

RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE TRANSPORT PAR LA MÉTHODE DU PLONGEMENT INVARIANT

A. CHAPOT *

(Manuscrit reçu le 24 juin 1968)

RÉSUMÉ

La méthode du plongement invariant est présentée à l'aide de deux exemples. Le premier porte sur une évaluation de la dose neutronique dans une simulation du corps humain. Le second étudie la formation et la propagation des rayons gamma provenant de captures radiatives de neutrons thermiques dans des plaques de fer. Auparavant deux algorithmes matriciels auxiliaires sont présentés.

I - INTRODUCTION

On s'est fixé pour but de donner un aperçu des possibilités actuelles de la méthode du plongement invariant. Deux processus distincts peuvent être utilisés pour obtenir les équations. Le premier, d'une conception très physique, est exposé dans l'appendice I. Le second, introduit par BAILEY et Wing, purement mathématique, illustre parfaitement le principe du plongement invariant mais est d'une application extrêmement pénible.

Les aspects mathématiques et numériques de la méthode ne seront pas donnés dans les détails mais seulement ébauchés à travers deux calculs caractéristiques.

Le premier de ceux-ci montrera la possibilité offerte par la méthode de calculer la pénétration des particules à l'intérieur d'un matériau hétérogène. Cet exemple portera sur l'évaluation de la dose neutronique dans une simulation du corps humain : plaque de 25 cm d'épaisseur de $C_7 H_{70} O_{32} N_2$, soumise au rayonnement initial du spectre neutronique de SPIELBERG [1] qui, d'après cet auteur, est celui que l'on aurait à quelques centaines de mètres d'une explosion nucléaire.

Le second aura pour but de mettre en évidence la possibilité de changement d'état des particules. Il portera sur la pénétration des neutrons lents dans des plaques d'acier laminé et les rayons gamma provenant des captures radiatives seront étudiés simultanément.

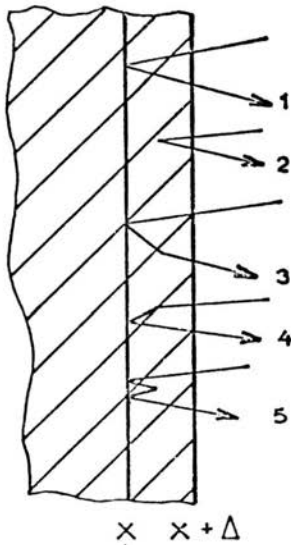
La méthode du plongement invariant étant globale, elle ne nous permet pas d'atteindre les flux à l'intérieur du matériau. D'autre part sa résolution sous forme matricielle conduit à des équations différentielles d'une intégration assez lente. Nous avons donc mis au point deux séries de formules permettant de tourner ces écueils, formules que nous donnerons avant de traiter les exemples.

* Attaché aux services techniques des Armées - Laboratoire Central de l'Armement, 16 bis avenue Prieur-de-la-Côte-d'Or - 94-Arcueil.

Enfin, en appendice I, nous donnons la méthode complète du dénombrement d'événements élémentaires simplement ébauchée dans le paragraphe suivant. Cette technique est utilisée pour obtenir les équations du problème. A titre d'exemple des calculs préparatoires nous donnons dans l'appendice II la fonction CHELN qui évalue les coefficients de transfert élastique groupe à groupe qui apparaissent dans les matrices de sections efficaces.

II - ÉQUATIONS SOUS FORME MATRICIELLE

Le principe est le suivant : on dénombre les événements élémentaires ayant la petite épaisseur Δ en facteur (les cinq cas de la figure ci-dessous pour les quantités réfléchies), on divise par Δ et on fait tendre Δ vers 0. On obtient ainsi les équations suivantes :



× × + Δ
FIG. 1

$$(1) \left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dx} R(x) = A(x) + B(x) \cdot R(x) + \\ R(x) \cdot C(x) + R(x) \cdot D(x) \cdot R(x) \\ R(0) = 0 \\ \frac{d}{dx} T(x) = B(x) + R(x) \cdot D(x) \cdot T(x) + \\ T(x) E(x) \\ T(0) = I. \end{array} \right.$$

où A, B, C et D sont des matrices carrées contenant des indications sur le matériau. $R(x)$ et $T(x)$ sont les quantités réfléchies et transmises par la plaque $(0, x)$. Leurs termes, $R_{ij}(x)$ et $T_{ij}(x)$ peuvent être décrits de la façon suivante : on appelle S_i, S_j , états des particules, l'ensemble des paramètres les définissant. Alors $R_{ij}(x)$ est le nombre de particules dans l'état S_i réfléchies par la plaque $(0, x)$ et ayant pour origine une particule dans l'état S_j , $T_{ij}(x)$ est la même quantité pour les particules transmises par la plaque $(0, x)$. Grossièrement on peut dire que les cas 2, 3, 4 et 5 correspondent aux quatre termes du 2^e membre de l'équation donnant $\frac{d}{dx} R(x)$, le 1^{er} cas donnant le premier membre.

Les équations (1) sont valables pour des problèmes plans, sphériques et cylindriques. Dans le problème plan $E(x) \equiv 0$.

Cette forme matricielle permet d'obtenir deux algorithmes utiles, le premier permettant d'accélérer considérablement les processus d'intégration. Si R_i, R_0, T_i, T_0 sont les matrices solutions des équations (1) pour des plaques P_i et P_0 seules, pour la plaque P_{i+1} obtenue en accolant les plaques P_i et P_0 nous avons :

$$\left. \begin{array}{l} R_{i+1} = T_0 (R_i R_0 + I) R_i T_0 + R_0 \\ T_{i+1} = T_0 (R_i R_0 (R_i R_0 + I) + I) T_i \end{array} \right\} (2)$$

Si P_0 est prise identique à P_1 on voit que l'application de (2) donne $R(2x)$ et $T(2x)$ à partir de $R(x)$ et $T(x)$, une deuxième application de (2) donne $R(4x)$ et $T(4x)$, etc... Ainsi nous avons pu calculer ces quantités pour un mètre de béton à partir des $R(x)$ et $T(x)$ pour 1 cm, obtenues en intégrant les équations (1).

Un autre algorithme, obtenu par un procédé tout à fait analogue à celui qui nous a conduit aux équations (2) s'est avéré nécessaire pour connaître les flux à l'intérieur du matériau, flux qui ne peuvent être atteints par la méthode.

Si nous voulons connaître les flux dans les sens + et - de la figure à l'intérieur de la plaque ($P_1 + P_2$) nous obtenons :

$$\left. \begin{aligned} F^{(+)} &= (R_1 R_2 + I) T_1 \\ F^{(-)} &= (R_2 R_1 + I) R_2 T_1 \end{aligned} \right\} (3)$$

Comme nous l'avons dit dans la définition des matrices inconnues $R(x)$ et $T(x)$, la résolution porte sur des valeurs initiales unitaires. C'est-à-dire que si l'on a la suite d'états possibles S_j , il y a une particule incidente par état. Ceci n'est pas le cas réel où l'on se trouve en présence d'un spectre initial que l'on met sous la forme $F(S_j)$, ou, plus simplement, F_j .

Alors les nombres de particules dans l'état S_i réfléchies et transmises par la plaque (0, x) et ayant pour origine les particules dans l'état S_j du rayonnement incident sont : $R_{ij}(x)$, F_j et $T_{ij}(x)$, F_j . Il est clair qu'à partir de ces expressions nous pouvons calculer toutes les quantités que l'on désire, par exemple $\sum_j R_{ij}(x) F_j =$ nombre de particules dans l'état S_i réfléchies par la plaque (0, x) soumise au rayonnement F_j , ou bien : $\sum_i \sum_j T_{ij}(x) \cdot F_j(x) =$ nombre total de particules transmises par la plaque (0, x) soumise au rayonnement F_j , etc.

