

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

CONTRIBUIÇÃO AO PROBLEMA DE MILNE, POLIENERGÉTICO,
EM FÍSICA DE REATORES

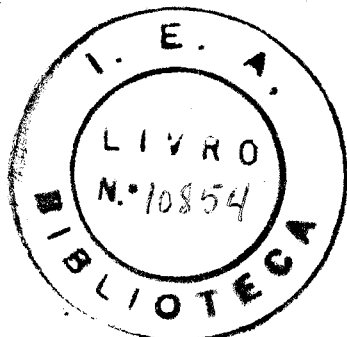
WILMA SONIA HEHL DE SYLOS CINTRA

Orientador: Prof. Carlos Chaves

TESE DE DOUTORAMENTO APRESENTADA
AO INSTITUTO DE FÍSICA DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

- 1970 -

SÃO PAULO - BRASIL



A meus pais
A meu marido

•

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Doutor Paulo Saraiva de Toledo, Professor do Instituto de Física da Universidade de São Paulo e Chefe da Divisão de Física de Reatores do Instituto de Energia Atômica, sou imensamente grata, não só pela excelente orientação no desenvolvimento desta tese, mas, principalmente, pela orientação constante durante minha formação científica, sem a qual, este trabalho dificilmente seria feito.

Ao Professor Doutor Rômulo Ribeiro Pieroni, Diretor do Instituto de Energia Atômica, minha gratidão pelas facilidades oferecidas, inclusive para os cálculos desta tese; pela possibilidade de uso constante do computador IBM-1620 mod. II, meus agradecimentos são extensivos ao Engenheiro Cíbar Cáceres Aguillera, Chefe do Serviço de Cálculo Analógico e Digital.

Agradeço ao Doutor Maximilian Emil Hehl, Diretor do Setor de Matemática Aplicada do Departamento de Física Nuclear e Partículas Elementares do Instituto de Física da Universidade de São Paulo pela elaboração dos programas digitais SLH1, DTC1 e DTM1, e ao Bacharel Antônio Soares de Gouvêa, membro do Serviço de Cálculo Analógico e Digital pela elaboração do programa digital VCPEA; meus agradecimentos são extensivos à Bacharel Ione de Almeida, membro da Divisão de Física de Reatores do Instituto de Energia Atômica pela elaboração de uma das sub-rotinas utilizadas no programa VCPEA.

Nestes agradecimentos, não poderia deixar de incluir o nome da Secretária da Divisão de Física de Reatores, Senhorita Terezinha Caires, pela eficiência com que elaborou o difícil trabalho de datilografia a duas esferas.

Desejo, também, expressar meu reconhecimento ao Engenheiro José Carlos de Almeida, membro da Divisão de Física de Reatores, pela gentileza em executar, para impressão, os gráficos desta tese.

À Bacharel Odette Guedes e à Bacharel Helena Kiyoko Suzuki, pertencentes ao grupo do Serviço de Cálculo Analógico e Digital, sou grata pelo trabalho de listagem, para impressão, dos programas digitais.

Não poderia deixar de agradecer, também, à Senhora Therezinha O. da Silveira Santos, Secretária da Diretoria do Instituto de Energia Atômica pela valiosa colaboração na impressão desta tese, bem como, ao Senhor José Florentino dos Santos, Encarregado da Gráfica e a seus auxiliares, pelo trabalho de impressão e montagem.

Finalmente, quero agradecer ao Professor Tibor David, Diretor da Editôra Clássico-Científica, pela gentileza em oferecer o material, a impressão e a confecção da capa desta tese.

ÍNDICE

	<u>Página</u>
 <u>CAPÍTULO I</u>	
<u>Introdução</u>	1
I.1 - Apresentação do Problema.	1
I.2 - Revisão Histórica	3
I.3 - Objetivo da Tese.	6
 <u>CAPÍTULO II</u>	
<u>Solução do Problema de Milne Polienergético</u>	9
II.1 - A Equação de Boltzmann.	9
II.2 - As Condições de Contorno.	24
 <u>CAPÍTULO III</u>	
<u>Modelo do Gás Pesado e Descrição do Programa Fortran</u>	30
 <u>CAPÍTULO IV</u>	
<u>Resultados Numéricos e Análise dos Resultados</u>	35
 <u>CAPÍTULO V</u>	
<u>Comentários sobre os Resultados Obtidos e Trabalho Futuro</u>	63
 <u>APÊNDICE 1</u>	
<u>Soluções para o Espalhamento Anisotrópico Linear</u>	69

	<u>Página</u>
<u>APÊNDICE 2</u>	
<u>Efeito de Fronteira Tornando o Espectro Mais "Quente"</u>	84
<u>APÊNDICE 3</u>	
<u>Listagens de Programas Fortran-II-D</u>	88
<u>BIBLIOGRAFIA.</u>	109

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

I.1 - Apresentação do Problema

O problema de Milne, um dos mais antigos problemas de transporte, quando considerado em relação a uma população de neutrons, recebeu especial atenção com o Projeto Manhattan, durante a Segunda Guerra Mundial.

Trata-se essencialmente, de calcular a distribuição estacionária de neutrons em um semi-espaço infinito $x > 0$ de um meio espalhador, e absorvedor ou não, onde é mantido um fluxo de neutrons devido à presença, neste meio, de uma fonte, no infinito. Os neutrons atravessam a fronteira com o vácuo e não retornam; nem há fontes no vácuo emitindo neutrons para dentro do meio.

Sendo um problema de transporte, pode ser enunciado rigorosamente utilizando a equação de transporte de Boltzmann, suplementada com condições de contorno adequadas.

A equação geral de transporte de Boltzmann é bastante difícil de ser resolvida, mesmo com os grandes computadores já existentes. Assim, muitas simplificações físicas e matemáticas foram feitas e vários métodos aproximados foram propostos.

Só em casos muito especiais, quase ideais, uma solução exata e explícita pode ser obtida e, assim mesmo, no caso monoenergético e, muito recentemente, com dois grupos de energia.

No caso monoenergético - população de neutrons todos dotados de um mesmo valor para a velocidade escalar - o problema de Milne se torna mais simples e os resultados podem ser usados para dar uma idéia de como se comporta uma população não monoenergética de neutrons num dado meio. No caso polienergético, o problema se complica e a dependência energética da distribuição de neutrons tem sido levada em conta, através de métodos de desenvolvimento em polinômios de Laguerre, Tschebycheff, etc.

Outra teoria muito usada é a de multigrupo, onde a distribuição contínua energética dos neutrons é substituída por uma distribuição

em intervalos discretos, e os parâmetros nucleares são obtidos por médias adequadas sobre cada intervalo.

Quanto à dependência angular o tratamento matemático é bastante complicado e, só no caso simples monoenergético, em geometria plana, pode ser obtida uma solução exata e explícita. Vários métodos aproximados foram propostos, e os mais usados são os métodos polinomiais, principalmente o das esféricas harmônicas e o método das ordenadas discretas, este equivalente ao método de multigrupo usado para tratar a dependência energética da distribuição dos neutrons.

Outra dificuldade grande na resolução da equação de transporte de Boltzmann é determinada pelo núcleo de espalhamento; a não ser num caso totalmente ideal, em que a secção de choque total é constante, isto é, independente da energia, onde então, é possível se reduzir a solução do problema polienergético à solução de problemas monoenergéticos.

Com todas estas dificuldades na obtenção de uma solução explícita para a equação de transporte de Boltzmann, o problema de Milne polienergético é extremamente difícil de ser resolvido. No entanto, a solução completa deste problema, ou seja, a determinação da distribuição energética e angular de neutrons, é muito importante. Em particular, poder-se-ia determinar a influência da fronteira sobre o espectro energético e angular de neutrons, influência esta da maior importância, mas até agora somente considerada no caso monoenergético.

A teoria - ou melhor - a aproximação de difusão para estudo da distribuição de neutrons num dado meio, também tem sido usada comumente; teoria esta que é sabido falhar em proximidades de fronteiras.

Supondo conhecida a solução completa do problema polienergético de Milne, poder-se-ia:

a) determinar a distância extrapolada com muito mais rigor que no caso monoenergético;

b) estudar, o que é muito importante, a deformação do espectro energético por causa dos fenômenos de absorção e fuga; este estudo nunca foi feito de maneira sistemática;

c) fazer um estudo sistemático da distribuição espacial dos

neutrons levando em conta os transientes do fluxo real perto da fronteira. Como se sabe, o fluxo obtido pela teoria de difusão é o fluxo assintótico e esta teoria falha nas proximidades de separação de meios diferentes; também este estudo ainda não foi feito.

No caso monoenergético, ou com teoria de difusão, todos estes efeitos foram estudados; mas não no caso em que são levadas em conta as dependências energética e angular da distribuição de neutrons. E isto, devido a todas aquelas dificuldades já expostas.

I.2 - Revisão Histórica

O problema de Milne tem sido tratado extensivamente no caso monoenergético e sobretudo para meios não absorvedores. Isto devido às dificuldades na resolução da própria equação monoenergética de transporte de Boltzmann.

Só ultimamente os autores têm procurado resolvê-lo para meios com absorção e especialmente para o caso polienergético.

Soluções exatas desse problema foram apresentadas por Placzek e Seidel /3/, e Placzek /4/ em 1947. Entretanto, estes autores consideraram o caso bastante simples em que os neutrons tinham todos uma mesma energia, ou seja, caso monoenergético; e além disso supuzeram o meio não absorvedor, espalhamento isotrópico.

Ainda em 1947, Le Caine /5/, fazendo as mesmas simplificações acima mencionadas, resolveu o problema de Milne pelo método variacional. Embora seja uma solução aproximada, apresenta uma forma analítica simples o que facilita a obtenção de resultados numéricos.

Pouca contribuição foi dada depois disso até o problema ter sido retomado, em aproximações de Teoria de Transporte, e com dependência energética para a secção de choque total, nos trabalhos de Conkie em 1959 /6/ e de Nelkin em 1960 /7/. Conkie admitiu núcleo de espalhamento anisotrópico, usou o método das esféricas harmônicas para a dependência angular, tomando somente a aproximação P_1 , e desenvolveu a dependência energética em uma série de polinômios de Tchebycheff. Nelkin considerou o espalhamento isotrópico e estendeu ao caso polienergético, o método variacio-

nal usado por LeCaine em problemas monoenergéticos. Ambos supuseram o meio não absorvedor.

A partir de então, outros trabalhos apareceram, onde o problema de Milne polienergético era considerado.

Kladnik e Kus^ver em 1961 /8/, ainda para meio não absorvedor es-
tenderam, ao caso anisotrópico, o método variacional que Nelkin havia usado.

Em 1964, Eisenhauer /9/ resolveu numericamente o problema de Milne, calculando a solução da equação integral de Boltzmann pelo programa THERMOS para computador. Considerou meio sem absorção, espalhamento isotrópico usando quatro modelos diferentes para o núcleo de espalhamento.

Também em 1964, Williams /10,11/ apresentou dois trabalhos sô-
bre o assunto. Em ambos admitiu meio não absorvedor e espalhamento isotró-
pico. No primeiro trabalho, usou o método exato de Wiener e Hopf, e nú-
cleo de espalhamento separável simples; no segundo trabalhou usou o méto-
do de perturbação para calcular o erro introduzido pelo uso de um núcleo
de espalhamento não realístico; nesse trabalho utilizou o núcleo de espa-
lhamento de gás livre de massa 1, e o programa THERMOS.

Novamente, em 1964, Conkie /12/ estudou o problema de Milne. Desta vez procurou uma solução analítica mais simples que a encontrada em seu trabalho anterior. Para isso, admitiu um meio sem absorção, espalha-
mento isotrópico, tomando o núcleo simples de espalhamento usado por Williams, e resolveu o problema para o caso monoenergético. Usou o método das esféricas harmônicas tomando a aproximação P_1 . A equação obtida foi estendida ao caso polienergético sendo a dependência energética desenvolvida em polinômios de Laguerre.

Ainda em 1964, o problema de Milne foi estudado por Kiefhaber /13/. Entretanto, desta vez foi introduzido algo novo: Kiefhaber conside-
rou o meio absorvedor. Seus cálculos foram feitos para a água, tendo a
secção de choque de absorção sido incluída na secção de choque total da
água. Considerou espalhamento anisotrópico e utilizou o núcleo de espalha-
mento de Nelkin. Obteve uma solução aproximada para o problema usando pa-
ra a dependência energética um desenvolvimento em polinômios de Laguerre,
e para a dependência angular um desenvolvimento em polinômios de Legendre,
tendo calculado apenas para P_1 .

Em 1965, Ferziger e Leonard /14/ estudaram o problema de Milne considerando: meio absorvedor com secção de choque de absorção seguindo a lei $1/v$; espalhamento isotrópico e admitindo como modelo de núcleo de espalhamento, o de gás pesado. Para a dependência angular obtiveram uma solução exata; quanto à dependência energética, desenvolveram-na em um conjunto completo de polinômios de Laguerre.

Mika /15/, em 1965, usou o método denominado "expansão em modos normais"; considerou meio absorvedor cuja secção de choque de absorção é levada em conta através da secção de choque total; admitiu espalhamento isotrópico e usou para modelo de núcleo de espalhamento, o núcleo simples separável. Obteve expressões analíticas semelhantes àquelas para a aproximação monoenergética.

Em 1967, a solução do problema de Milne pelo método de Wiener e Hopf foi estendida ao caso polienergético por Arkuszewski /16/. Neste trabalho foi suposta uma absorção seguindo a lei $1/v^n$, e foi admitido espalhamento isotrópico, tendo para núcleo de espalhamento o do modelo de gás livre. As soluções analíticas obtidas não são simples; pelo contrário são de difícil uso computacional.

Também em 1967, foi publicado um trabalho por Kallfelz e Reichardt /17/. Obtiveram uma solução para o problema de Milne pelo método variacional, porém para meios não absorvedores. Entretanto, este trabalho foi muito interessante, pois foram usados núcleos de espalhamento simples e também realísticos e os cálculos foram feitos para espalhamento isotrópico e anisotrópico linear. Concluíram que para núcleos simples, a concordância dos resultados pelo método variacional com resultados obtidos por métodos exatos era bastante boa, mas que isto já não se dava quando usaram núcleos de espalhamento mais realísticos; e portanto, para uma descrição mais precisa da forma do espectro, principalmente o espectro da fronteira, não é suficiente se admitir núcleos com espalhamento isotrópico, e que espalhamento anisotrópico linear deve ser incluído. Verificaram essas conclusões através das experiências realizadas por Beckurtz /18/.

O problema de Milne foi tratado, em teoria de dois grupos, por Metcalf /19/, em sua tese de doutoramento apresentada na Universidade de Michigan em 1968. Admitiu espalhamento isotrópico e considerou quatro va-

lores para a absorção do meio para o qual êle tomou a água. Metcalf colocou as duas equações resultantes da teoria de dois grupos em forma conveniente para análise numérica. Comparou os resultados numéricos obtidos com os obtidos pelas aproximações P_1 e P_3 ; e concluiu que a aproximação P_1 não é suficiente e sugere que pelo menos a aproximação P_3 deve ser usada. Conclui ainda que, quanto maior a absorção do meio, mais falhas ficam as baixas aproximações.

Em todos os trabalhos mencionados foi utilizada geometria plana.

Na Conferência sobre Teoria de Transporte, realizada de 20 a 24 de janeiro de 1969 no Virginia Polytechnic Institute, Blacksburg, Virginia, foi apresentado um trabalho de Smith /20/ onde o problema de Milne foi considerado em geometria esférica. Entretanto, a solução foi encontrada para meio sem absorção, e foi considerado somente o caso simples monoenergético.

I.3 - Objetivo da Tese

Como se pôde ver, o problema de Milne é importante, mas de solução extremamente difícil. Isto faz com que seja ainda um problema relativamente em aberto, cuja solução geral (dependência angular e energética) e explícita continua sendo procurada.

Soluções explícitas, mas não gerais, e resultados numéricos foram dados por Kiefhaber em 1964 e Metcalf em 1968.

Metcalf obteve solução exata para a dependência angular, mas por dificuldades matemáticas só trabalhou em teoria de dois grupos para a dependência energética. As dificuldades, como foi exposto na "Apresentação do Problema", aparecem já na própria solução da equação de transporte de Boltzmann, ainda que esta para neutrons, se reduza a uma equação Integro-diferencial linear.

O trabalho de Kiefhaber merece uma consideração especial, dada a semelhança entre seu tratamento e o desta tese.

Como nesta tese, Kiefhaber considerou meio absorvedor, desenvolveu a dependência energética da solução em polinômios de Laguerre e a

angular em polinômios de Legendre.

No entanto, a complexidade das expressões analíticas, devida tanto ao núcleo de espalhamento anisotrópico que considerou, como, principalmente, ao fato de utilizar o método clássico e não o método Polinomial Energético Angular, PEA, /1/, o qual será visto no próximo capítulo, fez com que não fizesse um estudo sistemático dos vários parâmetros do meio que influem, especialmente, no espectro energético.

Em particular, essa mesma complexidade fez com que limitasse o tratamento da dependência angular à aproximação P_1 , deixando assim de incluir possíveis efeitos tipicamente de transporte, efeitos estes que serão também analisados nesta tese.

O método PEA é um método polinomial, de bons resultados, que permite a obtenção de uma solução explícita aproximada da equação linear de transporte de Boltzmann, para neutrons.

A diferença entre o método PEA e os demais métodos polinomiais reside, essencialmente, na obtenção de soluções mais compactas para a dependência angular, ao mesmo tempo que a estrutura das expressões que comparecem são tais que os cálculos numéricos podem ser processados em computadores de médio e mesmo pequeno porte.

Como consequência, aproximações angulares de ordem superior à primeira podem ser consideradas, permitindo que se estenda ao campo dos problemas polienergéticos análises detalhadas feitas, até hoje, somente para o caso monoenergético.

Um desses problemas é o problema de Milne, de bastante importância, principalmente para a Física de Reatores, como já foi mostrado.

O objetivo desta tese é tentar dar uma contribuição à solução do problema de Milne polienergético, em meio absorvedor e espalhador, visando, em particular, uma melhor compreensão dos problemas físicos envolvidos.

O método utilizado será o método PEA.

Nesta tese se pretende:

a) estudar a influência da aproximação energética nos espec-

tros de energia dos neutrons;

b) fazer um estudo sistemático da influência conjunta da absorção do meio, de efeitos de transporte e de fronteira, especialmente, no espectro energético. Efeitos de transporte poderão ser estudados, uma vez que a aproximação P_3 será considerada;

c) analisar as distribuições espaciais do fluxo de neutrons, visando determinar a influência da lei $1/v$ (da absorção) sobre o comportamento do fluxo na fronteira;

d) estudar a influência dos denominados transientes no fluxo real;

e) analisar a influência da absorção, no afastamento do fluxo real em relação ao fluxo assintótico;

f) fazer um estudo sobre a zona de influência da fronteira, analisando como varia esta zona em relação à absorção e em relação à energia dos neutrons;

g) mostrar como é altamente insatisfatória a aproximação P_1 para a análise de fenômenos que ocorrem perto da fronteira;

h) determinar a distância extrapolada com muito mais rigor que no caso monoenergético e/ou que na aproximação P_1 ;

i) verificar como a absorção influe na distância extrapolada;

j) fazer uma análise sobre o comportamento dos auto-valores obtidos, e a influência de alta absorção sobre seu comportamento.

O estudo sistemático, feito nesta tese, de todos êsses itens, permitirá dar uma primeira idéia da necessidade de se usar aproximações, angulares de ordens superiores às até então tomadas em cálculos de fluxo, e, em particular, no problema de Milne.

Tal estudo sistemático é original e será tentado pôr ênfase na interpretação física dos resultados obtidos, mantendo-se, assim, a coerência com o objetivo desta tese.

CAPÍTULO II

SOLUÇÃO DO PROBLEMA DE MILNE POLIENERGÉTICO

II.1 - A Equação de Boltzmann

Seja um semi-espaço infinito de um meio espalhador e absorvedor, onde é mantido um fluxo de neutrons por meio de uma fonte no infinito; os neutrons que atravessam a fronteira com o vácuo não retornam e nem há fontes no vácuo emitindo neutrons para o meio.

O que se propõe, nesta tese, é determinar a distribuição estacionária dos neutrons nesse meio, cujo fluxo tem dependência angular e energética, ou seja, se propõe resolver o problema de Milne polienergético.

A função de distribuição $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}; t)$ é uma função de sete variáveis: três espaciais representadas por \vec{r} , a energia E , duas angulares representadas por $\vec{\Omega}$, e o tempo t .

$n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}; t)$ descreve da maneira mais geral possível uma população de neutrons, e é definida de maneira que

$n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}; t) d\vec{r} dE d\vec{\Omega}$ = número médio de neutrons que, no instante t , no volume $d\vec{r}$, centrado \vec{r} , têm energias entre E e $E+dE$ e cujas direções de movimento estão no ângulo sólido $d\vec{\Omega}$ centrado em $\vec{\Omega}$.

Pode-se, também, definir fluxo de neutrons como

$$\vec{\phi}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}; t) = vn(\vec{r}, E, \vec{\Omega}; t) \quad (\text{II.1.1})$$

onde v é a velocidade escalar do neutron de energia cinética E .

Considerando uma população de neutrons com energias entre E e $E+dE$ num elemento de volume $d\vec{r}$ centrado em \vec{r} , no instante t , cujas direções de movimento estão no ângulo sólido $d\vec{\Omega}$ centrado em $\vec{\Omega}$, a equação que descreve o balanço de neutrons desta população, sem fonte externa, é dada

por

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}; t) = & - \vec{v} \times \text{grad}_{\vec{r}} n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}; t) - \Sigma_a(\vec{r}, E) \cdot v \cdot n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}; t) - \\ & - \int_0^{\infty} dE'' \int_0^{4\pi} d\Omega'' \Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E'', \vec{\Omega}''/\vec{r}) v \cdot n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}; t) + \\ & + \int_0^{\infty} dE' \int_0^{4\pi} d\Omega' \Sigma_s(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega}/\vec{r}) v' \cdot n(\vec{r}, E', \vec{\Omega}'; t) \end{aligned} \quad (\text{II.1.2})$$

onde

$\Sigma_a(\vec{r}, E)$ = probabilidade por unidade de percurso, para que nas vizinhanças do ponto \vec{r} do meio, um neutron seja absorvido.

$\Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}'/\vec{r}) dE' d\Omega'$ = probabilidade por unidade de percurso para que um neutron com energia E e direção $\vec{\Omega}$, nas vizinhanças do ponto \vec{r} do meio, sofra um choque elástico após o qual sua energia final esteja entre E e $E+dE$ e sua direção esteja no ângulo sólido $d\Omega$ centrado em $\vec{\Omega}$.

$\Sigma_s(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}'/\vec{r}) dE' d\Omega' \cdot n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}; t) dV dE d\Omega v \cdot dt$ = número de espalhamentos em dV durante dt que lançam neutrons de $dE d\Omega$ para $dE' d\Omega'$.

Não foram considerados na dedução de (II.1.2)

- a) interações neutron-neutron
- b) desintegração radioativa dos neutrons
- c) efeitos quânticos

Daí, o caráter linear da equação de Boltzmann.

Nesta tese, o meio considerado é homogêneo e isotrópico.

Sendo homogêneo, as secções de choque independem de \vec{r} , e sendo isotrópico, há restrições nas formas das dependências angulares das secções de choque, uma vez que as propriedades do meio aparecem, na equação

de Boltzmann, através de secções de choque.

Assim, a dependência angular de $\Sigma_g(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}')$ só pode ser função de $\vec{\Omega} \times \vec{\Omega}'$, ou seja, do ângulo θ de espalhamento e não da orientação absoluta das direções iniciais e finais do neutron.

Define-se a secção de choque de espalhamento, neste caso, por

$$\Sigma_g(E, \vec{\Omega} \rightarrow E', \vec{\Omega}') = \frac{1}{2\pi} \Sigma_g(E \rightarrow E'; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}') \quad \text{e tal que}$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_g(E \rightarrow E'; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}') = \Sigma_g(E \rightarrow E')$$

Sabendo que a distribuição de neutrons no problema de Milne é uma distribuição estacionária, e sendo o meio homogêneo e isotrópico, a equação (II.1.2) é escrita

$$\begin{aligned} & \vec{v} \times \text{grad}_{\vec{r}} n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_a(E) \cdot v \cdot n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \\ & + \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dE'' \int_{4\pi} d\Omega'' \Sigma_g(E \rightarrow E''; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}'') \cdot v \cdot n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - \\ & - \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_g(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \times \vec{\Omega}) \cdot v' \cdot n(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') = 0 \quad (\text{II.1.3}) \end{aligned}$$

Integrando formalmente o terceiro termo de (II.1.3) em relação a $d\Omega''$ e depois em relação a dE'' , pode-se escrever:

$$\begin{aligned} & \vec{v} \times \text{grad}_{\vec{r}} n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \left[\Sigma_a(E) + \Sigma_g(E) \right] \cdot v \cdot n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - \\ & - \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_g(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \times \vec{\Omega}) \cdot v' \cdot n(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') = 0 \quad (\text{II.1.4}) \end{aligned}$$

onde $\Sigma_g(E)$ é, então, a secção de choque de espalhamento usual.

Como o meio não é multiplicador $\Sigma_g(E) + \Sigma_a(E) \neq \Sigma(E)$ onde $\Sigma(E)$ é a secção de choque total do meio.

Então, a equação de Boltzmann para meio não multiplicador, homogêneo e isotrópico, em regime estacionário e sem fontes externas, é escrita

$$\vec{v} \times \text{grad}_{\vec{r}} n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma(E) \cdot v \cdot n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - \\ - \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_S(E' \rightarrow E; \vec{\Omega}' \times \vec{\Omega}) \cdot v \cdot n(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') = 0 \quad (\text{II.1.5})$$

Considerando geometria plana, (II.1.5) se reduz a

$$\mu v \frac{\partial}{\partial x} n(x, E, \mu) + \Sigma(E) v n(x, E, \mu) - \\ - \int_0^{\infty} dE' \int_{-1}^1 d\mu' \Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0) v'(x, E', \mu') = 0 \quad (\text{II.1.6})$$

onde

$$\mu = \vec{\Omega} \times \vec{I} \quad ; \quad \mu' = \vec{\Omega}' \times \vec{I} \quad ; \quad \mu_0 = \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}' = \cos \theta$$

Aplicando a definição de fluxo através da fórmula (II.1.1) es-
creve-se

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \phi(x, E, \mu) - \\ - \int_0^{\infty} dE' \int_{-1}^1 d\mu' \Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0) \phi(x, E', \mu') = 0 \quad (\text{II.1.7})$$

É a solução geral desta equação que serão aplicadas as condições de contorno adequadas para o problema de Milne.

Será resolvida pelo método PEA, o qual, pode ser encontrado com todos os detalhes na referência 1.

Por comodidade, será tomado o valor mínimo de $1/\Sigma(E)$ como unidade de comprimento, o que torna as secções de choque adimensionais.

