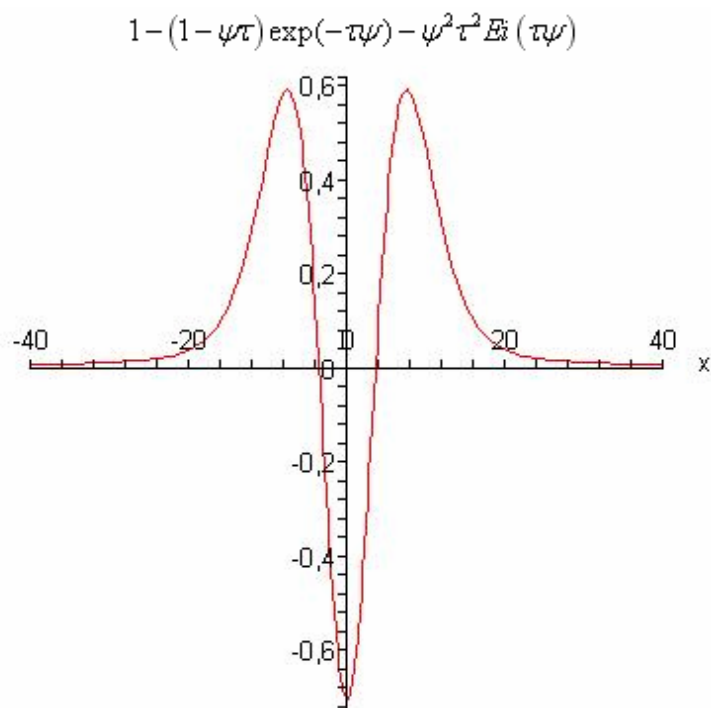


Figura 22.: Integrando do fator de auto-proteção para $\tau = 5.0$ e $\xi = 0.25$.

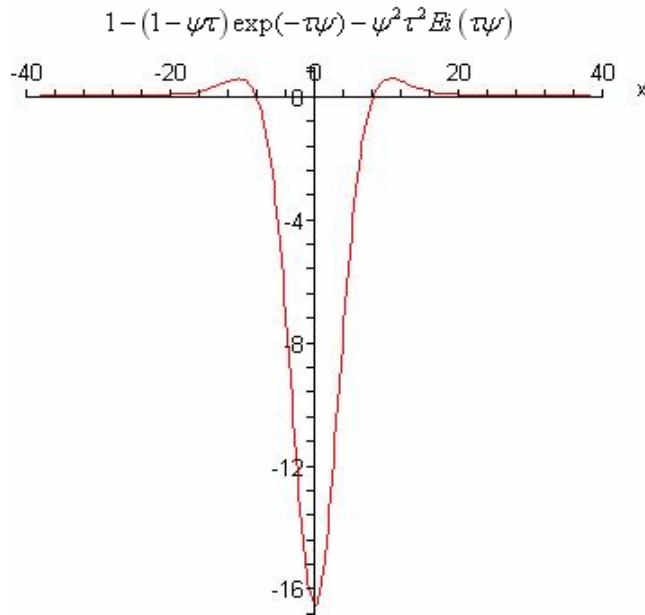


Figura 23.: Integrando do fator de auto-proteção para $\tau = 10$ e $\xi = 0.25$.

A função a ser integrada pelo método da quadratura gaussiana é simétrica em relação a variável x . Este fato permite integrar numericamente no intervalo $[0, \infty)$ e multiplicar o resultado por 2. Outro fato importante é que o infinito numérico não precisa se alongar muito, visto que a função vai rapidamente a zero.

Basicamente, o método de integração gaussiana ou quadratura gaussiana consiste em aproximar uma integral segundo a seguinte expressão [22]:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}\xi + \frac{b+a}{2}\right) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^N w_i f\left(\frac{b-a}{2}\xi_i + \frac{b+a}{2}\right), \quad (5.1)$$

onde N é a ordem da quadratura, ξ_i é o ponto da quadratura e w_i é a função peso correspondente ao ponto de quadratura.

Nesta seção o método de integração gaussiana será utilizado como referência para o cálculo dos fatores de auto-proteção. Essa escolha é justificada pelo fato de ser sempre possível aumentar o infinito numérico e o número de sub-intervalos no qual o método é aplicado, com conseqüente aumento de precisão. A integração numérica unidimensional

foi efetuada com o método de integração gaussiana, enquanto o cálculo da função de alargamento Doppler foi efetuado utilizando dois métodos distintos, a saber, o método de Frobenius e o próprio método de integração gaussiana.

