

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
FACULDADE DE FILOSOFIA, CIÊNCIAS E LETRAS

*+ Biblioteca do  
FEA Párcel 0  
Autor.*

CONTRIBUIÇÃO AO MÉTODO POLINOMIAL DE SOLUÇÃO  
APROXIMADA DA EQUAÇÃO POLI-ENERGÉTICA DE BOLTZMANN

PAULO SARAIVA DE TOLEDO

*Orientador: Jayme Tiomna*



TESE DE DOUTORAMENTO APRESENTADA À  
FACULDADE DE FILOSOFIA, CIÊNCIAS E  
LETRAS DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

- 1968 -

SÃO PAULO - BRASIL

E R R A T A

1) Página 8, 4<sup>a</sup> e 5<sup>a</sup> linhas.

onde se lê:

..... e  $v$  é o módulo da velocidade vetorial relativa do neutron e do núcleo do meio.

leia-se:

..... e sua determinação, onde  $v$  é o módulo da velocidade do neutron relativa ao sistema de laboratório, depende da consideração da velocidade relativa do neutron e dos núcleos do meio (10).

2) Página 23, na linha logo abaixo da última equação do sistema (2.35).

onde se lê:

O desenvolvimento sucessivo da dependência energética em uma ~~série de polinômios de Legendre  $P_m(\mu)$ .....~~

leia-se:

O desenvolvimento sucessivo da dependência energética em polinômios  $g_j(E)$  da energia, e da dependência angular em uma série de polinômios de Legendre  $P_m(\mu)$ .....

3) Página 72, 7<sup>a</sup> linha.

onde se lê:

Para  $v \in (-\frac{1}{\beta_L}, \frac{1}{\beta_L})$ , a matriz diagonal  $(u)$ .....

leia-se:

Para  $v \in (-\frac{1}{\beta_L}, \frac{1}{\beta_L})$ , a matriz diagonal  $(u(\pm v, \mu))$ .....

A meus pais

= 00 =

## CAPÍTULO I

### CONSIDERAÇÕES GERAIS:

#### 1.1 - Introdução

A equação de Boltzmann, no campo da Física de Reatores, no caso da geometria plana, com seção de choque dependente da energia, - caso poli-energético -, tem recebido especial atenção somente nos últimos anos, em contraste com a equação mono-energética que tem sido objeto de tratamento dos mais extensos e completos desde a década de 1930.

A equação de Boltzmann ou de transporte de neutrons, a ser apresentada no item seguinte, e que consideraremos neste trabalho, é a usual<sup>(1-3)</sup> no tratamento do comportamento espacial e temporal de neutrons interagindo com as partículas de meios materiais.

Apesar de ser uma equação integro-diferencial linear, em contraste com a não linearidade da equação mais geral que governa os fenômenos de transporte em que intervêm moléculas ou átomos, a obtenção de soluções exatas é extremamente difícil, a não ser em certos casos bastante especiais.

Esta dificuldade de obtenção de soluções exatas em casos de interesse, levou ao desenvolvimento de métodos diversos de aproximação.

No caso da equação mono-energética, um dos métodos mais utilizados foi e continua sendo o denominado das esféricas harmônicas. A simplicidade deste método aliada à facilidade que apresenta para a programação com computadores digitais, tornou-o um dos mais importantes tanto nas aplicações tecnológicas como nas pesquisas. Estas, em geral, se dedicam a esclarecer a origem de discrepâncias observadas entre resultados experimentais e os teóricos, ou visam obter uma melhor compreensão dos fenômenos físicos que determinam os comportamentos observáveis de populações de neutrons em interação com sistemas materiais diversos.

Neste trabalho, o método das esféricas harmônicas é estendido ao caso poli-energético, desenvolvendo-o de maneira a obter soluções ge-

rais para a equação de Boltzmann em ausência de fontes externas e de fissão, e para um meio com características de espalhamento elástico isotrópico.

Em particular, a equação de Boltzmann que consideraremos será adaptada ao estudo do denominado fenômeno de termalização: ou seja, será considerada uma forma adequada para descrever o comportamento de uma população de neutrons em um meio onde há possibilidade de, em colisões com os núcleos, os neutrons ganharem ou perderem energia. Em outras palavras, nos problemas que consideraremos as energias cinéticas dos neutrons são comparáveis com as de agitação térmica dos átomos ou moléculas do meio com o qual interagem.

### 1.2 - Termalização de neutrons: geometria plana e regime estacionário

Dentre os problemas que apresentam especial importância no estudo da termalização de neutrons, se encontra o de determinar o espectro completo (espacial, angular e energético) dos neutrons, em um dado meio, no qual há uma fonte externa de neutrons, constante no tempo.

Para precisar este problema, vamos considerar a equação linear de Boltzmann. E, para facilitar a definição e interpretação física das grandezas que aí comparecem, descreveremos a população de neutrons através de sua densidade  $n(\vec{r}, \vec{v}, \vec{\Omega}; t)$ . Em Física de Reatores,  $n(\vec{r}, \vec{v}, \vec{\Omega}; t)$  é definida como segue.

Consideremos um conjunto de  $N$  neutrons em um certo instante de tempo  $t$ . A descrição, clássica, da evolução deste conjunto, necessitaria a determinação do movimento de um ponto representativo num espaço a  $6N$  dimensões.

Porém, em Física de Reatores (como aliás em Mecânica Estatística em geral) estamos usualmente interessados em valores médios de certas grandezas, tomados sobre os elementos do conjunto acima.

Introduzamos uma função  $\rho(\vec{r}, \vec{v}; t)$  tal que

$$\rho(\vec{r}, \vec{v}; t) \cdot dx \, dy \, dz \, dv_x \, dv_y \, dv_z \quad (1.1)$$

represente o número médio - no sentido de média sobre o conjunto - de neutrons presentes, no instante  $t$ , no elemento de volume  $dx dy dz$  centrado em  $\vec{r}$ , com velocidades com componentes entre

$$v_x - v_x + dv_x, v_y - v_y + dv_y \text{ e } v_z - v_z + dv_z$$

Em coordenadas polares no espaço das velocidades, (1.1) fica:

$$\rho(\vec{r}, v, \vec{\Omega}; t) dx dy dz \cdot v^2 dv \sin \theta d\theta d\phi \quad (1.2)$$

onde o versor  $\vec{\Omega}$  é definido através de:

$$\vec{v} = v \cdot \vec{\Omega} \quad (1.3)$$

e  $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$

é o elemento de ângulo sólido

A densidade de neutrons  $n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}; t)$  utilizada em Física de Reactores é definida como:

$$n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}; t) = \rho(\vec{r}, v, \vec{\Omega}; t) v^2 \quad (1.4)$$

e portanto:  $n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}; t) dx dy dz \cdot dv \cdot d\Omega =$  número de neutrons que, no instante  $t$ , se encontram no elemento de volume  $dx dy dz$  centrado em  $\vec{r}$ , com velocidade vectorial de módulo entre  $v$  e  $v + dv$ , contida no ângulo sólido  $d\Omega$  centrado em  $\vec{\Omega}$ .

Considerando, por simplicidade, meios não multiplicadores, a equação linear de Boltzmann para  $n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}; t)$  se escreve imediatamente, balanceando a variação temporal durante  $dt$  no elemento de volume hexadimensional  $dx dy dz \cdot dv \cdot d\Omega$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}; t) = & - \vec{v} \times \text{grad}_{\vec{r}} n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}; t) - \Sigma_a(\vec{r}, v) \cdot v \cdot n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}; t) - \\ & - \int_0^\infty dv' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_f(v', \vec{\Omega}' \rightarrow v, \vec{\Omega}/\vec{r}) v' \cdot n(\vec{r}, v', \vec{\Omega}'; t) + \\ & + \int_0^\infty dv' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_s(v', \vec{\Omega}' \rightarrow v, \vec{\Omega}/\vec{r}) v' \cdot n(\vec{r}, v', \vec{\Omega}'; t) + S(\vec{r}, v, \vec{\Omega}; t) \end{aligned} \quad (1.5)$$

onde:

$\Sigma_a(\vec{r}, v)$  = probabilidade por unidade de percurso, para que, na vizinhança do ponto  $\vec{r}$  do meio, um neutron de velocidade  $v$  seja absorvido

$\Sigma_S(v, \vec{\Omega} \rightarrow v', \vec{\Omega}' / \vec{r}) dv' d\Omega' =$  probabilidade, por unidade de percurso, para que em neutron de velocidade  $v$  nas vizinhanças do ponto  $\vec{r}$  do meio, sofra um choque elástico após o qual sua velocidade final tenha módulo contido em  $v' \leftarrow v' + dv'$  e direção dentro do ângulo sólido  $d\Omega'$  centrado em  $\vec{\Omega}'$ .

$S(\vec{r}, v, \vec{\Omega}; t) dv d\Omega =$  número de neutrons emitidos por unidade de tempo pela fonte, nas vizinhanças do ponto  $\vec{r}$  do meio, com velocidades com módulo entre  $v \leftarrow v + dv$  e direção dentro de  $d\Omega$  centrado em  $\vec{\Omega}$ .

O carater linear de (1.5) decorre de não se considerarem as colisões neutron-neutron, aproximação esta que em Física de Reactores é excelente.

A presença de  $\vec{r}$  como variável nas secções de choque macroscópicas é necessária se se desejar uma equação válida para meios inhomogêneos.

No restante deste trabalho consideraremos somente meios homogêneos, eventualmente separados por superfícies de descontinuidade; assim, as secções de choque macroscópicas, em cada meio, não dependerão de  $\vec{r}$  e esta variável será omitida como argumento das funções que comparecem em (1.5).

Outra simplificação importante resulta da consideração de meios isotrópicos. Neste caso, a dependência angular de  $\Sigma_S(v, \vec{\Omega} \rightarrow v', \vec{\Omega}')$  só pode se dar através de  $\vec{\Omega} \times \vec{\Omega}'$ , ou seja através do ângulo de espalhamento, e não da orientação espacial dos ângulos individuais.

Portanto, para meio homogêneo e isotrópico a equação linear de Boltzmann fica:

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

$$+ \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dv' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_S(v' \rightarrow v; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}') v' \cdot n(\vec{r}, v', \vec{\Omega}'; t)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dv'' \int_{4\pi} d\Omega'' \Sigma_S(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}''; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}'') \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}(\vec{r}, \mathbf{v}, \vec{\Omega}; t) + S(\vec{r}, \mathbf{v}, \vec{\Omega}; t)$$

tendo posto

$$\Sigma_S(\mathbf{v}', \vec{\Omega}' \rightarrow \mathbf{v}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{2\pi} \Sigma_S(\mathbf{v}' + \mathbf{v}; \vec{\Omega}' \times \vec{\Omega}'')$$

As integrações em relação a  $d\Omega''$  e  $dv''$  podem ser efetuadas, obtendo-se

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dv'' \int_{4\pi} d\Omega'' \Sigma_S(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}''; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}'') \cdot \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}(\vec{r}, \mathbf{v}, \vec{\Omega}; t) = \\ & = \int_0^\infty dv'' \Sigma_S(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}'') \cdot \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}(\vec{r}, \mathbf{v}, \vec{\Omega}; t) = \\ & = \Sigma_S(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}(\vec{r}, \mathbf{v}, \vec{\Omega}; t) \end{aligned} \quad (1.7)$$

com

$$\begin{aligned} \Sigma_S(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}'') &= \frac{1}{2\pi} \int_{4\pi} d\Omega'' \Sigma_S(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}''; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}'') \\ \Sigma_S(\mathbf{v}) &= \int_0^\infty dv'' \Sigma_S(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}'') = \int_0^\infty dv'' \int_{4\pi} d\Omega'' \Sigma_S(\mathbf{v}, \vec{\Omega} \rightarrow \mathbf{v}'', \vec{\Omega}''). \end{aligned}$$

Sendo assim,  $\Sigma_S(\mathbf{v})$  é a secção de choque macroscópica usual para espalhamento elástico.

Transpondo para o primeiro membro  $[\Sigma_S(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}(\vec{r}, \mathbf{v}, \vec{\Omega}; t)]$  e notando que

$$\Sigma_a(\mathbf{v}) + \Sigma_S(\mathbf{v}) = \Sigma(\mathbf{v}) \quad (1.8)$$

onde  $\Sigma(\mathbf{v})$  é a secção de choque macroscópica total, obtemos a forma da equação de Boltzmann dependente do tempo, linear, para meios não multiplicadores, isotrópicos e homogêneos:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\vec{r}, \mathbf{v}, \vec{\Omega}; t) = - \vec{v} \times \text{grad}_{\vec{r}} n(\vec{r}, \mathbf{v}, \vec{\Omega}; t) - \Sigma(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}(\vec{r}, \mathbf{v}, \vec{\Omega}; t) +$$

$$+ \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dv' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_S(v' \rightarrow v; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}') v' \cdot \mathbf{n}(\vec{r}, v', \vec{\Omega}') + S(\vec{r}, v, \vec{\Omega}; t) \quad (1.9)$$

Nos casos estacionários, independentes do tempo, o primeiro membro se anula e o termo de fonte não pode depender do tempo.

A (1.9) se reduz a:

$$\begin{aligned} \vec{v} \times \text{grad}_{\vec{r}} \mathbf{n}(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) + \Sigma(v) \cdot v \cdot \mathbf{n}(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) &= \\ = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dv' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_S(v' \rightarrow v; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}') v' \cdot \mathbf{n}(\vec{r}, v', \vec{\Omega}') + S(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) \end{aligned} \quad (1.10)$$

Definindo um fluxo de neutrons  $\vec{\Phi}(\vec{r}, v, \vec{\Omega})$

$$\vec{\Phi}(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) = v \cdot \mathbf{n}(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) \quad (1.11)$$

da equação (1.10) obtemos:

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \times \text{grad}_{\vec{r}} \vec{\Phi}(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) + \Sigma \vec{\Phi}(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) &= \\ = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dv' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_S(v' \rightarrow v; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}') \vec{\Phi}(\vec{r}, v', \vec{\Omega}') + S(\vec{r}, v, \vec{\Omega}) \end{aligned} \quad (1.12)$$

As simplificações necessárias para se obter soluções - analíticas ou numéricas - da equação (1.12) - são essencialmente de três tipos:

a) as ligadas à geometria do meio: - em geral, consideram-se meios dotados de simetrias geométricas tais que reduzam o número das variáveis espaciais envolvidas; como, por exemplo, meios com simetria plana, esférica ou cilíndrica.

Utilizando sistemas adequados de coordenadas espaciais, a equação geral, tri-dimensional nas variáveis espaciais, se reduz a equação ou equações em uma ou duas variáveis. Em particular, os casos de geometria plana foram extensamente considerados; e, em menor escala, os de geometria cilíndrica.

b) as ligadas à dependência angular; o espectro angular das sg

luções de (1.12) é fortemente influenciado pelas condições de contorno impostas nas superfícies de separação do meio e também pela dependência angular do núcleo de espalhamento  $\Sigma_S(v \rightarrow v'; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}')$ . A simplificação, ou melhor, o tratamento aproximado que, em geral, se adota neste caso, consiste em desenvolver  $\Sigma_S(v \rightarrow v'; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}')$  em uma série de esféricas harmônicas em  $(\vec{\Omega} \times \vec{\Omega}')$  mantendo, posteriormente, somente os primeiros termos.

Na grande maioria das pesquisas nesse campo, este desenvolvimento é truncado logo no primeiro ou segundo termo, ou seja, só se considera o caso de espalhamento isotrópico ou anisotrópico linear.

c) as ligadas à dependência energética: a dependência energética da solução decorre tanto da forma de  $\Sigma_S(v' \rightarrow v; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}')$  como da de  $\Sigma(v)$ .

Considerações físicas relacionadas com problemas de interesse, levam a se estudar, separadamente, dois casos distintos importantes:

i) moderação de neutrons: quando a energia dos neutrons é bem superior à de agitação térmica das moléculas do meio com as quais interagem, a probabilidade de ocorrer um choque elástico neutron-núcleo com energia final do neutron maior que a inicial, é praticamente nula.

Como consequência  $\Sigma_S(v' \rightarrow v; \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}')$  = 0 se  $v > v'$ .

E, para  $v < v'$ , a forma do núcleo de espalhamento é razoavelmente simples (1), pois nesta aproximação é lícito se desprezar a velocidade de agitação térmica dos neutrons do meio.

A dependência energética que aparece através de  $\Sigma(v)$  é, nesta região de energia característica da moderação, bastante complexa, principalmente se considerássemos meios multiplicadores, onde comparecem núcleos pesados apresentando níveis de ressonâncias importantes e numerosos.

Deixamos de fazer outras observações a respeito, pois o caso a que se aplicará o método a ser apresentado nesta tese é o de termalização.

ii) termalização: na zona de energia dos neutrons característica da termalização, a energia destes é comparável à de agitação térmica dos núcleos do meio. Assim, o núcleo de espalhamento tem valores apreci-

áveis tanto para  $v > v'$  como para  $v < v'$ , acarretando complicações analíticas sérias para a obtenção de soluções de (1.12). Quanto a  $\Sigma(v)$ , nesta região de termalização, é uma função bastante complexa, pois o movimento das partículas do meio não é, em geral, desprezível, e  $v$  é o módulo da velocidade vetorial relativa do neutron e do núcleo do meio.

Vários tratamentos aproximados são correntemente utilizados e serão sucintamente descritos logo mais.

É oportuno notar que um caso especial que recebeu um tratamento extenso, como já citamos, é o de neutrons mono-energéticos; ou seja, considera-se que  $\Sigma_s(v' \rightarrow v)$  é tal que não haja troca de energia nas colisões neutron-núcleo e que  $\Sigma(v)$  independa da energia. Aliás, basta esta última admissão para que o problema poli-energético se reduza a um mono-energético<sup>(1,4)</sup>.

Nesta tese, as simplificações que adotaremos serão explicitadas paulatinamente.

A primeira delas se refere à consideração de meio com geometria plana, fatia plana, por exemplo, sem fonte externa. Isto nos permite escrever, imediatamente, a equação (1.12) como:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, v, \mu) + \Sigma(v) \phi(x, v, \mu) = \\ = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dv' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_s(v' \rightarrow v; \mu_0) \phi(x, v', \mu') \end{aligned} \quad (1.13)$$

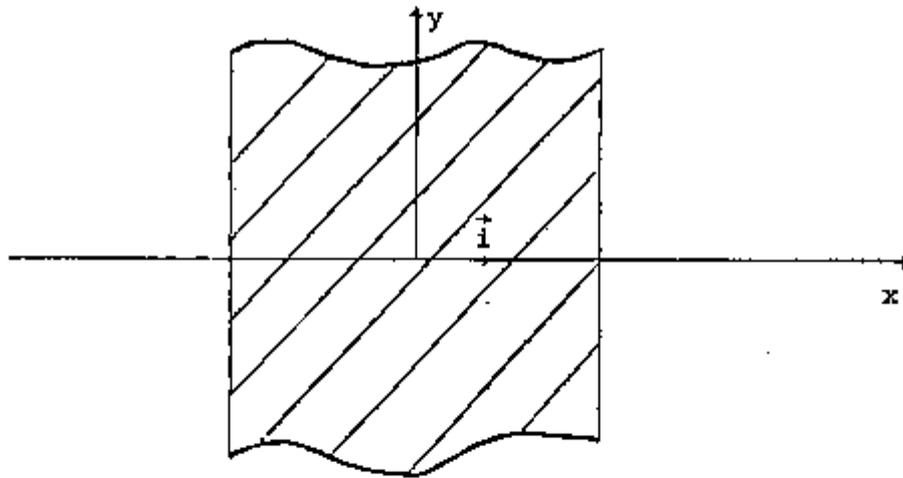
$$\text{com:} \quad \mu = \vec{\Omega} \times \vec{I} ; \mu' = \vec{\Omega}' \times \vec{I} \quad (1.14)$$

$$\mu_0 = \vec{\Omega} \times \vec{\Omega}' \quad (1.15)$$

$$\text{logo:} \quad \mu_0 = \cos \theta \quad (1.16)$$

sendo  $\theta$  o ângulo de espalhamento do neutron e  $\vec{I}$  o versor da normal às faces consideradas e orientando os eixos das coordenadas espaciais como

indicado na figura abaixo



A solução da equação (1.13) com condições adequadas de contorno (1), só foi obtida analiticamente (5-9) para certas formas bastante especiais tanto do núcleo de espalhamento  $\Sigma_S(v' \rightarrow v; \mu_0)$  como da variação de  $\Sigma(v)$  com a velocidade do neutron.

