N. T. 204

IONE DE ALMEIDA COCO

SBI-IFUSP
305M810T3017

O PROBLEMA DE MILNE POLIENERGÉTICO EM FÍSICA DE REATORES: ESTUDO DA INFLUÊNCIA DO ESPALHAMENTO ELÁSTICO ANISOTRÓPICO COM O MODELO DO GÁS PESADO

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ex. 2
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
3017
INSTITUTO DE FÍSICA

Dissertação de Mestrado apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
204
INSTITUTO DE FÍSICA

São Paulo

Setembro de 1973

RESUMO

Foi estudado o Problema de Milne polienergético, em geometria plana, em um meio espalhador e absorvedor, levando em consideração os efeitos da secção de choque de espalhamento dependente da energia e do espalhamento linearmente anisotrópico.

A equação de Boltzmann foi resolvida pelo Método Polinomial Energético e Angular, tendo sido utilizados secção de choque de absorção da forma $1/v$ e o núcleo de espalhamento do Gás Pesado.

Foram obtidos resultados numéricos para as distribuições energética e espacial do fluxo de neutrons na fronteira meio-vácuo e na região assintótica, distância extrapolada e auto valores para três meios com absorções diferentes, sempre que possível, os resultados foram comparados com os encontrados na bibliografia.

Conclui-se que, nas vizinhanças da fronteira e em meios pequenos, onde as fugas são importantes, tanto a dependência energética na secção de choque de espalhamento quanto o termo linearmente anisotrópico do núcleo de espalhamento devem ser incluidos.

∞∞∞∞∞∞∞∞∞∞

ABSTRACT

The energy dependent Milne problem has been studied in plane geometry for three absorbing and scattering media. Calculations have been carried out including the energy dependent scattering cross section and linear anisotropic scattering effects.

Boltzmann's equation has been solved using the polynomial energetic and angular method with a $1/v$ type absorption cross section and heavy gas scattering kernel.

Calculated numerical results are given for each of the three media for the energy spectrum and spatial distribution of neutrons at the vacuum-medium boundary and in the asymptotic region, the extrapolation distance and the eigenvalues. Results are compared with data found in the literature.

The numerical results show that near the boundaries and in small systems, where leakage is important, both the energy dependent scattering cross section and linear anisotropy must be included in the calculations.

∞∞∞∞∞∞∞∞∞∞∞∞∞

AGRADEÇO

ao Dr. Paulo Saraiva de Toledo que sugeriu e orientou o presente trabalho e a quem devo toda a minha formação profissional;

ao Instituto de Energia Atômica e à Comissão Nacional de Energia Nuclear por terem criado condições que permitiram a continuação de meus estudos desde a graduação;

às pesquisadoras Dra. Wilma H. de S. Cintra e Dra. Lia do A. Riske por valiosas discussões;

aos integrantes do Centro de Processamento de Dados do IEA pelas facilidades oferecidas para a utilização do computador e em particular às bacharéis Odette Guedes, Maria Luiza Cruz e Elisa Sano pela cooperação recebida nas diversas etapas do desenvolvimento deste trabalho;

ao Dr. José Goldenberg e Dra. Olga Y. M. Guidicini por possibilitarem a continuação deste estudo;

a Antonio Pedro Coco pelo incentivo e compreensão constantes sem os quais este trabalho dificilmente teria sido concluído;

a todos os colegas de trabalho que, direta ou indiretamente, colaboraram e possibilitaram a realização desta dissertação.

SUMÁRIO

Página

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO.

1.1. EXPOSIÇÃO DO PROBLEMA 1
1.2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 2
1.3. OBJETIVO 6

CAPÍTULO II - A EQUAÇÃO DE BOLTZMANN E SUA SOLUÇÃO PELO MÉTODO PEA PARA O PROBLEMA DE MILNE.

II.1. A EQUAÇÃO DE BOLTZMANN 9
II.2. SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE BOLTZMANN PELO MÉTODO PEA(33) 15
II.2.A. Dependência Energética 15
II.2.B. Dependência Angular 17
II.2.C. Dependência Espacial 18
II.3. O PROBLEMA DE MILNE - APLICAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO.. 21
II.3.A. Condição de Contorno Longe da Fronteira 21
II.3.B. Condição de Contorno na Interface 22
II.4. CÁLCULO DA DISTÂNCIA EXTRAPOLADA 24

CAPÍTULO III - MODELOS DE ESPALHAMENTO E ABSORÇÃO E CÁLCULO DAS MATRIZES $[V]$, $[\alpha^o]$ E $[\alpha^1]$.

III.1.MODELOS DE ABSORÇÃO E ESPALHAMENTO 26
III.1.A. Absorção 26
III.1.B. Espalhamento 26
III.2.CÁLCULO DOS ELEMENTOS DA MATRIZ 29
III.2.A. Matriz $[V]$ 29
III.2.B. Matrizes $[\alpha^n]$ 30

Página

CAPÍTULO IV - PROGRAMAS E SUB-PROGRAMAS UTILIZADOS NA RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE MILNE PELO MÉTODO PEA.

IV.1. EXPLICAÇÃO DOS PROGRAMAS 34
IV.2. FLUXOGRAMAS 38

CAPÍTULO V - ANÁLISE E COMPARAÇÃO DE RESULTADOS

V.1. ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA APROXIMAÇÃO $\sum_s(E)$ = CONSTANTE ... 41
V.1.A. Distribuição Energética de Neutrons 42
V.1.B. Distribuição Espacial de Neutrons 47
V.1.C. Distância Extrapolada 50
V.1.D. Sobre os Auto Valores ν_s 51
V.2. ANÁLISE DOS EFEITOS DA INCLUSÃO DO TERMO DE ESPALHAMENTO LINEARMENTE ANISOTRÓPICO 53
V.2.A. Influência da Inclusão da Anisotropia Linear na Distribuição Energética de Neutrons 53
V.2.B. Influência da Anisotropia na Distribuição Espacial de Neutrons 58
V.2.C. Distância Extrapolada 61
V.2.D. Sobre os Auto Valores ν_s 62
V.2.E. Comparação das Distâncias Extrapoladas aqui Obtidas com Outras Encontradas na Bibliografia 69
V.3. OBSERVAÇÕES SOBRE A REFERÊNCIA (32) 71

APÊNDICE A - FUNÇÕES ESPECIAIS

A.1. POLINÔMIOS DE LEGENDRE (1) 74
A.2. POLINÔMIOS DE LAGUERRE (não normalizados) (1) 75
A.3. FUNÇÃO DELTA DE DIRAC (18) 76

APÊNDICE B - SOLUÇÃO DO SISTEMA DE EQUAÇÕES (II.2.16) 79

APÊNDICE C - CALCULO DO COSSENO MÉDIO DO ÂNGULO DE ESPALHAMENTO 86

Página

APÊNDICE D - LISTAGENS DOS PROGRAMAS FORTRAN 88

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 107

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

I.1. EXPOSIÇÃO DO PROBLEMA

O Problema de Milne, um dos mais antigos problemas de transporte, teve origem na década de 20; porém sua aplicação a neutrons só se deu durante o projeto Manhattan.

Consiste na determinação do fluxo de neutrons em um semi-espaço material infinito moderador que faz fronteira com o vácuo. Supõe-se que os neutrons são fornecidos ao meio por uma fonte no infinito e que os neutrons que saem do meio não retornam.

O fluxo de neutrons, em tal meio, pode ser determinado pela solução da equação de Boltzmann e pela aplicação de condições de contorno adequadas .

O Problema de Milne para neutrons tem sido bastante estudado, principalmente na aproximação de difusão e no caso monoenergético da teoria de transporte; isto porque, nestes casos, a obtenção de solução exata é possível e razoavelmente simples.

A equação de Boltzmann para neutrons pode ser reduzida, com pequenas aproximações, a uma equação integro-diferencial linear. Ainda assim, no caso geral linear, sua solução apresenta grandes dificuldades e só foi obtida para casos muito especiais, e, geralmente, em formas aproximadas.

Entretanto, devido à importância da equação de transporte, diversos métodos aproximados de solução vêm sendo propostos . Os mais utilizados têm sido o Método Variacional, o Método de Expansão Polinomial e o Método de

Multigrupo. Convém notar que, em muitos dos trabalhos desenvolvidos, a solução encontrada é de tal forma que dificulta sua aplicação a problemas práticos.

Usualmente, a fim de tornar possível a solução da equação de Boltzmann para neutrons, são introduzidos modelos e aproximações sobre as propriedades do meio. Visando representar as características de espalhamento do meio, é introduzido o núcleo de espalhamento elástico que é o modelo que matematicamente descreve a troca de energia entre neutrons e átomos do meio. Como sua formá analítica nem sempre é simples, sua presença pode introduzir dificuldade na solução da equação de transporte.

Têm sido utilizados, principalmente, os nucleos de espalhamento Separável, desenvolvido por Corngold & outros (08), o do Gás Pesado, proposto por Wilkins Jr. (37), o do Gás Livre, desenvolvido por Wigner & Wilkins Jr. (36), e o de Nelkin (28) proposto para a água. Ainda com relação a espalhamento elástico, uma aproximação geralmente utilizada consiste em considerar apenas a parte isotrópica do núcleo de espalhamento.

A presença da absorção também constitui um grande impecilho na solução da equação de Boltzmann para neutrons e diversos trabalhos têm sido feitos para meio não absorvedor. Quando a absorção é considerada, em geral, utiliza-se uma dependência na velocidade v dos neutrons incidentes da forma C/v^n onde C é constante e n é um número inteiro não negativo.

Diante destas dificuldades, poucos foram os trabalhos que trataram o Problema de Milne levando em consideração, na determinação do fluxo de neutrons, a dependência espacial, energética e angular, considerando o meio como absorvedor e o espalhamento elástico como anisotrópico.

Entretanto, o estudo do Problema de Milne nesta forma mais geral, possibilita a obtenção de resultados de extrema importância sobre a influência da presença de fronteira em meios moderadores, ou seja, não multiplicadores .

I.2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Embora as primeiras pesquisas sobre o Problema de Milne em física de reato

res datem da década de 40, o primeiro trabalho publicado tratando do caso polienergético só surgiu em 1960 devido, principalmente, às dificuldades envolvidas nestes cálculos. Os trabalhos aqui relacionados tratam do Problema de Milne polienergético em geometria plana.

Em 1960, foram publicados os trabalhos de Nelkin (27) e Conkie (07) ambos supondo o meio não absorvedor. O primeiro obteve apenas uma expressão para a distância extrapolada para o Problema de Milne polienergético,por uma extensão do Método Variacional proposto por LeCaine (21) para o caso monoenergético, expressão esta desenvolvida para um núcleo de espalhamento arbitrário porém isotrópico. Conkie usou o Método de Desenvolvimento Polinomial nas variáveis energética (polinômios de Tchebycheff) e angular (polinômios de Legendre) e o núcleo de espalhamento do Gás Livre incluindo o espalhamento anisotrópico. Obteve solução explicita para o fluxo de neutrons mas comenta que os erros são grandes devido, principalmente, ao truncamento na aproximação angular P_1 e que a extensão para P_N N>1 é muito trabalhosa.

Em 1961, Kladnik & Kuščer (16, 17) extenderam o método variacional usado por Nelkin para o caso de espalhamento linearmente anisotrópico, em meio não absorvedor e absorvedor respectivamente. O objetivo dos dois trabalhos foi obter uma expressão para a distância extrapolada e uma aproximação para a distribuição energética de neutrons na fronteira. Em 1962, Kladnik (15) publicou valores da distância extrapolada calculados pelo método desenvolvido anteriormente para meios moderadores não absorvedores e com diversas massas diferentes. Neste trabalho concluiu que a distribuição de velocidades dos neutrons na fronteira de meios não absorvedores não é muito influenciada pela presença da mesma; entretanto, espera que este efeito seja muito mais importante se o meio considerado for absorvedor.

Em 1964, Williams (38, 41) publicou dois trabalhos onde estudou o Problema de Milne supondo meio não absorvedor e espalhamento isotrópico. No primeiro usou o método de Wiener & Hopf e obteve a solução exata da equação de Boltzmann usando o modelo de núcleo de espalhamento Separável. No segundo trabalho seu objetivo era estudar o erro introduzido pela utilização do núcleo Separável e para isto tomou o fluxo obtido com sua utilização como sendo o fluxo não perturbado e aplicou o método das perturbações a modelos mais realísticos. Concluiu que, neste caso, o uso de núcleos mais rea

lísticos não era difícil mas não teria sentido se não fossem incluídos absorção e espalhamento linearmente anisotrópico; comenta também sobre a dificuldade desta extensão.

No mesmo ano, Eisenhauer (10), mantendo as restrições de meio não absorvedor e espalhamento isotrópico, comparou a distribuição angular do fluxo de neutrons, integrado na energia, na fronteira e as distâncias extrapoladas obtidas com a utilização do programa THERMOS para diversos núcleos de espalhamento. Seu objetivo foi obter informações sobre a sensibilidade dos resultados às propriedades de espalhamento do meio e concluiu que para os núcleos de espalhamento testados não havia grande sensibilidade.

Também em 1964, Conkie (06) utilizando esféricas harmônicas para a variável angular e um método iterativo obteve o fluxo de neutrons para o caso monoenergético, e em seguida extendeu ao caso polienergético usando polinômios de Laguerre, para um meio sem absorção e espalhamento isotrópico - núcleo de espalhamento separável e secção de choque de espalhamento do gás livre.

Ainda em 1964, Kiefhaber (14) supondo o meio absorvedor e o espalhamento linearmente anisotrópico obteve uma solução aproximada para o Problema de Milne adotando o núcleo de espalhamento de Nelkin para a água, usando o método de esféricas harmônicas para a dependência angular e o desenvolvimento em polinômios de Laguerre para a dependência energética. Obteve resultados numéricos, no entanto, apenas para a aproximação P_1, devido à complexidade dos cálculos.

No ano seguinte, Mika (26) obteve formalmente a distância extrapolada e a distribuição angular de neutrons para o Problema de Milne pelo método de Expansão em Modos Normais considerando o meio como absorvedor e usando o núcleo de espalhamento isotrópico separável e com secção de choque de espalhamento arbitrária. Na bibliografia consultada não se encontrou aplicação posterior deste método.

Ainda em 1965, Leonard & Ferziger (23) estudaram a solução da equação de Boltzmann desenvolvendo a parte energética do fluxo de neutrons em polinômios de Laguerre, supondo meio absorvedor e núcleo de espalhamento isotrópico degenerado com secção de choque de espalhamento constante com a ener

gia. Embora a parte angular da solução seja obtida de maneira exata, este método tem como inconveniente a dificuldade tanto na obtenção como na solução das equações integrais de Fredholm que aparecem quando se consideram as condições de contorno.

Em 1967, Arkuszewski (02) estudou o Problema de Milne por uma extensão do método de Wiener & Hopf para meios com absorção da forma $1/v^n$ e espalhamento isotrópico usando o núcleo separável e modelo do gás livre. As expressões por ele obtidas são de difícil uso computacional; no entanto, apresenta resultados numéricos para a distância extrapolada, para os auto valores ν , distribuição energética e angular do fluxo de neutrons.

Ainda em 1967, Baran (03) estudou o problema de Milne pela teoria de dois grupos supondo o meio como sem absorção e o espalhamento isotrópico e Kallfelz & Reichardt (13) utilizaram o programa IMALS para obter a depêndência angular do espectro de neutrons na fronteira de um meio sem absorção e com espalhamento linearmente anisotrópico. Kallfelz & Reichardt concluiram que, para descrever bem a forma do espectro de neutrons na interface, o espalhamento linearmente anisotrópico deve ser incluído.

Na mesma época, Lancefield & Schofield (19, 20) publicaram dois trabalhos onde usaram o método variacional para calcular a distância extrapolada e a distribuição angular do fluxo de neutrons na fronteira. No primeiro consideraram o meio sem absorção e o espalhamento linearmente anisotrópico e no segundo consideraram a absorção da forma $1/v^n$ e espalhamento isotrópico. Compararam os resultados obtidos nos dois trabalhos com outros anteriores.

Em 1968, Metcalf (24) publicou sua tese de doutoramento onde obteve solução exata para o problema de Milne por teoria de dois grupos para a energia e esféricas harmônicas para a variável angular em um meio com quatro absorções diferentes e com espalhamento isotrópico.

Em 1971, Cintra (04) publicou sua tese de doutoramento onde estudou o Problema de Milne pelo método PEA (33) com absorção e espalhamento isotrópico com nucleo de espalhamento degenerado e modelo do Gás Pesado com secção de choque de espalhamento independente da energia do neutron. Obteve uma solução aproximada porém explicita, o que permitiu um estudo da distribui

ção energética e espacial do fluxo de neutrons.

Recentemente, em 1972 foram publicados mais dois trabalhos: - no primeiro Siewert & Ishiguro (31) utilizaram a teoria de dois grupos para resolver o problema de Milne em um meio com absorção e espalhamento isotrópico, e compararam os resultados obtidos com os de Metcalf; - no segundo Pahor & Larson (30) usaram o método desenvolvido anteriormente por Pahor (29) para obter o fluxo de neutrons em um meio absorvedor e com espalhamento isotrópico, utilizando o modelo de espalhamento degenerado com secção de choque do gás pesado. Comparam os resultados obtidos com os de Arkuszewski (02). Observam que as distâncias extrapoladas obtidas quando se utiliza o modelo de espalhamento do gás pesado diferem de menos de 0,07% das obtidas com a utilização do modelo do gás livre, para meios absorvedores e com massa do gás A = 12.

Com este histórico procurou-se mostrar que existem poucos trabalhos que consideram o meio absorvedor e o espalhamento linearmente anisotrópico; e mais, a maior parte deles, devido ao metodo utilizado na solução da equação de Boltzmann, não contém estudo de distribuições energéticas e espaciais do fluxo de neutrons.

O método PEA(33)(Polinomial Energético e Angular), entretanto, pode ser usado na solução de problemas práticos e, principalmente, na obtensão e análise de fluxos de neutrons dependentes das variáveis espacial, energética e angular pois, sendo de fácil utilização em computador, possibilita um estudo quase que paramétrico dos diversos fatores que influem no fluxo de neutrons.

I.3. OBJETIVO

O objetivo deste trabalho é dar uma contribuição ao estudo do Problema de Milne polienergético, em geometria plana, para meios não multiplicadores mas absorvedores e levando em consideração a influência do espalhamento linearmente anisotrópico e da secção de choque de espalhamento dependente da energia do neutron.

A motivação para o desenvolvimento deste estudo surgiu das observações do

artigo de Summerfield & Zweifel (32):

a) "Na aproximação do gás pesado o espalhamento é isotrópico";
b) "A influência da aproximação de secção de choque de espalhamento constante com a energia do neutron é uma questão em aberto"

e também das conclusões de outros autores que trataram o Problema de Milne como por exemplo Williams (41), Kallfelz & Reichardt (13) e Cintra(04), comentários estes já citados na revisão bibliográfica.

Neste trabalho será utilizado o método PEA (33) para solução da equação de Boltzmann. Este método é completamente geral e pode ser utilizado com qualquer núcleo de espalhamento ou lei de absorção; aqui foi escolhida a absorção da forma 1/v e o espalhamento descrito pelo núcleo do Gás Pesado (40) com secção de choque de espalhamento dependente da energia do neutron. Esta escolha se prende ao fato de facilitar o estudo a que se propõe este trabalho, por permitir a comparação direta com a referência (04).

Serão feitas, essencialmente, dois tipos de análises, conforme o trabalho de Summerfield & Zweifel sugere:

a) estudo da influência da secção de choque de espalhamento dependente da energia do neutron, o que ainda é considerado um caso em aberto, o que será feito supondo o espalhamento como isotrópico e comparando os resultados aqui obtidos com os de Cintra (04);

b) estudo da influência do espalhamento linearmente anisotrópico, o que será feito com a comparação dos resultados aqui obtidos nas aproximações de espalhamento isotrópico e linearmente anisotrópico.

Os dois estudos foram desenvolvidos para meios absorvedores e em tudo o trabalho aqui apresentado é análogo ao de Cintra tendo sido, no entanto, introduzidas duas generalizações: secção de choque dependente da energia do neutron e espalhamento linearmente anisotrópico. Serão feitas verificações da importância destas duas generalizações, principalmente:

a) no espéctro energético de neutrons

b) na distribuição espacial dos neutrons

c) na distância extrapolada

d) nos auto valores ν

Espera-se que o estudo de todos estes efeitos possibilite a melhor compreensão dos aspectos físicos decorrentes da presença de fronteira em meios moderadores com absorção.

CAPÍTULO II

A EQUAÇÃO DE BOLTZMANN E SUA SOLUÇÃO PELO MÉTODO PEA PARA O PROBLEMA DE MILNE

II.1. A EQUAÇÃO DE BOLTZMANN

Como já foi mencionado, a distribuição de neutrons em um semi-espaço infinito, Problema de Milne, pode ser determinada resolvendo-se a equação de Boltzmann com condições de contorno adequadas.

A lei fundamental que descreve o comportamento dos neutrons é essencialmente uma equação de balanço que pode ser deduzida de uma maneira simples baseada na conservação de neutrons em um elemento de volume. A equação de transporte será aqui deduzida para um meio moderador puro, isto é, somente espalhador e absorvedor.

Seja $n(\bar{r}, E, \bar{\Omega}, t)$ a função de distribuição de neutrons que é definida de modo que

$n(\bar{r}, E, \bar{\Omega}, t)\, d\bar{r}dEd\Omega$ - número médio de neutrons que, no instante t, no volume $d\bar{r}$, centrado em $\bar{r}$, têm energias entre E e E+dE e direção de movimento no ângulo sólido $d\Omega$, centrado em $\bar{\Omega}$.

Considerando-se um elemento de volume $d\bar{r}dEd\Omega$ no espaço hexadimensional, durante um intervalo de tempo dt, a variação do número de neutrons no elemento de volume é tal que

$$\frac{\partial n}{\partial t}(\bar{r}, E, \bar{\Omega}, t)\, d\bar{r}dEd\Omega dt = (1) + (2) + (3) + (4) + (5)$$

(1) termo de fuga - número líquido de neutrons do grupo $dEd\Omega$ que sai de $d\bar{r}$, durante dt.

(2) termo de absorção - número de neutrons do grupo $dEd\Omega$ absorvido em $d\bar{r}$, durante dt.

(3) perda por espalhamento interno - número de neutrons do grupo $dEd\Omega$ que é espalhado em $d\bar{r}$, para o grupo dE"dΩ", durante dt.

(4) ganho por espalhamento interno - número de neutrons que sendo espalhado em $d\bar{r}$, durante dt, passa do grupo dE'dΩ' para o grupo $dEd\Omega$.

(5) termo de fonte externa - número de neutrons do grupo $dEd\Omega$ produzido em $d\bar{r}$, durante o intervalo de tempo dt.

As expressões matemáticas para os cinco termos são as seguintes:

(1) $-\bar{v} \cdot \text{grad}\, n(\bar{r},E,\bar{\Omega},t)\, d\bar{r}dEd\Omega dt$

(2) $-\sum_a (E,\bar{r})\, v\, dt\, n(\bar{r},E,\bar{\Omega},t)\, d\bar{r}dEd\Omega$

(3) $-\int_0^\infty dE'' \int_{4\pi} d\Omega'' \sum_s (E,\bar{\Omega} \to E'',\bar{\Omega}'';\bar{r})\, v\, dt\, n(\bar{r},E,\bar{\Omega},t)\, d\bar{r}dEd\Omega$

(4) $+\int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \sum_s (E',\bar{\Omega}' \to E,\bar{\Omega};\bar{r})\, v'dt\, n(\bar{r},E',\bar{\Omega}';t)\, d\bar{r}dEd\Omega$

(5) $+ S(\bar{r},E,\bar{\Omega},t)\, d\bar{r}dEd\Omega dt$

onde $\bar{v} = v\bar{\Omega}$

$\sum_a (\bar{r},E)$ - probabilidade, por unidade de percurso, de que um neutron com energia E seja absorvido nas vizinhanças do ponto $\bar{r}$.

$\sum_s (E,\bar{\Omega} \to E',\bar{\Omega}';\bar{r})\, dE'\, d\Omega'$ - probabilidade, por unidade de percurso, de que um neutron com energia E e direção de movimento $\bar{\Omega}$ sofra um choque elástico, nas vizinhanças de $\bar{r}$, e depois do choque sua energia esteja entre E' e E'+dE' e sua direção de movimento dentro do ângulo sólido dΩ' centrado em $\bar{\Omega}'$.

Na dedução da equação de balanço foram desprezados os efeitos:

- de interações neutron-neutron

- de desintegrações radioativas
- quânticos.

Estas aproximações, clássicas em física de reatores, tornam a equação de Boltzmann linear e sua forma geral é expressa como segue:

$$\frac{\partial n}{\partial t}(\bar{r},E,\bar{\Omega},t) = -\bar{v}\cdot\text{grad}\, n(\bar{r},E,\bar{\Omega},t) - \Sigma_a(\bar{r},E)\, v\, n(\bar{r},E,\bar{\Omega},t) +$$

$$-\int_0^\infty dE'' \int_{4\pi} d\Omega''\ \Sigma_s(E,\bar{\Omega}\to E'',\bar{\Omega}'';\bar{r})\, v\, n(\bar{r},E,\bar{\Omega},t) + \qquad \text{(II.1.1)}$$

$$+\int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega'\ \Sigma_s(E',\bar{\Omega}'\to E,\bar{\Omega};\bar{r})\, v' n(\bar{r},E',\bar{\Omega}',t) + S(\bar{r},E,\bar{\Omega},t)$$

Costuma-se simplificar a equação (II.1.1) fazendo-se algumas restrições sobre o meio, o que também será feito aqui.

A. <u>Meio isotrópico</u> - as propriedades do meio aparecem na equação de Boltzmann através das secções de choque macroscópicas e, no caso de meio isotrópico, a dependência angular da secção de choque de espalhamento aparecerá somente através do ângulo de espalhamento e não da orientação absoluta das direções inicial e final de movimento dos neutrons. Faz-se

$$\Sigma_s(E,\bar{\Omega}\to E'',\bar{\Omega}'';\bar{r}) = \frac{1}{2\pi}\,\Sigma_s(E\to E'',\bar{\Omega}\cdot\bar{\Omega}'';\bar{r}).$$

B. <u>Meio homogêneo</u> - as secções de choque macroscópicas independem da posição, ou seja

$$\Sigma_s(E,\bar{\Omega}\to E'',\bar{\Omega}'') = \frac{1}{2\pi}\,\Sigma_s(E\to E'',\bar{\Omega}.\bar{\Omega}'')$$

$$\Sigma_a(E) = \Sigma_a(E,\bar{r})$$

C. <u>Meio sem fontes externas</u>.

$$S(\bar{r},E,\bar{\Omega},t) = 0$$

Como, no Problema de Milne, considera-se somente o caso estacionário, a equação (II.1.1) pode ser escrita como

$$\bar{v} \cdot \text{grad}\, n(\bar{r},E,\bar{\Omega}) + \Sigma_a(E)\, n(\bar{r},E,\bar{\Omega}) +$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dE'' \int_{4\pi} d\Omega''\ \Sigma_s(E \to E'', \bar{\Omega}.\bar{\Omega}'')\ v\, n(\bar{r},E,\bar{\Omega}) = \qquad \text{(II.1.2)}$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega'\ \Sigma_s(E' \to E, \bar{\Omega}'.\bar{\Omega})\ v'\, n(\bar{r},E',\bar{\Omega}')$$

Integrando-se o terceiro termo em relação a dE"dΩ" e usando

$$\Sigma_s(E \to E'') = (1/2\pi) \int_{4\pi} d\Omega''\ \Sigma_s(E \to E'', \bar{\Omega}.\bar{\Omega}'')$$

e

$$\Sigma_s(E) = \int_0^\infty dE''\ \Sigma_s(E \to E'')\,,$$

tem-se que:

$$\bar{v} \cdot \text{grad}\, n(\bar{r},E,\bar{\Omega}) + \{\Sigma_a(E) + \Sigma_s(E)\}\, v\, n(\bar{r},E,\bar{\Omega}) =$$

$$(1/2\pi) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega'\ \Sigma_s(E' \to E, \bar{\Omega}'.\bar{\Omega})\ v'\ n(\bar{r},E',\bar{\Omega}') \qquad \text{(II.1.3)}$$

Sendo o meio não multiplicador, a secção de choque total do meio é dada por

$$\Sigma(E) = \Sigma_a(E) + \Sigma_s(E) \qquad \text{(II.1.4)}$$

No caso do problema de Milne, aqui considerado, existe simetria plana; portanto a densidade de neutrons só depende da variável espacial x e da componente, segundo o eixo x, do vetor $\bar{\Omega}$.

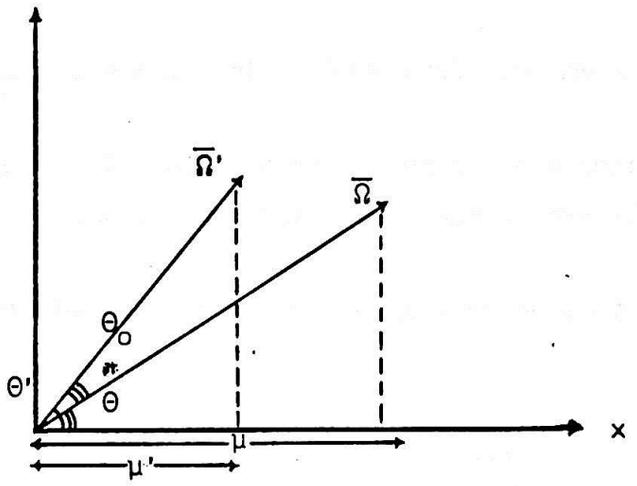


FIGURA 1. Representação esquemática das componentes μ e μ'dos vetores $\bar{\Omega}$ e $\bar{\Omega}'$ respectivamente com relação ao eixo x.