Para que o núcleo de espalhamento $\Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0)$ seja fisicamente aceitável é preciso que

$$M(E') \Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0) = M(E) \Sigma_S(E \rightarrow E'; \mu_0) \quad (\text{II.1.8})$$

sendo $M(E) = E e^{-E}$, sendo E a energia em unidades de kT , com k a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta do meio.

Esta igualdade decorre do princípio de balanço detalhado /24,25/ e garante que num meio infinito e sem absorção pode se estabelecer uma distribuição maxwelliana de equilíbrio à temperatura T .

Convém, como será visto mais adiante, simetrizar o núcleo $\Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0)$.

Para isso, é introduzida uma função $\Psi(x, E, \mu)$ tal que

$$\Phi(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} \Psi(x, E, \mu) \quad (\text{II.1.9})$$

A equação (II.1.7) toma, então a forma

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \Psi(x, E, \mu) = \int_0^\infty dE' \int_{-1}^1 d\mu' \frac{\sqrt{M(E')}}{\sqrt{M(E)}} \Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0) \quad (\text{II.1.10})$$

Chamando

$$\Sigma_{SS}(E' \rightarrow E; \mu_0) = \sqrt{\frac{M(E')}{M(E)}} \Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0) \quad (\text{II.1.11})$$

é fácil ver que $\Sigma_{SS}(E' \rightarrow E; \mu_0)$ é simétrico desde que $\Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0)$ satisfaça o princípio de balanço detalhado.

Assim

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \Psi(x, E, \mu) = \int_0^\infty dE' \int_{-1}^1 d\mu' \Sigma_{SS}(E' \rightarrow E; \mu_0) \Psi(x, E', \mu') \quad (\text{II.1.12})$$

Desenvolvendo $\Sigma_{SS}(E' \rightarrow E; \mu_0)$ em uma série de polinômios de Legendre em μ_0 e aplicando o teorema da adição, tem-se

$$\Sigma_{SS}(E' \rightarrow E; \mu_0) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{2p+1}{2} \Sigma_{SS}(E' \rightarrow E) P_p(\mu_0) \quad (\text{II.1.13})$$

com

$$P_p(\mu_0) = P_p(\mu) P_p(\mu') + 2 \sum_{m=-p}^p \frac{(p-m)!}{(p+m)!} P_p^m(\mu) P_p^m(\mu') \cos m(\phi - \phi')$$

sendo

ϕ e ϕ' os ângulos azimutais de $\vec{\Omega}$ e $\vec{\Omega}'$

e

$P_p^m(\mu)$ e $P_p^m(\mu')$ polinômios associados de Legendre

Como a integral em relação a ϕ' da somatória para $P_p(\mu_0)$ é nula, pois o meio foi considerado isotrópico, tem-se

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, E, \mu) + \Gamma(E) \Psi(x, E, \mu) = \\ = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{2p+1}{2} \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{SS}^p(E' \rightarrow E) P_p(\mu) \int_{-1}^1 d\mu' P_p(\mu') \Psi(x, E, \mu') \end{aligned} \quad (\text{II.1.14})$$

Uma situação mais realística seria admitir, pelo menos, espalhamento anisotrópico linear; matematicamente seria tomar $p = 1$.

Infelizmente, por pequena capacidade de memória e grande tempo de cálculo do computador disponível, os resultados numéricos só foram obtidos para espalhamento isotrópico, ou seja, $p = 0$.

Entretanto, dificuldades analíticas, utilizando-se o método PEA, para a obtenção das expressões para espalhamento anisotrópico linear não existem; tanto é assim que, as soluções para tal espalhamento se en-

contram deduzidas no apêndice 1.

Então, supondo o espalhamento isotrópico, a equação (II.1.14) pode ser escrita

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \Psi(x, E, \mu) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{SS}^0(E' \rightarrow E) \int_{-1}^1 d\mu' \Psi(x, E', \mu') \quad (\text{II.1.15})$$

uma vez que $P_0(\mu) = 1$

Desenvolvendo $\Psi(x, E, \mu)$ em uma série de polinômios na energia, $g_j(E)$, definidos por

$$g_j(E) = \sqrt{M(E)} L_j^{(1)}(E) \quad (\text{II.1.16})$$

onde $L_j^{(1)}(E)$ são polinômios de Laguerre de primeira espécie, tem-se

$$\Psi(x, E, \mu) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j(x, \mu) g_j(E) \quad (\text{II.1.17})$$

Os polinômios $g_j(E)$ formam um conjunto completo e ortonormal.

Então,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \left[\sum_{j=0}^{\infty} f_j(x, \mu) g_j(E) \right] + \Sigma(E) \sum_{j=0}^{\infty} f_j(x, \mu) g_j(E) &= \\ = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE' \int_{-1}^1 d\mu' \Sigma_{SS}^0(E' \rightarrow E) \sum_{j=0}^{\infty} f_j(x, \mu') g_j(E') \end{aligned}$$

Multiplicando por $g_k(E)$ e integrando entre 0 e $+\infty$, tem-se

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{\infty} \delta_{kj} \mu \frac{\partial}{\partial x} f_j(x, \mu) + \sum_{j=0}^{\infty} f_j(x, \mu) \int_0^{\infty} dE g_k(E) \Sigma(E) g_j(E) &= \\ = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dE g_k(E) \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{SS}^0(E' \rightarrow E) g_j(E') \int_{-1}^1 d\mu' f_j(x, \mu') \end{aligned} \quad (\text{II.1.18})$$

pois, pelo próprio caráter dos polinômios $g_j(E)$,

$$\int_0^{\infty} g_k(E) g_j(E) = \delta_{kj}$$

Fazendo

$$V_{kj} = \int_0^{\infty} dE g_k(E) \Sigma(E) g_j(E) \quad (\text{II.1.19})$$

e

$$\alpha_{kj}^0 = \int_0^{\infty} dE g_k(E) \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{ss}^0(E' \rightarrow E) g_j(E'), \quad (\text{II.1.20})$$

vê-se que

$$V_{kj} = V_{jk}$$

$$\alpha_{kj}^0 = \alpha_{jk}^0$$

A primeira dessas duas igualdades é imediata; a segunda decorre do fato de $\Sigma_{ss}^0(E' \rightarrow E)$ ser simétrico. Daí a vantagem de se ter simetrizado o núcleo de espalhamento, como ter-se-á ocasião de notar mais adiante.

A equação (II.1.18) toma, então, a forma

$$\sum_{j=0}^{\infty} \delta_{jk} \mu \frac{\partial}{\partial x} f_j(x, \mu) + \sum_{j=0}^{\infty} V_{jk} f_j(x, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu' \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_{jk}^0 f_j(x, \mu') \quad (\text{II.1.21})$$

Numa aproximação qualquer de ordem L para a dependência energética, que depende, como é natural, de cada problema específico, tem-se

$$\sum_{j=0}^L \delta_{jk} \frac{\partial}{\partial x} f_j(x, \mu) + \sum_{j=0}^L v_{jk} f_j(x, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu' \sum_{j=0}^L \alpha_{jk}^0 f_j(x, \mu')$$

(II.1.22)

$$k = 0, 1, 2, \dots, L$$

Ou, escrevendo a equação acima na forma matricial

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \left\{ |f(x, \mu)\rangle \cdot [I] + [V] |f(x, \mu)\rangle \right\} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu' [C^0] |f(x, \mu')\rangle$$

(II.1.23)

onde

[V] matriz quadrada de ordem (L+1) e simétrica de elementos v_{jk}

[α^0] matriz quadrada de ordem (L+1) e simétrica de elementos α_{jk}^0

[I] matriz identidade de ordem (L+1) de elementos δ_{jk}

|f(x, μ)> vetor, matriz coluna, de ordem (L+1) de elementos $f_j(x, \mu)$

Tem-se, ainda, um sistema íntegro-diferencial, mas agora, de equações independentes da energia; entretanto, ainda é um sistema de difícil solução, uma vez que, as componentes do vetor |f(x, μ)> estão acopladas através de matrizes não diagonais, [V] e [α^0].

Para facilitar a solução desse sistema, pode-se transformá-lo em um sistema de equações diferenciais, através de um desenvolvimento em série de polinômios de Legendre na variável μ .

Seja, então

$$f_j(x, \mu) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} A_j^n(x) P_n(\mu)$$

ou

$$|f(x, \mu)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) |A^n(x)\rangle$$

(II.1.24)

sendo $|A^m(x)\rangle$ um vetor, matriz coluna de ordem $(L+1)$ de elementos $A_j^m(x)$,
 $m = 0, 1, 2, \dots, \infty$.

Substituindo (II.1.24) em (II.1.23) obtem-se

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{2} P_m(\mu) |A^m(x)\rangle + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{2} [V] P_m(\mu) |A^m(x)\rangle = \\ & = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu' \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{2} [\alpha^0] P_m(\mu') |A^m(x)\rangle \end{aligned} \quad (II.1.25)$$

Multiplicando por $P_n(\mu)$, integrando em relação a $d\mu$ e lembrando que

$$\int_{-1}^1 P_m(\mu) P_n(\mu') d\mu = \frac{2}{2n+1} \delta_{m,n}$$

tem-se

$$\begin{aligned} & \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} |A^m(x)\rangle \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_n(\mu) \mu P_m(\mu) d\mu + \sum_{m=0}^{\infty} \delta_{m,n} [V] |A^m(x)\rangle = \\ & = \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{2} [\alpha^0] |A^m(x)\rangle \int_{-1}^1 P_n(\mu) d\mu \int_{-1}^1 P_m(\mu') d\mu' \end{aligned}$$

A equação (II.1.25) pode ser escrita

$$\begin{aligned} & \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} |A^m(x)\rangle \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_n(\mu) \mu P_m(\mu) d\mu + [V] |A^m(x)\rangle = [\alpha^0] |A^m(x)\rangle \delta_{n,0} \\ & n = 1, 2, \dots, \infty \end{aligned}$$

Para o primeiro termo do primeiro membro da equação acima, utiliza-se a fórmula de recorrência para os polinômios de Legendre

$$(n+1) P_{n+1}(\mu) + n P_{n-1}(\mu) = (2n+1) \mu P_n(\mu)$$

e então

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} |A^m(x)\rangle = \frac{1}{2m+1} \left[(m+1) \delta_{m+1,n} + m \delta_{m-1,n} \right] + [V] |A^n(x)\rangle - [\alpha^0] |A^n(x)\rangle \delta_{n,0}$$

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

(II.1.26)

$$n = 0, 1, 2, \dots, \infty$$

Se, análogamente ao caso da dependência energética, for considerada uma aproximação de ordem N para a dependência angular, tem-se o sistema de equações diferenciais

$$\left\{ \begin{array}{l} (n+1) \frac{\partial}{\partial x} |A^{n+1}(x)\rangle + n \frac{\partial}{\partial x} |A^{n-1}(x)\rangle + (2n+1) \left\{ [V] - [\alpha^0] \delta_{n,0} \right\} |A^n(x)\rangle = 0 \\ \qquad \qquad \qquad n = 0, 1, \dots, n-1 \\ N \frac{\partial}{\partial x} |A^{N-1}(x)\rangle + (2N+1) [V] |A^N(x)\rangle = 0 \\ \qquad \qquad \qquad n = N \end{array} \right. \quad \text{(II.1.27)}$$

Assim, também, como para a dependência energética, a ordem N da aproximação angular dependerá de cada problema específico.

Uma tentativa de transformar o sistema (II.1.27) em um sistema de equações algébricas é através de

$$|A^n(x)\rangle = e^{-x/v} |A^n(v)\rangle \quad \text{(II.1.28)}$$

Neste caso, tem-se o sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} (n+1) |A^{n+1}(v)\rangle + n |A^{n-1}(v)\rangle - (2n+1) v \left\{ [V] - [\alpha^0] \delta_{n,0} \right\} |A^n(v)\rangle = 0 \\ \qquad \qquad \qquad n = 0, 1, \dots, n-1 \\ N |A^{N-1}(v)\rangle - (2N+1) v [V] |A^N(v)\rangle = 0 \\ \qquad \qquad \qquad n = N \end{array} \right. \quad \text{(II.1.29)}$$

onde v é um parâmetro a ser determinado.

Se existirem v que satisfaçam (II.1.29), então, tem-se um sistema algébrico de $(N+1)$ equações, mas cuja solução ainda está dificultada pelo acoplamento das equações, através das matrizes não diagonais $[V]$ e $[\alpha^0]$.

Como $[V]$ e $[\alpha^0]$ são matrizes não diagonais de ordem $\{(N+1)(L+1)\}$, seria necessário determinar as raízes de um determinante de ordem $\{(N+1)(L+1)\}$, ou seja, calcular um determinante de $\{(N+1)(L+1)\}^2$ elementos.

A diagonalização de $[V]$ e $[\alpha^0]$ simultaneamente preservando o caráter diagonal de $[I]$ não é possível.

Escolheu-se, então, a matriz $[V]$ para ser diagonalizada; e a razão de tal escolha, é devida ao fato de que, para o caso isotrópico, $[\alpha^0]$ só "mistura" as componentes do vetor $|A^0(v)\rangle$ enquanto que $[V]$, "mistura" as ordenadas de todos os vetores $|A^0(v)\rangle$, $|A^1(v)\rangle$, . . . , $|A^N(v)\rangle$ o que complica muito mais a solução.

Além disso, após a diagonalização de $[V]$, a nova matriz diagonal $[U]$ obtida não "mistura" mais todas as componentes dos vetores acima mencionadas, e apenas multiplica as componentes respectivas desses vetores; e isto faz com que se obtenha um sistema de equações matriciais, de mesma estrutura que para o caso monoenergético.

No caso de espalhamento anisotrópico de qualquer ordem, a escolha da diagonalização de $[V]$ é ainda mais drástica, pois seria impossível se diagonalizar simultaneamente as matrizes $[\alpha^n]$ e ainda preservar o caráter diagonal de $[I]$.

Esta preocupação pela anisotropia no espalhamento é justificada desde já, pelo fato de que se pretende levá-la em consideração em trabalhos futuros; e como já foi dito, o espalhamento isotrópico foi o admitido nesta tese, apenas por questões de capacidade do computador utilizado.

Então, sendo $[V]$ uma matriz simétrica pois

$$V_{kj} = V_{jk} = \int_0^{\infty} g_j(E) \Sigma(E) g_k(E) dE$$

existirá uma matriz ortogonal $[S]$ tal que

$$[S]^{-1} [V] [S] = [U] \quad (\text{II.1.30})$$

onde $[U]$ é uma matriz diagonal.

Como $[\alpha^0]$ é também uma matriz simétrica pois

$$\alpha_{jk}^0 = \alpha_{kj}^0 = \int_0^\infty dE g_k(E) \int_0^\infty dE' \Sigma_{ss}^0(E' \rightarrow E) g_j(E')$$

com

$$\Sigma_{ss}^0(E' \rightarrow E) = \Sigma_{ss}^0(E \rightarrow E')$$

então, a transformação de similitude

$$[S]^{-1} [\alpha^0] [S] = [\gamma^0] \quad (\text{II.1.31})$$

fornece a matriz ainda simétrica $[\gamma^0]$. É interessante notar que $[\gamma^0]$ não seria simétrica se $[\alpha^0]$ não o fôsse. Portanto, mesmo após a diagonalização de $[V]$ se continua operando somente com matrizes simétricas, o que é de grande vantagem computacional.

Definindo o vetor $|B^n(v)\rangle$ através de

$$[S]^{-1} |A^n(v)\rangle = |B^n(v)\rangle \quad (\text{II.1.32})$$

o sistema (II.1.29) é escrito

$$\left\{ \begin{array}{l} (n+1) |B^{n+1}(v)\rangle + n |B^{n-1}(v)\rangle - (2n+1) \left\{ [vU] - [v\gamma^0] \delta_{n,0} \right\} |B^n(v)\rangle = 0 \\ \hspace{20em} n = 0, 1, 2, \dots, n-1 \\ N |B^{N-1}(v)\rangle - (2N+1) [vU] |B^N(v)\rangle = 0 \\ \hspace{20em} N = n \end{array} \right. \quad (\text{II.1.33})$$

onde agora $[U]$ é uma matriz diagonal e $[\gamma^0]$ é uma matriz simétrica.

Nesse sistema, as componentes dos vetores $|B^n(v)\rangle$, $n = 0, 1, \dots, N$, não são acopladas entre si devido ao caráter diagonal da matriz $[U]$; existe apenas um acoplamento entre as componentes do vetor $|B^0(v)\rangle$, introduzida pela presença da matriz $[\gamma^0]$.

O sistema homogêneo de $(N+1)$ equações, acima, admite solução não trivial, se e somente se o determinante, $\Delta_{N+1}([\bar{v}U])$, dos coeficientes for nulo.

Supondo que tal solução exista, pode-se construí-la, /1/, através da seguinte combinação linear de polinômios de Legendre P_n e das funções de Legendre de segunda espécie Q_n .

$$|B^n(v)\rangle = \left\{ P_n([\bar{v}U]) - W_{n-1}([\bar{v}U]) [\bar{v}\gamma^0] \right\} |B^0(v)\rangle \quad (\text{II.1.34})$$

onde

$$W_{n-1}([\bar{v}U]) = P_n([\bar{v}U]) Q_0([\bar{v}U]) - Q_n([\bar{v}U])$$

$$W_{-1}([\bar{v}U]) = 0 \quad \text{e} \quad W_0([\bar{v}U]) = 1$$

Tanto os P_n como os Q_n estão definidos na referência 26, e $|B^0(v)\rangle$ é um vetor totalmente arbitrário.

Os v permitidos para que o sistema (II.1.33) admita solução não trivial, são as raízes da equação

$$\Delta_{N+1}([\bar{v}U]) = 0$$

Apesar de a matriz $[U]$ ser diagonal, ter-se-ia que calcular um número muito grande de valores, mesmo para aproximações de ordens baixas, pois $\Delta(v)$ é um determinante de ordem $\{(N+1)(L+1)\}$. Isto significa que teriam que ser calculados $\{(N+1)(L+1)\}^2$ valores, o que ainda com o uso de computador seria desinteressante.

Prova-se, entretanto, /1,27/ que as condições

$$\Delta_{N+1}(\underline{vU}) = 0 \quad \text{e} \quad |B^{N+1}(v)\rangle = 0$$

são equivalentes.

Então, a solução geral do sistema (II.1.33) é dada por(II.1.34), onde os v permitidos são as raízes de

$$|P_{N+1}(\underline{vU}) - W_N(\underline{vU}) \underline{v\gamma^0}| = 0 \quad (\text{II.1.35})$$

A equação acima eliminará a arbitrariedade total do vetor $|B^0(v)\rangle$, ficando apenas uma componente arbitrária, o que possibilita a introdução de uma condição extra, conveniente a cada problema particular.

Tem-se, agora, apenas que se obter as raízes de um determinante de ordem $(L+1)$ e não mais, um determinante de ordem $\{(N+1)(L+1)\}$; e além disso, tem-se que obter as raízes de um determinante de uma matriz simétrica, o que é extremamente conveniente do ponto de vista computacional /29/.

Se v_s são as soluções de (II.1.35) e β_n , $n = 1, 2, \dots, L+1$, são os elementos diagonais de \underline{U} , pode-se escrever (II.1.34) como

$$B_j^n(v_s) = \sum_{k=0}^L \left\{ P_n(\beta_j v_s) \delta_{jk} - \sum_{m=0}^L W_{n-1}(\beta_j v_s) \delta_{jm} \cdot \left\{ (v_s \gamma^0) \right\}_{mk} \right\} B_k^0(v_s) \quad (\text{II.1.36})$$

onde os $B_k^0(v_s)$ são determinados pelo sistema.

$$\sum_{k=0}^L \left\{ P_{N+1}(\beta_j v_s) \delta_{jk} - \sum_{m=0}^L W_N(\beta_j v_s) \delta_{jm} \cdot \left\{ (v_s \gamma^0) \right\}_{mk} \right\} B_k^0(v_s) = 0 \quad (\text{II.1.37})$$

Devido ao caráter linear da equação de Boltzmann considerada e das transformações efetuadas, a solução geral que se obtem, numa aproximação (N,L) , para N ímpar e L qualquer é dada por

$$\phi(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} \left\{ \sum_{n=0}^N \sum_{j=0}^L \frac{1}{2} (N+1)(L+1) \left[\sum_{s=1} \left[C_s^{(+)} A_j^n(+v_s) e^{-x/v_s} + C_s^{(-)} A_j^n(-v_s) e^{+x/v_s} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) g_j(E) \right] \right\} \quad (\text{II.1.37})$$

Foram tomadas as aproximações ímpares para a dependência angular, pois neste caso, qualquer que seja L, não existe raiz nula, o que no caso monoenergético já introduz uma série de dificuldades. Além disso, as raízes são, então, aos pares, em número de $\frac{1}{2}(N+1)(L+1)$ pares.

As constantes C_s são determinadas por condições de contorno e $|A^n(\pm v_s)\rangle = [S] |B^n(\pm v_s)\rangle$.

II.2 - As Condições de Contorno

As condições de contorno impostas pelo problema de Milne à solução geral da equação de Boltzmann, (II.1.37), são

$$1. \lim_{x \rightarrow \infty} \phi(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} \left\{ \sum_{n=0}^N \sum_{j=0}^L \left[C_1^{(-)} A_j^n(-v_1) e^{+x/v_1} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) g_j(E) \right\} \quad (\text{II.2.1})$$

isto é, para $x \rightarrow \infty$, só existe contribuição do termo e^{x/v_1} onde v_1 é a maior raiz

$$2. \phi(0, E, \mu) = 0 \quad \text{para } \mu_1 \text{ soluções positivas de } P_{N+1}(\mu) = 0;$$

(II.2.2)

esta é a condição de contorno de Mark, que para o caso monoenergético se encontra apresentada e discutida por Davison /2/.

Em certos casos, a condição de contorno de Mark traz um melhor resultado que a de Marshak /2/; em outros casos é o inverso que acontece.

Nesta tese, não houve a preocupação de se examinar qual seria a melhor condição para o problema em questão; isto porque o interesse é

centrado em verificar, qualitativamente, a influência conjunta da absorção do meio e da fronteira especialmente no espectro energético, trabalhando com um formalismo (aproximação P_3) que já permite visualizar efeitos típicos de transporte, como já foi mencionado no início desta tese.

Mas será assunto de estudos futuros, saber qual das condições de contorno se aplica melhor ao caso.

Pela primeira condição de contorno, conclui-se que

$$C_2^{(-)} = 0, C_3^{(-)} = 0, \dots, C_S^{(-)} = 0 \quad \text{onde } S = \frac{1}{2}(N+1)(L+1); \quad (\text{II.2.3})$$

e pela segunda

$$\begin{aligned} \Phi(0, E, \mu) = \sqrt{M(E)} \left\{ \sum_{n=0}^N \sum_{j=0}^L \frac{1}{2} \frac{(N+1)(L+1)}{\sum_{s=1}^L} \left[C_s^{(+)} A_j^{n(+v_s)} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu_1) g_j(E) + \right. \\ \left. + \sum_{n=0}^N \sum_{j=0}^L \left[C_s^{(-)} A_j^{n(-v_1)} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu_1) g_j(E) \right\} = 0 \quad (\text{II.2.4}) \end{aligned}$$

onde μ_1 são as raízes positivas de $P_{N+1}(\mu) = 0$; $i = 1, 2, \dots, \frac{1}{2}(N+1)$, pois sendo N ímpar, $P_{N+1}(\mu)$ é um polinômio de grau $(N+1)$, par e, portanto, tem $\frac{1}{2}(N+1)$ raízes positivas.

Lembrando que

$$\int_0^\infty g_j(E) g_k(E) dE = \delta_{jk}$$

multiplicando (II.2.2) por $g_k(E)$ e integrando em relação a dE , tem-se

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^N \sum_{j=0}^L \frac{1}{2} \frac{(N+1)(L+1)}{\sum_{s=1}^L} \left[C_s^{(+)} A_j^{n(+v_s)} \right] \delta_{jk} \frac{2n+1}{2} P_n(\mu_1) + \\ + \sum_{n=0}^N \sum_{j=0}^L \left[C_s^{(-)} A_j^{n(-v_1)} \right] \delta_{jk} \frac{2n+1}{2} P_n(\mu_1) = 0 \end{aligned}$$

Como os únicos termos que existem na somatória em j são os para $j = k$, resulta que

$$\sum_{n=0}^N \frac{1}{2} \frac{(N+1)(L+1)}{s=1} \left[C_s^{(+)} A_k^{n(+v_s)} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu_1) +$$

$$+ \sum_{n=0}^N \left[C_1^{(-)} A_k^{n(-v_1)} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu_1) = 0 \quad (\text{II.2.5})$$

$$i = 1, 2, \dots, \frac{1}{2}(N+1) \quad \text{e} \quad k = 0, 1, \dots, L$$

Fazendo $K = 0, k = 1, \dots; k = L$, obtém-se para cada μ_i um sistema de $(L+1)$ equações a $\left\{ \frac{1}{2}(N+1)(L+1) + 1 \right\}$ incógnitas $C_1^{(+)}, C_2^{(+)}, \dots, C_S^{(+)}$ e $C_1^{(-)}$ onde $S = \frac{1}{2}(N+1)(L+1)$.

Mas, cada uma das equações do sistema deve ser satisfeita por $\mu_i, i = 1, 2, \dots, \frac{1}{2}(N+1)$, e portanto, o sistema contém $\frac{1}{2}(N+1)(L+1)$ equações a $\left\{ \frac{1}{2}(N+1)(L+1) + 1 \right\}$ incógnitas.

Uma das incógnitas e, então, arbitrária e pode ser determinada por condição de contorno apropriada a cada problema particular; por exemplo, por uma condição de fonte, ou ainda, se se trata da distribuição do fluxo no moderador de um reator, a constante arbitrária pode ser determinada pela potência do reator.

Lembrando que, numa aproximação de ordem N

$$|A^N(v_g)\rangle = [S] |B^N(v_g)\rangle$$

tendo sido v_g determinado por

$$|P_{N+1}(\overline{vU}) - W_N(\overline{vU}) \overline{v\gamma^0}| = 0;$$

e que

$$|B^N(v)\rangle = \left[P_N(\overline{vU}) - W_{N-1}(\overline{vU}) \overline{v\gamma^0} \right] |B^0(v)\rangle$$

a distribuição do fluxo de neutrons, com as condições de contorno (II.2.1) e (II.2.2) impostas pelo problema de Milne, fica totalmente determinada.

Sua expressão analítica é

$$\begin{aligned} \Phi(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} \left\{ \sum_{n=0}^N \sum_{j=0}^L \frac{1}{2} (N+1)(L+1) \left[\sum_{s=1}^L C_s^{(+)} A_j^n(+v_s) e^{-x/v_s} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) g_j(E) + \right. \\ \left. + \sum_{n=0}^N \sum_{j=0}^L \left[C_1^{(-)} A_j^n(-v_1) e^{+x/v_1} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) g_j(E) \right\} \quad (II.2.6) \end{aligned}$$

Isto equivale a dizer que, analiticamente, o problema de Milne, polienergético e com dependência angular, proposto nesta tese foi totalmente resolvido; e o método usado foi o método PEA /1/.