Em particular, mesmo com formas simples para  $\Sigma(v)$ , a presença do argumento  $\mu_0$  em  $\Sigma_S(v' \rightarrow v; \mu_0)$  dificulta bastante a obtenção de uma solução exata; e todas as soluções exatas das referências citadas foram obtidas para o caso de espalhamento isotrópico, ou seja, independência de  $\Sigma_S(v' \rightarrow v; \mu_0)$  de  $\mu_0$ .

A dependência de  $\mu_0$  é usualmente tratada, como já notamos, através de um desenvolvimento de  $\Sigma_S(v' \rightarrow v; \mu_0)$  em polinômios de Legendre em  $\mu_0$ .

Pondo-se

$$\Sigma_S(v' \rightarrow v; \mu_0) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \Sigma_S^{\ell}(v' \rightarrow v) P_{\ell}(\mu_0) \quad (1.17)$$

e utilizando o teorema da adição para os polinômios de Legendre:

$$P_{\ell}(\mu_0) = P_{\ell}(\mu)P_{\ell}(\mu') + 2 \sum_{m=1}^{\ell} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_{\ell}^m(\mu)P_{\ell}^m(\mu') \cos m(\phi - \phi')$$

onde  $\phi$  e  $\phi'$  são os ângulos azimutais de  $\vec{n}$  e  $\vec{n}'$ , e  $P_{\ell}^m(\mu)$  e  $P_{\ell}^m(\mu')$  são polinômios associados de Legendre, tem-se:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dv' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_S(v' \rightarrow v; \mu_0) \Phi(x, v', \mu') = \\ & = \int_0^\infty dv' \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \Sigma_S^\ell(v' \rightarrow v) \int_{-1}^{+1} d\mu' P_\ell(\mu) P_\ell(\mu') \Phi(x, v', \mu') \end{aligned} \quad (1.18)$$

pois a integral em relação a  $d\Phi'$  da somatória na expressão para  $P_\ell(\mu_0)$  é nula para os meios isotrópicos considerados.

A equação (1.13) fica portanto:

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial x} \Phi(x, v, \mu) + \Sigma(v) \Phi(x, v, \mu) = \\ & = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \int_0^\infty dv' \Sigma_S^\ell(v' \rightarrow v) P_\ell(\mu) \int_{-1}^1 d\mu' P_\ell(\mu') \Phi(x, v', \mu') \end{aligned} \quad (1.19)$$

A somatória acima é usualmente truncada, mantendo-se o primeiro termo - aproximação isotrópica - ou os dois primeiros termos - aproximação linear -.

Assim, no caso de meio homogêneo, isotrópico e espalhamento isotrópico, tem-se:

$$\Sigma_S^\ell(v' \rightarrow v) = \delta_{\ell 0} \Sigma_S^0(v' \rightarrow v) \quad (1.20)$$

e a equação (1.19) fica:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Phi(x, v, \mu) + \Sigma(v) \Phi(x, v, \mu) = \frac{1}{2} \int_0^\infty dv' \int_{-1}^1 d\mu' \Sigma_S^0(v' \rightarrow v) \Phi(x, v', \mu') \quad (1.21)$$

Para o caso de espalhamento anisotrópico linear, consideram-se os dois primeiros termos da somatória que comparece em (1.18) e obtém-se:

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial x} \Phi(x, v, \mu) + \Sigma(v) \Phi(x, v, \mu) = \frac{1}{2} \int_0^\infty dv' \int_{-1}^1 d\mu' \Sigma_S^0(v' \rightarrow v) \Phi(x, v', \mu') + \\ & + \frac{3}{2} \mu \int_0^\infty dv' \int_{-1}^1 d\mu' \mu' \Sigma_S^1(v' \rightarrow v) \Phi(x, v', \mu') \end{aligned} \quad (1.22)$$

A dependência energética tanto de  $\Phi(x, v, \mu)$  como das diversas secções de choque, foi considerada até agora através da velocidade escalar relativa  $v$  dos neutrons.

Nesta tese, entretanto, trabalharemos com a energia cinética do movimento relativo dos neutrons,  $E$ . A mudança de variável necessária para passar da variável  $v$  para a variável  $E$  é trivial, bastando apenas notar, no caso do núcleo de espalhamento, que se deve ter:

$$E_S^k(v' + v) dv = E_S^k(E' + E) dE.$$

Obtêm-se, assim, as seguintes equações correspondentes a (1.19), (1.21) e (1.22):

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Phi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \Phi(x, E, \mu) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} \int_0^{\infty} dE' \Sigma_S^k(E' + E) P_k(\mu) \int_{-1}^{+1} d\mu' P_k(\mu') \Phi(x, E', \mu') \quad (1.23)$$

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Phi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \Phi(x, E, \mu) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE' \int_{-1}^{+1} d\mu' \Sigma_S^0(E' + E) \Phi(x, E', \mu') \quad (1.24)$$

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \Phi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \Phi(x, E, \mu) = & \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dE' \int_{-1}^{+1} d\mu' \Sigma_S^0(E' + E) \Phi(x, E', \mu') + \\ & + \frac{3}{2} \int_0^{\infty} dE' \int_{-1}^{+1} d\mu' \mu' \Sigma_S^1(E' + E) \Phi(x, E', \mu'). \end{aligned} \quad (1.25)$$

Finalmente, uma observação sobre o termo de fonte externa, que foi omitido na passagem de (1.12) para (1.13): notemos que a forma de tal termo é característica de cada problema e, em geral, a solução completa de um problema específico exigirá a determinação direta de uma solução particular da equação inhomogênea, ou seja, de (1.24) ou (1.25) completada com o termo de fonte adequado.

A equação básica que consideraremos com detalhe neste trabalho será a (1.24); mas esta especialização somente será feita no capítulo III.

### 1.3 - Métodos de solução da equação de Boltzmann em geometria plana, no caso poli-energético e espalhamento isotrópico

Na equação (1.19) aplicada a problemas de termalização, no caso geral, tem-se, tanto para  $\Sigma(v)$  como para  $\Sigma_g^0(v' \rightarrow v)$  funções bastante complexas. De fato, mesmo se se considerar uma situação ideal em que as seções microscópicas de choque são constantes, as formas para  $\Sigma(v)$  e  $\Sigma_g^0(v' \rightarrow v)$  são matematicamente complexas. Esta complexidade é introduzida pela consideração do movimento das partículas (átomos ou moléculas) do meio (10-12).

Em consequência, a consideração de formas realistas para  $\Sigma(v)$  e para  $\Sigma_g^0(v' \rightarrow v)$  torna praticamente impossível se obter soluções exatas para a equação homogênea (1.24); e com maior razão para a equação geral (1.23).

A utilização de métodos aproximados é, portanto, imperativa.

Os métodos aproximados podem ser classificados nas seguintes categorias:

- a) métodos polinomiais
- b) métodos variacionais
- c) métodos de multi-grupo

Nos métodos polinomiais, (13-17) as dependências de  $v$  e de  $\mu$  de  $\Phi(x, v, \mu)$  de  $\Sigma(v)$  e de  $\Sigma_g^0(v' \rightarrow v)$  são expressas através de expansões em polinômios ortogonais convenientes. Truncamentos das séries consideradas, tanto no desenvolvimento energético como no angular, fornecem sistemas finitos de equações algébricas acopladas cuja solução não oferece dificuldade especial, mesmo em computadores de porte razoável.

É claro que, com a consideração de um número finito de termos das séries, introduzimos aproximações cujos efeitos são matematicamente difíceis de serem analisados. No entanto, considerações físicas, muitas vezes, permitem ter-se razoável certeza de que, em uma dada ordem de aproximação, as soluções aproximadas devem descrever com precisão aceitável o comportamento do sistema físico considerado. O método que exporemos nesta tese se enquadra nesta categoria.

Nos métodos variacionais (14, 18-20) são construídos funcionais que são estacionários em relação a afastamentos do fluxo de neutrons de

seu valor correto. Na maioria dos casos, estes métodos têm sido utilizados para cálculo de determinadas grandezas físicas associadas a um dado problema e não para a obtenção de soluções analíticas aproximadas que descrevam a dependência espacial, energética e angular do fluxo de neutrons.

São métodos poderosos, que se prestam bem a processos de iteração, e que, desde que os funcionais adequados sejam encontrados, permitem obter resultados com alta precisão.

A extensão dos diversos métodos variacionais para casos gerais, apresenta dificuldades, de onde decorre que suas aplicações mais importantes são sempre a problemas específicos.

Finalmente, nos métodos de multi-grupo<sup>(1)</sup> o intervalo de energia no qual a solução da equação (1.24) é procurada, é dividido em um certo número de sub-intervalos. Em cada sub-intervalo, a utilização de valores médios adequados para as secções de choque permite se obter um sistema de equações integro-diferenciais acopladas. A estrutura do sistema é tal que sua solução pode ser obtida utilizando cálculo digital eletrônico. É um método extensivamente usado, tendo sido aplicado mesmo a casos bi e tridimensionais. O número de sub-intervalos considerados depende da precisão, ou melhor, do detalhe, especialmente em energia, que se deseja para a solução e do tipo de variação com a energia das secções de choque que comparecem na equação básica<sup>(1)</sup>. Grandes computadores são geralmente necessários, os tempos de cálculo são longos e, mais importante, dificilmente os aspectos físicos dos problemas considerados podem ser analisados a partir das soluções numéricas obtidas.

#### 1.4 - Finalidade deste trabalho

A motivação básica para se obter, de uma maneira tão completa quanto possível, soluções gerais da equação de transporte em geometria plana, utilizando consistentemente expansão em polinômios energéticos e angulares, método que indicaremos por PEA: polinomial energético-angular, repousa essencialmente nos seguintes fatos:

a) Na denominada zona de energia de termalização, o conhecimento do espectro energético e espacial dos neutrons é da maior importância, tanto para uma análise e compreensão mais completa das experiências quanto para os cálculos precisos exigidos no projeto de reatores nucleares. O método que tem sido quase que exclusivamente utilizado para esta determinação do espectro dos neutrons é o de "multi-grupo"<sup>(1)</sup>.

Este método, extremamente poderoso como já notamos, não fornece soluções analíticas gerais, não se prestando assim, facilmente, à análise de influência relativa dos diversos processos físicos responsáveis pelas características de uma determinada solução.

Por outro lado, o método polinomial, em geral, permite a obtenção de soluções analíticas numa dada ordem de aproximação e, dentro do formalismo que desenvolveremos, permite, em princípio, a obtenção da parte denominada assintótica de soluções exatas quanto à dependência angular, através de um processo de passagem ao limite.

b) A obtenção de soluções aproximadas em geometria plana, através do método PEA, à primeira vista não teria sentido desde que, em trabalhos recentes Ferziger e Leonard<sup>(21)</sup> obtiveram soluções exatas na dependência angular, para a mesma geometria. No entanto, duas observações se impõem:

I: o método PEA apresenta boas perspectivas de poder ser estendido a outras geometrias, em especial a geometrias cilíndricas, da maior importância nos projetos de reatores nucleares, o que não parece ser possível com o método de Ferziger e Leonard;

II: a aplicação das soluções exatas de Ferziger e Leonard a problemas concretos<sup>(22)</sup>, não é fácil; de fato, a imposição de condições de contorno, mesmo em problemas simples com geometria plana, torna necessário resolver um sistema de equações integrais do tipo de Fredholm. No método PEA, as condições de contorno correspondentes são satisfeitas através da solução de um sistema de equações algébricas lineares.

Parce-nos assim, que o estudo sistemático do método PEA encontra ampla justificativa, sendo nossa intenção explorar suas aplicações a vários problemas de interesse de Física de Reatores. Pretendemos, em

particular, concentrar nossos esforços na extensão do método a geometrias cilíndricas, dada a importância prática dos problemas aí encontrados.

### 1.5 - Estrutura da Tese

A estrutura desta tese, baseada fundamentalmente na aplicação de um método polinomial para o tratamento da dependência energética, e no das esféricas harmônicas para o da dependência angular, é a seguinte.

No capítulo II, utilizando desenvolvimentos em séries de polinômios da energia e angulares - método PEA -, colocaremos a equação homogênea (1.23) em uma forma adequada para os tratamentos que serão apresentados nos capítulos subsequentes.

No capítulo III, obteremos uma solução geral, numa dada ordem de aproximação, do conjunto básico de equações desenvolvido no capítulo II, na aproximação de espalhamento isotrópico.

No capítulo IV, analisaremos o comportamento da solução geral, aproximada, para espalhamento isotrópico, (obtida no capítulo III) quando a ordem de aproximação em esféricas harmônicas tende para o infinito, comparando-a com os resultados de Ferziger e Leonard, que são exatos quanto às dependências angular e espacial.

No capítulo V, apresentaremos algumas observações e conclusões sobre o método PEA; em especial serão citados alguns problemas deixados em aberto, bem como faremos algumas conjecturas sobre o campo de aplicação do método que desenvolveremos.

No apêndice A-1 apresentaremos um resumo dos trabalhos fundamentais de Ferziger e Leonard, especialmente o da referência<sup>(22)</sup>, visando facilitar a compreensão das comparações apresentadas no capítulo IV. E, no apêndice A-2, será demonstrado que, para uma classe de problemas físicos, são reais os auto-valores  $v_s$  introduzidos no capítulo II.

particular, concentrar nossos esforços na extensão do método a geometrias cilíndricas, dada a importância prática dos problemas aí encontrados.

### 1.5 - Estrutura da Tese

A estrutura desta tese, baseada fundamentalmente na aplicação de um método polinomial para o tratamento da dependência energética, e no das esféricas harmônicas para o da dependência angular, é a seguinte.

No capítulo II, utilizando desenvolvimentos em séries de polinômios da energia e angulares - método PEA -, colocaremos a equação homogênea (1.23) em uma forma adequada para os tratamentos que serão apresentados nos capítulos subsequentes.

No capítulo III, obteremos uma solução geral, numa dada ordem de aproximação, do conjunto básico de equações desenvolvido no capítulo II, na aproximação de espalhamento isotrópico.

No capítulo IV, analisaremos o comportamento da solução geral, aproximada, para espalhamento isotrópico, (obtida no capítulo III) quando a ordem de aproximação em esféricas harmônicas tende para o infinito, comparando-a com os resultados de Ferziger e Leonard, que são exatos quanto às dependências angular e espacial.

No capítulo V, apresentaremos algumas observações e conclusões sobre o método PEA; em especial serão citados alguns problemas deixados em aberto, bem como faremos algumas conjecturas sobre o campo de aplicação do método que desenvolveremos.

No apêndice A-1 apresentaremos um resumo dos trabalhos fundamentais de Ferziger e Leonard, especialmente o da referência<sup>(22)</sup>, visando facilitar a compreensão das comparações apresentadas no capítulo IV. E, no apêndice A-2, será demonstrado que, para uma classe de problemas físicos, são reais os auto-valores  $v_s$  introduzidos no capítulo II.

CAPÍTULO II

O MÉTODO PEA: POLINOMIAL ENERGÉTICO E ANGULAR

2.1 - O método polinomial para a dependência energética

Consideramos a equação homogênea (1.23) para geometria plana, meio isotrópico com núcleo de espalhamento genérico:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \phi(x, E, \mu) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \int_0^{\infty} dE' \Sigma_S^{\ell}(E' \rightarrow E) P_{\ell}(\mu) \int_{-1}^{+1} d\mu' P_{\ell}(\mu') \phi(x, E', \mu') \quad (2.1)$$

Para aplicar o método polinomial para a dependência energética, é conveniente, como justificaremos no capítulo III, simetrizar antes os núcleos de espalhamento  $\Sigma_S^{\ell}(E' \rightarrow E)$ ; e, para facilitar a análise matemática, tomaremos o valor mínimo de  $1/\Sigma(E)$  como unidade de comprimento, tornando adimensionais as seções de choque em (2.1).

Considerando o núcleo de espalhamento  $\Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0)$ , pode-se demonstrar <sup>(25)</sup> que é necessário se ter para todo núcleo de espalhamento fisicamente aceitável:

$$M(E') \Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0) = M(E) \Sigma_S(E \rightarrow E'; \mu_0) \quad (2.2)$$

onde  $M(E) = E e^{-E}$ ; E = energia em unidades kT, com T a temperatura absoluta do meio e k a constante de Boltzmann (2.3)

Esta igualdade, que decorre do princípio de balanço detalhado, <sup>(24,25)</sup> assegura que, num meio infinito, sem absorção, é possível se estabelecer uma distribuição maxwelliana de equilíbrio à temperatura T.

Introduzamos uma função  $\Psi(x, E, \mu)$  tal que:

$$\phi(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} \cdot \Psi(x, E, \mu) \quad (2.4)$$

A equação (1.13) após passar da variável  $v$  para a variável  $E$ , nos fornece:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \phi(x, E, \mu) &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0) \phi(x, E', \mu') \end{aligned} \quad (2.5)$$

Levando (2.4) em (2.5) e dividindo ambos os membros por  $\sqrt{M(E)}$ :

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \Psi(x, E, \mu) &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dE' \int_{4\pi} d\Omega' \sqrt{\frac{M(E')}{M(E)}} \cdot \Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0) \Psi(x, E', \mu') \end{aligned} \quad (2.6)$$

ou ainda:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \Psi(x, E, \mu) &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dE' \int_{-1}^{+1} d\mu' \int_0^{2\pi} d\phi' \sqrt{\frac{M(E')}{M(E)}} \cdot \Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0) \Psi(x, E', \mu') \end{aligned} \quad (2.7)$$

É fácil se ver que o novo núcleo de espalhamento

$$\Sigma_{SS}(E' \rightarrow E; \mu_0) = \sqrt{\frac{M(E')}{M(E)}} \cdot \Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0) \quad (2.8)$$

será simétrico se  $\Sigma_S(E' \rightarrow E; \mu_0)$  satisfizer (2.2)

Desenvolvendo  $\Sigma_{SS}(E' \rightarrow E; \mu_0)$  em série de polinômios de Legendre em  $\mu_0$ , utilizando o teorema da adição, obtemos de (2.7) a equação seguinte, correspondente a (1.23)

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, E, \mu) + \Sigma(E) \Psi(x, E, \mu) &= \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{SS}^l(E' \rightarrow E) P_l(\mu) \int_{-1}^{+1} d\mu' P_l(\mu') \Psi(x, E', \mu') \end{aligned} \quad (2.9)$$

com  $\Sigma_{SS}^{\ell}(E' \rightarrow E)$  núcleos simétricos satisfazendo a:

$$\Sigma_{SS}^{\ell}(E' \rightarrow E) = \Sigma_{SS}^{\ell}(E \rightarrow E') \quad (2.10)$$

É útil notar que a expressão para o fluxo  $\Phi(x, E, \mu)$  será obtida, a partir de  $\Psi(x, E, \mu)$ , utilizando a (2.4).

