

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA
NUCLEARES
COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR
INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR**

JORGE FELIX SEBASTIÃO

**AVALIAÇÃO DE APROXIMAÇÕES ANALÍTICAS PARA FUNÇÃO ERRO COM
ARGUMENTO IMAGINÁRIO E APLICAÇÕES EM FÍSICA DE REATORES**

RIO DE JANEIRO

2022

JORGE FELIX SEBASTIÃO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós
graduação em Ciência e Tecnologia Nucleares
do Instituto de Engenharia Nuclear da Comissão
Nacional de Energia Nuclear como parte dos
requisitos necessários para a obtenção do Grau
de Mestre em Ciências em Engenharia Nuclear
- Profissional em Engenharia Nuclear

Orientador: Prof. Dr. Daniel Artur Pinheiro Palma
Coorientador: Prof. Dr. Guilherme Guedes de Almeida

RIO DE JANEIRO
2022

SEBA Sebastião, Jorge Felix

Avaliação de aproximações analíticas para função erro com argumento imaginário e aplicações em física de reatores / Jorge Felix Sebastião. – Rio de Janeiro: CNEN/IEN, 2022.

xiii, 65 p.: il.; 29,7 cm

Orientadores: Daniel Artur Pinheiro Palma e Guilherme Guedes de Almeida

Dissertação (mestrado) - Instituto de Engenharia Nuclear, PPGIEN, 2022.

Referências Bibliográficas: p. 63 – 64.

1. Função erro com argumento complexo. 2. Função de Alargamento Doppler. 3. Método de Abrarov.

AVALIAÇÃO DE APROXIMAÇÕES ANALÍTICAS PARA
FUNÇÃO ERRO COM ARGUMENTO IMAGINÁRIO E
APLICAÇÕES EM FÍSICA DE REATORES

Jorge Felix Sebastião

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM
CIÊNCIA E TECNOLOGIA NUCLEARES DO INSTITUTO DE ENGENHARIA
NUCLEAR DA COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR COMO
PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA OBTENÇÃO DO GRAU
DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR –
PROFISSIONAL EM ENGENHARIA NUCLEAR

Aprovada por:

Prof. Daniel Artur Pinheiro Palma, D.Sc.

Prof. Guilherme Guedes de Almeida, D.Sc.

Prof. Carlos Marcelo Franklin Lapa, D.Sc.

Prof. Carlos Augusto Domingues Zarro, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

JUNHO DE 2022

DEDICATÓRIA

Aos meus pais, Luis e Maria Aparecida, que dedicaram inúmeros esforços para que eu concluísse meus estudos.

AGRADECIMENTOS

Agradeço imensamente ao corpo docente do IEN por todo conteúdo ensinado e pela receptibilidade que tiveram com os alunos. À secretaria, especialmente à dona Claudinha, que sempre esteve solícita para nos auxiliar na nossa jornada. Aos meus amigos Gabriel Gonçalves, André Gustavo e Heliton Flávio, que me deram um grande apoio durante o curso. Agradeço também ao professor Altair de Souza Assis e Cláudio Elias da Silva, que me deram a oportunidade de conhecer o Instituto de Engenharia Nuclear.

Agradeço à Comissão Nacional de Energia Nuclear, pois graças ao apoio financeiro concedido este trabalho pôde ser realizado.

EPÍGRAFE

"Seja curioso e tente entender o que você vê. Vivemos em um universo governado por leis racionais que podemos descobrir e entender. Apesar dos triunfos recentes, há muitos mistérios novos e profundos que ainda precisam ser resolvidos."

Stephen Hawking

RESUMO

O estudo do comportamento da interação nêutron-núcleo é de extrema importância no campo da Física de Reatores, onde é necessário saber o comportamento das seções de choque na região das ressonâncias resolvidas onde pode ocorrer a captura de nêutrons. O Fenômeno de Alargamento Doppler, que é o alargamento das ressonâncias devido ao movimento relativo entre nêutron e núcleo, exerce um papel importante no projeto de reatores nucleares. Este fenômeno é representado matematicamente pela função de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$, cuja formulação analítica é bem estabelecida na literatura e que possui a função erro com argumento imaginário em sua forma funcional. Comumente, as partes real e imaginária dessa função são calculadas utilizando o método de Salzer proposto na década de 50. Nesta dissertação é apresentado um algoritmo mais moderno de aproximação da função erro com argumento complexo, desenvolvida por Abrarov, Quine e Jagpal (Abrarov et. al., 2018), que faz uso de formalismos mais modernos para a resolução deste problema. Após extensivos testes numéricos constatou-se que embora o método de Abrarov seja muito acurado em relação ao método numérico de referência, o Método de Salzer apresenta resultados um pouco melhores e com mais rapidez de processamento, o que corrobora o fato de estar a tantas décadas em utilização.

Palavras Chave: Função erro com argumento complexo, Função de Alargamento Doppler, Método de Abrarov

ABSTRACT

The study of the behavior of the neutron-nucleus interaction is extremely important in the field of reactor physics, where it is necessary to know the behavior of cross sections in the region of resolved resonances where neutron capture can occur. The Doppler Broadening Phenomenon, which is the widening of the resonance due to the relative motion of the neutron to the nucleus, plays an important role in the design of nuclear reactors. This phenomenon is mathematically represented by the Doppler Broadening function $\psi(x, \xi)$, whose analytical formulation is well established in the literature and which has the error function with imaginary argument in its functional form. Commonly, the real and imaginary parts of this function are calculated using the Salzer method proposed in the 1950s. In this dissertation, we present a more modern algorithm for approximating the error function with complex argument, developed by Abrarov, Quine and Jagpal (Abrarov et al., 2018), which uses more modern mathematical formalism to solve the problem. After extensive numerical tests, it was found that although the Abrarov method is very accurate in relation to the numerical reference method, the Salzer Method presents slightly better results and faster processing, which corroborates the fact that it is so far away from decades in use.

Keywords: Error function with complex argument, Doppler broadening function, Abrarov's method.

SUMÁRIO

Capítulo 1 – Introdução.....	15
Capítulo 2 - Cálculo da função erro com argumento complexo	21
2.1- Aproximação de Salzer.....	21
Capítulo 3: Metodologia	28
3.1 Função seno cardinal	28
3.1.1 Metodologia de amostragem pela expansão de cossenos incompleta	29
3.1.2 Análise de erro	36
3.3 Aproximação da função erro complexa	37
3.4 Domínio interno	39
3.4.1 Subdomínio primário	39
3.4.2 Subdomínio secundário.....	40
3.5 Região externa	41
3.6 Domínio de Z.....	42
3.6.1 Índice Externo.....	44
3.6.2 Índice Negativo.....	45
3.6.3 Sub-índice primário e secundário	45
3.7 Implementação da função de alargamento Doppler.....	46
Capítulo 4: Resultados obtidos com relação à função de alargamento Doppler	48
4.1- Testes e Resultados do método de Salzer.....	48
4.2- Testes e Resultados pelo método de Abrarov.....	50
4.2.1- Resultados Obtidos pelo Subdomínio Primário	50
4.2.2- Resultados Obtidos para a Região Externa	53
4.3- Tempo de processamento dos métodos	54
Capítulo 5: Aplicação ao cálculo da seção de choque	56
5.1- Implementação	56
5.2- Comparação dos dados obtidos entre as versões do algoritmo	58

5.2.1-Comparações	58
5.3- Desempenho entre os métodos	60
Capítulo 6 – Conclusão e sugestão de trabalhos futuros	62
REFERÊNCIAS.....	65

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Seção de choque microscópica de fissão do ^{239}Pu	18
Figura 2: Aproximação da expansão de cossenos incompleta.	33
Figura 3: Aproximação da função pela amostragem da expansão de cossenos incompleta.....	33
Figura 4: Divisão das regiões no domínio da função	38
Figura 5: Frações contínuas de laplace.....	41
Figura 6: Gráfico da seção de choque da ressonância $E_0 = 6.67\text{eV}$ do isótopo ^{238}U em função da energia do nêutron incidente.....	58

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Valores aproximados de E para diferentes valores de a	22
Tabela 2: Tabela de valores de z_i em função de ξ e x	43
Tabela 3: Índice externo	44
Tabela 4: índice negativo.....	45
Tabela 5: índice do subdomínio.....	46
Tabela 6: Valores de $\psi(x, \xi)$ reproduzidos a partir de Duderstadt (1976).....	48
Tabela 7: Valores obtidos para $\psi(x, \xi = 0,05)$ utilizando a metodologia de Salzer (1951). ..	49
Tabela 8: Desvio relativo em relação ao método de referência para $\psi(x, \xi = 0,05)$ pelo método de Salzer.	49
Tabela 9: Valores obtidos para $\psi(x, \xi = 0,5)$ utilizando a metodologia de Salzer (1951).	49
Tabela 10: Desvio relativo em relação ao método de referência para $\psi(x, \xi = 0,5)$ pelo método de Salzer.	50
Tabela 11: Valores obtidos para $\psi(x, \xi)$ utilizando a metodologia proposta por Abrarov (2018).	51
Tabela 12: Desvio relativo em relação ao método de referência para $\psi(x, \xi)$ utilizando a metodologia proposta por Abrarov (2018).	51
Tabela 13: Valores obtidos para $\psi(x, \xi)$ utilizando a metodologia proposta por Abrarov (2018) no subdomínio primário com $M = 10$	52
Tabela 14: Desvio relativo em relação ao método de referência para $\psi(x, \xi)$ utilizando a metodologia proposta por Abrarov (2018) no subdomínio primário para $M = 10$	52
Tabela 15: Valores obtidos para $\psi(x, \xi)$ utilizando a metodologia proposta por Abrarov (2018) no subdomínio da região externa.....	53
Tabela 16: Desvio relativo em relação ao método de referência para $\psi(x, \xi)$ utilizando a metodologia proposta por Abrarov (2018) no subdomínio da região externa.....	53
Tabela 17: Tabela de performance das aproximações.....	54
Tabela 18: Valores utilizados nos cálculos.....	57
Tabela 19: Valores da seção de choque para cada valor de M	59
Tabela 20: Desvio relativo.....	59
Tabela 21: Tempo de execução do cálculo (em segundos)	61

Capítulo 1 – Introdução

Nos projetos de reatores nucleares, é de suma importância o tratamento acurado do fenômeno da captura de nêutrons pelas ressonâncias e, neste contexto, o *Fenômeno de Alargamento Doppler* assume um papel central para o tratamento da seção de choque microscópica da interação nêutron-núcleo. Matematicamente, tal fenômeno é descrito através da *Função de Alargamento Doppler* $\psi(x, \xi)$, também conhecida como *Primeira Função de Voigt*, que pode ser interpretada como uma integral de convolução entre uma função gaussiana e uma lorentziana (GONÇALVES, MARTINEZ E SILVA, 2008). Esta função descreve fisicamente o fenômeno de alargamento de ressonâncias resolvidas em função da temperatura, o que ocasiona um aumento na faixa de energias onde é mais provável que um nêutron seja capturado. Outra função igualmente importante é a *Função do Termo de Interferência* $\chi(x, \xi)$, ou *Segunda Função de Voigt*, que deve ser considerada no caso do espalhamento ressonante.

Para se obter as expressões para as funções citadas, toma-se como ponto de partida a seção de choque média de interação nêutron-núcleo (DUDERSTADT E HAMILTON, 1976):

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

onde \vec{v} é a velocidade do nêutron, \vec{V} a velocidade do núcleo-alvo e $\sigma(|\vec{v} - \vec{V}|)$ é a seção de choque da interação nêutron-núcleo. Para se obter a expressão para a Função de Alargamento Doppler, considera-se, para os núcleos-alvo, uma distribuição isotrópica de velocidades que obedeça a bem estabelecida estatística de Maxwell-Boltzmann, escrita como (SOMMERFELD, 1956):

$$F(V, T) = 4\pi \left(\frac{M}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{MV^2}{2k_B T}}. \quad (2)$$

Além disso, considera-se a seção de choque da interação nêutron-núcleo como dada pela *Fórmula de Nível Único de Breit-Wigner* de captura ressonante (BREIT AND WIGNER, 1936) que expressa em função da energia do centro de massa do sistema nêutron-núcleo alvo, assume a seguinte forma:

$$\bar{\sigma}_\gamma(E_{CM}) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \left(\frac{E_0}{E_{CM}} \right)^{1/2} \left[\frac{1}{1 + \frac{4}{\Gamma^2} (E_{CM} - E_0)^2} \right], \quad (3)$$

onde as grandezas envolvidas são as seguintes:

- E_{CM} é a energia do sistema nêutron-núcleo alvo no referencial do centro de massa;
- E_0 é a energia no qual ocorre o pico de ressonância;
- Γ é a largura total da ressonância;
- Γ_γ é a largura da ressonância radioativa;
- σ_0 é o valor da seção de choque total na energia de ressonância E_0 .

