Problemas de Matemática na Teoria dos Reactores Nucleares (*)

por José Gaspar Teixeira

Vinte anos são passados sobre a realização da primeira experiência nuclear crítica. Pode dizer-se que os problemas teóricos que determinaram o seu exito são clássicos e que muitos outros cujo enunciado dela resultou estão a entrar igualmente no domínio do classicismo científico; ao mesmo tempo que as suas soluções contribuem já eficazmente para o progresso económico das nações que prosseguem nas sendas dos Fermis, dos Joliots, dos Kurchatovs.

Nesta perspectiva, a enunciação dos Problemas de Matemática na Teoria dos Reactores Nucleares pode portanto corresponder a um tema, de conteúdo clássico, em torno do qual seja possível polarizar uma actividade de aperfeiçoamento de conhecimentos de matemática aplicada e de física teórica dos nossos dias.

É com este objectivo que o apresentamos ao iniciar os trabalhos da secção «Métodos Matemáticos da Física», a desenvolver no Centro de Tratamento da Informação — CENTI.

Os problemas científicos que se põem na construção de um reactor nuclear são, não só o da determinação das suas condições de Ao falarmos, porém, da Teoria dos Reactores Nucleares (TRN), limitar-nos-emos aos problemas de determinação das densidades neutrónicas ou dos fluxos neutrónicos, como função do tempo do ponto e da energia do neutrão, das condições de reacção em cadeia, aos problemas da penetração das radiações e, consequentemente, das colisões nucleares.

Mesmo os aspectos macroscópicos que interessam na TRN resultam de fenómenos que se processam em regiões cujo «raio» varia entre 10^{-9} e 10^{-15} cm, interessando partículas (elementares, núcleos ou mesmo átomos) que se distribuem com densidades entre 10^6 e 10^{24} partículas/cm⁵. O instrumento adequado à tradução analítica destes fenómenos, instrumento aliás nem sempre eficiente, é a mecânica quântica.

Contudo, na maioria dos casos, as condições reais são de molde a permitir a utilização da mecânica clássica. Os problemas dos casos restantes, principalmente os que dizem

criticalidade (1) mas também muitos outros nos muitos variados campos da química e metalurgia, das termo e hidrodinâmicas, da protecção contra as radiações, das estabilidades mecânicas e nuclear, da física nuclear, etc.

^(*) Neste artigo nada de original se apresenta. Apenas se compilaram aspectos e resultados publicados por diversos autores com o objectivo de enunciar, como se diz, vários temas de trabalho no campo das matemáticas aplicadas.

⁽¹) Aos leitores não iniciados nos problemas ligados à utilização da Energia Nuclear aconselhamos a consulta prévia de:

ALICE MAIA MAGALHÃES e Túlio Lopes Tomás — Compêndio de Química para o 6.º ano liceal — Cap. XVI, Lisboa 1962,

J. Sant'Ana Dionisio — Reactores Nucleares, Seara Nova, 1958.

respeito à determinação das secções eficazes dos diversos materiais, grandezas que traduzem o comportamento das partículas nesses diferentes meios materiais são, em regra, de muito difícil solução; tem sido sistemàticamente estudados mas os resultados são ainda insuficientemente conhecidos.

Tratando portanto da TRN consideramos seguidamente os três problemas

- a) Densidades e fluxos neutrónicos,
- b) Criticalidade das reacções em cadeia,
- c) Penetração das radiações.

FLUXOS NEUTRÓNICOS

Hipóteses da Teoria Geral dos Reactores Nucleares

A teoria matemática que permite calcular o fluxo neutrónico no núcleo de um reactor nuclear baseia-se nos seguintes factos e hipóteses de natureza física:

As leis de interacção entre os neutrões e o meio ambiente devem estabelecer-se por meio da mecânica quântica.

- 1 A natureza ondulatória dos neutrões só se manifesta, porém, duma forma determinante apenas nos fenómenos de difracção nos meios cristalinos. Nestes casos, a introdução de uma anisotropia do meio permite reduzir a descrição dos referidos processos a termos simplesmente corpusculares.
- 2 Quanto à variável quântica, o spin, os neutrões dividem-se em dois grandes grupos, os de helicidade direita (spin paralelo à velocidade) e os de helicidade esquerda (spin anti-paralelo à velocidade); e as secções eficazes dos materiais tomam valores diferentes se bem que muito próximos para os diferentes valores de spin. Além

disso as transições entre as duas heli cidades são suficientemente frequentes por forma que os neutrões se podem considerar pràticamente não polarizados.

Estas duas hipóteses permitem remover eficazmente as dificuldades decorrentes da natureza quântica dos fenómenos e aceitar o ponto de vista clássico.

- 3 O número de neutrões é suficientemente grande para que
 - a) os neutrões possam ser considerados estatisticamente, e indiscerníveis quando caracterizados por identicos valores das variáveis que os definem;
 - b) a função fluxo neutrónico possa ser considerada contínua a respeito de todas as suas variáveis.

2. A Teoria do transporte. Enunciado Geral

As hipóteses anteriores permitem considerar os neutrões existentes no núcleo de um reactor nuclear como constituindo um gas que obedece ao princípio do determinismo mecanicista, e está sujeito à lei geral da difusão dos gases estabelecida em 1896 por Boltzmann e conhecida por Teoria do Transporte.

Fundamentalmente, pretende-se determinar uma função

$$\Phi(\mathbf{x}, E, \Omega; t)$$

denominada fluxo neutrónico e que representa, no instante t, o produto do número pela velocidade dos neutrões que satisfazem às condições seguintes:

- a) existem no volume unidade centrado em x:
- b) possuem energias contidas na banda de amplitude unidade centrada em E;
- c) estão animados de velocidades cuja direcção é interior ao ângulo sólido unidade de eixo Ω.

Evidentemente, a função Φ e as variáveis \mathbf{x} , E, Ω podem ser substituídas, na teoria do transporte, por outras equivalentes.

3. Primeira dificuldade; primeira divisão. Primeiro problema

O fluxo neutrónico afecta o meio do reactor: nomeadamente, se a produção de calor pelo processo de cisão nuclear faz variar sensivelmente os valores das secções eficazes e das dimensões geométricas dos diversos materiais, os próprios fenómenos nucleares alteram a constituição química dos componentes do núcleo do reactor.

Tudo isto significa que a equação de transporte é não-linear.

Conclue-se assim que a TRN leva-nos directa e naturalmente ao estudo da mecâ-nica ndo-linear.

Como se sabe, a mecânica não-linear ainda é muito insuficientemente conhecida (1).