Consideremos agora um conjunto completo e ortonormal de polinômios na energia,  $g_j(E)$ :

$$\int_0^{\infty} dE g_j(E) g_k(E) = \delta_{jk} \quad (2.11)$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} g_j(E) g_j(E') = \delta(E - E') \quad (2.12)$$

Desenvolvendo  $\Psi(x, E, \mu)$  em série de polinômios  $g_j(E)$ :

$$\Psi(x, E, \mu) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j(x, \mu) g_j(E) \quad (2.13)$$

levando em (2.9), multiplicando ambos os membros por  $g_k(E)$  e integrando em relação a  $E$  entre 0 e  $\infty$ , obtemos, utilizando (2.11):

$$\sum_{j=0}^{\infty} \delta_{jk} \mu \frac{\partial}{\partial x} f_j(x, \mu) + \sum_{j=0}^{\infty} f_j(x, \mu) \int_0^{\infty} dE g_k(E) \Sigma(E) g_j(E) =$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dE g_k(E) \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{SS}^{\ell}(E' \rightarrow E) g_j(E') \cdot P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') f_j(x, \mu') \frac{d\mu'}{\mu'} \quad (2.14)$$

Podemos:

$$V_{kj} = \int_0^{\infty} dE g_k(E) \Sigma(E) g_j(E) \quad (2.15)$$

$$\alpha_{kj}^{\ell} = \int_0^{\infty} dE \int_0^{\infty} dE' g_k(E) \Sigma_{SS}^{\ell}(E' \rightarrow E) g_j(E'), \quad (2.16)$$

vê-se logo que:

$$V_{kj} = V_{jk} \quad (2.17)$$

com  $\Sigma_{SS}^l(E' \rightarrow E)$  núcleos simétricos satisfazendo a:

$$\Sigma_{SS}^l(E' \rightarrow E) = \Sigma_{SS}^l(E \rightarrow E') \quad (2.10)$$

É útil notar que a expressão para o fluxo  $\Phi(x, E, \mu)$  será obtida, a partir de  $\Psi(x, E, \mu)$ , utilizando a (2.4).

Consideremos agora um conjunto completo e ortonormal de polinômios na energia,  $g_j(E)$ :

$$\int_0^\infty dE g_j(E) g_k(E) = \delta_{jk} \quad (2.11)$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} \int_0^\infty dE g_j(E) g_j(E') = \delta(E - E') \quad (2.12)$$

Desenvolvendo  $\Psi(x, E, \mu)$  em série de polinômios  $g_j(E)$ :

$$\Psi(x, E, \mu) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j(x, \mu) g_j(E) \quad (2.13)$$

levando em (2.9), multiplicando ambos os membros por  $g_k(E)$  e integrando em relação a  $E$  entre 0 e  $\infty$ , obtemos, utilizando (2.11):

$$\sum_{j=0}^{\infty} \mu \frac{\partial}{\partial x} f_j(x, \mu) + \sum_{j=0}^{\infty} f_j(x, \mu) \int_0^\infty dE g_k(E) E(E) g_j(E) =$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \int_0^\infty dE g_k(E) \int_0^\infty dE' \Sigma_{SS}^l(E' \rightarrow E) g_j(E'). P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') f_j(x, \mu') \quad (2.14)$$

Pondo:

$$V_{kj} = \int_0^\infty dE g_k(E) E(E) g_j(E) \quad (2.15)$$

$$\alpha_{kj}^l = \int_0^\infty dE \int_0^\infty dE' g_k(E) \Sigma_{SS}^l(E' \rightarrow E) g_j(E'), \quad (2.16)$$

vê-se logo que:

$$V_{kj} = V_{jk} \quad (2.17)$$

e

$$\alpha_{kj}^{\lambda} = \alpha_{jk}^{\lambda} \quad (2.18)$$

A igualdade (2.17) é óbvia, enquanto que a (2.18) decorre do caráter simétrico de  $\Sigma_{ss}^{\lambda}(E' \rightarrow E)$ .

A (2.14) se escreve, utilizando (2.15) e (2.16)

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{\infty} \mu \frac{\partial}{\partial x} f_j(x, \mu) \delta_{jk} + \sum_{j=0}^{\infty} v_{kj} f_j(x, \mu) = \\ & = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \int_{-1}^1 d\mu' P_{\ell}(\mu') \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_{kj}^{\lambda} f_j(x, \mu') \end{aligned} \quad (2.19)$$

Se agora truncarmos o desenvolvimento (2.13), mantendo somente os primeiros (L+1) termos, obteremos uma aproximação para a dependência energética de  $\Psi(x, E, \mu)$ , aproximação esta que denominaremos "aproximação de ordem L".

No momento, tal truncamento é arbitrário. Mas, em problemas específicos, há, às vezes, argumentos físicos que nos levam a esperar que um valor razoavelmente pequeno para L forneça soluções que descrevam com boa aproximação os fenômenos físicos reais.

Na aproximação de ordem L, a (2.19) fica:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^L \mu \frac{\partial}{\partial x} f_j(x, \mu) \delta_{jk} + \sum_{j=0}^L v_{kj} f_j(x, \mu) = \\ & = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \int_{-1}^1 d\mu' P_{\ell}(\mu') \sum_{j=0}^L \alpha_{kj}^{\lambda} f_j(x, \mu'), \end{aligned} \quad (2.20)$$

com  $k = 0, 1, \dots, L$ .

Finalmente, definindo as seguintes matrizes:

$[V]$  → matriz quadrada, de ordem (L+1), simétrica, de elementos  $v_{kj}$ ;

$(\alpha^k)$  + matriz quadrada, de ordem  $(L+1)$ , simétrica, de elementos  $\alpha_{kj}^k$ ;

$(I)$  → matriz identidade, de ordem  $(L+1)$  de elementos  $\delta_{kj}$ ;  
e um vetor (matriz de uma coluna)

$|f(x,\mu)\rangle$  → vetor (matriz coluna) de ordem  $(L+1)$  de elementos  $f_j(x,\mu)$ , podemos escrever a (2.20) sob a forma matricial seguinte:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} |f(x,\mu)\rangle + (V) |f(x,\mu)\rangle &= \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{2} P_k(\mu) \int_{-1}^1 d\mu' P_k(\mu') (\alpha^k) |f(x,\mu')\rangle \end{aligned} \quad (2.21)$$

A utilização do desenvolvimento em polinômios da energia permitiu-nos, assim, substituir a equação íntegro-diferencial (2.9) pelo sistema (2.21) de  $(L+1)$  equações, ainda íntegro-diferenciais, mas já independentes da energia.

Notemos desde já que a presença das matrizes não diagonais  $(V)$  e  $(\alpha^k)$  acopla as diversas componentes do vetor  $|f(x,\mu)\rangle$ . E, certamente, a obtenção de soluções para (2.21) será facilitada se um desacoplamento total ou parcial for conseguido; e se o sistema de equações íntegro-diferenciais puder ser transformado em um sistema de equações algébricas. Para o caso de espalhamento isotrópico, a (2.21) foi considerada por Ferziger e Leonard<sup>(21)</sup> que obtiveram uma solução exata numa dada ordem de aproximação energética. No apêndice A-1 apresentamos um resumo dos trabalhos fundamentais daqueles autores, pelas razões já indicadas nos itens 1.4 e 1.5.

## 2.2 - O método das esféricas harmônicas (polinômios angulares)

A transformação do sistema íntegro-diferencial (2.21) em um sistema de equações diferenciais, pode ser conseguido utilizando-se um

desenvolvimento de  $f_j(x, \mu)$  em uma s\u00e9rie de polin\u00f4mios de Legendre na vari\u00e1vel angular:

$$f_j(x, \mu) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{2} A_j^m(x) P_m(\mu) \quad (2.22)$$

ou

$$|f(x, \mu)\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{2} P_m(\mu) |A^m(x)\rangle \quad (2.23)$$

onde cada  $|A^m(x)\rangle$  ( $m=0, 1, 2, \dots, \infty$ ) \u00e9 uma matriz coluna de  $(L+1)$  elementos  $A_j^m(x)$  e os polin\u00f4mios de Legendre s\u00e3o normalizados de modo que:

$$\int_{-1}^1 P_n(\mu) P_m(\mu) d\mu = \frac{2}{2n+1} \delta_{nm} \quad (2.24)$$

Levando (2.23) em (2.21), multiplicando ambos os membros por  $P_n(\mu)$  e integrando em rela\u00e7\u00e3o a  $\mu$ , obtemos:

$$\begin{aligned} & \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} |A^m(x)\rangle \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_n(\mu) \cdot \mu \cdot P_m(\mu) d\mu + \\ & + \sum_{m=0}^{\infty} \langle V \rangle |A^m(x)\rangle \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_n(\mu) P_m(\mu) d\mu = \\ = & \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \langle \alpha^\ell \rangle |A^m(x)\rangle \frac{2\ell+1}{2} \cdot \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 d\mu P_n(\mu) P_\ell(\mu) \int_{-1}^1 d\mu' P_\ell(\mu') P_m(\mu') \quad (2.25) \end{aligned}$$

Utilizando (2.24), o segundo membro de (2.25) se escreve:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \langle \alpha^\ell \rangle |A^m(x)\rangle \delta_{\ell n} \delta_{\ell m} = \langle \alpha^n \rangle |A^n(x)\rangle \quad (2.26)$$

O primeiro membro ser\u00e1 simplificado utilizando ainda (2.24) e a rela\u00e7\u00e3o de recorr\u00eancia entre os polin\u00f4mios de Legendre:

$$(n+1)P_{n+1}(\mu) + nP_{n-1}(\mu) = (2n+1)\mu P_n(\mu). \quad (2.27)$$

Obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_n(\mu) \cdot \mu \cdot P_m(\mu) d\mu &= \frac{2m+1}{2} \cdot \frac{1}{2n+1} \left[ (n+1) \int_{-1}^1 P_{n+1}(\mu) P_m(\mu) d\mu + \right. \\ &\left. + n \int_{-1}^1 P_{n-1}(\mu) P_m(\mu) d\mu \right] \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_n(\mu) \mu P_m(\mu) d\mu = \frac{1}{2n+1} \left[ (n+1) \delta_{n+1,m} + n \delta_{n-1,m} \right] \quad (2.29)$$

$$\frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_n(\mu) P_m(\mu) d\mu = \delta_{n,m} \quad (2.30)$$

A (2.25) se escreve então:

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} |A^m(x)\rangle &= \frac{1}{2n+1} \left[ (n+1) \delta_{n+1,m} + n \delta_{n-1,m} \right] + \\ + \sum_{m=0}^{\infty} (V) |A^m(x)\rangle &= \delta_{n,m} = (q^n) |A^n(x)\rangle; \quad (n=0,1,\dots,\infty) \end{aligned} \quad (2.31)$$

o resulta o seguinte sistema de um número infinito de equações diferenciais acopladas, equivalente ao sistema de equações íntegro-diferenciais (2.21):

$$\begin{aligned} (n+1) \frac{\partial}{\partial x} |A^{n+1}(x)\rangle + n \frac{\partial}{\partial x} |A^{n-1}(x)\rangle + (2n+1) (V) |A^n(x)\rangle = \\ = (2n+1) (q^n) |A^n(x)\rangle; \quad (n=0,1,\dots,\infty), \end{aligned} \quad (2.32)$$

Por analogia com o que se faz no método das esféricas harmônicas no caso mono-energético<sup>(1)</sup>, substituímos agora, na denominada aproximação de ordem N, o sistema (2.32), com um número infinito de equações,

<sup>(1)</sup> p. 22

por um sistema obtido mantendo as (N+1) primeiras equações de (2.32) e ao mesmo tempo ignorando tanto os  $|A^n(x)\rangle$  para os quais  $n > N$  como as demais equações.

Obtemos, assim:

$$\left. \begin{aligned} (n+1) \frac{\partial}{\partial x} |A^{n+1}(x)\rangle + n \frac{\partial}{\partial x} |A^{n-1}(x)\rangle + (2n+1) \{V\} |A^n(x)\rangle = \\ = (2n+1) \{\alpha^n\} |A^n(x)\rangle \quad (n=0,1,\dots,N-1); \\ N \frac{\partial}{\partial x} |A^{N-1}(x)\rangle + (2N+1) \{V\} |A^N(x)\rangle = (2N+1) \{\alpha^N\} |A^N(x)\rangle \end{aligned} \right\} \quad (2.33)$$

Finalmente, considerando a invariância translacional do sistema, ponhamos, tentativamente:

$$|A^n(x)\rangle = e^{-x/v} |A^n(v)\rangle. \quad (2.34)$$

O sistema (2.33) fornece imediatamente, o seguinte sistema básico de equações matriciais algébricas:

$$\left. \begin{aligned} (n+1) |A^{n+1}(v)\rangle + n |A^{n-1}(v)\rangle - (2n+1)v \{V\} |A^n(v)\rangle = \\ = -v(2n+1) \{\alpha^n\} |A^n(v)\rangle; \quad (n=0,1,\dots,N-1); \\ N |A^{N-1}(v)\rangle - (2N+1)v \{V\} |A^N(v)\rangle = -v(2N+1) \{\alpha^N\} |A^N(v)\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (2.35)$$

O desenvolvimento sucessivo da dependência energética em uma série de polinômios de Legendre  $P_m(\mu)$  truncada com (N+1) termos, juntamente com o ansatz (2.34), forneceu-nos, assim, o sistema homogêneo (2.35) de (N+1) equações matriciais algébricas, acopladas pela matriz  $\{V\}$  e pelas (N+1) matrizes  $\{\alpha^n\}$ .

O sistema (2.35) tem, agora, uma estrutura análoga à do encon-

trado quando se aplica, para obter a solução de (2.1), o método de multi-grupo energético associado ao das esféricas harmônicas, ou seja, a denominada "aproximação de multi-grupo -  $P_N$ " (26).

Formalmente, a solução do sistema (2.35) pode ser obtida; mas a presença das matrizes não diagonais  $(V)$  e  $(\alpha^n)$  tem duas consequências importantes. A primeira se refere à ordem do sistema obtido, para cuja solução será necessário se determinar as raízes de um determinante de ordem  $(L+1)(N+1)$ . Assim, devemos calcular  $\{(L+1)(N+1)\}^2$  elementos e armazená-los na memória de um computador.

Como exemplo, tomemos a aproximação  $L=4, N=4$ ; o número de elementos será 625; e na aproximação  $L=4, N=9$  tal número já seria 2500, com dificuldades computacionais importantes.

Situação análoga se apresenta no método de multi-grupo- $P_N$ , mas um desacoplamento parcial é obtido ao caráter diagonal da matriz correspondente à  $(V)$  do sistema (2.35).

A segunda consequência importante da não diagonalização de  $(V)$  e  $(\alpha^n)$  é que a solução formal que se obtém é tal que a análise da passagem ao limite quando  $N \rightarrow \infty$  é extremamente difícil de ser feita.

Estas dificuldades foram, até agora, impecilhos sérios na exploração ampla do método PEA. E, como foi indicado, a raiz de tais dificuldades reside principalmente no caráter não diagonal das matrizes  $(V)$  e  $(\alpha^n)$ .

A parte central desta tese repousa no reconhecimento desta situação; e na remoção das dificuldades apontadas através do emprego de uma transformação de similitude que diagonaliza  $(V)$ , transformação esta introduzida por Ferziger e Leonard em seus trabalhos básicos já citados (21) (vide Apêndice A-1). Em particular, após tal transformação, a estrutura do sistema obtido a partir de (2.35), tornar-se-á idêntica à do que comparece no método multi-grupo- $P_N$  (26,27).

A diagonalização simultânea de  $(V)$  e das  $(\alpha^n)$ , preservando ainda as matrizes diagonais identidade  $(I)$  que comparecem em (2.35), não é possível. A escolha da diagonalização de  $(V)$  é óbvia, pois, no caso geral, há  $(N+1)$  matrizes  $(\alpha^n)$  e só seria possível diagonalizar uma delas,

mantendo as  $\{I\}$  como tais.

Sendo  $\{V\}$  uma matriz simétrica, existirá uma matriz ortogonal  $\{S\}$  tal que a transformação de similitude

$$\{S\}^{-1} \{V\} \{S\} = \{U\} \quad (2.36)$$

fornece uma matriz  $\{U\}$  diagonal. E o caráter ortogonal de  $\{S\}$  assegura ainda que  $\{I\}$  seja preservada e que a matriz simétrica  $\{\alpha^N\}$  seja transformada, através de

$$\{S\}^{-1} \{\alpha^N\} \{S\} = \{\gamma^N\} \quad (2.37)$$

em uma matriz  $\{\gamma^N\}$  também simétrica.

Definindo novos vetores  $|B^N(v)\rangle$ , através de

$$\{S\}^{-1} |A^N(v)\rangle = |B^N(v)\rangle \quad (n=0,1,\dots,N), \quad (2.38)$$

o sistema básico (2.35) se transforma em:

$$\begin{aligned} & (n+1) |B^{n+1}(v)\rangle + n |B^{n-1}(v)\rangle - v(2n+1) \{U\} |B^n(v)\rangle = \\ & = -v(2n+1) \{\gamma^N\} |B^n(v)\rangle \quad (n=0,1,\dots,N-1) \\ & N |B^{N-1}(v)\rangle - v(2N+1) \{U\} |B^N(v)\rangle = -v(2N+1) \{\gamma^N\} |B^N(v)\rangle. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Como, agora,  $\{U\}$  é diagonal, a estrutura deste sistema é idêntica à do que comparece no método de multi-grupo- $P_N$ , estabelecendo assim uma ligação formal entre tal método e o polinomial energético associado ao das esféricas harmônicas.

No capítulo seguinte vamos apresentar, com certo detalhe, a solução de (2.39) para o caso mais simples de espalhamento isotrópico; o caso de espalhamento anisotrópico linear poderia ser tratado, sem dificuldade, utilizando um método geral, desenvolvido por Travelli <sup>(27)</sup>.

A finalidade da obtenção completa da solução aproximada de (2.39), no caso de espalhamento isotrópico, é a de compará-la com a solução obtida por Ferziger e Leonard, <sup>(21)</sup> utilizando o método polinomial truncado para a dependência energética mas tratando de maneira exata a dependência angular de  $\varphi(x, E, \mu)$ , conforme está detalhado no Apêndice A-1. Esta comparação fornecer-nos-á alguns resultados interessantes aos quais referir-nos-emos no capítulo IV.

CAPÍTULO III

SOLUÇÃO GERAL, NO MÉTODO PEA, PARA O CASO DE  
GEOMETRIA PLANA E ESPALHAMENTO ISOTRÓPICO

3.1 - Sistema básico de equações matriciais algébricas

Consideremos o sistema básico (2.39) de equações matriciais algébricas, obtido pela aplicação do método polinomial energético e de esféricas harmônicas angular - método PEA -, ao caso de geometria plana:

$$\left. \begin{aligned} (n+1) |B^{n+1}(v)\rangle + n |B^{n-1}(v)\rangle - v(2n+1) \{U\} |B^n(v)\rangle = \\ = -v(2n+1) \{\gamma^n\} |B^n(v)\rangle \quad (n=0,1,\dots,N-1); \\ N |B^{N-1}(v)\rangle - v(2N+1) \{U\} |B^N(v)\rangle = -v(2N+1) \{\gamma^N\} |B^N(v)\rangle. \end{aligned} \right\} (2.39)$$

Da equação (2.16) resulta que, se o núcleo de espalhamento for isotrópico,  $\{\alpha^l\}$  será da forma:

$$\{\alpha^l\} = \{\alpha^0\} \delta_{l0} \quad (3.1)$$

ou seja, somente as matrizes  $\{\alpha^0\}$  e  $\{\gamma^0\}$  terão elementos diferentes de zero.

O sistema (2.39) se reduz, assim, ao seguinte:

$$\left. \begin{aligned} (n+1) |B^{n+1}(v)\rangle + n |B^{n-1}(v)\rangle - v(2n+1) \{U\} |B^n(v)\rangle = \\ = -v \{\gamma^0\} |B^n(v)\rangle \delta_{n0} \quad (n=0,1,\dots,N-1); \\ N |B^{N-1}(v)\rangle - v(2N+1) \{U\} |B^N(v)\rangle = 0 \end{aligned} \right\} (3.2)$$

A isotropia do núcleo de espalhamento introduz um acoplamento

unicamente entre as componentes do vetor  $|B^0(v)\rangle$ ; as componentes dos demais vetores  $|B^n(v)\rangle$  ( $n=1,2,\dots,N$ ) não são acopladas entre si, dado o caráter diagonal da matriz  $\{U\}$  e ao fato de serem matrizes nulas as  $\{\alpha^n\}$  para  $n>0$ .