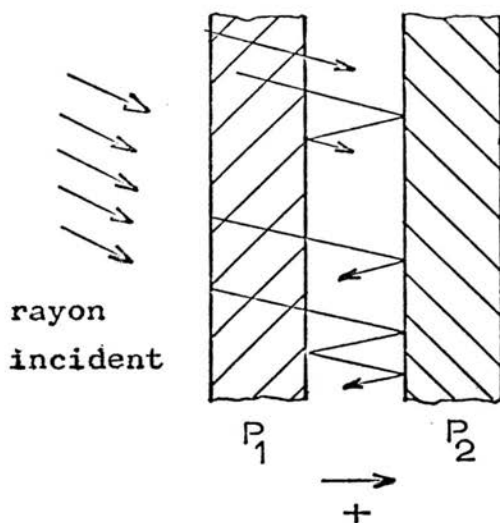


FIG. 2

III - MATÉRIAU HÉTÉROGÈNE : ÉVALUATION DE LA DOSE NEUTRONIQUE DANS LE CORPS HUMAIN

La pénétration des neutrons dans un corps humain est évidemment impossible à traiter dans un cas réel. Nous avons donc considéré le problème selon l'optique définie par M. HILLION : réaliser un calcul rigoureux à partir d'hypothèses bien définies schématisant le problème.

- a) Le corps humain est simulé par une plaque plane infinie de 25 cm d'épaisseur.
- b) Cette plaque est supposée avoir la composition chimique uniforme : $C_7 H_{70} O_{32} N_2$.
- c) Elle est irradiée sur toute sa surface.
- d) Les neutrons incidents obéissent aux spectres de SPIELBERG.

Dans l'état actuel de la méthode les hypothèses (b), (c) et (d) ne sont pas impératives. On aurait pu considérer une plaque stratifiée ou même une variation continue du milieu. Nous aurions pu aussi, calculer un rayonnement incident sous forme d'un pinceau mince et enfin, considérer des spectres initiaux tout à fait différents puisque la méthode calcule des quantités valables pour tous les spectres.

Seule l'hypothèse (a) est obligatoire : nous avons bien calculé des sphères et cylindres, mais seulement creux et ayant une épaisseur faible par rapport au rayon (1/10 environ).

Dans un tel problème trois étapes logiques peuvent être mises en évidence et même physiquement séparées :

- Traitement des données numériques et calcul des matrices de coefficients apparaissant dans les équations différentielles (1).
- Intégration des équations (1) pour un flux unitaire.
- Traitement des résultats obtenus pour les spectres incidents considérés et les questions demandées.

Nous avons opté pour la séparation complète des étapes, avec stockage des résultats intermédiaires sur bande magnétique ce qui procure une plus grande souplesse d'utilisation compte tenu des aménagements nécessités pour chaque calcul par la méthode qui n'est pas encore systématisée.

Pour la première étape, les données numériques sont tirées de J.J. SCHMIDT [2], et une étude préliminaire nous a conduit à limiter à 1 MeV l'énergie des neutrons incidents. Nous avons pris 10 groupes d'énergie allant de l'énergie thermique à 1 MeV et 3 angles d'incidence, soit 30 états S_j possibles. Nous avons calculé uniquement la propagation des neutrons et seuls les phénomènes de diffusion élastique sont donc à considérer.

Le fait que le matériau est hétérogène apparaît seulement ici en nous obligeant à traiter successivement le Carbone, l'Hydrogène, l'Oxygène et l'Azote puis à faire la combinaison $C_7 H_{70} O_{32} N_2$. Une fois les matrices de coefficients calculées pour le matériau, l'hétérogénéité de celui-ci n'apparaît plus. S'il avait été stratifié nous aurions calculé les diverses matrices pour les diverses couches, puis, au cours du processus d'intégration en arrivant aux épaisseurs correspondantes nous aurions simplement changé les matrices. Cette première étape a demandé 46 s sur l'UNIVAC 1108 du Centre de Calcul Scientifique de l'Armement.

Pour la deuxième étape nous avons intégré les équations (1) par une formule de RUNGE KUTTA du 4^e ordre jusqu'à 2,5 cm. Pour cela il a fallu 4 mn 18 s. Puis, à l'aide de l'algorithme (2) nous avons calculé et mis sur bande les matrices de résultats R et T jusqu'à 25 cm en 1 mn 29 s.

La troisième étape, en utilisant l'algorithme (3) a demandé 51 s pour l'obtention des résultats suivants :

- Spectres neutroniques $N(E)$
- Spectres de dose physique $D(E)$
- Spectres de dose physique cumulée $\int_0^E D(E') dE' / \int_0^\infty D(E') dE'$
- Facteurs d'atténuation $\int_0^\infty D(E') dE' / \int_0^\infty D_0(E') dE'$

aux profondeurs 0, 5, 10, 15, 20 et 25 cm pour trois angles d'incidence et trois spectres initiaux distincts.

Nous donnons les courbes représentatives pour le spectre n° 1 et le cosinus d'incidence 0,8873 et les courbes pour des neutrons monoénergétiques.

Comme il est aisé de le voir sur les spectres neutroniques et de dose, un grand nombre de neutrons est thermalisé et dans le spectre de dose cumulée, dès 15 cm d'épaisseur, 90 % de la dose est due aux neutrons thermiques.

Précisons qu'il s'agit là de dose physique sans RBE, et que les coefficients de conversion ont été pris dans [3], d'après SNYDER et NEUFELD. Nous renvoyons à [4] pour plus de détails sur ce point précis et aussi pour les résultats complets de ce calcul.

IV - EXEMPLE DE CHANGEMENT D'ÉTAT DES PARTICULES

Dans ce calcul nous nous proposons de donner les facteurs de transmission de dose dans des plaques de fer de 0 à 3,5 cm d'épaisseur soumises à un flux de neutrons thermiques et lents.

L'intervalle d'énergie des neutrons incidents, de 0,025 eV à 10 eV a été découpé en six groupes et trois angles d'incidence, de cosinus égaux à 0,1127 ; 05 ; et 0,8873, sont considérés. Nous avons donc 18 états possibles S_j pour les neutrons incidents. Nous tiendrons compte des phénomènes de capture des neutrons et des chocs élastiques. En effet, aux énergies considérées, il n'y a pas d'autre phénomène possible. Par contre pour les captures radiatives il y a une émission gamma très complexe que nous supposons instantanée. Ceux-ci sont émis dans une bande d'énergie s'étendant de 10 keV, énergie limite en dessous de laquelle l'absorption par le fer est très grande, à 10 MeV. Cette bande sera découpée en six groupes centrés sur les émissions les plus importantes (l'ensemble des groupes recouvre toute la bande) et nous prendrons les trois valeurs angulaires utilisées pour les neutrons. Nous avons donc aussi 18 états possibles, bien qu'il ne soit pas nécessaire d'avoir le même nombre d'états. Soit au total 36 états, ce qui nous conduit à des systèmes de $2 \times 36 \times 36$ équations différentielles non-linéaires à $2 \times 36 \times 36$ inconnues.

Nous avons tenu compte des phénomènes suivants pour les rayons γ .

- Effet photo-électrique.
- Effet de production de paires.
- Effet Compton.
- Effet Rayleigh.

Nous donnons quelques courbes où il est très net que la contribution à la dose due aux rayons γ est loin d'être négligeable et est, pour des neutrons thermiques incidents, largement prédominante.

Dans les courbes VI et VII nous donnons les facteurs de transmission de dose instantanée pour des sources monodirectionnelles et monoénergétiques en fonction de l'épaisseur de fer.

Dans les courbes VIII et IX nous avons tracé le rapport (dose due aux neutrons seuls) / (dose due aux γ provenant des captures) en fonction de l'épaisseur. C'est ainsi que pour une incidence presque rasante (83°) et après 3,5 cm de fer la dose « γ » est 17 fois plus importante que la dose « neutron » pour des neutrons thermiques et aussi importante pour des neutrons de 5,5 eV.