No entanto, a teoria da estabilidade de Liapounov que tem na mecânica não-linear um papel comparável ao do critério de Routh-Hurwitz na estabilidade das equações lineares, já foi definitivamente formulada em 1892!

Em face das dificuldades decorrentes da situação acabada de referir, os problemas gerais da TRN grupam-se naturalmente em

- a) Estática do Reactor
- b) Dinâmica do Reactor.

a) Na Estática do Reactor consideram-se os fenómenos para os quais as equações de transporte se mantém lineares.

Isto implica em primeiro lugar o desprezo dos efeitos das colisões neutrão-neutrão.

A hipótese de linearidade dá à equação de transporte características de muito maior simplicidade do que no caso da teoria geral da cinética dos gases.

Implica igualmente que os fenómenos em consideração sejam ou independentes do tempo, ou de possível estudo num intervalo de tempo suficientemente pequeno dentro do qual não se produzam alterações sensíveis das temperaturas, das dimensões e da constituição química dos diversos materiais constituires do núcleo do reactor.

Com efeito, os fluxos neutrónicos reais são, nos reactores nucleares actuais, suficientemente baixos para que a hipótese do desprezo das colisões neutrão-neutrão seja sempre justificada.

Por outro lado, o centro de interesse da Estática do Reactor reside nos aspectos matemáticos das teorias que permitem a determinação das secções eficazes mediadas sobre sistemas heterogéneos e dos fluxos neutrónicos nos referidos sistemas. Neste campo, enquanto que os aspectos físicos do problema estão relativamente bem compreendidos, existem dificuldades consideráveis no campo matemático para a resolução da equação de transporte.

b) Na Dinâmica do Reactor os problemas ou são considerados sob uma forma elementar, ou conduzem directamente a aspectos específicos da mecânica não-linear.

Harvey Brooks (1) referindo-se aos reactores de maior complexidade, os de maior

⁽¹⁾ Solomon Lefschetz, num relatório apresentado à «United States Air Force» sobre a investigação no campo das equações diferenciais e mecânica não-lineares diz: «um ponto de particular importância está em que o desenvolvimento da teoria da estabilidade de Liapounov e a sua aplicação a certos métodos e técnicas tem sido quase completamente ignorados fora da URSS». (Cf. Lefschetz e La Salle: Recent Soviet contributions to ordinary differential equations and non-linear mechanics — R. I. A. S. Technical Report 59-3, April 1959).

⁽¹⁾ Cf HARVEY BROOKS — Temperature coefficients and stability. Symposium of the A. M. S. 1959.

potência, divide os problemas da dinâmica em três grandes classes:

- Problemas de pequenas oscilações, perante as quais as equações do reactor podem ser linearizadas. Aqui se incluem as questões da estabilidade relativa a pequenas perturbações em torno da posição de funcionamento do reactor em regimen estacionário.
- 2) Problemas de grandes oscilações, perante as quais as equações do reactor já não podem ser linearizadas. Aqui, a amplitude das oscilações é limitada pelos picos de carga (1) dos quais não resultem alterações permanentes ou irreversíveis na estrutura física do reactor, isto é, oscilações não destrutivas.
- 3) Problemas de variações excepcionalmente grandes das condições de regimen do reactor, das quais resultem alterações permanentes na sua estrutura, como por exemplo, fusão do combustível, expulsão permanente do refrigerante, etc. Nestes problemas somos geralmente solicitados pelos processos de auto-domínio da distorção, isto é, preocupam-nos os aspectos que constituem a análise dos acidentes fortuitos nos reactores nucleares.

Em face do que acabamos de expor, consideramos que um dos objectivos fundamentais de uma actividade de aperfeiçoamento de conhecimentos de matemática aplicada à Teoria dos Reactores Nucleares — o Primeiro Problema — é o estudo da

TEORIA DAS OSCILAÇÕES (2).

A Teoria do Transporte. Duas atitudes diferentes (1).

A grande variedade de métodos de resolução das equações de transporte pode dividir-se, do ponto de vista da matemática, em dois grupos.

A situação é idêntica à criada pelas atitudes de RIEMANN e LEBESGUE em face do conceito de integral ou ainda por EULER e LAGRANGE perante as equações da dinâmica clássica dos fluidos. Assim, no método de Boltzman, considera-se um elemento de volume e o número de neutrões nele existentes, cujas energias e direcção de deslocamento são determinadas. Alternativamente, podemos fazer incidir a atenção sobre um neutrão e segui-lo ao longo das sucessivas colisões até a sua absorpção. Evidententemente este último método é mais complexo, até porque fornece mais informações do que as necessárias, pois dá não só o número dos neutrões absorvidos num dado ponto, como os que têm origem nesse mesmo ponto. Pela sua complexidade, na prática este método é posto de parte e substituído pelo de Boltz-MANN. Entretanto ele promete vir a ser de grande utilidade, principalmente no que respeita a mudanças de fluxo. Já existem publicados alguns trabalhos interessantes sobre este assunto (2).

5. A equação de Boltzmann

A equação de Boltzmann pode estabelecer-se considerando que a variação do fluxo $\Phi(\mathbf{x}, E, \Omega)$ é devida a duas causas:

 saída dos neutrões para o exterior do volume elementar x:

⁽⁴⁾ Como se disse, referimo-nos a reactores para produção de energia, evidentemente ligados a uma rede.

⁽²⁾ Bibliografia fundamental: Andronov, VITT е Снави — Teoria Kolebanii — 1960. Existe tradução incompleta, mas suficiente para primeiro estudo, da 1.ª edição de 1937, para inglês: Andronow е Снави — Theory of Oscilations, Princeton Univ. Press, 1949.

⁽¹⁾ Cf. E. P. Wigner - Problems of Nuclear Reactor Theory. Symposium of the A. M. S. 1959.