O parâmetro  $v$  - arbitrário até o momento - será determinado pela condição de o sistema homogêneo (3.2) admitir soluções não triviais. Isto é, pela condição de anulamento do determinante  $\Delta(v)$  dos coeficientes do sistema considerado.

Tal determinante será de ordem  $\{(L+1).(N+1)\}$  e da forma:

$$\Delta(v) = \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{|c|} \hline \Delta_1^L(v) & D_1^L \\ \hline \end{array} \\ \hline \end{array} \\ \hline \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{|c|} \hline D_1^L & \Delta_4^L(v) & D_2^L \\ \hline \end{array} \\ \hline \end{array} \\ \hline \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{|c|} \hline D_2^L & \Delta_2^L(v) \\ \hline \end{array} \\ \hline \end{array} \\ \hline \dots \\ \hline \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{|c|} \hline \Delta_{N-2}^L(v) & D_{N-2} \\ \hline \end{array} \\ \hline \end{array} \\ \hline \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{|c|} \hline D_{N-2}^L & \Delta_{N-1}^L(v) & D_{N-1}^L \\ \hline \end{array} \\ \hline \end{array} \\ \hline \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{|c|} \hline D_{N-1}^L & \Delta_N^L(v) \\ \hline \end{array} \\ \hline \end{array} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{c} 0 \\ \\ \\ \\ \\ \\ 0 \end{array} \end{array}$$

onde  $\Delta_1^L(v)$  e  $D_1^L$  são determinantes de ordem  $(L+1)$  definidos por:

$$\Delta_1^L(v) = \left| \left( 2L+1 \right) \left( v\gamma^L \right) - \left( vU \right) \right|$$

$$D_1^L = \left| \left( i \right) \right|$$

ou seja,  $\Delta_1^L(v)$  é o determinante da matriz quadrada  $(2i+1)((v\gamma^i) - (vU))$  e  $D_1^L$  é o determinante da matriz diagonal  $[i]$ .

As raízes da equação:

$$\Delta(v) = 0, \quad (3.3)$$

serão os  $v$  permitidos, e com êles se poderia construir a solução geral de (3.2).

Mas, tanto sob os pontos de vista computacional e de possibilidade de análise do comportamento da solução quando  $N \rightarrow \infty$ , quase nada teríamos ganho com a diagonalização de  $(V)$ . De fato, apesar de um número significativo de elementos de  $\Delta(v)$  serem nulos, continuaríamos a ter que armazenar na memória do computador  $[(L+1)(N+1)]^2$  valores; e os resultados continuariam sendo obtidos sob uma forma que dificilmente se prestaria à análise de seu comportamento quando  $N \rightarrow \infty$ .

Hã, no entanto, dois métodos de obtenção de uma solução geral para (3.2) que apresentam vantagens computacionais significativas quando comparados com o método direto acima esquematizado, e que fornecem resultados que permitem a análise do comportamento da solução e dos valores característicos quando  $N \rightarrow \infty$ . São:

- a) o método de Kofink<sup>(28)</sup>, extendido ao caso poli-energético;
- b) o método de Travelli<sup>(27)</sup>.

Notemos que a aplicabilidade eficaz de um ou outro método é decorrência da estrutura matemática do sistema (3.2) e, em particular, do caráter diagonal de  $(U)$ . Esta observação, em relação ao método de Kofink, será tornada mais clara no ítem 3.3.

Nesta tese, adotaremos, para obter a solução geral de (3.2), uma extensão, por nós desenvolvida, do método de Kofink.

Poderíamos ter adotado o método de Travelli que, sendo mais geral que o de Kofink, permite o tratamento de casos de espalhamento não isotrópico de qualquer ordem. Não o fizemos por duas razões:

1) a extensão do método de Kofink é simples, para o caso isotrópico que estamos tratando.

2) somente na fase de redação desta tese é que tomamos conhe-

cimento do trabalho completo de Travelli<sup>(27)</sup>, de difícil obtenção.

### 3.2 - Solução geral do sistema básico no caso isotrópico

O sistema básico que temos que resolver é o constituído pelas (N+1) equações matriciais (3.2).

Por analogia com o caso mono-energético consideremos um sistema matricial, ainda de (N+1) equações mas de (N+2) incógnitas, obtido de (3.2) após acrescentar, à última equação, o termo (N+1)  $|B^{N+1}(v)\rangle$  que havíamos omitido na aproximação de ordem N; ou seja, consideremos o sistema:

$$\begin{aligned} (n+1) |B^{n+1}(v)\rangle + n |B^{n-1}(v)\rangle - v(2n+1) (U) |B^n(v)\rangle = \\ = -v(\gamma^0) |B^n(v)\rangle \cdot \delta_{n0}, \text{ para } n=0,1,\dots,N-1,N. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Notemos que se

$$|B^{N+1}(v)\rangle = 0 \quad (3.5)$$

o sistema (3.4) se torna idêntico ao (3.2).

Se pudermos efetivamente construir, sem restrição sobre  $v$ , uma solução não trivial para (3.4), então a equação (3.5) determinará os  $v$  para os quais o sistema original (3.2) admite soluções não triviais. A condição (3.5) será, assim, equivalente à equação (3.3), em estreita analogia com o caso mono-energético.

Para construir uma solução não trivial para o sistema (3.4) adotaremos, como já explicamos, uma extensão do método de Kofink desenvolvido para o caso mono-energético.

Para isso, consideremos os polinômios de Legendre de primeira espécie  $P_n(x)$  e as funções de Legendre de segunda espécie  $Q_n(x)$ <sup>(29)</sup>. Ambos satisfazem à seguinte relação de recorrência:

$$(n+1)K_{n+1}(x) + nK_{n-1}(x) - (2n+1)xK_n(x) = 0 \quad (3.6)$$

onde  $K_n(x)$  indica  $P_n(x)$  ou  $Q_n(x)$ . Notemos que esta relação de recorrência tem uma estrutura similar à satisfeita pelas componentes do vetor  $|B^n(v)\rangle$ , para  $n=1,2 \dots N$ .

Consideremos ainda os polinômios  $W_n(x)$  constituídos pela parte não singular das  $Q_n(x)$ . A relação entre  $W_n(x)$ ,  $P_n(x)$  e  $Q_n(x)$  é <sup>(29)</sup>:

$$W_{n-1}(x) = P_n(x)Q_0(x) - Q_n(x) \quad (3.7)$$

com

$$W_{-1}(x) = 0 \quad (3.8)$$

Os polinômios  $W_n(x)$  satisfazem a seguinte relação de recorrência

$$(n+1)W_n(x) + nW_{n-2}(x) - (2n+1)x W_{n-1}(x) = 0 \quad (3.9)$$

consequência imediata de (3.7) e (3.6).

Notemos, inicialmente, que, para  $n=1,2 \dots N$ , o sistema (3.4) é identicamente satisfeito por um  $|B^n(v)\rangle$  da forma:

$$|B^n(v)\rangle = P_n(\{vU\})|A\rangle - W_{n-1}(\{vU\})|B\rangle \quad (3.10)$$

com  $|A\rangle$  e  $|B\rangle$  vetores arbitrários independentes de  $n$ , de  $v$  ou dos elementos de  $\{U\}$ .

A presença da matriz  $\{vU\}$  como argumento dos polinômios em (3.10) não introduz dificuldade alguma e a execução, em álgebra matricial, das operações aí indicadas formalmente, também é perfeitamente unívoca. Poderá, é verdade, haver eventuais dificuldades com operações matriciais se considerarmos a definição (3.7) de  $W_{n-1}(x)$ .

Para evitar estas eventuais dificuldades podemos considerar os  $W_n(x)$  definidos a partir de:

$$\left. \begin{aligned}
 W_{n-1}(x) &= \sum_{m=1}^n \frac{1}{m} P_{m-1}(x) P_{n-m}(x) && \text{para } n \geq 1 \\
 W_{-1}(x) &= 0 && \text{para } n=0
 \end{aligned} \right\} (3.11)$$

definição esta que é equivalente à (3.7)<sup>(29)</sup> para x número real.

Levando (3.10) no sistema (3.4), teremos como consequência de (3.6) e (3.9) para  $n=2,3 \dots N-1,N$ :

$$\begin{aligned}
 & \left[ (n+1)P_{n+1}(\{vU\}) |A\rangle + nP_{n-1}(\{vU\}) |A\rangle - (2n+1)\{vU\}P_n(\{vU\}) |A\rangle \right] - \\
 & - \left[ (n+1)W_n(\{vU\}) |B\rangle + nW_{n-2}(\{vU\}) |B\rangle - (2n+1)\{vU\}W_{n-1}(\{vU\}) |B\rangle \right] = 0 \quad (3.12)
 \end{aligned}$$

A arbitrariedade de escolha de  $|A\rangle$  e  $|B\rangle$  será utilizada para que (3.10) satisfaça a (3.4) para  $n=0$  e para  $n=1$ .

De (3.4) e (3.10) obtemos, para  $n=0$ :

$$\begin{aligned}
 & P_1(\{vU\}) |A\rangle - [\{vU\} + \{vU^0\}] P_0(\{vU\}) |A\rangle + \\
 & + W_0(\{vU\}) |B\rangle - [\{vU\} + \{vU^0\}] W_{-1}(\{vU\}) |B\rangle = 0 \quad (3.13)
 \end{aligned}$$

Ou como:

$$\begin{aligned}
 P_1(\{vU\}) &= \{vU\} \\
 P_0(\{vU\}) &= \{I\} \\
 W_{-1}(\{vU\}) &= 0 \\
 W_0(\{vU\}) &= \{I\}
 \end{aligned} \quad (3.14)$$

a (3.13) fica:

$$v(U) |A\rangle - \left[ (vU) + (v\gamma^0) \right] |A\rangle + |B\rangle = 0 \quad (3.15)$$

$$|B\rangle = v(\gamma^0) |A\rangle \quad (3.16)$$

Considerando a equação para  $n=1$ , do sistema (3.4) e utilizando a (3.10)

$$\begin{aligned} & \left[ 2P_2((vU)) |A\rangle + P_0((vU)) |A\rangle - 3(vU)P_1((vU)) |A\rangle \right] - \\ & - \left[ 2W_1((vU)) |B\rangle - W_{-1}((vU)) |B\rangle - 3(vU)W_0((vU)) |B\rangle \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

As relações de recorrência (3.6) e (3.9) satisfeitas por  $P_n(x)$  e  $W_n(x)$  asseguram que (3.17) será identicamente satisfeita. Assim, um dos vetores,  $|A\rangle$  por exemplo, é arbitrário, enquanto que o segundo  $|B\rangle$  é determinado por (3.16).

Fica, assim, provado que:

$$|B^n(v)\rangle = \left[ P_n((vU)) - W_{n-1}((vU)) (v\gamma^0) \right] |A\rangle, \quad (3.18)$$

é solução de (3.4), com  $|A\rangle$  arbitrário para todo  $n=0,1,\dots,N$ .

Notemos que, como  $(U)$  e  $(\gamma^0)$  são matrizes que, em geral, não comutam entre si, a ordem de  $W_{n-1}((vU))$  e  $(v\gamma^0)$  em (3.18) deve ser observada com cuidado.

Para  $n=0$ , a (3.18) fornece

$$|B^0(v)\rangle = |A\rangle \quad (3.19)$$

ou seja, o vetor arbitrário  $|A\rangle$  coincide com  $|B^0(v)\rangle$ . Em outras palavras, a escolha da particular combinação linear (3.10) equivale a tomar, como vetor arbitrário, o vetor  $|B^0(v)\rangle$ , escolha esta que, fisicamente, é in-

interessante. Sem entrar em detalhes, podemos adiantar que a arbitrariedade de  $|B^0(v)\rangle$  permite, nas aplicações específicas, satisfazer condições físicas relacionadas com o fluxo escalar de neutrons, como, por exemplo, a sua normalização a um dado valor.

### 3.3 - Determinação dos auto-valores do parâmetro $v$

Como, vimos, os  $v$  que permitem que o sistema básico (3.2) admita soluções não triviais, ou seja, os auto-valores do parâmetro  $v$ , são as raízes da equação (3.5), equação esta, equivalente a (3.3), ou seja, ao anulamento do determinante dos coeficientes do sistema (3.2).

Para facilitar a notação, introduzamos uma matriz  $(H^N(v))$  definida por:

$$(H^N(v)) = P_n((vU)) - W_{n-1}((vU)) (v\gamma^0) \quad (3.20)$$

Em termos desta matriz, a (3.18) e a (3.19) ficam:

$$|B^N(v)\rangle = (H^N(v)) |B^0(v)\rangle \quad (3.21)$$

A equação (3.5), considerando a (3.21) se escreve:

$$(H^{N+1}(v)) |B^0(v)\rangle = 0 \quad (3.22)$$

O sistema de equações algébricas acima só admitirá soluções não triviais se o determinante da matriz  $(H^{N+1}(v))$  for nulo:

$$||H^{N+1}(v)|| = 0 \quad (3.23)$$

ou

$$||P_{N+1}((vU)) - W_N((vU)) (v\gamma^0)|| = 0 \quad (3.24)$$

A equação (3.24) é a equação característica que nos fornecerá

os  $(L+1)(N+1)$  auto-valores para  $v$  e, ao mesmo tempo, eliminará a arbitrariedade, até aqui, total, do vetor  $|B^0(v)\rangle$ : restar-nos-á somente uma componente arbitrária ou a possibilidade de introduzir uma condição extra entre tais componentes, por exemplo, sua normalização a um dado valor. De fato,  $P_{N+1}(\{vU\})$  e  $W_N(\{vU\})(v\gamma^0)$  são polinômios matriciais de ordem  $(N+1)$  e  $\{vU\}$  e  $\{v\gamma^0\}$  são matrizes de ordem  $(L+1)$ , e portanto, a equação (3.24) será de ordem  $(N+1)(L+1)$  em  $v$ .

Pode-se demonstrar que, considerando somente  $N$  ímpar, não teremos raízes nulas para (3.25), quer  $L$  seja par ou ímpar. Como a presença de raízes nulas introduz, já no caso mono-energético, complicações sérias<sup>(1,28)</sup>, suporemos sempre  $N$  ímpar.

Como tanto  $P_{N+1}(\{vU\})$  como  $W_N(\{vU\})(v\gamma^0)$  são polinômios de ordem par em  $v$ ,<sup>(6)</sup> as  $(N+1)(L+1)$  raízes de (3.25) aparecerão aos pares e para cada raiz  $+|v_s|$  ( $s=1, \dots, \frac{1}{2}(N+1)(L+1)$ ), existirá a raiz simétrica  $-|v_s|$ .

No apêndice A-2, demonstramos que todos os  $v_s$  são reais, para uma classe ampla de problemas físicos.

Notemos que o método utilizado para resolver o sistema (3.2), através do ansatz (3.10), leva ao cálculo das raízes de um determinante de ordem  $(L+1)$  somente. Há, assim, em relação ao método direto de soluções de (3.2), uma economia realmente apreciável em capacidade de memória de computadores digitais utilizados no cálculo de tais raízes.

O número total de raízes, evidentemente, continua sendo  $(L+1)(N+1)$ .

Finalmente, algumas observações são necessárias para justificar, de maneira mais objetiva, a ênfase que puzemos na vantagem computacional decorrente do uso da transformação (2.36) que diagonalizou a matriz  $\{V\}$ .

Para isso, consideremos a equação característica (3.24) e vamos re-escrevê-la explicitando os elementos das matrizes que aí comparecem, tomando um exemplo específico:  $L=4$ ;  $N=4$ .

Temos:

$$P_5(vU) = \frac{1}{8} \left[ 63(vU)^5 - 70(vU)^3 + 15(vU) \right]$$

$$W_4(vU) = \frac{63}{8} (vU)^4 - \frac{49}{8} (vU)^2 + \frac{8}{15} (I)$$

Se  $(U)$  não fosse diagonal, teríamos que efetuar, num cálculo numérico, todas as potências indicadas de  $(U)$ , e mais a multiplicação por  $(v\gamma^0)$ .

Sendo  $(U)$  diagonal, temos simplesmente que, em geral,

$$(U)^p = \begin{bmatrix} \beta_1^p & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \beta_2^p & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \beta_3^p & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \beta_4^p & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \beta_5^p \end{bmatrix}$$

onde  $p$  é um expoente genérico e os  $\beta_i$  ( $i=1, \dots, 5$ ) são os elementos diagonais da matriz  $(U)$ .

Logo:

$$P_5(vU) = \begin{bmatrix} P_5(v\beta_1) & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & P_5(v\beta_2) & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & P_5(v\beta_3) & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & P_5(v\beta_4) & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & P_5(v\beta_5) \end{bmatrix}$$

Expressões análogas poderiam ser obtidas para  $W_4(VU)$ . E, imediatamente, se obtem, para a equação característica, nesse caso  $L=4$ ,  $N=4$ :

$$\left| \left| P_5(v\beta_i)\delta_{ij} - \sum_{k=1}^5 W_4(v\beta_i)\delta_{ik}(v\gamma_{kj}) \right| \right| = 0 \quad (i,j=1,2,\dots,5)$$

A ausência de multiplicação de matrizes para obter os elementos do determinante da equação característica é elemento importante de simplificação dos cálculos numéricos e de tempo de computador.

E talvez mais importante ainda, o aparecimento de polinômios em variáveis algébricas vai nos permitir analisar o comportamento da equação característica quando, numa dada ordem de aproximação energética, a ordem de aproximação angular  $N$  tende para infinito. Sem diagonalizar  $(V)$ , talvez fosse possível tal análise, mas somente através da teoria dos determinantes de ordem infinita.