Dans d'autres calculs, nous avons pris des neutrons ayant une énergie de 1/40 d'eV à 10 MeV et appliqué un spectre réel d'engin de fission : la contribution à la dose totale due aux rayons γ de capture devient, par contre, négligeable car les neutrons rapides et intermédiaires ne sont que très faiblement ralentis par le fer. Le calcul pour l'ensemble des résultats pour les trois angles d'incidence, toutes les épaisseurs de mm en mm de fer, et une énergie des neutrons limitée supérieurement à 10 keV a duré 3 mn 59 s sur l'UNIVAC 1108 du Centre de Calcul Scientifique de l'Armement, plus environ 50 s pour le calcul des matrices de coefficients. Nous n'avons pas utilisé l'algorithme d'accélération qui n'était pas encore au point.

V - CONCLUSION

En conclusion nous voudrions parler de la précision de la méthode. Celle-ci étant d'une introduction très récente dans les techniques de calcul numérique, tout a été à faire, notamment l'étude de l'erreur. Des travaux empiriques nous ont permis de voir que, sur des exemples analytiques, l'erreur commise par l'intégration par RUNGE-KUTTA 4^e ordre était négligeable (elle porte sur le 5^e, 6^e ou même 7^e chiffre significatif). Les erreurs commises sur l'établissement des matrices de coefficients pouvaient être plus importantes (de l'ordre de 1 0/100) mais l'incidence de celles-ci sur les résultats finaux n'a pu être calculée. Toutefois, dans les calculs réels que nous avons faits et pu comparer à ceux provenant d'autres méthodes, les résultats sont bien en accord comme Mme MARQUIÉ le met en évidence [5]. Une étude plus complète de l'erreur ainsi que la recherche de nouveaux processus d'intégration - autre méthode de RUNGE-KUTTA plus rapide, essais avec la méthode d'ADAMS-MOULTON ou celle de MATHEWS, etc. est en cours pour pouvoir nous permettre un calcul d'erreur rigoureux.

Finalement pour illustrer les possibilités et la souplesse de la méthode nous pouvons signaler qu'il existe au L.C.A. depuis plusieurs mois, un programme permettant de calculer la pénétration des rayons γ dans des plaques stratifiées (nombre de couches quelconque), les couches pouvant être composées de matériaux hétérogènes. Ce programme peut travailler avec des spectres incidents très variés et nous l'avons utilisé avec ceux du Co 60, du Lanthane 140 et du Cs 136, les découpages énergétiques encadrant de très près les émissions principales. Mais ce qui a été possible avec les rayons γ s'avère beaucoup plus difficile avec les neutrons du fait de la complexité des interactions possibles, de la mauvaise connaissance de certaines tables et de leur présentation différente, difficultés qui entraînent l'obligation de traiter chaque cas comme un cas particulier.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] FIEGEL A. Rapport L.C.A. (*) Etude 07.1, n° 78.
- [2] SCHMIDT J.J. Neutron Cross Section For Fast Neutrons Reactor Materials.
- [3] GOLDSTEIN H. Fundamental Aspects of Reactor Shielding Addison. Wesley Publishing Company Inc.
- [4] A. CHAPOT A. Rapport L.C.A. en préparation.
- [5] MARQUÉ M. Solution de l'équation de transport par méthode de Monte-Carlo.

* Laboratoire Central de l'Armement.