⁽²⁾ Cf. C. C. Grosjean — Nuovo Cim. 3 (1956), pág. 1262, as Publicações 1691-1692 — Conf. Genebra, 1958, e E. P. Wigner, Phys. Rev. 94 (1954), pág. 17.

$$-v\left(\Omega_{x}\frac{\partial\Phi}{\partial x} + \Omega_{y}\frac{\partial\Phi}{\partial y} + \Omega_{z}\frac{\partial\Phi}{\partial z}\right)$$
$$v = \sqrt{2E/M}$$

 variação da velocidade (mas não da posição) dos neutrões devida às colisões:

$$\Phi(\mathbf{x}, E, \Omega)$$

diminue como resultados das colisões dos neutrões que no ponto \mathbf{x} possuiam energia E e velocidade segundo Ω

$$-v\Sigma(\mathbf{x},E)\Phi(\mathbf{x},E,\Omega);$$

aumenta como resultado das colisões dos neutrões que no ponto \mathbf{x} tinham energia E', diferente de E, e velocidade de direcção Ω' , diferente de Ω , e por colisão passaram a ter energia E e velocidade segundo Ω

$$v \int dE' \int \Sigma(\mathbf{x}, E' \to E, \Omega' \to \Omega) \Phi(\mathbf{x}, E', \Omega') d\Omega'.$$

A variação total do fluxo neutrónico no ponto x é dada pela soma das expressões anteriores, e a equação de Boltzmann escreve-se

(1)
$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -v(\Omega \cdot \operatorname{grad} + \Sigma(\mathbf{x}, E)) \Phi(\mathbf{x}, E, \Omega) + v \int dE' \int d\Omega' \Sigma(\mathbf{x}, E' \to E, \Omega' \to \Omega) \cdot \Phi(\mathbf{x}, E', \Omega').$$

Aqui admite-se que

- a secção eficaz de moderação Σ(x, E)
 é independente da direcção Ω, excepto quando os efeitos cristalinos são sensíveis:
- a secção eficaz de transferência $\Sigma(\mathbf{x}, E' \to E, \Omega' \to \Omega)$ depende apenas do ângulo entre as direcções Ω e Ω' ;
- ambas as secções eficazes são independentes do tempo (hipótese de lineari-

dade) e do ponto, excepto nas superfícies de separação de dois meios diferentes onde apresentam discontinuidades finitas;
as superfícies de separação de meios diferente contíguos são invariáveis no tempo.

Nos casos mais simples, reactor homogéneo e nú, ambas as secções eficazes são independentes de $\mathbf x$ em todos os pontos do mesmo meio e identicamente nulas no vazio. Ambas as secções eficazes podem apresentar variações violentas como funções de E, ou de E e E'. A secção eficaz de transferência varia, em geral, lentamente com $\Omega \cdot \Omega'$.

Nos meios não absorventes nem multiplicativos temos a igualdade

(2)
$$\int dE \int d\Omega \cdot \Sigma(\mathbf{x}, E' \to E, \Omega' \to \Omega) = \Sigma(\mathbf{x}, E')$$

Mas se a absorpção predomina sobre a multiplicação a igualdade anterior transforma se em desigualdade:

$$(2 a) \int \! dE \int \! d\Omega \cdot \Sigma(\mathbf{x}, E' \to E, \Omega' \to \Omega) \! < \! \Sigma(\mathbf{x}, E'),$$

passando-se o contrário

(2b)
$$\int dE \int d\Omega \Sigma(\mathbf{x}, E' \to E, \Omega' \to \Omega) > \Sigma(\mathbf{x}, E')$$

no caso da multiplicação neutrónica predominar.

Assim a intervenção de uma relação do tipo (2) na expressão (1) pode traduzir um processo de absorpção ou de multiplicação, como o caso da cisão.

Como se disse, a teoria do transporte para os neutrões é mais simples que a dos gases pois as equações fundamentais respectivas são lineares. Esta maior simplicidade é, até certo ponto, prejudicada pelo maior livre percurso médio (1) dos neutrões comparado com o livre percurso médio dos átomos dum gás. Este último é da ordem de 10-5 cm à pressão ordinária, o que permite concluir que as propriedades do gás variam muito pouco ao longo de uma distância daquela ordem de grandeza. O livre percurso médio dos neutrões é da ordem de alguns centímetros mesmo nos materiais mais compactos, donde se conclui que há uma muito maior probabilidade em um neutrão sofrer uma colisão em determinado meio para sofrer a colisão seguinte em outros meios com características muito diferentes. Além disso a grande simplificação que é legítima na teoria cinética dos gases e consiste em eliminar a dependência do fluxo da direcção Ω, não é válida no transporte neutrónico.

Mesmo considerando os casos de estacionaridade, Φ ainda depende em geral de seis variáveis, e funções com este número de variáveis independentes são dificilmente manuseáveis em cálculo, registáveis em gráficos e visualisáveis.

É esta a razão por que se consideram situacões em que se verifica um alto grau de simetria geométrica. Por um lado, como se disse, a equação do reactor, é regra geral invariante em face de uma translacção no tempo; além disso, as secções eficazes são constantes em regiões bem definidas. Nestas condições o fluxo global P pode ser considerado como um «puzzle» obtido a partir das diversas soluções da equação de transporte relativas às diversas regiões consideradas homogéneas, admitindo a continuidade do fluxo P nas superfícies de separação de dois meios distintos. Na realidade, esta maneira de proceder é bastante simplificada se as diversas regiões têm formas simétricas.

6. Aplicações

Terminaremos as considerações gerais contidos no parágrafo anterior com alguns exemplos práticos de aplicação da equação de transporte.

6.1. Definições

Dá-se o nome de

 a) densidade angular em fase de uma distribuição de neutrões, e representa-se por

$$\psi(\mathbf{x}, E, \Omega, t)$$

o número de neutrões que, no instante t,

- 1) existem no volume unidade centrado em x;
- 2) possuem energias contidas na banda de amplitude unidade centrada em E;
- estão animados de velocidades cuja direcção é interior ao ângulo sólido unidade orientado segundo o vector unitário Ω.

De interesse equivalente é o vector

b) corrente angular em fase

$$J = v \Omega \cdot \psi (\mathbf{x}, E, \Omega, t)$$

cuja intensidade é o

c) fluxo angular em fase

$$\Phi(\mathbf{x}, E, \Omega, t)$$

já definido no parágrafo 2:

$$J = \Phi \Omega$$
.

Semelhantemente se consideram as noções integrais correspondentes:

a. 1) densidade

$$\rho\left(\mathbf{x},E,t\right)=\int\psi\left(\mathbf{x},E,\Omega,t\right)d\Omega$$

b. 1) corrente

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, E, t) = \int v \Omega \cdot \psi(\mathbf{x}, E, \Omega, t) d\Omega,$$

adoptando-se na teoria da difusão a designação de

c. 1) fluxo à intensidade

$$\varphi(\mathbf{x}, E, t) = v \cdot \rho(\mathbf{x}, E, t)$$

deste vector corrente.

⁽¹) O livre percurso médio duma partícula num determinado meio é a média aritmética dos trajectos que a partícula pode percorrer entre dois choques consecutivos quando se desloca nesse meio.