Assim, após alguma manipulação algébrica (DE ALMEIDA, 2019), é possível escrever a seguinte expressão para a seção de choque média:

$$\bar{\sigma}_\gamma(E) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \left(\frac{E_0}{E} \right)^{\frac{1}{2}} \Psi(x, \xi), \quad (4)$$

onde $\Psi(x, \xi)$ é a chamada Função de Alargamento Doppler, definida pela expressão abaixo:

$$\Psi(x, \xi) = \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}} \int_{-2E_0/\Gamma}^{+\infty} \frac{1}{1+y^2} \left[e^{-\frac{(v(x)-v_r(y))^2}{2v_{th}^2}} - e^{-\frac{(v(x)+v_r(y))^2}{2v_{th}^2}} \right] dy, \quad (5)$$

onde:

- $v(x)$ é o módulo da velocidade do nêutron;
- $x = \frac{2}{\Gamma} (E - E_0)$ é a energia reduzida do nêutron;
- $v_r(y)$ é o módulo da velocidade relativa entre nêutron e núcleo;
- $y = \frac{2}{\Gamma} (E_{CM} - E_0)$ é a energia reduzida do sistema nêutron-núcleo no referencial do centro de massa;
- $\xi = \frac{\Gamma}{\Gamma_D}$, onde Γ_D é o comprimento Doppler de ressonância;
- $v_{th} = \sqrt{k_b T / A}$ é a velocidade térmica, onde A é a massa do núcleo, T é a temperatura do meio e k_b é a constante de Boltzmann.

e define-se o *comprimento Doppler da ressonância*, que é a largura de ressonância gerada pela diferença de velocidade entre nêutron e núcleo como:

$$\Gamma_D = \sqrt{\frac{4k_B T E_0}{A}}. \quad (6)$$

A Função de Alargamento Doppler, como escrita na equação (5), é dada em termos de uma integral que além de não possuir solução analítica, apresenta uma forma complicada, de modo que aproximações podem ser muito úteis. Neste contexto, usam-se as aproximações de Bethe e Placzek (1937), descritas abaixo:

- 1) A segunda exponencial que aparece na equação (5) é desprezada, o que é equivalente a se considerar que:

$$[v(x) + v_r(y)]^2 \gg [v(x) - v_r(y)]^2. \quad (7)$$

- 2) Levando-se em conta o fato de os picos de ressonância serem altos e estreitos, estende-se o limite de integração inferior para $-\infty$:

$$-\frac{2E_0}{\Gamma} \rightarrow -\infty. \quad (8)$$

- 3) Usando o fato dos núcleos alvo serem massivos, chega-se à seguinte aproximação:

$$\sqrt{E_{CM}} \approx \sqrt{E} \left(1 + \frac{E_{CM} - E}{2E}\right). \quad (9)$$

Fazendo-se uso de tais aproximações, é possível escrever o argumento da primeira exponencial que aparece na equação (5) como:

$$\frac{(v(x) - v_r(y))^2}{2v_{th}^2} \approx \frac{\xi^2}{4} (x - y)^2. \quad (10)$$

Levando em consideração as aproximações de Bethe e Placzek, é possível escrever a conhecida expressão para a Função de Alargamento Doppler (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976):

$$\Psi(x, \xi) \approx \psi(x, \xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{1+y^2} \exp\left[-\frac{\xi^2}{4}(x-y)^2\right]. \quad (11)$$

Existem duas regiões distintas em relação à dependência da seção de choque microscópica, a região de ressonâncias resolvidas e a região de ressonâncias não resolvidas. Na Figura 1 é possível visualizar esta separação tomando-se como exemplo a dependência da seção de choque microscópica de fissão com a energia do nêutron incidente.

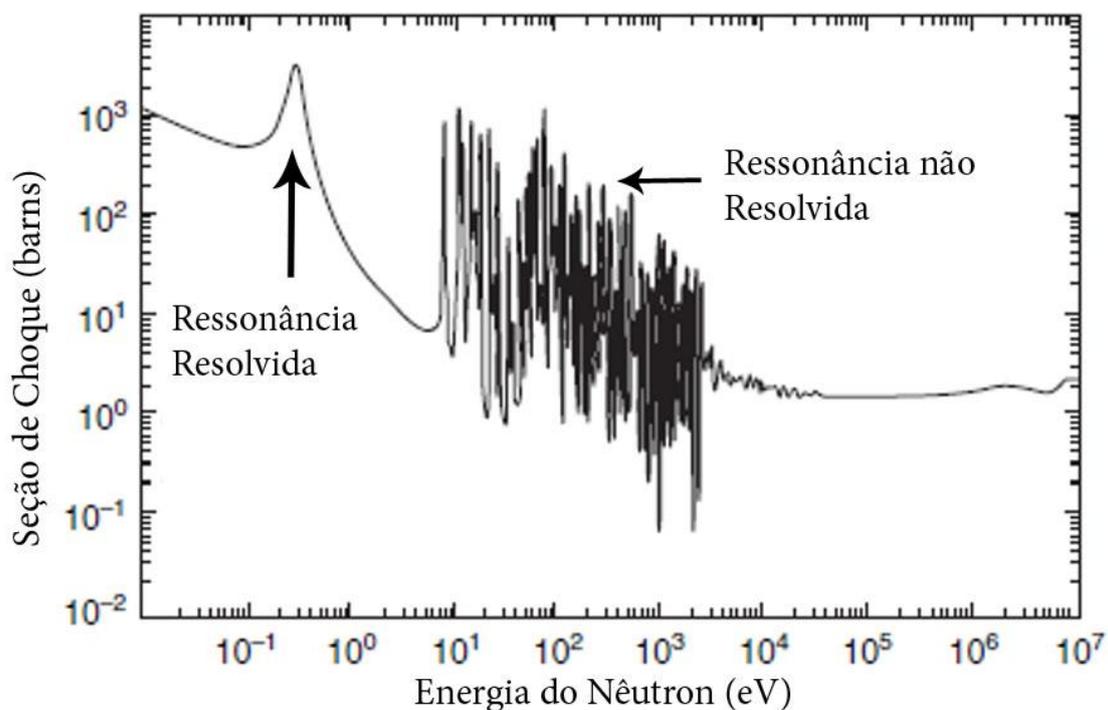


Figura 1: Seção de choque microscópica de fissão do ^{239}Pu ¹

Em reatores térmicos, ou seja, reatores cujos nêutrons que causam fissão já passaram pelo processo de moderação, perdendo energia a cada colisão com o moderador, as energias de incidência já se encontram na faixa das ressonâncias resolvidas. Neste contexto surge a

¹ Imagem extraída de <http://www.dne.bnl.gov/CoN/index.html>. Com adaptações. Acesso em 18 de ago de 2021.

importância de se conhecer de forma acurada uma expressão analítica para a Função de Alargamento Doppler, uma vez que, segundo o formalismo de Briet-Wigner descrito pela equação (3), ela é proporcional a seção de choque microscópica de fissão. De posse da seção de choque microscópica de fissão é possível calcular a seção de choque macroscópica de fissão de forma direta e, ao multiplicar esta pelo fluxo de nêutrons, a taxa de fissões é obtida.

Na prática, os códigos computacionais necessitariam calcular as seções de choque para cada elemento várias vezes para cada temperatura de interesse. Em décadas passadas, quando o poder de processamento computacional era muito inferior ao atual, grandes tabelas eram geradas com seções de choque calculadas em algumas temperaturas e interpolações eram realizadas sempre que fosse necessário calcular essas seções de choque em temperaturas não fornecidas pelas tabelas. Por isso, é muito importante conhecer expressões analíticas acuradas e de fácil processamento computacional de modo a permitir calcular rapidamente o valor da Função de Alargamento Doppler em cada energia e temperatura que seja desejado. Essa necessidade cresce ao se acoplar códigos neutrônicos a códigos termohidráulicos, uma vez que existem diferentes processos que são auto-alimentativos, ou seja, cuja mudança na temperatura gera uma mudança nas seções de choque que por sua vez alteram as taxas de reação que mudam a temperatura no passo seguinte e assim sucessivamente.

Como supracitado, devido a uma grande demanda de cálculos cada vez mais rápidos e precisos das Funções de Alargamento Doppler, novas formulações vêm sendo desenvolvidas. Nesta dissertação é considerada como referência a formulação analítica proposta por Palma e Martinez (2005), que é descrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \psi(x, \xi) = & \xi \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp\left[-\frac{1}{4}\xi^2(x^2 - 1)\right] \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \\ & \times \left\{ 1 + \operatorname{Re}(\eta(x, \xi)) + \tan\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \operatorname{Im}(\eta(x, \xi)) \right\}, \end{aligned} \quad (12)$$

onde:

$$\eta(x, \xi) = \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right), \quad (13)$$

sendo $\text{erf}(z)$ a função erro com argumento imaginário. Pode-se perceber que, na equação (12), além da função erro com argumento imaginário, aparecem apenas funções bem comportadas e de fácil tratamento matemático, tanto por *softwares* matemáticos quanto por linguagens de programação.

Nessa dissertação será apresentado um método que utiliza a Função de Faddeeva e sua relação com a função erro com argumento complexo para calcular a Função de Alargamento Doppler. Proposto por Abrarov, Quine e Jagpal (2018), o formalismo aqui apresentado servirá para realizar uma aproximação numérica para determinar os valores da função erro e será comparada ao método de Salzer (SALZER, 1951), amplamente utilizado.

O texto desta dissertação possui a seguinte estrutura:

No capítulo 2 é descrita a metodologia usual de cálculo da função $\text{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right)$ em função de expansões em séries como a proposta por Salzer (1951) e aplicadas em trabalhos publicados na literatura como os de Palma e Martinez (2009).

No capítulo 3 é descrita a metodologia proposta por Abrarov, Quine e Jagpal (2018), que também é baseada em uma expansão em série, utilizando a função sinc como ponto de partida.

No capítulo 4 os resultados obtidos a partir das metodologias de Salzer e Abrarov são reportados para diferentes intervalos de valores das variáveis x e ξ de interesse em Física de Reatores.

No capítulo 5 são demonstrados os resultados obtidos na descrição das seções de choque de absorção segundo as mesmas metodologias.

No capítulo 6 conclusões e sugestões de trabalhos futuros são apresentadas.

Capítulo 2 - Cálculo da função erro com argumento complexo

A função erro com argumento complexo é expressa da seguinte forma (ABRAMOWITZ E STEGUN, 1972):

$$\operatorname{erf}(Z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^Z e^{-u^2} du \quad (14)$$

onde

$$Z = X + Yi; \quad X, Y \in \mathbb{R} \quad (15)$$

A integral presente na equação (14) não é solucionável analiticamente, sendo necessário se encontrar outras formas de solução.

2.1- Aproximação de Salzer

Herbert Ellis Salzer (1915-2006) foi um matemático aplicado, americano, com diversos trabalhos publicados na área. Fez mestrado e doutorado em *Columbia University* na área de matemática e ciências aplicadas. Trabalhou no laboratório de computação de National Bureau of Standards, em Nova York e Washington DC. Nesta seção será apresentada a aproximação desenvolvida por Salzer (1951), descrevendo a metodologia utilizada para calcular a Função de Alargamento Doppler de acordo com Palma e Martinez (2005).

Conforme descrito na equação (14), a função erro é uma integral definida de 0 a Z. Uma forma de se avaliar $\operatorname{erf}(Z)$ é escolher como caminho de integração dois segmentos de reta: o primeiro da origem até $(0, X)$ e o segundo de $(0, X)$ até $(X, X + iY)$, como segue:

$$\begin{aligned} \operatorname{erf}(Z) = & \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^X e^{-u^2} du \\ & + \frac{2e^{-X^2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^Y e^{u^2} \operatorname{sen}(2Xu) du + i \frac{2e^{-X^2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^Y e^{u^2} \operatorname{cos}(2Xu) du. \end{aligned} \quad (16)$$

O termo $\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^X e^{-u^2} du$ é a função $\operatorname{erf}(X)$, definida na equação (14), com argumento real, e é numericamente bem conhecida. Para as demais integrais, utiliza-se uma aproximação

para e^{u^2} , de acordo com a metodologia proposta por Salzer (1951), tendo como base a seguinte expressão:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-(u+na)^2} = \pi^{1/2} a^{-1} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-n^2\pi^2/a^2} \cos(2n\pi u/a), \quad (17)$$

Que é um corolário imediato da fórmula de Poisson (identidade de Poisson) (TITCHMARSH, 1948). A partir da equação (17), pode-se chegar ao seguinte resultado:

$$e^{u^2} (1 + E) = a\pi^{-\frac{1}{2}} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-a^2 n^2} \cosh(2nau) \right], \quad (18)$$

onde:

$$E = 2 \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-n^2\pi^2/a^2} \cos(2n\pi u/a). \quad (19)$$

Assim, para valores de a onde $E \ll 1$, uma aproximação para e^{u^2} é dada pela seguinte expressão:

$$e^{u^2} = a\pi^{-\frac{1}{2}} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-a^2 n^2} \cosh(2nau) \right]. \quad (20)$$

Esta aproximação possui um erro relativo E , definido pela equação (19), de magnitude da ordem de $2e^{-\pi^2/a^2}$. Na Tabela 1, são mostrados os valores do erro relativo em para alguns valores de a :

Tabela 1: Valores aproximados de E para diferentes valores de a

a	1	0,9	0,8	0,7	0,6	0,5
E	10^{-4}	10^{-5}	$\frac{1}{2} 10^{-6}$	$\frac{1}{2} 10^{-8}$	$\frac{1}{4} 10^{-11}$	$\frac{3}{2} 10^{-17}$

Percebe-se, pela tabela, que o erro relativo diminui conforme se diminua o valor de a . Além disso, é notório que para $a = 1/2$ já se tem um erro desprezível. Assim, com esta escolha, se tem o seguinte:

$$e^{u^2} \approx \pi^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{2} + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-n^2/4} \cosh(nu) \right], \quad (21)$$