Ensaio numérico e uma análise gráfica da equação (4.13), subsidiada pelas figuras 21, 22 e 23, mostra que no ponto $x = 40$ o integrando decai rapidamente a zero. Por isso, nesta tese o ponto $x = 100$ será considerado o infinito numérico. Utilizou-se como referência a integração gaussiana de ordem 15 subdividindo o intervalo de integração unidimensional em 10 intervalos com o intuito de refinar ainda mais o método. A espessura efetiva da chapa $\tau = 0.3633$ foi escolhida para efeito de validação por ser um valor dentro da faixa dos utilizados por Shcherbakov e Harada em seu trabalho[4].

A tabela 6 mostra os resultados para os fatores de auto-proteção onde a função de alargamento Doppler é calculada a partir do método de Frobenius.

Tabela 6.: Fatores de auto-proteção para diferentes temperaturas utilizando o método de Frobenius no cálculo da função de alargamento Doppler.

ξ	Método de Frobenius	Integração Gaussiana	Discrepância entre os métodos (%)
0.05	0.96330	0.96276	0.06
0.10	0.94426	0.94395	0.03
0.15	0.92812	0.92790	0.02
0.20	0.91448	0.91431	0.02
0.25	0.90272	0.90258	0.02
0.30	0.89246	0.89234	0.01
0.35	0.88341	0.88331	0.01
0.40	0.87537	0.87528	0.01
0.45	0.86818	0.86810	0.01
0.50	0.86172	0.86165	0.01

A tabela 6 mostra que o método de Frobenius para o cálculo da função de alargamento Doppler fornece desvio percentuais pequenos em relação aos valores de referência.

Capítulo 6

Conclusões e perspectivas futuras de trabalho

No capítulo 3 desta tese determinaram-se novas aproximações analíticas para a função de alargamento Doppler e para o termo de interferência. As formas funcionais dessas funções se mostraram simples.

Com referência à função de alargamento Doppler, compararam-se os resultados obtidos a partir da combinação dos métodos de Frobenius e o de variação de parâmetros com os obtidos através do método de Padé de 4 pólos. Os resultados obtidos com o método proposto, tomando o método numérico como referência, foram melhores que os obtidos com o de Padé de 4 pólos.

Quanto ao termo de interferência, obteve-se uma aproximação analítica tão simples e precisa quanto a da função de alargamento Doppler, reproduzindo plenamente dados publicados anteriormente [1].

Como aplicação direta das novas aproximações obtidas nesta tese, foram estudadas algumas ressonâncias conhecidas do elemento combustível ^{238}U . Essas ressonâncias foram escolhidas por serem as mais importantes no processo de moderação de nêutron em reatores térmicos. As expressões obtidas utilizando essas novas aproximações analíticas foram aplicadas nos cálculos das seções de choque de captura, de espalhamento e total, sendo validadas através da comparação com valores existentes na literatura.

Os bons resultados obtidos na determinação das seções de choque de captura, de espalhamento e total, juntamente com o trabalho de Shcherbakov e Harada [4],

motivaram a aplicação dessa nova aproximação analítica para a determinação de fatores de auto-proteção.

No capítulo 5 obteve-se uma nova expressão para os fatores de auto-proteção em forma de uma integral unidimensional.

Com a nova aproximação analítica para a função de alargamento Doppler, que aparece na expressão dos fatores de auto-proteção de maneira não trivial, aplicou-se o método de integração gaussiana para obtenção numérica de $G_{epi}(\xi, \tau)$. As discrepâncias em relação aos valores de referência foram pequenas.

Algumas perspectivas de continuação do presente trabalho são elencadas a seguir:

- Aplicação da função de alargamento Doppler ao cálculo das funções $J(\xi, \beta)$, necessárias no cálculo das probabilidades de escape ressonante e das integrais de ressonância;
- Para algumas ressonâncias, é possível aproximar a função de alargamento como:

$$\psi(x, \xi) = \frac{\xi\sqrt{\pi}}{2} \exp\left[-\frac{1}{4}\xi^2(x^2-1)\right] \cos\left(\frac{\xi^2x}{2}\right). \quad (6.1)$$

Um exemplo onde isso é possível é nas ressonâncias em níveis de energia maiores que $E_0 = 36.80eV$, no caso do isótopo ^{238}U . Uma continuação para o presente trabalho seria validar essa aproximação para outros elementos físseis, determinando, além das seções de choque de absorção ressonante e de espalhamento, probabilidades de escape onde as integrais de ressonâncias desempenham um papel primordial;