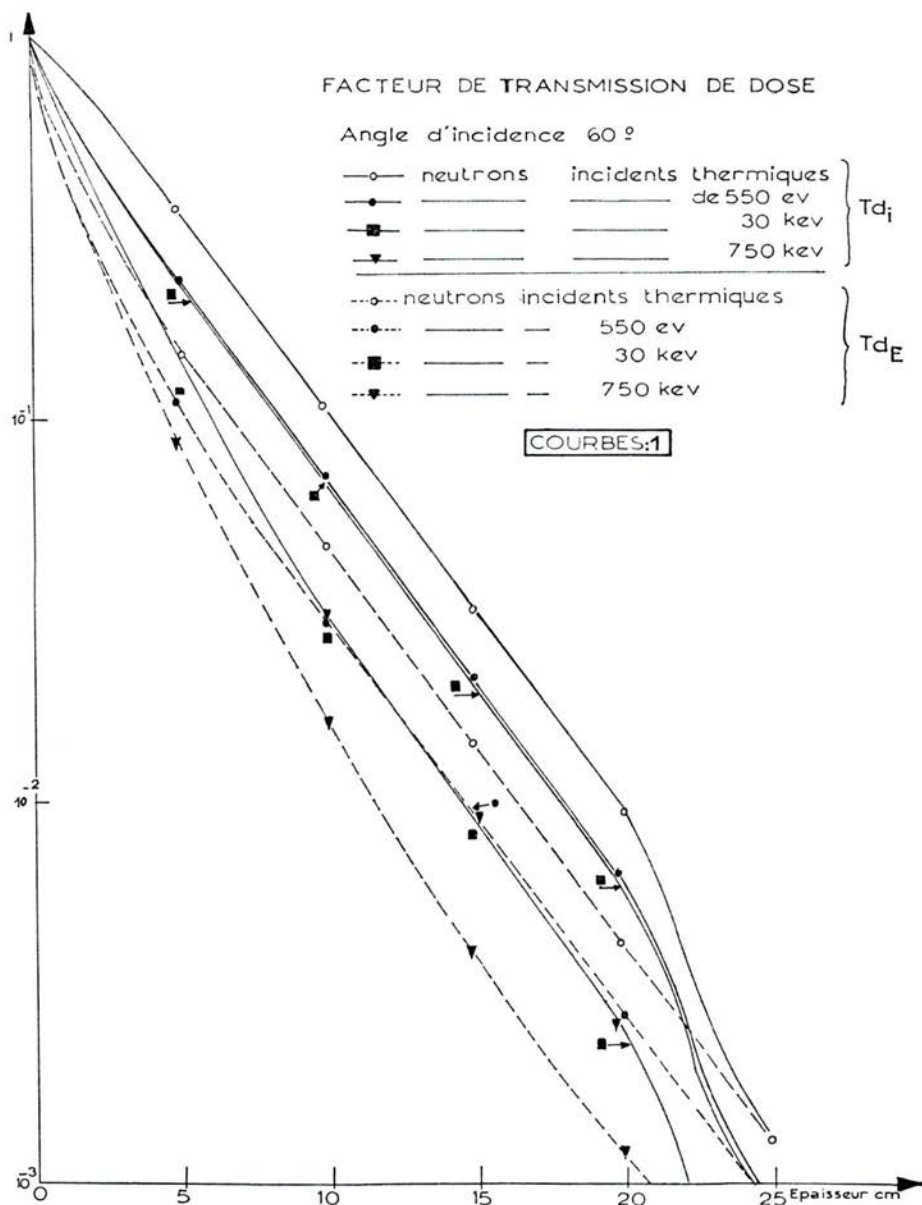


FIG. 3

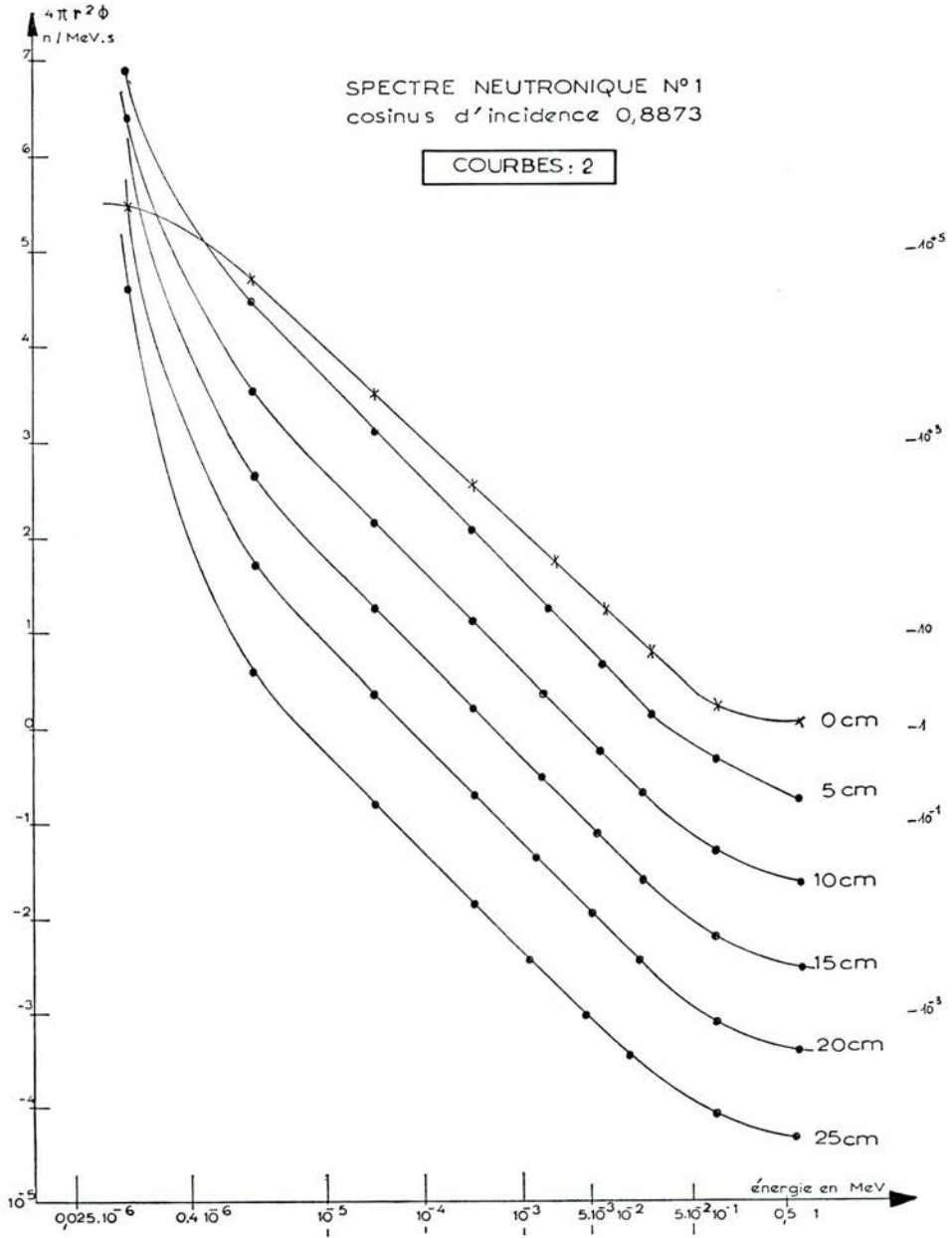


FIG. 4

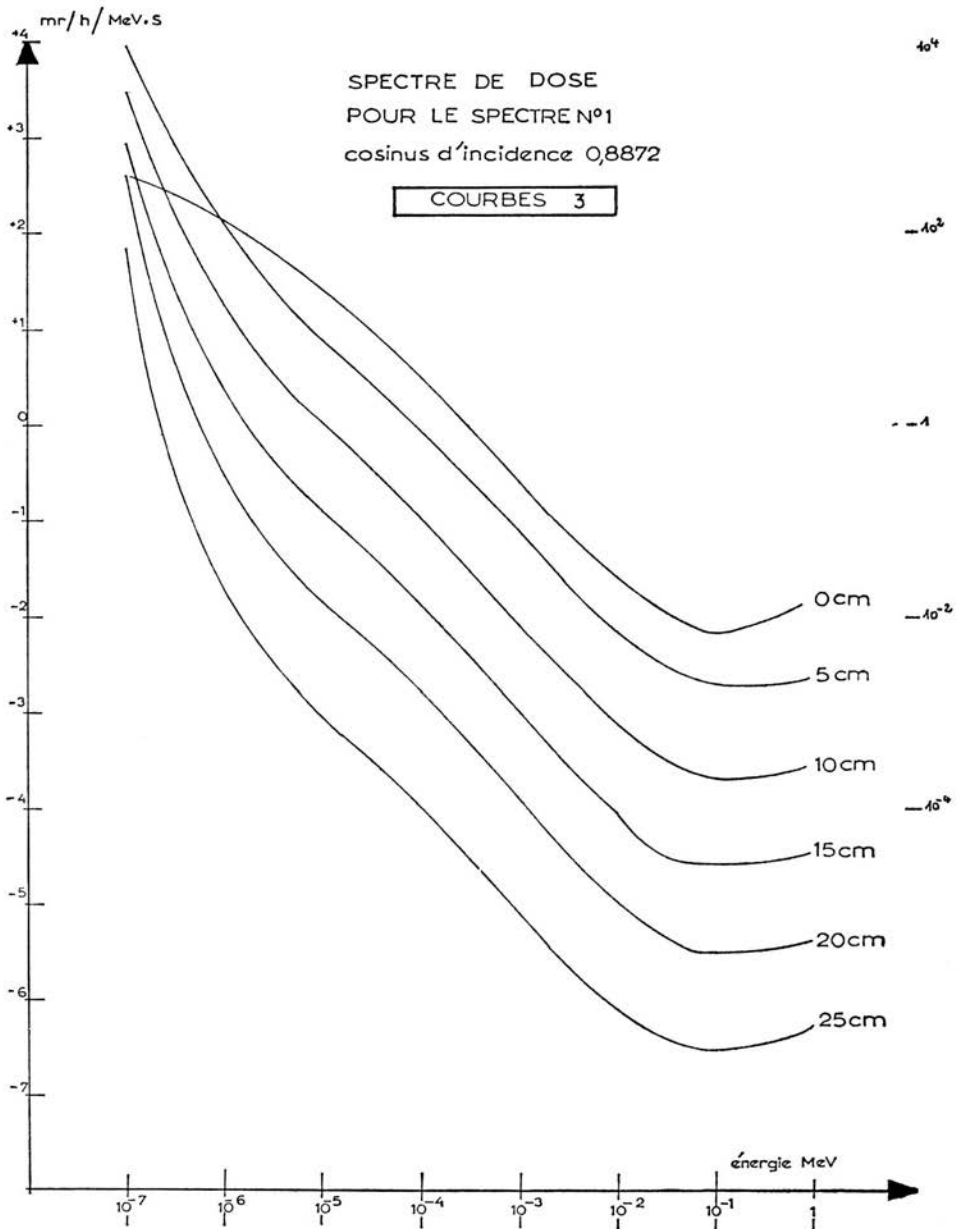


FIG. 5

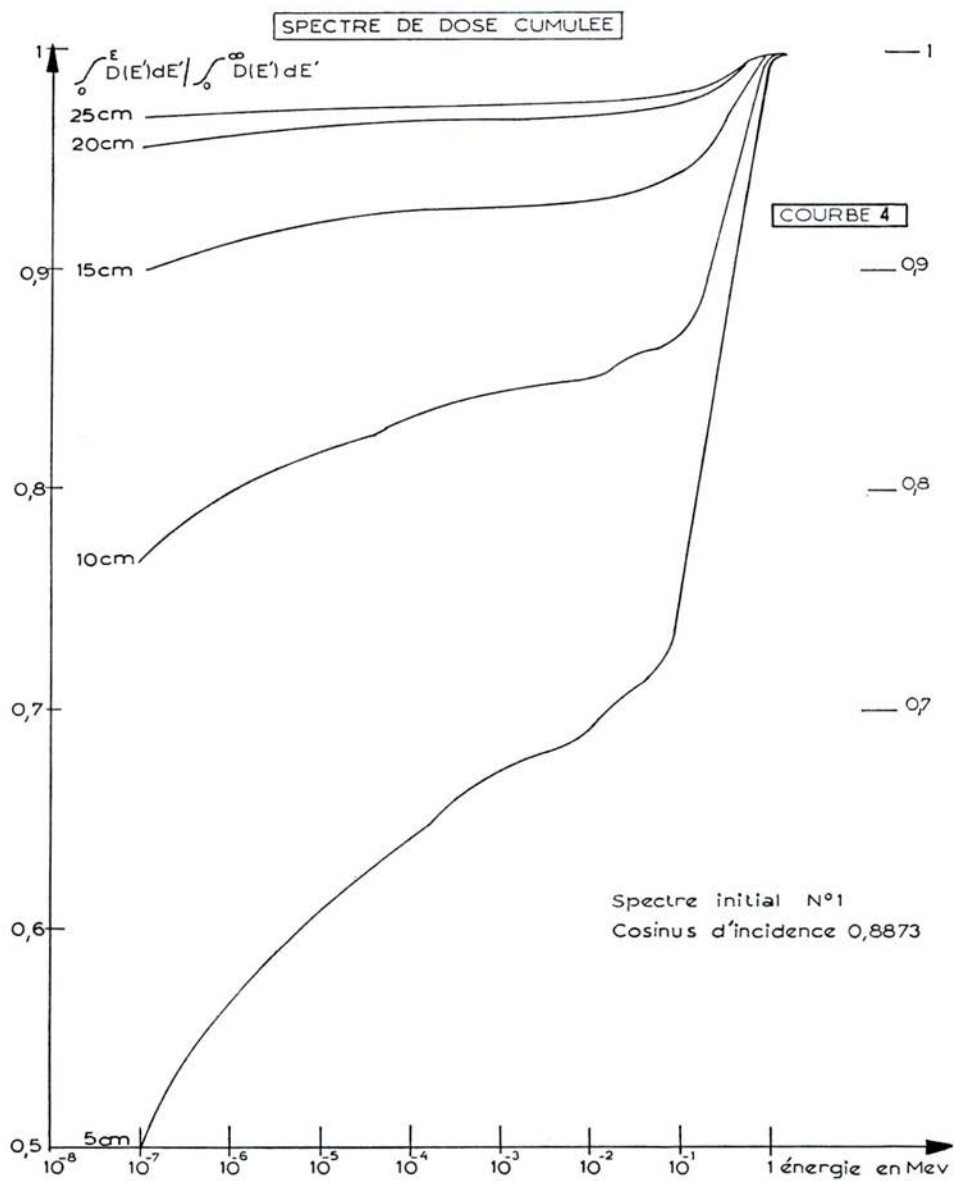


FIG. 6

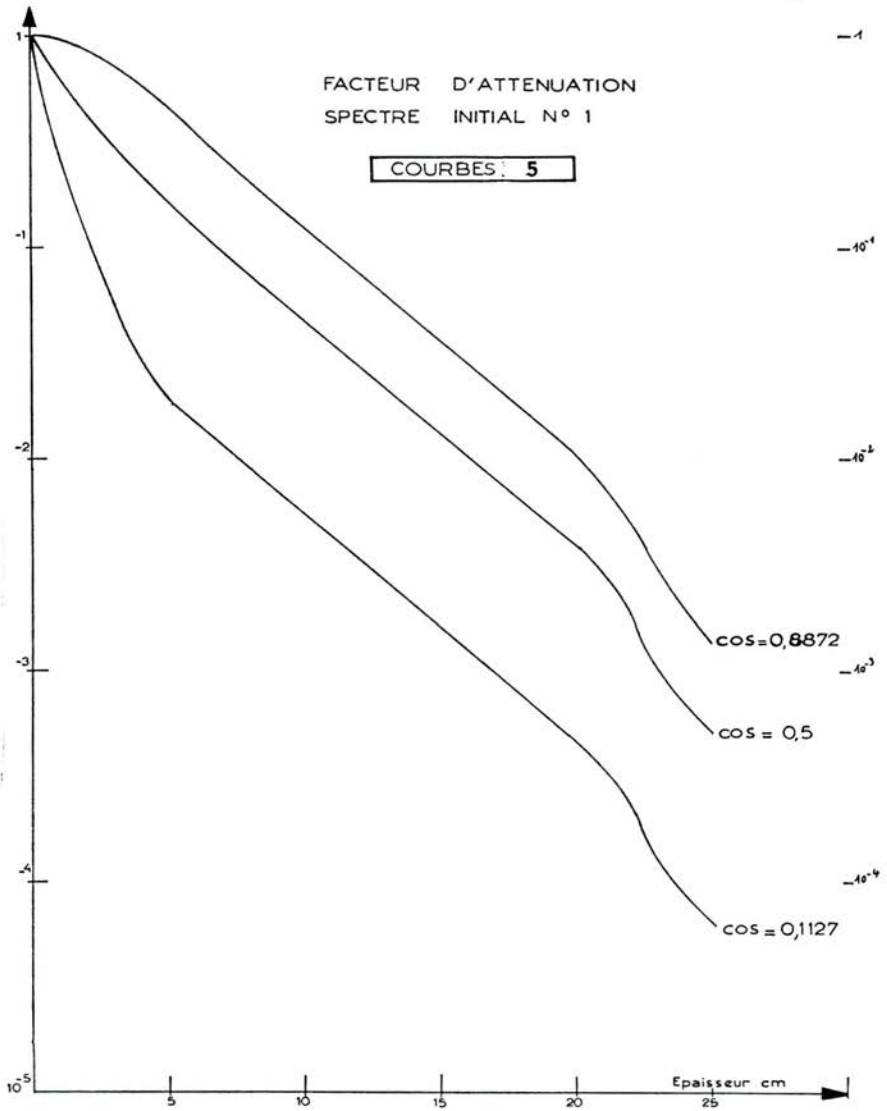


FIG. 7

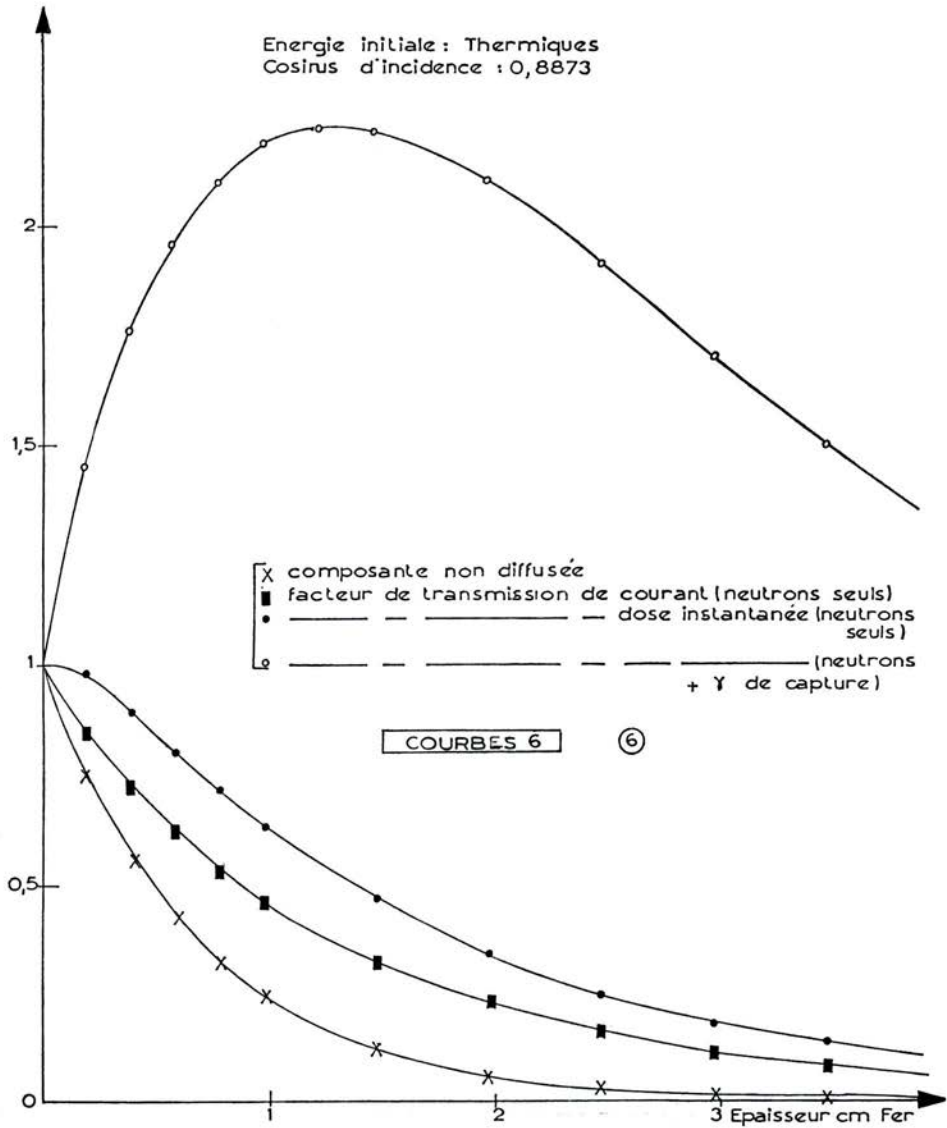


FIG. 8

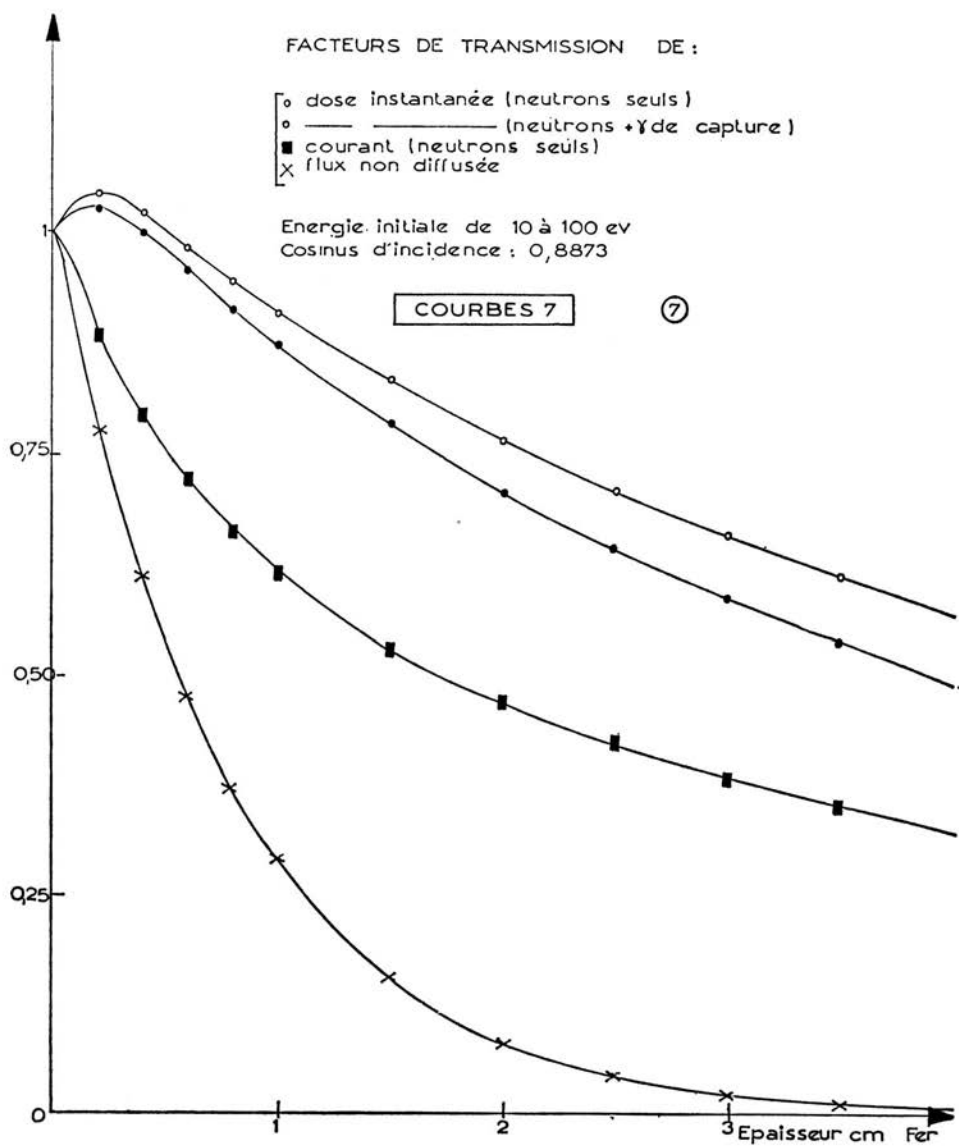


Fig. 9

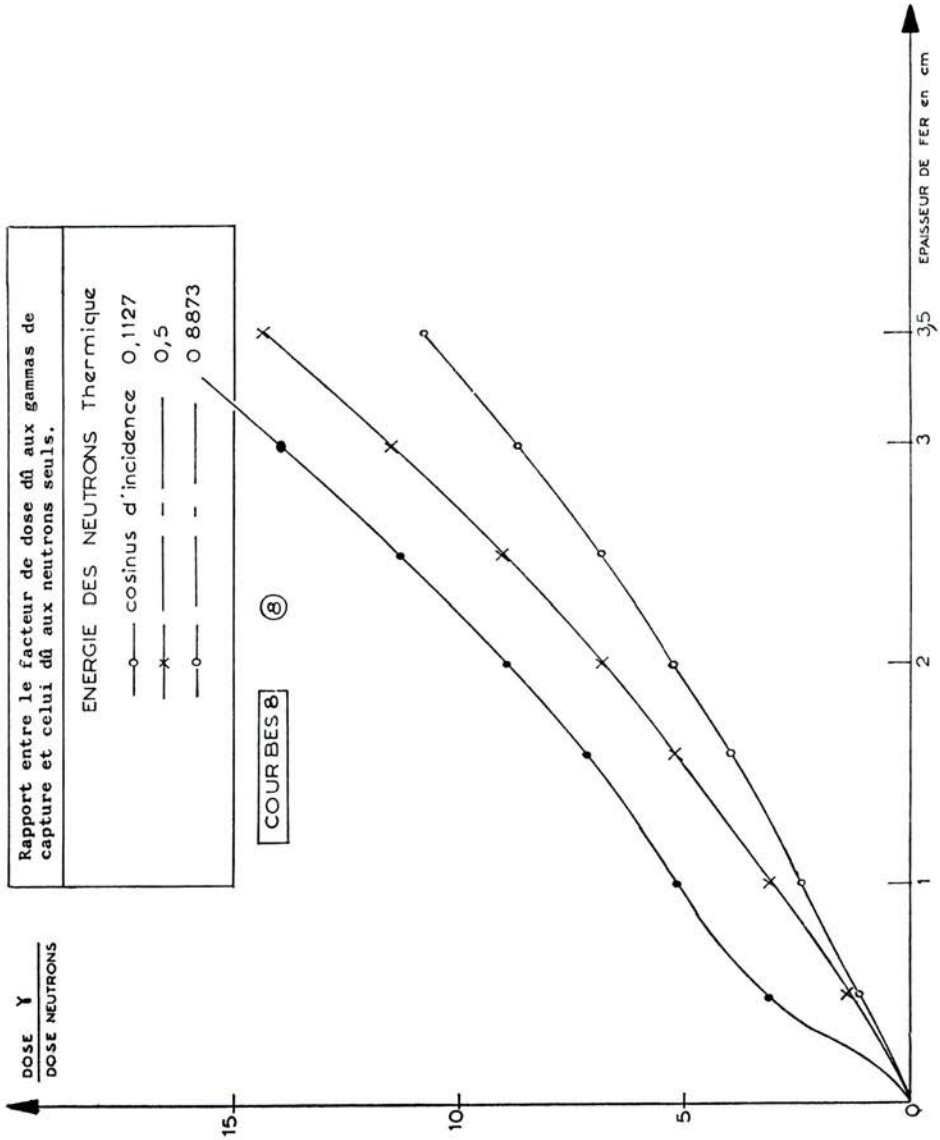


FIG. 10

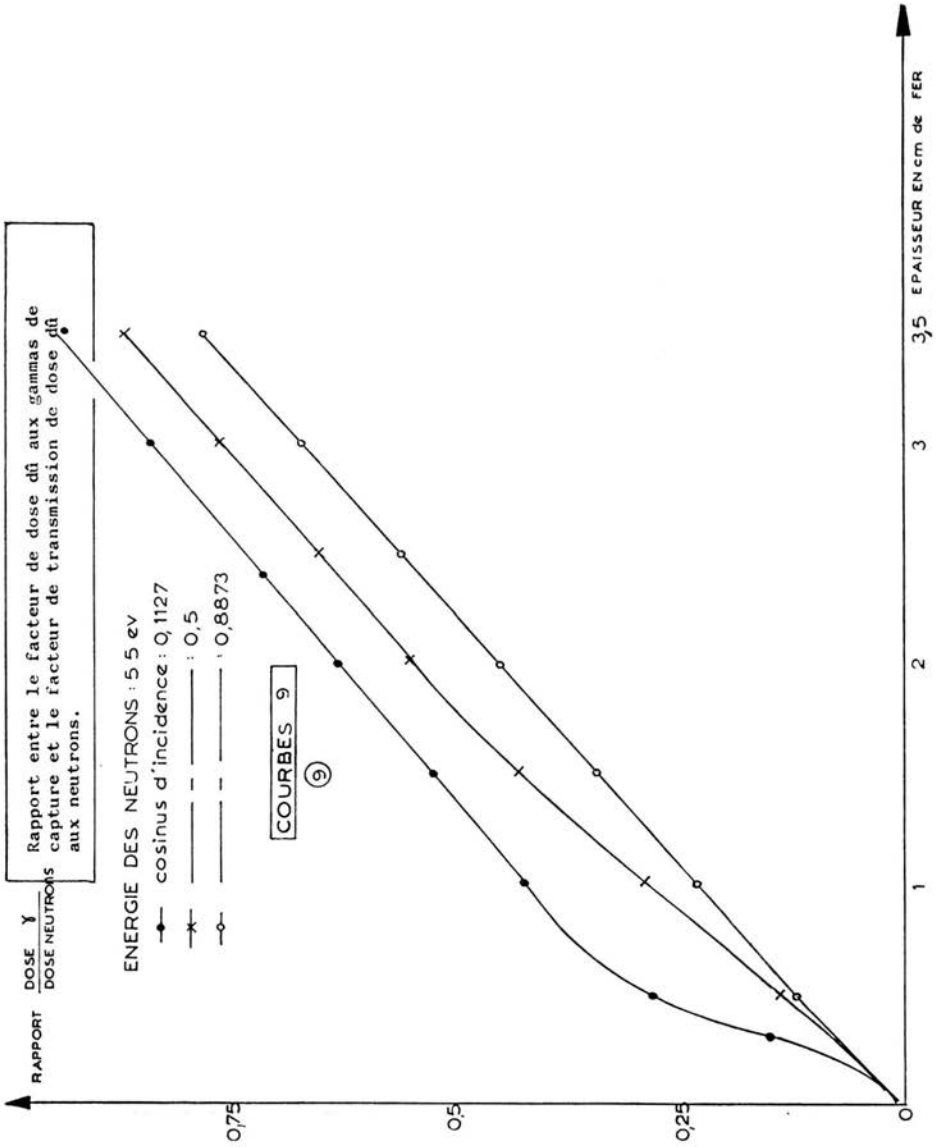


FIG. 11

APPENDICE I

LA MÉTHODE DU PLONGEMENT INVARIANT
ET L'ÉQUATION DE BOLTZMANN

I - DÉFINITIONS ET HYPOTHÈSES

Considérons une famille de surfaces fermées, Σ_η , définies par le paramètre η , sur lesquelles nous faisons les hypothèses suivantes :

- 1) $\eta > 0$
- 2) Σ_0 est une surface de la famille mais peut être dégénérée
- 3) $\eta_1 < \eta_2 \rightarrow$ tout segment joignant un point de Σ_0 à un point de Σ_{η_2} traverse Σ_{η_1}