6. 2. Hipóteses limitativas

No que vai seguir-se consideraremos apenas uma distribuição estacionária de neutrões monoenergéticos (1). Então teremos

densidade angular

$$\psi(\mathbf{x},\Omega)$$

corrente angular

$$J(\mathbf{x},\Omega) = v \Omega \cdot \psi(\mathbf{x},\Omega)$$

fluxo angular

$$\Phi\left(\mathbf{x},\Omega\right)=v\cdot\psi\left(\mathbf{x},\Omega\right)$$

densidade

$$\rho\left(\mathbf{x}\right) = \int \psi\left(\mathbf{x},\Omega\right) d\Omega$$

corrente

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \int v \, \Omega \cdot \psi \left(\mathbf{x} \,, \Omega \right) \, d \, \Omega$$

fluxo

$$\varphi\left(\mathbf{x}\right)=v\cdot\rho\left(\mathbf{x}\right).$$

6. 3. Equação de continuidade

Sob quaisquer hipóteses, a equação de transporte traduz, como se disse em 5, uma condição de continuidade da distribuição neutrónica

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J} = q - \sigma,$$

sendo

$$q(\mathbf{x}, E, \Omega, t)$$

densidade angular de fontes neutrónicas e

$$\sigma(\mathbf{x}, E, \Omega, t)$$

densidade angular de secção eficaz de absorpção neutrónica, ambas funções características do meio ambiente.

Assim, por exemplo, sempre em regimen estacionário e

a) no vácuo a equação de transporte reduz-se a

$$\operatorname{div}\left[v\,\Omega\cdot\psi\left(\mathbf{x}\,,\Omega\right)\right]=0$$

que dá

$$\Omega \cdot \operatorname{grad} \psi(\mathbf{x}, \Omega) = 0$$

ou

$$\frac{d\psi}{ds}=0,$$

sendo ds tomado segundo a direcção Ω.

$$\psi(\mathbf{x},\Omega) = \psi(\mathbf{x} - s\Omega,\Omega) = \text{const.}$$
:

a densidade angular é constante sobre a direcção Ω.

b) num meio contendo fontes, é

$$\operatorname{div} \left[v \Omega \cdot \psi \left(\mathbf{x} , \Omega \right) \right] = q \left(\mathbf{x} , \Omega \right)$$

o que dá

$$\frac{d\psi}{ds} = Q(\mathbf{x}, \Omega) \qquad Q(\mathbf{x}, \Omega) = \frac{1}{v} \cdot q(\mathbf{x}, \Omega)$$

donde

$$\psi(\mathbf{x},\Omega) = \int_0^\infty Q(\mathbf{x} - s\Omega,\Omega) ds$$

- c) Se o meio se caracteriza por
- 1) densidade angular de fontes, $q(\mathbf{x}, \Omega)$;
- 2) densidade angular de secção eficaz de absorpção, o;

dois casos ainda podemos considerar:

 $I - \sigma = const$:

$$\Omega \cdot \operatorname{grad} \psi(\mathbf{x}, \Omega) = Q(\mathbf{x}, \Omega) - \sigma \cdot \psi(\mathbf{x}, \Omega)$$
.

Como

$$e^{\sigma \mathbf{x} \cdot \Omega} [\Omega \cdot \operatorname{grad} \psi(\mathbf{x}, \Omega) + \sigma \psi(\mathbf{x}, \Omega)] = Q(\mathbf{x}, \Omega) e^{\sigma \mathbf{x} \cdot \Omega}$$

vem

$$\Omega \cdot \operatorname{grad} \left[e^{\sigma \mathbf{x} \cdot \Omega} \cdot \psi \left(\mathbf{x}, \Omega \right) \right] = Q \left(\mathbf{x}, \Omega \right) e^{\sigma \mathbf{x} \cdot \Omega}$$

ou

$$e^{\sigma \mathbf{x} \cdot \Omega} \cdot \psi(\mathbf{x}, \Omega) = \int_{0}^{\infty} Q(\mathbf{x} - s\Omega, \Omega) e^{\sigma(\mathbf{x} - s\Omega) \cdot \Omega} ds$$

ou ainda

$$\psi(\mathbf{x},\Omega) = \int_0^\infty Q(\mathbf{x} - s\Omega,\Omega) e^{-\sigma s} ds.$$

II - σ função de ponto, σ (x):

Cálculo semelhante dá (1)

$$\psi(\mathbf{x},\Omega) = \int_0^\infty Q(\mathbf{x} - s\Omega,\Omega) e^{-\int_0^s \sigma(\mathbf{x} - t\Omega) dt} ds.$$

- d) Consideremos finalmente o caso de o meio se caracterizar por
 - densidade angular de fontes q (x, Ω);
- densidade angular de secção eficaz de colisão (não puramente absorvente), σ (x);
- número médio c (x) de neutrões secundários emitidos depois da colisão em x de um neutrão,
- 4) fracção $f(\mathbf{x}, \Omega' \to \Omega) d\Omega'$ de neutrões emitidos na direcção Ω depois da colisão em \mathbf{x} de um neutrão que seguia segundo a direcção Ω' ;

⁽¹) É evidente que estas condições se verificam apenas na ausência de colisões dos neutrões com partículas, que provocariam diminuição da energia cinética.

^{(&#}x27;) Cf. K. M. Case, F. Hoffman, G. Placzec - Introduction to the Theory of Neutron Diffusion, Vol. 1, Los Alamos, 1953.

a equação de transporte escreve-se agora

1)
$$\Omega \cdot \operatorname{grad} \psi(\mathbf{x}, \Omega) = Q(\mathbf{x}, \Omega) - \sigma(\mathbf{x}) \cdot \psi(\mathbf{x}, \Omega) + c(\mathbf{x}) \cdot \sigma(\mathbf{x}) \int \psi(\mathbf{x}, \Omega') \cdot f(\mathbf{x}, \Omega' \to \Omega) d\Omega$$
.

Admitindo que o segundo membro resulta de uma afonte generalizada» temos

$$\psi\left(\mathbf{x},\Omega\right)=\int_{0}^{\infty}K\left(\mathbf{x}-s\,\Omega\,,\Omega\right)e^{-\int_{0}\sigma\left(\mathbf{x}-t\Omega\right)dt}\,ds\,,$$

com

$$\begin{aligned} v \cdot K(\mathbf{x}, \Omega) &= \left[Q(\mathbf{x}, \Omega) + \right. \\ &+ c(\mathbf{x}) \cdot \sigma(\mathbf{x}) \cdot \int \psi(\mathbf{x}, \Omega') \cdot f(\mathbf{x}, \Omega' \to \Omega) \, d\Omega' \right] \cdot v, \end{aligned}$$

densidade angular de fonte generalizada.