- Existem indicações que a equação diferencial que rege a função de alargamento Doppler possa ser escrita na forma de outras funções especiais, resolvendo-as pelo método de Sturm-Liouville.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. J. J. Duderstadt, L. J. Hamilton, *Nuclear Reactor Analysis*, Ed. John Wiley and Sons, Nova York (1976).
2. A. S. Martinez, T. P.R. Campos. *Approximate Calculation of the Resonance Integral for Isolated Resonances*. Nuclear Science and Engineering, Estados Unidos, v. **102**, p. 211-218, (1989).
3. A. S. Martinez, C. M. Magalhães. *Uma Aproximação Analítica para a Integral de Ressonância*. Anais do V Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica, 1985. v. 1.
4. O. Shcherbakov, H. Harada, "Resonance Self-Shielding Corrections for Activations Cross Section Measurements", Journal of Nuclear Science and Technology, Japão, v. **39**, n. **5**, p. 548-553 (2002).
5. A. Zukeran, T. Nakagawa. *Criticality and Doppler Reactivity Worth Uncertainty Due To Resolved Resonance Parameter Errors – Formula For Sensitivity Analysis*. Jaeri – Research (2005).
6. R. S. Keshavamurthy, R. Harish, "Use of Padé Approximations in the Analytical Evaluation of the $J(\theta, \beta)$ Function and its Temperature Derivative", Nuclear Science and Engineering, **115**, 81 (1993).
7. P. Martin, G. Donoso, and J. Zamudio Cristi, "A modified asymptotic Padé method. Application to multipole approximation for the plasma dispersion function Z", J. Math. Phys., **21**, 280 (1980).
8. D. A. Palma, A. S. Martinez, F. C. Silva. "Aproximação da função de alargamento através do método de Frobenius" International Nuclear Atlantic Conference, Santos (2005).

9. D. A. Palma, A. S. Martinez, F. C. Silva. "*The Derivation of the Doppler Broadening Function using Frobenius Method*", Journal of Nuclear Science and Technology, Japão, **v. 43, n. 6**, p. 617-622 (2006).
10. E. Butkov. *Matemática Física*, Ed. Addison-Wesley, Nova York (1987).
11. D. A. Palma, A. S. Martinez, F. C. Silva. "*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).
12. K. H. Beckurts, K. Wirtz, *Nêutron Physics*, Springer Verlag, Nova York (1964).
13. L. Dresner, *Resonances absorption in nuclear reactors*, Ed. Pergamon, Oxford (1960).
14. R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, Ed. Pergamon, Oxford (1972).
15. J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Ed. Prentice-Hall, Upper Saddle River (1994).
16. R. L. Murray, Nuclear Science and Engineering. **n. 26**, p. 362 (1966).
17. L. C. Suster, *Tese de Mestrado: Cálculo do espectro adjunto de Nêutrons em células heterogêneas de combustível*, COPPE/UFRJ (1998).
18. A. S. Martinez, L. C. Suster, F. C. Silva, "*Approximation Method for the Adjoint Neutron Spectrum in Heterogeneous Media*", Kerntechnik, Alemanha, **v. 70, n. 4**, p. 218-223 (2005).
19. D. A. Palma, A. S. Martinez, F. C. Silva. "*An analytical approximation for the interference term using Frobenius method and applications*" International Nuclear Atlantic Conference, Santos (2007).
20. G. M. Roe, *The absorption of neutrons in Doppler Broadened Resonances*, KAPL-1241, (1954).
21. D. A. Palma, A. S. Martinez, F. C. Silva. "*A new formulation for resonant self-shielding factors*" International Nuclear Atlantic Conference, Santos (2007).
22. M. C. C. Cunha, *Métodos Numéricos*, 2^o ed., Ed. Unicamp, São Paulo, (2003).

Apêndice A

O método de Frobenius e o método de variação de parâmetros.

A.1 O método de Frobenius

Nesta seção faz-se um breve resumo sobre o método de Frobenius [George Ferdinand Frobenius, (1849 – 1917)] que é a ferramenta fundamental para discutir se a solução de uma equação diferencial ordinária, independentemente se os coeficientes são ou não constantes, pode ser representada como uma série de potências. O método de Frobenius possibilita a obtenção de pelo menos uma solução da equação diferencial ordinária, o que é fundamental, uma vez que a outra possa, por exemplo, ser obtida pelo método de redução de ordem. Em alguns casos, como será verificado posteriormente, o método possibilita a obtenção de uma solução geral, isto é, de duas soluções linearmente independentes.

Demonstra-se que nem sempre é possível encontrar uma solução geral de uma equação diferencial ordinária via desenvolvimento em série de Taylor (ou de MacLaurin). Uma pergunta surge de imediato: quando o desenvolvimento em série de Taylor é conveniente para procurar uma solução de uma equação diferencial ordinária?