Será realizada uma aproximação neste ponto, ao se utilizar a equação (21) para escrever os integrandos da segunda e terceira integrais presentes na equação (16):

$$e^{u^2} \cos(2Xu) \approx \pi^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{2} + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-n^2/4} \cosh(nu) \right] \cos(2Xu), \quad (22)$$

$$e^{u^2} \sen(2Xu) \approx \pi^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{2} + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-n^2/4} \cosh(nu) \right] \sen(2Xu), \quad (23)$$

Ao integrar as equações (22) e (23), se obtém o que segue:

$$\int_0^Y e^{u^2} \cos(2Xu) du \approx \pi^{-\frac{1}{2}} \int_0^Y \left(\frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-n^2/4} \cosh(nu) \right) \cos(2Xu) du, \quad (24)$$

$$\int_0^Y e^{u^2} \sen(2Xu) du \approx \pi^{-\frac{1}{2}} \int_0^Y \left(\frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-n^2/4} \cosh(nu) \right) \sen(2Xu) du. \quad (25)$$

A integral do lado direito da equação (24) pode ser escrita do seguinte modo:

$$\begin{aligned} \int_0^Y \left(\frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-n^2/4} \cosh(nu) \right) \cos(2Xu) du &= \\ &= \frac{1}{2} \int_0^Y \cos(2Xu) du + \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-n^2/4} \int_0^Y \cosh(nu) \cos(2Xu) du, \end{aligned} \quad (26)$$

o que nos deixa com duas integrais para resolver. A primeira destas é direta:

$$\int_0^Y \cos(2Xu) du = \frac{\sen(2XY)}{2X}, \quad (27)$$

Resta, então, resolver a segunda integral, e para tal, necessitamos da seguinte integral indefinida:

$$I_1 = \int \cosh(nu) \cos(2Xu) du. \quad (28)$$

Para encontrar o resultado a integral I_1 , precisa-se utilizar integração por partes, baseada na conhecida expressão:

$$\int w dv = wv - \int v dw. \quad (29)$$

Fazendo a escolha descrita abaixo:

$$dw = \cosh(nu) du \rightarrow w = \frac{1}{n} \sinh(nu), \quad (30)$$

$$v = \cos(2Xu) \rightarrow dv = -2X \sin(2Xu) du, \quad (31)$$

chega-se ao seguinte resultado para a equação (28):

$$I_1 = \frac{1}{n} \sinh(nu) \cos(2Xu) + \frac{2X}{n} \int \sinh(nu) \sin(2Xu) du. \quad (32)$$

Na equação (32), se faz uma nova integração por partes, de acordo com:

$$dw = \sinh(nu) du \rightarrow w = \frac{1}{n} \cosh(nu), \quad (33)$$

$$v = \sin(2Xu) \rightarrow dv = 2X \cos(2Xu) du, \quad (34)$$

o que permite escrever a equação (32) como:

$$I_1 = \frac{1}{n} \sinh(nu) \cos(2Xu) + \frac{2X}{n} \left[\frac{1}{n} \cosh(nu) \sin(2Xu) - \frac{2X}{n} \int \cosh(nu) \cos(2Xu) du \right]. \quad (35)$$

A integral remanescente no lado direito da equação (35) é justamente a expressão que define I_1 . Assim, após uma simples manipulação algébrica, tem-se que:

$$\int \cosh(nu) \cos(2Xu) du = \frac{1}{4X^2 + n^2} [n \sinh(nu) \cos(2Xu) + 2X \cosh(nu) \sin(2Xu)], \quad (36)$$

o que leva, lembrando que $\sinh(0) = \sin(0) = 0$, ao seguinte resultado:

$$\int_0^Y \cosh(nu) \cos(2Xu) du = \frac{1}{4X^2 + n^2} [n \sinh(nY) \cos(2XY) + 2X \cosh(nY) \sin(2XY)]. \quad (37)$$

Deste modo, com as equações (24), (26), (27) e (37), pode-se escrever:

$$\int_0^Y e^{u^2} \cos(2Xu) du \approx \pi^{-\frac{1}{2}} \left\{ \frac{\sin(2XY)}{4X} + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{e^{-n^2/4}}{4X^2 + n^2} [n \sinh(nY) \cos(2XY) + 2X \cosh(nY) \sin(2XY)] \right\}. \quad (38)$$

De maneira análoga, chega-se a:

$$\begin{aligned}
& \int_0^Y e^{u^2} \operatorname{sen}(2Xu) du \\
& \approx \pi^{-\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1 - \cos(2XY)}{4X} \right. \\
& \quad + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{e^{-n^2/4}}{4X^2 + n^2} [2X - 2X \cosh(nY) \cos(2XY) \\
& \quad \left. + n \operatorname{senh}(nY) \operatorname{sen}(2XY) \right\}, \tag{39}
\end{aligned}$$

Com os resultados das equações (38) e (39), finalmente é possível escrever a função erro com argumento complexo na forma:

$$\operatorname{erf}(X + Yi) \approx A + Bi, \tag{40}$$

sendo A e B definidas por:

$$A = \operatorname{erf}(X) + \frac{e^{-X^2}}{\pi} \left[\left(\frac{1 - \cos(2XY)}{2X} \right) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n^2/4}}{4X^2 + n^2} f_n(X, Y) \right], \tag{41}$$

e

$$B = \frac{e^{-X^2}}{\pi} \left[\frac{\operatorname{sen}(2XY)}{2X} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n^2/4}}{4X^2 + n^2} g_n(X, Y) \right], \tag{42}$$

onde

$$f_n(X, Y) = 2X - 2X \cosh(nY) \cos(2XY) + n \operatorname{senh}(nY) \operatorname{sen}(2XY), \tag{43}$$

e

$$g_n(X, Y) = 2X \cosh(nY) \operatorname{sen}(2XY) + n \operatorname{senh}(nY) \cos(2XY). \quad (44)$$

O nosso objeto de estudo é o resultado analítico para a Função de Alargamento Doppler obtido por Palma e Martinez (2006), apresentado na equação (12) e, para se calcular valores utilizando-se esta expressão, precisa-se determinar a parte real e a imaginária da função $\eta(x, \xi)$ definida pela equação (13). Tal resultado é obtido ao se utilizar as equações de (41) a (44) com $X = -\xi/2$ e $Y = \xi x/2$, assim:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(\eta(x, \xi)) &\approx \operatorname{erf}(-\xi/2) \\ &+ \frac{e^{-\xi^2/4}}{\pi} \left\{ \left[-\frac{1 - \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)}{\xi} \right] + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n^2/4}}{\xi^2 + n^2} f_n\left(-\frac{\xi}{2}, \frac{\xi x}{2}\right) \right\}, \end{aligned} \quad (45)$$

$$\operatorname{Im}(\eta(x, \xi)) \approx \frac{e^{-\xi^2/4}}{\pi} \left\{ \frac{\operatorname{sen}\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right)}{\xi} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n^2/4}}{\xi^2 + n^2} g_n\left(-\frac{\xi}{2}, \frac{\xi x}{2}\right) \right\}, \quad (46)$$

onde:

$$f_n\left(-\frac{\xi}{2}, \frac{\xi x}{2}\right) = -\xi + \xi \cosh\left(\frac{n\xi x}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) - n \operatorname{senh}\left(\frac{n\xi x}{2}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right), \quad (47)$$

e

$$g_n\left(-\frac{\xi}{2}, \frac{\xi x}{2}\right) = \xi \cosh\left(\frac{n\xi x}{2}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) + n \operatorname{senh}\left(\frac{n\xi x}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right). \quad (48)$$

De posse dos resultados presentes nas equações de (45) a (48), é possível determinar o valor da Função de Alargamento Doppler dada pela expressão da equação (12).

Capítulo 3: Metodologia

Com o avanço das pesquisas e dos métodos computacionais, é interessante o desenvolvimento de modelos de soluções numéricas mais eficientes para calcular numericamente a função erro com argumento complexo. Neste capítulo será apresentada uma metodologia de solução numérica proposta por Abrarov, Quine e Jagpal (2018). Essa metodologia utiliza a relação da função de Faddeeva com a função erro de argumentos complexos para calculá-la numericamente a partir da expansão em séries de cossenos incompleta, baseando-se na função seno cardinal.

3.1 Função seno cardinal

A função seno cardinal, também conhecida pela sua denotação abreviada como função sinc é uma função importante utilizada para análise de sinais (MERCA, 2016), onde as amostragens baseadas por esta função proveem meios poderosos de aproximação para funções diferenciáveis.

A função sinc é definida como

$$\text{sinc}(t) \equiv \begin{cases} \frac{\text{sen}(t)}{t}, & t \neq 0 \\ 1, & t = 0 \end{cases} \quad (49)$$

e sua forma normalizada é definida por

$$\text{sinc}_\pi(t) \equiv \begin{cases} \frac{\text{sen}(\pi t)}{\pi t}, & t \neq 0 \\ 1, & t = 0 \end{cases} \quad (50)$$

com a diferença de que a forma normalizada tem a escala da variável independente t alterada.

No trabalho proposto por Abrarov e Quine (2015), é utilizada a função $\text{sinc}(t)$, onde podemos aproximar a função $f(t)$ tomando certos pontos de amostragem $\{t_n, f(t_n)\}$, dentro de um intervalo $[a, b]$ sendo:

$$f(t) = \sum_{n=-N}^N f(t_n) \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi}{h}(t - t_n)\right) + \varepsilon(t), \quad (51)$$

onde $2N + 1$ é o número total de pontos de amostragem, h é o menor parâmetro e $\varepsilon(t)$ é o erro.

Esta importante propriedade da amostragem da função sinc pode ser usada, por exemplo, na integração e diferenciação numérica. Apesar da função sinc poder aproximar com precisão uma função, nem sempre é conveniente (ABRAROV e QUINE, 2015), mas neste trabalho é proposto uma metodologia de amostragem baseado na expansão em séries de cossenos incompletas da função sinc que permite abordar o problema.

3.1.1 Metodologia de amostragem pela expansão de cossenos incompleta

De acordo com Vieta (KAC, 1959), a função sinc pode ser representada como um produtório infinito de funções cossenos:

$$\operatorname{sinc}(t) = \prod_{m=1}^{\infty} \cos\left(\frac{t}{2^m}\right). \quad (52)$$

A partir da identidade a seguir que relaciona o produtório ao somatório (KAC, 1959)

$$\prod_{m=1}^K \cos\left(\frac{t}{2^m}\right) \equiv \frac{1}{2^{K-1}} \sum_{m=1}^{2^{K-1}} \cos\left(\frac{2m-1}{2^K} t\right), \quad (53)$$

onde M é um inteiro, e comparando as identidades (52) e (53), é possível escrever que:

$$\operatorname{sinc}(t) = \lim_{K \rightarrow \infty} \frac{1}{2^{K-1}} \sum_{m=1}^{2^{K-1}} \cos\left(\frac{2m-1}{2^K} t\right). \quad (54)$$

Consequentemente, com qualquer número finito K pode-se referir ao lado direito da equação (53) como uma expansão cossenoidal incompleta da função sinc. Em técnicas de amostragem envolvendo as funções sinc, é bem comum substituir os argumentos com $t \rightarrow \frac{\pi t}{h}$, seguindo a convenção, reescreve-se a expansão de cossenos incompleta da função sinc como a seguir:

$$\text{sinc}(t) = \frac{1}{2^{K-1}} \sum_{m=1}^{2^{K-1}} \cos\left(\frac{\pi(2m-1)}{2^K h} t\right). \quad (55)$$

Com o valor de h sendo infinitesimal, acontece uma propriedade muito útil nesta expansão

$$\lim_{h \rightarrow 0} \lim_{K \rightarrow \infty} \frac{1}{2^{K-1}} \sum_{m=1}^{2^{K-1}} \cos\left(\frac{\pi(2m-1)}{2^K h} t\right) \equiv \delta(t), \quad (56)$$

onde $\delta(t)$ é o delta de Dirac.

Este comportamento interessante pode ser provado pela observação a qual:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \text{sinc}\left(\frac{\pi}{h} t\right) \equiv \delta(t). \quad (57)$$

Como o valor inteiro K nesta aplicação é dada como finita, a expansão incompleta de cossenos (55) é uma função periódica com período T que é dependente de valores de K e h . Um valor elevado de K aumenta o número de termos do somatório da expansão incompleta de cossenos (55) que leva a um aumento do período T . Assim que a expansão de cossenos incompleta se aproxima da função sinc original $\text{sinc}(\pi t/h)$ dentro do intervalo $t \in \left[-\frac{T}{4}, \frac{T}{4}\right]$ próximo à origem, a aproximação pode ser escrita como

$$\frac{1}{2^{K-1}} \sum_{m=1}^{2^{K-1}} \cos\left(\frac{\pi(2m-1)}{2^K h} t\right) \approx \text{sinc}\left(\frac{\pi}{h} t\right), \quad -T/4 \leq t \leq T/4 \quad (58)$$

A função de Faddeeva é definida pela seguinte equação:

$$w(z) = e^{-z^2} \left(1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{t^2} dt\right), \quad (59)$$

onde $z = x + iy$. Esta função se relaciona com a função erro $\text{erf}(Z)$ a partir da seguinte expressão:

$$\operatorname{erf}(Z) = 1 - e^{-z^2} w(iz). \quad (60)$$

Uma das representações da função de Faddeeva é dado pela equação abaixo (ABRAROV e QUINE, 2011):

$$w(x, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp(-t^2/4) \exp(-yt) \exp(ixt) dt, \quad y > 0 \quad (61)$$

Fazendo alterações na variável $\frac{t}{2} \rightarrow t$ na integral (61) nos leva a

$$w(x, y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-t^2} e^{2i(x-iy)t} dt, \quad y > 0 \quad (62)$$

Conforme visto na integral acima, o integrando na integral (62) é uma função de várias variáveis. Este integrando pode ser rearranjado como $f(t, x, y) = g(t)h(t, x, y) = e^{-t^2} e^{2i(x-iy)t}$ e $g(t) = e^{-t^2}$, $h(t, x, y) = e^{2i(x-iy)t}$.