Definindo o fluxo de neutrons como $\phi(\bar{r},E,\bar{\Omega}) = v\, n(\bar{r},E,\bar{\Omega})$, no caso plano tem-se:

$$\phi(\bar{r}, E,\bar{\Omega}) = \phi(x, E,\mu)$$

$$\mu = \bar{\Omega} \cdot \bar{i} = \cos\theta$$
$$\mu' = \bar{\Omega}' \cdot \bar{i} = \cos\theta'$$
$$\mu_o = \bar{\Omega}' \cdot \bar{\Omega} = \cos\theta_o$$

a equação (II.1.3), considerando (II.1.4), pode ser escrita como:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x}\phi(x,E,\mu) + \sum(E)\phi(x,E,\mu) = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \sum_s (E' \to E,\mu_o)\phi(x,E',\mu') \quad \text{(II.1.5)}$$

Esta equação será resolvida pelo método PEA (33) com as condições de contorno adequadas ao problema de Milne.

Será tomada como unidade de comprimento o valor máximo do caminho livre médio total $[1/\sum(E)]$ e como unidade de energia KT onde K é a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta do meio.

O núcleo de espalhamento a ser utilizado deverá satisfazer o Princípio do Balanço Detalhado, ou seja

$$M(E')\ \Sigma_s(E' \to E,\mu_o) = M(E)\ \Sigma_s(E \to E',\mu_o) \qquad \text{(II.1.6)}$$

onde $M(E) = E\exp(-E)$ é a distribuição Maxwelliana para E em unidades de KT.

A validade da relação (II.1.6) garante que em um meio infinito, homogêneo e sem absorção a distribuição de equilibrio seja a Maxwelliana.

O núcleo de espalhamento será simetrizado, por conveniência, e para isto será introduzida a função

$$\phi(x,E,\mu) = \sqrt{M(E)}\ \psi(x,E,\mu) \qquad \text{(II.1.7)}$$

substituindo (II.1.7) em (II.1.5) e dividindo por $\sqrt{M(E)}$, tem-se

$$\mu \frac{\partial}{\partial x}\psi(x,E,\mu) + \Sigma(E)\,\psi(x,E,\mu) = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \sqrt{\frac{M(E')}{M(E)}}\,\Sigma_s(E' \to E,\mu_o)\,\psi(x,E',\mu') \qquad \text{(II.1.8)}$$

Pode-se notar que o novo núcleo de espalhamento

$$\Sigma_{ss}(E' \to E,\mu_o) = \sqrt{\frac{M(E')}{M(E)}}\,\Sigma_s(E' \to E,\mu_o) \qquad \text{(II.1.9)}$$

será simétrico se $\Sigma_s(E' \to E,\mu_o)$ satisfazer o Princípio do Balanço Detalhado.

Expandindo-se o núcleo de espalhamento em esféricas harmônicas:

$$\Sigma_{ss}(E' \to E,\mu_o) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{2p+1}{2} P_p(\mu_o)\,\Sigma_{ss}^p(E' \to E) \qquad \text{(II.1.10)}$$

onde $P_p(\mu_o)$ são polinômios de Legendre (Apêndice A1) e substituindo (II.1.10) em (II.1.8), tem-se

$$\mu \frac{\partial}{\partial x}\psi(x,E,\mu) + \Sigma(E)\,\psi(x,E,\mu) = \qquad \text{(II.1.11)}$$

$$\sum_{p=o}^{\infty} \frac{2p+1}{2}\ \frac{1}{2\pi}\ \int_0^\infty dE'\,\Sigma_{ss}^p(E' \to E) \int_{4\pi} d\Omega'\ P_p(\mu_o)\ \psi(x,E',\mu')$$

Utilizando o teorema da adição dos polinômios de Legendre, relação (A1.8), e fazendo a integração do terceiro termo, obtém-se:

$$\sum_{p=o}^{\infty} \frac{2p+1}{4\pi} \int_{o}^{\infty} dE' \sum_{ss}^{p}(E' \to E) \int_{4\pi} d\Omega' \; P_p(\mu_o)\, \psi(x,E',\mu') =$$

$$\sum_{p=o}^{\infty} \frac{2p+1}{4} \int_{o}^{\infty} dE' \sum_{ss}^{p}(E' \to E) \left\{ \int_{-1}^{1} d\mu' \; \psi(x,E',\mu') \; P_p(\mu) \; P_p(\mu') \int_{0}^{2\pi} d\Phi' + \right.$$

$$\left. 2\sum_{m=1}^{p} \frac{(p-m)!}{(p+m)!} \int_{-1}^{1} d\mu' \; \psi(x,E',\mu') \; P_p^m(\mu) \; P_p^m(\mu') \int_{0}^{2\pi} \cos(m\,(\Phi-\Phi'))\; d\Phi' \right\}$$

onde a segunda integral em $d\Phi'$ se anula. A equação de Boltzmann para meio homogêneo e isotrópico, sem fontes, caso estacionário e geometria plana é, portanto,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,E,\mu) + \Sigma(E)\; \psi(x,E,\mu) = \qquad \text{(II.1.12)}$$

$$\sum_{p=o}^{\infty} \frac{2p+1}{2} \int_{o}^{\infty} dE' \sum_{ss}^{p}(E' \to E) \int_{-1}^{1} d\mu' \; \psi(x,E',\mu')\, P_p(\mu)\, P_p(\mu')$$

II.2. SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE BOLTZMANN PELO MÉTODO PEA(33).

A seguir será feita a aplicação do Método Polinomial Energético e Angular (PEA) à equação (II.1.12).

II.2.A.Dependência Energética - A utilização do desenvolvimento de $\psi(x,E,\mu)$ em polinômios da energia permite substituir a equação integro-diferencial (II.1.12) por um sistema integro-diferencial de equações independentes da energia.

O fluxo de neutrons será desenvolvido em série de polinômios

$$g_j(E) = \sqrt{M(E)}\; L_j^{(1)}(E) \qquad \text{(II.2.1)}$$

onde $L_j^{(1)}(E)$ são polinômios de Laguerre de 1º espécie, normalizados (Apêndice A2).

Como os $g_j(E)$ formam um conjunto completo e ortonormal de funções, faz-se

$$\psi(x,E,\mu) = \sum_{j=o}^{\infty} f_j(x,\mu)\, g_j(E) = \sqrt{M(E)} \sum_{j=o}^{\infty} f_j(x,\mu)\, L_j^{(1)}(E) \quad \text{(II.2.2)}$$

Substituindo-se (II.2.2) em (II.1.12), tem-se

$$\sum_{j=o}^{\infty} \mu \frac{\partial}{\partial x} f_j(x,\mu)\, g_j(E) + \Sigma(E) \sum_{j=o}^{\infty} f_j(x,\mu)\, g_j(E) =$$

(II.2.3)

$$\sum_{p=o}^{\infty} \frac{2p+1}{2} P_p(\mu) \sum_{j=o}^{\infty} \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{ss}^p(E' \to E)\, g_j(E') \int_{-1}^{1} f_j(x,\mu')\, P_p(\mu')\, d\mu'$$

Multiplicando-se (II.2.3) por $g_k(E)$ e integrando-se com relação a dE (de 0 a ∞), com a utilização da relação de ortogonalidade (A2.6), obtém-se :

$$\sum_{j=o}^{\infty} \mu \frac{\partial}{\partial x} f_j(x,\mu)\, \delta_{k,j} + \sum_{j=o}^{\infty} f_j(x,\mu) \int_0^{\infty} g_k(E)\, \Sigma(E)\, g_j(E) =$$

(II.2.4)

$$\sum_{p=o}^{\infty} \frac{2p+1}{2} P_p(\mu) \sum_{j=o}^{\infty} \int_0^{\infty} g_k(E)\, dE \int_0^{\infty} dE'\, g_j(E')\, \Sigma_{ss}^p(E' \to E) \int_{-1}^{1} d\mu'\, f_j(x,\mu')\, P_p(\mu')$$

Definindo: $V_{kj} = \int_0^{\infty} g_k(E)\, \Sigma(E)\, g_j(E)$ (II.2.5)

$$\alpha_{kj}^p = \int_0^{\infty} dE\, g_k(E) \int_0^{\infty} dE'\, g_j(E')\, \Sigma_{ss}^p(E' \to E) \quad \text{(II.2.6)}$$

e, notando que $V_{jk} = V_{kj}$ e $\alpha_{jk}^p = \alpha_{kj}^p$ porque o núcleo de espalhamento foi simetrizado, a equação (II.2.4) fica:

(II.2.7)

$$\sum_{j=o}^{\infty} \mu \frac{\partial}{\partial x} f_j(x,\mu)\, \delta_{k,j} + \sum_{j=o}^{\infty} V_{kj}\, f_j(x,\mu) = \sum_{p=o}^{\infty} \frac{2p+1}{2} P_p(\mu) \sum_{j=o}^{\infty} \alpha_{kj}^p \int_{-1}^{1} P_p(\mu')\, f_j(x,\mu')\, d\mu'$$

Truncando-se a série (II.2.1) de forma a manter apenas L + 1 termos, chega-se à chamada "Aproximação Energética de Ordem L". Com as matrizes abaixo definidas:

$[V]$ - Matriz quadrada, simétrica, de ordem L+1, de elementos V_{kj}

$[\alpha^p]$ - Matriz quadrada, simétrica, de ordem L+1, de elementos α^p_{kj}

$[I]$ - Matriz Identidade (diagonal), de elementos $\delta_{k,j}$ e ordem L+1

$|f(x,\mu)\rangle$ Vetor (Matriz coluna) de ordem L+1 e elementos $f_j(x,\mu)$, pode-se escrever (II.2.7) sob a forma matricial seguinte:

$$[I]\ \mu \frac{\partial}{\partial x}|f(x,\mu)\rangle + [V]\ |f(x,\mu)\rangle = \sum_{p=o}^{\infty} \frac{2p+1}{2} P_p(\mu) \int_{-1}^{1} P_p(\mu')\ [\alpha^p]\ |f(x,\mu')\rangle\ d\mu' \qquad \text{(II.2.8)}$$

II.2.B. Dependência Angular - Com o desenvolvimento da parte angular de $f_j(x,\mu)$ em esféricas harmônicas consegue-se transformar o sistema integro diferencial (II.2.8) em um sistema de equações diferenciais. Fazendo

$$f_j(x,\mu) = \sum_{m=o}^{\infty} \frac{2m+1}{2}\ A^m_j(x)\ P_m(\mu) \qquad \text{(II.2.9)}$$

tem-se:

$$|f(x,\mu)\rangle = \sum_{m=o}^{\infty} \frac{2m+1}{2}\ |A^m(x)\rangle P_m(\mu) \qquad \text{(II.2.10)}$$

Substituindo (II.2.10) em (II.2.8), multiplicando por $P_n(\mu)$, integrando com relação a $d\mu$ e usando a relação de ortogonalidade (A1.9), tem-se, termo a termo:

<u>1º termo</u>

$$\sum_{m=o}^{\infty} \frac{2m+1}{2} \frac{d}{dx}\ |A^m(x)\rangle \int_{-1}^{1} P_m(\mu)\ \mu\ P_n(\mu)\ d\mu$$

Utilizando a relação (A1.6), tem-se:

$$\sum_{m=o}^{\infty} \frac{2m+1}{2} \frac{d}{dx}|A^m(x)\rangle \frac{1}{2n+1} \{n \int_{-1}^{1} P_m(\mu)\ P_{n-1}(\mu)\ d\mu + (n+1) \int_{-1}^{1} P_m(\mu)\ P_{n+1}(\mu)\ d\mu\}$$

$$= \frac{n}{2n+1}\frac{d}{dx}|A^{n-1}(x)> + \frac{(n+1)}{2n+1}\frac{d}{dx}|A^{n+1}(x)>$$

<u>2º termo</u> $\sum_{m=o}^{\infty}\frac{2m+1}{2}[V]\,|A^m(x)>\int_{-1}^{1}P_m(\mu)\,P_n(\mu)\,d\mu = [V]\,|A^n(x)>$

<u>3º termo</u> $\sum_{p=o}^{\infty}\sum_{m=o}^{\infty}\frac{2p+1}{2}\frac{2m+1}{2}[\alpha^p]|A^m(x)>\int_{-1}^{1}P_p(\mu')\,P_m(\mu')\,d\mu'\int_{-1}^{1}P_p(\mu)\,P_n(\mu)\,d\mu$

$$=[\alpha^n]\,|A^n(x)>$$

O sistema (II.2.8) fica : (II.2.11)

$$(n+1)\frac{d}{dx}|A^{n+1}(x)> + n\frac{d}{dx}|A^{n-1}(x)> + (2n+1)[V]|A^n(x)> = (2n+1)[\alpha^n]|A^n(x)>$$

para $n = 0,1,2, \ldots\ldots, \infty$

Neste trabalho serão considerados os espalhamentos isotrópico e linearmente anisotrópico, isto é, a série (II.1.10) será truncada para p = 0 e p = 1 respectivamente; só existirão no caso linearmente anisotrópico as matrizes $[\alpha^o]$ e $[\alpha^1]$, e no caso isotrópico considerar-se-á a matriz $[\alpha^1] = [0]$.

Se a série (II.2.9) for truncada para n = N tem-se a chamada " Aproximação Angular de Ordem N" e ignorando-se $|A^n(x)>$ para $n<0$ e para $n>N$ o sistema (II.2.11) fica:

$$\frac{d}{dx}|A^1(x)> + \left[[V] - [\alpha^o]\right]\,|A^o(x)> = 0$$

$$(n+1)\frac{d}{dx}|A^{n+1}(x)> + n\frac{d}{dx}|A^{n-1}(x)> + (2n+1)\left[[V] - [\alpha^n]\delta_{n,1}\right]|A^n(x)> = 0$$

$n=1,2, \ldots\ldots\ldots (N-1)$

$$N\frac{d}{dx}|A^{N-1}(x)> + (2N+1)\,[V]|A^N(x)> = 0 \qquad \text{(II.2.12)}$$

II.2.C. Dependência Espacial - Considerando a invariança translacional do sistema, utiliza-se uma solução tentativa

para a dependência espacial com a finalidade de transformar o sistema de equações diferenciais (II.2.12) em um sistema de equações algébricas. Seja

$$|A^n(x)> = \exp(-x/\nu)\ |A^n(\nu)> \qquad \text{(II.2.13)}$$

que, substituida em (II.2.12), dá

$$|A^1(\nu)> - \nu\left[\,[V] - [\alpha^o]\,\right]\ |A^o(\nu)> = 0$$

$$(n+1)\,|A^{n+1}(\nu)> + n\,|A^{n-1}(\nu)> - (2n+1)\,\nu\left[[V] - [\alpha^n]\delta_{n,1}\right]\,|A^n(\nu)> = 0$$

$$n = 1,2,\ldots\ldots(N-1)$$

$$N\,|A^{N-1}(\nu)> - (2N+1)\,\nu\,[V]\,|A^n(\nu)> = 0 \qquad \text{(II.2.14)}$$

A solução deste sistema homogêneo envolve a determinação das raízes de um determinante de ordem (L+1) (N+1), ou seja, o cálculo de um determinante com $(\,(L+1)\,(N+1)\,)^2$ elementos.

Esta solução é ainda dificultada pelo acoplamento das equações devido ao fato de as matrizes $[V]$, $[\alpha^o]$ e $[\alpha^1]$ não serem diagonais. Como é impossível diagonalizar as três matrizes simultaneamente e ainda preservar o caráter diagonal de $[I]$ escolhe-se, para ser diagonalizada, a matriz $[V]$ porque esta acopla as componentes de todos os vetores $|A^n(\nu)>$ enquanto que $[\alpha^o]$ e $[\alpha^1]$ acoplam apenas as componentes dos vetores $|A^o(\nu)>$ e $|A^1(\nu)>$.

Como $[V]$ é simétrica, existe uma matriz ortogonal $[S]$ tal que

$$[S^{-1}]\ [V]\ [S] = [U] \qquad \text{(II.2.15)}$$

onde $[U]$ é diagonal; consequentemente tem-se

$$[S^{-1}]\ [\alpha^n]\ [S] = [\gamma^n]$$

onde as matrizes $[\gamma^n]$ ainda são simétricas e faz-se

$$[S^{-1}]\ |A^n(\nu)> = |B^n(\nu)>$$

o que transforma o sistema (II.2.14) no sistema

$$|B^1(\nu)> - \left[[\nu U] - [\nu\gamma^o] \right] | B^o(\nu) > = 0$$

$$(n+1)\ |B^{n+1}(\nu)> + n|B^{n-1}(\nu)> - (2n+1)\left[[\nu U] - [\nu\gamma^n]\delta_{n,1}\right]|B^n(\nu)> = 0$$

$$n = 1,2,.....(N-1)$$

$$N|B^{N-1}(\nu)> - (2N+1)\ [\nu U]\ |B^N(\nu)> = 0 \qquad \text{(II.2.16)}$$

Para que o sistema homogêneo tenha solução não trivial, deve-se ter o determinante dos coeficientes nulo. Esta condição determina os valores possíveis de ν, até o momento considerado como um parâmetro arbitrário. Esta condição no entanto é pouco prática e se for acrescentado o termo $(N+1)\ |B^{N+1}(\nu)>$ na última equação do sistema (II.2.16) tem-se

$$(n+1)\ |B^{n+1}(\nu)> + n\ |B^{n-1}(\nu)> - (2n+1)\left[[\nu U] - [\nu\gamma^n](\delta_{n,o}+\delta_{n,1})\right]|B^n(\nu)>=0$$

$$n = 1,2, ...N$$

(II.2.17)

e, se for adicionada a condição

$$|B^{N+1}(\nu)> = 0 \qquad \text{(II.2.18)}$$

tem-se novamente o sistema (II.2.16).

Se for possível construir uma solução para (II.2.17), sem impor restrições sobre ν, então a equação (II.2.18) determinará os valores de ν para os quais o sistema (II.2.16) admite solução não trivial.

A equivalência entre a relação (II.2.18) e a condição de anulamento do determinante do sistema (II.2.16) foi aprovada para o caso monoenergético(05).

A solução do sistema (II.2.16) foi encontrada (Apêndice B) com a utilização do método proposto por Travelli (34) e é a seguinte:

$$|B^n(\nu)> = \{ P_n([\nu U])\ \{ [I] + 3\ [\nu\gamma^1]\left[[\nu U] - [\nu\gamma^o]\right]\} \qquad \text{(II.2.19)}$$

$$- W_{n-1}([\nu U])\ \{ [\nu\gamma^o] + 3[\nu U]\ [\nu\gamma^1]\ ([\nu U] - [\nu\gamma^o])\}\}|B^o(\nu)>$$

Com ν determinado por (II.2.18) e $|B^o(\nu)>$ pela solução do sistema

$$\{P_{N+1}([\nu U])\left[[I] + 3[\nu\gamma^1]([\nu U] - [\nu\gamma^o])\right] + \qquad \text{(II.2.20)}$$

$$- W_N([\nu U])\left[[\nu\gamma^o] + 3[\nu U][\nu\gamma^1]([\nu U] - [\nu\gamma^o])\right]\} |B^o(\nu)> = 0$$

Convém notar que, quando são consideradas aproximações impares para a dependência angular, os auto-valores ν_s aparecem aos pares e a solução geral da equação de Bolzmann que se obtém para uma dada ordem de aproximação (N,L) com N impar e L qualquer, devido à linearidade da equação (II.1.5) é dada por:

$$\phi(x,E,\mu) = M(E) \sum_{j=o}^{L} L_j^{(1)}(E) \sum_{n=o}^{N} \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) \sum_{s=1}^{(1/2)(N+1)(L+1)} \{C_s^+ A_j^n(\nu_s)\, e^{-x/\nu_s} + C_s^- A_j^n(-\nu_s)\, e^{x/\nu_s}\}$$

(II.2.21)

com $|A^n(\nu_s)> = [S]\,|B^n(\nu_s)>$ e com os $|B^n(\nu_s)>$ dados por (II.2.19).

II.3. O PROBLEMA DE MILNE - APLICAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO

A relação (II.2.21) é a solução geral da equação de Boltzmann para geometria plana, caso estacionário, e o fluxo para o problema de Milne é obtido a partir desta relação com a determinação das constantes C_s^+ e C_s^- (s = 1,2 ..... (1/2)(N+1)(L+1)}pela aplicação das condições de contorno.

Como já foi mencionado, o Problema de Milne consiste na determinação do fluxo de neutrons, em um semi-espaço infinito, fluxo este estabelecido por uma fonte no infinito e as condições de contorno usualmente empregadas serão aplicadas à relação (II.2.21) a seguir.

II.3.A. Condição de Contorno Longe da Fronteira - Para pontos situados longe da fronteira meio - vácuo, mas também longe da fonte, a distribuição de neutrons deve ser igual à de uma fonte plana colocada em um meio infinito, isto é, a solução cai exponencialmente com comprimento de relaxação ν_1 quando se afasta da fonte,

onde ν_1 é a maior raiz da equação (II.2.18). Portanto, todas as constantes C_s^- para s = 2,3,.... (1/2)(N+1)(L+1) devem ser nulas, restando apenas a contribuição da menor exponencial positiva e a constante C_1^- será determinada pela característica da fonte no infinito. Portanto, tem-se

$$\lim_{x \text{ gde}} \phi(x,E,\mu) = \sqrt{M(E)} \left\{ \sum_{n=o}^{N} \sum_{j=o}^{L} C_1^- A_j^n(-\nu_1)\, e^{x/\nu_1} \frac{2n+1}{2} P_n(\mu)\, g_j(E) \right\} \quad \text{(II.3.1)}$$

onde ν_1 é a maior raiz da equação (II.2.18).

Neste trabalho será feito $C_1^- = 1$, a fim de facilitar a comparação com os resultados da referência (04).

Portanto a condição de contorno (II.3.1) fornece $C_2^- = C_3^- = \ldots\ldots = C_s^- = 0$ com s = (1/2)(N+1)(L+1).

II.3.B. Condição de Contorno na Interface (x=0) = Os neutrons que saem do meio não retornam, ou seja, não há corrente de neutrons do vácuo para o meio.

A condição de contorno exata para o caso é: $\phi(0,E,\mu) = 0$ para $\mu>0$ (II.3.2)

Esta equação, na realidade, constitui um conjunto infinito de condições de contorno, não poderá ser satisfeita em uma aproximação de ordem finita. Em uma aproximação angular de ordem N(impar) finita só poderão ser impostas (1/2)(N+1) condições e costuma-se escolher (1/2)(N+1) valores arbitrários de μ positivos que satisfaçam a relação (II.3.2). Será utilizada a condição de Mark (09), para facilitar a comparação com a referência (04).

A condição de Mark (09) foi deduzida supondo o vácuo como um meio absorvedor puro, tratando a superfície como a interface entre dois meios e impondo condições de continuidade. Prova-se que esta condição é equivalente à (II.3.2) com os valores de μ positivos dados por

$$P_{N+1}(\mu_i) = 0 \qquad \text{com } i = 1,2,\ldots(1/2)(N+1) \qquad \text{(II.3.3)}$$

Considerando a condição de contorno (II.3.2) para μ_i dado por (II.3.3), ou

seja, raizes do polinômio de Legendre de grau N+1, tem-se

$$\phi(0,E,\mu) = \sqrt{M(E)} \sum_{n=o}^{N} \sum_{j=o}^{L} \left\{ \sum_{s=1}^{(1/2)(L+1)(N+1)} \left[C_s^+ A_j^n (\nu_s) \right] + C_1^- \cdot A_j^n (-\nu_1) \right\} \cdot$$

$$\cdot \frac{2n+1}{2} P_n(\mu_i) \; g_j(E) = 0 \qquad \text{(II.3.4)}$$

Multiplicando (II.3.4) por $g_k(E)$ e utilizando a condição de ortogonalidade dos polinômios de Laguerre (A2.6), tem-se

$$\sum_{n=o}^{N} \sum_{j=o}^{L} \left\{ \sum_{s=1}^{(1/2)(N+1)(L+1)} \left[C_s^+ A_j^n (\nu_s) \right] \delta_{j,k} + C_1^- A_j^n(-\nu_1) \delta_{j,k} \right\} P_n(\mu_i) \frac{2n+1}{2} = 0$$

$$\text{com} \quad i = 1,2,\ldots\ldots,(1/2)(N+1) \qquad \text{(II.3.5)}$$

Como só aparecem os termos j = k na somatória e como $C_1^- = 1$ a relação (II. 3.5) fica

$$\sum_{n=o}^{N} \left\{ \sum_{s=1}^{(1/2)(N+1)(L+1)} \left[C_s^+ A_k^n (\nu_s) \right] + A_k^n(-\nu_1) \right\} \frac{2n+1}{2} P_n(\mu_i) = 0 \qquad \text{(II.3.6)}$$

$$\text{com} \quad i = 1,2,\ldots\ldots\ldots (1/2)(N+1) \qquad\qquad k = 0,1,\ldots\ldots\ldots,L$$

Para cada μ_i tem-se um sistema de (L+1) equações e (1/2)(N+1)(L+1) incógnitas e portanto para todos os valores de μ_i tem-se um sistema com (1/2) (N+1)(L+1) equações e (1/2)(N+1)(L+1) incógnitas.

Com ν_s determinados com a utilização de (II.2.18) e (II.2.19), ou seja, a solução do determinante

$$\left| P_{N+1}([\nu U]) \left[[I] + 3 [\nu Y^1] \{ [\nu U] - [\nu Y^o] \} \right] - W_N([\nu U]) \left[[\nu Y^o] + \right. \right.$$

$$\left. \left. + 3 [\nu U] [\nu Y^1] \{ [\nu U] - [\nu Y^o] \} \right] \right| = 0 \,,$$

as constantes C_s^+ determinadas pela solução de (II.3.6), com $A_j^n(\nu_s)$ dados por

$$|A^n(\nu_s)\rangle = [S] \; |B^n(\nu_s)\rangle,$$

$$\text{com } |B^n(\nu_s)> = \{P_n([\nu U])\{[I] + 3[\nu\gamma^1]\left[[\nu U] - [\nu\gamma^0]\right]\} + +$$

$$- W_{n-1}([\nu U])\{[\nu\gamma^0] + 3[\nu U][\nu\gamma^1]\left[[\nu U] - [\nu\gamma^0]\right]\}\} |B^0(\nu_s)>$$

e com $|B^0(\nu_s)>$ dado pela solução do sistema (II.2.20), o Problema de Milne está totalmente resolvido e a expressão analítica para o fluxo de neutrons é

$$\phi(x,E,\mu) = \sqrt{M(E)} \sum_{n=o}^{N} \sum_{j=o}^{L} \{ \sum_{s=1}^{(1/2)(N+1)(L+1)} \left[C_s^+ A_j^n(\nu_s)\, e^{-x/\nu_s} \right] +$$

$$+ A_j^n(-\nu_1)\, e^{x/\nu_1} \}\, \frac{2n+1}{2}\, P_n(\mu)\, g_j(E) \qquad \text{(II.3.7)}$$

II.4. CÁLCULO DA DISTÂNCIA EXTRAPOLADA

O fluxo de neutrons, relação (II.3.7) pode ser considerado como a soma de

$$\phi(x,E,\mu) = \phi_{tr}(x,E,\mu) + \phi_{as}(x,E,\mu) \qquad \text{(II.4.1)}$$

onde $\phi_{as}(x,E,\mu)$ é a solução obtida apenas das exponenciais correspondentes ao maior auto valor $\pm\nu_1$. Esta solução domina na região longe da fronteira e é chamada solução assintótica.

$\phi_{tr}(x,E,\mu)$ é a soma das contribuições dos termos exponenciais correspondentes aos demais auto valores ν_s para $s = 2,3,.....(1/2)(N+1)(L+1)$. É chamada solução transiente e representa essencialmente a influência da fronteira. Estes termos decaem com o aumento de x de modo que no interior do meio a solução da equação de transporte é o fluxo assintótico.

A distância extrapolada é definida como a distância na qual o prolongamento analítico do fluxo assintótico integrado com relação a E e μ e, assim dependente somente de x, se anula. De (II.3.7) e (II.4.1) tem-se que o fluxo assintótico é dado por

$$\phi_{as}(x,E,\mu) = \sqrt{M(E)} \sum_{n=o}^{N} \sum_{j=o}^{L} \frac{2n+1}{2} \left[C_1^+ A_j^n(\nu_1)\, e^{-x/\nu_1} + A_j^n(-\nu_1)\, e^{x/\nu_1} \right] g_j(E)\, P_n(\mu) \qquad \text{(II.4.2)}$$

Integrando-se a relação (II.4.2) com relação as variáveis angular e energética, obtém-se, usando a relação (A2.6); (II.4.3)

$$\phi_{as}(x,\mu) = \int_0^\infty \phi_{as}(x,E,\mu)\, dE = \sum_{n=o}^{N} \left\{ C_1^+ A_o^n(\nu_1)\, e^{-x/\nu_1} + A_o^n(-\nu_1)\, e^{x/\nu_1} \right\} \frac{2n+1}{2}\, P_n(\mu)$$

e usando a relação (A1.9), tem-se

$$\phi_{as}(x) = \int_{-1}^{1} \phi_{as}(x,\mu)\, d\mu = C_1^+ A_o^o(\nu_1)\, e^{-x/\nu_1} + A_o^o(-\nu_1)\, e^{x/\nu_1} \qquad \text{(II.4.4)}$$

Para z_o tal que $\phi_{as}(z_o) = 0$ e uma vez que, como pode ser facilmente demonstrado $A_o^o(\nu_1) = A_o^o(-\nu_1)$, a relação (II.4.4) fica

$$C_1^+ \exp(z_o/\nu_1) + \exp(-z_o/\nu_1) = 0$$

e, portanto

$$C_1^+ = - \exp(-2z_o/\nu_1)$$

a distância extrapolada é dada por

$$z_o = -(\nu_1/2) \ln(-C_1^+) \qquad \text{(II.4.5)}$$

Como para cada ordem de aproximação L e N têm-se valores diferentes de ν_1 e de C_1^+, a distância extrapolada assumirá valores diferentes em cada caso.