Para responder a essa pergunta, consideremos a equação diferencial escrita da seguinte forma:

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} + P(x)\frac{dy(x)}{dx} + Q(x)y(x) = 0, \quad (\text{A.1})$$

considerando apenas os casos em que $P(x)$ e $Q(x)$ são funções racionais ou ainda um quociente de dois polinômios. Com isso tem-se a seguinte definição:

Definição 1: Se os coeficientes $P(x)$ e $Q(x)$ são funções racionais e se $\lim_{x \rightarrow x_0} P(x)$ e $\lim_{x \rightarrow x_0} Q(x)$ existem, então $x = x_0$ é chamado ponto ordinário da equação diferencial. No caso em que um dos limites não exista, então $x = x_0$ é chamado de ponto singular.

Teorema 1: Se x_0 é um ponto ordinário da equação diferencial (A.1) então existem duas soluções linearmente independentes obtidas a partir do desenvolvimento em série de Taylor. Essas séries convergem no intervalo $|x - x_0| < R$ onde $R > 0$

O método de Frobenius consiste fundamentalmente em procurar uma solução da equação diferencial de segunda ordem, linear e homogênea, na forma de série em torno do ponto $x = x_0$, com um parâmetro livre, isto é, da seguinte forma:

$$y(x) = x^s \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^{n+s}, \text{ com } c_0 \neq 0, \quad (\text{A.2})$$

onde s é o parâmetro. Visto que é sempre possível deslocar a singularidade sem mudar essencialmente a equação diferencial, é suficiente considerar $x = x_0 + z$ e restringirmos, sem perda de generalidade, nosso estudo ao caso do ponto $z = 0$.

A partir da definição 1, que afirma que se um ponto não é um ponto ordinário, associado a uma equação diferencial ordinária, ele deve ser um ponto singular, define-se o conceito de ponto singular. Além disso, no caso em que tem-se um ponto singular deve-se classificá-lo como sendo um ponto singular regular ou um ponto irregular (este fugindo do escopo da proposta desta tese).

Definição 2: Um ponto $x = x_0$ associado á uma equação diferencial ordinária

$$p(x) \frac{d^2 y(x)}{dx^2} + q(x) \frac{dy(x)}{dx} + r(x) y(x) = 0,$$

onde $p(x)$, $q(x)$ e $r(x)$ são funções polinomiais, é dito ponto singular regular se os limites

$$\lim_{x \rightarrow x_0} (x - x_0) \frac{q(x)}{p(x)} \text{ e } \lim_{x \rightarrow x_0} (x - x_0) \frac{r(x)}{p(x)}$$

são finitos.

A série de potências generalizada (A.2), dependente do parâmetro indeterminado s , pode descrever:

- a) Funções analíticas que não se anulam na origem ($s=0$);
- b) Funções analíticas com zero de ordem m na origem ($s=m$ = inteiro positivo);
- c) Funções com um pólo de ordem m na origem ($s=-m$ = inteiro negativo);
- d) Funções com certos tipos de pontos de ramificação na origem (s = não inteiro).

Se a solução da equação diferencial for representada por (A.2) então, em geral, poderá ser diferenciada termo a termo. Com efeito, para os casos mais importantes tem-se, em resumo que:

- 1) Se s for nulo ou um inteiro positivo, a série será uma série de Taylor e poderá ser diferenciada um número arbitrário de vezes no interior de seu círculo de convergência.
- 2) Se s for um inteiro negativo, a série será uma série de Laurent e poderá ser diferenciada um número arbitrário de vezes no anel em que é válida.

A.2. O método de variação de parâmetros

Na sessão anterior deste apêndice fez-se uma breve descrição do método de Frobenius, método utilizado na obtenção da solução da parte homogênea das equações diferenciais (3.5) e (3.12). Para a obtenção de uma solução particular dessas mesmas equações pode-se utilizar, entre outros métodos, o de variação de parâmetros que é um método bem estabelecido na literatura. Na presente seção uma breve descrição do método é apresentada a fim de embasar sua aplicação nesta tese.

Suponha que uma solução particular seja escrita como uma combinação das soluções linearmente independentes da parte homogênea, sendo representada por

$$u_p(x) = v_1(x)u_1(x) + v_2(x)u_2(x), \quad (\text{A.3})$$

onde $v_1(x)$ e $v_2(x)$ são parâmetros osciladores que dão flexibilidade e nome ao método.