II.3 - Distância Extrapolada

Define-se fluxo integrado $\Phi(x, E)$ como a integral em relação a μ de $\Phi(x, E, \mu)$.

A expressão geral para o fluxo integrado no problema de Milne obtém-se a partir de (II.2.6)

$$\begin{aligned} \Phi(x, E) = \sqrt{M(E)} \left\{ \sum_{j=0}^L \frac{1}{2} (N+1)(L+1) \left[\sum_{s=1}^L C_s^{(+)} A_j^0(+v_s) e^{-x/v_s} \right] g_j(E) + \right. \\ \left. + \sum_{j=0}^L \left[C_1^{(-)} A_j^0(-v_1) e^{+x/v_1} \right] g_j(E) \right\} \quad (II.3.1) \end{aligned}$$

Separando a contribuição referente aos dois maiores auto-valores $\pm v_1$, tem-se

$$\begin{aligned} \Phi(x, E) = \sqrt{M(E)} \left\{ \sum_{j=0}^L \left[C_1^{(+)} A_j^0(+v_1) e^{-x/v_1} + C_1^{(-)} A_j^0(-v_1) e^{+x/v_1} \right] g_j(E) + \right. \\ \left. + \sum_{j=0}^L \frac{1}{2} (N+1)(L+1) \left[\sum_{s=2}^L C_s^{(+)} A_j^0(+v_s) e^{-x/v_s} \right] g_j(E) \right\} \quad (II.3.2) \end{aligned}$$

É claro que se ν_1 é o maior auto-valor, a contribuição para o fluxo integrado longe da fronteira é devido aos dois primeiros termos; é a região denominada assintótica, e a parcela do fluxo integrado devida somente aos auto-valores $\neq \nu_1$ é usualmente denominada de fluxo assintótico.

O fluxo assintótico é dado, então, pela expressão

$$\phi_{\text{ass}}(x, E) = \sqrt{M(E)} \left\{ \sum_{j=0}^L \left[C_1^{(+)} A_j^{(+)} e^{-x/\nu_1} + C_1^{(-)} A_j^{(-)} e^{+x/\nu_1} \right] g_j(E) \right\} \quad (\text{II.3.3})$$

As demais contribuições com $\nu_i < \nu_1$, ($i \geq 2$), decaem mais ou menos rapidamente, traduzindo a influência, no fluxo integrado, dos denominados transientes devido à existência da fronteira com o vácuo, ou seja, uma superfície de descontinuidade do meio.

Pode-se escrever, como $\nu_1 > \nu_j$ ($j \geq 2$), que

$$\phi_{\text{int}} = \phi_{\text{ass}} + \phi_{\text{trans.}} \quad (\text{II.3.4})$$

onde

ϕ_{int} é o fluxo integrado e

$\phi_{\text{trans.}} \propto 0(e^{-x/\nu_2})$

A distância extrapolada x_0 é classicamente /2/ definida através da equação

$$\phi_{\text{ass}}(-x_0) = 0 \quad (\text{II.3.5})$$

Ou seja, considera-se somente a parte assintótica do fluxo integrado, válida como boa representação do fluxo integrado real, somente na região assintótica como valendo em todo o meio (especialmente até a fronteira), e determina-se uma abcissa ($-x_0$) onde o prolongamento analítico de ϕ_{ass} do meio se anule.

Em problemas práticos, como por exemplo, muitos de Física de Reatores, especialmente em reatores de grande porte, a região assintótica é a dominante pois a região onde o fluxo integrado real e o fluxo assintótico diferem é muito pequena da ordem de alguns caminhos livre-médio junto à fronteira.

Utilizando a distância extrapolada, facilita-se enormemente o estabelecimento de condições de contorno para o cálculo do fluxo assintótico que é praticamente o existente em todo o núcleo de um reator nuclear. De fato, impõe-se somente que ϕ_{ass} se anule em $(-x_0)$.

Como $|A^0(v)\rangle = |A^0(-v)\rangle$, então de (II.3.3), fazendo $C_1^{(-)} = 1$, já que $C_1^{(-)}$ é uma constante arbitrária, tem-se

$$-C_1^{(+)} e^{+x_0/v_1} = e^{-x_0/v_1}$$

$$-C_1^{(+)} = e^{-2x_0/v_1}$$

$$x_0 = -\frac{v_1}{2} \ln[-C_1^{(+)}] \quad (\text{II.3.4})$$

Com este formalismo para a distância extrapolada, as fórmulas matemáticas para P_1 e para P_3 são as mesmas. O que se altera é o valor do fluxo assintótico nos diversos pontos, e para valores diferentes da energia, fazendo com que a constante $C_1^{(+)}$ tenha valores diferentes para as aproximações P_1 e P_3 .

Os valores de v_1 também são diferentes para diferentes aproximações.

A fórmula (II.3.4) para o cálculo da distância extrapolada é a usada por Ferziger e Leonard num trabalho teórico por eles escrito /14/.

CAPÍTULO III

MODÉLO DO GÁS PESADO E DESCRIÇÃO DO PROGRAMA FORTRAN

Para obtenção de resultados numéricos, é preciso que seja escolhido um modelo para o núcleo de espalhamento e se saiba como varia a seção de choque de absorção.

Admitiu-se que a seção de choque de absorção segue a lei $1/v$, isto é

$$\Sigma_a(E) = \frac{\Sigma_a^{(1)}}{\sqrt{E}} \quad (\text{III.1})$$

onde $\Sigma_a^{(1)}$ é a seção de choque calculada a $E = 1$ kT.

Para modelo do núcleo de espalhamento, foi escolhido o do gás pesado /21/.

Isto, por ser um modelo bastante simples e muito conveniente para os propósitos computacionais, pois os elementos α_{jk} da matriz $[\alpha]$ podem ser facilmente obtidos.

Em trabalhos futuros quando se considerar o espalhamento anisotrópico, será usado o modelo de gás ideal de massa unitária; os cálculos serão feitos com os núcleos de espalhamento de Wigner-Wilkins /6,28/ ou outros núcleos mais realísticos como o de Nelkin /23/.

Mas, qualquer que seja o modelo, tudo que se tem a fazer, é calcular os elementos α_{jk} da matriz do núcleo de espalhamento e os elementos V_{jk} da seção de choque total.

Para o modelo de gás pesado usado nesta tese, a seção de choque de espalhamento foi considerada constante e igual à do átomo livre, Σ_f ; isto é

$$\Sigma_s(E) = \Sigma_f \quad (\text{III.2})$$

E, o núcleo de transferência de energia foi aproximada por um núcleo de

nerado /21/

$$\Sigma_B(E' \rightarrow E) = \Sigma_f M(E) \sum_{j=1}^M (1-2j\bar{\mu}) L_j^{(1)}(E) L_j^{(1)}(E') \quad (\text{III.3})$$

onde $\bar{\mu}$ é a razão da massa do neutron para a do moderador.

Com estas escolhas, a matriz $[V]$ tem a forma

$$[V] = \Sigma_f \left\{ [I] + \frac{\Sigma_a^{(1)}}{\Sigma_f} \right\} [A] \quad (\text{III.4})$$

onde os elementos $A_{i,j}$ da matriz $[A]$ são

$$A_{i,j} = \int_0^{\infty} \frac{M(E) L_i^{(1)}(E) L_j^{(1)}(E)}{\sqrt{E}} dE \quad (\text{III.5})$$

Chamando $\epsilon = \frac{\Sigma_a^{(1)}}{\Sigma_f}$ tem-se

$$[V] = \Sigma_f \left\{ [I] + \epsilon \right\} [A] \quad (\text{III.6})$$

Como Σ_f é uma constante, para maior facilidade de cálculo tomou-se $\Sigma_f = 1$.

Então, para o cálculo numérico do problema de Milne, nesta tese, $[V]$ é dada por

$$[V] = [I] + \epsilon [A] \quad (\text{III.7})$$

onde os elementos de $[A]$ são dados por (III.5).

Foram tomados, no cálculo, $\epsilon = 0,005$, $\epsilon = 0,05$ e $\epsilon = 0,5$, que corresponde, aproximadamente, a baixa, média e alta absorção.

Quanto aos elementos da matriz $[\alpha]$ têm a forma já definida

$$\alpha_{jk} = \int_0^{\infty} dE \int_0^{\infty} dE' L_j^{(1)}(E) \Sigma_s(E' \rightarrow E) \sqrt{M(E')} L_k^{(1)}(E') \sqrt{M(E)} \quad (\text{III.8})$$

Usando (III.3), obtém-se imediatamente

$$\alpha_{jk} = \Sigma_f (1 - j\bar{\mu}) \delta_{jk} \quad (\text{III.9})$$

Como se pode ver, a matriz $[\alpha]$, para o caso de núcleo de gás pesado, é diagonal.

Isto implica em que não haja transferência de neutrons de uma distribuição associada a cada $g_j(E)$ para outra; isto mostra que os neutrons de uma dada distribuição podem ganhar ou perder energia mantendo-se, porém, dentro dessa mesma distribuição.

A matriz $[V]$ como não é diagonal, "mistura" as componentes dos vetores $|A^n(v)\rangle$.

Quando se diagonaliza $[V]$, obtendo-se $[U]$, e então a matriz $[Y]$ obtida da $[\alpha]$ através da mesma transformação de similitude que diagonalizou $[V]$, as coisas se invertem.

Os motivos da preferência de se diagonalizar $[V]$ já foram expostas no Capítulo II.

No cálculo numérico tomou-se o valor usado por Ferziger e Leonard /21/ para facilitar as comparações feitas mais adiante

$$\bar{\mu} = \frac{1}{10}$$

O cálculo numérico foi feito no computador IBM-1620 mod. II do Instituto de Energia Atômica de São Paulo; os programas digitais foram escritos em linguagem Fortran II-D.

Devido à pequena capacidade de memória do computador, para tal cálculo, vários programas foram feitos e de maneira que os dados de entrada de um são obtidos da saída de outro, em cartões perfurados e com

"FORMAT" iguais.

Essa divisão de um único programa "Programa Milne" em vários outros, praticamente independentes, também foi conveniente do ponto de vista de tempo de cálculo; pois êste era demasiado grande e assim vários "loops" foram evitados.

O "Programa Milne" consta assim dos seguintes programas parciais:

1. VCPEA calcula os valores característicos ou auto-valores v_s pelo método PEA e as matrizes $[V]$, $[\alpha]$, $[S]$, $[U]$ e $[\gamma]$
2. MP₃ calcula os vetores $|A^n(v)\rangle$ e $|B^n(v)\rangle$ na aproximação P_3 ; calcula também os valores das constantes C_s ; todos êsses cálculos em qualquer ordem de aproximação energética L_N
3. FEMP₃ calcula a distribuição energética e espacial do fluxo na aproximação P_3L_N ; calcula a distância extrapolada
4. MP₁ calcula os vetores $|A^n(v)\rangle$ e $|B^n(v)\rangle$ na aproximação P_1L_N e os valores das constantes C_s
5. FEMP₁ calcula a distribuição energética e espacial do fluxo, na aproximação P_1L_N e a distância extrapolada.

Além dêsses programas, são utilizadas as sub-rotinas SLH1, DTCL e DTM1 que resolvem o sistema de equações (III.2.5), e a função PL que dá os valores dos polinômios de Laguerre.

Os programas MP₃ e FEMP₃ são usados exclusivamente para a aproximação angular P_3 . Para a aproximação angular P_1 existem os programas análogos MP₁ e FEMP₁; em ambos os casos não há restrições quanto à ordem de aproximação para a dependência energética.

Foi preciso se fazer esta separação, pelos mesmos motivos já expostos, de capacidade de memória e tempo de cálculo.

Num computador maior e mais rápido poderia ser feito um programa único e numa aproximação angular de ordem qualquer.

Todas as expressões analíticas obtidas não impõem restrições às ordens de aproximação, quer energética, quer angular.

Também não há restrições quanto ao número de pontos do meio no qual se quer estudar a distribuição espacial do fluxo, e nem quanto ao intervalo de energia onde se quer estudar a distribuição energética do fluxo.

Os programas, com exceção do VCPEA e das sub-rotinas SLH1, DTC1 e DIM1, foram elaborados como parte integrante desta tese.

A listagem completa do "Programa Milne" encontra-se no Apêndice III.

CAPÍTULO IV

RESULTADOS NUMÉRICOS E ANÁLISE DOS RESULTADOS

Utilizando os programas Milne P1 e Milne P3, foram calculados os espectros energéticos do fluxo de neutrons, respectivamente nas aproximações P_1L_N e P_3L_N , $N = 1, 2, 3, 4, 5$, em vários pontos do meio incluindo a fronteira.

Ênfase foi posta no espectro energético de fronteira e no espectro energético em um ponto a 20 caminhos livre-médios da fronteira, onde já é bastante seguro se considerar esse ponto como pertencente a um meio infinito.

Com os mesmos programas Fortran, foram obtidas as distribuições espaciais dos fluxos, real e assintótico.

Essas distribuições foram calculadas para neutrons de várias energias, desde 0,5 kT até 10 kT, e nas aproximações P_1L_N e P_3L_N , $N = 1, 2, 3, 4, 5$.

Foram determinados os picos dos espectros energéticos, nas aproximações já citadas.

Foram, também, calculadas as distâncias extrapoladas para os fluxos de neutrons, naquelas aproximações acima mencionadas.

Os resultados de todos esses cálculos estão representados em gráficos ou tabelas, e foram normalizados, para efeito de comparação.

Todos os cálculos foram feitos para as absorções correspondentes a $\epsilon = 0,005$, $\epsilon = 0,05$ e $\epsilon = 0,5$.

Os espectros energéticos na fronteira ($x = 0$) e num ponto da zona assintótica ($x = 20$), nas aproximações P_1L_5 e P_3L_5 estão representados pelos gráficos (IV.1.a) e (IV.1.b), respectivamente. Em ambos os gráficos foi traçada uma maxwelliana teórica, também normalizada, para efeito de comparação.

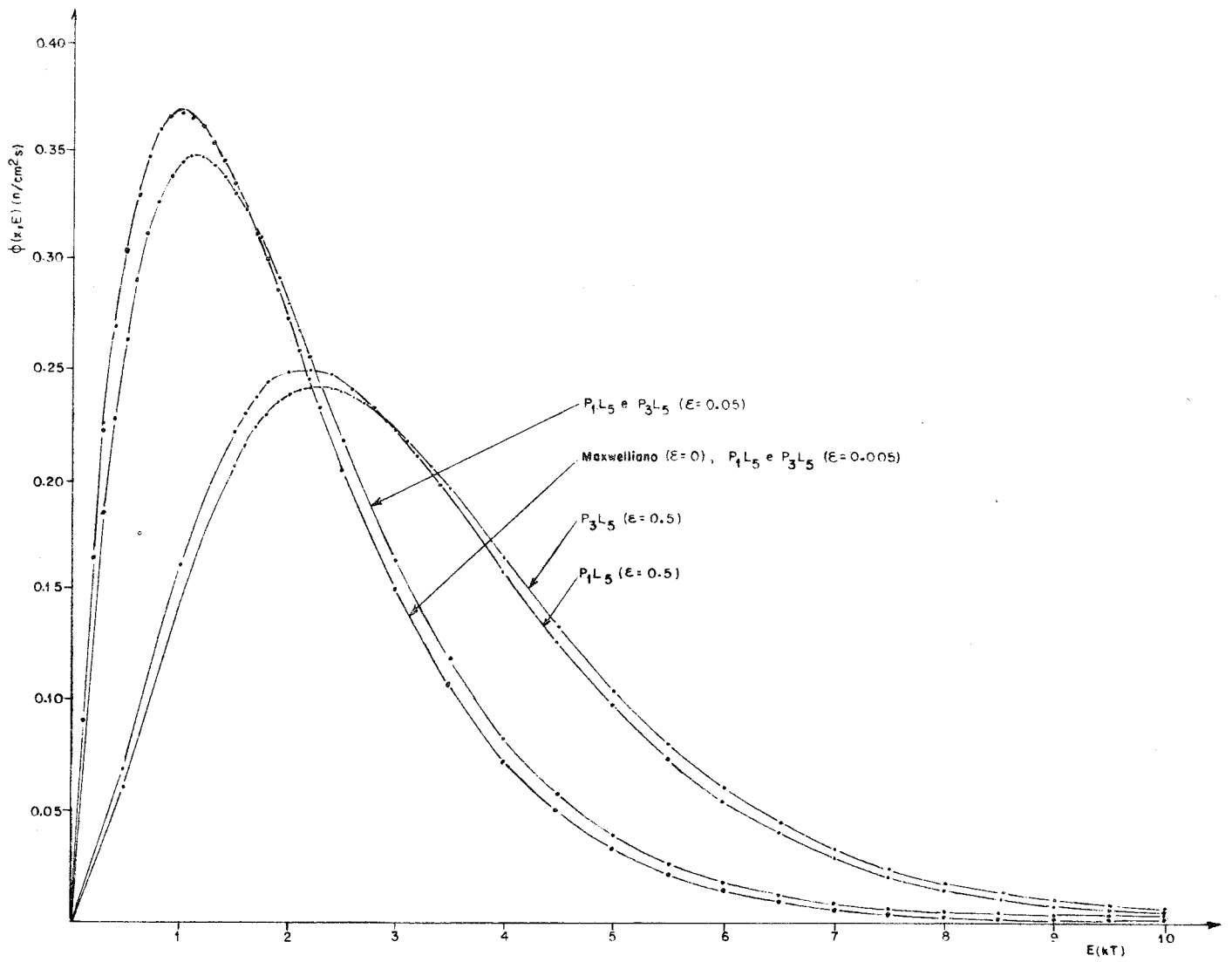


Gráfico IV.1.a - Espectros energéticos normalizados na fronteira, para as várias absorções, nas aproximações P_1L_5 e P_3L_5

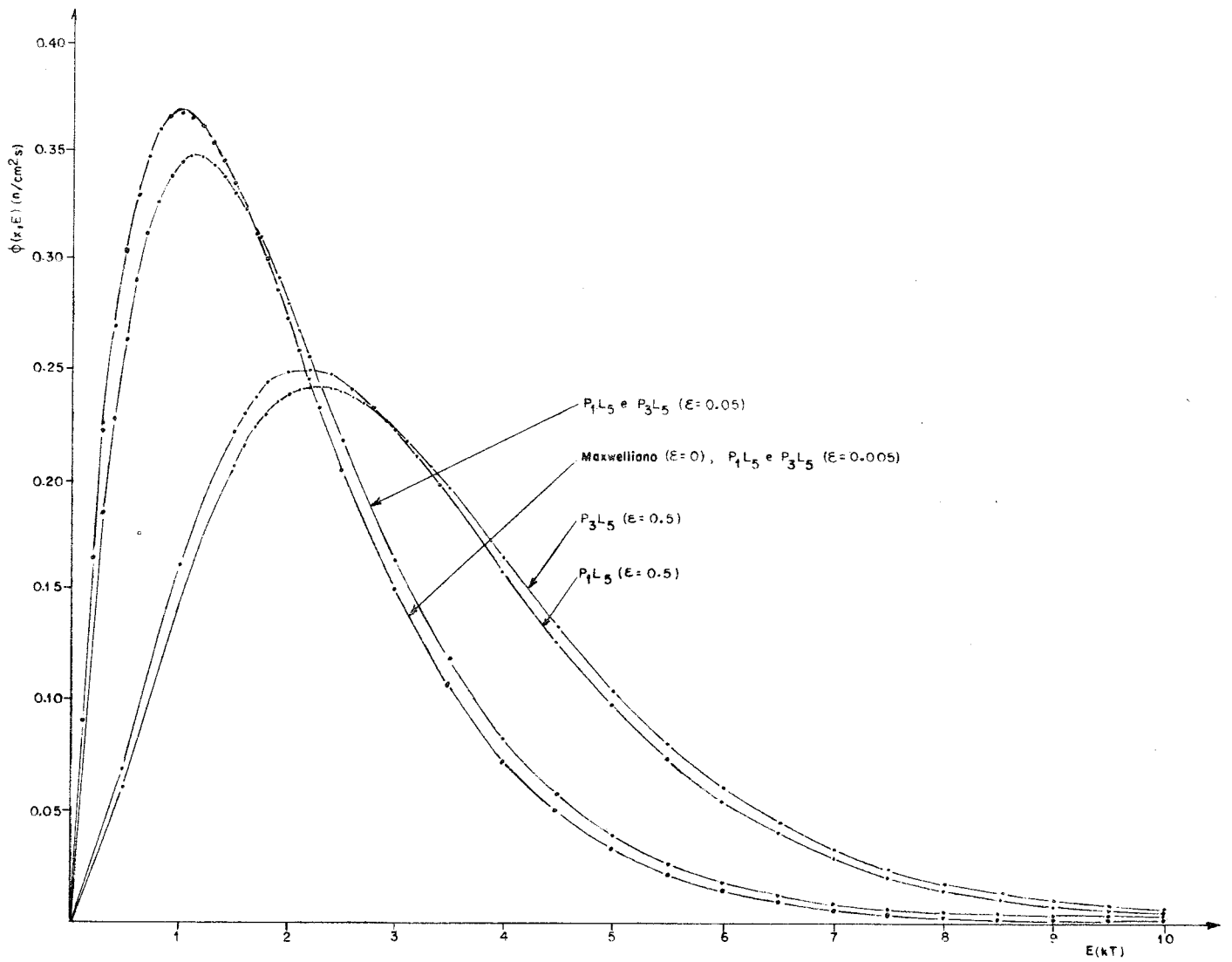


Gráfico IV.1.a - Espectros energéticos normalizados na fronteira, para as várias absorções, nas aproximações P_1L_5 e P_3L_5

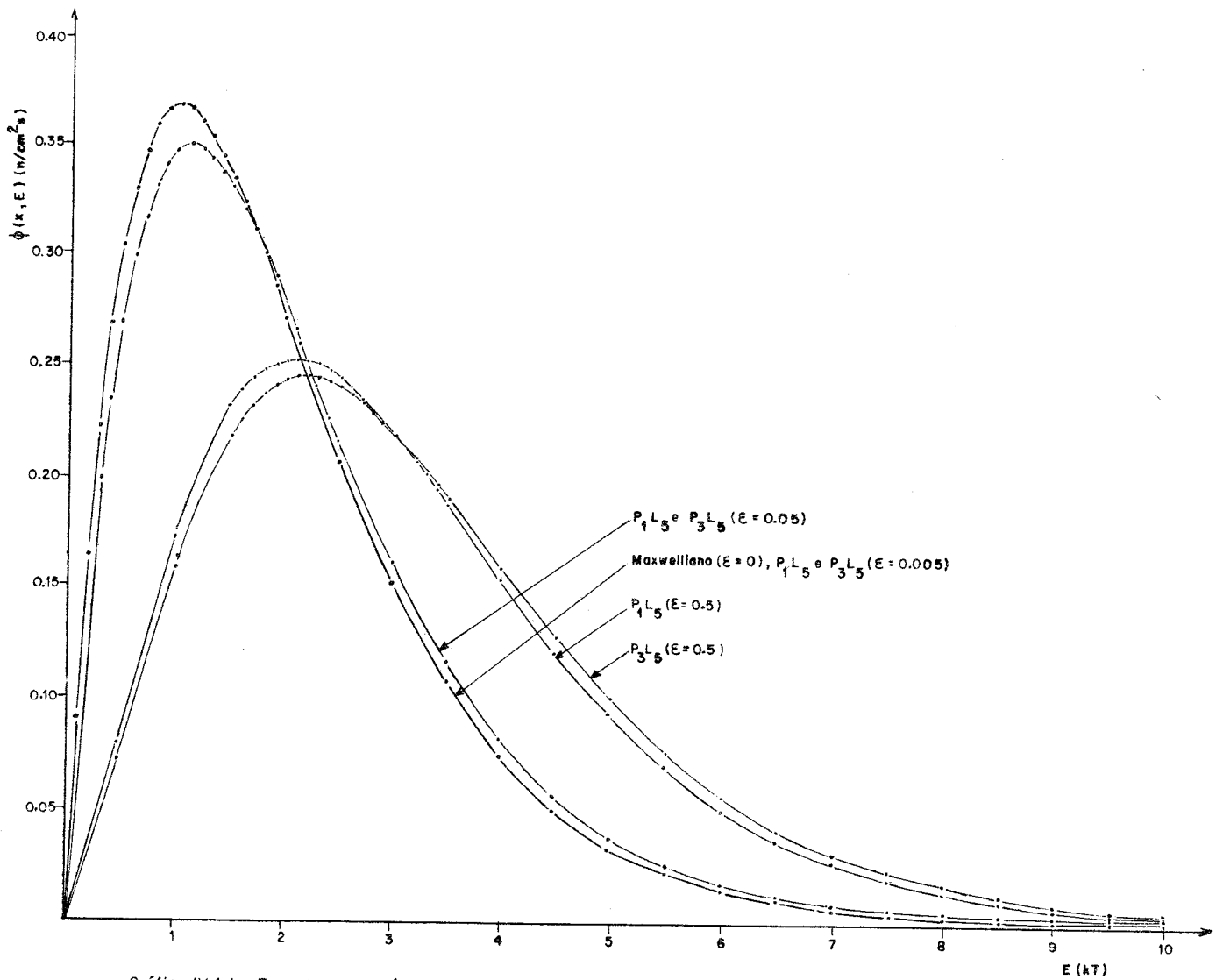


Gráfico IV.1.b - Espectros energéticos assintóticos normalizados, para as várias absorções, nas aproximações P_{1L_5} e P_{3L_5}

Os valores dos picos dos espectros energéticos, na fronteira ($x = 0$) e num ponto da região assintótica ($x = 20$), estão apresentados nas tabelas (IV.1.a), (IV.1.b), (IV.1.c), (IV.1.d), (IV.1.e), (IV.1.f), (IV.1.g) e (IV.1.h).