Consequentemente, podemos aproximar a equação (62) como sendo

$$w(x, y) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=-N}^N \int_0^{\infty} e^{-t_n^2} \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi}{h}(t - t_n)\right) e^{2i(x-iy)t} dt, \quad y > 0 \quad (63)$$

A forma mais simples é a de considerar pontos separados equidistantes $t_n = nh$, com passos entre os dois pontos de amostragem adjacentes iguais a h . Com esta suposição, a aproximação (63) se torna

$$w(x, y) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=-N}^N \int_0^{\infty} e^{-n^2 h^2} \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi}{h}(t - t_n)\right) e^{2i(x-iy)t} dt, \quad y > 0. \quad (64)$$

Apesar de cada termo da integral no lado direito da equação (64) ser integrável através da função arco tangente hiperbólico, este método é absolutamente inapropriado para computação rápida desde que a aproximação resultante da função de Faddeeva não é uma

aproximação racional, ou seja, não é uma aproximação composta por polinômios no numerador e no denominador da função.

Este problema pode ser efetivamente resolvido usando a expansão incompleta de cossenos. Especificamente, podemos escrever

$$e^{-t^2} \approx \frac{1}{2^{K-1}} \sum_{m=1}^{2^{K-1}} \sum_{n=-N}^N e^{-t_n^2} \cos\left(\frac{\pi(2m-1)(t-t_n)}{2^K h}\right), \quad \frac{-T}{4} \leq t \leq \frac{T}{4} \quad (65)$$

Desde que a expansão incompleta de cossenos é uma função periódica com período T , a aproximação obtida é também periódica e pode ser vista pela figura 2. Junto com a escolha da origem coincidindo com a função exponencial original e^{-t^2} mostrado pela linha azul, pode-se observar picos adicionais positivos e negativos em $t = \left\{ \pm \frac{T}{2}, \pm \frac{3T}{2}, \pm \frac{5T}{2}, \pm \frac{7T}{2} \dots \right\}$ e $t = \{\pm T, \pm 2T, \pm 3T, \pm 4T, \pm 5T \dots\}$, respectivamente. Portanto, a função exponencial e^{-t^2} pode ser razoavelmente aproximada apenas no domínio $\frac{-T}{4} \leq t \leq \frac{T}{4}$.

Introduzimos também uma nova constante real positiva $\varsigma > 0$ na equação (65), onde é multiplicado em ambos os lados por $e^{-\varsigma t}$. Isto acontece pois se a constante ς for grande o suficiente, como por exemplo, ς maior ou igual a 2, a restrição $-\frac{T}{4}$ na equação (65) pode ser efetivamente eliminada, pois $e^{-\varsigma t}$ decresce rapidamente e os picos adicionais são reduzidos a zero à medida que a variável t aumenta.

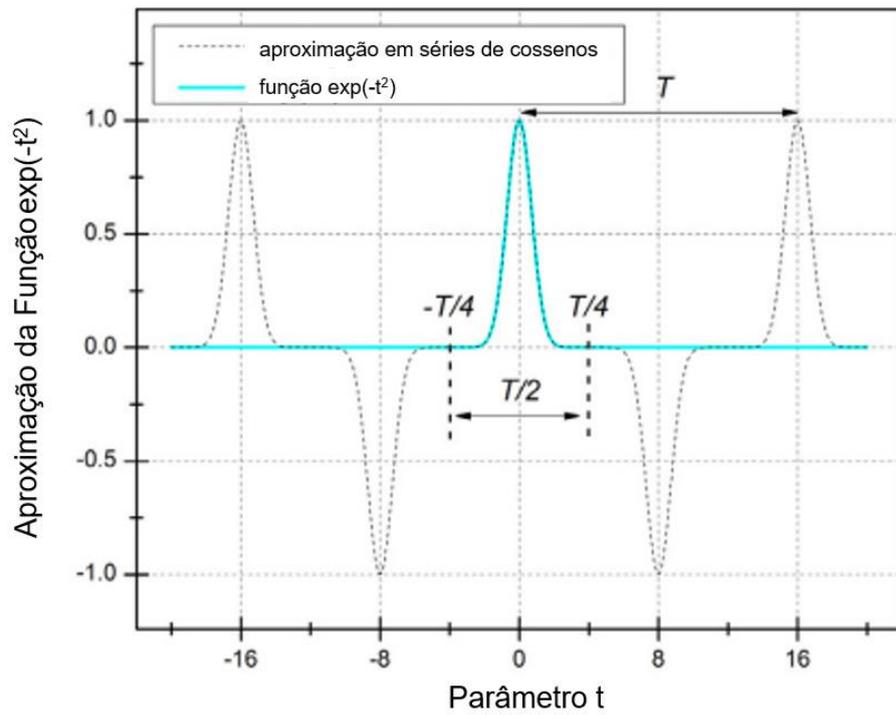


Figura 2: Aproximação da expansão de cossenos incompleta.²

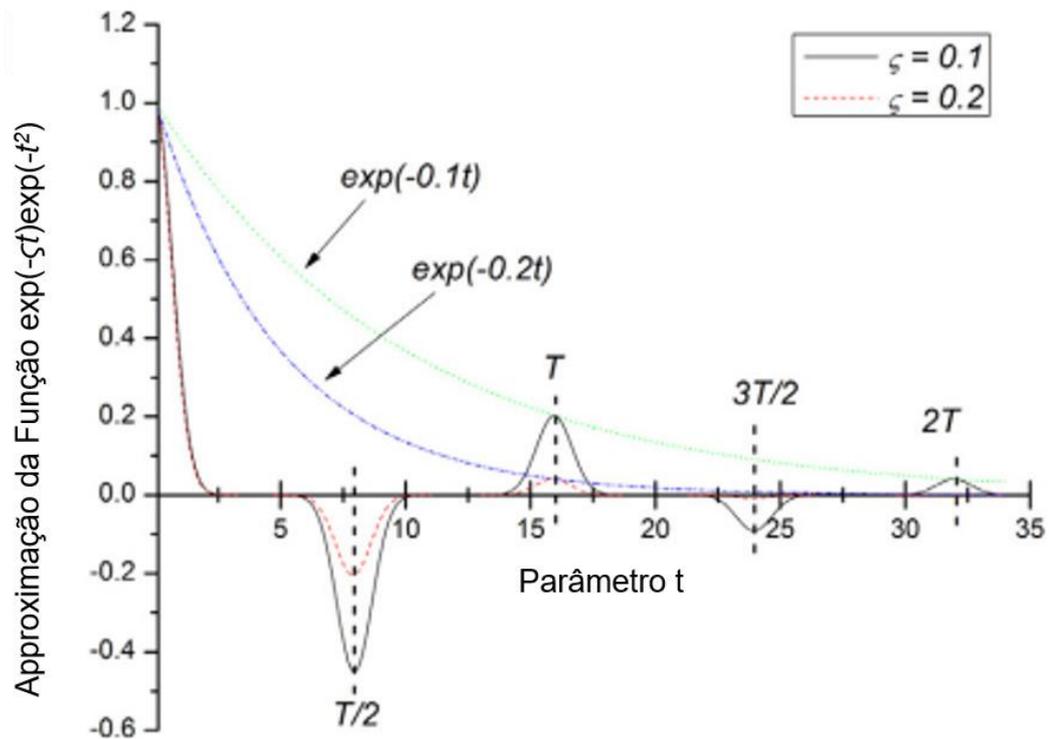


Figura 3: Aproximação da função pela amostragem da expansão de cossenos incompleta³.

² Imagem extraída de (ABRAROV E QUINE, 2015). Com adaptações

³ Imagem extraída de (ABRAROV E QUINE, 2015). Com adaptações

Podemos ver na figura 3, comparando as curvas $\zeta = 0,1$ e $\zeta = 0,2$, observando que a medida que ζ cresce, os picos adicionais decrescem significativamente. Quando $\zeta = 2$, todos os picos adicionais desaparecem e apenas a parte inicial da função $e^{-\zeta t} e^{-t^2}$ permanece inalterada. Portanto, podemos escrever a seguinte equação:

$$e^{-\zeta t} e^{-t^2} \approx \frac{e^{-\zeta t}}{2^{K-1}} \sum_{m=1}^{2^{K-1}} \sum_{n=-N}^N e^{-t_n^2} \cos\left(\frac{\pi(2m-1)(t-t_n)}{2^K h}\right), \quad \zeta > 2 \quad (66)$$

Da equação (66) segue que

$$e^{-\zeta t} e^{-(t-\zeta/2)^2} \approx \frac{e^{-\zeta t}}{2^{K-1}} \sum_{m=1}^{2^{K-1}} \sum_{n=-N}^N e^{-t_n^2} \cos\left(\frac{\pi(2m-1)(t-t_n-\zeta/2)}{2^K h}\right), \quad \zeta > 2 \quad (67)$$

assim como o pico da função exponencial $e^{-(t-\zeta/2)^2}$ está deslocada para a direita da origem por $\zeta/2$, o parâmetro ζ pode ser considerado, portanto, como uma constante de deslocamento.

Levando em conta a função exponencial $e^{-t^2} = e^{\frac{\zeta^2}{4}} e^{-\zeta t} e^{-(t-\zeta/2)^2}$ e substituindo as aproximações (67) em (62), se tem:

$$w(x, y) \approx \frac{e^{\zeta^2/4}}{2^{K-2} \sqrt{\pi}} \sum_{m=1}^{2^{K-1}} \sum_{n=-N}^N \int_0^\infty e^{-t_n^2} \cos\left(\frac{\pi(2m-1)(t-nh-\zeta/2)}{2^K h}\right) e^{-\zeta t} e^{2(ixt-yt)} dt. \quad (68)$$

Mais uma vez, assumindo uma separação equidistante dos pontos de amostragem $t_n = nh$, pode-se rescrever a aproximação (68) na forma:

$$w(x, y) \approx \frac{e^{\zeta^2/4}}{2^{K-2} \sqrt{\pi}} \times \sum_{m=1}^{2^{K-1}} \sum_{n=-N}^N \int_0^\infty e^{-n^2 h^2} \cos\left(\frac{\pi(2m-1)(t-nh-\zeta/2)}{2^K h}\right) e^{-\zeta t} e^{2(ixt-yt)} dt. \quad (69)$$

Todos os termos nno integrando do lado direito da aproximação (69) é integrável e pode ser expressa como uma função racional. Conseqüentemente, da equação (69) segue que

$$w(z) \approx \sum_{m=1}^{2^{K-1}} \sum_{n=-N}^N \frac{\alpha_{m,n} + (z + i\zeta/2)\beta_{m,n}}{C_m^2 - (z + i\zeta/2)^2}, \text{Im}[z] > 0, \quad (70)$$

onde

$$C_m = \frac{\pi(2m-1)}{2^{K+1}h}, \quad (71)$$

$$\alpha_{m,n} = \frac{\sqrt{\pi}(2m-1)e^{\zeta^2/4-n^2h^2}}{2^{2K}h} \text{sen}\left(\frac{\pi(2m-1)(nh + \zeta/2)}{2^Kh}\right), \quad (72)$$

$$\beta_{m,n} = -i \frac{e^{\zeta^2/4-n^2h^2}}{2^{K-1}\sqrt{\pi}} \cos\left(\frac{\pi(2m-1)(nh + \zeta/2)}{2^Kh}\right). \quad (73)$$

Apesar da aproximação (70) ser precisa, não é rápida devido a dupla somatória. Contudo, este problema pode ser prontamente resolvido definindo as seguintes constantes.

$$A_m \equiv \sum_{n=-N}^N \alpha_{m,n}, \quad (74)$$

$$B_m \equiv \sum_{n=-N}^N \beta_{m,n}. \quad (75)$$

Portanto, após algumas reconfigurações triviais, obtemos

$$w(z) \approx \sum_{m=1}^{2^{M-1}} \frac{A_m + (z + i\zeta/2)B_m}{C_m^2 - (z + i\zeta/2)^2}, \quad \text{Im}[z] > 0 \quad (76)$$

onde

$$A_m = -\frac{\sqrt{\pi}(2m-1)}{2^{2K}h} \sum_{n=-N}^N e^{\zeta^2/4-n^2h^2} \text{sen}\left(\frac{\pi(2m-1)(nh + \zeta/2)}{2^Kh}\right), \quad (77)$$

e

$$B_m = -\frac{i}{2^{K-1}\sqrt{\pi}} \sum_{n=-N}^N e^{\varsigma^2/4 - n^2 h^2} \cos\left(\frac{\pi(2m-1)(nh + \varsigma/2)}{2^K h}\right). \quad (78)$$

A aproximação (76) é uma função racional por ser uma razão de polinômios, e não contém funções trigonométricas ou exponenciais dependentes do parâmetro x ou y . Portanto, a aplicação da aproximação (76) pode ser vantajosa para uma computação rápida. Uma vantagem adicional é que a aproximação (76) é integrável com respeito ao parâmetro x e pode ser usado para o cálculo da função de alargamento Doppler a função de Voigt.