### 3.4 - Solução geral em uma aproximação de ordem L-N

Considerando os resultados fundamentais do capítulo II e dos itens anteriores deste capítulo, podemos resumí-los como segue:

Da equação geral (1.23) em geometria plana e com núcleo de espalhamento genérico, sem fonte:

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial x} \Phi(x, E, \mu) + \Sigma(E)\Phi(x, E, \mu) = \\ & = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \int_0^{\infty} dE' \Sigma_S^{\ell}(E' \rightarrow E) P_{\ell}(\mu) \int_{-1}^1 d\mu' P_{\ell}(\mu') \Phi(x, E', \mu') \end{aligned} \quad (1.23)$$

obtivemos, transformando  $\Phi(x, E, \mu)$  em  $\Psi(x, E, \mu)$  através de

$$\Phi(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} \Psi(x, E, \mu) \quad (2.4)$$

a equação (2.9.) onde agora os núcleos de espalhamento são simétricos:

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial \Psi}{\partial x}(x, E, \mu) + \Sigma(E) \Psi(x, E, \mu) = \\ & = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{SS}^{\ell}(E' \rightarrow E) P_{\ell}(\mu) \int_{-1}^1 d\mu' P_{\ell}(\mu') \Psi(x, E', \mu') \end{aligned} \quad (2.9)$$

Desenvolvendo  $\Psi(x, E, \mu)$  em uma série de polinômios ortonormais e completo da energia  $E$ , ou seja, pondo

$$\Psi(x, E, \mu) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j(x, \mu) g_j(E) \quad (2.13)$$

reduzimos a equação íntegro-diferencial (2.9) a um sistema (2.24) de  $(L+1)$  equações ainda íntegro-diferenciais, tendo mantido somente um número finito  $(L+1)$  de termos no desenvolvimento (2.13) - aproximação energética de ordem  $L$  -:

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial x} |f(x, \mu)\rangle + (V) |f(x, \mu)\rangle = \\ & = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2} P_{\ell}(\mu) \int_{-1}^1 d\mu' P_{\ell}(\mu') (A^{\ell}) |f(x, \mu')\rangle \end{aligned} \quad (2.24)$$

Utilizando agora um desenvolvimento da dependência angular de  $|f(x, \mu)\rangle$  em polinômios de Legendre

$$|f(x, \mu)\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{2} P_m(\mu) |A^m(x)\rangle \quad (2.25)$$

e mantendo somente  $(N+1)$  termos - aproximação de ordem  $N$  - reduzimos (2.24) no sistema (2.33) de  $(N+1)$  equações diferenciais matriciais

$$\begin{aligned}
 (n+1) \frac{\partial}{\partial x} |A^{n+1}(x)\rangle + n \frac{\partial}{\partial x} |A^{n-1}(x)\rangle + (2n+1) (V) |A^n(x)\rangle = \\
 = (2n+1) (\alpha^n) |A^n(x)\rangle \quad (n=0,1,\dots,N-1) \\
 N \frac{\partial}{\partial x} |A^{N-1}(x)\rangle + (2N+1) (V) |A^N(x)\rangle = \\
 = (2N+1) (\alpha^N) |A^N(x)\rangle
 \end{aligned}
 \tag{2.33}$$

Tendo posto:

$$|A^n(x)\rangle = e^{-x/v} |A^n(v)\rangle \tag{2.34}$$

o sistema diferencial (2.33) forneceu o sistema algébrico matricial

$$\begin{aligned}
 (n+1) |A^{n+1}(v)\rangle + n |A^{n-1}(v)\rangle - v(2n+1) (V) |A^n(v)\rangle = \\
 = -v(2n+1) (\alpha^n) |A^n(v)\rangle \quad (n=0,1,\dots,N-1) \\
 N |A^{N-1}(v)\rangle - v(2N+1) (V) |A^N(v)\rangle = \\
 = -v(2N+1) (\alpha^N) |A^N(v)\rangle
 \end{aligned}
 \tag{2.35}$$

O desacoplamento parcial desse sistema foi conseguido através de uma transformação de similitude determinada para diagonalizar  $(V)$ :

$$(S)^{-1} (V) (S) = (U) \tag{2.36}$$

$$(S)^{-1} |A^n(v)\rangle = |B^n(v)\rangle \quad (2.38)$$

E, a (2.35) se transformou no sistema parcialmente desacoplado (2.39):

$$\left. \begin{aligned} (n+1) (I) |B^{n+1}(v)\rangle + n (I) |B^{n-1}(v)\rangle - v(2n+1) (U) |B^n(v)\rangle = \\ = -v(2n+1) (\gamma^n) |B^n(v)\rangle \quad (n=0,1,\dots,N-1) \\ N |B^{N-1}(v)\rangle - v(2N+1) (U) |B^N(v)\rangle = \\ = -v(2N+1) (\gamma^N) |B^N(v)\rangle \end{aligned} \right\} \quad (2.39)$$

Finalmente, a solução geral desse sistema, no caso de espalhamento isotrópico foi mostrado ser

$$|B^n(v)\rangle = \left[ P_n((vU)) - W_{n-1}((vU)) (v\gamma^0) \right] |B^0(v)\rangle \quad (3.18)$$

desde que  $v$  assumisse um dos  $(N+1)$   $(L+1)$  valores característicos  $v_s$  dados pelas raízes do determinante de ordem  $(L+1)$ :

$$| | P_{N+1}((vU)) - W_N((vU)) (v\gamma^0) | | = 0 \quad (3.24)$$

Em consequência do caráter linear da equação básica e das transformações efetuadas, a solução geral, na aproximação de ordem  $L-N$  ( $N$  ímpar) e caso de espalhamento isotrópico, sem fonte, será:

$$\begin{aligned} \psi(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} \left[ \sum_{j=0}^L \sum_{n=0}^N \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{(N+1)(L+1)} \left[ C_s^{(+)} A_j^n(+v_s) e^{-x/v_s} + C_s^{(-)} A_j^n(-v_s) e^{x/v_s} \right] \cdot \right. \\ \left. \cdot \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) g_j(E) \right] \quad (3.26) \end{aligned}$$

Os  $C_s^{(+)}$  e  $C_s^{(-)}$  são  $(N+1)$   $(L+1)$  constantes arbitrárias, a serem determinadas pelas condições de contorno do problema físico específico e os  $A_j^n(\pm v_s)$  - componentes de  $|A^n(v_s)\rangle$  - serão determinadas pela aplicação de  $(S)$  a  $|B^n(\pm v_s)\rangle$  :

$$|A^n(\pm v_s)\rangle = (S) |B^n(\pm v_s)\rangle \quad (3.27)$$

ou

$$|A^n(\pm v_s)\rangle = (S) (H^n) |B^0(\pm v_s)\rangle \quad (3.28)$$

com

$$(H^n) = P_n(vU) - W_{n-1}(vU) (vY^0) \quad (3.29)$$

E a (3.26) se escreve:

$$\begin{aligned} \Phi(x, E, \mu) = \sqrt{N(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{n=0}^N \sum_{s=1}^{\frac{1}{2}(N+1)(L+1)} \sum_{k,m=0}^L S_{jk} H_{km}^n \left[ C_s^{(+)} B_m^0(+v_s) e^{-x/v_s} - \right. \\ \left. - C_s^{(-)} B_m^0(-v_s) e^{x/v_s} \right] \cdot \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) g_j(E) \end{aligned} \quad (3.30)$$

Sendo, então,  $\Phi(x, E, \mu)$  solução geral da equação de transporte sem fonte, no caso de geometria plana, núcleo de espalhamento isotrópico, na aproximação energética de ordem  $L$  e angular de ordem  $N$ .



CAPÍTULO IVCOMPORTAMENTO ASSINTÓTICO ANGULAR NA APROXIMAÇÃO L-N4.1 - Análise dos valores característicos, na aproximação L-N, quando  $N \rightarrow \infty$ 

No capítulo III mostramos que os valores característicos ou auto-valores  $\pm v_s$  [ $s=1,2,\dots,\frac{1}{2}(L+1)$  ( $N+1$ )] na aproximação L-N do método PEA com N ímpar e caso de espalhamento isotrópico, eram as raízes da equação:

$$||P_{N+1}([vU]) - W_N([vU])(v\gamma^0)|| = 0 \quad (3.24)$$

Sendo  $[U]$  uma matriz diagonal de ordem  $(L+1)$ , seus elementos serão da forma:

$$[U]_{ij} = \beta_j \delta_{ij} ; (i,j=0,1,\dots,L) \quad (4.1)$$

Com a escolha de  $(\frac{1}{\Sigma})_{\min}$  para a unidade de comprimento, as seções de choque são adimensionais e, em particular,  $\Sigma(E)$ , adimensional, satisfaz a:

$$\Sigma(E) \geq 1 \quad (4.2)$$

Nestas condições, pode-se demonstrar <sup>(22)</sup> que

$$\beta_j \geq 1 \quad (j=0,1,\dots,L) \quad (4.3)$$

e no que segue, serão ordenados em ordem decrescente:

$$\beta_0 > \beta_1 > \dots > \beta_L \geq 1 \quad (4.4)$$

Escrevamos a (3.24) como

$$\left\| P_{N+1}(\beta_j v) \delta_{jk} - \sum_{l=0}^L W_N(\beta_j v) \delta_{jl} (v\gamma^0)_{lk} \right\| = 0 \quad (k, j=0, 1, \dots, L) \quad (4.5)$$

Nosso problema é analisar o comportamento das soluções de (4.5) quando  $N \rightarrow \infty$ .

Dois casos distintos se apresentam correspondentes a argumentos dos polinômios maiores ou menores do que 1.

Ordenemos o conjunto dos  $v_s$ , soluções de (4.5), numa dada ordem de aproximação L-N, de maneira que:

$$v_s \in \left( -\frac{1}{\beta_L}, \frac{1}{\beta_L} \right) \text{ para } s=1, 2, \dots, S_1; \quad (4.6)$$

$$v_s \in \left( -\frac{1}{\beta_L}, \frac{1}{\beta_L} \right) \text{ para } s=S_1+1, S_1+2, \dots, \frac{1}{2}(N+1)(L+1). \quad (4.7)$$

Conforme análise apresentada no Apêndice A-2, existe uma classe de problemas físicos para a qual:

$$v_s = v_s^* , \quad (4.8)$$

ou seja: todos  $v_s$  são reais. No que segue consideraremos (4.8) como válida.

Os  $v_s$  que satisfazem (4.6) diremos serem auto-valores pertencentes ao espectro discreto puro, e indicá-los-emos por  $v_s^{(d)}$ ; e os  $v_s$  que satisfizerem (4.7) diremos serem auto-valores pertencentes ao espectro misto (discreto superposto a um contínuo) e indicá-los-emos por  $v_s^{(c)}$ .

A razão dessa classificação ficará clara quando compararmos nossos resultados assintóticos com os do espectro da FL-II, <sup>(22)</sup> citados no Apêndice A-1.

Como os  $\beta_j$  foram ordenados em uma sequência decrescente é

Óbvio que:

$$|\beta_j v_s^{(d)}| > 1 \text{ para } s=1, \dots, S_1 \quad (4.9)$$

e para qualquer  $\beta_j$  ( $j=0, 1, \dots, L$ ).

Consideremos agora as formas assintóticas para  $P_{N+1}(x)$  quando  $|x| > 1$ , obtidas imediatamente das expressões de Jahnke-Emde <sup>(29)</sup> e, portanto, aplicáveis quando os  $v$  que comparecem em (4.5) pertencerem ao espectro discreto puro e satisfizerem a (4.8):

$$P_{N+1}(\beta_j v_s^{(d)}) \sim (2\beta_j v_s^{(d)})^{N+1} \sqrt{\pi(N+1)}^{-1}; \quad N \gg 1 \quad (4.10)$$

$$W_N(\beta_j v_s^{(d)}) \sim \left[ (2\beta_j v_s^{(d)})^{N+1} / \sqrt{\pi(N+1)}^{-1} \right] \operatorname{tgh}^{-1}(\beta_j v_s^{(d)})^{-1} - \sqrt{\pi(N+1)}^{-1} (2\beta_j v_s^{(d)})^{2N+4}; \quad N \gg 1. \quad (4.11)$$

A equação característica (4.5) fica, para  $N \gg 1$ , após simplificações imediatas:

$$\left| \left| \delta_{jk} - \sum_{i=0}^L \left[ \operatorname{tgh}^{-1}(\beta_j v_s^{(d)})^{-1} - \pi / (2\beta_j v_s^{(d)})^{2N+3} \right] v_s^{(d)} \delta_{ji} \gamma_{ik}^0 \right| \right| = 0 \quad (j, k=0, 1, \dots, L). \quad (4.12)$$

No limite  $N \rightarrow \infty$ , (5.12) fornece:

$$\left| \left| \delta_{jk} - \sum_{i=0}^L v_s^{(d)} \operatorname{tgh}^{-1}(\beta_j v_s^{(d)})^{-1} \delta_{ji} \gamma_{ik}^0 \right| \right| = 0; \quad (j, k=0, 1, \dots, L). \quad (4.13)$$

Comparando (4.13) com (A-1.23), vemos que os  $v_s^{(d)}$  dados por (4.13) coincidem com os  $v_s$  dados por (A-1.23), provando que os valores característicos reais do espectro discreto puro  $v_s^{(d)}$  tendem para os valores característicos reais do espectro discreto puro de FL-II, quando  $N \rightarrow \infty$ .

Uma indicação da rapidez dessa convergência pode ser obtida observando os valores constantes dos quadros abaixo, onde apresentamos os valores para  $|v_s^{(d)}|$  calculados para o exemplo tratado em FL-II (referência 22). Neste trabalho, Ferziger e Leonard consideram o denominado "modelo do gás pesado" para o meio moderador; supõem espalhamento elástico independente da energia do neutron ( $\Sigma_s(E) = \text{constante}$ ), e uma lei de absorção  $1/v$ . Introduziam um parâmetro de absorção  $\epsilon$  definido por

$$\epsilon = \Sigma_a(1) / \Sigma_s$$

onde  $\Sigma_a(1)$  é o valor da seção de choque macroscópica de absorção para neutrons de energia 1 kT; e consideram três valores distintos para  $\epsilon$ :  $\epsilon=0,005$ ;  $\epsilon=0,05$ ;  $\epsilon=0,5$ .

Os valores para  $|v_s^{(d)}|$  foram calculados pelo método PEA, nas aproximações energéticas de ordem  $L=2,3,4$ , utilizando para os  $g_j(E)$  polinômios de Laguerre de primeira espécie multiplicados por  $\sqrt{M(E)}$ .

Todo o processo de cálculo - esquematizado no item 3.4 - foi automatizado através de uma série de programas digitais sequenciais, escritos em Fortran-II-D, para o computador IBM-1620 - modelo II-D do Instituto de Energia Atômica. Dados os valores de  $V_{jk}$  e  $\alpha_{jk}$ , o conjunto de programas fornece todas as  $(N+1)$   $(L+1)$  raízes características. Nos quadros seguintes apresentamos somente as correspondentes ao espectro discreto, ou seja, aquelas que satisfazem a (4.9) e que, no exemplo, particular considerado, são todas reais.

TABELA I

 $\epsilon = 0,005$ 

L	N	$ v_0^{(d)} $	$ v_1^{(d)} $	$ v_2^{(d)} $	$ v_3^{(d)} $
2	1	8,6612	1,2762	...	...
	3	8,6765	1,3905	1,0781	...
	5	8,6765	1,3934	1,0938	...
	Exato(FL-II)	8,6907	1,3935	1,0966	...
3	1	8,6907	1,2762	...	...
	3	8,7060	1,3906	1,0782	...
	5	8,7059	1,3935	1,0939	...
	Exato(FL-II)	8,6907	1,3948	1,0966	1,0109
4	1	8,6703	1,2763	...	...
	3	8,6856	1,3906	1,0782	...
	5	8,6857	1,3935	1,0939	...
	Exato(FL-II)	8,6907	1,3948	1,0966	1,0111

TABELA II

$$c = 0,05$$

L	N	$ v_0^{(d)} $	$ v_1^{(d)} $	$ v_2^{(d)} $	$ v_3^{(d)} $
2	1	2,7323	1,1609	. . .	. . .
	3	2,7784	1,2801	1,0259	. . .
	5	2,7785	1,2841	1,0428	. . .
	Exato(FL-II)	2,7788	1,2843	1,0463	. . .
3	1	2,7342	1,1618	. . .	. . .
	3	2,7803	1,2811	1,0314	. . .
	5	2,7804	1,2851	1,0489	. . .
	Exato(FL-II)	2,7799	1,2852	1,0527	. . .
4	1	2,7351	1,1622	. . .	. . .
	3	2,7812	1,2815	1,0322	. . .
	5	2,7812	1,2854	1,0497	. . .
	Exato(FL-II)	2,7810	1,2856	1,0536	0,9896

TABELA III

$\epsilon = 0,5$

L	N	$ v_0^{(d)} $	$ v_1^{(d)} $	$ v_2^{(d)} $	$ v_3^{(d)} $
2	1	0,8767	. . .	. . .	. . .
	3	0,9880	0,8475	. . .	. . .
	5	0,9939	0,8619	. . .	. . .
	Exato(FL-II)	0,9945	0,8658	. . .	. . .
3	1	0,8767	. . .	. . .	. . .
	3	0,9880	0,8642	. . .	. . .
	5	0,9939	0,8837	. . .	. . .
	Exato(FL-II)	0,9945	0,8905	. . .	. . .
4	1	0,8768	. . .	. . .	. . .
	3	0,9880	0,8644	. . .	. . .
	5	0,9939	0,8849	. . .	. . .
	Exato(FL-II)	0,9945	0,8941	. . .	. . .

Certas flutuações observadas no modo de convergência dos  $|v_s^{(d)}|$  para os valores exatos (de FL-II) quando  $N$  cresce, são possivelmente, devidas a erros de arredondamento em cálculos numéricos. Sem entrar em detalhe, cremos que a maior fonte de erros se encontra no método adotado para o cálculo final das raízes, ou seja, na determinação dos zeros da equação (3.24) ou (4.5). É um problema de cálculo numérico digital que está sendo analisado.

A consideração de (4.12) mostra ainda que a convergência no campo real de  $v_s^{(d)}$  para os  $v_\mu$  discretos puros de FL-II será, numa dada ordem de aproximação  $N$ , tanto mais rápida quando maior o valor de  $|\beta_j v_s^{(d)}|$ . Podemos, assim, esperar que o formalismo PEA nos forneça raízes características discretas mais próximas das raízes exatas - no sentido de FL-II - para os auto-valores reais maiores. Estas considerações justificam a seguinte observação feita em FL-II (referência 22, pag.179): "Em geral, vê-se que a teoria de difusão prediz os comprimentos de difusão com precisão somente para pequena absorção e somente para o primeiro modo". (grifo nosso). Para isso basta notar:

- a) a teoria de difusão citada não passa da aproximação de ordem  $N=1$  (aproximação angular  $P_1$ ) em nosso formalismo;
- b) que uma pequena absorção do meio implica em pequena distorção do espectro energético em relação a um maxwelliano; (\*)
- c) que o primeiro modo corresponde ao maior auto-valor real  $v_0^{(d)}$ .

Notemos ainda que todo o raciocínio desenvolvido para demonstrar que, quando  $N \rightarrow \infty$ , a (4.5) tende para a (4.12) ou para a (A-1.23), se baseia na condição de os argumentos dos polinômios  $P_{N+1}(\beta_j v_s^{(d)})$  e  $W_N(\beta_j v_s^{(d)})$  serem maiores que 1, para qualquer  $\beta_j$ .

---

(\*) Com uma escolha conveniente de polinômios ortogonais na energia - como os polinômios de Laguerre de primeira espécie multiplicados por  $\sqrt{M(E)}$  - um espectro pouco distorcido em relação a um espectro maxwelliano necessitará poucas componentes ( $L$  pequeno) para ser bem aproximado.

Para as raízes do espectro que denominamos misto, isto é, para os  $v_s^{(c)}$ , o comportamento assintótico de  $P_{N+1}(\beta_j v_s^{(c)})$  e  $W_N(\beta_j v_s^{(c)})$  será radicalmente diferente<sup>(6)</sup>. De fato, haverá raízes para as quais  $|\beta_j v_s^{(c)}| < 1$  e para argumentos  $|x| < 1$  tanto  $P_{N+1}(x)$  como  $W_N(x)$  apresentam, assintoticamente, um caráter oscilante que impede tirarmos conclusões semelhantes às apresentadas quando da análise dos autos-valores  $v_s^{(d)}$ .

Em particular, não parece haver convergência nem para os valores discretos que se apresentam quando os  $v_l$  de FL-II pertencem a intervalos indicados em A-1 como do tipo  $I_{\beta_j}$ . Podemos antecipar, no entanto, que quando  $N \gg 1$ , as raízes  $v_s^{(c)}$  no método PEA, que satisfazem a (4.7) fornecerão termos para o fluxo de neutrons que tenderão, possivelmente, a representar os efeitos dos termos que correspondem ao espectro misto de FL-II, conforme analisaremos no item 4.2.