6.4. Difusão anisótropa

Em certos casos simples a expressão 1) pode conduzir a cálculo fácil.

Por vezes torna-se, porém, preferível integrar directamente a equação de difusão.

É o caso do exemplo que vamos tratar.

Suponhamos que a função $f(\mathbf{x}, \Omega' \to \Omega)$ é desenvolvivel em série de funções harmónicas esféricas,

$$f(\mathbf{x}, \Omega^{l} \to \Omega) = \sum_{i} f_{i}(\mathbf{x}) P_{i}(\cos \theta);$$

fazendo

$$s_l = \frac{4\pi}{2l+1} \sigma c f_l$$

e

$$P_{l}\left(\cos\theta\right) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{l}^{l} Y_{lm}\left(\Omega\right) Y_{lm}^{*}\left(\Omega'\right)$$

a equação 1) torna-se

$$B') \quad \Omega \cdot \operatorname{grad} \psi(\mathbf{x}, \Omega) + \sigma(\mathbf{x}) \cdot \psi(\mathbf{x}, \Omega) = Q(\mathbf{x}, \Omega) + \int \psi(\mathbf{x}, \Omega') \sum_{l} s_{l}(\mathbf{x}) \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\Omega) Y_{lm}^{*}(\Omega')$$

e o desenvolvimento

$$\Sigma_{s}(\mathbf{x}, \Omega' \to \Omega) = \sum_{l} s_{l}(\mathbf{x}) P_{l}(\cos \theta) =$$

$$= \sum_{l} s_{l'}(\mathbf{x}) \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\Omega) Y_{lm}^{*}(\Omega')$$

representa a secção eficaz macroscópica de difusão.

Admitindo, além disso, que são possíveis todas as integrações necessárias aos cálculos, multipliquemos ambos os membros por Y_{lm}^* (Ω) d Ω e integremos sobre Ω :

a) Para o último termo,

$$\int \psi(\mathbf{x}, \Omega') \sum_{l'} s_{l'} \sum_{m'=-l'}^{l'} Y_{l'm'}(\Omega) Y_{l'm'}^{*}(\Omega') Y_{lm}^{*}(\Omega) d\Omega' d\Omega =$$

$$= s_{l}(\mathbf{x}) \int \psi(\mathbf{x}, \Omega') Y_{lm}^{*}(\Omega') d\Omega'$$

e, para que o resultado tenha sentido, torna-se necessário que

$$\psi\left(\mathbf{x},\Omega\right) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m'=-l}^{l} \psi_{lm}\left(\mathbf{x}\right) Y_{lm}\left(\Omega\right)$$

isto é, que $\psi(\mathbf{x},\Omega)$ seja desenvolvivel em série de funções harmónicas esféricas.

Então

$$\begin{split} s_{l}\left(\mathbf{x}\right) & \int \psi\left(\mathbf{x},\Omega^{l}\right) Y_{lm}^{*}\left(\Omega^{l}\right) d \Omega^{l} = \\ & = s_{l}\left(\mathbf{x}\right) \int \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l} \psi_{l'm'}\left(\mathbf{x}\right) \cdot Y_{l'm'}\left(\Omega^{l}\right) Y_{lm}^{*}\left(\Omega^{l}\right) d \Omega^{l} = \\ & = s_{l}\left(\mathbf{x}\right) \psi_{lm}\left(\mathbf{x}\right). \end{split}$$

b) Nas mesmas condições

$$\int Q(\mathbf{x}, \Omega) Y_{lm}^{*}(\Omega) d\Omega = Q_{lm}(\mathbf{x})$$

$$\int \sigma(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, \Omega) Y_{lm}^{*}(\Omega) d\Omega = \sigma(\mathbf{x}) \psi_{lm}(\mathbf{x})$$

c) o cálculo do primeiro termo é mais trabalhoso

$$\Omega \operatorname{grad} \psi = \operatorname{sen} \theta \operatorname{cos} \varphi \frac{\partial \psi}{\partial x} + \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi \frac{\partial \psi}{\partial y} + \operatorname{cos} \theta \frac{\partial \psi}{\partial z}$$

$$\operatorname{sen} \theta \operatorname{cos} \varphi \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{1}{2} \operatorname{sen} \theta \left(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi} \right) \sum_{lm} Y_{lm}(\Omega) \frac{\partial \psi_{lm}}{\partial x}$$

$$\operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi \frac{\partial \psi}{\partial y} = -\frac{i}{2} \operatorname{sen} \theta \left(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi} \right) \sum_{lm} Y_{lm}(\Omega) \frac{\partial \psi_{lm}}{\partial y}$$

donde

$$\begin{split} \Omega \operatorname{grad} \psi &= \frac{1}{2} \operatorname{sen} \theta \, e^{i \, \varphi} \sum_{lm} \, Y_{lm} \left(\Omega \right) \left\{ \frac{\partial}{\partial \, x} - i \, \frac{\partial}{\partial \, y} \right\} \psi_{lm} \, + \\ &+ \frac{1}{2} \operatorname{sen} \theta \, e^{-i \, \varphi} \sum_{lm} \, Y_{lm} \left(\Omega \right) \left\{ \frac{\partial}{\partial \, x} + i \, \frac{\partial}{\partial \, y} \right\} \psi_{lm} \, + \\ &+ \cos \theta \, \sum_{lm} \, Y_{lm} \left(\Omega \right) \, \frac{\partial \psi_{lm}}{\partial \, z} \, . \end{split}$$

Mas, fazendo $\cos \theta = \omega$, temos

$$\begin{split} &e^{i\,\varphi}\,(1-\omega^2)^{1/s}\,Y_{lm}\,(\Omega) = \\ &= \left[\frac{(l+m+2)\,(l+m+1)}{(2\,l+3)\,(2\,l+1)}\right]^{1/s}\,Y_{l+1m+1}\,(\Omega) - \\ &- \left[\frac{(l-m-1)\,(l-m)}{(2\,l-1)\,(2\,l+1)}\right]^{1/s}\,Y_{l-1m+1}\,(\Omega) \end{split}$$

$$\begin{split} e^{-i\varphi} \left(1 - \omega^2\right)^{l/2} Y_{lm} \left(\Omega\right) &= \\ &= \left[\frac{(l+m-1)(l+m)}{(2l+1)(2l-1)}\right]^{l/2} Y_{l-1m-1} \left(\Omega\right) - \\ &- \left[\frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}\right]^{l/2} Y_{l+1m-1} \left(\Omega\right) \\ &\omega Y_{lm} \left(\Omega\right) &= \left[\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}\right]^{l/2} Y_{l-1m} \left(\Omega\right) - \\ &- \left[\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+3)(2l+1)}\right]^{l/2} Y_{l+1m} \left(\Omega\right) \end{split}$$