CAPÍTULO III

MODELOS DE ESPALHAMENTO E ABSORÇÃO E CÁLCULO DAS MATRIZES $[V]$, $[\alpha^0]$ E $[\alpha^1]$

III.1. MODELOS DE ABSORÇÃO E ESPALHAMENTO

Para que seja possível a obtenção de resultados numéricos tem-se que conhecer as leis de variação da absorção e espalhamento dos neutrons no meio considerado. Foram escolhidas:

III.1.A. Absorção - A secção de choque de absorção segue a lei 1/v:

$$\sum_a(E) = \overline{\sum}_a/v = \overline{\sum}_a/\sqrt{E} \qquad \text{(III.1.1)}$$

onde $\overline{\sum}_a$ é a secção de choque de absorção para E = 1KT

E é a energia do neutron em unidades de KT.

III.1.B. Espalhamento - Para descrever os espalhamentos dos neutrons no meio foi escolhido o núcleo de espalhamento do Gás Livre que, expandindo em série de 1/A (A é a relação massa de átomos do meio para massa do neutron) e conservados apenas os dois primeiros termos, dá origem ao chamado Modelo do Gás Pesado (37).

Não tendo sido possível obter a referência (37), o núcleo de espalhamento do Gás Pesado será aqui obtido a partir da secção de choque de transferência do Gás Monoatômico conforme é feito na referência (40). A forma analítica da secção de choque de transferência de energia para neutrons espalhados por um gás monoatômico é dada por (40):

$$\sum_s (E' \to E, \mu_o) = \frac{\sum_b}{4\pi} \sqrt{\frac{E}{E'}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \, \exp(-it(E'-E)) \exp\left[(1/A)(E'+E-2\sqrt{E'E}\,\mu_o)(it - t^2)\right] \quad \text{(III.1.2)}$$

onde $\sum_b$ é a secção de choque de espalhamento do átomo ligado

A é a relação (massa dos átomos do meio) / (massa do neutron)

E é a energia do neutron em unidades de KT.

Definindo $F^2 = (E' + E - 2\sqrt{EE'}\,\mu_o)$ (III.1.3)

e expandindo a exponencial em série de potências de 1/A, obtém-se

$$\exp(-(F^2/A)(t^2-it)) = \sum_{n=o}^{\infty} \frac{(-F^2)^n}{n!} \frac{(t^2-it)^n}{A^n} \quad \text{(III.1.4)}$$

Supondo o moderador como um gás pesado (A>>1) e conservando apenas os dois primeiros termos da expansão, tem-se

$$\sum_s (E' \to E, \mu_o) = \frac{\sum_b}{4} \sqrt{\frac{E}{E'}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \, \exp(-it(E' - E)) \left[1 - \frac{F^2}{A}(t^2-it)\right] \quad \text{(III.1.5)}$$

ou $$\sum_s (E' \to E, \mu_o) = \frac{\sum_b}{4\pi} \sqrt{\frac{E}{E'}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\exp(it(E-E')) - \frac{(Ft)^2}{A} \exp(it(E-E')) + \right.$$

$$\left. + \frac{itF^2}{A} \exp(it(E-E'))\right] dt \quad \text{(III.1.6)}$$

Utilizando a definição da função Delta de Dirac (Apêndice A3) e as propriedades (A3.6), (A3.7) e (A3.10) pode-se integrar a relação (III.1.6) e obter

$$\sum_s (E \to E, \mu_o) = \frac{\sum_b}{2} \sqrt{\frac{E}{E'}} \left\{\delta(E'-E) + \frac{F^2}{A}\left[\delta^{(2)}(E'-E) - \delta^{(1)}(E'-E)\right]\right\} \quad \text{(III.1.7)}$$

onde $\delta^{(n)}(E'-E)$ é a derivada n-ésima da função Delta de Dirac com relação a E'.

Convém notar que uma restrição deste modelo de espalhamento é o fato de não levar em consideração o efeito de ligações químicas entre moléculas do meio.

Expande-se agora $\sum_s(E' \to E, \mu_o)$ em série de polinômios de Legendre

$$\sum_s(E' \to E, \mu_o) = \sum_{n=o}^{\infty} \frac{2n+1}{2} \sum_s^n (E' \to E)\, P_n(\mu_o) \qquad \text{(III.1.8)}$$

notando-se que, no caso do espalhamento linearmente anisotrópico que será aqui tratado, são necessários apenas os dois primeiros termos desta expansão, ou seja, as componentes $\sum_s^o(E' \to E)$ e $\sum_s^1(E' \to E)$. Estas componentes serão obtidas a partir da expressão geral:

$$\sum_s^n (E' \to E) = \frac{1}{2\pi} \int_{4\pi} \sum_s(E \hookrightarrow E, \mu_o)\, P_n(\mu_o)\, d\Omega \qquad \text{(III.1.9)}$$

A. Expressão Analítica para $\sum_s^o (E' \to E)$ - a partir das relações (III.1.9) e (III.1.7) tem-se

$$\sum_s^o (E' \to E) = \frac{\sum_b}{2} \sqrt{\frac{E}{E'}} \int_{-1}^{1} d\mu_o \left\{\delta(E'-E) + \frac{F^2}{A}\left[\delta^{(2)}(E'-E) - \delta^{(1)}(E'-E)\right]\right\} P_o(\mu_o)$$

(III.1.10)

e utilizando (III.1.3) e (A3.6):

$$\sum_s^o (E' \to E) = \sum_b \sqrt{\frac{E}{E'}} \left\{\delta(E'-E) + \frac{(E'+E)}{A}\left[\delta^{(2)}(E'-E) - \delta^{(1)}(E'-E)\right]\right\}$$

(III.1.11)

B. Expressão Analítica para $\sum_s^1 (E' \to E)$ - das relações (II.1.9) e (III.1.7) tem-se

$$\sum_s^1 (E' \to E) = \frac{\sum_b}{2} \sqrt{\frac{E}{E'}} \int_{-1}^{1} \left\{\delta(E'-E) + \frac{F^2}{A}\left[\delta^{(2)}(E'-E) - \delta^{(1)}(E'-E)\right]\right\} P_1(\mu_o)\, d\mu_o$$

(III.1.12)

Integrando com relação a $d\mu_o$, utilizando (III.1.3) e (A3.6), tem-se:

$$\sum_s^1 (E' \to E) = -\frac{2}{3A} \sum_b E\left[\delta^{(2)}(E'-E) - \delta^{(1)}(E'-E)\right] \qquad \text{(III.1.13)}$$

C. Expressão Analítica para $\Sigma_s(E)$ - integrando a relação (III.1.8) vem

$$\Sigma_s(E) = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty dE' \int_{4\pi} \Sigma_s(E\to E', \mu_o)\, d\Omega = \int_0^\infty \Sigma_s^o(E\to E')\, dE'$$

$$\Sigma_s(E) = \Sigma_b \int_0^\infty dE' \sqrt{\frac{E'}{E}} \left\{\delta(E'-E) + \frac{(E'+E)}{A}\left[\delta^{(2)}(E'-E) + \delta^{(1)}(E'-E)\right]\right\} \quad \text{(III.1.14)}$$

Utilizando a relação (A3.6) tem-se

$$\Sigma_s(E) = \Sigma_b \left\{\sqrt{\frac{E'}{E}} + \frac{1}{A}\left[\frac{\partial^2}{\partial E'^2}\left\{\sqrt{\frac{E'}{E}}\,(E'+E)\right\} - \frac{\partial}{\partial E'}\left\{\sqrt{\frac{E'}{E}}\,(E'+E)\right\}\right]\right\}$$

para $E'=E$

e portanto

$$\Sigma_s(E) = \Sigma_b\,(1 - 2/A + 1/(2AE)) \quad \text{(III.1.15)}$$

Para facilitar a comparação de resultados com o trabalho de Cintra (04), convém colocar a relação (III.1.15) em função da secção de choque do átomo livre e para isto será utilizada a relação

$$\Sigma_b = \left[\frac{A+1}{A}\right]^2 \Sigma_f = \left[1 + 1/A\right]^2 \Sigma_f \quad \text{(III.1.16)}$$

que, expandida em 1/A e conservados apenas os termos da ordem de 1/A, fica:

$$\Sigma_b = [1 + 2/A]\,\Sigma_f \quad \text{(III.1.17)}$$

Substituindo-se (III.1.17) em (III.1.15) e eliminando os termos de segunda ordem em 1/A, obtém-se

$$\Sigma_s(E) = \Sigma_f\,(1 + 1/(2AE)) \quad \text{(III.1.18)}$$

III.2. CÁLCULO DOS ELEMENTOS DE MATRIZ

III.2.A. Matriz [V]- Com a secção de choque total dada por (II.1.4) e considerando (III.1.1) e (III.1.18) tem-se

$$\sum(E) = \sum_a(E) + \sum_s(E) = \overline{\sum}_a / \sqrt{E} + \sum_f (1 + 1/(2AE)). \quad \text{(III.2.1)}$$

Definindo $\varepsilon = \overline{\sum}_a / \sum_f$, a relação anterior fica

$$\sum(E) = \sum_f \{\varepsilon / \sqrt{E} + (1 + 1/(2AE))\} \quad \text{(III.2.2)}$$

Substituindo (III.2.2) em (II.2.5) tem-se

$$V_{ij} = \sum_f \int_0^\infty E\, e^{-E}\, L_i^{(1)}(E)\, L_j^{(1)}(E) \left[\frac{\varepsilon}{\sqrt{E}} + 1 + \frac{1}{2AE}\right] dE \quad \text{(III.2.3)}$$

Integrando e utilizando as propriedades de ortogonalidade dos polinômios de Laguerre (A2.6), obtém-se

$$V_{ij} = \sum_f \{\delta_{i,j} + \int_0^\infty [\varepsilon\sqrt{E} + 1/(2A)]\, e^{-E}\, L_i^{(1)}(E)\, L_j^{(1)}(E)\, dE\} \quad \text{(III.2.4)}$$

III.2.B. Matrizes $[\alpha^n]$ - Os elementos das matrizes $[\alpha^n]$ são dados por (II.2.6), ou seja

$$\alpha_{ij}^n = \int_0^\infty dE\, g_i(E) \int_0^\infty dE'\, g_j(E')\, \Sigma_{ss}^n(E' \to E) \quad \text{(III.2.5)}$$

Segundo Williams (40): "É difícil dizer se o núcleo de espalhamento do Gás Pesado satisfaz o Princípio do Balanço Detalhado mas como ele prediz a Maxwelliana como solução do meio infinito, sem absorção e sem fontes pode-se assumir que sim". De fato, usando a relação (II.1.9) e os momentos do núcleo de espalhamento dados por (III.1.11) e (III.1.13) obtém-se que as matrizes $[\alpha^o]$ e $[\alpha^1]$ são simétricas, o que prova, indiretamente, que o núcleo de espalhamento satisfaz o Princípio do Balanço Detalhado.

A. <u>Elementos da Matriz</u> $[\alpha^o]$ - são obtidos a partir da relação (II.2.6) ou seja

$$\alpha_{ij}^o = \sum_b \int_0^\infty dE\, L_i^{(1)}(E) \int_0^\infty dE'\, L_j^{(1)}(E')\, \sqrt{EE'}\, e^{-E'} \{\delta(E'-E) + (E'+E)/A) \left[\delta^{(2)}(E'-E) - \delta^{(1)}(E'-E)\right]\} \quad \text{(III.2.6)}$$

Integrando em relação a dE' obtém-se, termo a termo,

1ºtermo - utilizando a relação (A3.6)

$$\sum_b \int_0^\infty e^{-E'} (E'E)^{1/2} L_j^{(1)}(E') \, \delta(E'-E) \, dE' = \sum_b E \, e^{-E} L_j^{(1)}(E)$$

2ºtermo - $\frac{\sum_b}{A} \int_0^\infty dE' \; L_j^{(1)}(E') \; (EE')^{1/2} \; e^{-E'} \; \delta^{(2)}(E'-E)(E+E')$

$$= \frac{\sum_b}{A} e^{-E} \{ L_j^{(1)}(E) \left[2E^2 - 4E + 1/2 \right] + \frac{d}{dE'} L_j^{(1)}(E') \Big|_{E'=E} (1-E)4E + 2E^2 \frac{d^2}{dE'^2} L_j^{(1)}(E') \Big|_{E'=E} \}$$

3ºtermo - $(-1) \frac{\sum_b}{A} \int_0^\infty dE' \; L_j^{(1)}(E') \; (EE')^{1/2} \; (E+E') \; e^{-E'} \; \delta^{(1)}(E'-E)$

$$= \frac{\sum_b}{A} \; e^{-E} \; \{ \; L_j^{(1)}(E) \; 2E(1-E) + 2E^2 \frac{d}{dE'} \; L_j^{(1)}(E') \Big|_{E'=E} \; \}$$

Grupando os termos e usando a equação diferencial dos polinômios de Laguerre (A2.4) a relação (III.2.6) fica

$$\alpha_{ij}^o = \sum_b \int_0^\infty dE \; L_i^{(1)}(E) \; L_j^{(1)}(E) \; e^{-E} \left[E \; (1-2(j+1)/A) + 1/(2A) \right]$$

que integrada com relação a E fica

$$\alpha_{ij}^o = \sum_b \; \{ \delta_{i,j} \; (1-2(j+1)/A) + 1/(2A) \int_0^\infty dE \; L_i^{(1)}(E) \; L_j^{(1)}(E) \; e^{-E} \} \quad \text{(III.2.7)}$$

Colocando α_{ij}^o em termos da secção de choque do átomo livre e eliminando os termos de segunda ordem em 1/A tem-se

$$\alpha_{ij}^o = \sum_f \; \{ \delta_{i,j} \; (1-2j/A) + 1/2A \int_0^\infty dE \; L_i^{(1)}(E) \; L_j^{(1)}(E) \; e^{-E} \} \quad \text{(III.2.8)}$$

onde $0 \leqslant i,j \leqslant L$ = ordem de aproximação energética.

B . Elementos da Matriz $[\alpha^1]$- são calculados a partir de (II.2.6) com

(III.1.13).

$$\alpha^1_{ij} = -\frac{2\sum_b}{3A}\int_0^\infty dE\ L_i^{(1)}(E)\ E\int_0^\infty dE'\ E'\ L_j^{(1)}(E')\ e^{-E'}\left[\delta^{(2)}(E'-E)-\delta^{(1)}(E'-E)\right] \quad \text{(III.2.9)}$$

Integrando com relação a dE', tem-se

$$\underline{1^{\circ}\text{termo}}\quad \int_0^\infty dE'\ E'\ L_j^{(1)}(E')\ e^{-E'}\ \delta^{(2)}(E'-E)$$

$$= e^{-E}\left\{(E-2)\ L_j^{(1)}(E) + 2(1-E)\frac{d}{dE'}\ L_j^{(1)}(E')\Big|_{E'=E} + E\frac{d^2}{dE'^2}\ L_j^{(1)}(E')\Big|_{E'=E}\right\}$$

$$\underline{2^{\circ}\text{termo}}\quad (-1)\int_0^\infty dE'\ E'\ L_j^{(1)}(E')\ e^{-E'}\ \delta^{(1)}(E'-E) =$$

$$= e^{-E}\left\{E\frac{d}{dE'}\ L_j^{(1)}(E')\Big|_{E'=E} + (1-E)\ L_j^{(1)}(E)\right\}$$

E, usando a equação diferencial dos polinômios de Laguerre, (A2.4), tem-se

$$\alpha^1_{ij} = \frac{2\sum_b}{3A}\int_0^\infty dE\ L_i^{(1)}(E)\ E\ e^{-E}(1+j)\ L_j^{(1)}(E)$$

que integrada com relação a dE fica

$$\alpha^1_{ij} = \frac{2\sum_b}{3A}(j+1)\ \delta_{i,j} \quad \text{(III.2.10)}$$

E, em termos da secção de choque do átomo livre, os elementos da matriz $[\alpha^1]$ ficam

$$\alpha^1_{ij} = \frac{2}{3A}\sum_f (j+1)\ \delta_{i,j} \quad \text{(III.2.11)}$$

onde $0 \leqslant i,j < L$ = ordem de aproximação energética.

Ficam, assim, obtidos explicitamente todos os elementos de matriz $[V]$, $[\alpha^0]$

e $[\alpha^1]$ e a solução do problema de Milne pode ser obtida conforme foi indicado no parágrafo II.3.B.

CAPÍTULO IV

PROGRAMAS E SUB-PROGRAMAS UTILIZADOS NA RESOLUÇÃO DO PROBLEMA DE MILNE PELO MÉTODO PEA

Para a resolução da equação de Boltzmann pelo método PEA no caso do Problema de Milne polienergético foi feito um conjunto de programas e sub-programas em FORTRAN II, desenvolvido para o computador IBM 1620-II do Instituto de Energia Atômica.

Por ser este um computador de pequeno porte, extremamente lento, os programas aqui apresentados fazem cálculos bem específicos, o que visa economizar memória e diminuir o tempo de processamento de cada programa.

Com a utilização de um computador de terceira geração, este conjunto de programas pode ser bastante otimizado principalmente do ponto de vista de entrada e saída. Aqui, as saídas dos programas são perfuradas em cartões que servem como entrada para programas seguintes.

As ligações entre os diversos programas ficarão claras pela explicação de cada um deles em particular e bem assim como pelo fluxograma apresentado. As listagens de todos os programas utilizados são apresentadas no Apêndice D.

A seguir será apresentada uma lista dos programas principais com uma explicação do cálculo executado, assim como SUBROUTINES e FUNCTIONS utilizadas. Como alguns dos sub-programas são utilizados mais do que uma vez, e para isto as vezes é necessário que sejam mudados seus comandos DIMENSION e COMMON, a explicação sobre estes só será dada na primeira vez em que aparecem, a menos que esta se torne necessária.

1. MPLILJ - Calcula a matriz AL(I,J,K) produto dos coeficiente dos polinômios de Laguerre para ser utilizada no cálculo das integrais envolvidas na determinação dos elementos da matriz [V] Nesta representação um elemento da matriz AL(I,J,K) é o coeficiente do termo $x^{(k-1)}$ do produto $L^{(1)}_{i-1}\ L^{(1)}_{j-1}$.

2. MATRIZ[V]- Calcula a matriz [V] de interação total para o modelo de espalhamento do gás pesado para uma dada absorção e uma relação (massa do moderador)/(massa do neutron) = A.

2.1. GAMASI(XK) - Calcula a função Gama de um número semi-inteiro xk.

2.2. GAMA(K) - Calcula a função Gama de um número inteiro k.

3. ALFAO & ALFA1 - Calcula as matrizes $[\alpha^o]$ e $[\alpha^1]$para o modelo do gás pesado e para uma dada relação de massas.

4. AASIM* - Calcula os auto valores e auto vetores da matriz [V].

5. MGOGI - Calcula as matrizes [S], $[\gamma^o]$ e $[\gamma^1]$.

5.1. MM(N,A,B,R) - Subrotina que calcula o produto de matrizes de ordem N
$[R] = [A]\ [B]$

6. CALNIS4 - Calcula os auto valores ν_s para uma dada aproximação energética L nas aproximações angulares P_1 e P_3 e nos casos isotrópico e linearmente anisotrópico.

6.1. LEPW(N,NT,X,Y,W) - Subrotina que calcula os polinômios de Legendre de ordem N - $P_n(x)$ e para NT>0 calcula também os polinômios $W_{n-1}(x)$.

6.2. RAINT(U,V,E1,E,Y) - Calcula a raiz de uma função contínua dados os extremos (U,V) dó intervalo que a contém. E1 e E

---

* Programas e Sub-programas pertencentes à Biblioteca de Programas do Centro de Processamento de Dados do Instituto de Energia Atômica.

são as precisões desejadas na determinação da raiz e no valor da função no ponto respectivamente.

6.3. FF(X) - Sub-programa FUNCTION que define a função da qual se deseja calcular a raiz em RAINT. Neste programa
FF(X) = DETPW (N, L1, GO, G1, BE, X).

6.4. DETPW(N,L1,GO,G1,BE,X) - Calcula o determinante do sistema (II.2.18) do qual ν_s é a solução.

6.5. DTC(C,L1,DET)* - Calcula o determinante da matriz [C] de ordem L1 pelo método de Crout.

6.6. MM(N,A,B,R) - Já definida em 5.1.

7. CALB4 - Calcula os vetores $|B^n(\nu)>$ (relação (II.2.19) e $|A^n(\nu)>$ na aproximação energética L e angulares P_1 e P_3 nos casos isotrópico e linearmente anisotrópico.

7.1. SLH(A,N,X)* - Solução de sistema de equações homogêneas de ordem N.

7.2. DTM(A,N,DET)* - Calcula o determinante da matriz [A] de ordem N pelo método de eliminação de Gauss.

7.3. DTC(C,L1,DET)* - Já definida em 6.5.

7.4. MV(N,C,X,Z) - Calcula o produto da matriz [C] pelo vetor $|X>$.

7.5. LEPW(N,NT,X,Y,W) - Já definida em 6.1.

7.6. MM(N,A,B,R) - Já definida em 5.1.

8. CEMAS - Calcula as constantes $C^{\dagger}$ (relação II.3.6) e a distância extrapolada z_o para uma dada aproximação energética L e angulares P_1 e P_3 nos casos isotrópico e linearmente anisotrópico.

8.1. GAUSIS (AZERO,AA,NI,M,BB,X,K,U,ICOM,NPOSTO)* - Subrotina que resolve um sistema de equações inhomogeneas pelo método de Gauss.

8.2. LEPW(N,NT,X,Y,W) - Já definida em 6.1.

9. FLUXOS - Calcula $\phi(x,E)$ real e assintótico. Calcula também o valor destes dois fluxos normalizados a um.

9.1. LAGUE(N,X,M,DL) - Calcula os polinômios de Laguerre de espécie M e ordem N, no ponto X, isto é: $L_n^m(x)$.

10. PICOS - Calcula o pico da distribuição energética de neutrons em um ponto x do espaço.

10.1. FIAS(NR,L1,AMA,CMA,X,ANI,E) - Calcula a derivada da distribuição energética assintótica do fluxo de neutrons no ponto X, no ponto E.

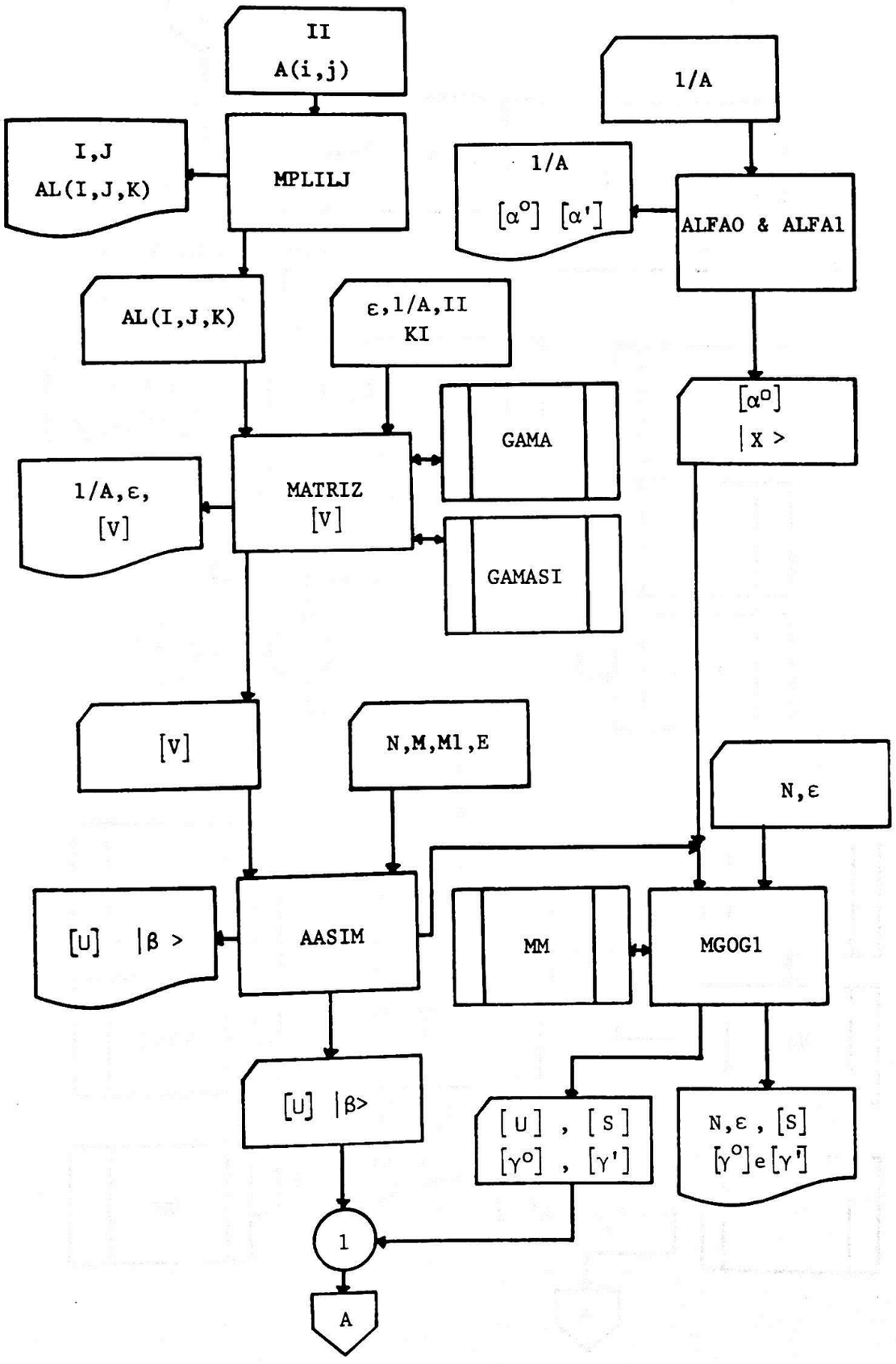
10.2. FI(NR,L1,AMA,CMA,X,ANI,E) - Calcula a derivada da distribuiçao energética real do fluxo de neutrons no ponto X, calculada no ponto E.

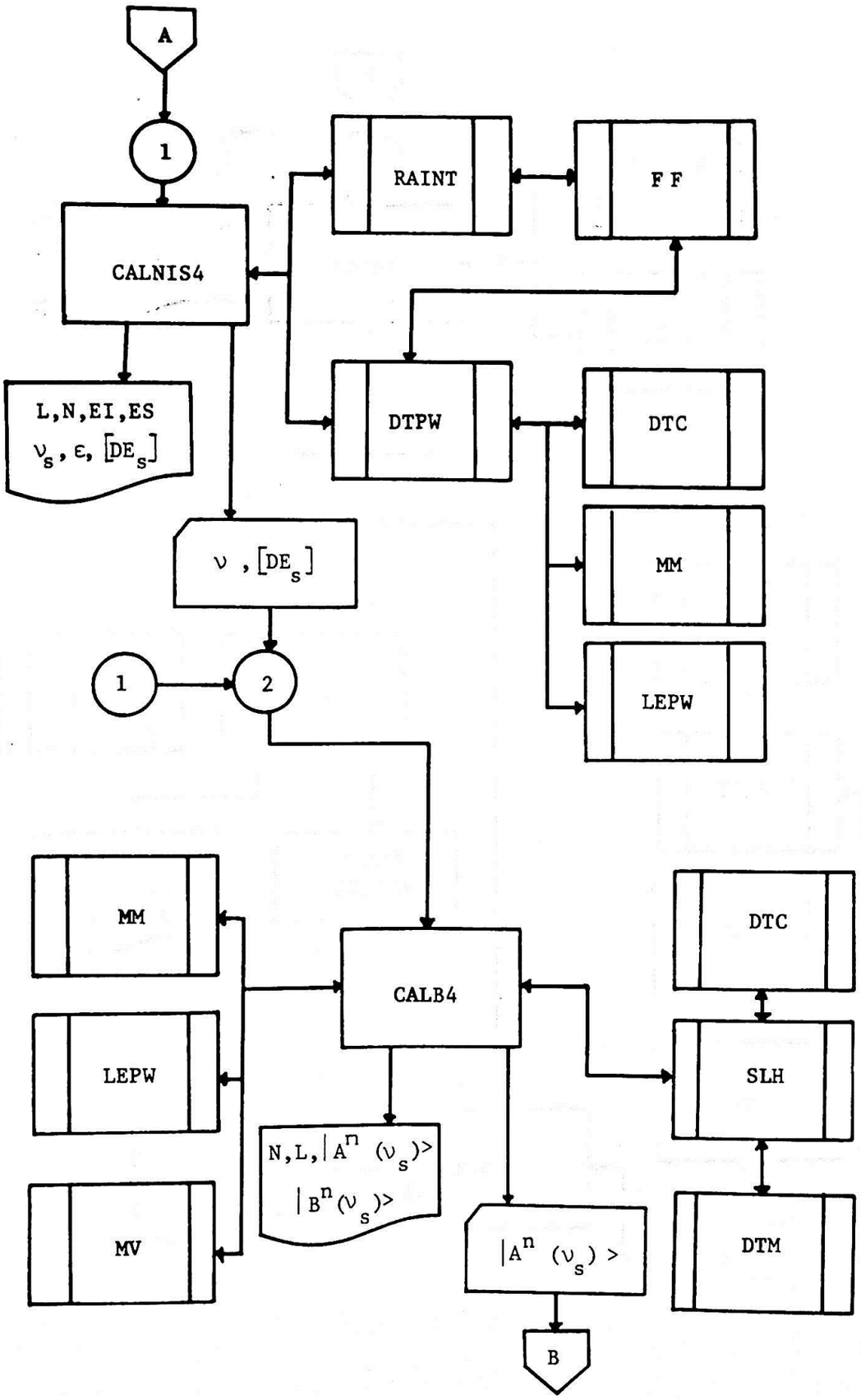
10.3. LAGUE(N,X,M,DL) - Já definida em 9.1.