Aproximação P_1

$x = 0$

ϵ	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5
0,005	1,006	1,010	1,012	1,013	1,013
0,05	1,076	1,111	1,126	1,132	1,133
0,5	2,070	2,160	2,164	2,168	2,167

Tabela (IV.1.a)

$x = 20$

ϵ	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5
0,005	1,006	1,008	1,010	1,011	1,011
0,05	1,067	1,094	1,107	1,111	1,112
0,5	2,007	2,081	2,085	2,083	2,081

Tabela (IV.1.b)

Aproximação P_1 (fluxo assintótico)

$x = 0$

ϵ	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5
0,005	1,006	1,008	1,010	1,011	1,011
0,05	1,067	1,094	1,107	1,111	1,112
0,5	2,007	2,081	2,085	2,083	2,081

Tabela (IV.1.c)

$x = 20$

ϵ	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5
0,005	1,006	1,008	1,010	1,011	1,011
0,05	1,067	1,094	1,107	1,111	1,112
0,5	2,007	2,081	2,085	2,083	2,081

Tabela (IV.1.d)

Aproximação P_3

$x = 0$

ϵ	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5
0,005	1,006	1,011	1,011	1,011	1,013
0,05	1,076	1,111	1,126	1,132	1,133
0,5	2,109	2,291	2,280	2,285	2,284

Tabela (IV.1.e)

$x = 20$

ϵ	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5
0,005	1,006	1,008	1,010	1,011	1,011
0,05	1,067	1,095	1,107	1,111	1,112
0,5	2,040	2,185	2,179	2,177	2,176

Tabela (IV.1.f)

Aproximação P_3 (fluxo assintótico)

$\kappa = 0$

ϵ	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5
0,005	1,006	1,008	1,010	1,011	1,011
0,05	1,067	1,095	1,107	1,111	1,112
0,5	2,040	2,185	2,179	2,177	2,176

Tabela (IV.1.g)

$\kappa = 20$

ϵ	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5
0,005	1,006	1,008	1,010	1,011	1,011
0,05	1,067	1,095	1,107	1,111	1,112
0,5	2,040	2,185	2,179	2,177	2,176

Tabela (IV.1.h)

Para maior facilidade na comparação entre os valores dos picos de energia nas aproximações P_{15} e P_{35} , foram construídas as tabelas (IV.2.a) e (IV.2.b).

Também, para análise dos resultados, foi construída a tabela (IV.3) cujos dados foram tomados de uma curva de distribuição energética num meio infinito, figura 2 da referência 16, e indicados por $F\epsilon L$.

Esta curva também apresenta a mesma normalização que foi tomada nos cálculos desta tese. Assim pode ser usada para efeito de comparação.

$\kappa = 0$

ϵ	P_{15}	P_{35}
0,005	1,013	1,013
0,05	1,133	1,133
0,5	2,167	2,284

Tabela (IV.2.a)

$\kappa = 20$

ϵ	P_{15}	P_{35}
0,005	1,011	1,011
0,05	1,112	1,112
0,5	2,081	2,176

Tabela (IV.2.b)

ϵ	$F\epsilon L$
0,005	~ 1,0
0,05	~ 1,2
0,5	~ 1,9

Tabela (IV.3)

Por essas tabelas, pode-se ver:

1) Influência da ordem da aproximação energética nos espectros de energia.

Fixando-se uma aproximação para a dependência angular (P_1 ou P_3), um valor para absorção ($\epsilon = 0,005$ ou $\epsilon = 0,05$ ou $\epsilon = 0,5$) e um ponto do meio ($x = 0$ ou $x = 20$), pelas tabelas (IV.1) conclue-se que os valores dos picos de energia convergem para um certo limite quando a ordem de aproximação para a dependência energética aumenta.

O termo em L_1 reproduz, praticamente, o espectro maxwelliano, enquanto que os termos em L_2, L_3, L_4, \dots vão deformando este espectro. Daí a razão pela qual os picos de energia vão se deslocando com o aumento da ordem de aproximação para a dependência energética.

A convergência é mais rápida para baixas absorções. Isto era de se esperar, pois para baixas absorções o espectro energético obtido é mais próximo de um maxwelliano, na mesma temperatura.

Da análise dessas tabelas, pode-se, então, dizer que:

- a) em P_1 ou em P_3 , para $\epsilon = 0,005$, a posição do pico converge imediatamente, mostrando que uma aproximação L_1 é suficiente;
- b) essa convergência, tanto em P_1 como em P_3 , já não é tão rápida quando a absorção toma um valor mais alto, $\epsilon = 0,05$; uma aproximação L_3 pelo menos seria mais indicada;
- c) para uma absorção alta, $\epsilon = 0,5$, parece ser suficiente se tomar uma aproximação de terceira ordem, onde não há influência da fronteira, isto é, para $x = 20$; enquanto que na fronteira é conveniente se tomar uma aproximação de pelo menos quarta ordem. Isto vale tanto para P_1 como para P_3 .

Tem-se ainda, a comentar dessas tabelas, que os espectros energéticos dos fluxos assintóticos, (em $x = 0$ e $x = 20$) e do fluxo real na zona assintótica $x = 20$, têm o mesmo valor dos picos de energia, para uma mesma absorção; isto não poderia deixar de ser assim, uma vez que na zona assintótica o fluxo real e o fluxo assintótico coincidem.

Aliás, a região assintótica começa muito antes de 20 caminhos

livre-médios, como será mostrado mais adiante.

Com base na análise das tabelas (IV.1), conclue-se que uma aproximação de quinta ordem para a dependência energética já pode ser considerada uma boa aproximação; isso está de acordo com Ferziger e Leonard /21/ que adotaram tal ordem de aproximação.

Foram, então, tomadas para análises subsequentes, as aproximações P_1L_5 e P_3L_5 .

2) Influência da absorção do meio, de efeitos de transporte e de fronteira sobre espectros energéticos:

Para continuação da análise sobre os espectros energéticos, a gora não mais interessando aproximações abaixo da de quinta ordem, foram construídas as tabelas (IV.2), e também a tabela (IV.3) tirada da referência 16.

A tabela (IV.3) foi construída para efeito de comparação com os resultados obtidos nesta tese, mas comentários sobre esta comparação são feitos no capítulo seguinte, Capítulo V.

Pode-se dizer, das tabelas (IV.2), que:

- a) existe um efeito de absorção fazendo com que o aumento desta desloque o pico do espectro de energia para a direita, ou seja, tornando o espectro mais "quente";
- b) para absorção baixa $\epsilon = 0,005$, o efeito desta é bastante pequeno, pois o pico variou de 1 kT (se não houvesse absorção) para 1,011 kT. O efeito de fronteira também é muito pequeno, pois o pico deslocou-se de 1,011 kT para 1,013 kT. Não aparece ainda efeito de transporte;
- c) para absorção $\epsilon = 0,05$, o efeito desta já é bem visível, assim como o efeito de fronteira. Não há ainda efeito de transporte;
- d) para absorção alta $\epsilon = 0,5$, já são bem evidentes os efeitos de absorção, de fronteira, e mesmo de transporte.

Todos esses efeitos podem ser vistos, também, analisando-se os gráficos (IV.1.). É interessante notar, inclusive, que o espectro de neu-

trons num meio de baixa absorção $\epsilon = 0,005$, praticamente coincide com o espectro maxwelliano de neutrons num meio sem absorção; ambos os espectros para neutrons com mesmas temperaturas.

Este foi um resultado já obtido do exame das tabelas (IV.2).

O efeito de absorção, tornando o espectro mais "quente" perto da fronteira, é devido à lei $1/v$ seguida pela secção de choque microscópica de absorção.

No gráfico (IV.2), pode-se notar, também, o efeito de absorção devido à referida lei $1/v$.

Para efeito de comparação, foram traçadas nesse mesmo gráfico, gráfico (IV.2), as curvas que representam as distribuições espaciais dos fluxos de neutrons com energias $E = 1$ kT e $E = 10$ kT, na aproximação P_3L_5 .

Vê-se que, para cada absorção, a curva de distribuição espacial do fluxo real de neutrons com energia $E = 1$ kT (normalizado a 1 neutron/cm²xs) está localizada acima da curva de distribuição espacial do fluxo real (também normalizado) de neutrons com energia $E = 10$ kT; a única exceção é para o caso de $\epsilon = 0,005$ onde ambas as distribuições praticamente coincidem, o que é esperado, por ser a absorção muito baixa.

A influência da lei $1/v$ sobre tal comportamento dos fluxos normalizados na fronteira, torna-se clara se se notar que, para se ter 1 neutron/cm²xs na fronteira, é necessário se ter, longe desta, fluxos maiores para neutrons de menor energia que para os de alta energia.

O efeito de transporte, que aparece para $\epsilon = 0,5$ é devido à excitação de maior número de modos mais altos; tais modos mais altos são, realmente, mais numerosos na aproximação P_3 do que na aproximação P_1 .

A contribuição do efeito de fronteira para tornar o espectro mais "quente" é devida à fuga preferencial para a frente de neutrons de alta energia.

A demonstração dêsse fato, de interpretação delicada e que se presta facilmente a interpretações exatamente opostas à que foi dada, está no Apêndice 2.

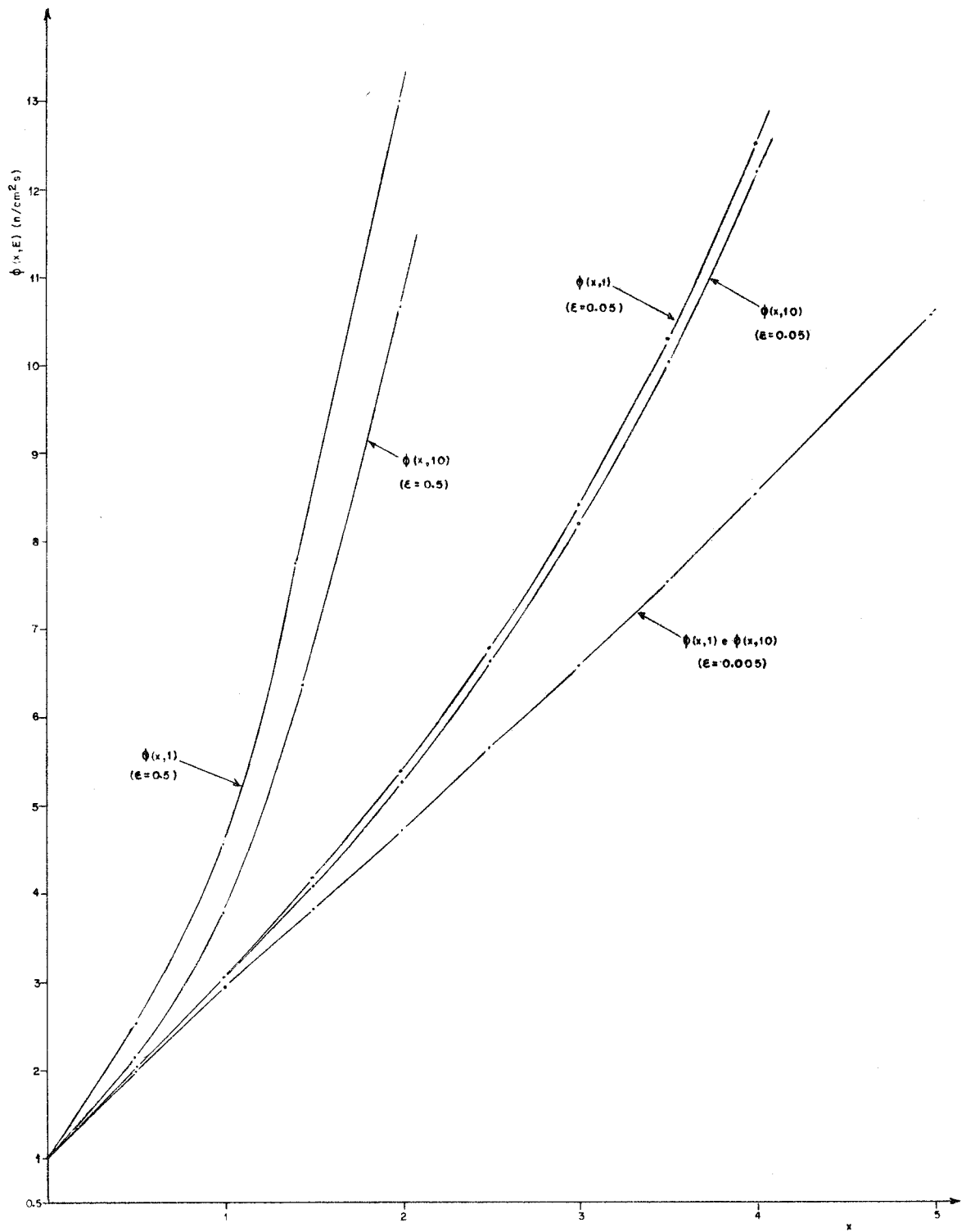


Gráfico IV.2 - Distribuição espacial dos fluxos normalizados $\phi(x,E)$, na aproximação P_3L_5 , para $E=1$ kT e $E=10$ kT

O efeito de absorção devido à lei $1/v$, aliado ao efeito de fronteira, faz com que o espectro seja, realmente, cada vez mais "quente", principalmente quando se aproxima da fronteira meio-vácuo.

Foram dadas em separado as explicações do aparecimento dos efeitos de absorção, fronteira e transporte, apenas para mostrar como estes efeitos influem fisicamente na distribuição energética dos neutrons; mas na verdade, esses efeitos são efeitos globais e não independentes entre si.

As distribuições espaciais dos fluxos reais e assintóticos para neutrons de energia $E = 1$ kT e nas absorções correspondentes a $\epsilon = 0,005$, $\epsilon = 0,05$ e $\epsilon = 0,5$ podem ser analisadas através dos gráficos (IV.3.a) e (IV.3.b), respectivamente nas aproximações P_1L_5 e P_3L_5 .

O fator de normalização é o valor do fluxo real na fronteira.

No gráfico (IV.3.b) pode-se ver a influência dos denominados transientes do fluxo real na aproximação P_3L_5 (induzidos pela consideração dos modos mais altos), nas vizinhanças da fronteira, fazendo com que este fluxo se afaste do fluxo assintótico.

Isto é explicado por não serem considerados os modos mais altos quando se determina o fluxo assintótico,

Nota-se, também, que quanto maior a absorção, maior é tal afastamento.

Esse fato é fácil de se compreender se se notar (tabelas IV.8) que, quanto maior a absorção, mais os modos mais altos se aproximam do modo fundamental. Ou, em outras palavras, quanto maior a absorção, menor se torna a separação entre o auto-valor correspondente ao modo fundamental e os auto-valores correspondentes aos modos mais altos.

As tabelas (IV.4.a) e (IV.4.b) mostram a zona de influência da fronteira na aproximação P_3L_5 , quando comparadas com as tabelas (IV.5.a) e (IV.5.b) respectivamente.

As tabelas (IV.4.a) e (IV.4.b) são correspondente a cálculos, onde a energia dos neutrons foi considerada ser $E = 1$ kT; as tabelas (IV.5.a) e (IV.5.b) são análogas, apenas tendo sido considerado para os cálculos, os neutrons com energia $E = 10$ kT.

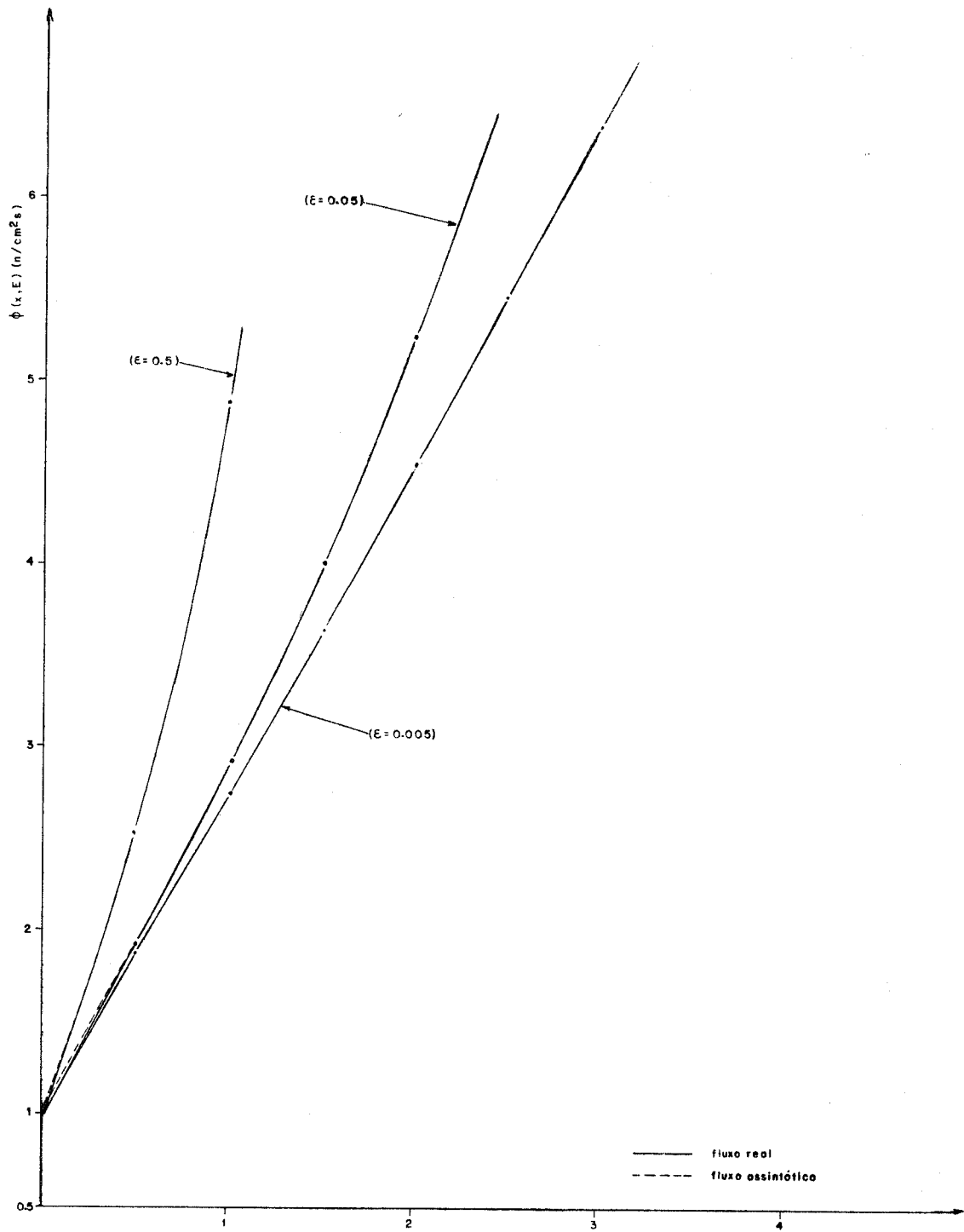


Gráfico IV.3. a - Distribuição espacial do fluxo real e do fluxo assintótico na aproximação P_1L_3 , para $E=1kT$, normalizado a $\phi(0,E)=1n/cm^2 s$

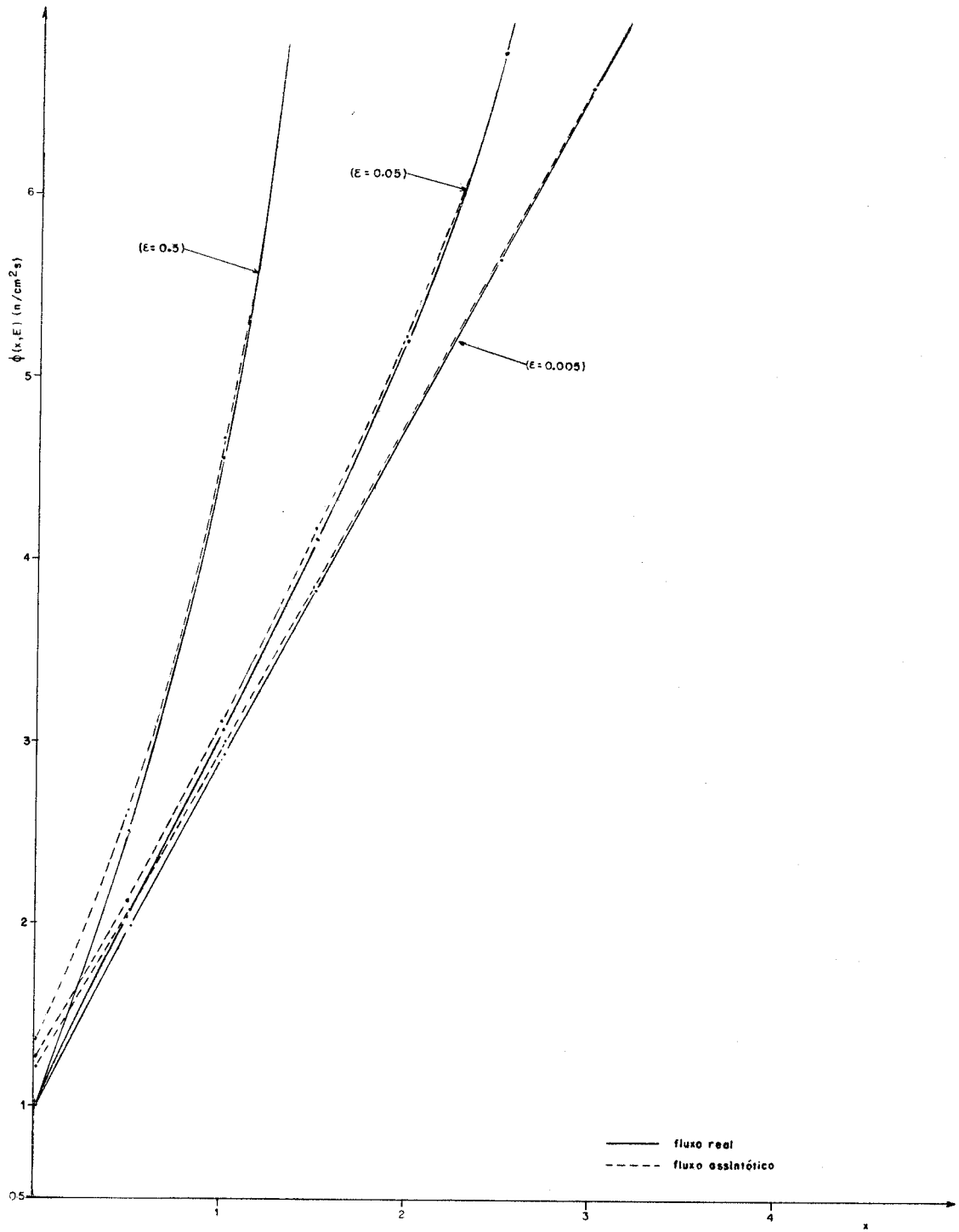


Gráfico IV. 3. b - Distribuição espacial do fluxo real e do fluxo assintótico na aproximação $P_{3/3}$, para $E=1kT$, normalizado a $\phi(0,E)=1n/cm^2 s$

$P_3 L_5$

$E = 1 \text{ kT}$

ϕ_{real}

x	$\epsilon = 0,005$	$\epsilon = 0,05$	$\epsilon = 0,5$
0	1	1	1
0,5	1,9992	2,0467	2,5167
1,0	2,9246	3,0748	4,5564
1,5	3,8299	4,1735	7,5667
2,0	4,7367	5,3967	12,9778
2,5	5,6551	6,7908	21,5909*
3,0	6,5905	8,4036	35,8513
3,5	7,5471	10,2881*	59,4898
4,0	8,5282*	12,5056	98,6907
5,0	10,5778	18,2410	271,5543
6,0	12,7667	26,3594	747,1575

Tabela (IV.4.a)

ϕ_{ase}

x	$\epsilon = 0,005$	$\epsilon = 0,05$	$\epsilon = 0,5$
0	1,2038	1,2123	1,3539
0,5	2,0749	2,1238	2,6347
1,0	2,9528	3,1042	4,6047
1,5	3,8405	4,1851	7,7794
2,0	4,7408	5,4017	12,9791
2,5	5,6566	6,7932	21,5909*
3,0	6,5911	8,4049	35,8513
3,5	7,5473	10,2881*	59,4898
4,0	8,5282*	12,5056	98,6907
5,0	10,5778	18,2410	271,5543
6,0	12,7667	26,3594	747,1575

Tabela (IV.4.b)

P_{3L_5}
 $E = 10 \text{ kT}$
 ϕ_{real}

x	$\epsilon = 0,005$	$\epsilon = 0,05$	$\epsilon = 0,5$
0	1	1	1
0,5	2,0026	2,0121	2,1473
1,0	2,9339	3,0100	3,7821
1,5	3,8418	4,0771	6,3806*
2,0	4,7490	5,2664	10,6583
2,5	5,6677	6,6229*	17,7166
3,0	6,6050*	8,1929	29,4094
3,5	7,5626	10,0282	48,7958
4,0	8,5450	12,1883	80,9472
5,0	10,5978	17,7763	222,7284
6,0	12,7904	25,6869	612,8165

Tabela (IV.5.a)

 ϕ_{ass}

x	$\epsilon = 0,005$	$\epsilon = 0,05$	$\epsilon = 0,5$
0	1,2059	1,1813	1,1104
0,5	2,0788	2,0696	2,1609
1,0	2,9582	3,0250	3,7868
1,5	3,8475	4,0783	6,3806*
2,0	4,7494	5,2667	10,6583
2,5	5,6680	6,6229*	17,7166
3,0	6,6050*	8,1929	29,4094
3,5	7,5626	10,0282	48,7958
4,0	8,5450	12,1883	80,9472
5,0	10,5978	17,7763	222,7284
6,0	12,7904	25,6869	612,8165

Tabela (IV.5.b)

Nota: Os asteriscos foram colocados nessas tabelas para facilitar a visualização de onde termina a zona de influência da fronteira.

Comparando as tabelas (IV.4.a) e (IV.4.b), ou (IV.5.a) e (IV.5.b), pode-se ver que a zona de influência da fronteira é tanto menor quanto maior for a absorção. Isso porque o caminho livre-médio para neutrons de uma dada energia, se torna menor à medida que aumenta a absorção, e é de se esperar que, após alguns caminhos livre-médios os neutrons "esqueçam" a presença da fronteira, onde os transientes se fazem sentir mais intensamente.

Comparando-se, agora, as tabelas (IV.4) e (IV.5), nota-se que a zona de influência da fronteira decresce quando a energia dos neutrons aumenta.

Este comportamento é surpreendente, pois era de se esperar que, com o aumento do caminho livre-médio para neutrons de alta energia, a zona de influência da fronteira se tornasse maior.

Como tal comportamento aparece mesmo para baixa absorção, não pode ser devido a um efeito combinado de absorção e energia dos neutrons; resta somente, para sua causa, um efeito típico de transporte.

Em princípio, seria possível se verificar a validade dessa hipótese, analisando tabelas equivalentes para a aproximação P_1 .

Mas os resultados seriam duvidosos, pois como será visto, a aproximação P_1 é altamente insatisfatória para análises relativas a fenômenos que ocorrem nas vizinhanças da fronteira.

Resta assim, a comparação entre aproximações P_3 e P_5 , por exemplo. Infelizmente, tal comparação até o presente momento não pôde ser feita.

Entretanto, pode-se adiantar, desde já, uma explicação para esse resultado, notando que a presença da fronteira torna o espectro mais "quente", devido a um acúmulo de neutrons rápidos nas suas vizinhanças. Tal acúmulo - efeito de transporte - seria suficiente para contrabalançar o efeito devido ao aumento do caminho livre-médio.

É oportuno notar que esta variação, com a energia dos neutrons, da zona de influência da fronteira, deve tornar-se mais pronunciada se se considerar a contribuição de espalhamentos anisotrópicos.