- 4) si Δ positif ou négatif tend vers 0, $\Sigma_{\eta+\Delta}$ tend, point par point, vers Σ_η .

Les particules sont définies par leur état S , ensemble de paramètres (énergie, position, direction, nature, etc.) mais l'état S et le milieu K compris entre Σ_0 et Σ_η sont indépendants des paramètres définissant les surfaces autres que η et $\frac{dS}{d\eta}$ existe.

Nous nous proposons de trouver les équations auxquelles obéissent les quantités réfléchies et transmises (réflectance et transmittance) par le milieu K si un flux d'une particule par unité de temps et unité de surface dans l'état $S', f(S')$, est incident sur Σ_η .

Remarques.

Si $R(\eta, S, S')$ est la réflectance et $f(S')$, $S' \in [S]$, un rayonnement incident indépendant des paramètres définissant Σ_η autres que η , le flux réfléchi est

$$\int_{[S]} R(\eta, S, S') \cdot f(S') dS'.$$

La réflectance et la transmittance sont des propriétés « locales » du système physique $[\Sigma_\eta, f(S')]$. Ainsi, s'il y a des réflexions multiples (intérieur d'un cylindre creux par exemple) et si la réflectance obéit aux hypothèses faites sur $f(S')$, le flux réfléchi ou transmis obéit à une nouvelle équation intégrale fonction de la réflectance ou de la transmittance.

II - RÉFLECTANCE

$\Delta P(\eta, S')$ est la probabilité pour qu'une particule parcourant l'intervalle $(\eta - \frac{\Delta}{2}, \eta + \frac{\Delta}{2})$ ait un choc et $B(\eta, S' \rightarrow S)$ est le nombre de particules dans l'état S émergeant d'un choc subi par une particule dans l'état S' . Nous nous proposons d'exprimer la quantité réfléchie par Σ_η en fonction de la réflectance de $\Sigma_{\eta-\Delta}$: $R(\eta - \Delta, S, S')$.

En dénombrant les événements possibles entre $\Sigma_{\eta-\Delta}$ et Σ_{η} nous obtenons cinq cas possibles du premier degré en Δ (fig. ci-dessous). Toutes les autres contributions possibles ayant Δ^2 en facteur seront groupées dans $o(\Delta)$.