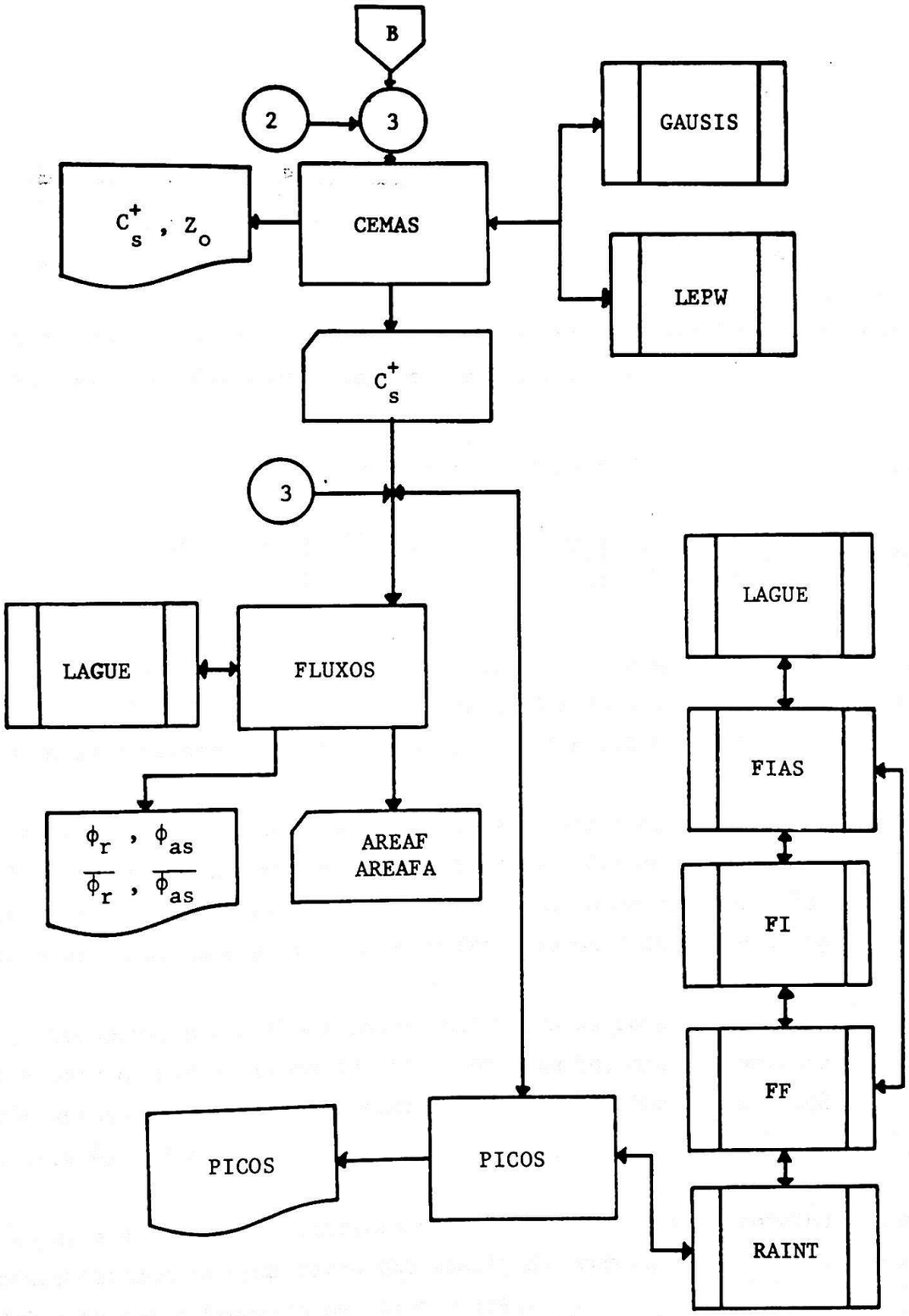
10.4. RAINT(U,V,E1,E,Y) - Já definida em 6.2.

10.5. FF(X) - Aqui, ora FF(X) = FI ora é igual a FIAS dependendo do pico que se deseja calcular ser do fluxo real ou do assintótico respectivamente.

A seguir é apresentado o Fluxograma do sistema de programas que visa facilitar a visualização do modo como os programas se interligam.


II
A(i,j)
1/A
I,J
AL(I,J,K)
MPLILJ
1/A
[α°] [α']
ALFAO & ALFA1
AL(I,J,K)
ε,1/A,II
KI
[α°]
| X >
GAMA
1/A,ε,
[V]
MATRIZ
[V]
GAMASI
[V]
N,M,M1,E
N,ε
[U] |β >
AASIM
MM
MGOG1
[U] |β>
[U] , [S]
[γ°] , [γ']
N,ε , [S]
[γ°]e[γ']
1
A


A
1
CALNIS4
RAINT
F F
DTPW
DTC
MM
LEPW
L,N,EI,ES
ν_s, ε, $[DE_s]$
ν , $[DE_s]$
1
2
MM
LEPW
MV
CALB4
DTC
SLH
DTM
N,L,$|A^n(\nu_s)>$
$|B^n(\nu_s)>$
$|A^n(\nu_s)>$
B


B
2
3
GAUSIS
C_s^+ , Z_o
CEMAS
LEPW
C_s^+
3
LAGUE
FLUXOS
LAGUE
FIAS
FI
FF
RAINT
ϕ_r , ϕ_{as}
$\overline{\phi_r}$, $\overline{\phi_{as}}$
AREAF
AREAFA
PICOS
PICOS

CAPÍTULO V

ANÁLISE E COMPARAÇÃO DE RESULTADOS

Utilizando o conjunto de programas descrito no capítulo IV, foram calculados os fluxos de neutrons integrados em $d\mu$, ou seja

$$\phi(x,E) = \int_{-1}^{1} \phi(x,E,\mu)\, d\mu \qquad (V.1)$$

$$\phi(x,E) = \sqrt{M(E)} \sum_{j=o}^{L} \left\{ \sum_{s=1}^{1/2(L+1)(N+1)} \left[C_s^{+} A_j^{o}(\nu_s) e^{-x/\nu_s} \right] + C_1^{-} A_j^{o}(-\nu_1)\, e^{x/\nu_1} \right\} g_j(E) \qquad (V.2)$$

para as aproximações energéticas L = 1,2,3,4 e 5 e angulares N = 1 e 3 em diversos pontos do meio com x variando de 0 a 20 (em unidades de $(1/\Sigma)$ máximo) e para diversos valores da energia entre 0,5 e 10 KT.

Com estes valores foi possível estudar as distribuições energética e espacial do fluxo de neutrons na região térmica. Foram calculados ainda, por meio de programas auxiliares, a posição do pico da distribuição energética real e assintótica e a distância extrapolada para cada aproximação L-N.

Neste trabalho, não serão apresentados todos os resultados obtidos: isto o tornaria desnecessàriamente longo; no entanto, pode-se adiantar que aqui serão apresentados apenas os correspondentes à melhor aproximação energética, isto é, L = 5.

Na escolha dos valores numéricos para os cálculos deste trabalho visou-se a possibilidade de comparação dos resultados com outros já existentes, principalmente com o trabalho de Cintra (04).

Foram escolhidos os seguintes valores numéricos:

A = 10 - relação massa dos átomos do meio/massa do neutron

$\sum_f$ = 1 - secção de choque do átomo livre (é unitária devido à unidade de comprimento adotada)

$\varepsilon = \bar{\sum}_a/\sum_f$ = 0,005, 0,05 e 0,5 - estes tres valores para a absorção possibilitam um estudo do meio tanto para absorções médias e altas como no limite de baixas absorções, tendo sido as adotadas por Michael (25), Leonard & Ferziger (22) e Cintra (04).

V.1. ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA APROXIMAÇÃO $\sum_s(E) \equiv$ CONSTANTE

Nas referências (04) e (22) foi utilizado o modelo de espalhamento degenerado com secção de choque de espalhamento do gás pesado na aproximação de secção de choque de espalhamento elástico constante com a energia. Realmente o modelo do gás pesado preve uma secção de choque de espalhamento elástico dependente da energia do neutron e portanto a suposição de $\sum_s(E) =$ Cte. é mais uma aproximação e sua validade será discutida a seguir. O modelo do Gás Pesado, apresentado com detalhes no capítulo III, leva à secção de choque de espalhamento seguinte (eq. III.1.19):

$$\sum_s(E) = \sum_f[1+1/2AE)] \qquad (V.3)$$

Nas tabelas e gráficos deste capítulo será utilizada a seguinte notação:

E.T.I. - Este Trabalho - aproximação de espalhamento Isotrópico

E.T.A. - Este Trabalho - aproximação de espalhamento linearmente Anisotrópico.

R(4) - Referência (04) - Cintra

Δ - Diferença entre dois resultados a serem comparados.

V.1.A. Distribuição Energética de Neutrons

As figuras 2 e 3 mostram a variação, com a energia, do fluxo normalizado de neutrons na fronteira (x=0) e em um ponto no interior do meio (x=20) na aproximação P_3L_5. Nestes gráficos são apresentados, para efeito de comparação, os resultados obtidos por Cintra na aproximação de secção de choque

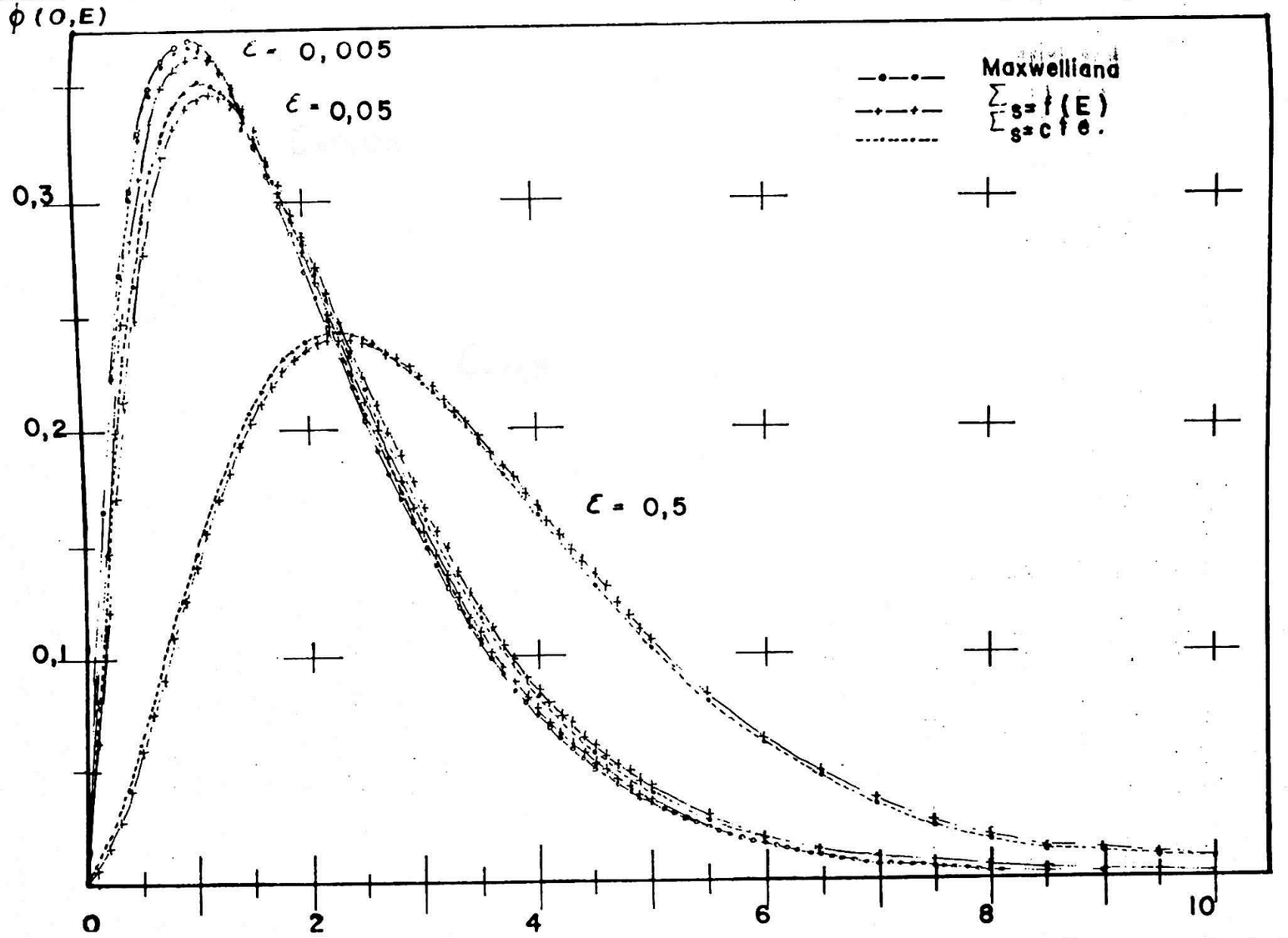


FIGURA 2. Distribuição energética do fluxo de neutrons, normalizada, na aproximação P_3L_5, calculada para o caso isotrópico, secções de choque de espalhamento constante e dependente da energia, para 3 valores da absorção diferentes, na fronteira.

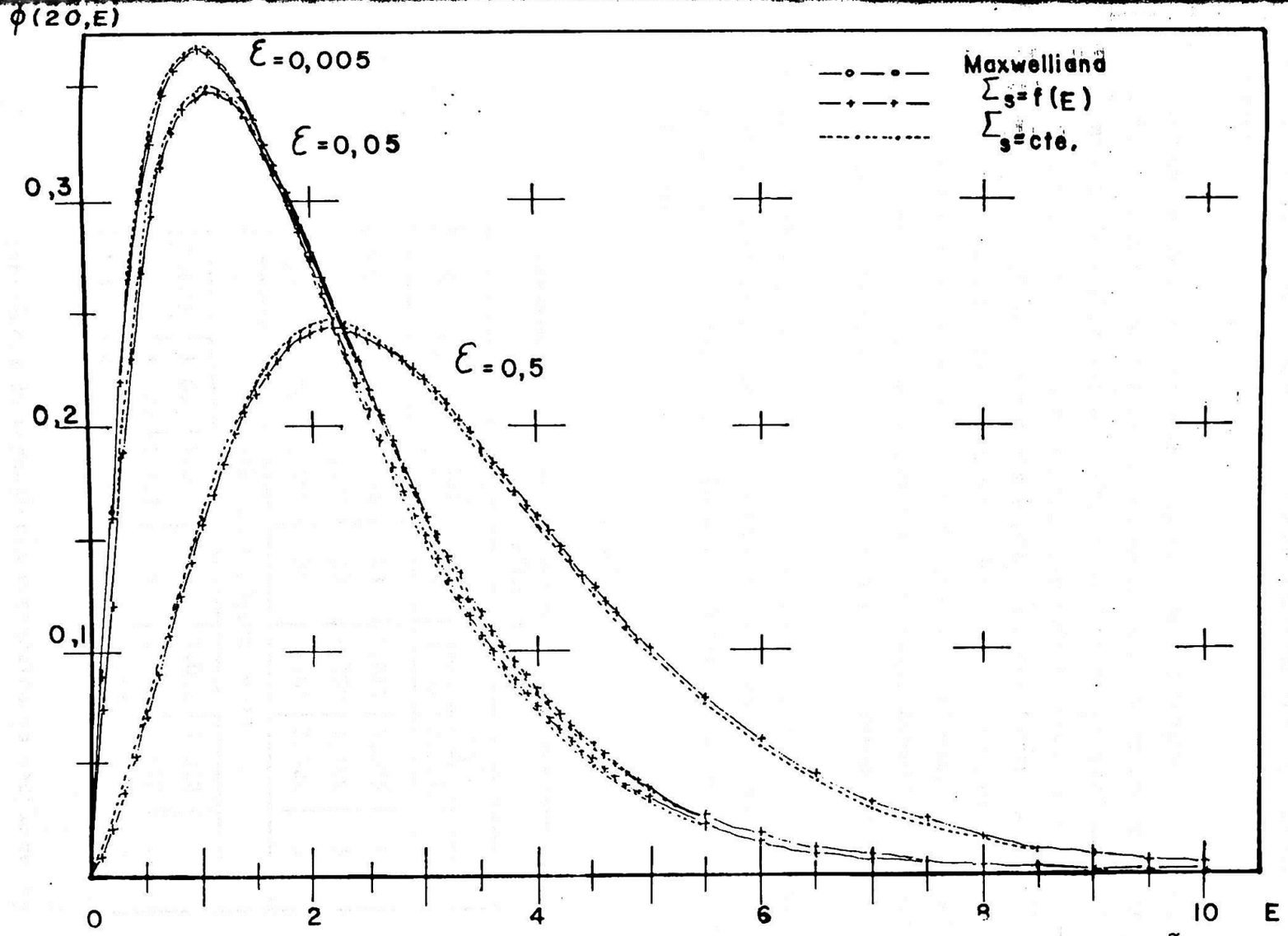


FIGURA 3. Distribuição energética de neutrons na região assintótica, normalizada, aproximação P_3L_5, caso isotrópico, com secções de choque de espalhamento constante e dependente da energia, para 3 valores de absorção.

de espalhamento elástico independente da energia e os aqui obtidos usando a secção de choque expressa pela equação (V.3). Ainda visando a facilidade de comparação, foi também traçada a Maxwelliana correspondente (absorção nula).

A influência do termo dependente de E, tanto no interior do meio quanto na fronteira, é deslocar o espectro normalizado de neutrons no sentido de aquecê-lo. Isto pode ser explicado pelo fato de um espalhamento elástico, variando inversamente com a energia, ser mais efetivo na retirada de neutrons de um intervalo de menor energia, da mesma forma que uma absorção também variando inversamente com E. Portanto o que interessa no caso é que existe uma secção de choque de interação total maior e mais efetiva na remoção de neutrons de baixa energia e, consequentemente, o espectro normalizado deve se deslocar no sentido das energias crescentes.

A Tabela I apresenta a posição dos picos de energia nos casos de, respectivamente, secção de choque de espalhamento constante e secção de choque dada pela relação (V.3); e nos dois casos, o espalhamento é considerado como isotrópico.

TABELA I

FRONTEIRA x=0						
ε	P_1L_5			P_3L_5		
	R (4)	E.T.I.	$\Delta x10^{+3}$	R (4)	E.T.I.	$\Delta x10^{+3}$
0,005	1,013	1,076	63	1,013	1,075	62
0,05	1,133	1,190	57	1,133	1,189	56
0,5	2,167	2,197	30	2,284	2,322	38
REGIÃO ASSINTÓTICA x=20						
0,005	1,011	1,012	1	1,012	1,012	0
0,05	1,112	1,121	9	1,112	1,122	10
0,5	2,081	2,101	20	2,176	2,202	26

Influência da dependência energética da secção de choque de espalhamento na posição dos picos de energia (em unidades de KT);caso de espalhamento isotrópico.

Nesta tabela pode-se notar que na região assintótica a maior influência do termo em 1/E se dá para maiores absorções o que não ocorre na fronteira. Este efeito, aparentemente contraditório, será melhor entendido com base nos dados da tabela seguinte.

TABELA II

ε	EFEITO DE TRANSPORTE				EFEITO DE FRONTEIRA			
	x = 0		x = 20		P_1		P_3	
	E.T.I.	R(4)	E.T.I.	R(4)	E.T.I.	R(4)	E.T.I.	R(4)
0,005	-1	0	0	1	64	2	63	1
0,05	-1	0	1	0	69	21	67	21
0,5	125	117	101	95	96	86	120	108

Influência do termo 1/2AE da secção de choque de espalhamento elástico nos efeitos de transporte e fronteira (todos os dados foram multiplicados por um fator 10^3); caso de espalhamento isotrópico.

Com base na tabela II pode-se comparar os diversos efeitos como segue:

A. efeito de absorção - desloca o pico do espectro energético no sentido de aquecê-lo e já é observado para a menor absorção ε = 0,005, quando o pico se desloca de 1KT para 1,012 KT. Isto já era observado no trabalho de Cintra como pode ser visto na Tabela I.

B. efeito de transporte - só aparece para a maior absorção, como também ocorria no caso de secção de choque de espalhamento constante com a energia.

C. efeito de fronteira -- já é sensível para baixa absorção, o que não ocorre para o caso de $\sum_s(E)$ = Cte.

Pode-se concluir que na aproximação $\sum_s(E)$ = Cte. o fluxo de neutrons nas vizinhanças da fronteira não é bem representado dando um espectro mais

frio do que no caso em que a dependência energética da secção de choque de espalhamento é considerada.

O efeito de aquecimento do espectro de neutrons nas vizinhanças da fronteira quando é utilizada a secção de choque de espalhamento decrescente com o aumento da energia do neutron já fora observado para meios não absorvedores (11) o que se deve essencialmente à maior probabilidade de fuga dos neutrons rápidos. Isto explica o fato de ser maior a influência da nova secção de choque perto da fronteira: comparando as tabelas I e II chega-se a conclusão que para baixas absorções o efeito representado na tabela I é devido unica e exclusivamente a uma melhor descrição do fluxo de neutrons nas vizinhanças da fronteira pela nova secção de choque; e isto ocorre tanto na aproximação P_1 quanto na P_3.

Convém notar ainda que, como era esperado, para altas energias, a influência da nova secção de choque de espalhamento tende a zero por ser sua dependência na energia da forma 1/E.

V.1.B. Distribuição Espacial de Neutrons

Os gráficos 4 e 5 representam a distribuição espacial de neutrons de energia E = 1KT e E = 10KT respectivamente, na aproximação P_3L_5. As curvas foram normalizadas para $\phi(0,E) = 1$ n/cm^{2}s., ou seja, fluxo unitário na fronteira.

Na análise dos dois gráficos nota-se que a influência da secção de choque de espalhamento dependente da energia é maior para E = 1KT, o que era esperado dada a forma da dependência de $\sum_s(E)$ na energia.

Observa-se ainda que a maior influência se dá para menores absorções o que é justificado pelo fato de no caso $\varepsilon = 0,5$ o termo de absorção ser bem maior do que a correção introduzida e, portanto, mascará-la. Esta explicação é corroborada pelo fato de as duas curvas praticamente coincidirem no caso $\varepsilon = 0,5$ e E = 10KT onde o termo correspondente à correção da dependência energética no espalhamento elástico é bem menor do que o correspondente para a absorção.

Ainda aqui convém notar que o fluxo de neutrons calculado para E = 1KT é

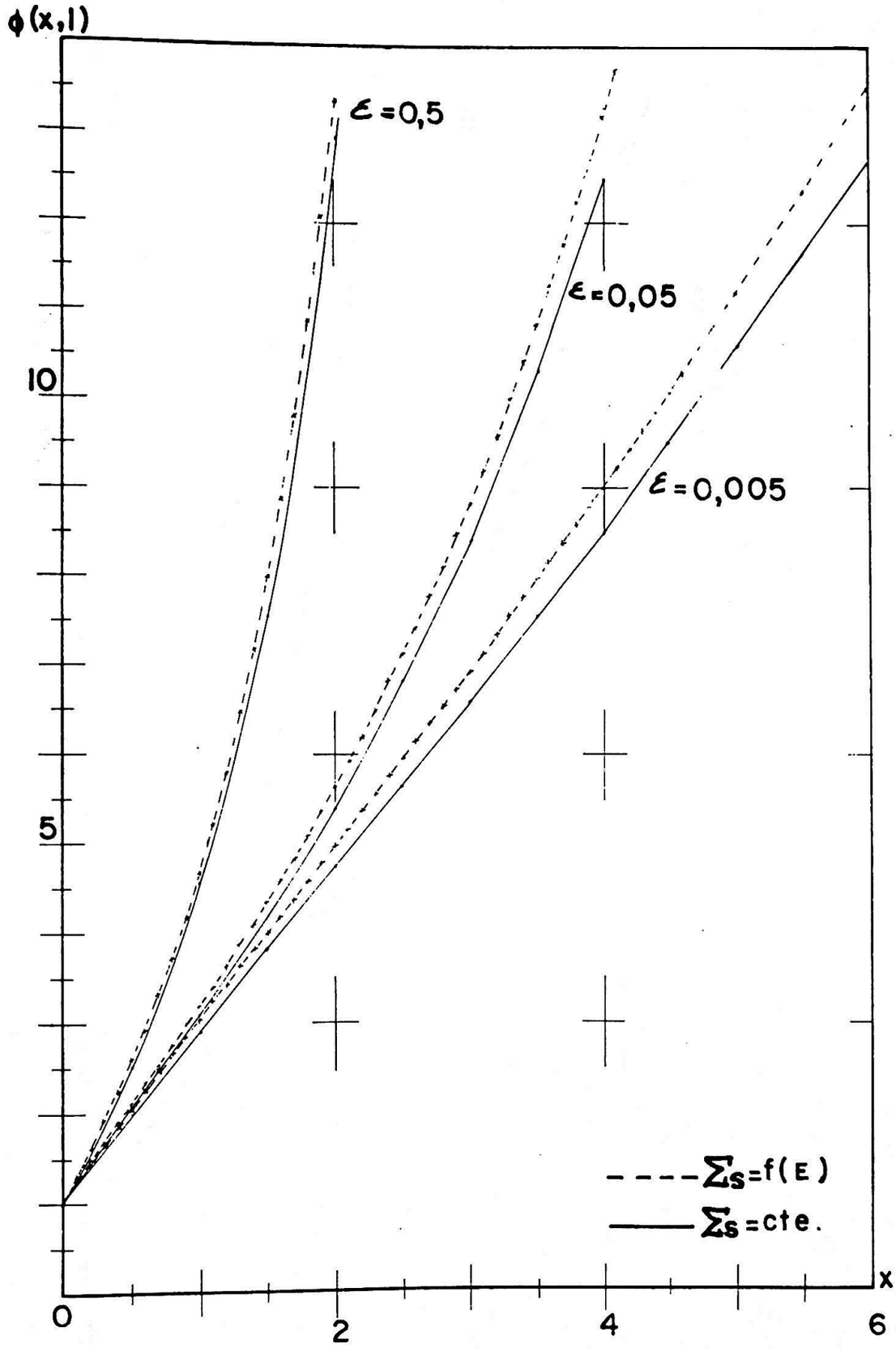


FIGURA 4. Distribuição espacial do fluxo de neutrons, normalizado na origem, aproximação P_3L_5, calculado para E = 1KT, caso isotrópico, secção de choque de espalhamento constante e dependente da energia, para 3 valores da absorção.

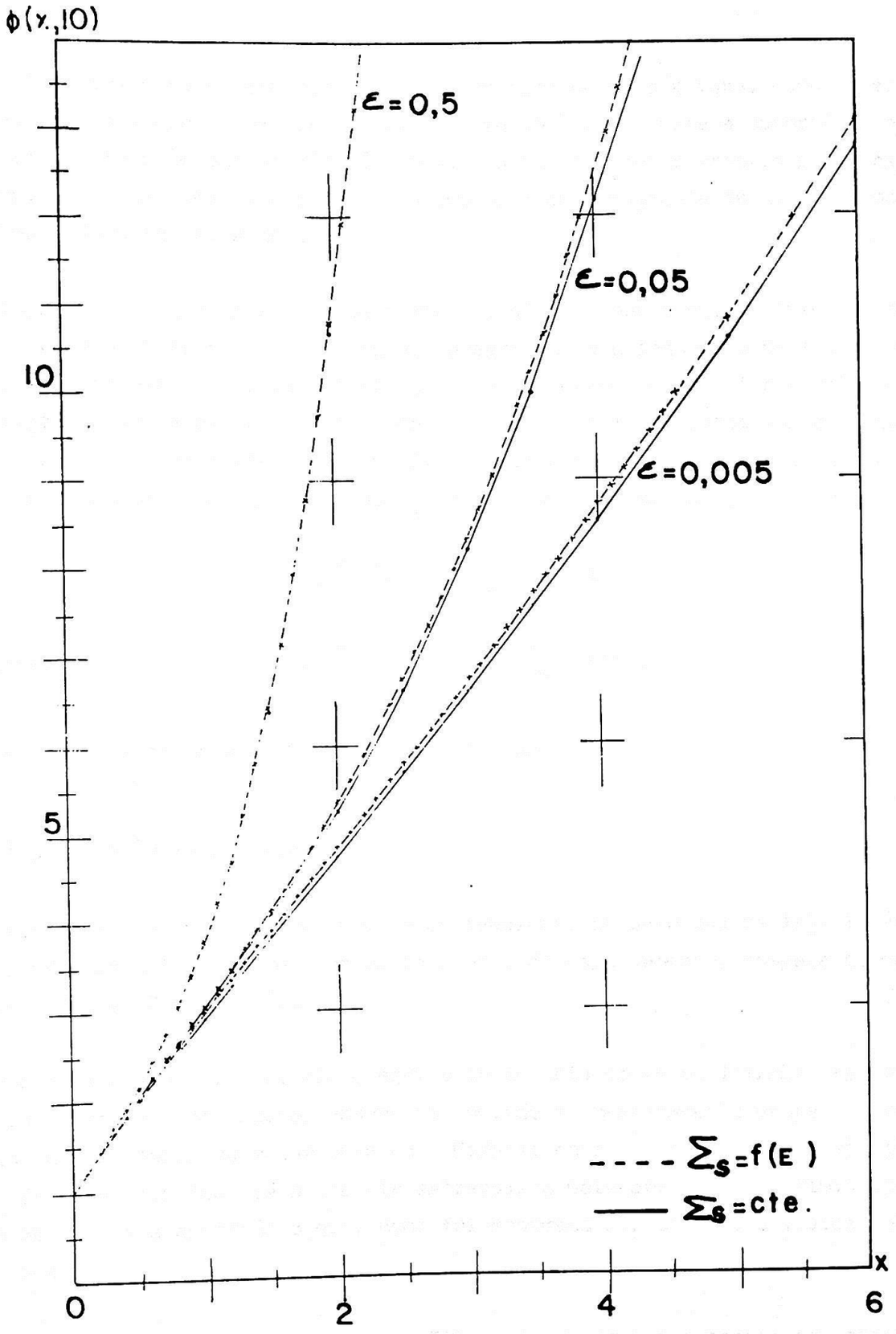


FIGURA 5. Distribuição espacial do fluxo de neutrons, normalizado na origem, aproximação P_3L_5, calculado para E = 10KT, caso isotrópico, secções de choque de espalhamento constante e dependente da energia, para 3 absorções diferentes.

maior do que o cálculado para 10KT no interior do meio e isto, como foi observado por Cintra, se deve à influência da lei 1/v para a absorção: para se ter $1n/cm^2s$ na fronteira é necessário se ter fluxos maiores para neutrons de menor energia porque, para estes, a probabilidade de absorção por unidade de percurso é maior.