Cálculos com aproximações de ordens maiores que P_3 , assim como cálculos que levam em conta a anisotropia no espalhamento, serão objetos de trabalhos futuros, num computador de porte maior que o utilizado para esta tese.

A influência dos transientes do fluxo real, verificada na aproximação P_3L_5 , é praticamente nula na aproximação P_1L_5 como se pode ver no gráfico (IV.3.a).

Isto é compreensível, pois a aproximação P_1 é a aproximação de difusão, e nesta aproximação o fluxo considerado nas proximidades de fronteiras é o fluxo assintótico.

Os gráficos (IV.4.a) e (IV.4.b) mostram as distâncias extrapoladas correspondentes aos fluxos de neutrons nas aproximações P_1L_5 e P_3L_5 , respectivamente. Não houve, aí, a preocupação de se normalizar os fluxos, uma vez que só havia interesse em visualizar os valores dessas distâncias extrapoladas, em cada absorção.

Conclusões interessantes podem ser tiradas da análise desses gráficos.

Numa delas é que a distância extrapolada para alta absorção, não coincide com a extrapolação linear do fluxo assintótico na fronteira (distância extrapolada linear); isto pode ser visto no gráfico (IV.4.b). Esta diferença era esperada, uma vez que já aparece no caso monoenergético /2/.

Outra conclusão, também válida para P_3 , é que à medida que a absorção aumenta a distância extrapolada se torna maior; isto pode ser visto tanto no gráfico (IV.4.b) como na tabela (IV.6).

Essa tabela mostra as distâncias extrapoladas para os fluxos, nas aproximações P_1L_5 e P_3L_5 .

As distâncias extrapoladas estão em unidade de caminho livre-médio $1/\Sigma_f$. Para se obtê-las em centímetro, basta multiplicá-las pelo valor do caminho livre-médio do meio que se considera.

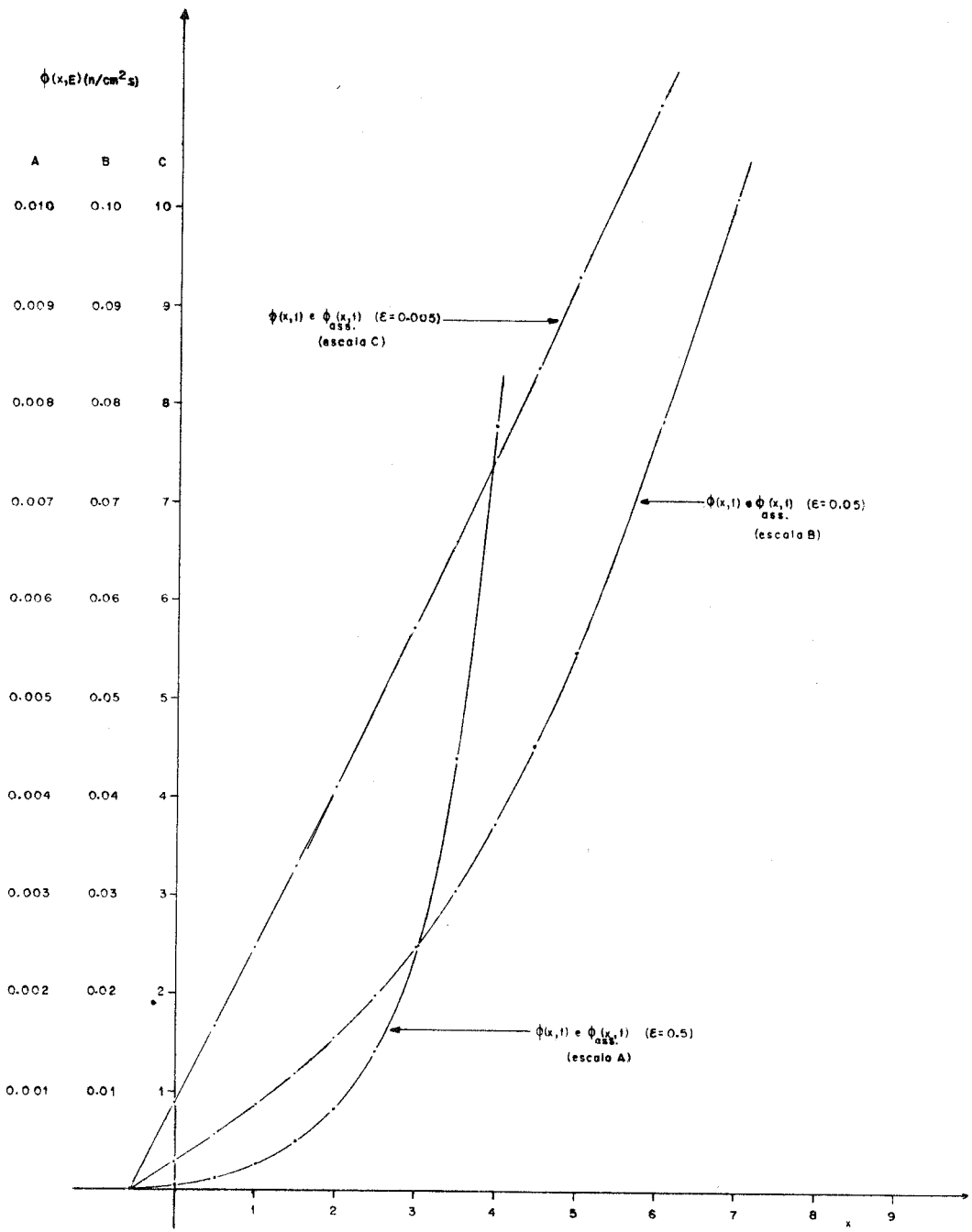


Gráfico IV.4.a - Distribuição do fluxo real e do fluxo assintótico e da distância extrapolada, na aproximação P_1L_5 , para $E = 1 \text{ kT}$

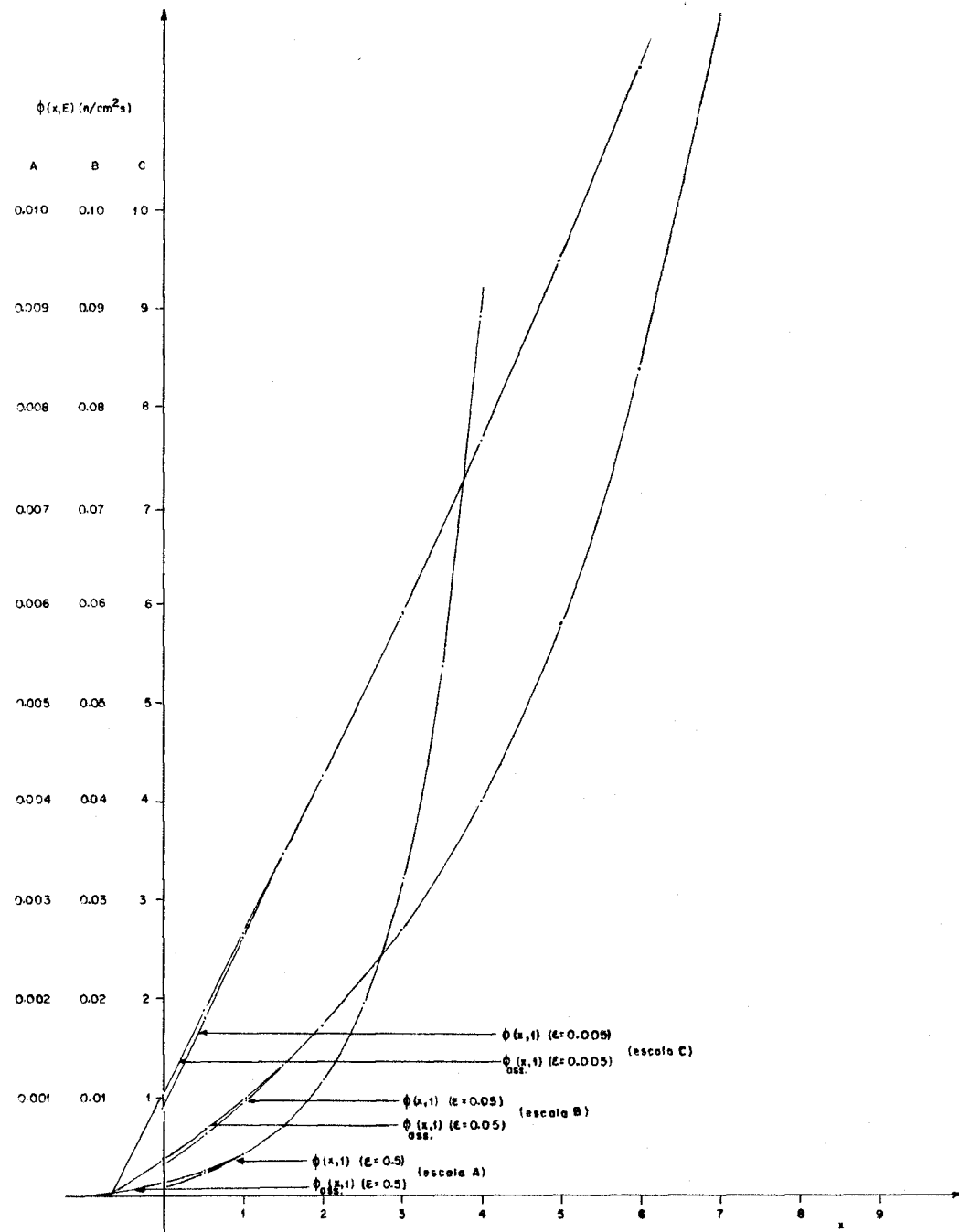


Gráfico IV.4.b- Distribuição do fluxo real e do fluxo assintótico e da distância extrapolada, na aproximação P_3L_5 , para $E=1kT$

	1.5	3.5
0,005	0,5757	0,6944
0,05	0,5626	0,6975
0,5	0,5107	0,7619

Tabela (IV.6)

A conclusão acima tirada, de que a distância extrapolada se torna maior com o aumento da absorção, decorre do fato de que quanto maior a absorção, menor é a zona de influência da fronteira devida ao efeito combinado de absorção e transporte a que já foi feita referência.

Diminuindo a influência da zona de fronteira, equivalente a um aumento da absorção global do meio, maior será a distância extrapolada, como aliás ocorre já no caso monoenergético /2/.

No limite, considerando um meio puramente absorvedor, a distância extrapolada deve tender a infinito. De fato, a distância extrapolada é determinada pela condição de fronteira. No problema de Milne, a fronteira é com o vácuo; no vácuo a seção de choque de absorção é "máxima", e então, quanto maior a absorção do meio, mais este se aproxima do vácuo e, portanto, a distância extrapolada é tanto maior quanto maior for a absorção.

Este efeito combinado de transporte, fronteira e absorção, e, especialmente, os dois primeiros (vide tabelas IV.2), não é adequadamente descrito na aproximação P_1 ; e a falha dessa aproximação é bem indicada pelos resultados constantes da tabela (IV.6), onde se nota que a distância extrapolada na aproximação P_1 diminui quando a absorção cresce, o que é fisicamente inadmissível, como ficou indicado acima.

Uma outra análise interessante, é a referente ao comportamento dos auto-valores obtidos.

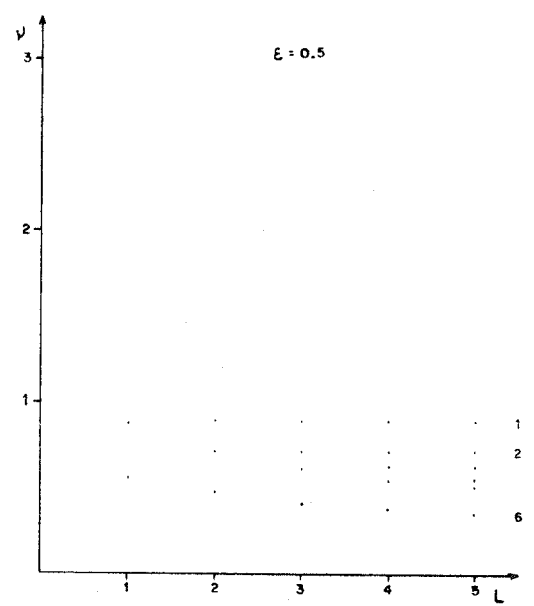
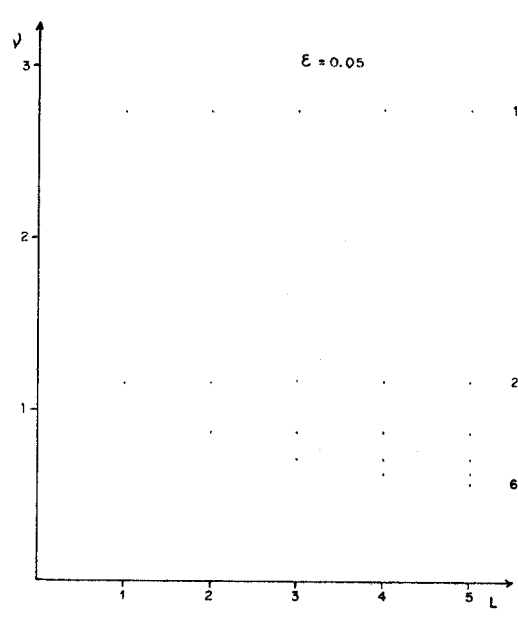
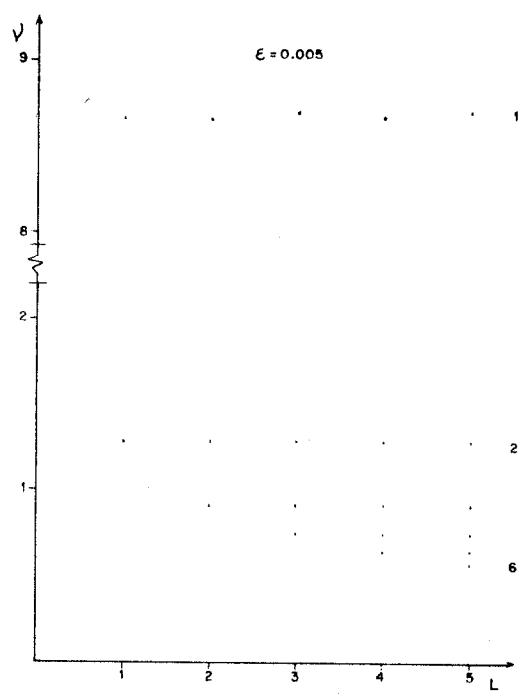


Gráfico IV.5.a - Valores de v nas aproximações $P_1 L_N$, $N = 1, 2, 3, 4, 5$.

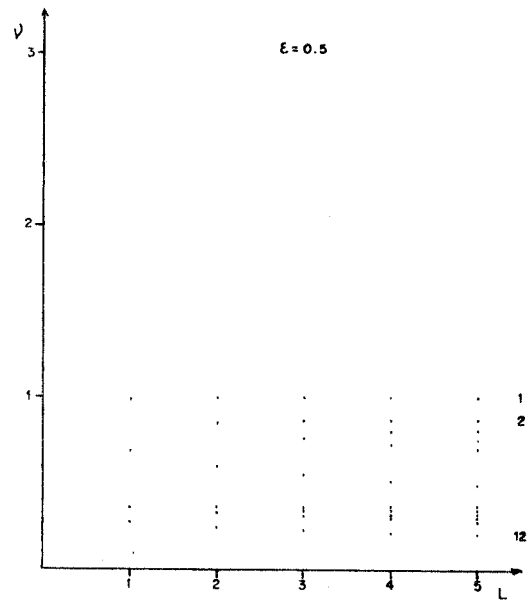
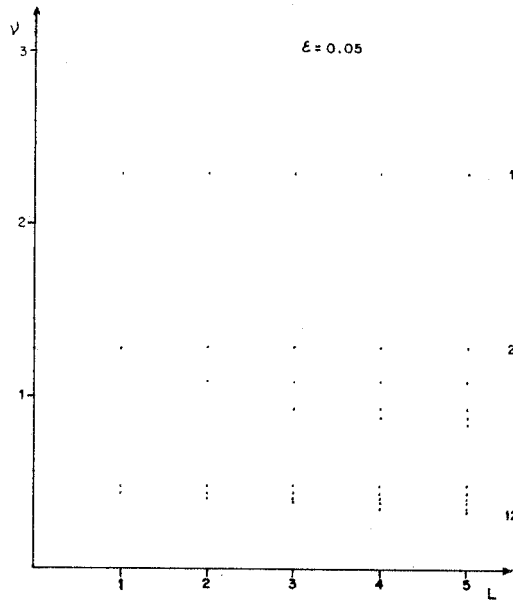
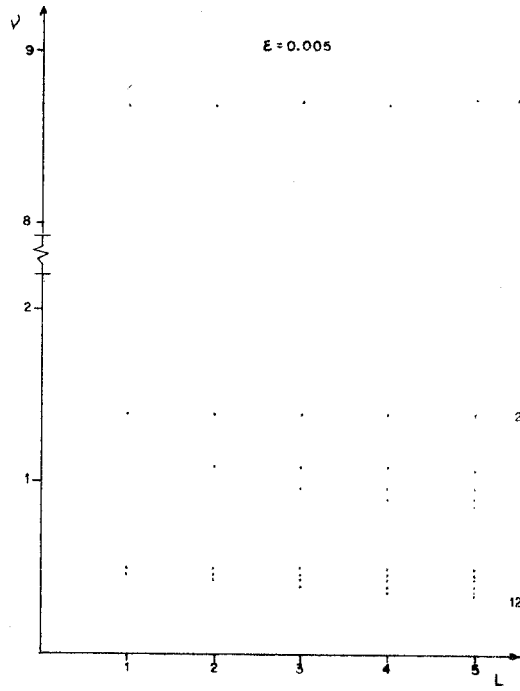


Gráfico IV.5.b - Valores de ν nas aproximações P_3L_N , $N=1, 2, 3, 4, 5$.

Nos gráficos (IV.5.a) e (IV.5.b) estão representados os auto-valores, em função do número de polinômios de Laguerre, quando se usa as aproximações P_1 e P_3 , respectivamente.

Os auto-valores obtidos quando se toma a aproximação P_1 estão nas tabelas (IV.7.a), (IV.7.b) e (IV.7.c).

Aproximação P_1

$$\epsilon = 0,005$$

$P_1 L_1$	$P_1 L_2$	$P_1 L_3$	$P_1 L_4$	$P_1 L_5$
8,67	8,66	8,69	8,67	8,70
1,28	1,28	1,28	1,28	1,28
	0,91	0,91	0,91	0,91
		0,74	0,74	0,74
			0,64	0,64
				0,57

Tabela (IV.7.a)

$\epsilon = 0,05$

P_{1L_1}	P_{1L_2}	P_{1L_3}	P_{1L_4}	P_{1L_5}
2,73	2,73	2,73	2,74	2,74
1,15	1,15	1,16	1,16	1,16
	0,86	0,86	0,86	0,86
		0,71	0,71	0,71
			0,62	0,62
				0,56

Tabela (IV.7.b)

 $\epsilon = 0,5$

P_{1L_1}	P_{1L_2}	P_{1L_3}	P_{1L_4}	P_{1L_5}
0,87	0,88	0,88	0,88	0,88
0,56 ←	0,71	0,71	0,71	0,71
	0,47 ↔	0,61	0,62	0,62
		0,41 ↔	0,54	0,55
			0,37 ↔	0,50
				0,34

Tabela (IV.7.c)

As setas indicadas na tabela (IV.7.c) servem para mais rápida visualização das descontinuidades na sequência dos auto-valores quando se aumenta a aproximação energética.

As tabelas (IV.8.a), (IV.8.b) e (IV.8.c) são análogas às anteriores, sendo que os auto-valores são os obtidos através da aproximação P_3 .

$$\epsilon = 0,005$$

P_3L_1	P_3L_2	P_3L_3	P_3L_4	P_3L_5
8,68	8,68	8,71	8,69	8,72
1,39	1,39	1,39	1,39	1,39
	1,08	1,08	1,08	1,07
		0,96	0,96	0,96
			0,90	0,90
				0,86
0,50	0,50	0,50	0,50	0,50
0,46	0,46	0,46	0,46	0,46
	0,43	0,43	0,43	0,43
		0,39	0,39	0,39
			0,36	0,36
				0,34

Tabela (IV.8.a)

$\epsilon = 0,05$

P_3L_1	P_3L_2	P_3L_3	P_3L_4	P_3L_5
2,77	2,78	2,78	2,78	2,78
1,27	1,28	1,28	1,28	1,28
	1,03	1,03	1,03	1,03
		0,93	0,93	0,93
			0,87	0,87
				0,83
0,48	0,48	0,48	0,48	0,48
0,44	0,44	0,44	0,44	0,44
	0,41	0,41	0,41	0,41
		0,38	0,38	0,38
			0,35	0,35
				0,33

Tabela (IV.8.b)

$$\epsilon = 0,5$$

P_3L_1	P_3L_2	P_3L_3	P_3L_4	P_3L_5
0,98	0,99	0,99	0,99	0,99
0,68 ↔	0,85	0,86	0,86	0,86
	0,60 ↔	0,78	0,80	0,80
		0,55 ↔	0,72	0,75
			0,51 ↔	0,69
				0,48
0,36	0,36	0,36	0,36	0,37
0,27 ↔	0,33	0,34	0,34	0,34
	0,24 ↔	0,31	0,32	0,32
		0,22 ↔	0,29	0,30
			0,21 ↔	0,27
				0,19

Tabela (IV.8.c)

As setas que aparecem na tabela (IV.8.c) servem para mais rápida visualização das discontinuidades na sequência de auto-valores, quando cresce a ordem de aproximação energética.

Como foi exposto na parte teórica, o número de pares de raízes, ou seja, o número de pares de auto-valores v , quando a aproximação P_N é ímpar, é sempre $\left\{ \frac{1}{2} (N+1)(L+1) \right\}$.

Examinando-se as tabelas dos auto-valores para a aproximação P_1 , nota-se que quando o número de polinômios é aumentado de 1, um auto-valor aparece. Mas o uso de $(L+1)$ polinômios não altera o valor dos auto-valores obtidos para L polinômios, apenas conserva os já existentes e dá mais um auto-valor que é menor que todos os outros; salvo no caso de alta absorção $\epsilon = 0,5$, como será visto adiante.

Além disso, a diferença entre dois auto-valores de ordens sucessivas decresce com o aumento da ordem.

Espera-se assim, que os auto-valores de mais altas ordens tendam a ficar tão próximos que sua distribuição possa se aproximar de um contínuo.

Este fato serve para mostrar como se comete erros usando-se a aproximação monoenergética para solução de problemas reais; e ainda mais, verifica-se que quanto maior a ordem de aproximação para a dependência energética, mais exatos serão os resultados dos cálculos efetuados utilizando este formalismo.

Isto se torna mais drástico para meios com alta absorção $\epsilon = 0,5$, onde o último auto-valor de uma aproximação de ordem L não é correto e só é corrigido numa aproximação de ordem $(L+1)$. Este fato está bem visível na tabela (IV.7.c).

Um resultado bastante curioso foi obtido quando foram analisadas as tabelas (IV.8) para a aproximação P_3 , análogas às tabelas (IV.7) para a aproximação P_1 .

Encontrou-se que, na aproximação P_3 os auto-valores podem ser separados em dois grupos. Talvez seja um agrupamento de raízes em torno:

- a) de uma raiz fundamental assintótica, que é da ordem de um comprimento de difusão médio;
- b) de uma raiz fundamental transiente, que é da ordem de um caminho livre-médio.

Tal característica, pelo que foi possível ver consultando a bibliografia recente, não era conhecida, sendo um dos resultados originais desta tese.

Também os auto-valores tendem a um contínuo como em P_1 ; e para alta absorção, ver tabela (IV.8.c), eles são mais corretos quando se usa ordens altas de aproximação para a dependência energética.

CAPÍTULO VCOMENTÁRIOS SOBRE OS RESULTADOS OBTIDOS E TRABALHO FUTURO

Embora muitos dos resultados, nesta tese, sejam originais - em especial o tratamento sistemático que apresentamos - há sempre a possibilidade de compará-los com algo já existente em trabalhos de outros autores.

Especial atenção deve ser dada aos resultados obtidos por Kiefhaber /13/ devido à semelhança entre o tratamento usado por este autor e o usado nesta tese, para a obtenção da solução do problema de Milne.

Como já foi dito anteriormente, Kiefhaber considerou o problema de Milne com as mesmas condições iniciais que as usadas nesta tese, a menos do núcleo de espalhamento; e também, como nesta tese, desenvolveu a dependência angular da solução em polinômios de Legendre e a dependência energética em polinômios de Laguerre.

Entretanto, a complexidade da solução analítica por êle obtida, fez com que só fôsse possível o tratamento da dependência angular na aproximação P_1 . Com isso, Kiefhaber determinou a distribuição do fluxo na fronteira sem levar em conta efeitos de transporte que a utilização da aproximação P_3 permite considerar.

Por outro lado, êsse autor considerou espalhamento anisotrópico linear, que é um espalhamento muito mais realístico que o isotrópico considerado nesta tese.

Apesar disso, uma comparação entre ambos os resultados pode ser feita.

Analisando os gráficos (IV.1) e/ou as tabelas (IV.2), e a figura 1 da referência 13, embora na referência 13 seja uma distribuição do fluxo dependente da velocidade, conclui-se que:

a) o efeito do deslocamento do espectro de neutrons na fronteira em direção a energias mais altas, encontrado nesta tese, também foi encontrado por Kiefhaber;

b) êste deslocamento é, na realidade, qualitativamente correto pois Kiefhaber comparou os resultados obtidos por êle, com os obtidos experimentalmente por Beckurts /18/ como se pode ver na figura 1 da referência 13.

E, êste efeito como já foi dito, é devido à fuga preferencial de neutrons de altas energias, através da fronteira.

Aliás, êste também foi um resultado, anteriormente obtido por Conkie /6/ e por Kladnik e Kušcer /8/.

Outro trabalho que merece especial consideração para efeito comparativo é o de Ferziger e Leonard /21/.

Na verdade, Ferziger e Leonard não obtiveram resultados numéricos para o problema de Milne, e isto devido à complexidade da solução analítica obtida para a equação de transporte de Boltzmann.

Entretanto, êsses autores apresentam resultados do comportamento do fluxo energético num meio infinito, quando a absorção dêste meio varia.

Isto possibilita uma comparação entre êsses resultados e os obtidos nesta tese, para $x = 20$ caminhos livre-médios, uma vez que, as condições iniciais são exatamente as mesmas e, como já foi provado, um ponto a 20 caminhos livre-médios da fronteira é considerado seguramente pertencer a um meio infinito.

Para efeito de comparação, é mais correto se tomar os resultados obtidos, nesta tese, através da aproximação P_3 ; isto se deve ao fato de Ferziger e Leonard terem obtido uma solução exata para a dependência angular e naturalmente quando maior a ordem de aproximação, mais a solução se aproxima da exata.