3.1.2 Análise de erro

Para estimar a precisão da aproximação (76), para este trabalho é definido os valores para as partes real e imaginárias como:

$$\Delta_{Re} = \left| \frac{Re[w(x, y)] - Re[w_{ref}(x, y)]}{Re[w_{ref}(x, y)]} \right|, \quad (79)$$

e

$$\Delta_{Im} = \left| \frac{Im[w(x, y)] - Im[w_{ref}(x, y)]}{Im[w_{ref}(x, y)]} \right|, \quad (80)$$

onde $w_{ref}(x, y)$ é o valor de referência.

Valores de referência altamente precisos podem ser gerados usando, por exemplo, os códigos do Algoritmo 680 (POPPE e WIJERS, 1990) ou o Algoritmo 916 (ZAGHLOUL e ALI, 2011), neste caso foi utilizado o algoritmo 916 para este trabalho para gerar os valores de referência.

A um valor suficientemente grande de $|Z|$, como sendo ≥ 15 , a computação da função erro complexa não é problemática e muitas aproximações estão disponíveis em literaturas científicas

para computação rápida e precisa, como a aproximação por frações contínuas de Laplace (ROCKETT e SZUSZ, 1992). Para este trabalho, foi utilizado os dados da *database* de espectroscopia molecular HITRAN (ROTHMAN, 2013). HITRAN (ou *High Resolution Transmission*) é uma base de dados que contém vários componentes que são armazenados em pasta, que incluem parâmetros espectroscópicos de alta resolução de absorção molecular, cálculo de radiância, seções de choque de absorção no infravermelho entre outros. Os dados utilizados para o cálculo de erro foram o domínio completo de *Voigt line-shape*, ou perfil de Voigt, que consiste em uma forma de linha espectral cujo resultado é uma convolução de uma lorentziana com uma gaussiana, para obtenção de picos espectrais em pesquisas com espectroscopia por ressonância magnética (RMN) (MARSHAL, 1997), que compreende os intervalos $0 < x < 40000$ e $0 < y < 10^2$, o domínio mais difícil para a computação é $0 < x < 15$ e $10^{-4} < y < 15$. Esta aproximação da função erro complexa desenvolvida neste trabalho cobre o domínio com precisão.

De acordo com o desenvolvimento do trabalho (ABRAROV, 2018), a para a aproximação (76), assume-se os valores $h = 0,25$, $N = 23$, $K = 5$ e $\zeta = 2,75$. Na maior parte do domínio, a precisão é melhor que 10^{-8} , tanto para a parte real quanto para a parte imaginária do erro calculado.

3.3 Aproximação da função erro complexa

Para introduzir a metodologia de cálculo que será utilizada na presente dissertação é necessário apresentar as considerações feitas para a execução do cálculo das aproximações numéricas, que leva em conta os seguintes parâmetros:

- Uso do primeiro quadrante do plano complexo $Z = a + bi$ para a efetuação dos cálculos.

Isto se deve pelo fato de simplificar as operações e diminuir o custo computacional. Esta consideração pode ser feita devido a uma propriedade importante da função de Faddeeva:

$$w(z) = 2e^{-z^2} - w(-z), \quad (81)$$

que nos leva à seguinte equação,

$$w(x, -|y|) = 2e^{-(x+i|y|^2)} - w(-x, |y|). \quad (82)$$

Para efeitos práticos, significa que é necessário considerar somente o primeiro e o segundo quadrante do plano complexo Z . Em outras palavras, trabalha-se apenas com valores de $y \geq 0$.

- Uso de sub-regiões para a efetuação dos cálculos.

Dentro desta região Z , que compreende o primeiro quadrante, é dividida em três sub-regiões, a região externa, a região interna primária, e a região interna de subdomínio secundária.

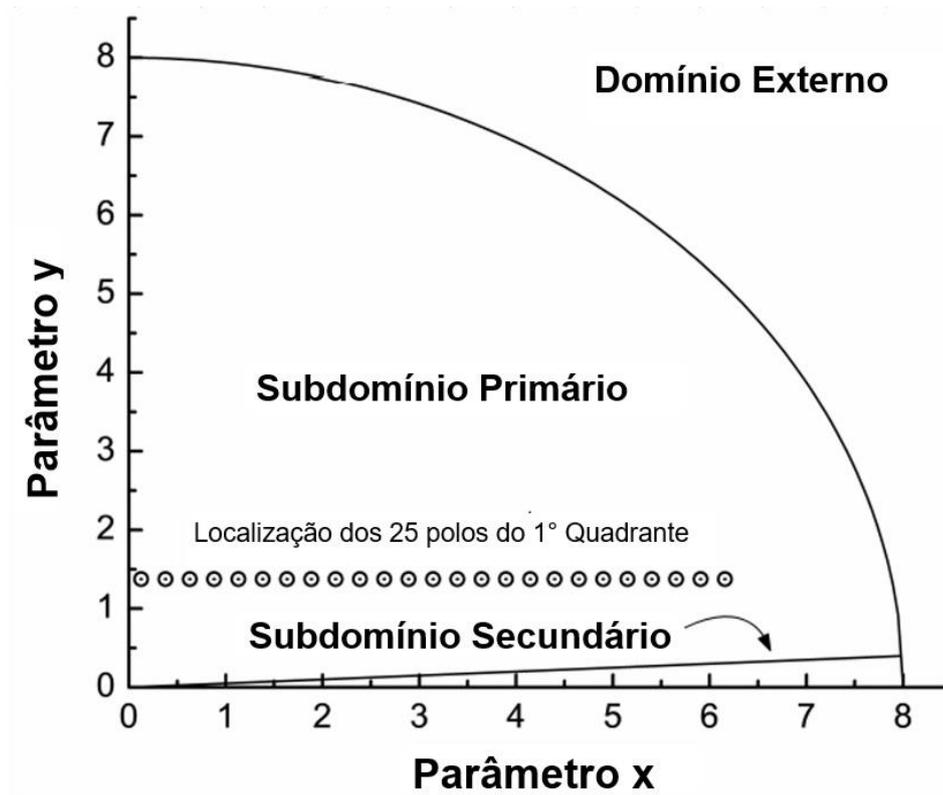


Figura 4: Divisão das regiões no domínio da função⁴

⁴ Imagem extraída de (ABRAROV E QUINE, 2018). Com adaptações.

A razão para a divisão em regiões acontece devido a diferença da exatidão dos resultados das aproximações para valores muito baixos e muito altos, que necessitam de uma abordagem diferente para que estejam dentro da faixa de erro proposta no trabalho.

3.4 Domínio interno

A divisão do domínio interno se dá pela deterioração da precisão da aproximação, que acontece conforme o valor de y decresce. Então para sanar este problema, são feitas algumas considerações, alterando as equações de aproximação para manter a precisão da aproximação desenvolvida.

Vale ressaltar que os polos indicados na imagem acima são referentes ao subdomínio secundário, e por consequência, estes polos não se encontram na região secundária, não sendo um problema para a aproximação.

3.4.1 Subdomínio primário

Para o subdomínio primário, a partir da aproximação (76), além de utilizar os parâmetros $h = 0.25$, $\zeta = 2,75$, $K = 5$ e $N = 23$, é mostrado que o truncamento da aproximação (76) não necessariamente precisa ser igual a 2^{K-1} . A proposta encontrada para evitar esta restrição foi a substituição de 2^{K-1} por um valor inteiro arbitrário M ao fazer isto, a aproximação (76) pode ser reescrita na forma

$$w(z) \approx \sum_{m=1}^M \frac{a_m + b_m(z + i\zeta/2)}{c_m^2 - (z + i\zeta/2)^2}, \quad (83)$$

onde,

$$a_m = \frac{\sqrt{\pi}(m - 1/2)}{2M^2h} \sum_{n=-N}^N e^{\frac{\zeta^2}{4} - n^2h^2} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi(m - 1/2)(nh + \zeta/2)}{Mh}\right), \quad (84)$$

$$b_m = \frac{i}{M\sqrt{\pi}} \sum_{n=-N}^N e^{\frac{\zeta^2}{4} - n^2h^2} \cos\left(\frac{\pi(m - 1/2)(nh + \zeta/2)}{Mh}\right), \quad (85)$$

$$c_m = \frac{\pi(m - 1/2)}{2Mh}. \quad (86)$$

Esta aproximação (83) pode cobrir todo o domínio HITRAN, mas mesmo assim, conforme o valor de y diminui, a precisão da aproximação se deteriora, sendo necessária uma outra aproximação para valores pequenos de y .

3.4.2 Subdomínio secundário

Como dito anteriormente, a criação de um subdomínio secundário foi necessária pois como a precisão deteriora para valores pequenos de y ao utilizar a aproximação (83). A solução foi encontrada para este problema fazendo a equação (81) ser reescrita. Ao adicionar $w(z)$ em ambos os lados da equação (81) e dividir a mesma por 2, eis que esta assume a seguinte forma

$$w(z) = e^{-z^2} + \frac{w(z) - w(-z)}{2}. \quad (87)$$

Substituindo $w(z)$ na equação (89) pela aproximação (85), após fazer alguns rearranjos chega-se a

$$w(z) \approx e^{-z^2} + z \sum_{m=1}^{M+2} \frac{\alpha_m + \beta_m z^2}{\gamma_m - \theta_m z^2 + z^4}, \quad (88)$$

onde:

$$\alpha_m = b_m \left[c_m^2 - \left(\frac{\zeta^2}{2} \right)^2 \right] + i a_m \zeta = b_m \left[\left(\frac{\pi(m - 1/2)}{2Mh} \right)^2 - \left(\frac{\zeta}{2} \right)^2 \right] + i a_m \zeta, \quad (89)$$

$$\beta_m = b_m, \quad (90)$$

$$\gamma_m = c_m^4 + \frac{c_m^2 \zeta^2}{2} + \frac{\zeta^4}{16} = \left[\left(\frac{\pi(m - 1/2)}{2Mh} \right)^2 - \left(\frac{\zeta}{2} \right)^2 \right]^2, \quad (91)$$

$$\theta_m = 2c_m^2 - \frac{\zeta^2}{2} = 2 \left(\frac{\pi(m - 1/2)}{2Mh} \right)^2 - \frac{\zeta^2}{2}. \quad (92)$$

Como a nova aproximação (88) deriva de uma transformação de uma aproximação racional baseada em amostragem (76), esta equação também representa uma aproximação racional baseada em amostragem.

3.5 Região externa

A região externa corresponde a valores de $|z| > 8$. Para valores de Z que se encontram no domínio externo, o cálculo empregado para a resolução da função de Faddeeva, é utilizado aproximação pelo método de Frações Contínuas de Laplace. As frações contínuas são expressões que possuem a seguinte forma:

$$x = b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \frac{a_3}{b_3 + \frac{a_4}{b_4 + \dots}}}}$$

Figura 5: Frações contínuas de laplace

onde as quantidades $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ são chamadas de quocientes parciais e podem ser números inteiros, real ou complexos, além de funções contendo este tipo de variáveis. Para este trabalho, a aproximação por frações contínuas é feita utilizando a seguinte expressão (GAUTSCHI, 1969):

$$w(z) \approx \frac{(i/\sqrt{\pi})}{z - \frac{1/2}{z - \frac{1}{z - \frac{3/2}{z - \frac{2}{z - \frac{5/2}{z - \frac{3}{z - \frac{7/2}{z - \frac{4}{z - \frac{9/2}{z - \frac{5}{z - \frac{11/2}{z}}}}}}}}}}}}}}}} \quad (93)$$

onde

$$a_1 \dots a_{11} = \frac{1}{2} \dots \frac{11}{2}. \quad (94)$$

3.6 Domínio de Z

Para o presente trabalho, é importante definir o domínio da função complexa que será utilizada para sabermos em qual região ela se encontra para efetuarmos os cálculos. A função $erf(Z)$ utilizada na função de alargamento Doppler foi representada na equação (13) na seguinte forma:

$$\eta(x, \xi) = \operatorname{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right), \quad (95)$$

onde

$$\operatorname{erf}(z) = (a + bi). \quad (96)$$

Logo, para esta função com $z = a + bi$, temos

$$a = -\frac{\xi}{2}, \quad (97)$$

e

$$b = xa. \quad (98)$$

Entretanto, conforme discutido anteriormente, a relação da função de Faddeeva com a função erro é escrita na seguinte maneira:

$$\operatorname{erf}(z) = 1 - \exp(-z^2) w(iz), \quad (99)$$

onde $w(iz)$ é a função de Faddeeva com seu argumento multiplicado por i , o que faz necessário a substituição de $z = a + bi$ utilizado no cálculo da expressão. Se

$$z = a + bi, \quad (100)$$

então

$$z_i = -b + ai. \quad (101)$$

Ao colocamos ξ e x em função de a e b , podemos então descobrir o domínio da função $z_i = -b + ai$, sabendo que $0.05 < \xi < 0.5$ e $0 < x < 40$, podemos ver abaixo uma tabela representando z , tendo como referência a disposição de valores da tabela do Duderstadt (1976) para efeitos de comparação.