É importante observar ainda que a nova secção de choque de espalhamento dá fluxos maiores no interior do meio. Observando a dependência do fluxo de neutrons na variável espacial (relação (V.2)) para um determinado valor da energia e para x grande, isto é, no interior do meio, notando que o fluxo de neutrons é proporcional a $\exp(x/\nu_1)$, e levando em consideração os valores obtidos para os auto valores ν_1 (secção V.1.D), sendo

$$\nu_1(\Sigma_s(E)) < \nu_1(\Sigma_s = cte)$$

tem-se

$$\phi(\Sigma_s(E)) > \phi(\Sigma_s = cte),$$

visto que os fatores de normalização são constantes.

V.1.C. Distância Extrapolada

A tabela III apresenta a distância extrapolada, em unidades de $1/\Sigma(E)$ máximo, para os dois casos de secção de choque de espalhamento, comparados nas aproximações P_1L_5 e P_3L_5.

Como pode ser observado, ainda aqui a influência do termo 1/(2AE) aparece mais claramente nas baixas absorções, devido ao mascaramento desta correção para os casos de maior absorção. Pode-se notar ainda que a aproximação P_1 falha na previsão de distância extrapolada pois preve uma diminuição da mesma com a absorção o que, como foi mostrado por Cintra, é fisicamente inadmissível.

Ainda com base nos dados da tabela III, observa-se que a secção de choque de espalhamento dependente da energia fornece valores de z_o menores, tanto para a aproximação P_1 quanto para a P_3. Isto pode ser explicado em termos da razão entre as probabilidades de absorção/espalhamento nos dois casos

TABELA III

ε	P_1L_5			P_3L_5		
	R (4)	E.T.I.	$\Delta x10^{+4}$	R (4)	E.T.I.	$\Delta x10^{+4}$
0,005	0,5757	0,5513	244	0,6949	0,6657	292
0,05	0,5626	0,5433	193	0,6975	0,6734	241
0,5	0,5107	0,5055	52	0,7619	0,7550	69

Influência do termo 1/(2AE) na secção de choque de espalhamento elástico na distância extrapolada (em unidades de $1/\sum$ máximo) ; caso de espalhamento isotrópico.

aqui comparados: quando se considera $\sum_s(E)$ = Constante tem-se uma maior probabilidade de absorção/espalhamento por unidade de percurso; e no cálculo de z_o, quando é utilizada a secção de choque dependente da energia, o meio se comporta como se tivesse menor absorção do que no caso anterior. Como a distância extrapolada aumenta com a absorção, está jusfiticado o comportamento dos dados da tabela III.

V.1.D. Sobre os Auto Valores ν_s

Nesta secção não serão apresentadas as tabelas dos auto-valores ν_s; estas serão mostradas na parte V.2.D; a influência da dependência energética na secção de choque de espalhamento poderá ser vista comparando-se as tabelas IX e X com as tabelas (IV.8.a), (IV.8.b) e (IV.8.c) da referência (04).

Aqui, fazendo uso da teoria de difusão, será analisada a coerência do comportamento do maior auto-valor ν_1, que no limite de baixa absorção é o comprimento de difusão. No caso aqui tratado, espalhamento isotrópico, o caminho livre médio de transporte é igual ao caminho livre médio total e tem-se

$$L^2 = \frac{\lambda tr\ \lambda a}{3} = \frac{\lambda t\ \lambda a}{3} \qquad (V.4)$$

Como para $\sum_s$ constante e $\sum_s$ dependente de E tem-se o mesmo caminho livre médio de absorção basta comparar o caminho livre médio total e tem-se

$$\lambda_t \left(\sum_s = \text{Cte.}\right) \geq \lambda_t \left(\sum_s = f(E)\right)$$

portanto

$$L \left(\sum_s = \text{Cte}\right) > L \left(\sum_s = f(E)\right)$$

e

$$\nu_1 \left(\sum_s = \text{Cte}\right) > \nu_1 \left(\sum_s = f(E)\right) \qquad \text{(V.5)}$$

A tabela abaixo mostra os auto valores ν_1, para $\sum_s$ = Cte. e $\sum_s$ dependente de E, nas aproximações P_1L_5 e P_3L_5.

TABELA IV

APROXIMAÇÃO P_1L_5			
ε	0,005	0,05	0,5
R (4)	8,7030	2,7355	0,8768
E.T.I.	8,4776	2,6860	0,8720
APROXIMAÇÃO P_3L_5			
R (4)	8,7182	2,7816	0,9880
E.T.I.	8,4921	2,7300	0,9820

Valores de ν_1 para $\sum_s(E)$ = Cte. e $\sum_s(E)$ dependente da energia nas aproximações P_1L_5 e P_3L_5; caso de espalhamento isotrópico.

A tabela mostra que a relação (V.5) ocorre mesmo para alta absorção na

aproximação L_5; mas pode-se dizer que, embora os resultados não tenham sido aqui incluídos, isto ocorre para qualquer das aproximações $P_N L_L$ e para qualquer auto valor ν_s.

V.2. ANÁLISE DOS EFEITOS DA INCLUSÃO DO TERMO DE ESPALHAMENTO LINEARMENTE ANISOTRÓPICO.

No que se segue será feita uma análise da influência da inclusão do termo linearmente anisotrópico no núcleo de espalhamento do Gás Pesado; inclusão da matriz $[\alpha^1]$. Serão feitas comparações utilizando os cálculos aqui desenvolvidos para a aproximação isotrópica, isto é, utilizar-se-á sempre a secção de choque de espalhamento dada pela expressão (V.3).

V.2.A. Influência da Inclusão da Anisotropia Linear na Distribuição Energética de Neutrons.

Os gráficos 6 e 7 apresentam o espectro de neutrons, normalizado, para a aproximação P_3L_5. Pode-se observar que a influência da anisotropia aparece mais na região da fronteira, conforme era esperado porque, sendo o meio homogêneo, a presença da fronteira introduz uma descontinuidade no mesmo e, portanto, aumenta a anisotropia no espalhamento nas vizinhanças de x=0.

Para uma melhor comparação serão apresentados na Tabela V os picos de energia para as aproximações P_1L_5 e P_3L_5 nos casos de espalhamento isotrópico e linearmente anisotrópico, na fronteira e na região assintótica.

Como pode ser observado, através dos gráficos 6 e 7 ou dos dados da Tabela V, mesmo na aproximação P_1L_5 já existe influência da inclusão da anisotropia linear e, em particular, no caso de alta absorção esta influência não é despresível. Conclui-se que, em calculos do fluxo de neutrons em meios com alta absorção e, principalmente, quando incluem fronteiras, a anisotropia deverá ser incluída.

Da observação dos dados da tabela V referentes à região assintótica conclui-se que a influência da absorção e do espalhamento não podem ser estudados separadamente, visto que a presença da absorção introduz uma aniso -

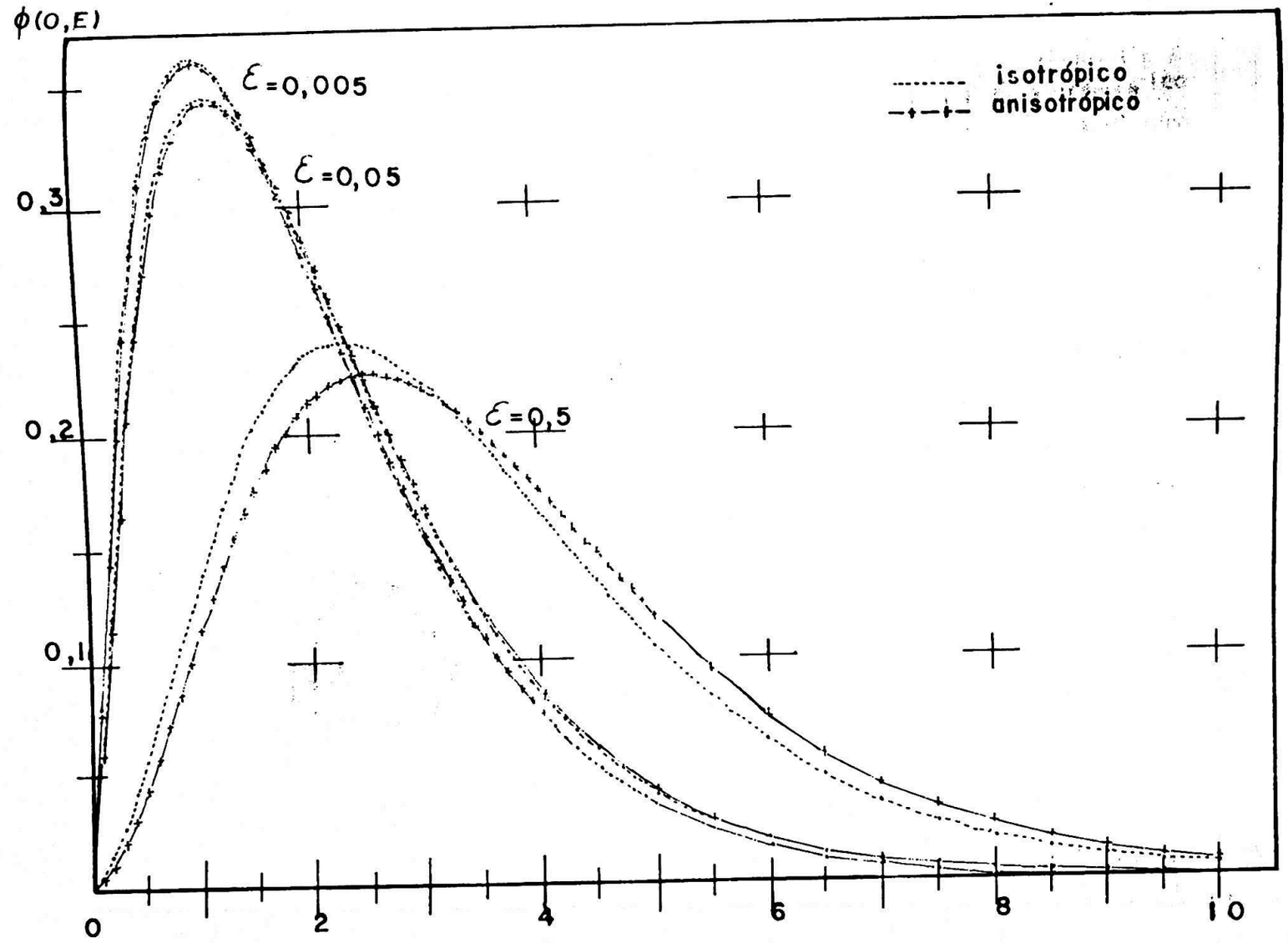


FIGURA 6. Distribuição energética do fluxo de neutrons normalizado na fronteira, com espalhamento isotrópico e linearmente anisotrópico, na aproximação P_3L_5.

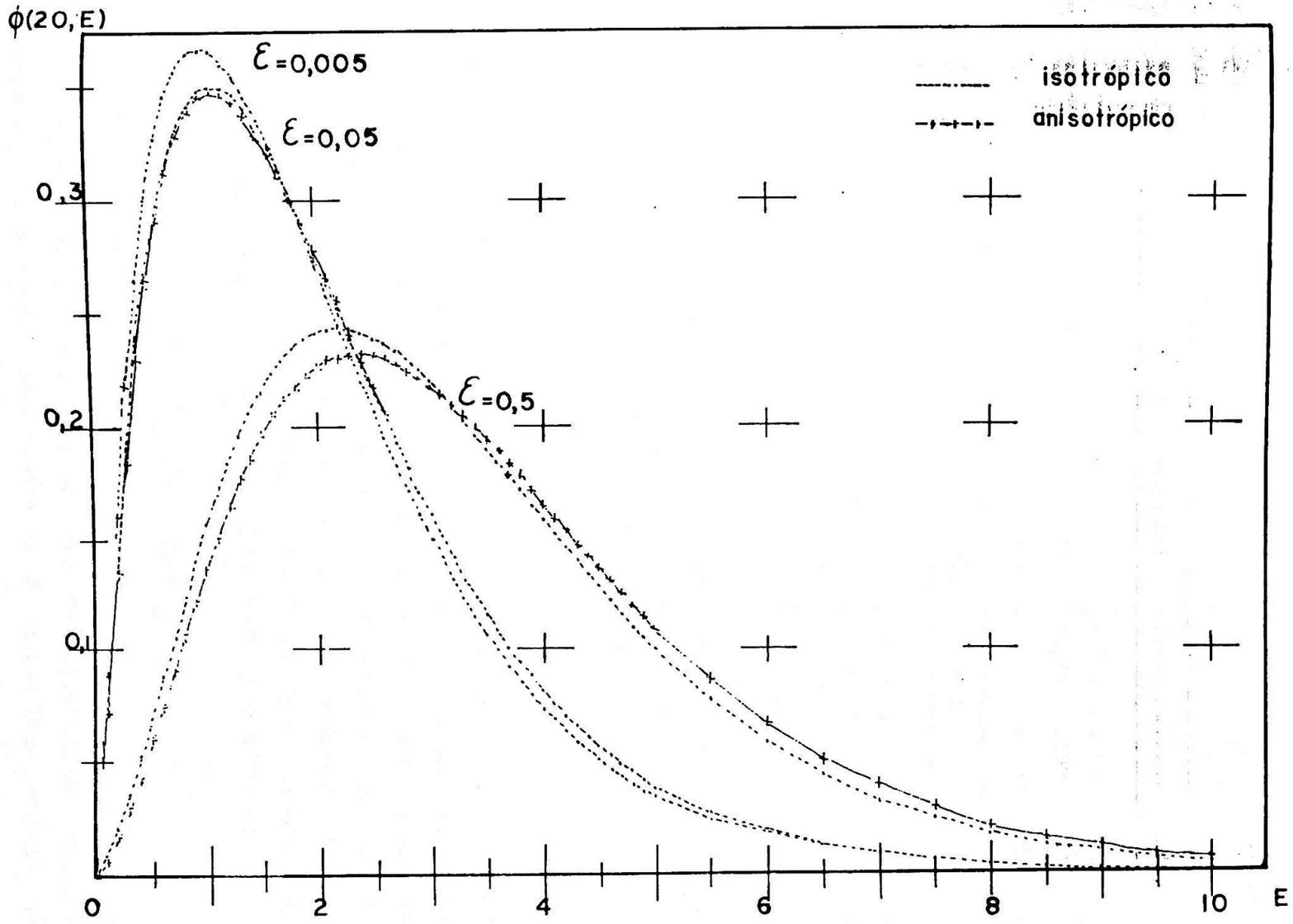


FIGURA 7. Distribuição energética do fluxo normalizado de neutrons no interior do meio, com espalhamento isotrópico e espalhamento linearmente anisotrópico, na aproximação P_3L_5.

TABELA V

FRONTEIRA x=0						
ε	P_1L_5			P_3L_5		
	E.T.I.	E.T.A.	$\Delta x10^{+3}$	E.T.I.	E.T.A.	$\Delta x10^{+3}$
0,005	1,076	1,080	12	1,075	1,080	5
0,05	1,190	1,210	20	1,189	1,209	19
0,5	2,197	2,363	166	2,322	2,546	224
REGIÃO ASSINTÓTICA x = 20						
0,005	1,012	1,012	0	1,012	1,012	0
0,05	1,121	1,125	4	1,122	1,125	3
0,5	2,101	2,214	113	2,202	2,356	151

Influência na posição dos picos de energia da inclusão do termo linearmente anisotrópico no núcleo de espalhamento do gás pesado.

tropia no meio. Isto porque a presença da absorção, mesmo na região assintótica, desloca o espectro energético no sentido de aquecê-lo, aumentando assim a energia média dos neutrons. Este aumento de energia, aumenta a anisotropia como se pode ver considerando a expressão para $\bar{\mu}(E)$: cosseno médio do ângulo de espalhamento. De fato, no Apêndice C mostra-se que quando é utilizado o núcleo de espalhamento do Gás Pesado na aproximação linearmente anisotrópica, tem-se para $\bar{\mu}(E)$ a seguinte expressão:

$$\bar{\mu}(E) = \frac{2/3}{(A + 1/(2E))} \qquad (V.6)$$

A influência da inclusão da anisotropia nas aproximações P_1L_5 e P_3L_5 nos efeitos de transporte e fronteira é apresentada através dos dados da tabela VI.

TABÈLA VI

ε	EFEITO DE TRANSPORTE				EFEITO DE FRONTEIRA			
	x=0		x=20		P_1L_5		P_3L_5	
	E.T.I.	E.T.A.	E.T.I.	E.T.A.	E.T.I.	E.T.A.	E.T.I.	E.T.A.
0,005	-1	-8	0	0	64	76	63	68
0,05	-1	-1	1	0	69	85	67	84
0,5	125	183	101	142	96	149	120	190

Influência da inclusão do termo linearmente anisotrópico no nucleo de espalhamento nos efeitos de transporte e fronteira (todos os dados desta tabela foram multiplicados por um fator 10^3)

A utilização conjunta dos dados das tabelas V e VI permite se chegar às conclusões seguintes referentes aos efeitos de transporte, absorção e fronteira:

A. Efeito de Transporte - como já ocorre no caso isotrópico, este efeito só aparece para altas absorções, embora a inclusão do termo linearmente anisotrópico o torne mais acentuado.

B. Efeito de Absorção - é um pouco mais visível, principalmente perto da fronteira, quando a anisotropia é incluída.

C. Efeito de Fronteira - no caso anisotrópico é bem mais pronunciado do que no caso isotrópico, o que era esperado mesmo para baixas absorções, sendo, no entanto, mais sensível para altas absorções.

Este aumento pronunciado decorre da conjugação de efeitos devidos à anisotropia e à absorção. De fato, como já foi mencionado anteriormente, existe uma fuga preferencial dos neutrons rápidos o que aumenta $\bar{\mu}(E)$ nas vizi

nhanças da fronteira, ou seja, há aumento da anisotropia. Por outro lado, o aumento da absorção, como existe preferência para absorção de neutrons lentos, também aumenta $\bar{\mu}(E)$, dando como resultado uma anisotropia mais pronunciada nas vizinhanças da fronteira para altas absorções.

Este efeito é mostrado mais claramente na tabela VII que apresenta o cosseno médio do ângulo de espalhamento integrado na energia, em um determinado ponto do espaço, segundo a expressão:

$$\bar{\mu}(x_o) = \frac{\int_0^\infty \phi(x_o,E)\ \bar{\mu}(E)\ dE}{\int_0^\infty \phi(x_o,E)\ dE} \qquad (V.7)$$

TABELA VII

ε	P_1L_5		P_3L_5	
	x=0	x=20	x=0	x=20
0,005	6,3896	6,3788	6,3890	6,3788
0,05	6,4107	6,3982	6,4107	6,3983
0,5	6,5270	6,5166	6,5360	6,5247

Cosseno médio do ângulo de espalhamento nas aproximações P_1L_5 e P_3L_5, na origem e na região assintótica (todos os valores de $\bar{\mu}$ foram multiplicados pelo fator 10^2)

A tabela VII confirma que, mesmo em um meio infinito, o aumento da absorção se traduz em um aumento da anisotropia e que $\bar{\mu}$ é máximo nas vizinhanças da fronteira e para a maior absorção ε=0,5 como foi mencionado anteriormente.

V.2.B. Influência da Anisotropia na Distribuição Espacial de Neutrons

Os gráficos 8 e 9 mostram a influência da inclusão do termo linearmente

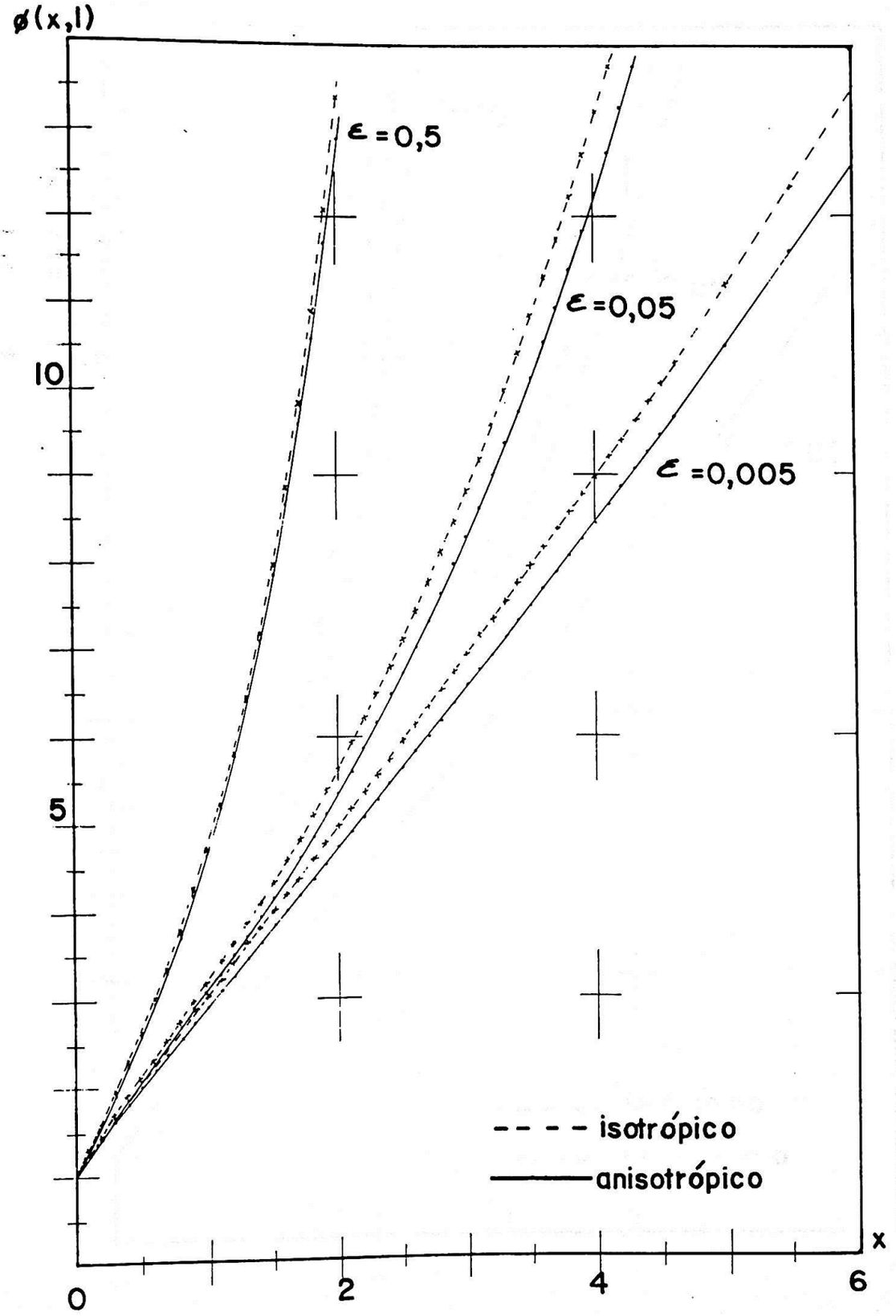


FIGURA 8. Distribuição espacial do fluxo de neutrons, normalizada na origem, para E = 1KT, com espalhamento isotrópico e linearmente anisotrópico, na aproximação P_3L_5, para 3 absorções diferentes.

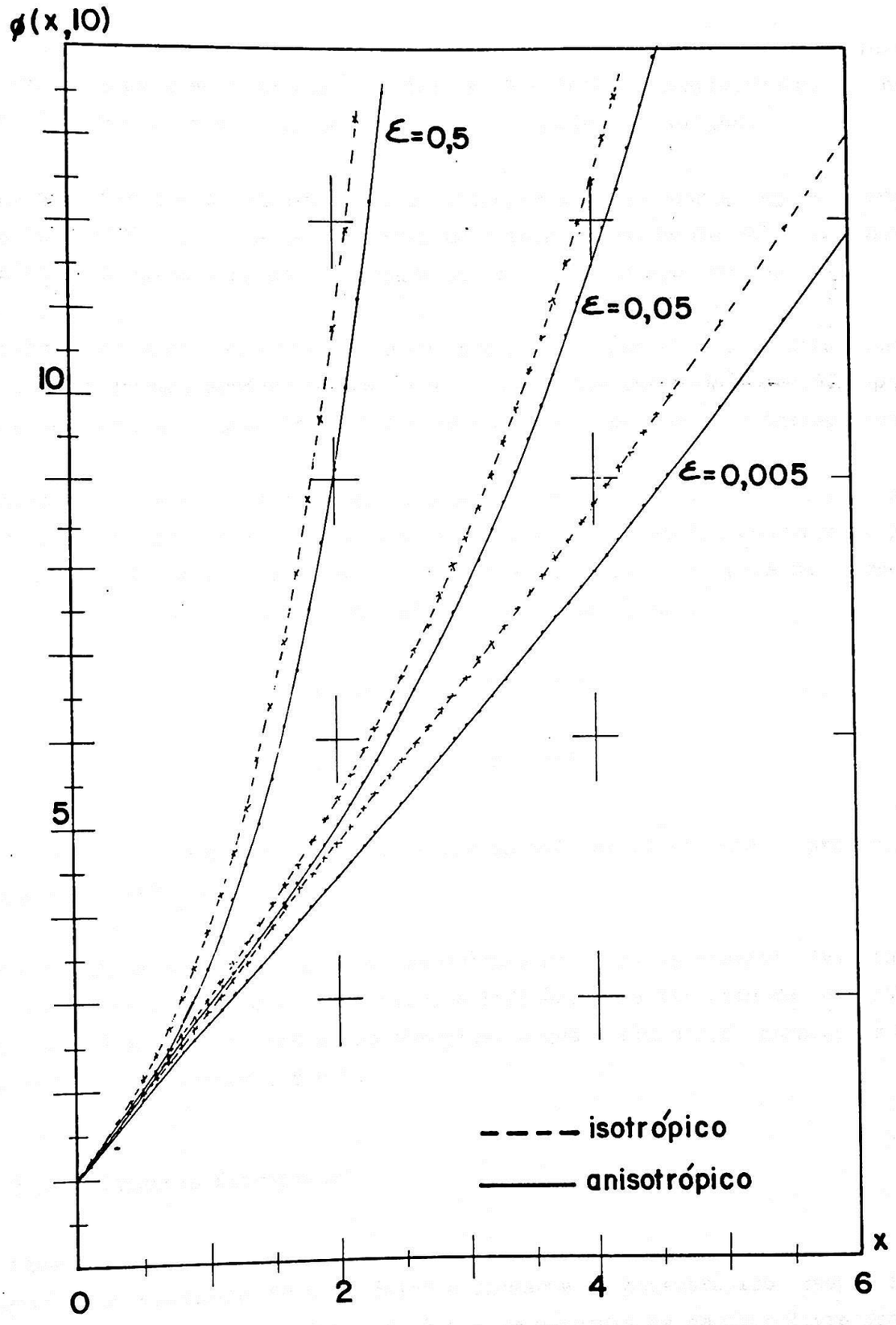


FIGURA 9. Distribuição espacial do fluxo de neutrons, normalizado na origem, para E = 10KT, com espalhamento isotrópico e linearmente anisotrópico, aproximação P_3L_5, para 3 absorções diferentes.

anisotrópico do núcleo de espalhamento na distribuição espacial do fluxo de neutrons para as energias E = 1KT e E = 10KT respectivamente, na aproximação P_3L_5 e normalizados para fluxo unitário na origem.

Pode-se notar que a influência da anisotropia é maior para energias maiores (E = 10KT): isto se deve ao fato de o termo linearmente anisotrópico do núcleo de espalhamento do Gás Pesado ser linearmente proporcional a E.

A maior influência da anisotropia aparece para baixas absorções porque, sendo o fluxo normalizado na origem, e calculado para uma dada energia, a presença da alta absorção ainda aqui mascara o termo de correção introduzido.

Pode-se notar ainda que o fluxo de neutrons para o caso isotrópico é sempre maior do que o para o caso anisotrópico o que, como foi mostrado no parágrafo V.1.B, se deve à relação entre os auto valores ν_1 para os casos isotrópico e anisotrópico (parágrafo V.2.D), isto é, como

$$\nu_1 \text{ (iso.)} < \nu_1 \text{ (anis.)}$$

$$\phi \text{ (iso.)} > \phi \text{ (anis.)}$$

porque, como já foi notado, no interior do meio os fluxos são proporcionais a $\exp(x/\nu_1)$.