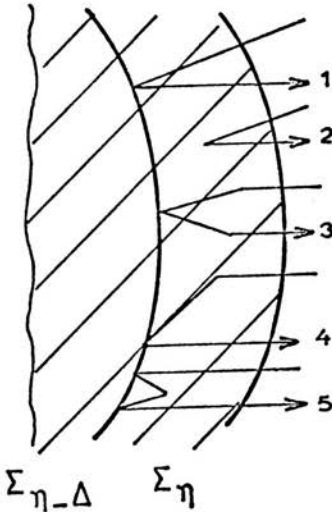


FIG. 12

Les cas 2, 3, 4 et 5 ne posant aucune difficulté nous donnerons la valeur de leur contribution à $R(\eta, S, S')$ sans les analyser. Les quantités réfléchies par Σ_{η} dans un état compris entre S' et S'' et provenant d'un état S_0 et dues aux cas 2, 3, 4 et 5 s'écrivent :

contribution du cas 2 :

$$\int_{S'}^{S''} \Delta \cdot P(\eta, S_0) B(\eta, S_0 \rightarrow S) dS + o(\Delta)$$

contribution du cas 3 :

$$\int_{S'}^{S''} \int_S \Delta \cdot P(\eta, S''') R(\eta, \Delta, S, S_0) \cdot B(\eta, S \rightarrow S''') dS \cdot dS + o(\Delta)$$

contribution du cas 4 :

$$\int_{S'}^{S''} \int_S \Delta P(\eta, S_0) B(\eta, S_0 \rightarrow S) R(\eta, S'', S) dS \cdot dS + o(\Delta)$$

contribution du cas 5 :

$$\int_{S'}^{S''} \int_S \int_{S'} R(\eta, \Delta, S''', S_0) P(\eta, S''') B(\eta, S'' \rightarrow S') R(\eta, \Delta, S, S') dS' \cdot dS'' \cdot dS + o(\Delta)$$