#### 4.2 - Comportamento das soluções na aproximação L-N quando $N \rightarrow \infty$

No capítulo III mostramos que a solução geral de (1.23) para o caso de espalhamento isotrópico era dada por:

$$\begin{aligned} \phi(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} & \sum_{j=0}^L \sum_{n=0}^N \sum_{k,m=0}^L \frac{1}{2} (N+1)(L+1) \sum_{s=0}^L S_{jk} H_{km}^n \left[ C_s^{(+)} B_m^0(+v_s) e^{-\frac{x}{v_s}} - \right. \\ & \left. - C_s^{(-)} B_m^0(-v_s) e^{-\frac{x}{v_s}} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) g_j(E) \end{aligned} \quad (3.30)$$

Como  $(U)$  é diagonal, podemos escrever  $H_{km}^n$  como:

$$H_{km}^n = P_n(\beta_k v) \delta_{km} - W_{n-1}(\beta_k v) \cdot v \cdot \gamma_{km}^0 \quad (4.14)$$

Separaremos a solução (3.30) em duas partes  $\phi_d(x, E, \mu)$  e  $\phi_c(x, E, \mu)$ :

$$\Phi(x, E, \mu) = \Phi_d(x, E, \mu) + \Phi_c(x, E, \mu) \quad (4.15)$$

$$\begin{aligned} \Phi_d(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} & \sum_{j=0}^L \sum_{n=0}^N \sum_{K, m=0}^L \sum_{s=1}^{S_1} S_{jk} H_{km}^n \left[ C_s^{(+)} B_m^0(+v_s^{(d)}) e^{-\frac{x}{v_s^{(d)}}} + \right. \\ & \left. + C_s^{(-)} B_m^0(-v_s^{(d)}) e^{\frac{x}{v_s^{(d)}}} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) g_j(E) \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned} \Phi_c(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} & \sum_{j=0}^L \sum_{n=0}^N \sum_{k, m=0}^L \sum_{s=S_2+1}^{\frac{1}{2}(N+1)(L+1)} S_{jk} H_{km}^n \left[ C_s^{(+)} B_m^0(+v_s^{(c)}) e^{-\frac{x}{v_s^{(c)}}} + \right. \\ & \left. + C_s^{(-)} B_m^0(-v_s^{(c)}) e^{\frac{x}{v_s^{(c)}}} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) g_j(E) \end{aligned} \quad (4.17)$$

Demonstremos que:

- a)  $\lim_{N \rightarrow \infty} \Phi_d(x, E, \mu)$  coincide com a parte discreta pura de FL-II;
- b)  $\Phi_c(x, E, \mu)$  para  $N \gg 1$ , parece não convergir para a parte contínua de FL-II, mas, possivelmente, descreve os efeitos de tal parte.

#### 4.3 - Comportamento de $\Phi_d(x, E, \mu)$ para $N \rightarrow \infty$

Considerando (A-1.39) e (4.16) desejamos provar que:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \Phi_d(x, E, \mu) \rightarrow \sqrt{M(E)} & \sum_{j=0}^L \sum_{s=0}^M g_j(E) \left[ a_{(+)} f_j(v_s, \mu) e^{-\frac{x}{v_s}} + \right. \\ & \left. + a_{(-)} f_j(-v_s, \mu) e^{\frac{x}{v_s}} \right] \end{aligned} \quad (4.18)$$

com:

$$f_j(\pm v_s, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{k,m=0}^L (S_{jlk} \frac{v_s}{\beta_k v_s \mp \mu}) Y_{km}^0 w_m(v_s) \quad (A-1.27)$$

sendo  $\pm v_s$  as raízes do determinante (A-1.23) não pertencentes ao intervalo  $(-\frac{1}{\beta_L}, \frac{1}{\beta_L})$ .

Continuando a supor válidas as condições de realidade dos  $v_s^{(d)}$ , vimos no ítem 4.1 que:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} v_s^{(d)} \rightarrow v_s \quad (4.19)$$

A validade de (4.18) ficará provada se demonstrarmos que:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N \left( \frac{2n+1}{2} \right) H_{km}^n B_m^0(\pm v_s) P_n(\mu) \rightarrow \frac{1}{2} \frac{v_s}{\beta_k v_s \mp \mu} Y_{km}^0 w_m(v_s) \quad (4.20)$$

ou utilizando a (4.14) e considerando somente o caso  $(+v_s)$  e eliminando o índice  $s$ , que:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N \left[ P_n(\beta_k v) \delta_{km} - W_{n-1}(\beta_k v) \cdot v \cdot Y_{km}^0 \right] B_m^0(v) \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) \rightarrow \\ \rightarrow \frac{1}{2} \frac{v}{\beta_k v - \mu} Y_{km}^0 w_m(v). \end{aligned} \quad (4.21)$$

A expressão (3.7) para  $W_{n-1}(x)$  nos permite escrever o primeiro membro da expressão acima como:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N \left[ \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) P_n(\beta_k v) (\delta_{km} - v Y_{km}^0) B_m^0(v) + \right.$$

$$+ \frac{\nu}{2} (2n+1) P_n(\mu) \cdot Q_n(\beta_k \nu) \gamma_{km}^0 B_m^0(\nu) \Big] = G_{km}^{(1)}(\beta_k \nu) + G_{lm}^{(2)}(\beta_k \nu), \quad (4.22)$$

$$G_{km}^{(1)}(\beta_k \nu) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) P_n(\beta_k \nu) \cdot (\delta_{km} - \nu Q_0(\beta_k \nu) \cdot \gamma_{km}^0) B_m^{(0)}(\nu) \quad (4.23)$$

$$G_{km}^{(2)}(\beta_k \nu) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[ (2n+1) P_n(\mu) Q_n(\beta_k \nu) \right] \cdot \nu \cdot \gamma_{km}^0 B_m^0(\nu). \quad (4.24)$$

Como  $|\beta_k \nu| > 1$  e  $|\mu| < 1$  para o caso de espectro discreto, que estamos analisando, o desenvolvimento de Heine para  $\frac{1}{\beta_k \nu - \mu}$  em série de polinômios de Legendre<sup>(30)</sup> é válido e, portanto:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) P_n(\beta_k \nu) Q_n(\mu) = \frac{1}{\beta_k \nu - \mu} \quad (4.25)$$

$$G_{km}^{(2)}(\beta_k \nu) = \frac{1}{2} \frac{\nu}{\beta_k \nu - \mu} \cdot \gamma_{km}^0 \cdot B_m^0(\nu) \quad (4.26)$$

Para analisar o termo  $G_{km}^{(1)}(\beta_k \nu)$  consideremos a fórmula de somação de Christoffel-Darboux<sup>(31)</sup>:

$$\sum_{n=0}^N (2n+1) P_n(\mu) P_n(\beta_k \nu) = \frac{N+1}{\beta_k \nu - \mu} \left[ P_{N+1}(\beta_k \nu) P_N(\mu) - P_N(\beta_k \nu) P_{N+1}(\mu) \right] \quad (4.27)$$

Pondo  $P_{N+1}(\beta_k \nu)$  em evidência (\*), podemos escrever:

$$G_{km}^{(1)}(\beta_k \nu) = \left[ \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N \frac{N+1}{\beta_k \nu - \mu} \left( P_N(\mu) - \frac{P_N(\beta_k \nu)}{P_{N+1}(\beta_k \nu)} \cdot P_{N+1}(\mu) \right) \cdot \left( P_{N+1}(\beta_k \nu) \delta_{km} - \nu P_{N+1}(\beta_k \nu) \cdot Q_0(\beta_k \nu) \cdot \gamma_{km}^0 \right) B_m^0(\nu) \right] \quad (4.28)$$

---

(\*) Supomos que as raízes da equação característica (3.25) não coincidam com as de  $P_{N+1}(x) = 0$

Mas, de (3.21) escrita, em termos de elementos de matrizes, obtemos:

$$B_k^N(v) = \sum_{m=0}^L \left[ P_N(\beta_k v) (\delta_{km} - Q_0(\beta_k v) \cdot v \cdot \gamma_{km}^0) B_m^0(v) + Q_N(\beta_k v) \cdot v \cdot \gamma_{km}^0 \cdot B_m^0(v) \right] \quad (4.29)$$

Como, para as raízes características, segundo (3.5).

$$B_k^{N+1}(v) = 0 \quad (4.30)$$

segue que

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^L \left[ P_{N+1}(\beta_k v) \delta_{km} - v P_{N+1}(\beta_k v) Q_0(\beta_k v) \cdot \gamma_{km}^0 \right] B_m^0(v) = \\ = - \sum_{m=0}^L Q_{N+1}(\beta_k v) \cdot v \cdot \gamma_{km}^0 \cdot B_m^0(v) \end{aligned} \quad (4.31)$$

Podemos escrever, considerando (4.28) e (4.31):

$$\begin{aligned} - \sum_{m=0}^L G_{km}^{(1)}(\beta_k v) = \sum_{m=0}^L \left[ \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N \frac{N+1}{\beta_k^{v-\mu}} \left( P_N(\mu) - \frac{P_N(\beta_k v)}{P_{N+1}(\beta_k v)} \cdot P_{N+1}(\mu) \right) \cdot Q_{N+1}(\beta_k v) \cdot v \cdot \gamma_{km}^0 \cdot B_m^0(v) \right] \end{aligned} \quad (4.32)$$

Considerando as expressões assintóticas<sup>(29)</sup> para  $Q_{N+1}(\beta_k v)$  e  $P_{N+1}(\beta_k v)$  quando  $|\beta_k v| > 1$ , é imediato se mostrar que:

$$\sum_{m=0}^L G_{km}^{(1)}(\beta_k v) = 0 \quad (4.33)$$

Coletando os resultados expressos por (4.26) e (4.33), vemos que, considerando implicitamente o efeito da somatória sôbre m:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N \left[ P_N(\beta_k, \nu) \delta_{km}^{-W_{n-1}(\beta_k, \nu) \nu \gamma_{km}^0} \right] B_m(\nu) \cdot \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) = \\ = \frac{1}{2} \frac{\nu}{\beta_k \nu - \mu} \cdot \gamma_{km}^0 \cdot B_m^0(\nu) \end{aligned} \quad (4.34)$$

Para provar a validade de (4.21) resta-nos mostrar que  $B_m^0(\nu)$  e  $w_m(\nu)$  são proporcionais, no limite de  $N \rightarrow \infty$ .

Para isso, lembremos que as  $B_m^0(\nu)$  eram determinadas - a menos de uma componente arbitrária ou uma condição de normalização - pela equação (3.23):

$$\left( H^{N+1}(\nu) \right) | B^0(\nu) \rangle = 0 \quad (3.23)$$

Quanto às  $w_m(\nu)$  eram determinadas, com o mesmo tipo de indeterminação das  $B_m^0(\nu)$ , pela equação (A-1.23)

$$\left( (I) - (T(\nu))(\bar{Y}) \right) | w(\nu) \rangle = 0 \quad (A-1.23)$$

A (3.23) pode ser escrita como:

$$\left( (I) - \frac{W_N((\nu U))}{P_{N+1}((\nu U))} \cdot \nu \cdot (Y^0) \right) | B^0(\nu) \rangle = 0 \quad (4.35)$$

Conforme (4.10) e (4.11):

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{W_N(\beta_k, \nu)}{P_{N+1}(\beta_k, \nu)} \cong \operatorname{arctgh} \left( \frac{1}{\beta_k \nu} \right) \quad (4.36)$$

e, assim, concluímos que:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \{H^{N+1}(v)\} = [I] - [T(v)] \{Y^0\} \quad (4.37)$$

ficando demonstrado que  $|B^D(v)\rangle$  e  $|w(v)\rangle$  são vetores proporcionais e completando a prova da validade de (4.18), para os problemas físicos onde são comparados  $v_s^{(d)}$  e  $v_l$  reais.

Esta igualdade, no limite de  $N \rightarrow \infty$ , entre o espectro discreto exato (no sentido de FL-II) e o espectro discreto no método PEA, permite-nos esperar que o comportamento assintótico do fluxo de neutron seja bem descrito em uma aproximação razoável de ordem N. Por comportamento assintótico, estamos nos referindo ao comportamento do fluxo  $\Phi(x, E, \mu)$  longe de regiões de descontinuidade.

Nas vizinhanças de tais regiões de descontinuidade, haverá influência grande do espectro contínuo e, como veremos, não poderemos esperar que o método PEA ofereça resultados satisfatórios, salvo para problemas - importantes aliás - onde haja predominância do comportamento médio do fluxo de neutrons. Esta situação se apresenta já no caso mono-energético<sup>(2)</sup> e, evidentemente, não poderíamos esperar que houvesse melhora no caso poli-energético.

#### 4.4 - Comportamento de $\psi_c(x, E, \mu)$ quando $N \rightarrow \infty$

Desejamos analisar a relação entre  $\psi_c(x, E, \mu)$  dada por (4.17) e a parte correspondente ao espectro misto (contínuo e discreto) de FL-II. Considerando a (A-1.38) e (A-1.39), trata-se de relacionar, no limite de  $N \rightarrow \infty$ , ou melhor, para  $N \gg 1$ :

$$\psi_c(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k, m=0}^L \sum_{n=0}^N \frac{1}{2} \frac{(N+1)(L+1)}{s=S_1+1} S_{jk} H_{km}^n \cdot \left[ C_s^{(+)} B_m^0(+v_s(c)) e^{-\frac{x}{v_s(c)}} + C_s^{(-)} B_m^0(-v_s(c)) e^{\frac{x}{v_s(c)}} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) g_j(E) \quad (4.17)$$

e

$$\phi_c^{(FL-II)}(x, E, \mu) = \phi_{c1}^{(FL-II)}(x, E, \mu) + \phi_{c2}^{(FL-II)}(x, E, \mu)$$

com:

$$\phi_{c2}^{(FL-II)}(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k,m=0}^L \frac{1}{2} S_{jk} \int_{\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} \frac{v}{\beta_k v - \mu} \gamma_{km}^0 C_1(v) w_m(v) e^{-\frac{x}{v}} dv g_j(E) \quad (4.38)$$

$$\phi_{c1}^{(FL-II)}(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k=0}^L S_{jk} \int_{\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} C_1(v) \lambda_k(v) \delta(\beta_k v - \mu) dv e^{-\frac{x}{v}} B_j(E) \quad (4.39)$$

onde, conforme detalhamos no apêndice A-1:

a) se  $(\beta_k v) \in I_{\beta_k}$ , as  $w_m(v)$  de (4.39) são determinados por (A-1.35), a integral se reduz a uma soma e os  $\gamma_{jk}^0(v)$  se tornam coeficientes, como os  $a_z(\pm v_s)$  da parte discreta pura, a serem determinados pelas condições de contorno;

b) se  $(\beta_k v) \in II_{\beta_k}$ ,  $\lambda_k(v)$  é determinada por (A-1.37) com os  $\{C_1(v) w_m(v)\}$  que comparecem em (4.38) e os  $C_1(v) \lambda_k(v)$  de (4.39) funções arbitrárias, a serem determinados pelas condições de contorno.

Como já notamos no ítem 4.1, quando  $N \rightarrow \infty$ , os  $v_g^{(c)}$  não convergem sequer para os  $v$  que pertencem a  $I_{\beta_j}$ . Assim, não podemos esperar que haja convergência de  $\phi_c^{(FL-II)}(x, E, \mu)$  para o  $\phi_c^{(FL-II)}(x, E, \mu)$  quando  $N \rightarrow \infty$ .

No entanto, por analogia com o que ocorre no caso mono-energético<sup>(32,33)</sup>, podemos esperar que a  $\phi_c^{(FL-II)}(x, E, \mu)$  descreva aproximadamente o comportamento da componente  $\phi_c^{(FL-II)}(x, E, \mu)$  do fluxo de neutrons.

Considerando a (4.17), substituindo  $H_{km}^n$  pela sua expressão (4.14) e utilizando (3.7), podemos escrever:

$$\phi_c(x, E, \mu) = \phi_c^{(I)}(x, E, \mu) + \phi_c^{(II)}(x, E, \mu) \quad (4.40)$$

com:

$$\begin{aligned} \phi_c^{(I)}(x, E, \mu) = & \sqrt{M(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k, m=0}^L \sum_{n=0}^N \sum_{s=S_j+1}^{\frac{1}{2}(N+1)(L+1)} S_{jk} P_n(\beta_{ks}^{(c)}) \left[ \delta_{km}^{-\nu_s^{(c)}} Q_{\nu_s^{(c)}}(\beta_{ks}^{(c)}) Y_{km} \right] \\ & \cdot \left[ C_s^{(+)} B_m^{\nu_s^{(c)}} e^{-\frac{x}{\nu_s^{(c)}}} + C_s^{(-)} B_m^{-\nu_s^{(c)}} e^{-\frac{x}{\nu_s^{(c)}}} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) g_j(E) \quad (4.41) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi_c^{(II)}(x, E, \mu) = & -\sqrt{M(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k, m=0}^L \sum_{n=0}^N \sum_{s=S_j+1}^{\frac{1}{2}(N+1)(L+1)} S_{jk} Q_n(\beta_{ks}^{(c)}) \nu_s^{(c)} Y_{km} \\ & \cdot \left[ C_s^{(+)} B_m^{\nu_s^{(c)}} e^{-\frac{x}{\nu_s^{(c)}}} + C_s^{(-)} B_m^{-\nu_s^{(c)}} e^{-\frac{x}{\nu_s^{(c)}}} \right] \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) g_j(E) \quad (4.42) \end{aligned}$$

Vamos mostrar que  $\phi_c^{(I)}(x, E, \mu)$  e  $\phi_c^{(II)}(x, E, \mu)$  dadas pelas equações (4.41) e (4.42) são aproximações para  $\phi_{c1}^{(FL-II)}$  e  $\phi_{c2}^{(FL-II)}$ , dadas, respectivamente, pelas equações (4.38) e (4.39).

Considerando (4.38) e (4.39), multiplicando ambos os membros por  $P_n(\mu)$  e integrando em relação a  $\mu$  entre -1 e +1, obtemos:

$$\int_{-1}^1 P_n(\mu) \phi_{c1}^{(FL-II)}(x, E, \mu) d\mu = \phi_{c1}^{(FL-II)}(x, E)_n \quad (4.43)$$

$$\int_{-1}^1 P_n(\mu) \phi_{c2}^{(FL-II)}(x, E, \mu) d\mu = \phi_{c2}^{(FL-II)}(x, E)_n \quad (4.44)$$

com:

$$\phi_{c1}^{(FL-II)}(x, E)_n = \sqrt{N(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k,m=0}^L S_{jk} \int_{-\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} dv \cdot v \cdot \gamma_{km} C_1(v) w_m(v) e^{-\frac{x}{v}} g_j(E) \cdot \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{1}{\beta_k v - \mu} P_n(\mu) d\mu \quad (4.45)$$

$$\phi_{c2}^{(FL-II)}(x, E)_n = \sqrt{M(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k=0}^L S_{jk} \int_{-\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} dv C_1(v) \lambda_k(v) e^{-\frac{x}{v}} g_j(E) \int_{-1}^1 \delta(\beta_k v - \mu) P_n(\mu) d\mu, \quad (4.46)$$

tendo tomado o valor principal da integral em relação a  $\mu$  onde comparece  $\left(\frac{1}{\beta_k v - \mu}\right)$  no integrando.