A princípio, o valor de $M = 23$ era assumido na literatura, mas para a questão da avaliação do método, este valor será alterado ao efetuar os testes de comparação e desempenho entre as implementações.

Tabela 2: Tabela de valores de z_i em função de ξ e x .

ξ	x				
	0	0,5	1	2	4
0,05	-0,025	-0,025+0,025i	-0,025+0,075i	-0,025+0,2i	-0,025+0,5i
0,10	-0,050	-0,050+0,025i	-0,050+0,075i	-0,050+0,2i	-0,050+0,5i
0,15	-0,075	-0,075+0,025i	-0,075+0,075i	-0,075+0,2i	-0,075+0,5i
0,20	-0,100	-0,100+0,025i	-0,100+0,075i	-0,100+0,2i	-0,100+0,5i
0,25	-0,125	-0,125+0,025i	-0,125+0,075i	-0,125+0,2i	-0,125+0,5i
0,30	-0,150	-0,150+0,025i	-0,150+0,075i	-0,150+0,2i	-0,150+0,5i
0,35	-0,175	-0,175+0,025i	-0,175+0,075i	-0,175+0,2i	-0,175+0,5i
0,40	-0,200	-0,200+0,025i	-0,200+0,075i	-0,200+0,2i	-0,200+0,5i
0,45	-0,225	-0,225+0,025i	-0,225+0,075i	-0,225+0,2i	-0,225+0,5i
0,50	-0,250	-0,250+0,025i	-0,250+0,075i	-0,250+0,2i	-0,250+0,5i

ξ	x				
	6	8	10	20	40
0,05	-0,025+0,9i	-0,025+1,4i	-0,025+2i	-0,025+4,5i	-0,025+10i
0,10	-0,050+0,9i	-0,050+1,4i	-0,050+2i	-0,050+4,5i	-0,050+10i
0,15	-0,075+0,9i	-0,075+1,4i	-0,075+2i	-0,075+4,5i	-0,075+10i
0,20	-0,100+0,9i	-0,100+1,4i	-0,100+2i	-0,100+4,5i	-0,100+10i
0,25	-0,125+0,9i	-0,125+1,4i	-0,125+2i	-0,125+4,5i	-0,125+10i
0,30	-0,150+0,9i	-0,150+1,4i	-0,150+2i	-0,150+4,5i	-0,150+10i
0,35	-0,175+0,9i	-0,175+1,4i	-0,175+2i	-0,175+4,5i	-0,175+10i
0,40	-0,200+0,9i	-0,200+1,4i	-0,200+2i	-0,200+4,5i	-0,200+10i
0,45	-0,225+0,9i	-0,225+1,4i	-0,225+2i	-0,225+4,5i	-0,225+10i
0,50	-0,250+0,9i	-0,250+1,4i	-0,250+2i	-0,250+4,5i	-0,250+10i

3.6.1 Índice Externo

Este índice mostra uma matriz contendo variáveis booleanas que registram quais valores de z que satisfazem a condição de $|z| > 8$, indicando que se deve utilizar a equação pré-definida para calcular.

Tabela 3: Índice externo

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	false	true								
0,10	false	true								
0,15	false	true								
0,20	false	true								
0,25	false	true								
0,30	false	true								
0,35	false	true								
0,40	false	true								
0,45	false	true								
0,50	false	true								

Pode-se ver que este índice está coerente com as informações obtidas na tabela 1, pois para valores de $X = 40$, o módulo de Z se torna superior a 8, portanto estando na região externa do algoritmo implantado.

3.6.2 Índice Negativo

O índice negativo indica quando z possui valores imaginários negativos. Como o algoritmo foi projetado para trabalhar no primeiro e no segundo quadrante, quaisquer valores imaginários negativos devem ser rebatidos para valores positivos.

Tabela 4: índice negativo.

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	true									
0,10	true									
0,15	true									
0,20	true									
0,25	true									
0,30	true									
0,35	true									
0,40	true									
0,45	true									
0,50	true									

Conforme visto na tabela 4, para todos os valores apresentados acima, a parte imaginária é negativa, necessitando do uso da propriedade mencionada na equação (66).

$$w(z) = \overline{(2 \exp(-z^2) - w(z))}, \forall \text{im}(z) < 0. \quad (102)$$

3.6.3 Sub-índice primário e secundário

Este índice serve para mostrar para quais valores de Z são pertencentes ao subdomínio primário e quais pertencem ao subdomínio secundário, sendo que *true* pertence ao subdomínio primário e *false* pertence ao subdomínio secundário.

Tabela 5: índice do subdomínio

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	true	true	true	true	true	false	false	false	false	false
0,10	true	true	true	true	true	true	true	false	false	false
0,15	true	true	true	true	true	true	true	true	false	false
0,20	true	true	true	true	true	true	true	true	true	false
0,25	true	true	true	true	true	true	true	true	true	true
0,30	true	true	true	true	true	true	true	true	true	true
0,35	true	true	true	true	true	true	true	true	true	true
0,40	true	true	true	true	true	true	true	true	true	true
0,45	true	true	true	true	true	true	true	true	true	true
0,50	true	true	true	true	true	true	true	true	true	true

De acordo com a tabela acima, nota-se que para valores de $x = 40$, os valores de Z se encontram na região externa, tendo este uma maior prioridade em comparação ao sub-índice interno. Alguns valores também se enquadram no sub-índice secundário, mas em quantidades menores se comparando a esta quantidade de valores. Considerando estas informações, a aproximação utilizada na sub-região primária terá o maior impacto no modelo de Abrarov, tanto em velocidade, tanto em precisão.

3.7 Implementação da função de alargamento Doppler

Após a obtenção de $w(iz)$, a função erro $\text{erf}(Z)$ é obtida através da expressão (99), sendo que, conforme mencionado, temos que

$$\text{erf}(Z) = \eta(x, \xi) = \text{erf}\left(\frac{i\xi x - \xi}{2}\right). \quad (103)$$

Onde obtemos a parte real e imaginária da equação, para ser aplicada na Função de Alargamento Doppler

$$\Psi_{\text{frob}}(x, \xi) = \xi \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(-\frac{1}{4}\xi^2(x^2 - 1)\right) \cos\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \left(1 + \text{Re}(\eta(x, \xi)) + \tan\left(\frac{\xi^2 x}{2}\right) \text{Im}(\eta(x, \xi))\right), \quad (104)$$

onde

$$\operatorname{Im}(\eta(X, \xi)) = \operatorname{Im}(\operatorname{erf}(Z)), \quad (105)$$

e

$$\operatorname{Re}(\eta(X, \xi)) = \operatorname{Re}(\operatorname{erf}(Z)). \quad (106)$$

A implementação foi efetuada a partir do software matemático MAPLE 2015, na qual foram obtidos os resultados dos cálculos que serão reportados no próximo capítulo.

Capítulo 4: Resultados obtidos com relação à função de alargamento Doppler

Após a implementação, o próximo passo do trabalho foi verificar a acurácia dos valores obtidos a partir dos cálculos efetuados pela metodologia empregada, para coletar os resultados fornecidos pela função de alargamento Doppler. A validação dos valores obtidos será avaliada comparando com os valores fornecidos pela bibliografia.

4.1- Testes e Resultados do método de Salzer

Para validar o método, reproduziremos os cálculos utilizando o software *maple 2015*, para reproduzir os valores obtidos na tabela 2.2 do livro Duderstadt (1976). Esta tabela mostra valores da função de alargamento Doppler obtidos ao variar x e ξ , valores que serão comparados com os obtidos pelo método mencionado anteriormente.

Tabela 6: Valores de $\psi(x, \xi)$ reproduzidos a partir de Duderstadt (1976).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,04309	0,04308	0,04306	0,04298	0,04267	0,04216	0,04145	0,04055	0,03380	0,01639
0,10	0,08384	0,08379	0,08364	0,08305	0,08073	0,07700	0,07208	0,06623	0,03291	0,00262
0,15	0,12239	0,12223	0,12176	0,11989	0,11268	0,10165	0,08805	0,07328	0,01695	0,00080
0,20	0,15889	0,15854	0,15748	0,15331	0,13777	0,11540	0,09027	0,06614	0,00713	0,00070
0,25	0,19347	0,19281	0,19086	0,18324	0,15584	0,11934	0,08277	0,05253	0,00394	0,00067
0,30	0,22624	0,22516	0,22197	0,20968	0,16729	0,11571	0,07042	0,03880	0,00314	0,00065
0,35	0,25731	0,25569	0,25091	0,23271	0,17288	0,10713	0,05724	0,02815	0,00289	0,00064
0,40	0,28679	0,28450	0,27776	0,25245	0,17359	0,09604	0,04566	0,02109	0,00277	0,00064
0,45	0,31477	0,31168	0,30261	0,26909	0,17052	0,08439	0,03670	0,01687	0,00270	0,00064
0,50	0,34135	0,33733	0,32557	0,28286	0,16469	0,07346	0,03025	0,01446	0,00266	0,00063

Para este trabalho, compararemos a tabela acima com os valores obtidos em dois cenários. O primeiro cenário analisa os valores obtidos pela metodologia aplicada, com o valor de $\xi = 0,05$ e $\xi = 0,5$, com n_{max} variando de $n = 3$ a $n = 15$, com o intuito de observar o erro relativo à tabela de referência, observando a variação da acurácia do método com relação a um uso menor de termos.

Tabela 10: Desvio relativo em relação ao método de referência para $\psi(x, \xi = 0,5)$ pelo método de Salzer.

x	n=3	n=5	n=7	n=9	n=11	n=13	n=15	n=29
0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
4	1,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
6	6,3	0,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
20	100,0	99,8	92,8	52,2	8,7	0,3	0,0	0,0
40	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0	99,9	0,7

Ao observar os valores da tabela, conclui-se que, para $\xi = 0,5$, ao elevar os valores de x , a discrepância começa a aumentar, sendo necessário mais iterações no método para poder obter uma acurácia desejada. Temos que o caso mais grave é o de $x = 40$, onde a discrepância é considerável, necessitando que o número de termos seja superior a $n = 25$ para obter um valor com desvio pequeno.

4.2- Testes e Resultados pelo método de Abrarov

Para a aproximação desenvolvida por Abrarov, comparamos os valores obtidos computacionalmente pelo *MAPLE 2015* com a tabela do livro Duderstadt (1976), referência para este trabalho, com a diferença de que nesta aproximação foi feito os testes com os seguintes valores: $h = 0,25$, $N = 23$ e $\zeta = 2,75$, respeitando as otimizações apresentadas pelo autor. Entretanto, testes serão efetuados em todos os algoritmos em todo o domínio, não só pelos quais foram destinados com o intuito de poder avaliar a performance, ou a deterioração dela conforme estes se afastam de suas regiões pré-estabelecidas.

4.2.1- Resultados Obtidos pelo Subdomínio Primário

Neste primeiro teste foram obtidos os resultados do algoritmo implementado, calculando a Função de Alargamento Doppler, com o intuito de comparar com os valores de referência para validação. Nesta aproximação, o número de termos padrão definido pelo autor é $M = 23$, que foi utilizado para obter os valores reportados nas tabelas a seguir:

Tabela 11: Valores obtidos para $\psi(x, \xi)$ utilizando a metodologia proposta por Abrarov (2018).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,04309	0,04308	0,04306	0,04298	0,04267	0,04216	0,04145	0,04055	0,03380	0,01639
0,10	0,08384	0,08379	0,08364	0,08305	0,08073	0,07700	0,07208	0,06623	0,03291	0,00262
0,15	0,12239	0,12223	0,12176	0,11989	0,11268	0,10165	0,08805	0,07328	0,01695	0,00080
0,20	0,15889	0,15854	0,15748	0,15331	0,13777	0,11540	0,09027	0,06614	0,00713	0,00070
0,25	0,19347	0,19281	0,19086	0,18325	0,15584	0,11934	0,08277	0,05253	0,00394	0,00067
0,30	0,22624	0,22516	0,22197	0,20968	0,16729	0,11571	0,07043	0,03881	0,00314	0,00065
0,35	0,25731	0,25569	0,25091	0,23271	0,17288	0,10713	0,05726	0,02816	0,00289	0,00064
0,40	0,28679	0,28450	0,27776	0,25245	0,17360	0,09604	0,04569	0,02110	0,00277	0,00064
0,45	0,31477	0,31168	0,30261	0,26909	0,17052	0,08439	0,03670	0,01687	0,00270	0,00064
0,50	0,34135	0,33733	0,32557	0,28286	0,16469	0,07346	0,03025	0,01446	0,00266	0,00063

Tabela 12: Desvio relativo em relação ao método de referência para $\psi(x, \xi)$ utilizando a metodologia proposta por Abrarov (2018).

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,10	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1
0,15	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,3
0,20	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,7
0,25	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,5
0,30	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4
0,35	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7
0,40	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,1	0,1	0,0
0,45	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,5
0,50	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7

Com isso pode-se observar resultados com desvios inferiores a 1%. Assim como no modelo de Salzer, também foi feito nesta aproximação um teste com o número de termos M menor que o recomendado, que para este próximo teste foi utilizado o valor de $M = 10$, representados nas tabelas a seguir:

Tabela 13: Valores obtidos para $\psi(x, \xi)$ utilizando a metodologia proposta por Abrarov (2018) no subdomínio primário com $M = 10$.