Então, comparando o gráfico (IV.1.b) com a figura 2 da referência 21, vê-se que:

a) há coincidência no comportamento do fluxo para as várias absorções;

b) as posições dos picos de energia (em P_3L_5 e $x = 0$) são praticamente as mesmas obtidas por Ferziger e Leonard; isto é mais facilmente

te visto pelas tabelas (IV.2.b) e (IV.3).

A não coincidência total, reside no fato de que êsses autores calcularam somente as raízes discretas, embora exatas; enquanto que nesta tese foram calculadas não só as raízes discretas como as correspondentes à zona do espectro contínuo também, embora sendo tôdas aproximadas.

Êsses dois trabalhos acima citados são os mais interessantes para uma comparação com esta tese, dada as várias semelhanças quer nas condições iniciais, quer no método de cálculo.

Entretanto, outras comparações e alguns comentários podem ainda ser feitos sobre os resultados obtidos.

Pode-se comparar, embora grosseiramente, os resultados, sobre as distâncias extrapoladas, obtidos nesta tese, (tabela IV.6), com os obtidos por Nelkin /7/ e Davison /2/.

Nelkin obteve, para o caso de secção de choque constante, $x_0 = 0,7083\lambda$ (λ = caminho livre-médio) e cita que êste valor é 0,3% menor que o valor exato; aliás, êste é um resultado também obtido por Williams /23/ em 1966; Davison, para o caso monoenergético obtem: na aproximação P_1 , $x_0 = 0,58\lambda$, e na aproximação P_3 , $x_0 = 0,69\lambda$ e comenta que êste é um bom resultado comparado com o valor exato $x_0 = 0,71\lambda$, (λ =caminho livre-médio).

A comparação foi grosseira e feita apenas para verificar ordens de grandeza, pois para o caso polienergético e com secção de choque total dependente da energia que é o caso desta tese, os resultados obtidos são originais.

Um comentário que pode ser feito é que Williams em seu livro /21/ diz que a variação de x_0 com as dimensões do meio pode ser separada em duas partes aditivas: uma devida somente a efeitos de transporte e outra devida ao desvio do espectro de neutrons em relação ao espectro maxwelliano.

Êste fato é bastante interessante, e se pretende futuramente estudá-lo com mais detalhes. Para isso, pode-se desde já dizer que, basta mudar as condições de contorno de semi-espaço infinito, para condições de contorno para meios finitos, localizando convenientemente a fonte de neutrons, por exemplo, no plano médio no caso de uma fatia (problema unidi-

mensional).

Uma outra comparação que pode ser feita é sobre os auto-valores.

Kunaish /22/ apresenta em seu trabalho, uma solução para a equação de transporte de Boltzmann, usando para a dependência angular o método das esféricas harmônicas e para a dependência energética um desenvolvimento em série de polinômios de Laguerre; como núcleo de espalhamento, considerou o do gás pesado e tomou a lei $1/v$ para a absorção.

As condições são as mesmas desta tese, mas infelizmente os únicos resultados interessantes para a comparação são os auto-valores, uma vez que Kunaish não se interessou em resolver o problema de Milne, mas somente resolveu a equação de Boltzmann.

Além disso, este autor só calculou na aproximação P_1 tomando inclusive somente o modo fundamental; usou um valor baixo para a absorção.

Para comparação entre as tabelas (IV.7) e a figura 1 da referência 22, convém dizer que $\rho_0 = \frac{1}{\lambda}$; e por isso os auto-valores crescem tendendo para um espectro contínuo, enquanto que os obtidos nesta tese de crescem, também tendendo para um espectro contínuo.

Por esta comparação, vê-se que os resultados da análise feita no capítulo anterior coincidem com o andamento dos resultados de Kunaish.

Ferziger e Leonard em seu trabalho /14/ comentam que a teoria de difusão não prediz nem comprimentos de relaxação corretos e nem um espectro assintótico correto a não ser para o primeiro modo e assim mesmo para baixas absorções, ou seja, comprimentos de relaxação para modos mais altos não são dados corretamente pela teoria de difusão.

Isto significa que cálculos sobre espectros de neutrons não devem ser feitos com teoria de difusão, quando o meio é altamente absorvedor, em que modos mais altos podem ser excitados.

Esta conclusão de Ferziger e Leonard é mostrada claramente comparando os valores da tabela (IV.7.c) com os da tabela I da referência 21.

Com a aproximação P_3 , existem dois modos "fundamentais" em vez de um só; isto não ocorre nos resultados de Ferziger e Leonard /21/ por terem considerado somente as raízes discretas exatas, enquanto que nesta tese foram consideradas tanto raízes discretas como as correspondentes à zona do espectro contínuo.

As conclusões daqueles autores, também podem ser verificadas comparando os resultados da tabela (IV.8.c) e da tabela I da referência 21.

Já na aproximação P_3 , em particular, o auto-valor fundamental discreto coincide com o exato de Ferziger e Leonard, mesmo para absorção tão alta quanto $\epsilon = 0,5$. E além disso, o segundo auto-valor discreto ainda difere de menos de 5% do valor exato desses autores.

O conjunto dos resultados sobre os auto-valores, ou seja, os resultados nas tabelas (IV.8) não podem ser comparados, pois são resultados originais.

Pelo mesmo motivo não podem ser confrontados, com resultados de outras referências, os obtidos sobre zona de influência da fronteira, comportamento espacial e energético do fluxo, influência da absorção, fronteira extrapolada, quando se toma aproximação P_3 .

Resta ainda fazer alguns comentários sobre o trabalho que se pretende realizar futuramente.

Em primeiro lugar, ainda considerando espalhamento isotrópico, se pretende refazer todos os cálculos desta tese, em aproximações maiores de P_3 .

Isto ainda não foi feito, exclusivamente por limitação de capacidade de memória e tempo do computador utilizado.

O método de cálculo é exatamente o mesmo e as equações são as mesmas, apenas acrescidas de maior número de termos, e haverá, naturalmente maior número de raízes, uma vez que o número delas é dado por $\left\{ \frac{1}{2}(N+1)(L+1) \right\}$.

Em seguida, se pretende estudar o problema de Milne considerando o espalhamento anisotrópico.

Uma das razões do interesse por um cálculo com espalhamento anisotrópico, decorreu da conclusão tirada por Kallfelz e Reichardt em seu trabalho publicado em 1967, /17/, bem como das observações feitas nesta tese e referentes à relação entre a zona de influência da fronteira e a energia dos neutrons.

Esses autores, inclusive resolveram o problema de Milne para um meio sem absorção, quando outros já haviam resolvido para meios com absorção, mas levando em conta espalhamento anisotrópico.

E, concluem que uma descrição mais precisa da forma do espectro na fronteira não é suficiente com núcleos de espalhamento isotrópico, e que espalhamento anisotrópico linear deve ser incluído, conclusão esta que, qualitativamente, também foi tirada nesta tese.

Este estudo não foi feito até agora pelos mesmos motivos acima indicados.

Entretanto, não existe dificuldade alguma, quer matemática, quer computacional; e as expressões analíticas para o espalhamento anisotrópico já foram deduzidas durante a realização desta tese, e se encontram no Apêndice 1.

Também se pretende obter resultados quando se aplica as condições de contorno de Marshak e comparar esses resultados com os obtidos nesta tese, usando as condições de Mark.

Este estudo não deve ser difícil, mas é de bastante importância, pois mesmo no caso monoenergético já é muito discutido o mérito relativo das duas condições; no caso polienergético nunca foi feito.

Pretende-se, ainda, fazer um estudo paramétrico da variação da distância extrapolada com as dimensões do meio, conforme já foi citado.

Naturalmente, toda esta pesquisa que está sendo proposta, necessita um computador mais rápido e de maior capacidade de memória; pretende-se, para isso, utilizar inicialmente um IBM-360/44, ou eventualmente computadores de maior porte, trabalhando-se em cooperação com centros computacionais estrangeiros.

APÊNDICE 1

SOLUÇÕES PARA O ESPALHAMENTO ANISOTRÓPICO LINEAR

Seja a equação (II.1.14)

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \Psi(x, E, \mu) = \\ = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{2p+1}{2} \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{ss}^p(E' \rightarrow E) P_p(\mu) \int_{-1}^1 du' P_p(\mu') \Psi(x, E', \mu') \end{aligned}$$

Esta é a equação linear de Boltzmann para meios homogêneos, isotrópicos e não multiplicadores; os núcleos de espalhamento $\Sigma_{ss}^p(E' \rightarrow E)$ são simétricos como já foi visto.

Fazendo um desenvolvimento análogo ao do Capítulo II, e também tomando análogamente a (II.1.19) e (II.1.20), as expressões

$$v_{kj} = \int_0^{\infty} dE g_k(E) \Sigma(E) g_j(E) \quad (\text{A.1.1})$$

e

$$c_{kj}^p = \int_0^{\infty} dE g_k(E) \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{ss}^p(E' \rightarrow E) g_j(E') \quad (\text{A.1.2})$$

tem-se pelas mesmas razões já expostas, que

$$v_{kj} = v_{jk}$$

$$c_{kj}^p = c_{jk}^p$$

Chega-se, assim, a uma expressão equivalente à (II.1.25)

$$\begin{aligned} & \nu \frac{\partial}{\partial x} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{2} P_m(\mu) |A^m(x)\rangle + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{2} [V] P_m(\mu) |A^m(x)\rangle = \\ & = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{2p+1}{2} P_p(\mu) \int_{-1}^1 P_p(\mu') [Q^p] \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{2} P_m(\mu) |A^m(x)\rangle \quad (A.1.3) \end{aligned}$$

Também, como no Capítulo II, multiplicando por $P_n(\mu)$ e integrando entre -1 e $+1$, e usando a fórmula de recorrência dos polinômios de Legendre, obtém-se

$$\begin{aligned} & \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} |A^m(x)\rangle \cdot \frac{1}{2m+1} \left[(m+1) \delta_{m+1,n} + m \delta_{m-1,n} \right] + \sum_{m=0}^{\infty} [V] |A^m(x)\rangle \delta_{m,n} = \\ & = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} [Q^p] |A^m(x)\rangle \delta_{p,n} \delta_{p,m} \quad n = 0, 1, \dots, \infty \quad (A.1.4) \end{aligned}$$

ou ainda

$$\begin{aligned} & (n+1) \frac{\partial}{\partial x} |A^{n+1}(x)\rangle + n |A^{n-1}(x)\rangle + \\ & + (2n+1) \left\{ [V] - [Q^n] \right\} |A^n(x)\rangle = 0 \quad n = 0, 1, \dots, \infty \quad (A.1.5) \end{aligned}$$

que é um sistema correspondente ao de (II.1.26)

Uma conclusão importante, que pode ser tirada, é que, truncando as somatórias o grau de anisotropia está limitado à ordem de aproximação que se deseja para a dependência angular.

Assim por exemplo, para uma aproximação P_1 (aproximação de difusão) só se pode considerar no máximo uma anisotropia linear.

No caso do grau p de anisotropia ser menor que a ordem N de aproximação para a dependência angular considerada, o sistema (A.1.5) truncado em $n = N$ terá $(N+1)$ equações, das quais $(N-p)$ serão homogêneas.

Continuando com o raciocínio análogo ao do Capítulo II, obtém-se um sistema de equações equivalente a (II.1.33), e que é escrito

Trata-se, agora, de encontrar uma solução para este sistema, assim como foi encontrada /1/ a solução (II.1.34) para o sistema (II.1.33) onde foi considerado espalhamento isotrópico.

Sabe-se que os polinômios de Legendre $P_n(x)$ e as funções de Legendre da segunda espécie $Q_n(x)$ satisfazem a relação de recorrência

$$(n+1) K_{n+1}(x) + nK_{n-1}(x) - (2n+1) xK_n(x) = 0 \quad (\text{A.1.8})$$

Então, $P_n(\sqrt{VU})$ e $Q_n(\sqrt{VU})$ são soluções do sistema (A.1.7), com exceção de três equações: as duas primeiras e a última. Uma combinação linear dessas soluções também será solução do sistema com exceção das três referidas equações.

Se existir uma combinação linear dessas soluções que satisfaça todo o sistema, esta será a solução geral de (A.1.7).

Sejam $|R^n(v)\rangle$, $|S^n(v)\rangle$ e $|T^n(v)\rangle$ três vetores que satisfaçam as seguintes relações:

$$(n+1) |R^{n+1}(v)\rangle + n|R^{n-1}(v)\rangle - (2n+1)v|R^n(v)\rangle = 0$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, \infty \quad (\text{A.1.9})$$

$$|R^n(v)\rangle = |R^0(v)\rangle \quad n = 0 \quad (\text{A.1.10})$$

$$(n+1) |S^{n+1}(v)\rangle + n|S^{n-1}(v)\rangle - (2n+1)v|S^n(v)\rangle = 0$$

$$n = 2, 3, 4, \dots, \infty \quad (\text{A.1.11})$$

$$|S^n(v)\rangle = |0\rangle \quad n = 0 \quad (\text{A.1.12})$$

$$|S^n(v)\rangle = |S^1(v)\rangle \quad n = 1 \quad (\text{A.1.13})$$

$$(n+1)|T^{n+1}(v)\rangle + n|T^{n-1}(v)\rangle - (2n+1)v|T^n(v)\rangle = 0$$

$$n = 3, 4, 5, \dots, \infty$$

(A.1.14)

$$|T^n(v)\rangle = |0\rangle \quad n = 0 \quad \text{(A.1.15)}$$

$$|T^n(v)\rangle = |0\rangle \quad n = 1 \quad \text{(A.1.16)}$$

$$|T^n(v)\rangle = |T^2(v)\rangle \quad n = 2 \quad \text{(A.1.17)}$$

Então, dados $|R^0(v)\rangle$, $|S^1(v)\rangle$ e $|T^2(v)\rangle$, todos os outros vetores $|R^n(v)\rangle$, $|S^n(v)\rangle$ e $|T^n(v)\rangle$ ficam bem determinados pela relação de recorrência (A.1.8).

Pode-se encontrar expressões analíticas para essas soluções, válidas para qualquer n . E são /30/

$$|R^n(v)\rangle = P_n(\overline{vU}) |R^0(v)\rangle \quad \text{(A.1.18)}$$

$$|S^n(v)\rangle = \left\{ P_n(\overline{vU}) Q_0(\overline{vU}) - Q_n(\overline{vU}) \right\} |S^1(v)\rangle \quad \text{(A.1.19)}$$

$$|T^n(v)\rangle = 2 \left\{ P_n(\overline{vU}) (Q_0(\overline{vU}) \overline{vU} - \overline{I}) - Q_n(\overline{vU}) \overline{vU} + \delta_{n,0} \right\} |T^2(v)\rangle, \quad \text{(A.1.20)}$$

que serão obtidas a seguir.

De fato, como $P_n(\overline{vU})$ e $Q_n(\overline{vU})$ satisfazem a relação de recorrência (A.1.8), as expressões para $|R^n(v)\rangle$, $|S^n(v)\rangle$ e $|T^n(v)\rangle$ podem ser obtidas combinando linearmente os polinômios e as funções de Legendre.

Assim escolhe-se

$$\begin{aligned}
|R^n(v)\rangle, |S^n(v)\rangle, |T^n(v)\rangle = P_n(\overline{vU})|A\rangle + Q_n(\overline{vU})|B\rangle + \\
+ \sum_1 |C_1\rangle \delta_{n,1}
\end{aligned}
\tag{A.1.21}$$

onde a somatória é estendida para os valores de n , tais que, para n e $n + 1$ a combinação linear deve ser igual a zero.

Os vetores $|A\rangle$, $|B\rangle$ e $|C_1\rangle$ são vetores arbitrários, independentes de n , mas que podem ser escolhidos de tal maneira que satisfaçam (A.1.9), (A.1.10), . . . , (A.1.17).

Substituindo (A.1.21) em (A.1.10), tem-se

$$|R^0(v)\rangle = P_0(\overline{vU})|A\rangle + Q_0(\overline{vU})|B\rangle$$

Então

$$|R^0(v)\rangle = |A\rangle + Q_0(\overline{vU})|B\rangle$$

e portanto, pode-se tomar

$$|B\rangle = 0 \quad \text{e} \quad |A\rangle = |R^0(v)\rangle$$

Tem-se, então

$$|R^n(v)\rangle = P_n(\overline{vU})|R^0(v)\rangle$$

que é a expressão (A.1.18).

Para obter a expressão para $|S^n(v)\rangle$, note-se que, de (A.1.21)

$$|0\rangle = |A\rangle + Q_0(\sqrt{U})|B\rangle$$

$$|S^1(\nu)\rangle = P_1(\sqrt{U})|A\rangle + Q_1(\sqrt{U})|B\rangle$$

Portanto

$$|S^1(\nu)\rangle = -P_1(\sqrt{U})Q_0(\sqrt{U})|B\rangle + Q_1(\sqrt{U})|B\rangle$$

ou

$$|S^1(\nu)\rangle = -\left\{P_1(\sqrt{U})Q_0(\sqrt{U}) - P_0(\sqrt{U})Q_1(\sqrt{U})\right\}|B\rangle$$

Sabe-se /26/ que

$$P_n(x)Q_{n-1}(x) - P_{n-1}(x)Q_n(x) = \frac{1}{n}$$

É fácil mostrar que essa relação também é verificada quando o argumento dos P_n e dos Q_n são matrizes diagonais. Então

$$P_n(\sqrt{U})Q_{n-1}(\sqrt{U}) - P_{n-1}(\sqrt{U})Q_n(\sqrt{U}) = \frac{1}{n} [I]$$

Logo

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

e

$$|A\rangle = Q_0(\sqrt{U})|S^1(\nu)\rangle$$

Substituindo os valores de $|A\rangle$ e $|B\rangle$ em (A.1.21), tem-se

$$|S^n(v)\rangle = \left\{ P_n(\overline{vU}) Q_0(\overline{vU}) - Q_n(\overline{vU}) \right\} |S^1(v)\rangle$$

que é a expressão (A.1.19).

Resta apenas mostrar que (A.1.20) é a expressão para $|T^n(v)\rangle$.

Como

$$|0\rangle = |A\rangle + Q_0(|vU\rangle) |B\rangle + \sum_{i=0}^1 |C_i\rangle \delta_{0,0}$$

então

$$|0\rangle = |A\rangle + Q_0(\overline{vU}) |B\rangle + |C_0\rangle$$

e também por (A.1.16)

$$|0\rangle = P_1(\overline{vU}) |A\rangle + Q_1(\overline{vU}) |B\rangle$$

e por (A.1.17)

$$|T^2(v)\rangle = P_2(\overline{vU}) |A\rangle + Q_2(\overline{vU}) |B\rangle$$

$P_1(\overline{vU}) = \overline{vU}$ e sendo \overline{vU} uma matriz não singular, existe $P_1^{-1}(\overline{vU})$.

Logo

$$P_1^{-1}(\overline{vU}) P_1(\overline{vU}) |A\rangle = - P_1^{-1}(\overline{vU}) Q_1(\overline{vU}) |B\rangle$$

e portanto

$$|A\rangle = - P_1^{-1}(\overline{vU}) Q_1(\overline{vU}) |B\rangle$$

Substituindo

$$|T^2(v)\rangle = - P_2(\underline{vU}) P_1^{-1}(\underline{vU}) Q_1(\underline{vU}) |B\rangle + Q_2(\underline{vU}) |B\rangle$$

$$P_1(\underline{vU}) |T^2(v)\rangle = - \left\{ P_1(\underline{vU}) P_2(\underline{vU}) P_1^{-1}(\underline{vU}) Q_1(\underline{vU}) - \right. \\ \left. - P_1(\underline{vU}) Q_2(\underline{vU}) \right\} |B\rangle$$

Como as matrizes $P_n(\underline{vU})$ comutam entre si

$$P_1(\underline{vU}) |T^2(v)\rangle = - \frac{1}{2} [I] |B\rangle$$

ou

$$|B\rangle = - 2P_1(\underline{vU}) |T^2(v)\rangle$$

e

$$|A\rangle = 2P_1^{-1}(\underline{vU}) Q_1(\underline{vU}) P_1(\underline{vU}) |T^2(v)\rangle$$

Então,

$$|C_0\rangle = - 2 \left\{ P_1^{-1}(\underline{vU}) Q_1(\underline{vU}) P_1(\underline{vU}) - Q_0(\underline{vU}) P_1(\underline{vU}) \right\} |T^2(v)\rangle$$

Mas

$$Q_1(\underline{vU}) = P_1(\underline{vU}) Q_0(\underline{vU}) - [I]$$

e então,

$$|C_0\rangle = - 2 \left\{ P_1^{-1}(\underline{vU}) (P_1(\underline{vU}) Q_0(\underline{vU}) - [I]) P_1(\underline{vU}) - \right. \\ \left. - Q_0(\underline{vU}) P_1(\underline{vU}) \right\} |T^2(v)\rangle$$

$$|C_0\rangle = - 2 \left\{ Q_0(\underline{vU}) P_1(\underline{vU}) - [I] - Q_0(\underline{vU}) P_1(\underline{vU}) \right\} |T^2(v)\rangle$$

$$|C_0\rangle = 2 |T^2(v)\rangle$$

Substituindo $|A\rangle$, $|B\rangle$ e $|C_0\rangle$ em (A.1.21) tem-se

$$|T^n(v)\rangle = 2 \left\{ P_n(\overline{vU}) (Q_0(\overline{vU}) \overline{vU} - \overline{I}) - \right. \\ \left. - Q_n(\overline{vU}) \overline{vU} + \delta_{n,0} \right\} |T^2(v)\rangle$$

que é a expressão (A.1.20).

Foi provado, então, que $|R^n(v)\rangle$, $|S^n(v)\rangle$ e $|T^n(v)\rangle$ têm, respectivamente, como expressões analíticas, (A.1.18), (A.1.19) e (A.1.20), as quais são combinações lineares de polinômios e funções de Legendre.

Supõe-se, agora que

$$|B^n(v)\rangle = |R^n(v)\rangle + |S^n(v)\rangle + |T^n(v)\rangle \quad (\text{A.1.22})$$

seja a solução do sistema (A.1.7).

Para satisfazer a primeira das equações, é preciso que

$$|R^1(v)\rangle + |S^1(v)\rangle - \overline{vU} |R^0(v)\rangle = - \overline{v\gamma^0} |R^0(v)\rangle$$

Mas por (A.1.9)

$$|R^1(v)\rangle = \overline{vU} |R^0(v)\rangle \quad (\text{A.1.23})$$

e, então

$$|S^1(v)\rangle = - \overline{v\gamma^0} |R^0(v)\rangle \quad (\text{A.1.24})$$

Da segunda equação de (A.1.7), tem-se

$$2|R^2(v)\rangle + 2|S^2(v)\rangle + 2|T^2(v)\rangle + |R^0(v)\rangle - \\ - 3 \left\{ \overline{vU} - \overline{v\gamma^1} \right\} |R^1(v)\rangle - 3 \left\{ \overline{vU} - \overline{v\gamma^1} \right\} |S^1(v)\rangle = 0 \quad (\text{A.1.25})$$

Mas por (A.1.9) e (A.1.23)

$$2|R^2(v)\rangle = -|R^0(v)\rangle + 3[\bar{v}\bar{U}]^2|R^0(v)\rangle$$

e por (A.1.11) e (A.1.24)

$$2|S^2(v)\rangle = -3[\bar{v}\bar{U}][\bar{v}\bar{Y}^0]|R^0(v)\rangle$$

Substituindo em (A.1.25), obtem-se

$$|T^2(v)\rangle = \frac{3}{2}[\bar{v}\bar{Y}^1] \left\{ [\bar{v}\bar{Y}^0] - [\bar{v}\bar{U}] \right\} |R^0(v)\rangle \quad (\text{A.1.26})$$

Tendo os valores de $S^1(v)$ e $T^2(v)$, já que $R^0(v)$ é arbitrário, e substituindo na primeira e na segunda equações do sistema (A.1.7), vê-se, imediatamente, que ambas são satisfeitas.

Então $B^n(v) = R^n(v) + S^n(v) + T^n(v)$ com as condições impostas é solução das duas primeiras equações de (A.1.7). As restantes equações desse sistema, com exceção da última, também têm $B^n(v)$ dado acima como solução; isto é imediato se verificar pela própria lei de recorrência dos $R^n(v)$, dos $S^n(v)$ e dos $T^n(v)$.

Resta, então, mostrar que $B^n(v) = R^n(v) + S^n(v) + T^n(v)$ também satisfaz a última das equações.