Então

$$\int_{I}^{\infty} \Omega \cdot \operatorname{grad} \psi \cdot Y_{lm}^{*}(\Omega) d\Omega =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{I'} \sum_{m'} \left[\frac{(l'+m'+2)}{(2\,l'+3)} \frac{(l'+m'+1)}{(2\,l'+1)} \right]^{l/2} Y_{l'+1m'+1}(\Omega)$$

$$Y_{lm}^{*}(\Omega) \left\{ \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right\} \psi_{l'm'} d\Omega +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{I'} \sum_{m'} \left[\frac{(l'+m'-1)}{(2\,l'+1)} \frac{(l'+m')}{(2\,l'+1)} \right]^{l/2} Y_{l'-1m'-1}(\Omega)$$

$$Y_{lm}^{*}(\Omega) \left\{ \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right\} \psi_{l'm'} d\Omega -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{I'} \sum_{m'} \left[\frac{(l'-m'-1)}{(2\,l'-1)} \frac{(l'-m')}{(2\,l'+1)} \right]^{l/2} Y_{l'-1m'+1}(\Omega)$$

$$Y_{lm}^{*}(\Omega) \left\{ \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right\} \psi_{l'm'} d\Omega -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{I'} \sum_{m'} \left[\frac{(l'-m'+2)}{(2\,l'+1)} \frac{(l'-m'+1)}{(2\,l'+1)} \right]^{l/2} Y_{l'-1m'+1}(\Omega)$$

$$Y_{lm}^{*}(\Omega) \left\{ \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right\} \psi_{l'm'} d\Omega +$$

$$+ \sum_{I'} \sum_{m'} \left[\frac{(l'+m')}{(2\,l'+1)} \frac{(l'-m')}{(2\,l'-1)} \right]^{l/2} Y_{l'-1m'}(\Omega)$$

$$Y_{lm}^{*}(\Omega) \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right\} \psi_{l'-1m-1} +$$

$$+ \frac{1}{2} \left[\frac{(l+m)}{(2\,l+1)} \frac{(l+m+2)}{(2\,l+1)} \frac{l'/2}{(2\,l+2)} \right]^{l/2} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right\} \psi_{l-1m-1} +$$

$$+ \frac{1}{2} \left[\frac{(l-m+1)}{(2\,l+1)} \frac{(l-m+2)}{(2\,l+3)} \right]^{l/2} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right\} \psi_{l+1m-1} -$$

$$- \frac{1}{2} \left[\frac{(l-m)}{(2\,l-1)} \frac{(l-m-1)}{(2\,l-1)} \right]^{l/2} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right\} \psi_{l-1m+1} +$$

$$+ \left[\frac{(l-m)}{(2\,l+3)} \frac{(l-m+1)}{(2\,l+3)} \frac{l'^{1/2}}{2} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{l-1m} +$$

$$+ \left[\frac{(l-m)}{(2\,l+3)} \frac{(l-m+1)}{(2\,l+3)} \right]^{l/2} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{l-1m} +$$

$$+ \left[\frac{(l-m)}{(2\,l+3)} \frac{(l-m+1)}{(2\,l+3)} \right]^{l/2} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{l-1m} +$$

$$+ \left[\frac{(l-m)}{(2\,l+1)} \frac{(l-m+1)}{(2\,l+3)} \right]^{l/2} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{l-1m} +$$

$$+ \left[\frac{(l-m)}{(2\,l+1)} \frac{(l-m+1)}{(2\,l+1)} \right]^{l/2} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{l-1m} +$$

$$+ \left[\frac{(l-m)}{(2\,l+1)} \frac{(l-m+1)}{(2\,l+1)} \right]^{l/2} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{l-1m} +$$

A equação B') transforma-se no sistema

$$(-1)^{m-i} \cdot \frac{1}{2} \left[\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2\,l+1)(2\,l-1)} \right]^{!/s} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_{l-1m-1} + \\ + (-1)^{m+i} \cdot \frac{1}{2} \left[\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2\,l+1)(2\,l+3)} \right]^{!/s} \\ \qquad \qquad \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_{l+1m+1} - \\ - (-1)^{m-i} \cdot \frac{1}{2} \left[\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2\,l+1)(2\,l+3)} \right]^{!/s} \\ \qquad \qquad \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_{l+1m-1} - \\ - (-1)^{m+i} \cdot \frac{1}{2} \left[\frac{(l-m)(l-m+1)}{(2\,l-1)(2\,l+1)} \right]^{!/s} \\ \qquad \qquad \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_{l-1m+1} + \\ + (-1)^m \left[\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2\,l+1)(2\,l+3)} \right]^{!/s} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{l+1m} + \\ + (-1)^m \left[\frac{(l-m)(l+m)}{(2\,l-1)(2\,l+1)} \right]^{!/s} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{l-1m} + \\ + (-1)^m \sigma (\mathbf{x}) \cdot \psi_{lm} (\mathbf{x}) = \\ = (-1)^m s_l (\mathbf{x}) \psi_{lm} (\mathbf{x}) + (-1)^m Q_{lm} (\mathbf{x}) .$$

Admitamos, como aproximação, que a secção eficaz de difusão tem uma anisotropia de primeira ordem, isto é que

$$\Sigma_s = s_0(\mathbf{x}) P_0(\cos \theta) + s_1(\mathbf{x}) P_1(\cos \theta)$$

e que estes dois termos têm influência não desprezável apenas nos termos de \$\psi\$ que correspondem a uma aproximação de segunda ordem; nestas condições

$$\begin{split} \psi\left(\mathbf{x}\,,\Omega\right) &= \psi_{00}\,\,Y_{00} + \psi_{11}\,\,Y_{11} + \psi_{10}\,\,Y_{10} + \psi_{1-1}\,\,Y_{1-1} + \psi_{22}\,\,Y_{22} + \\ &\quad + \,\psi_{21}\,\,Y_{21} \,+ \,\psi_{20}\,\,Y_{20} + \,\psi_{2-1}\,\,Y_{2-1} \,+ \,\psi_{2-2}\,\,Y_{2-2}\,; \end{split}$$

a) o fluxo de neutrões é

$$\varrho = \int \psi \left(\mathbf{x} \,\,, \, \Omega \right) \, d \,\, \Omega = \sqrt{4 \, \pi} \, \psi_{00}$$