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,04309	0,04308	0,04306	0,04298	0,04267	0,04216	0,04145	0,04055	0,03380	0,01639
0,10	0,08384	0,08379	0,08364	0,08305	0,08073	0,07700	0,07208	0,06623	0,03291	0,00262
0,15	0,12239	0,12223	0,12176	0,11989	0,11268	0,10165	0,08805	0,07328	0,01695	0,00080
0,20	0,15889	0,15854	0,15748	0,15331	0,13777	0,11540	0,09027	0,06614	0,00713	0,00069
0,25	0,19347	0,19281	0,19086	0,18325	0,15584	0,11934	0,08277	0,05253	0,00394	0,00067
0,30	0,22624	0,22516	0,22197	0,20968	0,16729	0,11571	0,07043	0,03881	0,00314	0,00065
0,35	0,25731	0,25569	0,25091	0,23271	0,17288	0,10713	0,05726	0,02816	0,00289	0,00064
0,40	0,28679	0,28450	0,27776	0,25245	0,17360	0,09604	0,04569	0,02110	0,00277	0,00064
0,45	0,31477	0,31168	0,30261	0,26909	0,17051	0,08439	0,03670	0,01687	0,00270	0,00064
0,50	0,34135	0,33733	0,32557	0,28286	0,16469	0,07346	0,03025	0,01446	0,00266	0,00063

Tabela 14: Desvio relativo em relação ao método de referência para $\psi(x, \xi)$ utilizando a metodologia proposta por Abrarov (2018) no subdomínio primário para $M = 10$.

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,10	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1
0,15	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4
0,20	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,7
0,25	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,6
0,30	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,4
0,35	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,7
0,40	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,1	0,1	0,0
0,45	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	0,6
0,50	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,6

Pode-se notar que, para esta aproximação, reduzir o número de termos para $M = 10$ não compromete significativamente a precisão do algoritmo para este trabalho, visto que o desvio relativo permanece abaixo de 1% para todo domínio de Z , lembrando que os valores de referência foram retirados da bibliografia (DUDERSTADT & HAMILTON, 1975).

A utilização do algoritmo elaborado para calcular valores do subdomínio primário já seria o suficiente para estar obtendo valores com boa precisão, entretanto segue-se a análise das aproximações das outras regiões, obtendo resultados sob todo o domínio com o intuito de obtermos a performance e poder analisar a eficiência dos mesmos.

4.2.2- Resultados Obtidos para a Região Externa

A região do domínio externo utiliza a aproximação por Funções Contínuas para calcular a função de Faddeeva, onde esta não operaria com boa acurácia para valores no domínio que fossem menores de $|Z| < 8$, o que podemos visualizar na tabela abaixo:

Tabela 15: Valores obtidos para $\psi(x, \xi)$ utilizando a metodologia proposta por Abrarov (2018) no subdomínio da região externa.

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	0,00427	0,00428	0,00434	0,00458	0,00571	0,00845	0,01571	0,04321	0,00655	0,02803
0,10	0,01676	0,01705	0,01795	0,02214	0,05572	0,30082	0,08466	0,02500	0,07278	0,00132
0,15	0,03663	0,03797	0,04230	0,06579	0,31782	0,08214	0,02996	0,02987	0,01547	0,00082
0,20	0,06263	0,06634	0,07884	0,15520	0,19736	0,05109	0,06280	0,12527	0,00518	0,00070
0,25	0,09328	0,10098	0,12747	0,27605	0,11987	0,07229	0,14028	0,03305	0,00394	0,00067
0,30	0,12709	0,14020	0,18495	0,34705	0,10314	0,16044	0,05496	0,03850	0,00315	0,00065
0,35	0,16270	0,18203	0,24485	0,34470	0,11602	0,13601	0,04440	0,03116	0,00289	0,00064
0,40	0,19893	0,22445	0,29991	0,31666	0,15560	0,08523	0,05401	0,01926	0,00277	0,00064
0,45	0,23489	0,26575	0,34508	0,29159	0,19785	0,07016	0,03800	0,01710	0,00270	0,00064
0,50	0,26992	0,30466	0,37893	0,27604	0,19687	0,07187	0,02878	0,01460	0,00266	0,00063

Tabela 16: Desvio relativo em relação ao método de referência para $\psi(x, \xi)$ utilizando a metodologia proposta por Abrarov (2018) no subdomínio da região externa.

ξ	x									
	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
0,05	90,1	90,1	89,9	89,3	86,6	80,0	62,1	6,6	80,6	71,0
0,10	80,0	79,7	78,5	73,3	31,0	290,7	17,4	62,2	121,2	49,5
0,15	70,1	68,9	65,3	45,1	182,1	19,2	66,0	59,2	8,7	3,0
0,20	60,6	58,2	49,9	1,2	43,3	55,7	30,4	89,4	27,3	0,7
0,25	51,8	47,6	33,2	50,7	23,1	39,4	69,5	37,1	0,1	0,5
0,30	43,8	37,7	16,7	65,5	38,3	38,7	21,9	0,8	0,4	0,4
0,35	36,8	28,8	2,4	48,1	32,9	27,0	22,4	10,7	0,0	0,7
0,40	30,6	21,1	8,0	25,4	10,4	11,3	18,3	8,7	0,1	0,0
0,45	25,4	14,7	14,0	8,4	16,0	16,9	3,5	1,4	0,2	0,5
0,50	20,9	9,7	16,4	2,4	19,5	2,2	4,9	0,9	0,0	0,7

Percebe-se que a utilização da aproximação reservada para a região externa para todo domínio não é viável, visto que apresenta desvio elevados quando utilizado fora da região destinada, somente apresentando erros abaixo de 1% quando $\xi > 0,25$ e $x > 20$. Comparando com o resultado obtido pelo algoritmo utilizado para obter a aproximação da função de Faddeeva na sub-região primária, quando levamos em consideração o erro relativo, não se torna necessário a divisão em regiões do domínio de Z para este trabalho, podendo ser utilizado a

aproximação da sub-região para valores de $|Z| > 8$. Quanto a questão da velocidade de processamento, será abordado mais a frente.

4.3- Tempo de processamento dos métodos

A tabela a seguir mostra o tempo de processamento de cada modelo avaliado na seção anterior. A informação do tempo decorrido no processo, medido por uma função da biblioteca do programa MAPLE, será utilizado para comparação entre os algoritmos utilizados nesta dissertação com o intuito de obter informações sobre a eficiência dos mesmos, visto que quando é avaliado a performance da aproximação, não só o resultado deve ser preciso, mas o tempo de execução da aproximação também deve ser levado em conta. Por esta razão, uma tabela com tomadas de tempo foi elaborada para então concluirmos preliminarmente se as aproximações são rápidas e precisas.

Conforme visto nas tabelas das seções anteriores, para cada valor de x foram calculados valores de ξ (de 0,05 a 0,5), para obter $\psi(x, \xi)$, e o tempo decorrido desta operação é apresentado na tabela abaixo:

Tabela 17: Tabela de performance das aproximações

x	0	0,5	1	2	4	6	8	10	20	40
Salzer	0,837	0,783	0,858	0,748	0,759	0,797	0,781	0,905	0,800	0,767
Região externa	1,003	1,036	0,868	0,974	1,077	1,053	0,912	0,948	0,941	0,950
Subdom 1 (M = 23)	5,428	26,217	25,276	24,695	23,145	23,301	23,163	23,261	23,658	23,162
Subdom 1 (M = 10)	1,267	1,861	1,718	1,843	1,632	1,688	1,734	1,702	1,737	1,661

Comparando os tempos de execução de cada aproximação utilizada neste trabalho, podemos verificar que o modelo de Salzer se mostrou mais rápido que os outros modelos apresentados neste trabalho. A aproximação utilizada para calcular a região externa também se mostrou rápida, apesar do mesmo não ser preciso, e a aproximação da sub-região primária, quando utilizado $M = 23$, o mesmo se mostra bem mais lento quando comparamos com o modelo de Salzer. Entretanto quando utilizado um valor de M menor, como $M = 10$, esta aproximação se mostrou rápida e com boa precisão, se tornando a aproximação que será utilizada para o cálculo da seção de choque, a ser comparada com o modelo de Salzer.

Para a continuação do trabalho, o modelo de Abrarov utilizado será composto somente pela aproximação utilizada no sub-domínio primário, portanto, este abrangerá todo o domínio e será comparado com o modelo de Salzer para a implementação e obtenção da seção de choque.

Capítulo 5: Aplicação ao cálculo da seção de choque

Após a implementação da função de alargamento Doppler, utilizando o cálculo da função erro pela aproximação utilizando a função de Faddeeva, foi adicionado o cálculo da seção de choque em função da energia. Os passos serão mostrados no tópico a seguir.

5.1- Implementação

Até o presente momento, as funções era operadas em função das variáveis (ξ, X) , atreladas à temperatura e a distância relativa entre o nêutron e o núcleo, mas que a proposta é a de operar em função da energia (E) . Para isto, as seguintes operações deverão ser feitas.

$$\xi = \frac{\Gamma}{\Gamma_D}, \quad (107)$$

e

$$X = \frac{2(E-E_0)}{\Gamma}. \quad (108)$$

Como as variáveis de (ξ, X) são dependentes das variáveis (Γ, E) , mudamos as dependências de variáveis dos métodos utilizados neste trabalho para a obtenção dos resultados. Para este trabalho, foram utilizados os valores para as seguintes variáveis:

- T = Temperatura absoluta;
- E_0 = Energia em que a ressonância ocorre;
- k = Constante de Boltzmann;
- A = Número de massa;
- Γ = Largura total da ressonância;
- Γ_g = Largura da radiação gama;
- Γ_D = Comprimento Doppler da ressonância.

Os valores das variáveis serão mostrados na tabela a seguir:

Tabela 18: Valores utilizados nos cálculos

T (K)	1500
k (eV/K)	$8,6 \times 10^{-5}$
E_0 (eV)	6,674
A (u)	238
Γ (eV)	0,0245
Γ_g (eV)	0,0230

O valor de Γ_D pode ser encontrado utilizando a seguinte expressão:

$$\Gamma_D = \sqrt{\frac{4E_0kT}{A}}. \quad (109)$$

Com estas alterações, segue-se com o processo de cálculo da função alargamento Doppler ψ_{aprox} , que será utilizado para calcular a seção de choque seguindo a equação abaixo:

$$\sigma = \sigma_0 \frac{\Gamma_g}{\Gamma} \sqrt{\frac{E_0}{E}} \psi_{\text{aprox}}. \quad (110)$$

Para obter os resultados no *maple* utilizamos o seguinte comando:

For i from (6.0) by 0.05 to (7.0) do print(eval(σ , E=i)) end do;

Esta expressão nos dá o conjunto de valores da seção de choque no intervalo de energia (E) entre 6 e 7. Para plotar o gráfico no *maple* utiliza-se o seguinte comando:

plot(σ , E = 6.0..7.0);

O gráfico da ressonância cujo pico em $E_0 = 6,674 \text{ eV}$ pode ser visualizado na figura a seguir:

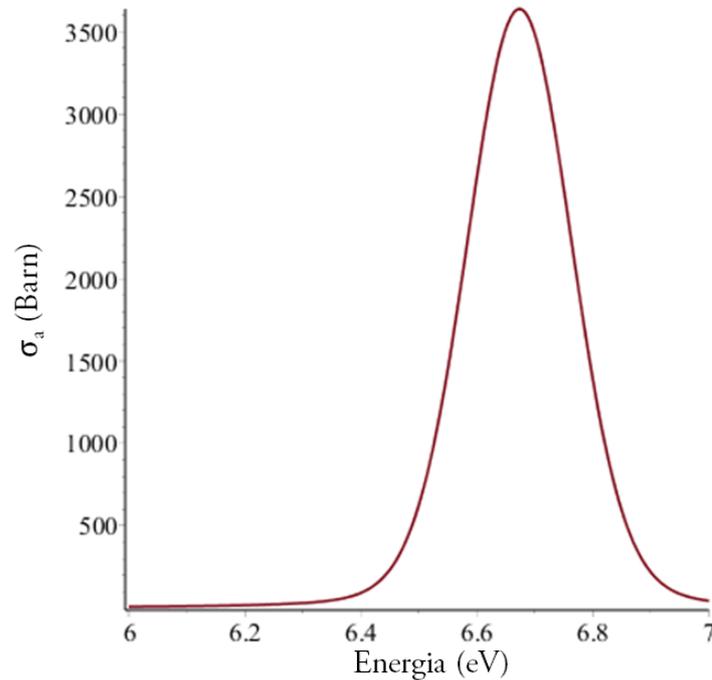


Figura 6: Gráfico da seção de choque da ressonância $E_0 = 6.67\text{eV}$ do isótopo ^{238}U em função da energia do nêutron incidente.

5.2- Comparação dos dados obtidos entre as versões do algoritmo

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos nas seguintes condições:

- Geração do gráfico da seção de choque, com a energia (E) variando de 6.0 até 7.0;
- Utilização do número de termos (M) em 10, 15, 20 e 25 para comparações;
- Obter o tempo decorrido de cada execução do algoritmo;

5.2.1-Comparações

A seguir é mostrado duas tabelas contendo os valores da seção de choque em função da energia para os dois métodos utilizados, lembrando que a aproximação utilizada para o modelo de Abrarov é o utilizado para a sub-região primária, que foi o mais eficiente e precisa em todo domínio de Z .