Para que $B^n(v)$, dado por (A.1.22), satisfaça também a última equação de (A.1.7), é preciso que $R^0(v)$, até aqui arbitrário, seja escolhido de tal maneira que

$$|B^{N+1}(v)\rangle = |R^{N+1}(v)\rangle + |S^{N+1}(v)\rangle + |T^{N+1}(v)\rangle = 0 \quad (\text{A.1.27})$$

Usando (A.1.18), (A.1.19), (A.1.20), e mais (A.1.24) e (A.1.26), tem-se

$$|B^n(v)\rangle = P_n(\overline{vU}) |R^n(v)\rangle - W_{n-1}(\overline{vU}) \cdot \overline{v\gamma^0} |R^0(v)\rangle +$$

$$+ 2 \left\{ W_{n-1}(\overline{vU}) \overline{vU} - P_n(\overline{vU}) \right\} \frac{3}{2} \overline{v\gamma^1} \left\{ \overline{v\gamma^0} - \overline{vU} \right\} |R^0(v)\rangle$$

onde foi usada a relação

$$P_n(\overline{vU}) Q_0(\overline{vU}) - Q_n(\overline{vU}) = W_{n-1}(\overline{vU})$$

$$|B^n(v)\rangle = P_n(\overline{vU}) |R^0(v)\rangle - W_{n-1}(\overline{vU}) \overline{v\gamma^0} |R^0(v)\rangle +$$

$$+ 3W_{n-1}(\overline{vU}) \cdot \overline{vU} \left\{ \overline{v\gamma^1} \overline{v\gamma^0} - \overline{v\gamma^1} \overline{vU} \right\} |R^0(v)\rangle -$$

$$- 3P_n(\overline{vU}) \left\{ \overline{v\gamma^1} \overline{v\gamma^0} - \overline{v\gamma^1} \overline{vU} \right\} |R^0(v)\rangle$$

ou

$$|B^n(v)\rangle = P_n(\overline{vU}) \left\{ \overline{I} + 3 \overline{v\gamma^1} (\overline{vU} - \overline{v\gamma^0}) \right\} |R^0(v)\rangle -$$

$$- W_{n-1}(\overline{vU}) \overline{vU} \overline{vU}^{-1} \overline{v\gamma^0} |R^0(v)\rangle +$$

$$+ 3W_{n-1}(\overline{vU}) \cdot \overline{vU} \left\{ \overline{vU} (\overline{v\gamma^0} - \overline{vU}) \right\} |R^0(v)\rangle$$

ou ainda

$$|B^n(v)\rangle = P_n(\overline{vU}) \left\{ \overline{I} + 3 \overline{v\gamma^1} (\overline{vU} - \overline{v\gamma^0}) \right\} |R^0(v)\rangle -$$

$$- W_{n-1}(\overline{vU}) \overline{vU} \left\{ \overline{vU}^{-1} \overline{v\gamma^0} + 3 \overline{v\gamma^1} (\overline{vU} - \overline{v\gamma^0}) \right\} |R^0(v)\rangle$$

Somando e subtraindo $W_{n-1}(\overline{vU}) \overline{vU} |R^0(v)\rangle$ e rearranjando os termos, tem-se

$$|B^n(v)\rangle = \left\{ \left\{ P_n(\overline{vU}) - W_{n-1}(\overline{vU}) \overline{vU} \right\} \left\{ \overline{I} + 3 \overline{vY}^1 (\overline{vU} - \overline{vY}^0) \right\} + \right. \\ \left. + W_{n-1}(\overline{vU}) (\overline{vU} - \overline{vY}^0) \right\} |R^0(v)\rangle$$

Mas como

$$|B^n(v)\rangle = |R^n(v)\rangle + |S^n(v)\rangle + |T^n(v)\rangle$$

e

$$|R^n(v)\rangle = |R^0(v)\rangle \quad \text{para } n = 0$$

$$|S^n(v)\rangle = |0\rangle \quad \text{para } n = 0$$

$$|S^n(v)\rangle = |S^1(v)\rangle \quad \text{para } n = 1$$

$$|T^n(v)\rangle = |0\rangle \quad \text{para } n = 0$$

$$|T^n(v)\rangle = |0\rangle \quad \text{para } n = 1$$

$$|T^n(v)\rangle = |T^2(v)\rangle \quad \text{para } n = 2$$

Conclue-se que

$$|R^0(v)\rangle = |B^0(v)\rangle \quad (\text{A.1.28})$$

e então

$$|B^n(v)\rangle = \left\{ \left\{ P_n(\overline{vU}) - W_{n-1}(\overline{vU}) \overline{vU} \right\} \left\{ \overline{I} + 3 \overline{v\gamma^I} (\overline{vU} - \overline{v\gamma^O}) \right\} + \right. \\ \left. + W_{n-1}(\overline{vU}) (\overline{vU} - \overline{v\gamma^O}) \right\} |B^0(v)\rangle \quad (\text{A.1.29})$$

Mas pela condição (A.1.27), os $|B^n(v)\rangle$ dados por (A.1.29) são soluções não triviais do sistema (A.1.7) para os v que satisfazem

$$\left| \left\{ P_{N+1}(\overline{vU}) - W_N(\overline{vU}) \overline{vU} \right\} \left\{ \overline{I} + 3 \overline{v\gamma^I} (\overline{vU} - \overline{v\gamma^O}) \right\} + \right. \\ \left. + W_N(\overline{vU}) (\overline{vU} - \overline{v\gamma^O}) \right\} \Big| = 0 \quad (\text{A.1.30})$$

Nota: Se o espalhamento for isotrópico, $\overline{v\gamma^I} = 0$ e (A.1.30) se reduz a

$$\left| P_{N+1}(\overline{vU}) - W_N(\overline{vU}) \overline{v\gamma^O} \right| = 0$$

que é a equação (II.1.35) obtida no desenvolvimento do problema no caso isotrópico.

Concluindo:

a) caso de espalhamento isotrópico

$$|B^n(v)\rangle = \left\{ P_n(\overline{vU}) - W_{n-1}(\overline{vU}) \overline{v\gamma^O} \right\} |B^0(v)\rangle \quad (\text{II.1.34})$$

é solução do sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} (n+1) |B^{n+1}(v)\rangle + n |B^{n-1}(v)\rangle - (2n+1) \left\{ \overline{vU} - \overline{v\gamma^O} \delta_{n,0} \right\} |B^n(v)\rangle = 0 \\ \hspace{15em} n = 0, 1, \dots, N-1 \\ N |B^{N-1}(v)\rangle - (2N+1) \overline{vU} |B^N(v)\rangle = 0 \quad n = N \end{array} \right. \quad (\text{II.1.33})$$

APÊNDICE 2

EFEITO DE FRONTEIRA TORNANDO O ESPECTRO MAIS "QUENTE"

Na obtenção da equação de transporte de Boltzmann, demonstra-se que

$$\left[\vec{v} \times \text{grad } n(\vec{v}) \right] dV = \text{perda líquida, por segundo, de neutrons com velocidade } \vec{v}, \text{ do elemento de volume } dV$$

Seja $n(\vec{v}_1)$ a distribuição espacial dos neutrons que se dirigem para a fronteira, e $n(\vec{v}_2)$ a distribuição dos neutrons que caminham em sentido contrário.

Lembrando que não há neutrons vindos do vácuo em direção ao meio, se

$$|\vec{v}_2| = |\vec{v}_1|$$

então, para A ponto perto da fronteira e B ponto da região assintótica

$$|\text{grad } n_A(\vec{v}_2)| > |\text{grad } n_A(\vec{v}_1)| \quad \text{no ponto (A)} \quad (\text{A.2.1})$$

$$|\text{grad } n_B(\vec{v}_2)| = |\text{grad } n_B(\vec{v}_2)| \quad \text{no ponto (B)} \quad (\text{A.2.2})$$

De fato: a própria condição de contorno do problema de Milne implica que, na fronteira

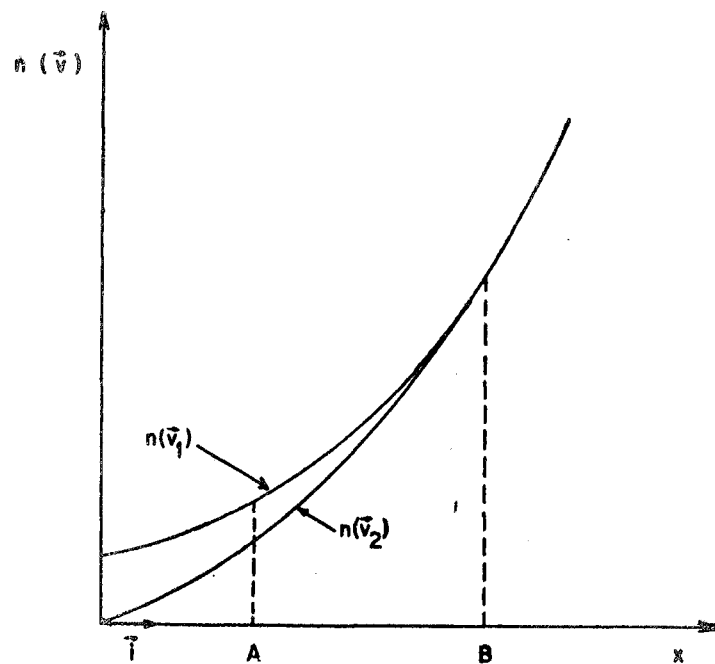
$$n(\vec{v}_1) \neq 0$$

$$n(\vec{v}_2) = 0$$

Na região assintótica, longe da fronteira, o efeito desta não se faz sentir, e portanto

$$n(\vec{v}_1) = n(\vec{v}_2)$$

O andamento das curvas de variação de $n(\vec{v}_2)$ e $n(\vec{v}_1)$ com a distância da fronteira \vec{e} , portanto, o indicado na figura abaixo



Como a geometria é plana

$$\text{grad } n(\vec{v}_1) = |\text{grad } n(\vec{v}_1)| \vec{i} \quad (\text{A.2.3})$$

$$\text{grad } n(\vec{v}_2) = |\text{grad } n(\vec{v}_2)| \vec{i} \quad (\text{A.2.4})$$

e, então, tem-se:

a) no ponto (A)

$$\left. \begin{array}{l} \text{t\^e}rmo de perda \\ \text{para os neutrons} \\ \text{do tipo } (\vec{v}_2) \end{array} \right\} = \vec{v}_2 \times \text{grad } n(\vec{v}_2) > 0$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{t\^e}rmo de perda \\ \text{para os neutrons} \\ \text{do tipo } (\vec{v}_1) \end{array} \right\} = \vec{v}_1 \times \text{grad } n(\vec{v}_1) < 0$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{perda global de} \\ \text{neutrons dos tipos} \\ (\vec{v}_2) \text{ e } (\vec{v}_1) \end{array} \right\} = \vec{v}_2 \times \text{grad } n(\vec{v}_2) + \vec{v}_1 \times \text{grad } n(\vec{v}_1)$$

Mas por (A.2.1), esta perda no ponto (A) \u00e9 positiva, crescendo com o m\u00f3dulo de \vec{v}_1 .

b) no ponto (B)

$$\left. \begin{array}{l} \text{perda global de} \\ \text{neutrons dos ti-} \\ \text{pos } (\vec{v}_2) \text{ e } (\vec{v}_1) \end{array} \right\} = 0$$

pr\u00e1ticamente independente do m\u00f3dulo de \vec{v}_1

Ent\u00e3o, nos elementos de volume em (A) e (B) tem-se, respectivamente, perda positiva e perda quase nula. Como os neutrons de energias mais altas t\u00eam dire\u00e7\u00e3o privilegiada para a frente (e, no caso, sentido oposto ao do versor \vec{i}), o espectro energ\u00e9tico se torna cada vez mais "quente", \u00e0 medida que se aproxima da fronteira.

Realmente, considerando, por exemplo, duas energias $E = 1$ kT e $E = 10$ kT, e um elemento de volume do meio localizado adjacente \u00e0 fronteira, tal elemento recebe, de seus vizinhos \u00e0 direita, mais neutrons de $E = 10$ kT que neutrons de $E = 1$ kT. Como o regime \u00e9 estacion\u00e1rio, no ele-

mento de volume adjacente à fronteira haverá uma maior densidade de neutrons de $E = 10 \text{ kT}$ do que de neutrons de $E = 1 \text{ kT}$, "aquecendo", aí, o espectro.

APÊNDICE 3

LISTAGENS DE PROGRAMAS FORTRAN-II-D

Programa Milne P1

Programa Milne P3

Sub-rotina SLH1

Sub-rotina DTCL

Sub-rotina DTML

Programa VCPEA

Função PLWPSI

Sub-rotina MM

Função F

Sub-rotina RAINI

```

*FANDK1204
C   *PROGRAMA MILNE P1*
C   MP1
C   METODO PEA
C   ESPALHAMENTO ISOTROPICO
C   APROXIMACAO P1
C   A RAIZ DE INDICE (N+1) CORRESPONDE A RAIZ -NU(1)
C   N=ORDEM DE APROXIMACAO USADA MAIS 1 PARA OS
C   POLINOMIOS DE PRIMEIRA ESPECIE DE LAGUERRE (NORMA
      LIZADOS)
C   CHAVE 2 LIGADA, SAO IMPRIMIDOS OS COEFICIENTES
C   E AS SOLUCOES DOS SISTEMAS HOMOGENEO E NAO HOMOGE
      NEO
      DIMENSION S(8,8), BENI(8), GANI(8,8), P2BENI(8), W1BENI(8
        ), P1BENI(8), W
      IOBENI(8), COEFBO(6,6), BO(6), B1(6), AO(6), A1(6), ENU(9)
      DIMENSION ALFA(8,8), TIND(8), X(9), AOAUX(9,8)
1   L=1
      READ 10, N, ABSOR
10  FORMAT(I2, 5F7.3)
      DO 100 I=1, N
100 READ 11, (S(I, J), J=1, N)
      NN=N-1
      IF(SENSE SWITCH 2) 181, 55
181 PRINT 203, NN
203 FORMAT(1H, 55X, 18H*APROXIMACAO P1, L(, I2, 2H)*////////)
55 READ 11, ENI
11  FORMAT(5E14.8)
      DO 180 I=1, N
180 READ 11, (GANI(I, J), J=1, N)
      READ 11, (BENI(I), I=1, N)
      DO 150 I=1, N
      P2BENI(I)=(3.*BENI(I)**2-1.)/2.
      W1BENI(I)=1.5*BENI(I)
      P1BENI(I)=BENI(I)
150 WOBENI(I)=1.
      DO 102 J=1, N
      DO 102 K=1, N
      DELTA=J-K
      IF(DELTA) 50, 51, 50
51  DELTA=1.
      GO TO 102
50  DELTA =0.
102 COEFBO(J, K)=P2BENI(J)/W1BENI(J)*DELTA-GANI(J, K)
      IF(N-2) 194, 194, 195
194 BO(1)=COEFBO(1, 2)
      BO(2)=-COEFBO(1, 1)
      GO TO 196
195 CALL SLH1(COEFBO, N, BO)
196 IF(BO(1)) 348, 349, 349
348 DO 213 K=1, N
213 BO(K)=-BO(K)
349 DO 103 J=1, N

```

```

SOMA=0.
DO 107 K=1,N
DELTA=J-K
IF(DELTA)52,53,52
53 DELTA=1.
GO TO 104
52 DELTA=0.
104 P=(PIBENI(J)*DELTA-WOBENI(J)*GANI(J,K))*BO(K)
107 SOMA=SOMA+P
103 B1(J)=SOMA
DO 105 I=1,N
SOMA1=0.
SOMA=0.
DO 106 J=1,N
P=S(I,J)*BO(J)
Q=S(I,J)*B1(J)
SOMA=SOMA+P
106 SOMA1=SOMA1+Q
AO(I)=SOMA
AOAUX(L,I)=AO(I)
105 A1(I)=SOMA1
ENU(L)=ENI
IF(L-N)114,114,115
114 DO 700 J=1,N
700 ALFA(J,L)=AO(J)+1.73205081*A1(J)
GO TO 8000
115 DO 900 J=1,N
900 TIND(J)=- (AO(J)+1.73205081*A1(J))
8000 IF(SENSE SWITCH 2)800,184
800 PRINT 19,ABSOR,L,ENU(L)
19 FORMAT(1H,25X,6HABSOR=,F6.3,5X,3HNU(,I2,2H)=,E14.8//)
DO 192 J=1,N
192 PRINT 193,(J,K,COEFBO(J,K),K=1,N)
193 FORMAT(3(1H,5X,7HCOEFBO(,I2,I2,2H)=,E14.8))
PRINT 2000
2000 FORMAT(//)
DO 191 J=1,N
191 PRINT 20,J,BO(J),J,B1(J),J,AO(J),J,A1(J)
20 FORMAT(1H,5X,3HBO(,I2,2H)=,E14.8,5X,3HB1(,I2,2H)=,E14.8,5X,3HAO(,I2,2H)=,E14.8,5X,3HA1(,I2,2H)=,E14.8)
TESTE=0.
DO 197 J=1,N
197 TESTE=TESTE+COEFBO(1,J)*BO(J)
PRINT 2000
PRINT 207,TESTE
207 FORMAT(1H,5X,6HTESTE=,E14.8)
PRINT 5000
5000 FORMAT(////)
184 L=L+1
IF(L-N-1)55,55,56
56 IF(SENSE SWITCH 2)185,186
185 DO 411 I=1,N

```

```

411 PRINT 204, (I, J, ALFA(I, J), J=1, N)
204 FORMAT(3(1H ,5X,5HALFA(,I2,I2,2H)=,E14.8))
PRINT 2000
DO 412 J=1, N
412 PRINT 205, J, TIND(J)
205 FORMAT(1H ,5X,12HTERMO INDEP(,I2,2H)=,E14.8)
186 NMI=N-1
705 DO 770 K=1, NMI
    KPI=K+1
    L=K
710 DO 730 I=KPI, N
    IF(ABSF(ALFA(L, K))-ABSF(ALFA(I, K))) 720, 730, 730
720 L=I
730 CONTINUE
    IF(L-K) 740, 740, 750
750 DO 760 J=K, N
    AA1=ALFA(K, J)
    ALFA(K, J)=ALFA(L, J)
760 ALFA(L, J)=AA1
    AA2=TIND(K)
    TIND(K)=TIND(L)
    TIND(L)=AA2
740 DO 770 I=KPI, N
    R=ALFA(I, K)/ALFA(K, K)
    TIND(I)=TIND(I)-R*TIND(K)
745 DO 770 J=K, N
770 ALFA(I, J)=ALFA(I, J)-R*ALFA(K, J)
775 X(N)=TIND(N)/ALFA(N, N)
    DO 790 K=1, NMI
    I=N-K
    IP1=I+1
    SOMA=0.
    DO 780 J=IP1, N
780 SOMA=SOMA+ALFA(I, J)*X(J)
790 X(I)=(TIND(I)-SOMA)/ALFA(I, I)
    IF(SENSE SWITCH 2) 187, 188
187 PRINT 2000
    PRINT 206, (I, X(I), I=1, N)
206 FORMAT(1H ,5X,2HX(,I2,2H)=,E14.8)
    TESTE=0.
    DO 160 J=1, N
160 TESTE=TESTE+ALFA(1, J)*X(J)
    TESTE=TESTE-TIND(1)
    PRINT 2000
    PRINT 207, TESTE
    PAUSE
188 ZO=-ENU(1)/2.*LOG(-X(1))
    PUNCH 300, N, NN, ABSOR, ZO
300 FORMAT(2I2, 2E14.8)
    JN=N+1
    PUNCH 11, (ENU(L), L=1, JN)
    DO 302 L=1, JN
302 PUNCH 11, (ACAUX(L, J), J=1, N)
    PUNCH 11, (X(I), I=1, N)
    PAUSE
    GO TO 1
END

```

```

*FANDK1204
C   PROGRAMA MILNE P1
C   FEEMP1
C   -DISTRIBUICAO ENERGETICA DO FLUXO E DISTANCIA EXTRAPO
      LADA-
C   AREA TOTAL = AREA DEBAIXO DA CURVA DE
C   DISTRIBUICAO DO FLUXO NO INTERVALO 0-10 KT
C   NP=NUMERO DE PONTOS PARA A CURVA DA DISTRIBUICAO
C   ENERGETICA DO FLUXO
C   SWITCH 2 CALCULA OS FLUXOS EM INTERVALOS
C   DE EXTREMOS DIFERENTES DE 0-10KT
C   SWITCH 3 CALCULA O FLUXO ASSINTOTICO
C   ABINT=ABCISSA INTERMEDIARIA PARA INTERVALOS MENORES
C   DELINT=INTERVALO MENOR
C   ABMAX=ABCISSA MAXIMA
C   DELMAX=INTERVALO MAIOR
C   DIMENSION AOAUX(13,6),X(13),ENU(13),YFLUXO(100),FLUXO
      M(100),FL(15)
1   READ 280, NP, Z, EMIN, EMAX, ENTERV, ABINT, ABMAX, DELINT, DEL
      MAX
280  FORMAT(I4, 8F7.3, I12)
      READ 300, N, NN, ABSOR, Z0
300  FORMAT(2I2, 2E14.8)
      JJ=N+1
      READ 220, (ENU(I), I=1, JJ)
      DO 302 L=1, JJ
302  READ 220, (AOAUX(L, J), J=1, N)
220  FORMAT(5E14.8)
      READ 220, (X(I), I=1, N)
2   IF(SENSE SWITCH 3) 902, 903
902  PRINT 904, NN
904  FORMAT(1H ,55X, 18H*APROXIMACAO P1, L(, I2, 2H)*, 5X, 19H(F
      LUXO ASSINTOT
      LICO)/////)
      GO TO 905
903  PRINT 203, NN
203  FORMAT(1H, 55X, 18H*APROXIMACAO P1, L(, I2, 2H)*/////)
905  PRINT 29, ABSOR, Z
29   FORMAT(1H ,15X, 6HABSOR=, F6.3, 10X, 2HZ=, F7.3////)
      PRINT 30
30   FORMAT(1H ,9X, 1HE, 13X, 5HFLUXO, 14X, 6HFINORM, 11X, 9HFIMA
      XNORM, 8X, 28H(
      1FINORM-FIMAXNORM)/FIMAXNORM/)
      E=EMIN
      X(JJ)=1.
      INDICE=1
71  FLUXO=0.
      IF(SENSE SWITCH 3) 900, 901
900  NI=N
      GO TO 350
901  NI=1
350  DO 330 L=1, JJ, NI
      M=1

```

```

      DO 331 J=1,N
      FLUXO=FLUXO+A0AUX(L,J)*PL(M,E)
331  M=M+1
      FLUXO=FLUXO*X(L)*EXP(-Z/ENU(L))
      FL(L)=FLUXO
330  FLUXO=0.
      DO 340 L=1, JJ, NI
340  FLUXO=FLUXO+FL(L)
      FLUXOM(INDICE)=E*EXP(-E)
      FLUXO=FLUXO*FLUXOM(INDICE)
      YFLUXO(INDICE)=FLUXO
      E=E+ENTERV
      INDICE=INDICE+1
      IF(E-EMAX)71,71,4000
4000 IF(SENSE SWITCH 2)800,801
      800 READ 220,AREAT
      AREA=AREAT
      GO TO 802
      801 S1=0.
      S2=0.
      DO 400 I=2, NP, 2
400  S1=S1+YFLUXO(I)
      NP1=NP-1
      DO 402 I=3, NP1, 2
402  S2=S2+YFLUXO(I)
      AREA=ENTERV/3.*((YFLUXO(1)+YFLUXO(NP))+4.*S1+2.*S2)
      802 E=EMIN
      DO 209 J=1, NP
      FIN=YFLUXO(J)/AREA
      FIMAXN=FLUXOM(J)/.99945
      IF(FIMAXN)7000,7000,8000
7000 RELFLU=0.
      GO TO 9000
8000 RELFLU=(FIN-FIMAXN)/FIMAXN
9000 PRINT 499,E,YFLUXO(J),FIN,FIMAXN,RELFLU
      499 FORMAT(1H ,5X,F7.3,7X,E14.8,5X,E14.8,5X,E14.8,12X,E14
      .8/)
      209 E=E+ENTERV
      IF(SENSE SWITCH 2)803,804
      804 AREAT=AREA
      803 PRINT 2000
      PRINT 208,AREAT,Z0
208  FORMAT(1H ,5X,11HAREA TOTAL=,E14.8,10X,22HDISTANCIA E
      XTRAPOLADA=,E
      114.8///)
      PRINT 5000
2000 FORMAT(//)
5000 FORMAT(/////)
      IF(Z-ABINT)6000,6001,6001
6000 Z=Z+DELINT
      PUNCH 280,NP,Z,EMIN,EMAX,ENTERV,ABINT,ABMAX,DELINT,DE
      LMAX,N
      PUNCH 280,NP,Z,EMIN,EMAX,ENTERV,ABINT,ABMAX,DELINT,DE
      LMAX,N

```

```

GO TO 2
+001 Z=Z+DELMAX
PUNCH 280, NP, Z, EMIN, EMAX, ENTERV, ABINT, ABMAX, DELINT, DE
    LMAX, N
IF (Z-ABMAX) 2, 2, 1
END

```

```

*PANDK1204
C      *PROGRAMA MILNE P3*
C      MP3
C      -CALCULO DOS COEFICIENTES E DAS CONSTANTES-
C      METODO PEA
C      APROXIMACAO P3
C      ESPALHAMENTO ISOTROPICO
C      A RAIZ DE INDICE (N+1) CORRESPONDE A RAIZ -NU(1)
C      N=ORDEM DE APROXIMACAO USADA MAIS 1 PARA OS POLINOMIO
C      S
C      DE PRIMEIRA ESPECIE DE LAGUERRE (NORMALIZADOS)
C      CHAVE 2 LIGADA, SAO IMPRIMIDOS OS COEFICIENTES
C      E AS SOLUCOES DOS SISTEMAS HOMOGENEO E NAO HOMOGE
C      NEO
C      DIMENSION S(6,6), GANI(6,6), P2BENI(12), BENI(6), X(13)
C      DIMENSION P3BENI(12), P4BENI(12), W2BENI(12), AOAUX(13,6
C      )
C      DIMENSION W3BENI(12), COEFB0(6,6), B0(6), B1(6), B2(6), B3
C      (6)
C      DIMENSION A0(6), A1(6), A2(6), A3(6), ENU(13), ALFA(12,12)
C      , TIND(12)
1     L=1
      READ 10, N, ABSOR
10    FORMAT(I2, 5F7.3)
      DO 100 I=1, N
100   READ 11, (S(I, J), J=1, N)
      NN=N-1
      IF (SENSE SWITCH 2) 181, 55
181   PRINT 203, NN
203   FORMAT(1H , 55X, 18H*APROXIMACAO P3, L(, I2, 2H)*/////)
      55 READ 11, ENI
      11 FORMAT(5E14.8)
      DO 180 I=1, N
180   READ 11, (GANI(I, J), J=1, N)
      READ 11, (BENI(I), I=1, N)
      DO 150 I=1, N
      P2BENI(I)=1.5*BENI(I)*BENI(I)-.5
      P3BENI(I)=2.5*BENI(I)**3-1.5*BENI(I)
      P4BENI(I)=(35.*BENI(I)**4-30.*BENI(I)**2+.5)/8.
      W2BENI(I)=2.5*BENI(I)*BENI(I)-.66666666

```

```

150 W3BENI(I)=4.375*BENI(I)*BENI(I)*BENI(I)-2.291666*BENI
    (I)
    DO 102 J=1,N
    DO 102 K=1,N
    DELTA=J-K
    IF(DELTA)50,51,50
51 DELTA=1.
    GO TO 102
50 DELTA=0.
102 COEFB0(J,K)=P4BENI(J)/W3BENI(J)*DELTA-GANI(J,K)
    IF(N-2)194,194,195
194 B0(1)=COEFB0(1,2)
    B0(2)=-COEFB0(1,1)
    GO TO 196
195 CALL SLH1(COEFB0,N,B0)
196 IF(B0(1))348,349,349
348 DO 213 K=1,N
213 B0(K)=-B0(K)
349 DO 103 J=1,N
    SOMAP1=0.
    SOMAP2=0.
    SOMAP3=0.
    DO 107 K=1,N
    DELTA=J-K
    IF(DELTA)52,53,52
53 DELTA=1.
    GO TO 104
52 DELTA=0.
104 P1=(BENI(J)*DELTA-GANI(J,K))*B0(K)
    SOMAP1=SOMAP1+P1
    P2=(P2BENI(J)*DELTA-1.5*BENI(J)*GANI(J,K))*B0(K)
    SOMAP2=SOMAP2+P2
    P3=(P3BENI(J)*DELTA-W2BENI(J)*GANI(J,K))*B0(K)
107 SOMAP3=SOMAP3+P3
    B1(J)=SOMAP1
    B2(J)=SOMAP2
103 B3(J)=SOMAP3
    DO 105 I=1,N
    SOMA1P=0.
    SOMA2P=0.
    SOMA3P=0.
    SOMA4P=0.
    DO 106 J=1,N
    SOMAP1=S(I,J)*B0(J)
    SOMAP2=S(I,J)*B1(J)
    SOMAP3=S(I,J)*B2(J)
    SOMAP4=S(I,J)*B3(J)
    SOMA1P=SOMA1P+SOMAP1
    SOMA2P=SOMA2P+SOMAP2
    SOMA3P=SOMA3P+SOMAP3
106 SOMA4P=SOMA4P+SOMAP4
    A0(I)=SOMA1P
    A0AUX(L,I)=A0(I)