b) a corrente tem as componentes

$$\begin{split} j_x &= \int \psi \cdot \sin \theta \cos \varphi \, d \, \Omega = \sqrt{\frac{2 \, \pi}{3}} \, (\psi_{\mathbf{i} - \mathbf{i}} - \psi_{\mathbf{i} \mathbf{i}}) \\ j_y &= \int \psi \cdot \sin \theta \sin \varphi \, d \, \Omega = - \, i \, \sqrt{\frac{2 \, \pi}{3}} \, (\psi_{\mathbf{i} - \mathbf{i}} + \psi_{\mathbf{i} \mathbf{i}}) \\ j_z &= \int \psi \, \cos \theta \, d \, \Omega = \sqrt{\frac{4 \, \pi}{3}} \, \psi_{\mathbf{i} \mathbf{0}} \end{split}$$

c) os momentos são

$$\begin{split} P &= \int \psi \, \mathrm{sen^2} \, \theta \, \mathrm{cos} \, 2 \, \varphi \, d \, \Omega = \sqrt{\frac{8 \, \pi}{15}} \, (\psi_{22} + \psi_{2-2}) \\ Q &= \int \psi \, \mathrm{sen^2} \, \theta \, \mathrm{sen} \, 2 \, \varphi \, d \, \Omega = -i \, \sqrt{\frac{8 \, \pi}{15}} \, (\varphi_{2-2} - \psi_{22}) \\ R &= \int \psi \, \mathrm{sen} \, \theta \, \mathrm{cos} \, \theta \, \mathrm{cos} \, \varphi \, d \, \Omega = \sqrt{\frac{2 \, \pi}{15}} \, (\psi_{2-1} - \psi_{21}) \\ S &= \int \psi \, \mathrm{sen} \, \theta \, \mathrm{cos} \, \theta \, \mathrm{sen} \, \varphi \, d \, \Omega = -i \, \sqrt{\frac{2 \, \pi}{15}} \, (\psi_{2-1} + \psi_{21}) \\ T &= \int \psi \, \frac{1}{2} \, (3 \, \mathrm{cos^2} \, \theta - 1) \, d \, \Omega = \sqrt{\frac{4 \, \pi}{5}} \, \psi_{20} \, . \end{split}$$

Obtemos então

$$\begin{split} \psi_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\,\pi}}\,\, \varrho \quad \psi_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\,\pi}}\, (j_x - i\,j_y) \\ \psi_{1-1} &= \sqrt{\frac{3}{8\,\pi}}\, (j_x + ij_y) \quad \psi_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\,\pi}}j_z \\ \psi_{22} &= \sqrt{\frac{15}{32\,\pi}}\, (P - i\,Q) \quad \psi_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\,\pi}}\, (P + i\,Q) \\ \psi_{21} &= -\sqrt{\frac{15}{8\,\pi}}\, (R - i\,S) \quad \psi_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\,\pi}}\, (R + i\,S) \\ \psi_{20} &= \sqrt{\frac{5}{4\,\pi}}\, T \,. \\ 4\,\pi\,\psi\,(\mathbf{x}\,,\Omega) &= \varrho + \frac{3}{2}\, (j_x - i\,j_y) \, \mathrm{sen}\,\,\theta\,e^{i\,\varphi} + 3\,j_z\,\mathrm{cos}\,\theta + \\ &+ \frac{3}{2}\, (j_x + ij_y) \,\mathrm{sen}\,\,\theta\,e^{-i\,\varphi} + \frac{15}{8}\, (P - i\,Q)\,\mathrm{sen}^2\,\theta\,e^{2\,i\,\varphi} + \\ &+ \frac{15}{2}\, (R - i\,S)\,\mathrm{sen}\,\theta\,\mathrm{cos}\,\theta\,e^{i\,\varphi} + \frac{5}{2}\, T\,(3\,\mathrm{cos}^2\,\theta - 1) + \\ &+ \frac{15}{2}\, (R + i\,S)\,\mathrm{sen}\,\theta\,\mathrm{cos}\,\theta\,e^{-i\,\varphi} + \\ &+ \frac{15}{8}\, (P + i\,Q)\,\mathrm{sen}^2\,\theta\,e^{-2\,i\,\varphi} = \\ &= \varrho + 3\,\Omega\cdot\dot{\,\,\,\,\,}(\mathbf{x}) + \frac{15}{4}\, (P\,\mathrm{cos}\,2\,\varphi + Q\,\mathrm{sen}\,2\,\varphi)\,\mathrm{sen}^2\,\theta + \\ &+ 15\, (S\,\mathrm{cos}\,\varphi + R\,\mathrm{sen}\,\varphi)\,\mathrm{sen}\,\theta\,\mathrm{cos}\,\theta + \frac{5}{2}\, T\,(3\,\mathrm{cos}^2\,\theta - 1) \,. \end{split}$$

Por outro lado, a função K(x, \O) toma a forma

$$\begin{split} K\left(\mathbf{x}\;,\Omega\right) &= \sum_{lm} \, Q_{lm}(\mathbf{x}) \, Y_{lm}(\Omega) + \sum_{pq} \, s_p(\mathbf{x}) \, \psi_{pq}(\mathbf{x}) \, Y_{pq}(\Omega) = \\ &= Q\left(\mathbf{x}\;,\Omega\right) + s_0 \, \psi_{00} \, Y_{00} + s_1 \sum_{m} \psi_{1m}\left(\mathbf{x}\right) \, Y_{1m}\left(\Omega\right) = \\ &= Q\left(\mathbf{x}\;,\Omega\right) + \frac{1}{4 \, \pi} \, s_0\left(\mathbf{x}\right) \, \varrho\left(\mathbf{x}\right) + \frac{3}{4 \, \pi} \, s_1\left(\mathbf{x}\right) \cdot \Omega \cdot \mathbf{j}\left(\mathbf{x}\right) \, . \\ &p = 0,1 \end{split}$$