Pode-se ainda notar que, dada a dependência de $\bar{\mu}(E)$ na energia (V.6) para o caso de espalhamento anisotrópico, a influência da inclusão da anisotropia deverá ser maior para altas energias, o que realmente é comprovada pela análise dos gráficos 8 e 9.

V.2.C. Distância Extrapolada

A tabela VIII apresenta as distâncias extrapoladas calculadas para as aproximações de espalhamento isotrópico e linearmente anisotrópico respectivamente, nas aproximações P_1L_5 e P_3L_5, em unidades de caminho livre médio máximo.

As distâncias extrapoladas no caso linearmente anisotrópico são maiores do

TABELA VIII

ε	P_1L_5			P_3L_5		
	E.T.I.	E.T.A.	$\Delta x10^{+4}$	E.T.I.	E.T.A.	$\Delta x10^{+4}$
0,005	0,5513	0,5897	384	0,6657	0,7117	460
0,05	0,5433	0,5819	386	0,6734	0,7212	478
0,5	0,5055	0,5661	606	0,7550	0,8687	1176

Distância extrapolada (em unidades de $1/\sum$ máximo) para as aproximações de espalhamento isotrópico e linearmente anisotrópico.

que para o caso isotrópico porque o caminho livre médio de transporte é maior no primeiro caso. Esta explicação é baseada na teoria de difusão, mas é válida visto que tal desigualdade já ocorre na aproximação P_1.

Convém notar ainda que a influência da anisotropia, em meios com alta absorção, no cálculo da distância extrapolada é bastante acentuada.

V.2.D. Sobre os Auto Valores ν_s

As tabelas seguintes apresentam os auto valores ν_s nas aproximações P_1 e P_3 respectivamente e para L_i com i = 1,2,3,4 e 5, nos casos de espalhamento isotrópico e linearmente anisotrópico, para as três absorções consideradas.

Tem-se a observar que foi mostrado por Cintra (04) que existe uma alteração na convergência dos auto valores ν_s no caso de meio altamente absorvedor - "Quando cresce a ordem de aproximação energética são adicionados (1/2) (N+1) auto valores (na aproximação angular de ordem N) e além disto a diferença entre dois auto valores de ordem sucessiva decresce com o aumento da ordem; para meios com alta absorção os auto valores adicionados

TABELA IX.1

L	1	2	3	4	5
iso.	8,4662	8,4711	8,4743	8,4768	8,4776
anis.	8,7490	8,7549	8,7592	8,7625	8,7640
	1,2451	→ 1,2477	1,2487	1,2493	1,2497
	1,3322	→ 1,3363	1,3380	1,3390	1,3397
		0,8843	→ 0,8873	0,8884	0,8890
		0,9818	→ 0,9883	0,9904	0,9916
			0,7223	→ 0,7259	0,7270
			0,8335	→ 0,8447	0,8472
				0,6249	→ 0,6293
				0,7499	→ 0,7700
					0,5579
					0,6953

Auto valores ν_s calculados para as aproximações P_1L_i com i = 1, 2, 3, 4 e 5 para os espalhamentos isotrópico e linearmente anisotrópico e absorção ε = 0,005.

TABELA IX.2

L	1	2	3	4	5
iso.	2,6733	2,6811	2,6839	2,6852	2,6860
anis.	2,7618	2,7704	2,7737	2,7753	2,7762
	1,1249	→ 1,1385	1,1409	1,1419	1,1424
	1,1998	→ 1,2190	1,2222	1,2236	1,2243
		0,8319	→ 0,8438	0,8458	0,8467
		0,9179	→ 0,9403	0,9431	0,9443
			0,6884	→ 0,7006	0,7024
			0,7857	→ 0,8169	0,8191
				0,5988	→ 0,6121
				0,7060	→ 0,7515
					0,5354
					0,6509

TABELA IX.3

L	1	2	3	4	5
iso.	0,8677	0,8720	0,8720	0,8720	0,8720
anis.	0,9014	0,9098	0,9098	0,9098	0,9098
	0,5446	→ 0,7037	0,7100	0,7100	0,7100
	0,5638	→ 0,7510	0,7675	0,7676	0,7676
		0,4554	→ 0,6064	0,6140	0,6140
		0,4768	→ 0,6640	0,6902	0,6914
			0,3973	→ 0,5400	0,5488
			0,4202	→ 0,6057	0,6430
				0,3555	→ 0,4910
				0,3797	→ 0,5631
					0,3236
					0,3488

Auto valores ν_s calculados para as aproximações P_1L_i com i=1, 2,3,4 e 5 para os espalhamentos isotrópico e linearmente anisotrópico e para as absorções ε=0,05 e ε=0,5 respectivamente

TABELA X.1

L	1	2	3	4	5
iso. anis.	8,4805 8,7637	8,4854 8,7698	8,4887 8,7741	8,4912 8,7774	8,4921 8,7788
	1,3511 1,4437	→ 1,3557 → 1,4506	1,3573 1,4532	1,3583 1,4547	1,3589 1,4557
		1,0416 1,1483	→ 1,0508 → 1,1660	1,0531 1,1694	1,0542 1,1709
			0,9177 1,0389	→ 0,9355 → 1,0807	0,9378 1,0823
				0,8470 0,9771	→ 0,8778 → 0,0585
					0,7971 0,9319
iso. anis.	0,4864 0,4865	0,4868 0,4869	0,4869 0,4871	0,4870 0,4871	0,4870 0,4871
	0,4382 0,4387	→ 0,4470 → 0,4482	0,4478 0,4489	0,4480 0,4492	0,4481 0,4493
		0,4007 0,4027	→ 0,4106 → 0,4143	0,4115 0,4152	0,4117 0,4155
			0,3682 0,3726	→ 0,3788 → 0,3863	0,3797 0,3872
				0,3407 0,3475	→ 0,3519 → 0,3636
					0,3173 0,3264

Auto valores ν_s calculados para absorção ε=0,005, nas aproximações P_3L_i com i = 1,2,3,4 e 5, nos casos de espalhamento isotrópico e linearmente anisotrópico

TABELA X.2

L	1	2	3	4	5
iso.	2,7171	2,7250	2,7279	2,7292	2,7300
anis.	2,8071	2,8159	2,8192	2,8208	2,8218
	1,2343	→ 1,2532	1,2563	1,2575	1,2581
	1,3143	→ 1,3414	1,3452	1,3467	1,3475
		0,9853	→ 1,0115	1,0140	1,0150
		1,0783	→ 1,1248	1,1269	1,1277
			0,8728	→ 0,9133	0,9148
			0,9749	→ 1,0569	1,0568
				0,8034	→ 0,8622
				0,9099	→ 1,0383
					0,7528
					0,8619
iso.	0,4683	0,4684	0,4684	0,4684	0,4684
anis.	0,4685	0,4686	0,4686	0,4686	0,4686
	0,4142	→ 0,4321	0,4325	0,4325	0,4326
	0,4147	→ 0,4336	0,4339	0,4340	0,4340
		0,3782	→ 0,3986	0,3991	0,3992
		0,3800	→ 0,4029	0,4032	0,4033
			0,3477	→ 0,3693	0,3698
			0,3512	→ 0,3772	0,3776
				0,3219	→ 0,3443
				0,3272	→ 0,3563
					0,2998
					0,3069

Auto valores calculados para o caso de absorção $\varepsilon = 0,05$, aproximações P_3L_i com i = 1,2,3,4 e 5, para espalhamento isotrópico e linearmente anisotrópico

TABELA X.3

L	1	2	3	4	5
iso.	0,9736	0,9820	0,9820	0,9820	0,9820
anis.	1,0109	0,0269	1,0272	1,0272	1,0272
	0,6520	→ 0,8399	0,8595	0,8599	0,8599
	0,6724	→ 0,8903	0,9313	0,9376	0,9388
		0,5684	→ 0,7643	0,7977	0,8005
		0,5904	→ 0,8206	0,8876	0,9118
			0,5129	→ 0,7126	0,7592
			0,5359	→ 0,7718	0,8561
				0,4720	→ 0,6735
				0,4957	→ 0,7348
					0,4401
					0,4643
iso.	0,3529	0,3624	0,3630	0,3630	0,3630
anis.	0,3536	0,3636	0,3645	0,3645	0,3645
	0,2571	→ 0,3255	0,3397	0,3408	0,3408
	0,2577	→ 0,3270	0,3426	0,3444	0,3445
		0,2286	→ 0,3030	0,3197	0,3210
		0,2296	→ 0,3055	0,3246	0,3273
			0,2075	→ 0,2840	0,3020
			0,2089	→ 0,2877	0,3092
				0,1910	→ 0,2679
				0,1926	→ 0,2726
					0,1775
					0,1794

Auto valores calculados para a absorção ε=0,5 nas aproximações P_3L_i i = 1,2,3,4 e 5 para os espalhamentos isotrópico e linearmente anisotrópico

em uma aproximação L não são corretos e só serão corrigidos em uma aproximação L+1".

Este efeito, quando se considera a secção de choque de espalhamento dependente da energia, já aparece mesmo na menor absorção, embora com menor intensidade, tanto no caso isotrópico como no linearmente anisotrópico e em qualquer uma das duas aproximações angulares consideradas. As flexas colocadas nas tabelas IX e X visam facilitar a visualização destas alterações.

Nestas tabelas, pode-se notar ainda que os auto valores correspondentes ao caso linearmente anisotrópico são sempre maiores do que os correspondentes ao caso isotrópico e, em particular, isto também ocorre com o maior auto valor que, no limite de baixa absorção, corresponde ao comprimento de difusão e determina o comportamento assintótico do fluxo de neutrons. Recorrendo à teoria de difusão, tentar-se-á comparar o comportamento dos comprimento de difusão aqui obtidos para as aproximações de espalhamento isotrópico e linearmente anisotrópico.

Utilizando para o comprimento de difusão L a relação (V.4), com λtr dado por ($\lambda_{tr}(E) = \left[\sum_a(E) + \sum_s(E)(1-\bar{\mu}(E))\right]^{-1}$ (V.8)

tem-se $\lambda_{tr}(iso) < \lambda_{tr}(anis.)$

portanto $L\ (iso) < L\ (anis.)$

visto que $\lambda_a\ (iso) = \lambda_a\ (anis.)$.

o que confirma o comportamento de ν_1 nas tabelas IX e X.

Ainda sobre as tabelas IX e X tem-se a observar que estas confirmam a observação de Williams (39) "Parece que a inclusão de termos adicionais na expansão de Legendre tende a reduzir os auto valores $k_n = 1/\nu_n$". Nas tabelas anteriores, correspondentes às aproximações angulares P_1 e P_3, os auto valores ν_i $i = 0,1,\ldots,5$ são maiores para P_3 do que seus correspondentes na aproximação P_1.

Podem ser feitas ainda algumas considerações quanto ao número de auto valo

res do espectro discreto nas diversas ordens de aproximação. No caso aqui estudado, devido às unidades adotadas, os auto valores do espectro discreto estão situados fora do intervalo.

$$-1/\beta_L < \nu_i < 1/\beta_L \qquad (V.9)$$

onde β_L é o maior auto valor da matriz $[V]$.

Foi observado que o número de auto valores do espectro discreto diminui com a absorção, como era esperado; mas, por outro lado, aumenta, para uma dada absorção, com a ordem de aproximação angular e com a anisotropia porque o intervalo dado pela relação (V.9) só depende da aproximação energética e tanto a anisotropia como o aumento da aproximação angular aumentam os auto valores.

V.2.E. Comparação das Distâncias Extrapoladas aqui Obtidas com Outras Encontradas na Bibliografia.

A tabela abaixo mostra o valor da distância extrapolada calculado para A=10 com relações encontradas na bibliografia; no entanto, todas estas relações só valem para o caso sem absorção e portanto só valerão como comparação de ordem de grandeza do valor aqui obtido para o caso de menor absorção : ε=0,005. A distância extrapolada incluída na tabela é, portanto, a calculada para a menor absorção e para a melhor aproximação P_3L_5.

TABELA XI

CASO ISOTRÓPICO					
E.T.I.	NELKIN (27)	WEISS (35)	WILLIAMS (38)		
0,6657	0,6719	0,6698	0,6729	0,6749	0,6758

Distâncias extrapoladas obtidas na bibliografia para meio sem absorção e com espalhamento isotrópico e o valor obtido neste trabalho para a aproximação P_3L_5 e absorção $\varepsilon = 0,005$

Os três resultados de Williams se devem a três relações diferentes. O valor aqui obtido deveria ser maior do que os valores para meio não absorvedor; a não observação deste fato pode ser devida principalmente a dois fatores: necessidade de maior aproximação angular (P_5 por exemplo) ou da utilização de outra condição de contorno que não a de Mark que, no caso monoenergético, não é a que dá melhores resultados (no caso polienergético não se encontrou comparação de condições de contorno na bibliografia);mas tal condição de contorno foi utilizada para tornar possível a comparação com o trabalho de Cintra (04).

Entretanto a tabela XI mostra que a ordem de grandeza das distâncias extrapoladas aqui calculada é correta e, em particular, o valor aqui obtido é muito próximo do calculado por Weiss que também utiliza o modelo de espalhamento do gás pesado.

Poucos foram os autores que consideraram o caso anisotrópico e também aqui só será possível a comparação com o caso não absorvedor. A tabela seguinte é análoga à anterior porém contém os valores da distância extrapolada calculados quando se considera o termo linearmente anisotrópico do núcleo de espalhamento.

TABELA XII

CASO LINEARMENTE ANISOTRÓPICO		
E.T.A.	WEISS (35)	KLADNIK & KUSCER (16)
0,7117	0,7168	0,7201

Distância extrapolada calculada para a absorção $\varepsilon = 0{,}005$ comparada com as obtidas na bibliografia para meio não absorvedor.

Existem poucos trabalhos publicados que apresentam resultados numéricos

para meios absorvedores, por exemplo Arkuszewski (02) e Lancefield & Schofield (20), mas infelizmente não utilizam as mesmas absorções aqui estudadas nem a mesma massa para o moderador o que impede comparações diretas. No entanto comparações da ordem de grandeza mostram que os resultados obtidos para o caso isotrópico estão dentro do esperado. Quanto ao caso em que o espalhamento linearmente anisotrópico é incluído em um meio absorvedor não foram encontrados resultados na bibliografia consultada.

V.3. OBSERVAÇÕES SOBRE A REFERÊNCIA (32)

Summerfield & Zweifel (32) se propoem a justificar as suposições feitas por Leonard & Ferziger (22) (espalhamento isotrópico e secção de choque independente da energia) para obter a solução explicita da equação de Boltzmann em um meio cujo moderador é um gás pesado.

A fim de facilitar as comparações, serão transcritas algumas das observações dos autores.

"Uma análise superficial pode parecer indicar que a suposição de espalhamento isotrópico é inconsistente com um modelo de espalhamento no qual a energia muda numa colisão elástica, uma vez que tanto a anisotropia como a troca de energia são da ordem de 1/A (A = razão de massa do moderador sobre massa do neutron). Entretanto, o objetivo desta nota é mostrar que dentro do contexto do modelo do gás pesado a contribuição do modelo de espalhamento linearmente anisotrópico é realmente da ordem de $\sum_a/A$, e portanto pode ser considerada da ordem de $1/A^2$ (12).

Por outro lado, o modelo do gás pesado prediz explicitamente uma secção de choque dependente da energia, o termo dependente da energia sendo inversamente proporcional a E. Portanto a suposição de secção de choque constante, mesmo se a variação, com a energia, da secção de choque de absorção puder ser desprezada, é uma questão em aberto a menos que os resultados sejam aplicados a energias moderadamente altas tal que o termo 1/(2AE) possa ser desprezado".

A verificação da influência do termo 1/(2AE) pode ser estudada pelos resultados da secção V.1. A inclusão do termo dependente da energia na sec

ção de choque de espalhamento influi, principalmente:

A. na distribuição energética de neutrons nas vizinhanças da fronteira. No estudo de distribuição energética dos neutrons em meios infinitos este termo poderá ser desprezado (V.1.A).

B. nas probabilidades da fuga de neutrons, como é mostrado pela distribuição espacial de neutrons (V.1.B).

Conclui-se que no estudo de meios finitos, onde a influência da fronteira e das fugas é mais importante, o termo dependente de E deverá ser incluído na secção de choque de espalhamento do modelo do gás pesado.

Quanto à influência da anisotropia tem-se a observar que o trabalho de Hurwitz e outros (12) citado por Summerfield & Zweifel (32) não esclarece porque a secção de choque de absorção pode ser considerada como sendo proporcional a 1/A. Outro comentário que pode ser citado é o de Leonard & Ferziger (23) que observam que: "na prática em geral pode-se desprezar o espalhamento anisotrópico, visto que Summerfield & Zweifel mostraram que para um moderador gás pesado (que é provávelmente o caso mais interessante uma vez que a ligação química faz com que todos os moderadores pareçam pesados nas energias térmicas) as correções introduzidas são da ordem do quadrado da razão massa do neutron para massa do moderador".

Como a equação (7) da referência (32) não é totalmente justificada, assim como também não o é a afirmação de que $\sum_a$ é proporcional a 1/A, visto que no caso geral esta relação não é válida, decidiu-se verificar a validade da conclusão de Summerfield & Zweifel: "na aproximação do gas pesado o nucleo de espalhamento é isotrópico", e levando ainda em consideração outra conclusão do mesmo trabalho que: "como o limite clássico de $\sum_s(E' \to E, \overline{\Omega}\cdot\overline{\Omega})$ para qualquer moderador é o gás ideal então a conclusão anterior vale para qualquer moderador pesado que possa ser aproximado por um sistema clássico".

A análise detalhada do parágrafo V.2 mostra que a conclusão de Summerfield & Zweifel não vale sempre.

Em meios altamente absorvedores a inclusão do termo linearmente anisotrópico é importante e em alguns casos, como por exemplo no cálculo da distân -

cia extrapolada o efeito já é sentido mesmo para baixas absorções. A tabela abaixo dá uma idéia da ordem de grandeza do efeito da inclusão do espalhamento linearmente anisotrópico na distância extrapolada.

TABELA XIII

ε	P_1 %	P_3 %
0,005	6,7	6,7
0,05	6,9	6,9
0,5	11,3	14,0

Percentagem de aumento da distância extrapolada quando é incluído o termo linearmente anisotrópico do nucleo de espalhamento do gás pesado na aproximação L_5.

Portanto, em meios com alta absorção e principalmente que incluam fronteira, ou seja meios finitos, o efeito da inclusão do termo linearmente anisotrópico do núcleo de espalhamento não é desprezível; ou ainda, nem sempre este efeito é da ordem de $1/A^2$ como afirmam Summerfield & Zweifel.

A conclusão importante que se tira é que a observação de que o nucleo de espalhamento é isotrópico para o modelo do gás pesado não vale sempre e, a menos que a absorção seja muito pequena, a anisotropia não poderá ser desprezada.

APÊNDICE A.

FUNÇÕES ESPECIAIS

A1. POLINÔMIOS DE LEGENDRE (1)

A. Definições

1. Polinômios de Legendre de 1ª espécie, do grau n, $P_n(x)$ (Fórmula de Rodrigues)

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \qquad \text{com} \quad -1 \leq x \leq 1 \qquad \text{(A1.1)}$$

2. Polinômios de Legendre de 2ª espécie, do grau n, $Q_n(x)$

$$Q_n(x) = P_n(x)\, \text{tgh}(x) - W_{n-1}(x) \qquad \text{(A1.2)}$$

onde
$$W_{n-1}(x) = \sum_{m=1}^{n} \frac{1}{m} P_{m-1}(x)\ P_{n-m}(x) \qquad \text{(A1.3)}$$

e vale
$$W_n(x) = P_{n+1}(x)\, Q_o(x) - Q_{n+1}(x)\, P_o(x) \qquad \text{(A1.4)}$$

3. Funções associadas de Legendre de 1ª espécie

$$P_n^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \qquad \text{(A1.5)}$$

B. Relações de Recorrência

$$(n+1)\, Z_{n+1}(x) - (2n+1) \times Z_n(x) + n\, Z_{n-1}(x) = 0 \qquad \text{(A1.6)}$$

esta relação vale tanto para os $P_n(x)$ quanto para os $Q_n(x)$

$$P_n(x)\, Q_{n-1}(x) - P_{n-1}(x)\, Q_n(x) = 1/n \qquad \text{(A1.7)}$$

C. Teorema da Adição

$$P_n(x_o) = P_n(x)\, P_n(x') + 2 \sum_{m=1}^{n} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}\, P_n^m(x)\, P_n^m(x') \cos(m(\Phi-\Phi')) \qquad \text{(A1.8)}$$

D. Relação de Ortogonalidade

$$\int_{-1}^{1} P_n(x)\, P_m(x)\, dx = \frac{2}{2n+1}\, \delta_{m,n} \qquad \text{(A1.9)}$$

E. Valores Especiais

$$P_o(x) = 1 \qquad W_{-1}(x) = 0$$
$$P_1(x) = x \qquad W_o(x) = 1 \qquad \text{(A1.10)}$$

A2. POLINÔMIOS DE LAGUERRE (não normalizados) (1)

A. Definições

1. Polinômios de Laguerre do grau n (Fórmula de Rodrigues)

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^n\ e^{-x}) \qquad \text{(A2.1)}$$

2. Polinômios generalizados de Laguerre do grau n e ordem m

$$L_n^{(m)}(x) = (-1)^m \frac{d^m}{dx^m} L_{n+m}(x) \qquad m > -1 \qquad \text{(A2.2)}$$

B. Relação de Recorrência

$$(n+1)\, L_{n+1}^{(m)}(x) + (m+2n+1-x)\, L_n^{(m)}(x) + n\, L_{n-1}^{(m)}(x) = 0 \qquad \text{(A2.3)}$$

$$n,m=0,1,\ldots\ldots\ldots$$

C. Equação Diferencial

$$x\,\frac{d^2}{dx^2} L_n^{(m)}(x) + (m+1-x)\,\frac{d}{dx} L_n^{(m)}(x) + n\, L_n^{(m)}(x) = 0 \qquad \text{(A2.4)}$$

Relação Diferencial

$$x\,\frac{d}{dx} L_n^{(m)}(x) = n\, L_n^{(m)}(x) - (n+m)\, L_{n-1}^{(m)}(x) \qquad \text{(A2.5)}$$

D. Relação de Ortogonalidade

$$\int_0^\infty x^m e^{-x}\, L_n^{(m)}(x)\, L_k^{(m)}(x)\, dx = \frac{\Gamma(n+m+1)}{n!}\,\delta_{n,k} \qquad m>-1 \qquad \text{(A2.6)}$$

E. Valores Especiais

$$L_o^{(m)}(x) = 1$$

$$L_1^{(m)}(x) = (m+1-x) \qquad \text{(A2.7)}$$

A3. FUNÇÃO DELTA DE DIRAC (18)

A. Definição - A função Delta de Dirac $\delta(x)$ é definida por

$$\int_a^b f(y)\,\delta(y-x)\,dy = \begin{cases} 0 & \text{se } x<a \text{ ou } x>b \\ 1/2\ f(x) & \text{se } x=a \text{ ou } x=b \\ f(x) & \text{se } a<x<b \end{cases} \qquad \text{(A3.1)}$$

para $a<b$ e onde $f(y)$ é uma função arbitrária, continua para $y=x$

A definição acima implica nas relações

$$\delta(x) = 0 \qquad (x \neq 0) \tag{A3.2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\, dx = 1 \tag{A3.3}$$

vale ainda a representação

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{itx} dt \tag{A3.4}$$

B. Derivada da Função Delta de Dirac - podem ser definidas as funções

$$\delta^{(n)}(x) = \frac{d^n \delta(x)}{dx^n} \tag{A3.5}$$

$$\int_a^b f(y)\, \delta^{(n)}(y-x)\, dy = \begin{cases} 0 \text{ se } x<a \text{ ou } x>b \\ 1/2\ (-1)^n \left.\dfrac{d^n f(y)}{dy^n}\right|_{y=x} \text{ se } x=a \text{ ou } x=b \\ (-1)^n \left.\dfrac{d^n f(y)}{dy^n}\right|_{y=x} \text{ se } a<x<b \end{cases} \tag{A3.6}$$

Usando a relação (A3.4) tem-se

$$\delta^{(n)}(x-a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (it)^n \exp(it(x-a))\, dt \tag{A3.7}$$

C. Propriedades

$$\delta(ax) = \frac{1}{a}\, \delta(x) \qquad a>0 \tag{A3.8}$$

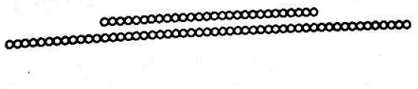
notação simbólica

$$\delta^{(n)}(x) = (-1)^n\, n!\, \frac{\delta(x)}{x^n} \qquad n>0 \tag{A3.9}$$

de onde

$$\delta^{(n)}(x) = (-1)^n \delta^{(n)}(-x) \qquad \text{(A3.10)}$$

para n = 0,1,2,...



APÊNDICE B

SOLUÇÃO DO SISTEMA DE EQUAÇÕES (II.2.16)

Seja o sistema de equações

$$|B^1(\nu)> - \left[[\nu U] - [\nu\gamma^o]\right] |B^o(\nu)> = 0$$

$$(n+1)|B^{n+1}(\nu)> + n|B^{n-1}(\nu)> - (2n+1)\left[[\nu U] - [\nu\gamma^n]\delta_{n,1}\right] |B^n(\nu)> = 0$$

$$n = 1,2,..,N-1$$

$$N|B^{N-1}(\nu)> - (2N+1)\,[\nu U]\;|B^N(\nu)> = 0 \qquad (B.1)$$

para solução do sistema (B.1) será utilizado o método proposto por Travelli (34).

O sistema (B.1) pode ser representado por (N-2) equações idênticas à relação de recorrência dos polinômios de Legendre (A1.6) e mais três equações diferentes que são as correspondentes a n = 0,1 e N.

Os polinômios de Legendre $P_n(x)$ e as funções de Legendre de segunda espécie $Q_n(x)$ satisfazem (A1.6):

$$(n+1)\,Z_{n+1}(x) - (2n+1)\times Z_n(x) + n\,Z_{n-1}(x) = 0 \qquad (A1.6)$$

e devido à linearidade desta equação, uma combinação linear de soluções $P_n(x)$ e $Q_n(x)$ também deverá ser solução.

Travelli propõe três soluções $|R^n(\nu)>$, $|S^n(\nu)>$ e $|T^n(\nu)>$ e impõe que

estas soluções satisfaçam as três equações restantes e isto será feito a seguir.

Sejam três vetores $|R^n(\nu)>$, $|S^n(\nu)>$ e $|T^n(\nu)>$ que satisfazem:

$$\begin{aligned}
&a)\ |R^n(\nu)> = |R^o(\nu)> && \text{para } n=0\\
&b)\ |S^n(\nu)> = |0> && \text{para } n=0\\
&\quad\ |S^n(\nu)> = |S^1(\nu)> && n=1\\
&c)\ |T^n(\nu)> = |0> && \text{para } n=0\\
&\quad\ |T^n(\nu)> = |0> && n=1\\
&\quad\ |T^n(\nu)> = |T^2(\nu)> && n=2
\end{aligned} \qquad \text{(B.2)}$$

portanto, dados $|R^o(\nu)>$, $|S^1(\nu)>$ e $|T^2(\nu)>$ todos os outros vetores ficam determinados pela relação de recorrência (A1.6).

As expressões para $|R^n(\nu)>$, $|S^n(\nu)>$ e $|T^n(\nu)>$ são obtidas por uma combinação linear de polinômios e funções de Legendre. Escolhe-se:

$$|R^n(\nu)>\ ,|S^n(\nu)>\ \text{e}\ |T^n(\nu)> = P_n([\nu U])\ |A> + Q_n([\nu U])\ |B> + \sum_i |C_i>\delta_{n,i} \qquad \text{(B.3)}$$

onde a somatória é nula a menos que a combinação linear dos polinômios e funções de Legendre se anule para i = n e i = n+1.