É fácil verificar que $v_1(x)$ e $v_2(x)$ não são definidos unicamente mesmo se $u_p(x)$ for.

Pode-se utilizar dessa liberdade e impor certas exigências adicionais sobre $v_1(x)$ e $v_2(x)$

para facilitar sua determinação. Calculando $u_p'(x)$ tem-se

$$u_p'(x) = v_1(x)u_1'(x) + v_2(x)u_2'(x) + v_1'(x)u_1(x) + v_2'(x)u_2(x). \quad (\text{A.4})$$

Se impusermos a exigência adicional que

$$v_1'(x)u_1(x) + v_2'(x)u_2(x) = 0 \quad (\text{A.5})$$

a determinação de $v_1(x)$ e $v_2(x)$ será simplificada como será visto adiante.

Calculando agora $u_p''(x)$ e substituindo os valores de $u_p''(x)$, $u_p'(x)$ e $u_p(x)$ na equação diferencial e utilizando o fato que $u_1(x)$ e $u_2(x)$ são soluções da equação homogênea é fácil verificar que

$$v_1'(x)u_1'(x) + v_2'(x)u_2'(x) = F(x), \quad (\text{A.6})$$

onde $F(x)$ é a parte não homogênea da equação. A relação (A.6) juntamente com a condição (A.5) formam um sistema algébrico de equações que, pode ser escrito, em forma matricial, da seguinte forma

$$\begin{pmatrix} u_1'(x) & u_2'(x) \\ u_1(x) & u_2(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1'(x) \\ v_2'(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(x) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

Resolvendo o sistema (A.7) obtém-se que os parâmetros osciladores $v_1(x)$ e $v_2(x)$ são dados por

$$\begin{aligned} v_1(x) &= -\int_{x_1}^x d\eta \frac{u_2(\eta)F(\eta)}{W(\eta)} \\ v_2(x) &= \int_{x_2}^x d\eta \frac{u_1(\eta)F(\eta)}{W(\eta)}, \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

onde a função $W(\eta)$ é o wronskiano de u_1 e u_2 representado sob a forma do determinante

$$W[u_1(x), u_2(x)] = \det \begin{pmatrix} u_1(x) & u_2(x) \\ u_1'(x) & u_2'(x) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

Dessa forma, a partir das integrais (A.8) uma solução particular fica definida.

Apêndice B

A função erro

A função erro, designada abreviadamente por $\text{erf}(x)$, é obtida por integração de uma distribuição normal, sendo definida como:

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\eta^2} d\eta. \quad (\text{B.1})$$

Sua representação gráfica é dada pela figura 28:

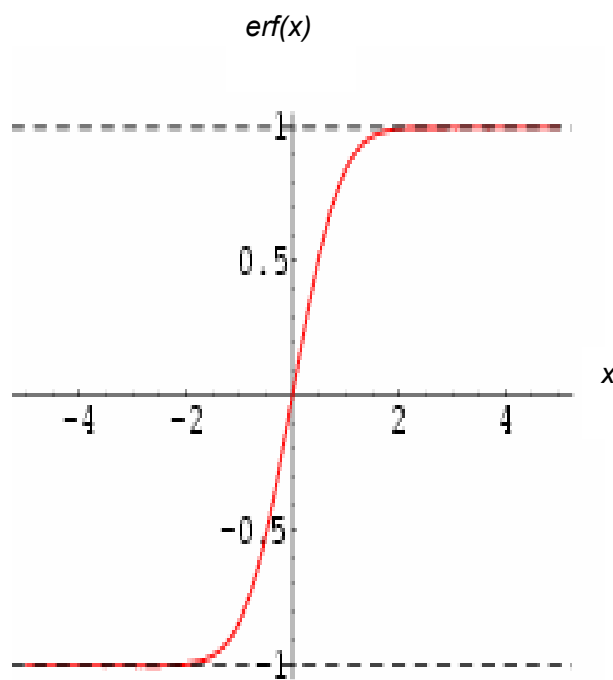


Figura 24.: A função erro.

A função erro toma os seguintes valores especiais:

$$\operatorname{erf}(0) = 0. \quad (\text{B.2})$$

$$\operatorname{erf}(+\infty) = 1. \quad (\text{B.3})$$

A função erro é uma função ímpar, isto é:

$$\operatorname{erf}(x) = -\operatorname{erf}(x). \quad (\text{B.4})$$

A primeira derivada da função erro é:

$$\frac{d}{dx} \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}. \quad (\text{B.5})$$

A integral indefinida da função erro é dada por:

$$\int \operatorname{erf}(x) dx = x \operatorname{erf}(x) + \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}}. \quad (\text{B.6})$$