Para fazer as comparações, foram gerados valores de referência utilizando a função erro já implementada na biblioteca do aplicativo MAPLE para se obter a seção de choque no intervalo já definido. A partir destes valores foram observados os seguintes resultados:

- Para o modelo de Salzer, é observado desvios elevados nos dados quando utilizamos número de termos $m = 10$, mostrando que quando tentamos aproximar valores pequenos de seção de choque, é necessário usar um número de termos maiores, que é solucionado quando é aumentado para $m = 15$, não apresentando desvios significativos.
- O modelo de Abrarov não demonstrou desvios significativos para todos os números de termos testados neste trabalho, denotando que pode ser calculado com um número de termos abaixo do recomendado pelo autor, definido como $m = 23$, reduzindo o esforço computacional ao utilizar este método.

5.3- Desempenho entre os métodos

A tabela a seguir foi gerada usando o programa Maple 15, versão de 64 bits, utilizado em um computador que possui processador core I7-9700 (octacore, 4,7 GHz turbo), 16GB RAM dual-channel (2666 MHz clock) e, utilizando uma função de marcação de tempo pode se obter o tempo de processamento dos modelos utilizados.

O Maple possui uma função comando, chamado,

$$time[real](). \quad (111)$$

Esta função retorna o tempo real em que este foi chamado no código da simulação na variável, que pode ser armazenado em uma variável. Para obter o tempo decorrido da operação, é necessário realizar novamente a chamada desta função no final do código da simulação, obtendo a diferença de tempo decrementando o novo tempo do tempo registrado anteriormente (`time1`).

$$time1 - time[real](). \quad (112)$$

A partir desta rotina, foram obtidos os tempos de ambos os métodos e em diferentes números de termos da aproximação, que são mostrados na tabela abaixo.

Tabela 21: Tempo de execução do cálculo (em segundos)

M-termos	10	15	20	25
Salzer	1,526	1,454	1,546	1,405
Abrarov	1,874	3,537	7,409	15,347

A tabela mostra que o modelo que utiliza a aproximação de Salzer é mais eficiente computacionalmente, levando no máximo 1,5s aproximadamente quando arbitramos $M = 25$, enquanto o modelo pela aproximação de Abrarov leva no mínimo 1,9s quando utilizamos $M = 10$, tendo seu tempo de execução aumentado consideravelmente para cada aumento do valor do termo M , chegando a levar mais de 8 vezes mais tempo quando alteramos o valor de M de 10 para 25, enquanto o modelo de Salzer não apresenta custo computacional significativo quando aumentamos o número de termos na aproximação. Porém vale destacar que o modelo de Abrarov funciona bem para $M = 10$, apresentado erros de no máximo 0,03%, que pode ser considerado eficiente, tendo o tempo de execução próximo ao tempo decorrido pela aproximação de Salzer.

Capítulo 6 – Conclusão e sugestão de trabalhos futuros

O fenômeno de Alargamento Doppler, que é o alargamento das ressonância devido ao movimento relativo do nêutron ao núcleo, exerce um papel importante no projeto de reatores nucleares, é representado matematicamente pela função de Alargamento Doppler $\psi(x, \xi)$ cuja formulação analítica possui a função erro com argumento imaginário $\eta(x, \xi)$ em sua forma funcional.

A obtenção das partes real e imaginária da função erro complexa comumente é realizada utilizando a aproximação proposta por Salzer (SALZER, 1951), que nos testes efetuados, se mostra acurada, apesar de ser um método antigo. Na presente dissertação uma metodologia de cálculo mais moderna para $\eta(x, \xi)$ foi apresentada (ABRAROV et. al., 2018). Essa metodologia é baseada na expansão em séries de cossenos incompleta e capaz de obter a separação dos termos imaginário e real da função erro complexa, tendo potencial para reduzir o esforço computacional normalmente demandada neste tipo de operação.

Como a nova metodologia possuía algoritmos diferentes para as regiões distintas no domínio de Z , estes algoritmos foram testados em suas respectivas regiões e também foram extrapoladas para todo o domínio, com o intuito de observar a degradação da aproximação conforme este se afastava da região pré-definida. Isto é comprovado para a metodologia utilizada na região externa de Z , cujo desvio relativo aumenta consideravelmente conforme se direciona para a região interna do domínio de Z .

O algoritmo utilizado para efetuar a aproximação da função de Faddeeva na região primária se mostrou eficiente mesmo fora da sua região estipulada, se mostrando melhor que os outros algoritmos atuando em suas respectivas regiões, dentro deste trabalho, cujos valores de x e ξ são pequenos ($x_{max} = 40$ e $\xi_{max} = 0,5$). O domínio de Z se encontra majoritariamente na região primária do algoritmo, tornando a aproximação utilizada nesta região a mais importante para este trabalho.

A viabilidade da metodologia permitiu o prosseguimento dos estudos da seção de choque de absorção ressonante, que apesar de ter diferenças de aproximações numéricas referentes aos valores de Z encontrados em seu domínio, o mesmo se mostrou robusto e

entregou resultados satisfatórios, não apresentando discrepância entre valores obtidos pelas diferentes metodologias.

Ao analisar o teste de performance entre ambas as metodologias, esta que foi implementada neste trabalho não se mostrou mais eficiente que a proposta por Salzer (1951), levando mais tempo de processamento que este, apesar da diferença de tempo ser bem pequena se levando em consideração a utilização de um número menor de termos nas somatórias envolvidas nas soluções numéricas apresentadas no trabalho.

Vale ressaltar que o tempo de cálculo decorrido pelo método de Salzer não se alterou conforme se elevou o número de termos M da somatória, o que é uma característica interessante deste modelo, levando 1,5s em média para se obter o resultado. Por outro lado, o modelo de Abrarov aumenta o tempo decorrido da operação conforme eleva-se o número de termos M da somatória, levando de 1,6s para obter o resultado com no número de termos $M = 5$, chegando a levar 15s para obter o resultado com $M = 25$.

Para o método de Abrarov, o número de termos $M = 15$ já é suficiente para se comparar ao modelo de Salzer, porém com este número de termos, esta operação tem a duração de aproximadamente 3,5s em média, custando mais que o dobro de tempo do modelo de Salzer com mesmo número de termos.

Vale ressaltar que estes valores de tempo estão agregados à máquina que foi utilizado para fazer os testes, e que tem efeito comparativo entre os métodos, visto que estes valores de tempos mudam para os diferentes computadores nos quais estas operações serão computadas, cujos componentes internos interferem na performance.

Este tipo de trabalho é importante, pois visa a obtenção de metodologias mais modernas e eficientes, o que pode ser obtido em trabalhos futuros, onde outras propostas metodológicas podem ser analisadas e implementadas para encontrar resultados cada vez melhores.

Como sugestão de trabalhos futuros destacam-se:

- Aplicar o método no cálculo de Fatores de auto-proteção ressonantes na faixa epitérmica (G_{epi}) (WILKINSON, 2022);
- Aplicar o método no cálculo de integrais de ressonâncias e, mais especificamente no cálculo da função J (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976);
- Aplicar o método as funções erro com argumento imaginário decorrentes de outras distribuições de velocidades tais como as de Kaniadakis e Tsallis (GUEDES, PALMA e GONÇALVES, 2019);

REFERÊNCIAS

ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A.; **Error function and Fresnel integrals**. Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables. 9th ed. New York, 297-309, 1972.

ABRAROV, S. M.; QUINE, B M; **Sampling by incomplete cosine expansion of the sinc function**. Appl. Math. Comput., 258, 425-435, 2015. doi: 10.1016/j.amc.2015.01.072.

ABRAROV, S. M. QUINE, B M., **Efficient algorithmic implementation of the Voigt/complex error function based on exponential series approximation**. Applied Mathematics and Computation, Volume 218, 1894-1902, 2011. doi.org/10.1016/j.amc.2011.06.072.

ABRAROV, S. M. et. al., **A Sampling-based Approximation of the Complex Error Function and its Implementation Without Poles**. Applied Numerical Mathematics, Volume 129, 181-191, 2018. doi: 10.1016/j.apnum.2018.03.009.

BETHE, H. A., PLACZEK, G. **Resonance Effects in Nuclear Processes**, Physical Review (Series I), v. 51, pp. 450–484, mar 1937. doi: 10.1103/PhysRev.51.450.

BREIT, G., WIGNER, E. **Capture of Slow Neutrons**, Physical Review (Series I), v. 49, pp. 519–531, apr 1936. doi: 10.1103/PhysRev.49.519.

DE ALMEIDA, G G, **Generalizações no Fenômeno de Alarmamento Doppler**. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2019.

DUDERSTADT, James J.; HAMILTON, Louis J. **Nuclear Reactor Analysis** - Department of Nuclear Engineering – The University of Michigan, 1976.

EBERLEIN, W. F.; **On Euler’s Infinite Product for the Sine**. Journal of Mathematical Analysis and Applications, Volume 58, Issue 1, 147-151, 1977. doi: 10.1016/0022-247X(77)90234-7.

GAUTSCHI, W.; **Efficient computation of the complex error function**. SIAM J. Numer. Anal., Vol. 7, Issue 1, 187-198, 1970.

GUEDES, G.; PALMA, D. A. P.; GONÇALVES, A. C.; **A deformed Doppler Broadening Function considering the Tsallis speed distribution**. Annals of Nuclear Energy, Vol. 128, p. 414-421, 2019. doi: 10.1016/j.anucene.2019.01.023.

KAC, M.; **Statistical Independence on Probability, Analysis and Number Theory**, Carus Monographs, 12, Mathematical Association of America, Washington DC, 1959.

MARSHAL, I., HIGINBOTHAN, J., BRUCE, S., FREISE, A.; **Use of voigt lineshape for quantification of in vivo ^1H spectra**. Magnetic Resonance in Medicine, Vol.37, Issue 5, p. 651-657, 1997. doi: 10.1002/mrm.1910370504.

MERCA, M.; **The cardinal sine function and the Cherbyshev-Stirling numbers.** *Journal of Number Theory*, Volume 160, 19-31, 2016. doi: 10.1016/j.jnt.2015.08.018.

PALMA, D.A.P.; Martinez, A.S., **A faster procedure for the calculation of the $J(\xi, \beta)$ function.** *Annals of Nuclear Energy*, Vol 36, Issue 10, 1516-1520, 2009. doi: 10.1016/j.anucene.2009.07.019.

PALMA, D.A.P., **Formulações Analíticas para as Funções de Alargamento Doppler.** UFRJ, 2007.

PALMA, D.A.P, MARTINEZ A.S., SILVA F.C., **The Derivation of the Doppler Broadening Function using Frobenius Method,** *Journal of Nuclear Science and Technology*, 43:6, 617-622, 2005, doi: 10.1080/18811248.2006.9711141.

POPPE, G. P. M.; WIJERS, C. M. J.; Algorithm 680: **Evaluation of the Complex error Function.** *ACM Transact. Math. Software*, Volume 16, Issue 1, 1990. doi:10.1145/77626.77630.

ROCKETT, A. M.; SZUSZ, P; **Continued Fractions,** World Scientific Publishing Company, 1992. doi: 10.1142/1725.

L.S. ROTHMAN, I.E. GORDON, Y. BABIKOV, A. BARBE, D. CHRIS BENNER, P.F. BERNATH, M. BIRK, L. BIZZOCCHI, V. BOUDON, L.R. BROWN, A. CAMPARGUE, K. CHANCE, E.A. COHEN, L.H. COUDERT, V.M. DEVI, B.J. DROUIN, A. FAYT, J.-M. FLAUD, R.R. GAMACHE, J.J. HARRISON, J.-M. HARTMANN, C. HILL, J.T. HODGES, D. JACQUEMART, A. JOLLY, J. LAMOUREUX, R.J. LE ROY, G. LI, D.A. LONG, O.M. LYULIN, C.J. MACKIE, S.T. MASSIE, S. MIKHAILENKO, H.S.P. MÜLLER, O.V. NAUMENKO, A.V. NIKITIN, J. ORPHAL, V. PEREVALOV, A. PERRIN, E.R. POLOVTSEVA, C. RICHARD, M.A.H. SMITH, E. STARIKOVA, K. SUNG, S. TASHKUN, J. TENNYSON, G.C. TOON, VL.G. TYUTEREV, G. WAGNER, **The HITRAN2012 molecular spectroscopic database,** *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Volume 130, Pages 4-50, ISSN 0022-4073, 2013, doi:10.1016/j.jqsrt.2013.07.002.

SALZER, H.E., **Formulas for Calculating the Error Function of a Complex Variable,** *Math. Tables Aids Comput.* 5, 61-70, 1951. doi:10.2307/2002163.

SOMMERFELD, A. *Lectures on Theoretical Physics*, vol. V: **Thermodynamics and statistical mechanics.** 1 ed. New York, USA, Academic Press, 1956.

TITCHMARSH, E. C., **Introduction to the Theory of Fourier Integrals.** Oxford, p. 60-64, 1937.

WILKINSON, I. M.; BHATTACHARJEE, R. R.; SHAFER, J. C.; OSBORNE, A. G.; **Confidence estimation in the prediction of epithermal neutron resonance self-shielding factors in irradiation samples using an ensemble neural network.** *Energy and AI*, Vol 7, 2022. doi: 10.1016/j.egyai.2021.100131.

ZAGHLOUL, M.R.; ALI, N. A.; Algorithm 916: **Computing the Faddeyeva and Voigt Functions.** *ACM Trans. Math. Software*, Volume 38, Issue 2, 15:1-15:22, 2011. doi: 10.1145/2049673.2049679.