1. <u>Cálculo de $|R^n(\nu)>$</u> - Substituindo-se (B.3) em (B.2a) tem-se

$$|R^o(\nu)> = P_o([\nu U])\ |A> + Q_o([\nu U]\ |B> \qquad \text{(B.4)}$$

Utilizando (A1.10) tem-se

$$|R^o(\nu)> = |A> + Q_o([\nu U])\ |B>$$

e tomando $|B\rangle = |0\rangle$ obtem-se

$$|A\rangle = |R^{o}(\nu)\rangle \tag{B.5}$$

e, de (B.3), $|R^{n}(\nu)\rangle = P_{n}([\nu U])\,|R^{o}(\nu)\rangle$ (B.6)

2. Cálculo de $|S^{n}(\nu)\rangle$ - Substituindo-se (B.3) em (B.2b) tem-se

$$\begin{aligned} &a)\quad |S^{o}(\nu)\rangle = |A\rangle + Q_{o}([\nu U])\,|B\rangle = |0\rangle \\ &b)\quad |S^{1}(\nu)\rangle = P_{1}([\nu U])\,|A\rangle + Q_{1}([\nu U])\,|B\rangle \end{aligned} \tag{B.7}$$

de (B.7a) obtem-se

$$|A\rangle = -\,Q_{o}([\nu U])\,|B\rangle \tag{B.8}$$

e substituindo (B.8) em (B.7b) tem-se

$$|S^{1}(\nu)\rangle = -\,P_{1}([\nu U])\,Q_{o}([\nu U])\,|B\rangle + Q_{1}([\nu U])\,P_{o}([\nu U])\,|B\rangle$$

utilizando (A1.7) tem-se

$$|B\rangle = -|S^{1}(\nu)\rangle$$

e

$$|A\rangle = Q_{o}([\nu U])\,|S^{1}(\nu)\rangle$$

e, de (B.3) , tem-se

$$|S^{n}(\nu)\rangle = \{Q_{o}([\nu U])\,P_{n}([\nu U]) - Q_{n}([\nu U])\}\,|S^{1}(\nu)\rangle$$

que, considerando (A1.4), fica

$$|S^{n}(\nu)\rangle = W_{n-1}([\nu U])\,|S^{1}(\nu)\rangle \tag{B.9}$$

3. Cálculo de $|T^{n}(\nu)\rangle$ - Substituindo (B.3) em (B.2c) tem-se

$$a)\quad |T^{o}(\nu)\rangle = |A\rangle + Q_{o}([\nu U])\,|B\rangle + |C_{o}\rangle = |0\rangle$$

$$b)\quad |T^{1}(\nu)\rangle = P_{1}([\nu U])\,|A\rangle + Q_{1}([\nu U])\,|B\rangle = |0\rangle \qquad (B.10)$$

$$c)\quad |T^{2}(\nu)\rangle = P_{2}([\nu U])\,|A\rangle + Q_{2}([\nu U])\,|B\rangle$$

Eliminando-se $|A\rangle$ de (B.10b), tem-se

$$P_{1}([\nu U])\,|A\rangle = -\,Q_{1}([\nu U])\,|B\rangle$$

sendo $P_{1}([\nu U])$ matriz não singular, existe $P_{1}^{-1}([\nu U])$ tal que

$$P_{1}^{-1}([\nu U])\,P_{1}([\nu U])\,|A\rangle = -\,P_{1}^{-1}([\nu U])\,Q_{1}([\nu U])\,|B\rangle$$

e, substituindo-se em (B.10c), obtém-se

$$|T^{2}(\nu)\rangle = \{-P_{2}([\nu U])\,P_{1}^{-1}([\nu U])\,Q_{1}([\nu U]) + Q_{2}([\nu U])\}|B\rangle \qquad (B.11)$$

Como as matrizes $P_{n}([\nu U])$ comutam entre si, multiplicando-se (B.11) por $P_{1}([\nu U])$, tem-se

$$P_{1}([\nu U])\,|T^{2}(\nu)\rangle = -\{-P_{2}([\nu U])\,Q_{1}([\nu U]) + P_{1}([\nu U])\,Q_{2}([\nu U])\}|B\rangle$$

e, usando a relação (A1.7), tem-se

$$|B\rangle = -\,2\,P_{1}([\nu U])\,|\,T^{2}(\nu)\rangle$$

$$|A\rangle = 2\,P_{1}^{-1}([\nu U])\,Q_{1}([\nu U])\,P_{1}([\nu U])\,|\,T^{2}(\nu)\rangle = 2\,Q_{1}([\nu U])\,|T^{2}(\nu)\rangle$$

e, de (B.10a)

$$|C_{o}\rangle = -\,|A\rangle - Q_{o}([\nu U])\,|B\rangle$$

$$|C_{o}\rangle = -\,2\{Q_{1}([\nu U]) - P_{1}([\nu U])\,Q_{o}([\nu U])\}|T^{2}(\nu)\rangle = 2|T^{2}(\nu)\rangle$$

e, portanto de (B.3), tem-se

$$|T^n(\nu)> = 2\{P_n([\nu U])\, Q_1([\nu U]) - Q_n([\nu U])\, P_1([\nu U]) + \delta_{n,o}\}|T^2(\nu)>$$

Com a utilização de (A1.7) e (A1.10) pode-se colocar $|T^n(\nu)>$ na forma

$$|T^n(\nu)> = 2\{P_n([\nu U])\left[[\nu U]\, Q_o([\nu U]) - [I]\right] - [\nu U]\, Q_n([\nu U]) + \delta_{n,o}\}|T^2(\nu)>$$

e, considerando (A1.4) e tendo em vista a comutabilidade dos polinômios de Legendre, a relação anterior fica:

$$|T^n(\nu)> = 2\{W_{n-1}([\nu U])\,[\nu U] - P_n([\nu U]) + \delta_{n,o}\}\,|T^2(\nu)> \qquad (B.12)$$

Supondo que

$$|B^n(\nu)> = |R^n(\nu)> + |S^n(\nu)> + |T^n(\nu)> \qquad (B.13)$$

também seja solução do sistema (B.1), a determinação de $|R^o(\nu)>$, $|S^1(\nu)>$ e $|T^2(\nu)>$ será feita a seguir com a utilização das equações para n=0,1 e N.

$$n = o \qquad |B^1(\nu)> - \left[[\nu U] - [\nu\gamma^o]\right]\,|B^o(\nu)> = 0$$

$$|R^1(\nu)> + |S^1(\nu)> - [\nu U]\,|R^o(\nu)> + [\nu\gamma^o]\,|R^o(\nu)> = 0$$

utilizando (B.6) obtém-se para $|S^1(\nu)>$ a relação

$$|S^1(\nu)> = -[\nu\gamma^o]\,|R^o(\nu)> \qquad (B.14)$$

$$n = 1 \qquad 2\,|B^2(\nu)> + |B^o(\nu)> - 3\left[[\nu U] - [\nu\gamma^1]\right]\,|B^1(\nu)> = 0$$

ou seja

$$2|R^2(\nu)> + 2|S^2(\nu)> + 2|T^2(\nu)> + |R^o(\nu)> - 3\Big[[\nu U] - [\nu\gamma^1]\Big]|R^1(\nu)>$$

$$- 3\Big[[\nu U] - [\nu\gamma^1]\Big]\ |S^1(\nu)> = 0 \qquad (B.15)$$

como de (B.6) tem-se que

$$2|R^2(\nu)> = - |R^o(\nu)> + 3\ [\nu U]^2\ |R^o(\nu)>$$

e de (B.9) e (B.14)

$$2|S^2(\nu)> = - 3\ [\nu U]\ [\nu\gamma^o]\ |R^o\ (\nu)\ >$$

a relação (B.15) fica

$$- |R^o(\nu)> + 3[\nu U]^2\ |R^o(\nu)> - 3[\nu U]\ [\nu\gamma^o]\ |R^o(\nu)> + 2|T^2\ (\nu)> + |R^o(\nu)>$$

$$- 3\ [\nu U]^2\ |R^o\ (\nu)> + 3[\nu\gamma^1]\ [\nu U]|R^o(\nu)> + 3[\nu U][\nu\gamma^o]|R^o(\nu)> +$$

$$- 3\ [\nu\gamma^1]\ \ [\nu\gamma^o]|R^o(\nu)> = 0$$

tem-se para $|T^2(\nu)>$ a relação

$$|T^2(\nu)> = (3/2)\ [\nu\gamma^1]\{\ [\nu\gamma^o] - [\nu U]\}\ \ |R^o(\nu)> \qquad (B.16)$$

Utilizando os valores de $|S^1(\nu)>$ e $|T^2(\nu)>$ dados por (B.14) e (B.16) tem-se que o sistema (B.1) é satisfeito a menos da equação para $n=N$ e $|R^o(\nu)>$, arbitrário até o momento, será escolhido de forma a satisfazer a última equação.

$n = N$ $\qquad N\ |B^{N-1}(\nu)> - (2N+1)\ [\nu U]|B^N(\nu)> = 0$

ou sua análoga $\qquad |B^{N+1}(\nu)> = 0$

como $\qquad |B^{N+1}(\nu)> = |R^{N+1}(\nu)> + |S^{N+1}(\nu)> + |T^{N+1}(\nu)> \qquad (B.17)$

e, das relações (B.6), (B.9), (B.14), (B.12) e (B.16) tem-se

$$|R^{N+1}(\nu)> = P_{N+1}([\nu U])\ R^{o}(\nu)>$$

$$|S^{N+1}(\nu)> = -W_{N}([\nu U])\ [\nu\Upsilon^{o}]\ |R^{o}(\nu)>$$

$$|T^{N+1}(\nu)> = 3\{W_{N}([\nu U])[\nu U] - P_{N+1}([\nu U]) + \delta_{N+1,0}\}[\nu\Upsilon^{1}]\{[\nu\Upsilon^{o}] - [\nu U]\}\ |R^{o}(\nu)>$$

Substituindo em (B.17) tem-se

$$\{P_{N+1}([\nu U])\left[[I] + 3[\nu\Upsilon^{1}]\left[[\nu U] - [\nu\Upsilon^{o}]\right]\right] + \tag{B.19}$$

$$- W_{N}([\nu U])\left[[\nu\Upsilon^{o}] + 3[\nu U][\nu\Upsilon^{1}]\left[[\nu U] - [\nu\Upsilon^{o}]\right]\right]\}\ |R^{o}(\nu)> = 0$$

de (B.15) e das relações (B.2) segue que

$$|B^{o}(\nu)> = |R^{o}(\nu)> + |S^{o}(\nu)> + |T^{o}(\nu)> \tag{B.20}$$

e portanto $|R^{o}(\nu)> = |B^{o}(\nu)>$

E, a solução geral do sistema (B.1), ou seja, (II.2.16) fica :

$$|B^{n}(\nu)> = \{P_{n}([\nu U])\{[I] + 3[\nu\Upsilon^{1}]\left[[\nu U] - [\nu\Upsilon^{o}]\right]\} + \tag{B.21}$$

$$- W_{n-1}([\nu U])\{[\nu\Upsilon^{o}] + 3[\nu U][\nu\Upsilon^{1}]\left[[\nu U] - [\nu\Upsilon^{o}]\right]\}\}\ |B^{o}(\nu)>$$

Com $|B^{o}(\nu)>$ determinado pela solução do sistema (B.19) que sendo homogêneo, só terá solução não trivial para os valores de ν tais que o determinante dos coeficientes seja não nulo. Esta condição tira a arbitrariedade de ν.

APÊNDICE C

CÁLCULO DO COSSENO MÉDIO DO ÂNGULO DE ESPALHAMENTO

Seja $\Sigma_s(E\to E',\mu_o)$ tal que $\Sigma_s(E\to E',\mu_o)\,dE'd\mu_o$ - probabilidade, por unidade de percurso, de que um neutron com energia E e direção de movimento qualquer sofra um choque elástico e depois do choque sua energia entre E' e E'+dE' e sua direção de movimento seja desviada de um ângulo θ tal que $\cos\theta = \mu_o$. Portanto $\bar{\mu}(E)$ pode ser dado por

$$\bar{\mu}(E) = \frac{\int_0^\infty \int_{-1}^{1} \mu_o \Sigma_s(E\to E',\mu_o)\, d\mu_o\, dE'}{\int_0^\infty \int_{-1}^{1} \Sigma_s(E\to E',\mu_o)\, d\mu_o\, dE'} \qquad (C.1)$$

Expandindo o núcleo de espalhamento em esféricas harmônicas de acordo com a relação (II.1.10), na aproximação do espalhamento linearmente anisotrópico, tem-se

$$\Sigma_s(E\to E',\mu_o) = \sum_{n=0}^{1} \frac{2n+1}{2} \Sigma_s^n(E\to E')\, P_n(\mu_o) \qquad (C.2)$$

E, integrando (C.1) considerando (C.2), tem-se

A. Denominador

$$\int_0^\infty dE' \int_{-1}^{1} d\mu_o\, \Sigma_s(E\to E',\mu_o) =$$

$$= 1/2 \int_0^\infty dE'\, \Sigma_s^o(E\to E') \int_{-1}^{1} d\mu_o + 3/2 \int_0^\infty dE'\, \Sigma_s^1(E\to E') \int_{-1}^{1} \mu_o\, d\mu_o$$

$$= \int_0^\infty \Sigma_s^o (E-E')\, dE' = \Sigma_s(E) \qquad (C.3)$$

B. Numerador

$$\int_0^\infty dE' \int_{-1}^{1} d\mu_o\, \mu_o\, \Sigma_s(E\to E', \mu_o) =$$

$$= 1/2 \int_0^\infty dE' \Sigma_s^o (E\to E') \int_{-1}^{1} \mu_o\, d\mu_o + 3/2 \int_0^\infty dE' \Sigma_s^1 (E\to E') \int_{-1}^{1} \mu_o^2\, d\mu_o =$$

$$= 3/2 \int_0^\infty dE' \Sigma_s^1 (E\to E') \quad 2/3$$

Considerando que no núcleo de espalhamento do Gás Pesado $\Sigma_s^1(E\to E')$ é dado por (III.1.13) a relação anterior fica

$$= -\frac{2\Sigma_b}{3A} \int_0^\infty dE'\, E' \left[\delta^{(2)}(E'-E) + \delta^{(1)}(E'-E)\right] =$$

$$= -\frac{2\Sigma_b}{3A} \left\{(-1)^2 \frac{d^2}{dE'^2}\left[E'\right] + (-1)\frac{d}{dE'}\left[E'\right]\right\} = \frac{2\Sigma_b}{3A} \qquad (C.4)$$

Substituindo (C.3) e (C.4) em (C.1) e considerando (III.1.15) obtem-se para $\bar{\mu}(E)$ a relação

$$\bar{\mu}(E) = \frac{2}{3A\,(1+1/(2AE))} \qquad (C.5)$$

APÊNDICE D

Nas listagens apresentadas a seguir não estão incluidos os programas e sub programas pertencentes à Biblioteca de Programas do Centro de Processamento de Dados do IEA. Os programas se encontram na seguinte ordem:

1. Programa ALFAO & ALFA1
2. Programa CALB4
3. Programa CALNIS4
4. Programa CEMAS4
5. Subrotina DETPW
6. Função FF
7. Função FI
8. Função FIAS
9. Programa FLUXOS
10. Função GAMA
11. Função GAMASI
12. Subrotina LAGUE
13. Subrotina LEPW
14. Programa MATRIZ V
15. Programa MGOG1
16. Programa MPLILJ
17. Programa PICOS
18. Subrotina RAINT

```
C *** PROGRAMA ALFA0 + ALFA1
C
C      CALCULO DE ALFA0(I,J) E ALFA1(I,J)
C      ALFA0(I,J) E A MATRIZ DE ESPALHAMENTO ISOTROPICO
C      ALFA1(I,J) E A MATRIZ DE ESPALHAMENTO LINEARMENTE
C      ANISOTROPICO
C
       DIMENSION ALFA0(6,6), ALFA1(6,6)
       READ 1, EMI
       DO 10 I=1,6
       DO 10 J=1,I
       AI = I-1.
       AK = I
       AJ = J
       IF(I-J) 20,30,20
   30  ALFA0(I,J) = (1.-2.*EMI*AI) + EMI*.5
       ALFA1(I,J) = 2.*EMI*AJ/3.
       GO TO 10
   20  AA = SQRT(AJ/AK)
       ALFA0(I,J) = EMI*AA/2.
       ALFA1(I,J) = 0.
       ALFA0(J,I) = ALFA0(I,J)
       ALFA1(J,I) = ALFA1(I,J)
   10  CONTINUE
       PRINT 2
       PRINT 3,((ALFA0(I,J), I=1,6), J=1,6)
       PRINT 4
       PRINT 3,((ALFA1(I,J), I=1,6), J=1,6)
       DO 100 I=1,6
  100  PUNCH 5,(ALFA0(I,J),J=1,I)
       PUNCH 5,(ALFA1(I,I),I=1,6)
     1 FORMAT (F7.3)
     2 FORMAT (1HC,/,18H MATRIZ ALFA0(I,J),/)
     3 FORMAT (1H0,6E13.7)
     4 FORMAT (1H0,/,18H MATRIZ ALFA1(I,J),/)
     5 FORMAT (1H ,5E14.8)
       END
```

```
C *** PROGRAMA CALB4
C
C      CALCULO DOS BN E DOS AN
C
       DIMENSION DE(6,6),X(6),GO(6,6),G1(6,6),BE(6),Z(6),
      1Y(6),YY(6),W(6),WW(6),B0(6),C(6,6),S(6,6),D(6,6)
       READ 1, ABSOR
       READ 2, N,L
       INDI = 0
       L1 = L+1
       DO 111I=1,L1
   111 READ 1,(S(I,J),J=1,L1)
       READ 1,(BE(I), I=1,L1)
       DO 10 I=1,L1
    10 READ 1, (GO(I,J), J=1,L1)
       PRINT 3,N,L,ABSOR
   250 DO 20 I=1,L1
```

```
  20 READ 1,(G1(I,J), J=1,L1)
 200 IF(G1(1,1)) 12,11,12
  11 PRINT 4,L,N
     INDI = INDI+1
     GO TO 13
  12 PRINT 5,L,N
     INDI = INDI+1
  13 CONTINUE
     N1 = N+1
     NR = N1*L1/2
     DO 100 KK=1,NR
     READ 1, ANI
     PRINT 6, ANI
     PRINT 16
     DO 30 I=1,L1
  30 READ 1, (DE(I,J), J=1,L1)
C
C      CALCULO DE BO
C
       CALL SLH(DE,L1,BO)
       PRINT18,(BO(J),J=1,L1)
C
C      TESTE DE BO
C
       CALL MV(L1,DE,BO,X)
       PRINT 15
       PRINT 8,(X(J), J=1,L1)
       PRINT 16
C
C      CALCULO DE AO
C
       CALL MV(L1,S,BO,X)
       PRINT19,(X(J),J=1,L1)
       PUNCH 1,(X(J), J=1,L1)
       PRINT 16
       DO 100 I=1,N
       I1 = I+1
       DO 101 J=1,L1
       DI = BE(J)*ANI
       CALL LEPW(I,1,DI,Y,W)
       YY(J) = Y(I1)
 101   WW(J) = W(I1)
       DO 41 J=1,L1
       DO 41 K=1,J
       IF(K-J) 43,42,43
  42   C(J,J) = ANI*(BE(J)-GO(J,J))
       GO TO 41
  43   C(J,K) = -ANI*GO(J,K)
       C(K,J) = C(J,K)
  41   CONTINUE
       CALL MM(L1,G1,C,D)
C *** PROGRAMA ALFAO + ALFA1

       DO 40 J=1,L1
       DO 40 K=1,L1
       IF(K-J) 44,45,44
  45   D(J,J) = 1. + 3.*ANI*D(J,J)
       GO TO 40
  44   D(J,K) = 3.*ANI*D(J,K)
  40   CONTINUE
       DO 50 J=1,L1
```

```
      DO 50 K=1,L1
      D(J,K) = (YY(J)-WW(J)*ANI*BE(J))*D(J,K)+WW(J)*C(J,K)
   50 CONTINUE
      PRINT 16
      CALL MV(L1,D,BO,X)
      CALL MV(L1,S,X,Z)
      PRINT 7, I
      PRINT 8,(X(J),J=1,L1)
      PRINT 9, I
      PRINT 8,(Z(J),J=1,L1)
      PUNCH 1,(Z(J), J=1,L1)
      PRINT 16
  100 CONTINUE
      IF(INDI-2) 120,130,120
  120 N = 3
      IF (INDI-4) 121,131,131
  121 GO TO 200
  130 N = 1
      GO TO 250
  131 CONTINUE
    1 FORMAT (5E14.8)
    2 FORMAT (2I2)
    3 FORMAT(1H ,2HN=,I3,2HL=,I3,6HABSOR=,F5.3,/)
    4 FORMAT (1H ,20X,15HCASO ISOTROPICO,5X,2HL=,I2,3X,2HN=
     ,I2,/)
    5 FORMAT (1H ,20X,17HCASO ANISOTROPICO,5X,2HL=,I2,3X,2H
     N=,I2,/)
    6 FORMAT (1H ,/,30X,4HANI=,E14.8,/)
    7 FORMAT (1H ,2HB(,I2,1H),/)
    8 FORMAT (1H ,6E14.8)
    9 FORMAT (1H ,2HA(,I2,1H),/)
   15 FORMAT (1H ,/,12H TESTE DE BO,/)
   16 FORMAT (//)
   18 FORMAT(1H ,3HBO=,4X,6E14.8,/)
   19 FORMAT(1H ,3HAO=,4X,6E14.8,/)
      END
```

```
C *** PROGRAMA CALNIS4
C
C     CALCULA OS VALORES CARACTERISTICOS NA APROXIMACAO L-N
C
      DIMENSION GO(6,6),G1(6,6),BE(6),Y(6),W(6),C(6,6),
     1DE(6,6),G(6),D(6)
      COMMON N,L1,GO,G1,BE,DE
      READ 2, ABSOR
      PRINT 8,ABSOR
      READ 1,E1,E,L,N
      IND = 0
      NI = N
      L1 = L+1
      DO 10 I=1,L1
   10 READ 2,(GO(I,J),J=1,L1)
      READ 2, (BE(I),I=1,L1)
  450 DO 20 I=1,L1
   20 READ 2,(G1(I,J),J=1,L1)
```

```
  350 NI = N
      N = N+1
      NR = L1*N/2
      READ 1, H
      IF(G1(1,1)) 13,14,13
   14 PRINT 24,L,NI
      IND = IND+1
      GO TO 12
   13 PRINT 23,L,NI
      IND = IND+1
   12 CONTINUE
      DO 1000 M=1,NR
      PRINT 3
      READ 7, EI,ES
      PRINT 6,EI,ES
      ANI = EI
      Z1 = DETPW(N,L1,G0,G1,BE,ANI,DE)
      ANI = ANI + H
      PRINT 6, ANI
  100 Z2 = DETPW(N,L1,G0,G1,BE,ANI,DE)
      PRINT 6,Z1,Z2
      IF(Z1*Z2) 15,15,25
   25 ANI = ANI + H
      PRINT 6, ANI
      IF(ANI-(ES+H)) 16,26,26
   16 Z1 = Z2
      GO TO 100
   15 X1 = ANI - H
C
C     TESTE - SE E RAIZ OU DESCONTINUIDADE
C
      X2 = ANI
      X3 = X1 + H/3.
      Z3 = DETPW(N,L1,G0,G1,BE,X3,DE)
      S1 = ABS(Z1) + ABS(Z2)
      PR = Z1*Z3
      IF(PR) 30,35,40
   40 S2 = ABS(Z2) + ABS(Z3)
      GO TO 200
   30 S2 = ABS(Z1) + ABS(Z3)
  200 IF(S2-S1) 35,35,25
   35 CALL RAINT(X1,X2,E,E1,Y0)
      Z3 = DETPW(N,L1,G0,G1,BE,Y0,DE)
      YNU = 1./(Y0*Y0)
      PRINT 4, YNU,Y0,Z3
      DO 18 I=1,L1
   18 PRINT 19, (DE(I,J),J=1,L1)
      GO TO 1000
   26 PRINT 5
 1000 CONTINUE
      IF (IND-2) 300,400,300
C *** PROGRAMA ALFA0 + ALFA1

  300 N = 3
      IF(IND-4) 310,320,320
  310 GO TO 350
  400 N = 1
      GO TO 450
    1 FORMAT (2E5.0,2I2)
    2 FORMAT (5E14.8)
    3 FORMAT ( 1H ,31HINTERVALO PARA PESQUISA DA RAIZ,/)
```

```
  4 FORMAT (1H ,10H1/(NI**2)=,E14.8,3HNU=,E14.8,4HDET=,E1
     4.8)
  5 FORMAT (1H ,28HA RAIZ NAO ESTA NO INTERVALO,/)
  6 FORMAT (1H ,2E14.8,/)
  7 FORMAT (2F9.7)
  8 FORMAT (1H ,6HABSOR=,F6.3,/)
 19 FORMAT (1H ,6E14.8)
 23 FORMAT (1H ,17HCASO ANISOTROPICO,5X,2HL=,I3,2HN=,I3/)
 24 FORMAT (1H ,15HCASO ISOTROPICO,5X,2HL=,I3,2HN=,I3,/)
320 END



C *** PROGRAMA CEMAS4
C
C      CALCULO DAS CONSTANTES C+
C      M=0  CASO ISOTROPICO  *  M=1  CASO ANISOTROPICO
C
       DIMENSION Y(6),W(6),COEFC(12,12),AMA(6,6,12),AME(6,6)
      1,ID(12),U(12,12),A(12,13),TTIND(12),TIND(12),ANI(12),
      2CMA(12)
       READ 4, ABSOR
       PRINT 14, ABSOR
       READ 1,NN,L
       M = 0
       L1 = L+1
  151  N1 =NN+1
       N2 = N1/2
       NR = N2*L1
       IF (M) 100,100,110
  100  PRINT 2,NN,L
       GO TO 120
  110  PRINT 3,NN,L
  120  CONTINUE
       DO 12 J=1,NR
   12  READ 4, ANI(J)
       DO 11 J=1,NR
       DO 11 N=1,N1
   11  READ 4, (AMA(N,K,J) , K=1,L1)
       DO  63 J=1,NR
       DO 63 N=1,N1
       DO 63 K=1,L1
   63  AMA(N,K,J) = (-1.)**(L)*AMA(N,K,J)
       DO 10 N=1,N1
       DO 10 K=1,L1
   10  AME(N,K) = ((-1.)**(N+1))*AMA(N,K,1)
C
C      AMI = RAIZES POSITIVAS DE PN+1
C
       DO 20 I=1,N2
       READ 4,AMI
       II = (I-1)*L1
       CALL LEPW(NN,0,AMI,Y,W)
       DO 20 K=1,L1
       KI = II+K
       DO 20 J=1,NR
       TIND(KI) = 0.
```

```
      COEFC(KI,J) = 0.
      DO 20 N=1,N1
      R = N
      AN = (2.*R-1.)/2.
      BN = AN*Y(N)
      TIND(KI) = TIND(KI) - BN*AME(N,K)
   20 COEFC(KI,J) = COEFC(KI,J) + BN*AMA(N,K,J)
      PRINT 6
      DO 30 I=1,NR
   30 PRINT 15, (COEFC(I,J) ,J=1,NR)
      PRINT 7
      PRINT 15, (TIND(I), I=1,NR)
      EEE = .1E-5
      CALL GAUSIS(EEE,COEFC,NR,NR,TIND,CMA,KA,U,ICOM,NPOSTO
     )
      PRINT 8
      PRINT 15,(CMA(I), I=1,NR)
      DO 60 J=1,NR
   60 PUNCH 4, CMA(J)
C
C     TESTE DA SOLUCAO DO SISTEMA
C
      DO 50 I=1,NR
      TTIND(I) = 0.
      DO 50 J=1,NR
   50 TTIND(I) = TTIND(I) + COEFC(I,J)*CMA(J)
      PRINT 9
      DO 40 I=1,NR
   40 TTIND(I) = TIND(I)-TTIND(I)
      PRINT 15,(TTIND(I), I=1,NR)
C
C     CALCULO DA DISTANCIA EXTRAPOLADA
C
      ZO = -(ANI(1)/2.)*LOG(-CMA(1))
      PRINT 5, L,NN,ZO
      IF(M) 130,130,140
  130 IF(NN-1) 150,150,160
  150 NN = 3
      GO TO 151
  160 M = 1
      NN = 1
      GO TO 151
  140 IF(NN-1) 170,170,180
  170 NN = 3
      GO TO 151
    1 FORMAT (2I2)
    2 FORMAT(1H ,/,20X,15HCASO ISOTROPICO,5X,2HN=,I2,2HL=,I
         2,//)
    3 FORMAT (1H ,/,20X,17HCASO ANISOTROPICO,5X,2HN=,I2,2HL
         =,I2,//)
    4 FORMAT (5E14.8)
    5 FORMAT (1H ,//,15X,14HAPROXIMACAO L=,I2,5X,2HN=,I2,/,
         13X,22HDISTAN
     1CIA EXTRAPOLADA=,E14.8)
    6 FORMAT (1H ,20X, 27HMATRIZ DOS COEFICIENTE DE C,/)
    7 FORMAT (1H ,/,21X,18HTERMO INDEPENDENTE,/)
    8 FORMAT (1H ,/,20X,18HSOLUCAO DO SISTEMA,/)
    9 FORMAT (1H ,/,30X,5HTESTE,/)
   14 FORMAT (1H ,30X,6HABSOR=,E14.8,/)
```

```
 15 FORMAT (1H ,8(E14.8,2X))
180 END



C *** SUBROTINA DETPW(N,NT,X,Y,W)
C
C     CALCULA O DETERMINANTE DO SISTEMA DO QUAL NI E
C     SOLUCAO
C
      FUNCTION DETPW(N,L1,G0,G1,BE,ANI,DE)
      DIMENSION G0(6,6),G1(6,6),BE(6),Y(6),W(6),C(6,6),
     1DE(6,6),G(6),D(6)
      NN = N+1
      DO 10 I=1,L1
      D(I) = ANI*BE(I)
      DI = D(I)
      CALL LEPW (N,1,DI,Y,W)
   10 G(I) =  Y(NN)/(ANI*W(NN))
      IF (G1(1,1)) 50,51,50
   51 DO 52 I=1,L1
      DO 52 J=1,L1
   52 DE(I,J) = 0.
      GO TO 53
   50 DO 20 I=1,L1
      DO 20 J=1,I
      IF(I-J) 15,25,15
   25 C(I,I) = 3.*ANI*(D(I)-ANI*G0(I,I))
      GO TO 20
   15 C(I,J) =-3.*ANI*ANI*G0(I,J)
   20 C(J,I) = C(I,J)
      CALL MM(L1,G1,C,DE)
   53 DO 30 I=1,L1
      DO 30 J=1,L1
      IF(I-J) 35,45,35
   45 C(I,I) = G(I) - G0(I,I) + (G(I)-BE(I))*DE(I,I)
      GO TO 30
   35 C(I,J) = -G0(I,J) + (G(I)-BE(I))*DE(I,J)
   30 CONTINUE
      DO 40 I=1,L1
      DO 40 J=1,L1
   40 DE(I,J) = C(I,J)
      CALL DTC (C,L1,DETPW)
      PRINT 2, DETPW
    2 FORMAT (1H ,4HDET=, E14.8,/)
      RETURN
      END



C *** FUNCAO FF(X)
C
C     DEFINICAO DA FUNCAO A SER USADA NA SUBROUTINA RAINT
C
      FUNCTION FF(X)
```

```
      DIMENSION GO(6,6),G1(6,6),BE(6),Y(6),W(6),C(6,6),
     1DE(6,6),G(6),D(6)
      COMMON N,L1,GO,G1,BE,DE
      FF= DETPW(N,L1,GO,G1,BE,X,DE)
      RETURN
      END



C *** FUNCAO FI(NR,L1,AMA,CMA,X,ANI,E)
C
C     CALCULA A DERIVADA DO FLUXO REAL NO PONTO
C
      FUNCTION FI(NR,L1,AMA,CMA,X,ANI,E)
      DIMENSION AMA(6,12),ANI(12),CMA(12),DL(6),S(6)
      COMMON ANI,AMA,CMA,DL,X,L1,NR
      FIA= FIAS(NR,L1,AMA,CMA,X,ANI,E)
      FI = 0.
      DO 1 K=1,L1
      S(K) = 0.
      K1 = K-1
      AK = K
      BK = K1
      CK = SQRT(AK*BK)
      DO 2 J=2,NR
    2 S(K) = S(K) + CMA(J)*AMA(K,J)*EXP(-X/ANI(J))
      IF(K-1)10,10,11
   10 FI = FI + S(K)*(1.-E)
      GO TO 1
   11 FI = FI + S(K)*(DL(K)*(AK-E) - CK*DL(K1))
    1 CONTINUE
      FI = FI*EXP(-E)
      FI = FI+FIA
      RETURN
      END



C *** FUNCAO FIAS(NR,L1,AMA,CMA,X,ANI,E)
C
C     CALCULA A DERIVADA DO FLUXO ASSINTOTICO NO PONTO
C
      FUNCTION FIAS(NR,L1,AMA,CMA,X,ANI,E)
      DIMENSION AMA(6,12),ANI(12),CMA(12),DL(6)
      COMMON ANI,AMA,CMA,DL,X,L1,NR
      FIAS = 0.
      CALL LAGUE(L1,E,1,DL)
      A = CMA(1)*EXP(-X/ANI(1)) + EXP(X/ANI(1))
      DO 1 K=1,L1
      K1 = K-1
      AK = K
      BK = K1
      CK = SQRT(AK*BK)
      IF(K-1)10,10,11
   10 FIAS = FIAS + (1.-E)*AMA(1,1)
```

```
      GO TO 1
   11 FIAS = FIAS + AMA(K,1)*(DL(K)*(AK-E)-CK*DL(K1))
    1 CONTINUE
      FIAS = FIAS*EXP(-E)*A
      RETURN
      END



C *** PROGRAMA FLUXOS
C
C       CALCULO DOS FLUXOS -  REAL E ASSINTOTICO
C       NX = NUMERO DE PONTOS X    *    NE = NUMERO DE PONTOS E
C       XI = VALOR INICIAL DE X    *    HX = INCREMENTO EM X
C       EI = VALOR INICIAL DE E    *    HE = INCREMENTO EM E
C       DMAX = DISTRIBUICAO MAXWELLIANA
C
      DIMENSION AMA(12,6),ANI(12),CMA(12),DL(6),S(6),
     1FIA(30),F(30),FN(30),FAN(30)
      READ 1, ABSOR
      PRINT 2, ABSOR
      READ 3, L
      READ 3, NE,NX
      NI = 0
  150 DO 1000 N=1,3,2
C
C       NI=0 - CASO ISOTROPICO  *  NI=1 - CASO ANISOTROPICO
C
      IF(NI) 100,100,200
  100 PRINT 4,N,L
      GO TO 300
  200 PRINT 5,N,L
  300 N1 = N+1
      L1 = L+1
      NR = N1*L1/2
      READ 1,XI,HX
      READ 1, EI,HE
      DO 10 J=1,NR
      READ 1, ANI(J)
      READ 1, CMA(J)
   10 READ 1, (AMA(J,K), K=1,L1)
      DO 11 J=1,NR
      DO 11 K=1,L1
   11 AMA(J,K) =((-1.)**L)*AMA(J,K)
      X = XI
      DO 1000 KK=1,NX
      E = EI
      PRINT 6, X
      PRINT 7
      DO 1100 JJ=1,NE
      FIASS= 0.
      FI = 0.
      CALL LAGUE(L1,E,1,DL)
      DO 20 K=1,L1
   20 FIASS= FIASS+ AMA(1,K)*DL(K)
      DMAX = E*EXP(-E)
      FIASS = DMAX*FIASS*(CMA(1)*EXP(-X/ANI(1)) + EXP(X/ANI
     (1)))
```

```
      DO 30 K=1,L1
      S(K) = 0.
      DO 40 J=2,NR
   40 S(K) = S(K) +CMA(J)*AMA(J,K)*EXP(-X/ANI(J))
   30 FI = FI + S(K)*DL(K)
      FIA(JJ) = FIASS
      F(JJ) = FIASS+FI*DMAX
 1100 E = E+HE
C
C     CALCULO DAS AREAS E NORMALIZACAO
C
      S1 = 0.
      S2 = 0.
      S3 = 0.
      S4 = 0.
      DO 50 I=2,NE,2
      S1 = S1 + F(I)
   50 S3 = S3 + FIA(I)
      NE1 = NE-1
      DO 60 I=3,NE1,2
      S2 = S2+F(I)
   60 S4 = S4 + FIA(I)
      AREAF = HE/3.*((F(1)+F(NE)) + 4.*S1 + 2.*S2)
      AREAFA = HE/3.*((FIA(1)+FIA(NE)) + 4.*S3 + 2.*S4)
      E = EI
      DO 70 I=1,NE
      FN(I) = F(I)/AREAF
      FAN(I) = FIA(I)/AREAFA
      PRINT 8,E,F(I),FN(I),FIA(I),FAN(I)
   70 E = E+HE
      PRINT 12
      PRINT 9, AREAF, AREAFA
      PRINT 13
      IF(X-2.) 1000,1001,1001
 1001 HX = 2.
 1000 X = X+HX
      NI = NI+1
      IF(NI-1) 150,150,160
  160 CONTINUE
    1 FORMAT (5E14.8)
    2 FORMAT (1H ,30X,6HABSOR=,E14.8,/)
    3 FORMAT (2I2)
    4 FORMAT (1H ,10X,15HCASO ISOTROPICO,5X,2HN=,I2,3X,2HL=
        ,I2,//)
    5 FORMAT (1H ,10X,17HCASO ANISOTROPICO,5X,2HN=,I2,3X,2H
        L=,I2,//)
    6 FORMAT (1H ,15X,40HDISTRIBUICAO ENERGETICA DO FLUXO P
        ARA X=,E14.8,
     1//)
    7 FORMAT (1H ,3X,7HENERGIA,13X,5HFLUXO,15X,5HFLUXO,15X,
        5HFLUXO,14X,9
     1HFLUXO AS.,/,42X,11HNORMALIZADO,9X,11HASSINTOTICO,10X
        ,11HNORMALIZA
     2DO,//)
    8 FORMAT (1H ,5(E14.8,6X))
    9 FORMAT (1H ,12HAREA TOTAL =,E14.8,/,1H ,18HAREA ASSIN
        TOTICO =,E14.
     18,//)
   12 FORMAT (1H ,///)
```

```
 13 FORMAT (1H1)
    END



C *** FUNCAO GAMA(K)
C
C       FUNCAO GAMA DE UM NUMERO INTEIRO
C
      FUNCTION GAMA(K)
      GAMA = 1.
      K1 = K-1
      IF(K1)10,10,20
   20 DO 1 I=1,K1
      AI = I
    1 GAMA = AI*GAMA
   10 RETURN
      END



C *** FUNCAO GAMASI(XK)
C
C       FUNCAO GAMA DE UM NUMERO SEMI-INTEIRO
C
      FUNCTION GAMASI(XK)
      K = XK-.5
      GAMASI = 1.77245385
      IF(XK-.5) 10,10,20
   20 DO 1 I=1,K
      AI = I
    1 GAMASI = (2.*AI-1.)*.5*GAMASI
   10 RETURN
      END



C *** SUBROTINA LAGUE(N,X,M,DL)
C
C       CALCULA POLINOMIOS DE LAGUERRE DE ESPECIE M E DE
C       ORDEM N
C
      SUBROUTINE LAGUE(N,X,M,DL)
      DIMENSION DL(6),BL(6)
      BL(1) = 1.
      DL(1) = 1.
      IF(N-1) 1,1,2
    1 RETURN
    2 A = M+1
      BL(2) = A-X
      DL(2) = BL(2)/SQRT(2.)
      N1 = N-1
      IF(N-2) 1,1,3
```

```
    3 DO 4 I=2,N1
      AI = I
      II = I+1
      CI = II
      IL = I-1
      B = M+IL
      BB = IL
      BL(II) = ((2.*BB+A-X)*BL(I)-B*BL(IL))/AI
      C = SQRT(CI)
    4 DL(II) = BL(II)/C
      RETURN
      END



C *** SUBROTINA LEPW(N,NT,X,Y,W)
C
C       CALCULA OS POLINOMIOS DE LEGENDRE PN(X) E WN-1(X)
C       COM N=I+1
C
        SUBROUTINE LEPW(N,NT,X,Y,W)
        DIMENSION Y(6),W(6)
        NN=N+2
        N1 = N+1
        Y(1) = 1.
        W(1) = 0.
        IF(N) 1,1,2
      1 RETURN
      2 Y(2) = X
        IF (N-1) 7,7,3
      3 DO 4 I=2,N
        I1 = I+1
        I2 = I-1
        G = X*Y(I)
        AI = I
      4 Y(I1) = G-Y(I2)+G-(G-Y(I2))/AI
C
C       SE NT FOR MENOR OU IGUAL A ZERO - O PROGRAMA NAO
C       CALCULA OS WN-1
C
      7 IF(NT) 1,1,5
      5 S = 0.
        DO 6 J=3,NN
        J1 = NN+1-J
        J2 = J-2
        AJ2 = J2
      6 S = S + Y(J2)*Y(J1)/AJ2
        W(N1) = S
        RETURN
        END
```