```

```

      A1(I)=SOMA2P
      A2(I)=SOMA3P
105  A3(I)=SOMA4P
      ENU(L)=ENI
      IF(L-2*N)114,114,115
114  DO 700 J=1,N
      ALFA(J,L)=A0(J)+2.5834089*A1(J)+3.0616679*A2(J)+2.133
      2283*A3(J)
      JS=J+N
700  ALFA(JS,L)=A0(J)+1.01994312*A1(J)-1.63309675*A2(J)-2.
      88209607*A3(J)
      1)
      GO TO 8000
115  DO 900 J=1,N
      TIND(J)=- (A0(J)+2.5834089*A1(J)+3.0616679*A2(J)+2.133
      22283*A3(J))
      JS=J+N
900  TIND(JS)=- (A0(J)+1.01994312*A1(J)-1.63309675*A2(J)-2.
      88209607*A3(J)
      1))
8000 IF(SENSE SWITCH 2)800,184
      800 PRINT 19,ABSOR,L,ENU(L)
      19 FORMAT(1H ,25X,6HABSOR=,F6.3,5X,3HNU(,I3,2H)=,E14.8//
      )
      DO 192 J=1,N
192  PRINT 193,(J,K,COEFB0(J,K),K=1,N)
193  FORMAT(3(1H ,5X,7HCOEFB0(,I3,I3,2H)=,E14.8))
      PRINT 2000
2000 FORMAT(//)
      DO 191 J=1,N
191  PRINT 20,J,B0(J),J,B1(J),J,B2(J),J,B3(J)
      20 FORMAT(1H ,5X,3HB0(,I2,2H)=.E14.8,5X,3HB1(,I2,2H)=,E1
      4.8,5X,3HB2(,
      I2,2H)=,E14.8,5X,3HB3(,I2,2H)=,E14.8)
      PRINT 2000
      DO 198 J=1,N
198  PRINT 21,J,A0(J),J,A1(J),J,A2(J),J,A3(J)
      21 FORMAT(1H ,5X,3HA0(,I2,2H)=.E14.8,5X,3HA1(,I2,2H)=,E1
      4.8,5X,3HA2(,
      I2,2H)=,E14.8,5X,3HA3(,I2,2H)=,E14.8)
      TESTE=0.
      DO 197 J=1,N
197  TESTE=TESTE+COEFB0(1,J)*B0(J)
      PRINT 2000
      PRINT 207,TESTE
207  FORMAT(1H ,5X,6HTESTE=,E14.8)
      PRINT 5000
5000 FORMAT(////)
      184 L=L+1
      IF(L-2*N-1)55,55,56
      56 JJ=2*N
      IF(SENSE SWITCH 2)185,186
185  DO 411 I=1,JJ

```

```

411 PRINT 204, (I, J, ALFA(I, J), J=1, JJ)
204 FORMAT(3(1H ,5X,5HALFA(,13,13,2H)=,E14.8))
PRINT 2000
DO 412 J=1, JJ
412 PRINT 205, J, TIND(J)
205 FORMAT(1H ,5X,12HTERMO INDEP(,12,2H)=,E14.8)
186 NAL=JJ-1
705 DO 770 K=1, NMI
      KPI=K+1
      L=K
710 DO 730 I=KPI, JJ
      IF(ABSF(ALFA(L, K))-ABSF(ALFA(I, K))) 720, 730, 730
720 L=I
730 CONTINUE
      IF(L=K) 740, 740, 750
750 DO 760 J=K, JJ
      AAI=ALFA(K, J)
      ALFA(K, J)=ALFA(L, J)
760 ALFA(L, J)=AAI
      AAZ=TIND(K)
      TIND(K)=TIND(L)
      TIND(L)=AAZ
740 DO 770 I=KPI, JJ
      R=ALFA(I, K)/ALFA(K, K)
      TIND(I)=TIND(I)-R*TIND(K)
745 DO 770 J=K, JJ
770 ALFA(I, J)=ALFA(I, J)-R*ALFA(K, J)
775 X(JJ)=TIND(JJ)/ALFA(JJ, JJ)
      DO 790 K=1, NMI
      I=JJ-K
      IPI=I+1
      SOMA=0.
      DO 780 J=IPI, JJ
780 SOMA=SOMA+ALFA(I, J)*X(J)
790 X(I)=(TIND(I)-SOMA)/ALFA(I, I)
      IF(SENSE SWITCH 2) 187, 188
187 PRINT 2000
      PRINT 206, (I, X(I), I=1, JJ)
206 FORMAT(1H ,5X,2HX(,13,2H)=,E14.8)
      TESTE=0.
      DO 160 J=1, JJ
160 TESTE=TESTE+ALFA(1, J)*X(J)
      TESTE=TESTE-TIND(1)
      PRINT 2000
      PRINT 207, TESTE
      PAUSE
188 ZO=-ERU(1)/2.*LOG(-X(1))
      PUNCH 300, N, NM, ABSOR.ZO
300 FORMAT(2I2, 2E14.8)
      JJJ=JJ+1
      PUNCH 11, (ERU(L), L=1, JJJ)
      DO 302 L=1, JJJ
302 PUNCH 11, (ACAU(L, J), J=1, N)
      PUNCH 11, (X(I), I=1, JJ)
      PAUSE
      GO TO 1
      END

```

```

*FANDK1204
C      *PROGRAMA MILNE P3
C      FEEMP3
C      -DISTRIBUICAO ENERGETICA DO FLUXO E DISTANCIA EXTRAPO
        LADA-
C      AREA TOTAL = AREA DEBAIXO DA CURVA DE
C      DISTRIBUICAO DO FLUXO NO INTERVALO 0-10 KT
C      NP=NUMERO DE PONTOS PARA A CURVA DA DISTRIBUICAO
C      ENERGETICA DO FLUXO
C      SWITCH 2 CALCULA OS FLUXOS EM INTERVALOS
C      DE EXTREMOS DIFERENTES DE 0-10KT
C      SWITCH 3 CALCULA O FLUXO ASSINTOTICO
C      ABINT=ABCISSA INTERMEDIARIA PARA INTERVALOS MENORES
C      DELINT=INTERVALO MENOR
C      ABMAX=ABCISSA MAXIMA
C      DELMAX=INTERVALO MAIOR
C      DIMENSION AOAUX(13,6),X(13),ENU(13),YFLUXO(100),FLUXO
        M(100),FL(15)
1 READ 280,NP,Z,EMIN,EMAX,ENTERV,ABINT,ABMAX,DELINT,DEL
    MAX
280 FORMAT(14,8F7.3,112)
    READ 300,N,NN,ABSOR,Z0
300 FORMAT(2I2,2E14.8)
    JJ=2*N
    JJJ=JJ+1
    READ 220,(ENU(I),I=1,JJJ)
    DO 302 L=1,JJJ
302 READ 220,(AOAUX(L,J),J=1,N)
220 FORMAT(5E14.8)
    READ 220,(X(I),I=1,JJ)
2 IF(SENSE SWITCH 3)902,903
902 PRINT 904,NN
904 FORMAT(1H ,55X,18H*APROXIMACAO P3,L(,12,2H)*,5X,19H(F
    LUXO ASSINTOT
    LICO)//////)
    GO TO 905
903 PRINT 203,NN
203 FORMAT(1H ,55X,18H*APROXIMACAO P3,L(,12,2H)*//////)
905 PRINT 29,ABSOR,Z
29 FORMAT(1H ,15X,6HABSOR=,F6.3,10X,2HZ=,F7.3////)
    PRINT 30
30 FORMAT(1H ,9X,1HE,13X,5HFLUXO,14X,6HF INORM,11X,9HF IMA
    XNORM,8X,28H(
    1FINORM-FIMAXNORM)/FIMAXNORM/)
    E=EMIN
    X(JJJ)=1.
    INDICE=1
71 FLUXO=0.
    IF(SENSE SWITCH 3)900,901
900 NI=JJ
    GO TO 350
901 NI=1
350 DO 330 L=1,JJJ,NI

```

```

M=1
DO 331 J=1,N
FLUXO=FLUXO+AOAUX(L,J)*PL(M,E)
331 M=M+1
FLUXO=FLUXO*X(L)*EXP(-Z/ENU(L))
FL(L)=FLUXO
330 FLUXO=0.
DO 340 L=1,JJJ,NI
340 FLUXO=FLUXO+FL(L)
FLUXOM(INDICE)=E*EXP(-E)
FLUXO=FLUXO*FLUXOM(INDICE)
YFLUXO(INDICE)=FLUXO
E=E+ENTERV
INDICE=INDICE+1
IF(E-EMAX)71,71,4000
4000 IF(SENSE SWITCH 2)800,801
800 READ 220,AREAT
AREA=AREAT
GO TO 802
801 S1=0.
S2=0.
DO 400 I=2,NP,2
400 S1=S1+YFLUXO(I)
NP1=NP-1
DO 402 I=3,NP1,2
402 S2=S2+YFLUXO(I)
AREA=ENTERV/3.*((YFLUXO(1)+YFLUXO(NP))+4.*S1+2.*S2)
802 E=EMIN
DO 209 J=1,NP
FIN=YFLUXO(J)/AREA
FIMAXN=FLUXOM(J)/.99945
IF(FIMAXN)7000,7000,8000
7000 RELFLU=0.
GO TO 9000
8000 RELFLU=(FIN-FIMAXN)/FIMAXN
9000 PRINT 499,E,YFLUXO(J),FIN,FIMAXN,RELFLU
499 FORMAT(1H ,5X,F7.3,7X,E14.8,5X,E14.8,5X,E14.8,12X,E14
.8/)
209 E=E+ENTERV
IF(SENSE SWITCH 2)803,804
804 AREAT=AREA
803 PRINT 2000
PRINT 208,AREAT,Z0
208 FORMAT(1H ,5X,11HAREA TOTAL=,E14.8,10X,22HDISTANCIA E
XTRAPOLADA=,E
114.8///)
PRINT 5000
2000 FORMAT(//)
5000 FORMAT(/////
IF(Z-ABINT)6000,6001,6001
6000 Z=Z+DELINT
PUNCH 280,NP,Z,EMIN,EMAX,ENTERV,ABINT,ABMAX,DELINT,DE
LMAX,N

```

```

      GO TO 2
6001 Z=Z+DELMAX
      PUNCH 280,NP,Z,EMIN,EMAX,ENTERV,ABINT,ABMAX,DELINT,DE
          LMAX,N
      IF(Z-ABMAX)2,2,1
      END

```

*FANDK1204

```

      SUBROUTINE SLH1(A,N,X)
      DIMENSION A(6,6),C(6,6),X(6)
      DO 10 I=1,N
      DO 10 J=1,N
10 C(I,J)=A(I,J)
      CALL DTCL(C,N,DET)
      IF(ABSF(DET)-1.E-3)40,40,20
20 PRINT 30
30 FORMAT(1H ,44HSISTEMA ADMITE APENAS SOLUCAO TRIVIAL X
          (I)=0//)
      GO TO 140
40 IH=1
      IE=1
      MEH=N-1
50 J=0
      DO 70 K=1,MEH
          J=J+1
          DO 70 I=1,MEH
              IF(IE-J)70,60,70
60 J=J+1
70 C(I,K)=A(I,J)
          DO 80 J=1,N
80 C(N,J)=0.
          DO 90 I=1,N
90 C(I,N)=0.
          GO TO (100,120),IH
100 CALL DTCL(C,MEH,DET)
          IF(DET)130,110,130
110 IH=IH+1
          GO TO 50
120 CALL DTM1(C,MEH,DET)
          IH=1
130 X(IE)=(-1.)**(IE+1)*DET
          IE=IE+1
          IF(IE-N)50,50,140
140 RETURN
      END

```

*FANDK1204

```
      SUBROUTINE DTC1(A,N,DET)
      DIMENSION A(6,6)
      DO 10I=1,N
10  A(I,1)=A(I,1)
      DET=A(1,1)
      DO 20J=2,N
20  A(1,J)=A(1,J)/A(1,1)
      DO 30I=2,N
      II=I-1
      S=0.
      DO 35K=1,II
      P=A(I,K)*A(K,I)
35  S=S+P
      A(I,I)=A(I,I)-S
      DET=DET*A(I,I)
      IF(I-N)31,60,31
31  IF(DET)36,60,36
36  IS=I+1
      DO 40J=IS,N
      S=0.
      DO 45K=1,II
      P=A(J,K)*A(K,I)
45  S=S+P
40  A(J,I)=A(J,I)-S
      DO 50J=IS,N
      S=0.
      DO 55K=1,II
      P=A(I,K)*A(K,J)
55  S=S+P
50  A(I,J)=(A(I,J)-S)/A(I,I)
30  CONTINUE
60  RETURN
      END
```

```
*FANDK1204
SUBROUTINE DTMI(A,N,DET)
DIMENSION A(6,6),XMAX(6)
DO 30I=1,N
XMAX(I)=ABSF(A(I,I))
L=I
KK=I+1
DO 40K=KK,N
IF(XMAX(I)-ABSF(A(K,I)))50,40,40
50 XMAX(I)=ABSF(A(K,I))
L=K
40 CONTINUE
DO 90J=I,N
B=A(I,J)
A(I,J)=A(L,J)
A(L,J)=B
90 CONTINUE
M=N
120 A(I,M)=A(I,M)/A(I,I)
IF(M-I)100,100,110
110 M=M-1
GO TO 120
100 IF(I-1)125,125,115
115 NN=I
GO TO 150
125 NN=I
130 NN=NN+1
IF(NN-I)135,130,135
135 IF(NN-N)150,150,30
150 M=N
170 A(NN,M)=A(NN,M)-A(NN,I)*A(I,M)
IF(M-I)130,130,180
180 M=M-1
GO TO 170
30 CONTINUE
DET=1.
DO 190I=1,N
190 DET=DET*XMAX(I)
RETURN
END
```

```

C   PROGRAMA   VCPEA
C   VALORES CARACTERISTICOS NT NA APROXIMACAO L-N
C   METODO POLINOMIAL ENERGETICO E ESFERICAS HARMONI
      CAS ANGULAR
      DIMENSION U(6,6),UT(6,6),ALFA(6,6),R(6,6),G(6,6),B(6)
      ,P(15),Y(15),
      IT(6,6),GA(6,6),GANI(6,6),BNU(6)
      COMMON B,N1,N,G,T
C   EI = EXT.INFERIOR * ES = EXT.SUPERIOR DO INTERVALO DE
      NI
C   H = PASSO * E = PRECISAO DA RAIZ
555 READ 777,EI,ES,H,E,EI
777 FORMAT (3F6.3,2E4.1)
C   N NUMERO DE AUTO VALORES * N1 POL. LEGENDRE P(N1+1)
      READ 1,N,N1
      1 FORMAT (2I2)
C   B(I) - AUTO VALORES
      READ 2,(B(I),I=1,N)
C   MATRIZ U(I,J) - AUTO VETORES
      READ 2,((U(I,J),J=1,N),I=1,N)
      2 FORMAT (5E14.8)
C   NORMALIZA A MATRIZ U
      DO 30 J=1,N
      Z=0.
      DO 35 I=1,N
      35 Z=Z+U(I,J)**2
      FN=SQRT(Z)
      DO 30 I=1,N
      30 U(I,J)=U(I,J)/FN
      PRINT 701
701 FORMAT(1H0,36HMATRIZ DOS AUTO-VETORES NORMALIZADOS/)
      DO 702 I=1,N
702 PRINT602,(U(I,J),J=1,N)
C   PERFURA A MATRIZ DOS AUTO-VETORES NORMALIZADOS
      DO 900 I=1,N
900 PUNCH 901,(U(I,J),J=1,N)
901 FORMAT(5E14.8)
C   MATRIZ UT TRANSPOSTA DE U
      DO 40 I=1,N
      DO 40 J=1,N
      40 UT(J,I)=U(I,J)
C   CALCULA A MATRIZ ALFA
      DO 45 I=1,N
      DO 45 J=1,N
      45 ALFA(I,J)=0.
      SCF=1.
      XNU=.10000000E+00
      ALFA (1,1) =SCF
      N2=N-1
      DO 50 K=1,N2
      FK=K
      50 ALFA(K+1,K+1)=SCF*(1.-2.*FK*XNU)
C   CALCULA A MATRIZ GAMA

```

```

      CALL MM(N,UT,ALFA,R)
      CALL MM(N,R,U,G)
C     IMPRIME A MATRIZ GAMA
      PRINT 600
      600 FORMAT(1H0,15X,12HMATRIZ  GAMA//)
      DO 601 IG=1,N
      601 PRINT602,(G(IG,JG),JG=1,N)
      602 FORMAT(1H0,6(E14.8,2X))
C     GUARDA A MATRIZ GAMA
      DO 603 I=1,N
      DO 603 J=1,N
      603 GA(I,J)=G(I,J)
      DO 55 I=1,N
      DO 55 J=1,N
      55 T(I,J)=-G(I,J)
      PRINT 26,(I,B(I),I=1,N)
      26 FORMAT (1H0,6(2HB(,12,2H)=,E14.8,2X))
      PRINT9,N1,N2
      270 RA=EI
      ZE1=PLWPSI(RA,B,N1,N,G,T)
      RA=RA+H
      250 ZE2=PLWPSI(RA,B,N1,N,G,T)
      IF (ZE1*ZE2) 800,800,400
      400 RA=RA+H
      IF (RA-(ES+H)) 80,85,85
      80 ZE1=ZE2
      GO TO 250
      800 X1=RA-H
      X2=RA
      X3=X1+H/3.
      D=PLWPSI(X3,B,N1,N,G,T)
      S1=ABS(ZE1)+ABS(ZE2)
      PR=ZE1*D
      IF (PR) 330,390,340
      340 S2=ABS(ZE2)+ABS(D)
      GO TO 360
      330 S2=ABS(ZE1)+ABS(D)
      360 IF(S2-S1) 390,390,400
      390 CALL RAIN(T,X1,X2,E,E1,Y0)
      D=PLWPSI(Y0,B,N1,N,G,T)
      YNU=1./(Y0*Y0)
      PRINT133,YNU
      133 FORMAT (1H0,6H1/NI2=.E14.8/)
      PRINT503,Y0
      503 FORMAT (1H ,3HNI=,E14.8)
C     PERFURA O VALOR DE NI
      PUNCH 901,Y0
C     CALCULA O PRODUTO NI*GAMA
      DO 608 I=1,N
      DO 608 J=1,N
      608 GANI(I,J)=GA(I,J)*Y0
      PRINT 609
      609 FORMAT(1H0,/,15X,15HMATRIZ  GAMA*NI,/)

```

```

        DO 610 I=1,N
610 PRINT602,(GANI(I,J),J=1,N)
C     PERFURA A MATRIZ GAMA*NI
        DO 902 I=1,N
902 PUNCH 901,(GANI(I,J),J=1,N)
        DO 550 I=1,N
550 BNU(I)=B(I)*YO
        DO 885 I=1,N
885 PRINT 16,I,BNU(I)
    16 FORMAT (1H ,2HB(,I2,4H)NI=,E14.8)
        PRINT134,D
    134 FORMAT (1H ,3HD =,E14.8/)
        PUNCH 901,(BNU(I),I=1,N)
        IF (SENSE SWITCH 3)2000,2001
2000 V=-YO
        DO 2100 I=1,N
        DO 2100 J=1,N
2100 GANI(I,J)=GA(I,J)*V
        DO 2200 I=1,N
2200 BNU(I)=B(I)*V
        PUNCH 901,V
        DO 2300 I=1,N
2300 PUNCH 901,(GANI(I,J),J=1,N)
        PUNCH 901,(BNU(I),I=1,N)
2001 CONTINUE
        RA=RA+H
        IF (RA-(ES+H)) 80,85,85
    85 RA=RA-H
        PRINT180,EI,RA,H
    180 FORMAT (1H ,22HRAIZES NO INTERVALO AB,3X,2HA=,F6.2,5X
        ,2HB=,F6.2,5X
        1,6HPASSO=,E14.8)
        IF (SENSE SWITCH 2) 200,100
200 N1=N1+2
        PRINT9,N1,N2
    9 FORMAT (1H0,10X,3HGP ,2HN=,I2,1X,2HL=,I2,/)
        GO TO 270
100 GO TO 555
        END

```

```

FUNCTION PLWPSI(AR,B,N1,N,G,T)
DIMENSION B(6),G(6,6),P(15),Y(15),T(6,6)
RA=AR
DO 60 I=1,N
X=B(I)*RA
C POLINOMIOS DE LEGENDRE
P(1)=1.
P(2)=X
DO 65 L=1,N1
L1=L+2
L2=L1-1
L3=L2-1
F2=L3
F3=L2
65 P(L1)=((2.*F2+1.)*X*P(L2)-F2*P(L3))/F3
C POLINOMIOS W
IF (N1-1) 50,50,55
55 J=N1-1
Y(1)=1.
Y(2)=3./2.*X
DO 70 M=1,J
J1=M+2
J2=J1-1
J3=J1-2
F4=J2
F5=J1
70 Y(J1)=((2.*F4+1.)*X*Y(J2)-F4*Y(J3))/F5
GO TO 80
50 J1=2
Y(2)=3./2.*X
80 PSI=P(L1)/(RA*Y(J1))
60 T(I,I)=PSI-G(I,I)
CALL DETER(N,T,DET)
PLWPSI=DET
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE MM(N,A,B,R)
DIMENSION A(6,6),B(6,6),R(6,6)
DO 5 I=1,N
DO 10 J=1,N
SOMA=0.
DO 15 K=1,N
PROD=A(J,K)*B(K,I)
15 SOMA=SOMA+PROD
10 R(J,I)=SOMA
5 CONTINUE
RETURN
END

```

```

FUNCTION F(X)
  DIMENSION B(6),G(6,6),T(6,6)
  COMMON B,N1,N,G,T
  F=PLWPSI(X,B,N1,N,G,T)
  RETURN
END

```

```

SUBROUTINE RAIN ( U, V, E, E1, Y0 )
  COMMON A1,B1,A2,B2
  C= -1./SQRT(2.)
  FU= F(U)
  FV= F(V)
10 IF ( ABS (U-V) -E) 20,30,30
20 Y0= 0.5 *(U+V)
  RETURN
30 Y1= (V*FU-U*FV)/(FU-FV)
  FY1= F(Y1)
  IF (C) 40,50,50
40 Y2= 0.5 *(U+V)
  FY2= F(Y2)
  GO TO 90
50 Y2= V+C*(U-V)
  FY2= F(Y2)
90 A= -FY1*FY2
  IF (A) 60,70,80
60 B= Y2-Y1
  D= FV*FY2
  IF (D) 15,22,25
15 C= C**2
  GO TO 35
22 IF (F(V)) 11,12,11
11 Y0= Y2
  RETURN
12 Y0= V
  RETURN
25 C= 0.5
  V= U
  FV= FU
35 G= B*(Y2-V)
  IF (G) 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 Y0= Y2
  RETURN
2 Y0= Y1
  RETURN
80 B= Y1-Y2
   IF (ABS(U-Y1) -E1) 25,7,7
7   IF (ABS(V-Y1) -E1) 15,8,8
8 C= -1./SQRT(2.)
   U= Y1
   V= Y2
   FU= FY1
   FV= FY2
   GO TO 10
END
```

BIBLIOGRAFIA

- 1 - Toledo, P.S. - Contribuição ao Método Polinomial de Solução Aproximada da Equação Polienergética de Boltzmann - Tese de Doutorado, Univ. de São Paulo, 1968.
- 2 - Davison - Neutron Transport Theory - Oxford University Press, 1958.
- 3 - Placzek, G. and Seidel, W. - Phys. Rev. 72, 550, 1947.
- 4 - Placzek, G. - Phys. Rev. 72, 556, 1947.
- 5 - LeCaine, J. - Phys. Rev. 72, 564, 1947.
- 6 - Conkie, W.R. - Nucl. Sci. and Eng. 7, 295, 1959.
- 7 - Nelkin, M. - Nucl. Sci. and Eng. 7, 552, 1960.
- 8 - Kladnik, R. and Kušcer, I. - Nucl. Sci. and Eng. 11, 116, 1961.
- 9 - Eisenhauer, C. - Nucl. Sci. and Eng. 19, 95, 1964.
- 10 - Williams, M.M.R. - Nucl. Sci. and Eng. 18, 260, 1964.
- 11 - Williams, M.M.R. - Nucl. Sci. and Eng. 19, 353, 1964.
- 12 - Conkie, W.R. - Nucl. Sci. and Eng. 18, 370, 1964.
- 13 - Kiefhaber, E. - Nukleonik 6, 262, 1964.
- 14 - Leonard, A. and Ferziger, J.A. - Energy-Dependent Neutron Transport Theory in Plane Geometry - III. Half-Range Completeness and Half-Space Problems, 1965.
- 15 - Mike, J. - Nucl. Sci. and Eng. 22, 235, 1965.
- 16 - Arkuszewski, J. - Nucl. Sci. and Eng. 27, 104, 1967.
- 17 - Kallfelz, J.M. and Reichardt, W. - Nukleonik 9, 148, 1967.
- 18 - Beckurtz, K.H. - Z. Naturforsch 16a, 611, 1961.
- 19 - Metcalf, D.R. - Solutions of Two-Group Transport Equation in Plane Geometry - Tese de Doutorado, Univ. de Michigan, 1968.
- 20 - Smith, O.J. - ORO-3858-1, Neutron Transport Theory Conference, Virginia, p.653, 1969.

- 21 - Leonard, A. and Ferziger, J.H. - Energy-Dependent Neutron Transport Theory in Plane Geometry - II. Eigenfunctions and Full-Range Completeness, 1965.
- 22 - Kunaish, H.H. - Time-Energy and Space-Dependent Neutron Thermalization Theory - Tese de Doutorado, University of Florida, USA, 1964.
- 23 - Williams, M.M.R. - The Slowing down and Thermalization of Neutrons - North-Holland Publishing Company - Amsterdam, 1966.
- 24 - Cohen, E.R. - Proc. Geneva Conf., 5, P/611, 1954.
- 25 - Hurwitz, H., Nelkin, M.S. and Habetler, G.J. - Nucl. Sci. and Eng. 1, 280, 1956.
- 26 - Jahnke, E. and Emde, F. - Tables of Functions - Dover, 1945.
- 27 - Hehl, W.S. - IEA-DFR/1
- 28 - Beckurts, K.H. and Wirtz, K. - Neutron Physics - Universitätsdruckerei H. Sturtz AG, Würzburg.
- 29 - Hehl, M.E. - Análise Computacional-Comparativa de Métodos Numéricos para Auto-Problemas Reais - Tese de Doutorado, Univ. de São Paulo, 1970.
- 30 - Travelli, A. - Thermal Neutron Transients in Various Order P-N Approximations - Tese de Doutorado, Rensselaer Polytechnic Institute, USA, 1963.