Como se pode demonstrar que:

$$\frac{1}{2} \mathcal{P} \int_{-1}^1 \frac{1}{\beta_k v - \mu} P_n(\mu) d\mu = - Q_n(\beta_k v) \quad (4.47)$$

obtemos:

$$-\phi_{c1}^{(FL-II)}(x, E)_n = \sqrt{N(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k,m=0}^L S_{jk} \int_{-\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} dv \cdot v \cdot C_1(v) \gamma_{km} w_m(v) e^{-\frac{x}{v}} g_j(E) Q_n(\beta_k v) \quad (4.48)$$

$$\phi_{c2}^{(FL-II)}(x, E)_n = \sqrt{M(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k=0}^L S_{jk} \int_{-\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} dv \cdot C_1(v) \lambda_k(v) e^{-\frac{x}{v}} g_j(E) P_n(\beta_k v) \quad (4.49)$$

Podemos pôr, portanto:

$$\phi_{c1}^{(FL-II)}(x, E, \mu) = \sqrt{N(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k, m=0}^L \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} S_{jk} \int_{-\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} dv \cdot v \cdot \gamma_{km}^0 C_1(v) w_m(v) e^{-\frac{x}{v}} g_j(E) Q_n(\beta_k v) P_n(\mu) \quad (4.50)$$

$$\phi_{c2}^{(FL-II)}(x, E, \mu) = \sqrt{N(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k=0}^L \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} S_{jk} \int_{-\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} dv \cdot C_1(v) \lambda_k(v) e^{-\frac{x}{v}} g_j(E) P_n(\beta_k v) P_n(\mu), \quad (4.51)$$

tendo eliminado a indicação que deveríamos tomar a parte principal da integral sobre  $dv$ , desde que a contribuição do eventual ponto singular  $\beta_k v = \mu$  foi considerada quando da integração que definiu  $Q_n(\beta_k v)$ .

$$\phi_{c2}^{(FL-II)}(x, E, \mu) = \sqrt{N(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k, m=0}^L \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} S_{jk} \int_{-\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} dv \left[ \delta_{km} - v Q_0(\beta_k v) \gamma_{km}^0 \right] C_1(v) w_m(v) \cdot e^{-\frac{x}{v}} \cdot g_j(E) \cdot P_n(\beta_k v) P_n(\mu) \text{ para } |\beta_k v| < 1 \quad (4.52)$$

$$= 0 \text{ para } |\beta_k v| > 1 \quad (4.53)$$

De fato, para  $|\beta_k v| < 1$ , a (A-1.37) nos permite escrever:

$$\lambda_k(v) = \sum_{m=0}^L \left[ \delta_{km} - v Q_0(\beta_k v) \gamma_{km}^0 \right] w_m(v) \quad (4.54)$$

bastando notar que<sup>(29)</sup>:

$$Q_0(x) = \operatorname{arctg} x, \text{ para } |x| < 1 \quad (4.55)$$

Portanto, nesse caso, (4.51) coincide com a (4.52)

(FL-II)

Para  $|\beta_k v| > 1$ , a demonstração de que  $\phi_{c2}(x, E, \mu)$  dada por (4.51) se anula é imediata, pois

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} P_n(\beta_k v) P_n(\mu) = \delta(\beta_k v - \mu)$$

(FL-II)

Suponhamos agora que  $\phi_{c2}(x, E, \mu)$  seja aproximada considerando, tanto para  $|\beta_k v| < 1$  como para  $|\beta_L v| > |\beta_k v| > 1$ , a expressão (4.52), com um número suficiente grande de termos da somatória sobre  $n$ .

Ou seja que:

$$\begin{aligned} \phi_{c2}^{(FL-II)}(x, E, \mu) &\approx \sqrt{M(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k, m=0}^L \sum_{n=0}^{N_1} \frac{2n+1}{2} S_{jk} \int_{-\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} dv \left[ \delta_{km}^{-vQ_0(\beta_k v)} \gamma_{km}^0 \right] C_1(v) w_m(v) \\ &\cdot e^{-\frac{x}{v}} \cdot B_j(E) P_n(\beta_k v) P_n(\mu) \end{aligned} \quad (4.56)$$

para todo  $|\beta_k v| \leq |\beta_L v|$

A relação entre  $\phi_c^{(I)}(x, E, \mu)$  dada por (4.41) e a  $\phi_{c2}^{(FL-II)}(x, E, \mu)$  aproximada por (4.56) pode ser vista se, para  $N=N_1 \gg 1$ , aproximarmos a somatória sobre os  $s$  em (4.41) por uma integral.

Teremos então, para todo  $|\beta_k v| \leq |\beta_L v|$ :

$$\begin{aligned} \phi_c^{(I)}(x, E, \mu) &\approx \sqrt{M(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k, m=0}^L \sum_{n=0}^{N_1} \frac{2n+1}{2} S_{jk} \int_{-\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} dv \left[ \delta_{km}^{-vQ_0(\beta_k v)} \gamma_{km}^0 \right] \\ &\cdot C(v) \cdot B_m^0(v) \cdot e^{-\frac{x}{v}} \cdot B_j(E) P_n(\beta_k v) P_n(\mu), \end{aligned} \quad (4.57)$$

tendo re-arranjado os termos de (4.41) e eliminado os índices de  $v_s^{(c)}$ .  
(FL-II)

A equivalência entre  $\phi_{c2}(x, E, \mu)$ , aproximada por (4.56), e a  $\phi_c^{(I)}(x, E, \mu)$ , aproximada por (4.57), parece não poder ser demonstrada em geral. Podemos, no entanto, esperar, dada a semelhança de estrutura matemática das duas expressões, que a descrição da parcela do fluxo de neutrons descrita por (4.57) não se afaste muito da que seria obtida utilizando (4.56).

Resta analisar a relação entre  $\phi_{c1}^{(FL-II)}(x, E, \mu)$  e  $\phi_c^{(I)}(x, E, \mu)$ , ou seja, a relação entre (4.50) e (4.42).

Utilizando, tanto para  $\phi_{c2}^{(FL-II)}(x, E, \mu)$  como para  $\phi_c^{II}(x, E, \mu)$ , as mesmas aproximações feitas na análise anterior, obtemos imediatamente as seguintes equações aproximadas:

$$\phi_{c1}^{(FL-II)}(x, E, \mu) = \sqrt{M(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k,m=0}^L \sum_{n=0}^{N_1} \frac{2n+1}{2} S_{jk} \int_{-\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} dv \cdot v \cdot \gamma_{km}^0 C_1(v) w_m(v) e^{-\frac{x}{v}} g_j(E) \cdot Q_n(\beta_k v) P_n(\mu) \quad (4.58)$$

$$\phi_c^{II}(x, E, \mu) = -\sqrt{M(E)} \sum_{j=0}^L \sum_{k,m=0}^L \sum_{n=0}^{N_1} \frac{2n+1}{2} S_{jk} \int_{-\frac{1}{\beta_L}}^{\frac{1}{\beta_L}} dv \cdot v \cdot \gamma_{km}^0 C(v) B_m^0(v) e^{-\frac{x}{v}} \cdot g_j(E) \cdot Q_n(\beta_k v) P_n(\mu) \quad (4.59)$$

para  $v$  tal que  $|\beta_k v| < |\beta_L v|$  para qualquer  $\beta_k$ .

Novamente encontramos uma semelhança de estrutura matemática, mas a equivalência entre (4.58) e (4.59) também não conseguimos provar.

Resumindo: a expressão para o espectro de neutrons correspondente aos  $v_s^{(c)}$  do método PEA, numa aproximação L-N, apresenta uma estrutura matemática semelhante ao de espectro misto de FL-II; mas a equivalência

entre ambos não conseguimos demonstrar, ao contrário do que ocorre quando se considera o espectro discreto puro.

Esta situação, como havíamos notado, se apresenta já no caso mono-energético. E seria interessante que fosse feita uma análise mais completa dessa equivalência através, por exemplo, do estudo comparativo de um problema onde a componente contínua do fluxo desempenhe papel importante, como é o caso de problema de Milne<sup>(1)</sup>.

## CAPÍTULO V

### OBSERVAÇÕES E CONCLUSÕES SÔBRE A APROXIMAÇÃO L-N NO MÉTODO PEA

#### 5.1 - Observações Gerais

O método PEA desenvolvido principalmente nos capítulos III e IV constitui uma extensão, ao caso poli-energético, do formalismo clássico das esféricas harmônicas, corrente e intensamente utilizado na obtenção de soluções da equação de transporte mono-energética.

Desejamos notar que os resultados do capítulo IV dificilmente poderiam ter sido obtidos sem a diagonalização de  $(V)$  efetuada no capítulo III. Tal diagonalização permitiu-nos desenvolver um formalismo que, quando aplicado a problemas concretos, envolve operações em que comparecem funções algébricas - como no caso mono-energético - e não funções matriciais como ocorreria se tal diagonalização não fosse efetuada. Esperamos que esta simplificação importante nos permita estender o formalismo desenvolvido a outras geometrias, em especial às com simetria cilíndrica, e isto sem complexidades matemáticas que possivelmente tornariam quase impraticável seu uso em problemas de interesse para a Física de Reatores.

Por outro lado, a estreita analogia existente entre o método PEA e o das esféricas harmônicas clássico, levava-nos a esperar que todas as dificuldades e peculiaridades deste último se apresentassem, aumentadas mesmo, no método PEA; em particular, os problemas associados à descrição do espectro contínuo persistiram, como era previsível.

Por outro lado, cremos que esta mesma analogia estreita será um útil guia para tentarmos estender ao caso poli-energético certas variantes modernas do método das esféricas harmônicas, em particular as relacionadas com o novo esquema de truncamento desenvolvido por Pomraning<sup>(34-36)</sup> e no qual ênfase especial é dada às dificuldades relacionadas com o comportamento da solução aproximada nas vizinhanças de superfícies de separação.

Vários problemas foram, nesta tese, deixados em aberto. Entre

êles, desejamos citar dois que nos parecem mais importantes:

- I) o caráter completo das auto-funções, do método PEA, para as variáveis angular e espacial, não foi demonstrado, ao contrário do que ocorre no formalismo de Ferziger e Leonard. Esta situação não é característica do método PEA mas, conforme observa Wigner<sup>(23)</sup>, se apresenta para todos os métodos de aproximação.
- II) o caráter real dos  $\nu$  foi demonstrado, no Apêndice A-2, para uma certa classe de problemas. Se as condições físicas forem tais que existam  $\nu$  complexos, toda a análise feita no capítulo IV não se aplica. É uma situação nada satisfatória que, certamente, necessitará ser esclarecida, através de uma análise minuciosa das implicações físicas das condições que levam a  $\nu$  complexos.

## 5.2 - Conclusões

Nêste trabalho utilizamos consistentemente o método das esfêricas harmônicas para o tratamento da dependência angular das soluções da equação de transporte poli-energética, no caso de geometria plana e núcleo de espalhamento isotrópico.

A consideração de núcleo de espalhamento anisotrópico não introduz complicações sérias, desde que utilizemos o método geral desenvolvido por Travelli<sup>(27)</sup>:

A utilidade imediata que vemos no método que apresentamos repousa na possibilidade de tratar problemas concretos sem as complicações matemáticas que decorreriam da utilização da teoria exata (angular) de Ferziger e Leonard. Esta conjectura pode ser qualitativamente justificada se notarmos que, nos problemas de maior interesse para a Física de Reatores, comparecem sempre médias de grandezas físicas; e em tais médias, o fluxo de neutrons desempenha um papel de fator de peso. Assim, em geral, há uma preponderância grande dos valores do fluxo em regiões espaciais afastadas das superfícies de descontinuidade (ou de separação entre meios). Ora, como em tais regiões afastadas, a componente associada aos  $\nu_s^{(d)}$  é que é dominante, e esta é bem descrita no formalismo PEA, jus

tifica-se nossa conjectura da utilidade de tal formalismo no campo dos problemas reais de Física de Reatores. Aliás, a correção desta conjectura poderia ser baseada no próprio sucesso do método das esféricas harmônicas nos problemas mono-energéticos, onde aquela preponderância do fluxo associado aos  $v$  discretos foi verificada.

Partindo dessa constatação do caso mono-energético, a correção de sua extensão ao caso poli-energético dependeria tão somente da descrição adequada, por um número finito de termos, da dependência energética do fluxo de neutrons. Que tal descrição aproximada no método PEA seja adequada, não poderemos provar; mas certamente será melhor que uma descrição drasticamente simplificada como o é a da aproximação mono-energética.

Finalizando, o campo de aplicação do método PEA pode ser grande; mas, como todo método de aproximação, somente a comparação entre os resultados de sua aplicação a casos específicos e os resultados ou teóricos exatos ou experimentais, poderá determinar suas vantagens e limitações.

APÊNDICE A-1O MÉTODO DE FERZIGER E LEONARDA.1.1 - Introdução

O problema da obtenção de soluções aproximadas da equação de transporte poli-energética, em geometria plana e com núcleo de espalhamento isotrópico, foi recentemente tratado, entre outros autores, por Ferziger e Leonard, em uma série de três trabalhos indicados a seguir por:

$$FL-I^{(4)}; FL-II^{(21)} \text{ e } FL-III^{(37)}.$$

No primeiro trabalho —FL-I— a equação (2.1) especializada para espalhamento isotrópico e com

$$\Sigma(E) = \text{constante}$$

(aproximação de secção de choque independente da energia) foi resolvida através de:

- a) uma expansão de  $\Psi(x, E, \nu)$  em uma série conveniente de polinômios ortogonais na variável  $E$ ;
- b) solução do sistema de equações íntegro-diferenciais para os coeficientes da expansão acima, por um método exato desenvolvido por Case<sup>(38)</sup> para a equação de transporte mono-energética em geometria plana e espalhamento isotrópico.

A possibilidade de aplicar o método de Case ao sistema de equações obtido após a expansão em polinômios da energia, decorreu do fato de que em tal sistema não havia termos de acoplamento entre as diversas equações; em outras palavras: após o desenvolvimento, em série de polinômios em  $E$ , o sistema de equações resultante era constituído de um conjunto não acoplado de equações de transporte mono-energéticas.

Notemos que a ausência de acoplamento entre as equações do sistema era consequência direta da admissão de constância da secção de cho-

que total expressa por (4.1).

A eliminação da restrição acima foi conseguida por Ferziger e Leonard nos dois trabalhos subsequentes: FL-II e FL-III.

Em FL-II, após uma expansão em polinômios ortogonais na variável  $E$ , o sistema de equações íntegro-diferenciais, agora acopladas, foi resolvido depois de um desacoplamento parcial efetuado através de uma transformação de similitude. As soluções formais foram obtidas e seu caráter completo e ortogonal foi provado.

Finalmente, em FL-III, foi tratado um problema especial, de interesse para as aplicações: o de provar o caráter completo em relação a  $\mu$ , das soluções formais obtidas em FL-II para  $\mu$  nos intervalos  $0 \rightarrow 1$  e  $-1 \rightarrow 0$ ; a prova da completabilidade para  $\mu$  no intervalo  $-1 \rightarrow +1$  fôra feita em FL-II.

O trabalho FL-II, tratando do caso de secção de choque dependente da energia, é o que mais nos interessa. E, neste Apêndice, apresentaremos, com razoável detalhe, um resumo do trabalho FL-II, com o intuito de facilitar a compreensão de comparações desenvolvidas essencialmente no capítulo IV desta tese.

#### A-1.2 - Auto-valores e auto-funções no método FL

Considerando a equação (2.21) e especializando-a para o caso de espalhamento isotrópico, obtemos a equação básica tratada em FL-II:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} f(x, \mu) + (V) | f(x, \mu) \rangle = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu' \{ \alpha^0 \} | f(x, \mu') \rangle \quad (A-1.1)$$

A invariância translacional de (A-1.1) sugere que se ponha:

$$| f(x, \mu) \rangle = e^{-x/\nu} | f(\nu, \mu) \rangle . \quad (A-1.2)$$

A equação (A-1) fornece então:

$$\left(-\frac{\mu}{v} (I) + (V)\right) |f(v, \mu)\rangle = \frac{1}{2} (\alpha^0) |f(v)\rangle \quad (A-1.3)$$

com

$$|f(v)\rangle = \int_{-1}^1 d\mu' |f(v, \mu')\rangle . \quad (A-1.4)$$

No sistema (A-1.4) há acoplamento total entre as componentes de  $|f(v, \mu)\rangle$  introduzido tanto pela matriz  $(V)$  como pela  $(\alpha^0)$ , como ocorreu para o sistema básico (2.35) no método PEA.

Como já notamos, um desacoplamento total não é possível de ser obtido; e Ferziger e Leonard - em FL-II - introduziram uma transformação de similitude induzida por uma matriz ortogonal  $(S)$  (a mesma que utilizamos em (2.36)) tal que a matriz simétrica  $(V)$  se transformasse numa matriz diagonal  $(U)$ :

$$(S)^{-1} (V) (S) = (U) \quad (A-1.6)$$

$$U_{jk} = \beta_k \delta_{jk} \quad (A-1.7)$$

Como  $L(E) \geq 1$ , relembremos que os elementos  $\beta_k$  da matriz diagonal  $(U)$  são todos maiores de 1; e continuarão a ser ordenados de maneira tal que:

$$\beta_0 > \beta_1 > \beta_2 > \dots > \beta_L \geq 1 \quad (A-1.8)$$

Multiplicando a equação (A-1.3) por  $(S)^{-1}$  obtem-se:

$$\left(-\frac{\mu}{v} (I) + (U)\right) (|w(v, \mu)\rangle) = \frac{1}{2} (\gamma^0) |w(v)\rangle \quad (A-1.9)$$

com

$$|w(v, \mu)\rangle = (S)^{-1} |f(v, \mu)\rangle ; |w(v)\rangle = (S)^{-1} |f(v)\rangle \quad (A-1.10)$$

$$(\gamma^0) = (S)^{-1} (\alpha^0) (S), \quad (A-1.11)$$

Para prosseguir sua análise, FL observa que há duas regiões importantes para  $v$ .

a)  $v$  tal que não pertença ao intervalo  $(-\frac{1}{\beta_L}, +\frac{1}{\beta_L})$ ; (A-1.12)

b)  $v$  tal que pertença ao intervalo  $(-\frac{1}{\beta_L}, +\frac{1}{\beta_L})$ . (A-1.13)

Se  $v$  satisfizer a (A-1.12), ou seja, se

$$v \notin (-\frac{1}{\beta_L}, \frac{1}{\beta_L}),$$

segue que a matriz diagonal

$$(U(v, \mu)) = -\frac{\mu}{v} (I) + (U) \quad (A-1.14)$$

terá seus elementos diferentes de zero para todo  $\mu$  no intervalo  $(-1, 1)$ . Não será, assim, singular e existirá uma matriz diagonal  $(U(v, \mu))^{-1}$  com elementos dados por:

$$(U(v, \mu))_{jk}^{-1} = \frac{1}{-\frac{\mu}{v} + \beta_j} \delta_{jk}. \quad (A-1.15)$$

A solução de (A-1.9) será dada por

$$|w(v, \mu)\rangle = \frac{1}{2} (U(v, \mu))^{-1} (\gamma^0) |w(v)\rangle \quad (A-1.16)$$

Integrando ambos os membros em relação a  $\mu$ , entre  $-1$  e  $+1$ , obtemos:

$$|w(v)\rangle = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu (U(v, \mu))^{-1} \cdot (\gamma^0) |w(v)\rangle \quad (A-1.17)$$

Ous

$$w_j(v) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{d\mu \cdot v}{\beta_j v - \mu} \cdot \sum_{k=0}^L Y_{jk}^0 w_k(v) \quad (A-1.18)$$

$$w_j(v) = v \operatorname{arctgh} \left( \frac{1}{\beta_j v} \right) \cdot \sum_{k=0}^L Y_{jk}^0 w_k(v) \quad (A-1.19)$$

Introduzindo uma matriz  $(T(v))$  de elementos definidos por:

$$T(v)_{jk} = \delta_{jk} \cdot v \cdot \operatorname{arctgh} \left( \frac{1}{\beta_j v} \right) \quad (A-1.20)$$

a (A-1.19) pode ser escrita:

$$|w(v)\rangle = (T(v)) (Y^0) |w(v)\rangle \quad (A-1.21)$$

$$((I) - (T(v)) (Y^0)) |w(v)\rangle = 0 \quad (A-1.22)$$

A equação matricial (A-1.22) só terá soluções não triviais se  $v$  for solução da equação característica:

$$|| (I) - (T(v)) (Y^0) || = 0 \quad (A-1.23)$$

Haverá, assim, um conjunto  $\{v_\rho\}$  de auto-valores<sup>(21)</sup> aos quais estarão associadas auto-funções  $|w(v_\rho)\rangle$ . Na realidade, como o determinante é uma função par de  $v$ , se  $(+v_\rho)$  for um auto-valor,  $(-v_\rho)$  também sê-lo-á; e ao par estarão associadas duas auto-funções  $|w(+v_\rho)\rangle$  e  $|w(-v_\rho)\rangle$ .