INSTITUTO DE FÍSICA
Serviço de Biblioteca e Informação
Tombo:

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
204
INSTITUTO DE FÍSICA

INSTITUTO DE FÍSICA
Serviço de Biblioteca e Informação
Tombo:

```
C *** PROGRAMA MATRIZ V
C
```

```
C      MATRIZ V(I,J) OBTIDA PELO MODELO DO GAS PESADO
C      EMI = .1  -  ABSOR = .005
C      ABSOR = RAZAO DE ABSORCAO
C      EMI = RAZAO DE MASSA
C      II = APROXIMACAO DA EXPANSAO EM POLINOMIOS DE
C           LAGUERRE
C
       DIMENSION V(6,6), AL(6,6,11)
       READ 1, ABSOR, EMI, II, KI
       READ 2, (((AL(I,J,K), K=1,KI), J=1,I ), I=1,II)
       EM = EMI*.5
       DO 10 I=1,II
       DO 10 J=1,I
       K2 = I+J-1
       V(I,J) = 0.
       DO 20 K = 1,K2
       AL(J,I,K) = AL(I,J,K)
       AK = K
       XK = AK+.5
       V(I,J)=V(I,J)+AL(I,J,K)*(GAMASI(XK)*ABSOR+EM*GAMA(K))
    20 CONTINUE
       IF(I-J) 30,40,30
    40 V(I,I) = 1. + V(I,I)
       GO TO 10
    30 V(J,I) = V(I,J)
    10 CONTINUE
       PRINT 4, EMI , ABSOR
       PRINT 5
       PRINT 3, ((V(I,J), J=1,II), I=1,II)
     1 FORMAT (2F8.4,2I3)
     2 FORMAT (6E13.8,/,5E13.8)
     3 FORMAT (1H0,6E13.7)
     4 FORMAT (1H0,4HEMI=,E14.8,6HABSOR=,E14.8)
     5 FORMAT (1H0,/,1X,13HMATRIZ V(I,J),/)
       END
```

```
C *** PROGRAMA MGOG1
C
C      CALCULA AS MATRIZES GO E G1
C      U = MATRIZ DOS AUTO VETORES DE V
C      ST = MATRIZ ORTONORMAL DA TRANSFORMACAO
C
       DIMENSION U(6,6),UNORM(6),S(6,6),ST(6,6),ALFAO(6,6),
      1ALFA1(6,6),X(6),GO(6,6),G1(6,6),R(6,6)
       READ 1,N
       LA = 0
       DO 60 I=1,N
    60 READ 3,(ALFAO(I,J),J=1,I)
       READ 3,(X(I),I=1,N)
       DO 70 I=1,N
       DO 70 K=1,I
       ALFAO(K,I) = ALFAO(I,K)
       DO 70 J=1,N
       IF(I-J) 15,25,15
    15 ALFA1(I,J) = 0.
```

```
      GO TO 70
   25 ALFA1(I,J) = X(I)
   70 CONTINUE
  100 READ 12, ABSOR
      PRINT 8,N,ABSOR
      LA = LA+1
      PRINT 2
      DO 10 I=1,N
      READ 3,(U(I,J),J=1,N)
   10 PRINT 4,(U(I,J),J=1,N)
C
C     NORMALIZACAO DOS AUTO VETORES
C
      DO 20 J=1,N
      UNORM(J) = 0.
      DO 30 I=1,N
   30 UNORM(J) = UNORM(J) + U(I,J)**2
   20 UNORM (J) = SQRT(UNORM(J))
      DO 40 J=1,N
      DO 40 I=1,N
      S(I,J) = U(I,J)/UNORM(J)
   40 ST(J,I) = S(I,J)
      PRINT 5
      DO 50 I=1,N
   50 PRINT 4,(S(I,J),J=1,N)
C
C     TESTE DOS AUTO VETORES
C
      CALL MM(N,ST,S,U)
      PRINT 9
      PRINT 4,((U(I,J),J=1,N),I=1,N)
C
C     CALCULA AS MATRIZES GAMA
C
      CALL MM(N,ST,ALFA0,R)
      CALL MM(N,R,S,G0)
      CALL MM(N,ST,ALFA1,R)
      CALL MM(N,R,S,G1)
C
C     IMPRIME AS MATRIZES GAMA
C
      PRINT 6
      DO 80 I=1,N
   80 PRINT 4,(G0(I,J),J=1,N)
      PRINT 7
      DO 90 I=1,N
   90 PRINT 4,(G1(I,J),J=1,N)
      PRINT 11
      IF (LA-3) 100,200,200
    1 FORMAT (I3)
    2 FORMAT (1H ,28HMATRIZ DOS AUTO VETORES DE V/)
    3 FORMAT (5E14.8)
    4 FORMAT (1H ,6(E14.8,2X))
    5 FORMAT (1H ,34HMATRIZ ORTONORMAL DE TRANSFORMACAO/)
    6 FORMAT (1H ,12HMATRIZ GAMA0/)
    7 FORMAT (1H ,12HMATRIZ GAMA1/)
    8 FORMAT (1H ,2HN=,I3,5X,6HABSOR=,F5.3,/)
    9 FORMAT (1H ,21HMATRIZ PRODUTO ST*S=I,/)
   11 FORMAT (1H ,//)
```

```
 12 FORMAT(F5.3)
200 CONTINUE
    END
```

```
C *** PROGRAMA MPLILJ
C
C     MATRIZ PRODUTO DE DOIS POLINOMIOS DE LAGUERRE NAO
C     NORMALIZADOS
C     A(I,J) SAO POLINOMIOS DE LAGUERRE DE ORDEM I
C
      DIMENSION A(6,6), AL(6,6,11)
      READ 1, II
      READ 2, ((A(I,J),J=1,II),I=1,II)
      K2 = 2*II - 1
      DO 5 I=1,II
      DO 5 J=1,I
      DO 15 K=1,K2
   15 AL(I,J,K) = 0.
      K1 = I+J-1
      DO 35  K=1,K1
      IF(K-II) 10,10,20
   10 L1= K+1
      L2= 1
      L3 = K
      GO TO 60
   20 L1=II+1
      L2= L2+1
      L3 = II
   60 DO 25 L=L2,L3
      L1= L1-1
   25 AL(I,J,K) = AL(I,J,K) + A(I,L)*A(J,L1)
      AL(J,I,K) = AL(I,J,K)
   35 CONTINUE
      PRINT 3, I,J
      PRINT 4,(AL(I,J,K), K=1,K1)
      PUNCH 6,(AL(I,J,K), K=1,K1)
    5 CONTINUE
    1 FORMAT (I3)
    2 FORMAT(6E13.8)
    3 FORMAT (1H0,3HI= ,I3,3HJ= ,I3/)
    4 FORMAT (1H0,11E13.7)
    6 FORMAT (6E13.7)
      END
```

```
C *** PROGRAMA PICOS
C
C     EI - EF  *  EXTREMOS DO INTERVALO QUE CONTEM A RAIZ
C     CALCULO DOS PICOS DOS FLUXOS
C     II=0 - FLUXO REAL     *     II=1 - FLUXO ASSINTOTICO
C     NI=0 - CASO ISOTROPICO  *  NI=1 - CASO ANISOTROPICO
C
```

```
      DIMENSION AMA(6,12),ANI(12),CMA(12),DL(6)
      COMMON ANI,AMA,CMA,DL,X,L1,NR
      READ 1, ABSOR
      PRINT 2, ABSOR
      READ 3, L
      READ 3, II
      NI = 0
      READ 1,EPS,EPSI
  150 DO 1000 N=1,3,2
      IF(NI) 100,100,200
  100 PRINT 4,N,L
      GO TO 300
  200 PRINT 5,N,L
  300 N1 = N+1
      L1 = L+1
      NR = N1*L1/2
      DO 10 J=1,NR
      READ 1, ANI(J)
      READ 1, CMA(J)
   10 READ 1, (AMA(K,J), K=1,L1)
      DO 11 J=1,NR
      DO 11 K=1,L1
   11 AMA(K,J) =((-1.)**L)*AMA(K,J)
      X = 0.
      DO 1000 KK=1,2
      READ 1, EI,EF,H
      PRINT 6, X
      E = EI
      Y1 = FF(E)
      PRINT 26, EI,EF
      E = E+H
   13 Y2 = FF(E)
      PRINT 27, Y1,Y2
      IF(Y1*Y2) 15,15,16
   16 E = E+H
      IF(E-(EF+H)) 17,18,18
   17 Y1 = Y2
      GO TO 13
   15 E1 = E-H
      E2 = E
      E3 = E1 + H/3.
      Y3 = FF(E3)
      S1 = ABS(Y1) + ABS(Y2)
      PR = Y1*Y3
      IF(PR) 20,25,30
   30 S2 = ABS(Y2) + ABS(Y3)
      GO TO 170
   20 S2 = ABS(Y1) + ABS(Y3)
  170 IF(S2-S1) 25,25,16
   25 CALL RAINT(E1,E2,EPS,EPSI,Y0)
      Y3 = FF(Y0)
      PRINT 8, Y0
      IF (II) 21,21,22
   21 PRINT 9, Y3
      GO TO 1002
   22 PRINT 7, Y3
      GO TO 1002
   18 PRINT 19
 1002 IF(KK-1) 1001,1001,1000
```

```
1001 X = 20.
1000 CONTINUE
     NI = NI+1
     IF(NI-1) 150,150,160
 160 CONTINUE
   1 FORMAT (5E14.8)
   2 FORMAT (1H ,30X,6HABSOR=,E14.8,/)
   3 FORMAT (2I2)
   4 FORMAT (1H ,10X,15HCASO ISOTROPICO,5X,2HN=,I2,3X,2HL=
       ,I2,//)
   5 FORMAT (1H ,10X,17HCASO ANISOTROPICO,5X,2HN=,I2,3X,2H
       L=,I2,//)
   6 FORMAT (1H ,24HPICOS DE ENERGIA PARA X=,E14.8,//)
   7 FORMAT (1H ,50H VALOR DA DERIVADA DO FLUXO ASSINTOTIC
       O NO PONTO =,
     1E14.8)
   8 FORMAT (1H ,8H PICO E=,E14.8,/)
   9 FORMAT (1H ,43H VALOR DA DERIVADA DO FLUXO REAL NO PO
       NTO =,E14.8/)
  19 FORMAT (1H ,28HA RAIZ NAO ESTA NO INTERVALO,/)
  26 FORMAT (1H ,2F6.3,/)
  27 FORMAT (1H ,2E14.8)
     END



C *** SUBROTINA RAINT(U,V,E,E1,YO)
C
C       CALCULA A RAIZ DE UMA FUNCAO DADO O INTERVALO QUE A
C       CONTEM E O VALOR DA FUNCAO NOS DOIS EXTREMOS DESTE
C
C
      SUBROUTINE RAINT(U,V,E,E1,YO)
      DIMENSION GO(6,6),G1(6,6),BE(6),Y(6),W(6),C(6,6),
     1DE(6,6),G(6),D(6)
      COMMON N,L1,GO,G1,BE,DE
      CC = -1./SQRT(2.)
      FU = FF(U)
      FV = FF(V)
   10 IF(ABS(FU)-E1) 31,31,32
   31 YO = U
      RETURN
   32 IF(ABS(FV)-E1) 33,33,34
   33 YO = V
      RETURN
   34 IF(ABS(U-V)-E) 20,30,30
   20 YO = 0.5*(U+V)
      RETURN
   30 Y1 = (V*FU-U*FV)/(FU-FV)
      FY1 = FF(Y1)
      IF(CC) 40,50,50
   40 Y2 = 0.5*(U+V)
      FY2 = FF(Y2)
      GO TO 90
   50 Y2 = V+CC*(U-V)
      FY2 = FF(Y2)
   90 A = -FY1*FY2
      IF(A) 60,70,80
```

```
60 B = Y2-Y1
   DD= FV*FY2
   IF(DD)15,22,25
15 CC=CC**2
   GO TO 35
22 IF (FV) 11,12,11
11 YO = Y2
   RETURN
12 YO = V
   RETURN
25 CC= 0.5
   V = U
   FV = FU
35 GG= B*(Y2-V)
   IF (GG)45,55,55
45 U = Y2
   FU = FY2
   GO TO 10
55 U = Y1
   FU = FY1
   GO TO 10
70 IF (FY1) 1,2,1
 1 YO = Y2
   RETURN
 2 YO = Y1
   RETURN
80 B = Y1-Y2
   IF (ABS(U-Y1) - E)  25,7,7
 7 IF(ABS(V-Y1) - E)  15,8,8
 8 CC= -1./SQRT(2.)
   U = Y1
   V = Y2
   FU = FY1
   FV = FY2
   GO TO 10
   END
```

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

(1) ABRAMOWITZ, M. & STEGUN, I. A. Handbook of mathematical functions. New York, Dover, 1965.

(2) ARKUSZEWSKI, J. Milne problem for thermal neutron with absorption. Nucl. Sci. Engng., New York, 27:104-19, 1967.

(3) BARAN, W. Eigenfunctions expansion method in two group transport theory. Nukleonik., Berlin, 11:10-6, 1968.

(4) CINTRA, W. H. S. Contribuição ao problema de Milne polienergético em física de reatores. São Paulo, Universidade, 1970. (Tese de doutoramento).

(5) CINTRA, W. H. S. Sobre a equivalência das equações $\Delta_{N+1}(\nu) = 0$ e $G_{N+1}(\nu) = 0$ no método das esféricas harmônicas, no caso monoenergético, plano e espalhamento isotrópico. São Paulo, 1968. (DFR/RI-1).

(6) CONKIE, W. R. An improved spherical harmonics method. Nucl. Sci. Engng., New York, 18:370-5, 1964.

(7) CONKIE, W. R. Velocity dependent neutron transport theory. Nucl. Sci. Engng., New York, 7:295-303, 1960.

(8) CORNGOLD, N. et alii. The time decai constants in neutron thermalization. Nucl. Sci. Engng., New York, 15:13-9, 1963.

(9) DAVISON, B. Neutron transport theory. London, Oxford, 1957.

(10) EISENHAUER, C. Some results on the energy dependent Milne problem for thermal neutrons on light gases. Nucl. Sci. Engng., New York, 19:95-101, 1964.

(11) HUSSEIN, A. et alii. On the energy dependent Milne problem. Cairo U.A.R., Atomic Energy Post Office, 1968. (UARAEE/Rep-60).

(12) HURWITZ JR., H. Neutron thermalization I. Heavy gas moderator. Nucl. Sci. Engng., New York, 1:280-312, 1956.

(13) KALLFELZ, J. M. & REICHARDT, W. An improved variational solution to the energy dependent Milne problem for realistic scattering kernels. Nukleonik, Berlin, 9:148-55, 1967.

(14) KIEFHABER, E. Thermal neutron spectra in H_2O for plane geometry. Nucl. Sci. Engng. New York, 18:404-6, 1964. (com mais detalhes em: Nukleonik, Berlin, 16:262-6, 1964).

(15) KLADNIK, R. Milne's problem for thermal neutron. In: Proceedings of Brookhaven conference on neutron termalization IV. Theoretical aspects of transient and assintotic phenomena. Upton, Brookhaven National Laboratory, 1962. p.1211-31 (BNL 719).

(16) KLADNIK, R. & KUŠCER, I. Milne's problem for thermal neutron in nonabsorbing medium. Nucl. Sci. Engng., New York, 11:116-20, 1961.

(17) KLADNIK, R. & KUŠCER, I. Velocity dependent Milne's problem. Nucl. Sci. Engng., New York, 13:149-52, 1962.

(18) KORN, G. & KORN, T.M. Mathematical handbook for cientists and engineers. New York, Mc Graw-Hill, 1961. p.742-5.

(19) LANCEFIELD, M. J. & SCHOFIELD, P. The thermal neutron Milne problem. Br. J. appl. Phys., London, 18:1497-515, 1967.

(20) LANCEFIELD, M. J. & SCHOFIELD, P. The thermal neutron Milne problem with capture. Br. J. appl. Phys. J. Phys. D., London, Ser. 2, 1:137-47, 1968.

(21) LECAINE, J. Application of a variational method to Milne's problem. Phys. Rev., Ithaca, N.Y., 72(7):564-6, Oct. 1.1947.

(22) LEONARD, A. & FERZIGER, J. H. Energy dependent neutron transport theory. I: Constant cross sections. Ann. Phys., Baltimore, 22:192-209, 1963.

(23) LEONARD, A. & FERZIGER, J. H. Energy dependent neutron transport theory in plane geometry. III: Half range completeness and half space problems. Nucl. Sci. Engng., New York, 26:181-91 , 1966.

(24) METCALF, D. R. Solutions of the two group transport equation in plane geometry. Ann Arbor, University of Michigan, 1968.(Tese de Doutoramento).

(25) MICHAEL, P. Thermal neutron flux distributions in space and energy. Nucl. Sci. Engng., New York, 18:426-31, 1960.

(26) MIKA, J. The thermalization theory with a simple scattering kernel. Nucl. Sci. Engng., New York, 22:235-43, 1965.

(27) NELKIN, M. Milne's problem for a velocity dependent mean free path. Nucl. Sci. Engng., New York, 7(6):552-3, 1960.

(28) NELKIN, M. Scattering of slow neutrons by water. Phys.Rev.,Ithaca, N.Y., 119(2):741-6, 1960.

(29) PAHOR, S. Albedo and Milne problem for thermal neutrons. Nucl.Sci. Engng., New York ,31:110-6, 1968.

(30) PAHOR, S. & LARSON, H. A. Albedo and Milne's problem for thermal neutron II. Nucl. Sci. Engng., New York, 48:420-32, 1972.

(31) SIEWERT, C. E. & ISHIGURO, Y. Two group neutron transport theory: half range orthogonality, normalization integrals,applications and computations. J. nucl. Energy, London, 26(5):251-69, 1972.

(32) SUMMERFIELD, G. C. & ZWEIFEL, P.F. On the energy dependent transport equation. Nucl. Sci. Engng., New York, 15:476-7, 1963.

(33) TOLEDO, P.S. Contribuição ao método polinomial de solução aproximada da equação polienergética de Boltzmann. São Paulo, Universidade, 1968. (Tese de Doutoramento).

(34) TRAVELLI, A. Thermal neutron transients in various order P-N approximations. Troy, N.Y., Rensselaer Polytechnic Institute, Jul. 1963. (Tese de Doutoramento)

(35) WEISS, Z. The $P_N L_J$ approximation of neutron thermalization in heavy gas moderador. Nukleonika, Warszawa, 4(11):703-15,1961.

(36) WIGNER, E. P. & WILKINS JR., J. E. Effect of the temperature of the moderator on the velocity distribution of neutrons with numerical calculations for H as moderador. Oak Ridge, Oak Ridge National Laboratory, Sept. 1948. (AECD 2275)

(37) WILKINS JR., J. E. 1944. (CP 2481), apud WILLIAMS, M. M. R. The slowing down and themalization of neutrons. Amsterdam, North Holland, 1966. p.572.

(38) WILLIAMS, M. M. R. The energy dependent Milne problem with a simple scattering kernel. Nucl. Sci. Engng., New York, 18:260-70, 1964.

(39) WILLIAMS, M. M. R. Mathematical methods in particle transport theory. London, Butterworths, 1971. p.276.

(40) WILLIAMS, M. M. R. The slowing down and thermalization of neutrons. Amsterdam, North Holland, 1966. p.45-7.

(41) WILLIAMS, M. M. R. A solution of the thermal neutron problem by perturbation theory. Nucl. Sci. Engng., New York, 19:353-8, 1964.