Suponhamos agora que (além das hipóteses já admitidas) o meio é homogéneo, isto é que

$$Q(\mathbf{x}) = \text{const} \quad \sigma(\mathbf{x}) = \text{const}.$$

Então

$$K(\mathbf{x}, \Omega) = Q + \frac{s_0}{4\pi} \rho(\mathbf{x}) + \frac{3s_1}{4\pi} \Omega \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x})$$

e o sistema A) dá

$$\begin{split} & \psi_{00} \quad (\mathbf{x}) = \int Y_{00} \ d\,\Omega \int_{0}^{\infty} K \, (\mathbf{x} - R\,\Omega\,,\,\Omega) \, e^{-\sigma R} \, d\,R \\ & \psi_{11} \quad (\mathbf{x}) = \int Y_{11} \ d\,\Omega \int_{0}^{\infty} K \, (\mathbf{x} - R\,\Omega\,,\,\Omega) \, e^{-\sigma R} \, d\,R \\ & \psi_{10} \quad (\mathbf{x}) = \int Y_{10} \ d\,\Omega \, \dots \\ & \psi_{i-1} \, (\mathbf{x}) = \int Y_{i-1} \, d\,\Omega \, \dots \\ & \psi_{22} \quad (\mathbf{x}) = \int Y_{22} \ d\,\Omega \, \dots \\ & \psi_{21} \quad (\mathbf{x}) = \int Y_{21} \ d\,\Omega \, \dots \\ & \psi_{20} \quad (\mathbf{x}) = \int Y_{20} \ d\,\Omega \, \dots \\ & \psi_{2-1} \, (\mathbf{x}) = \int Y_{2-1} \, d\,\Omega \, \dots \\ & \psi_{2-2} \, (\mathbf{x}) = \int Y_{2-2} \, d\,\Omega \, \dots \, ; \end{split}$$

É um sistema de equações integrais.

Mas a determinação das funções $\rho(x)$ e j(x) faz--se fàcilmente utilizando os resultados de B).

Com efeito, sempre nas condições previstas, B pode escrever-se

$$\operatorname{div} \mathbf{i} = (s_0 - \sigma) \varrho + \sqrt{4 \pi} Q_{00}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y}\right) (\varrho - T) + \frac{3}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y}\right) (P - i Q) +$$

$$+ 3 \frac{\partial}{\partial z} (R - i S) = 3 (s_1 - \sigma) (j_x - i j_y)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) (\rho - T) + \frac{3}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) (P + i Q) +$$

$$+ 3 \frac{\partial}{\partial z} (R + i S) = 3 (s_1 - \sigma) (j_x + i j_y)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho + 2 T) + 3 \left(\frac{\partial R}{\partial x} + \frac{\partial S}{\partial y} \right) = 3 (s_1 - \sigma) j_z$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) (j_x - i j_y) + \frac{5}{2} \sigma \cdot (P - i Q) = 0$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) (j_x + i j_y) + \frac{5}{2} \sigma \cdot (P + i Q) = 0$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} j_x + \frac{\partial}{\partial y} j_y - 2 \frac{\partial}{\partial z} j_z \right) = 5 \sigma \cdot T$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) j_z + \frac{\partial}{\partial z} (j_x - i j_y) + 5 \sigma (R - i S) = 0$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) j_z + \frac{\partial}{\partial z} (j_x + i j_y) + 5 \sigma (R + i S) = 0$$

ou

$$\operatorname{div}_{\mathbf{j}} = (s_0 - \sigma) \varrho + \sqrt{4\pi} Q_{00}$$

$$\frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x} (\varrho - T) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial Q}{\partial y} \right) + \frac{\partial R}{\partial z} = (s_1 - \sigma) j_x$$

$$\frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial y} (\varrho - T) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial Q}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial y} \right) + \frac{\partial S}{\partial z} = (s_1 - \sigma) j_y$$

$$\frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial z} (\varrho + 2T) + \left(\frac{\partial R}{\partial x} + \frac{\partial S}{\partial y} \right) = (s_1 - \sigma) j_z$$

$$\frac{\partial}{\partial x} j_x - \frac{\partial}{\partial y} j_y + \frac{5}{2} \sigma \cdot P = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial y} j_x + \frac{\partial}{\partial z} j_y + \frac{5}{2} \sigma \cdot Q = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial x} j_x + \frac{\partial}{\partial z} j_x + \frac{\partial}{\partial z} j_z + 5 \sigma R = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial y} j_z + \frac{\partial}{\partial z} j_z + 5 \sigma S = 0$$

ou ainda

$$\operatorname{div} \mathbf{i} = (s_0 - \sigma) \rho + \sqrt{4\pi} Q_{00}$$

$$\frac{1}{3} \operatorname{grad} \varrho (\mathbf{x}) - \frac{1}{5\sigma} \Delta \cdot \mathbf{j} (\mathbf{x}) - \frac{1}{15\sigma} \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{j} (\mathbf{x}) = (s_1 - \sigma) \mathbf{j} (\mathbf{x}).$$

Mas, por outro lado temos

$$\begin{split} Q &= Q\left(\mathbf{x}\right) = \int Q\left(\mathbf{x},\Omega\right) d\Omega = \\ &= \int Q_{lm}\left(\mathbf{x}\right) \, Y_{lm}\left(\Omega\right) \, Y_{00} \, \sqrt{4\,\pi} \, d\Omega = \sqrt{4\,\pi} \, Q_{00} \end{split}$$

0

$$\mu = \frac{\int \cos \theta \, \Sigma_s(\Omega' \to \Omega) \, d \, \Omega}{\int \Sigma_s(\Omega' \to \Omega) \, d \, \Omega} = \frac{s_1}{s_0} \qquad s_0 = \sigma_s$$

sendo também

$$\sigma = \sigma_{tot} = \sigma_a + \sigma_s$$
.

Portanto

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{i} &= -\sigma_a \, \rho + Q \\ \mathbf{i} &= -D \left[\operatorname{grad} \rho - \frac{4}{5 \, \sigma} \, \Delta \cdot \mathbf{i} - \frac{1}{5 \, \sigma} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{i} \right] \end{aligned}$$

donde

$$D = \frac{1}{3(\sigma - \sigma_{\rm s} \bar{\mu})} = \frac{1}{3 \Sigma_{\rm tr}}.$$

Então

$$-\sigma_{a} \rho + Q = -D \left[\Delta \rho - \frac{4}{5 \sigma} \Delta \operatorname{div} \mathbf{j} \right]$$

e, como Q = const.

$$\begin{cases} \operatorname{div} \mathbf{j} = -\sigma_a \, \rho + Q \\ -D \left(1 + \frac{4 \, \sigma_a}{5 \, \sigma} \right) \Delta \, \rho = -\sigma_a \, \rho + Q \, . \end{cases}$$

Concluimos assim que as expressões de $\rho(x)$ e j(x) são as das fórmulas clássicas relativas à teoria da difusão, mas correspondente agora ao novo valor do coeficiente de difusão

$$D' = \frac{1}{3\left(\sigma - \sigma_{s} \; \bar{\mu}\right)} \left(1 + \frac{4 \, \sigma_{a}}{5 \, \sigma}\right).$$