Determinadas as auto-funções  $|w(\pm v_\rho)\rangle$ , a (A-1.16) fornece as auto-funções  $|w(\pm v_\rho, \mu)\rangle$  e, através da aplicação do operador  $(S)$ , obtemos os auto-vectores  $\{f(\pm v_\rho, \mu)\}$  soluções de (A-1.3):

$$|w(\pm v_\ell, \mu)\rangle = \frac{1}{2} [U(\pm v_\ell, \mu)]^{-1} (\gamma^0) |w(\pm v_\ell)\rangle \quad (\text{A-1.24})$$

$$|f(\pm v_\ell, \mu)\rangle = \frac{1}{2} (S) [U(\pm v_\ell, \mu)]^{-1} (\gamma^0) |w(\pm v_\ell)\rangle \quad (\text{A-1.25})$$

As componentes de  $|f(\pm v_\ell, \mu)\rangle$  serão:

$$F_j(\pm v_\ell, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{k,m=0}^L S_{jk} \frac{v_\ell}{\beta_k v_\ell \pm \mu} \gamma_{km}^0 w_m(v_\ell) \quad (\text{A-1.26})$$

Hã, assim, para  $v \notin (-\frac{1}{\beta_L}, \frac{1}{\beta_L})$  - real ou complexo - um espectro discreto de auto-valores e auto-vetores associado à equação básica (A-1.3).

Para  $v \in (-\frac{1}{\beta_L}, \frac{1}{\beta_L})$ , a matriz diagonal  $(U)$  definida por (A-1.14) será singular. A solução formal adotada por FL é uma extensão da solução formal proposta por Case<sup>(38)</sup> para o caso mono-energético.

De fato, FL propõe como solução formal da equação (A-1.9) a seguinte:

$$|w(v, \mu)\rangle = \frac{1}{2} [\mathcal{P}(U(v, \mu))^{-1}] (\gamma^0) (w(v)) + (\Gamma(v, \mu)) \quad (\text{A-1.27})$$

onde indicamos por  $[\mathcal{P}(U(v, \mu))^{-1}]$  que deve ser tomado o valor principal de cada elemento da matriz diagonal  $(U(v, \mu))$ ; e  $(\Gamma(v, \mu))$  é uma matriz coluna de elementos dados por:

$$\Gamma(v, \mu)_j = \lambda_j(v) \delta(\beta_j v - \mu) \quad (\text{A-1.28})$$

onde  $\lambda_j(v)$  é uma função no momento arbitrária.

Se  $v \notin (-\frac{1}{\beta_L}, \frac{1}{\beta_L})$ , a (A-1.27) se reduz a (A-1.16) cuja solução explícita já foi obtida.

Se  $v \in (-\frac{1}{\beta_L}, \frac{1}{\beta_L})$ , integrando em relação a  $\mu$  ambos os membros

de (A-1.27) entre  $(-1, +1)$ , obtemos:

$$|w(v)\rangle = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (U(v,\mu))^{-1} d\mu \cdot (\gamma) |w(v)\rangle + |\Gamma_1(v)\rangle \quad (A-1.29)$$

com

$$\Gamma_1(v)_j = \lambda_j(v) H(1 - |\beta_j v|) \quad (A-1.30)$$

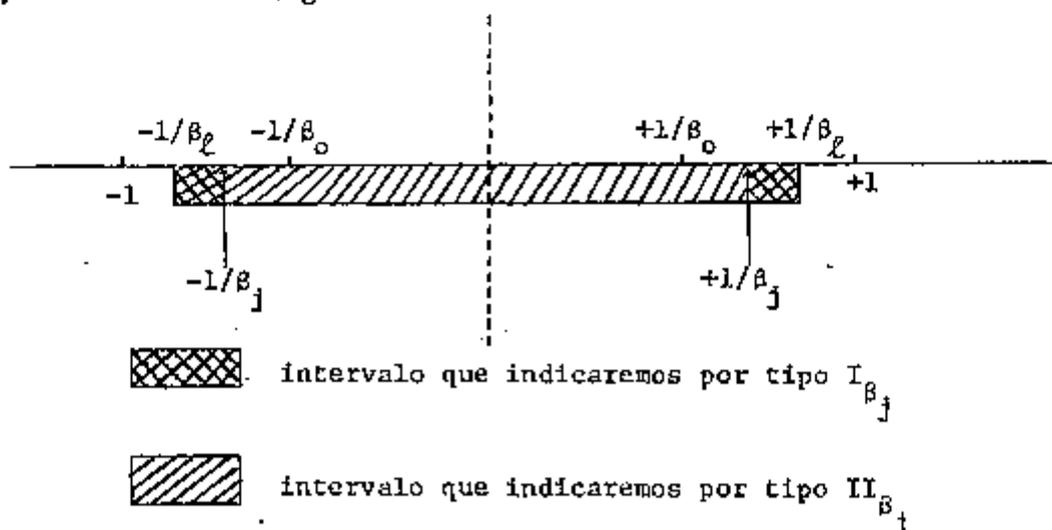
e  $H(x)$  a função de Heaviside:

$$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0 \\ 1 & \text{para } x > 0 \end{cases} \quad (A-1.31)$$

Para analisar a estrutura da equação (A-1.29) vamos escrevê-la como:

$$w_j(v) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{v d\mu}{\beta_j v - \mu} \sum_{k=0}^l \gamma_{jk}^0 w_k(v) + \lambda_j(v) H(1 - |\beta_j v|) \quad (A-1.32)$$

Recordando que os  $\beta_j$  foram ordenados numa seqüência decrescente, consideremos a figura abaixo:



Para um dado  $\beta_j$ , haverá dois intervalos de interesse para  $v$  real:

$$\begin{aligned}
 & I_{\beta_j} \rightarrow |\beta_j v| > 1 \\
 \text{ou} & \\
 & \frac{1}{\beta_L} > v < \frac{1}{\beta_j}
 \end{aligned}
 \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} & I_{\beta_j} \rightarrow |\beta_j v| > 1 \\ & \frac{1}{\beta_L} > v < \frac{1}{\beta_j} \end{aligned}} \right\} \text{(A-1.33)}$$

e

$$II_{\beta_j} \rightarrow |\beta_j v| < 1 \quad \text{(A-1.34)}$$

No intervalo  $I_{\beta_j}$ ,  $H(1-|\beta_j v|) = 0$  e os  $w_j(v)$  devem satisfazer a

$$w_j(v) = \operatorname{arctgh} \left( \frac{1}{\beta_j v} \right) \sum_{k=0}^L \gamma_{jk} w_k(v) \quad \text{(A-1.35)}$$

que coincide formalmente com a (A-1.19). Os auto-valores  $v_2$  que ainda satisfazem a equação característica (A-1.23) mas que caem no intervalo  $I_{\beta_j}$  definido por (A-1.33), pertencerão a um novo intervalo discreto fornecendo auto-funções discretas  $w_j(v_2)$  perfeitamente determinadas (a menos de uma constante).

No intervalo  $II_{\beta_j}$ , no entanto, temos uma situação diferente. De fato, como agora, para um dado  $\beta_j$ , tem-se  $|\beta_j v| < 1$ , a (A-1.32) nos dá:

$$w_j(v) = v \operatorname{arctgh} (\beta_j v) \sum_{k=0}^L \gamma_{jk}^0 w_k(v) + \lambda_j(v) \quad \text{(A-1.36)}$$

Escrevendo:

$$\lambda_j(v) = w_j(v) - v \operatorname{arctgh} (\beta_j v) \sum_{k=0}^L \gamma_{jk}^0 w_k(v) \quad \text{(A-1.37)}$$

e notando que os  $w_k(v)$  são agora funções arbitrárias de  $v$  desde que este pertença ao intervalo  $II_{\beta_j}$ , conclue-se que existe um espectro contínuo. As auto-funções desse espectro contínuo serão:

$$f_j(v, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{k,m=0}^L S_{jk} \Phi\left(\frac{v}{\beta_k}, \frac{\mu}{\beta_k}\right) Y_{km}^0 w_m(v) + \sum_{k=0}^L S_{jk} \lambda_k(v) \delta(\beta_k v - \mu) \quad (A-1.38)$$

Desejamos ainda acrescentar que, para satisfazer condições de contorno específicas, é necessário determinar as funções arbitrárias  $w_m(v)$  que aparecem em (A-1.38). Isto leva a problemas analíticos que não são simples, <sup>(37)</sup> o que tira do método de FL muito do seu valor nas aplicações concretas. Como exemplo, podemos citar que no cálculo do fator de desvantagem para o caso de espalhamento isotrópico e geometria plana, a determinação das funções  $w_m(v)$  é feita através de soluções de um sistema de equações integrais tipo Fredholm; e isto após um extenso cálculo de desacoplamento de equações integrais singulares acopladas <sup>(22)</sup>.

Estas dificuldades analíticas constituíram poderoso incentivo para o desenvolvimento do método que apresentamos, nesta tese, nos capítulos II e III.

A solução geral da equação básica (A-1.1), utilizando o método de FL-II será, coletando os resultados parciais obtidos:

$$\begin{aligned} \Psi(x, E, \mu) = & \sqrt{M(E)} \left[ \sum_{j=0}^n \sum_{s=0}^n g_j(E) (a_{(+)})_s f_j(v_s, \mu) e^{-\frac{x}{v_s}} + \right. \\ & \left. + a_{(-)}_s f_j(-v_s, \mu) e^{-\frac{x}{v_s}} \right] + \\ & + \sum_{j=0}^L g_j(E) \left[ \frac{1}{\beta_L} f_j(v, \mu) e^{-\frac{x}{v}} + \frac{1}{\beta_L} f_j(v, \mu) e^{-\frac{x}{v}} dv \right] \quad (A-1.39) \end{aligned}$$

entendendo-se que a integral deve ser considerada como uma somatória das eventuais auto-funções do espectro discreto para  $v$  no intervalo tipo  $I_{\beta_j}$  (eq. 4.37).

Esta apresentação, razoavelmente extensa, do método de Ferziger e Leonard pareceu-nos útil para tornar mais compreensível a análise feita no capítulo IV, do comportamento das soluções obtidas pelo método PEA quando o número de termos do desenvolvimento em polinômios de Legendre tende para infinito.



$$(c) = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline (u)-(y^0) & (q) & & \\ \hline (0) & 3\{(u)-(y^1)\} & & \\ \hline & & 5\{(u)-(y^2)\} & \\ & & \vdots & \\ & & \dots & \\ & & \vdots & \\ & & & 2(N+1)\{(u)-(y^N)\} \\ \hline \end{array} \quad (A-2.2)$$

pode-se ver imediatamente que o sistema (2.39) pode ser escrito sob a forma seguinte:

$$(A) |B_L^N\rangle = v(C) |B_L^N\rangle, \quad (A-2.3)$$

onde:

(A) e (C) são matrizes quadradas de ordem  $(N+1)(L+1)$ ;

$|B_L^N\rangle$  é um vetor (matriz coluna) de  $(N+1)(L+1)$  elementos da forma

$$|B_L^N\rangle = \begin{vmatrix} |B^0(v)\rangle \\ |B^1(v)\rangle \\ \vdots \\ |B^N(v)\rangle \end{vmatrix} \quad (A-2.4)$$

com os  $|B^n(v)\rangle (n=0,1,\dots,N)$  matrizes coluna de  $(L+1)$  elementos.

As matrizes que compoem como elementos da matriz (A), por exemplo, (2), são matrizes diagonais, de ordem  $(L+1)$ , com elementos dados por  $(2)_{ij} = 2\delta_{ij} (i,j=0,1,\dots,L)$ , e são também matrizes quadradas as que compoem como elementos da (C).

Notemos inicialmente que, no formalismo PEA, as matrizes  $(u)$  e  $(y^n)$  ( $n=0,1,\dots,N$ ) são tôdas simétricas e reais, conforme notamos no capítulo II.

Introduzindo o vetor  $\langle B_L^{N*} |$  - matriz linha de ordem  $(N+1)(L+1)$  - definido como a matriz conjugada transposta de  $|B_L^N\rangle$ , obtemos de (A-2.3):

$$\langle B_L^{N*} | (A) | B_L^N \rangle = v \langle B_L^{N*} | (C) | B_L^N \rangle \quad (\text{A-2.5})$$

Tomando o complexo conjugado de cada termo de (2.3) obtemos, por raciocínio análogo ao desenvolvido, a seguinte equação:

$$\langle B_L^N | (A)^* | B_L^{N*} \rangle = v^* \langle B_L^N | (C)^* | B_L^{N*} \rangle \quad (\text{A-2.6})$$

Subtraindo (A-2.6) de (A-2.5):

$$\langle B_L^{N*} | (A) | B_L^N \rangle - \langle B_L^N | (A)^* | B_L^{N*} \rangle = v \langle B_L^{N*} | (C) | B_L^N \rangle - v^* \langle B_L^N | (C)^* | B_L^{N*} \rangle \quad (\text{A-2.7})$$

Como  $[A]$  e  $[C]$  são matrizes hermitianas (reais e simétricas), segue que:

$$\langle B_L^{N*} | (A) | B_L^N \rangle = \langle B_L^N | (A)^* | B_L^{N*} \rangle \quad (\text{A-2.8})$$

$$\langle B_L^{N*} | (C) | B_L^N \rangle = \langle B_L^N | (C)^* | B_L^{N*} \rangle \quad (\text{A-2.9})$$

Portanto:

$$(v-v^*) \langle B_L^{N*} | (C) | B_L^N \rangle = 0 \quad (\text{A-2.10})$$

Logo,  $v$  será real se:

$$\langle B_L^{N*} | (C) | B_L^N \rangle \neq 0 \quad (\text{A-2.11})$$

o que será verdadeiro se  $(C)$  for uma matriz positiva definida<sup>(39)</sup>;

Como a condição necessária e suficiente para que uma matriz seja positiva definida é que seus auto-valores sejam positivos, os  $\nu$  serão reais para a classe de problemas físicos onde a condição acima for satisfeita.

Mesmo para meios puramente moderadores, não parece ser possível demonstrar que  $(C)$  seja positiva definida, em geral. E, conforme indicamos no capítulo V, se existirem  $\nu$  complexos, encontramos em face de uma situação bastante difícil. Logo, a admissão feita no capítulo IV, de serem todos os  $\nu$  reais, é uma hipótese que necessita um estudo mais completo, para precisar seu campo de validade.

BIBLIOGRAFIA

- 1 - B. Davison - "Neutron Transport Theory"; Oxford University Press (1958).
- 2 - A.M.Weinberg and E.P.Wigner - "The Physical Theory of Neutron Chain Reactors"; the University of Chicago Press (1958).
- 3 - R.V.Megheblian and D.K.Holmes - Reactor Analysis; McGraw Hill (1960).
- 4 - A.Leonard and J.H.Ferziger, Ann. Phys., 22, 192 (1963).
- 5 - M.M.R.Williams, Nucl. Sci. Eng., 18, 260 (1964).
- 6 - J. Arkuszewski, BNL - 10045, Brookhaven National Laboratory (1966) e Nucl. Sci. Eng., 27, 104 (1967).
- 7 - J.Mika, Nucl. Sci. Eng., 22, 235 (1965).
- 8 - M.M.R.Williams, J. Math. Phys., XLV, 1, 64 (1966).
- 9 - M.M.R.Williams, Nucl. Sci. Eng., 27, 511 (1967).
- 10 - E.Wigner and J.E.Wilkins Jr, - AECD - 2275 (1948).
- 11 - J.E.Wilkins Jr, CP - 2481.
- 12 - K.H. Beckurts and K.Wirtz, - "Neutron Physics"; Springer Verlag (1964).
- 13 - W.R.Conkie, - Nucl. Sci. Eng., 1, 295 (1960).
- 14 - R.R.Kladnik and I.Kuscer, Nucl. Sci. Eng., 11, 116 (1961).
- 15 - Z. Weiss, Nukleonika, VI, 11, 703 (1961).
- 16 - M.Kazarnovsky, Proc. Geneva Conf., 16 (1958).
- 17 - W.Hafele and L.Dresner, Nucl. Sci. Eng., 7, 304 (1960).
- 18 - M.M.R.Williams - "The Slowing Down and Thermalization of Neutrons"; North Holland Publishing Co. (1966).
- 19 - W.R.Conkie, Nucl. Sci. Eng., 18, 370 (1964).
- 20 - N.C.Francis - "Reactor Physics in the Resonance and Thermal Regions" edited by A.J.Goodjohn and G.C.Pomraning; MIT Press (1966).
- 21 - A.Leonard and Joel H.Ferziger, Nucl. Sci. Eng., 26, 170 (1966).
- 22 - Alan H.Robinson - "Transport Theoretic Calculations of the Disadvantage Factor", Tese de Doutorado; Stanford University (1965).
- 23 - E.Wigner, Proc. Symp. App. Math., 11, 89 (1961).
- 24 - E.Richard Cohen - Proc. Geneva Conf., 5, 406 (1958)
- 25 - M.S.Nelkin and G.J.Habetler, Nucl. Sci. Eng., 1, 280 (1956).

- 26 - A.Travelli and Gerald P.Calame, Nucl. Sci. Eng., 20, 414 (1964).
- 27 - A.Travelli - "Thermal Neutron Transients in Various P-N Approximations", Tese de Doutorado; Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, New York (1963).
- 28 - W. Kofink - "Studies of the Spherical Harmonics Method in Neutron Transport Theory" - I; ORNL - 2334 (1957); - II : ORNL - 2358 (1957).
- 29 - E. Jahnke and F.Emde - "Tables of Functions"; Dover (1945).
- 30 - E.T.Whittaker and G.N. Watson - "Modern Analysis"; Cambridge University Press (1940).
- 31 - A.Erdelyi, F. Oberhettinger and F.G.Triconi, "Higher Transcendental Functions", vol II; McGraw-Hill Co. (1953); *ibid*, vol I; McGraw-Hill Co. (1953).
- 32 - Donald H. Roy and Raymond L.Murray, BAW - 245 (1964); Babcock and Wilcox Co., Lynchburg, Va., USA.
- 33 - S.Gallone, G.Chiliardotti, *Il Nuovo Cimento*, 31, 203 (1964).
- 34 - G.C.Pomraning, *Nucleonik*, 6, 348 (1965).
- 35 - G.C.Pomraning, Nucl. Sci. Eng., 22, 328 (1965).
- 36 - M.Copic, Nucl. Sci. Eng., 26, 289 (1966).
- 37 - A.Leonard and Joel H.Ferziger, Nucl. Sci. Eng., 26, 181 (1966).
- 38 - K.M.Case, *Ann. of Phys.*, 9, 1 (1960).
- 39 - R.Bellman - "Introduction to Matrix Analysis", McGraw-Hill (1960).

AGRADECIMENTOS

Desejamos expressar nossos agradecimentos:

Aos Professores Shiguo Watanabe e Oscar Sala pelo incentivo prestado na realização deste trabalho e ao Professor Jayme Tiomno e Professora Wilma Sonia C. Nehl, pela completa revisão, acompanhada de úteis sugestões, do original desta tese.

Ao Licenciado Antonio Soares Gouvêa pela elaboração dos programas digitais e pela realização dos cálculos no computador do Instituto de Energia Atômica.

À Srta. Terezinha Cairés pela dedicação e competência no complexo trabalho de datilografia a duas esferas, e ao Sr. Adhemar Dias da Silva pelo interesse e eficiência demonstrados durante o processo de impressão.

Ao Instituto de Energia Atômica, pelas facilidades que seu Diretor Professor Rômulo Ribeiro Pieroni, nos ofereceu, inclusive pondo à nossa disposição, com prioridade, o uso do computador IBM-1620.

Ao Professor Tibor David diretor da Editora Clássico-Científica, pela gentileza em nos oferecer, em tempo recorde, o material, a impressão e a confecção da capa deste trabalho.