Pour alléger l'écriture nous poserons la somme de ces quatre cas égale à :

$$\Delta \int_{S'}^{S''} U[\eta, S, S_0] dS + o(\Delta) \tag{2.1}$$

Contribution du cas 1 — Les particules arrivant sur Σ_{η} dans l'état S_0 atteindront $\Sigma_{\eta-\Delta}$ dans l'état

$$\bar{S}_0 = S_0 - \Delta \left(\frac{dS}{d\eta} \right)_{S=S_0} + o(\Delta) \tag{2.2}$$

La quantité réfléchiée par $\Sigma_{\eta-\Delta}$ dans l'état S et provenant d'un état S_0 sera donc :

$$[1 - \Delta P(\eta, S_0)] \cdot R(\eta - \Delta, S, \bar{S}_0) \tag{2.3}$$

mais seules les particules dans un état S tel que

$$\bar{S} = S' - \Delta \cdot \left(\frac{dS}{d\eta} \right)_{S=S'} \leq S \leq S'' - \Delta \left(\frac{dS}{d\eta} \right)_{S=S''} = \bar{S} \tag{2.4}$$

atteindront Σ_{η} dans un état compris entre S' et S'' .

La contribution du cas 1 s'écrit alors :

$$[1 - \Delta \cdot P(\eta, S_0)] \cdot \int_{\bar{S}}^{\bar{S}'} [1 - \Delta \cdot P(\eta, S)] \cdot (R(\eta - \Delta, S, \bar{S}_0)) dS \tag{2.5}$$

L'addition de (2.5) et de (2.1) nous donne la quantité réfléchie par $\Sigma_{\eta-\Delta}$:

$$\int_{S'}^{S''} R(\eta, S, S_0) dS = \int_{\bar{S}}^{\bar{S}'} R(\eta - \Delta, S, \bar{S}_0) dS \\ - \Delta \cdot \int_{\bar{S}}^{\bar{S}'} [P(\eta, \bar{S}_0) + P(\eta, S)] \cdot R(\eta - \Delta, S, S_0) dS + \Delta \int_{S'}^{S''} U(\eta, S, S_0) dS + o(\Delta).$$

En dérivant les deux membres par rapport à S'' nous obtenons :

$$R(\eta, S'', S_0) = \frac{\partial \bar{S}}{\partial S''} R(\eta - \Delta, \bar{S}, \bar{S}_0) - \Delta \frac{\partial \bar{S}}{\partial S''} [P(\eta, \bar{S}_0) + P(\eta, \bar{S})] \\ \times R(\eta - \Delta, \bar{S}, \bar{S}_0) + \Delta \cdot U[\eta, S'', S_0] + o(\Delta) \quad (2.6)$$

mais d'après (2.4) $\frac{\partial \bar{S}}{\partial S''} (\bar{S}) = 1 - \Delta \cdot \frac{\partial}{\partial S''} \left(\frac{dS}{d\eta} \right)_{S=S''}$ et en remplaçant \bar{S}_0 et \bar{S} par leurs expressions, l'équation (2.6) devient :

$$R(\eta, S'', S_0) = R \left[\eta - \Delta, S - \Delta \left(\frac{dS}{d\eta} \right)_{S=S''}, S_0 - \Delta \left(\frac{dS}{d\eta} \right)_{S=S_0} \right] \\ - \Delta \left[P \left(\eta, S_0 - \Delta \left(\frac{dS}{d\eta} \right)_{S=S_0} \right) + P \left(\eta, S'' - \Delta \left(\frac{dS}{d\eta} \right)_{S=S''} \right) \right] \\ R \left[\eta - \Delta, S'' - \Delta \left(\frac{dS}{d\eta} \right)_{S=S''}, S_0 - \Delta \left(\frac{dS}{d\eta} \right)_{S=S_0} \right] + \Delta U[\eta, S, S_0] + o(\Delta).$$

En faisant passer d'un seul côté les termes de degré 0 en Δ , en divisant par Δ et en faisant tendre Δ vers 0, il vient :

$$\frac{d}{d\eta} R(\eta, S'', S_0) = [P(\eta, S'') + P(\eta, S_0)] R(\eta, S'', S_0) - \frac{\partial}{\partial S''} \left(\frac{dS}{d\eta} \right)_{S=S''} R(\eta, S'', S_0) \\ + U(\eta, S'', S_0).$$

Il nous suffit maintenant d'expliciter U et de remplacer S'' par S pour avoir l'expression classique de MILTON G. WING avec le terme en plus, $\frac{\partial}{\partial S} \left(\frac{dS'}{d\eta} \right)_{S'=S}$:

$$\frac{d}{d\eta} R(\eta, S, S_0) + \left[P(\eta, S_0) + P(\eta, S) + \frac{\partial}{\partial S} \left(\frac{dS'}{d\eta} \right)_{S'=S} \right] R(\eta, S, S_0) \\ = P(\eta, S_0) B(\eta, S_0 \rightarrow S) + \int_{[S']} P(\eta, S') B(\eta, S' \rightarrow S) R(\eta, S', S_0) dS' \\ \times \int_{[S_0]} P(\eta, S_0) B(\eta, S_0 \rightarrow S'_0) R(\eta, S, S'_0) dS'_0 \\ + \int_{[S]} \int_{[S_0]} R(\eta, S', S_0) \cdot P(\eta, S') B(\eta, S' \rightarrow S'_0) R(\eta, S, S'_0) dS'_0 dS' \quad (2.7)$$

Les conditions initiales pour $\eta = 0$ doivent être déterminées selon le cas particulier étudié.

III - TRANSMITTANCE

Nous n'avons ici que les trois cas de la figure ci-dessous à étudier.

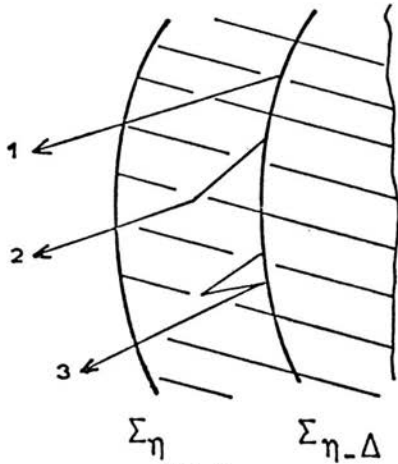


FIG. 13

En faisant pas à pas les mêmes étapes que dans le cas précédent on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{dT}{d\eta}(\eta, S, S_0) + (P(\eta, S) + \frac{\partial}{\partial S} \left(\frac{dS'}{d\eta} \right)_{S'=S}) T(\eta, S, S_0) \\ = \int_{[S]} P(\eta, S') B(\eta, S' \rightarrow S) T(\eta, S', S_0) dS' \\ + \int_{[S]} \int_{[S_0]} T(\eta, S', S_0) P(\eta, S') B(\eta, S' \rightarrow S_0) R(\eta, S, S'_0) dS'_0 dS'. \quad (3.1) \end{aligned}$$

IV - PRINCIPE DE LA RÉOLUTION NUMÉRIQUE

Considérons une certaine discrétisation des états possibles $S_1 \dots S_N$ et l'approximation

des intégrales $\int_{[S]} F(S') dS'$ par $\sum_{k=1}^P a_k^P F(S_k)$. Nous nous proposons de ne rechercher $R_{ij}(\eta)$, fonction approchée de $R(\eta, S, S_0)$, que pour les états $S_i, i = 1 \dots N$.

Par exemple, les états des particules étant définis par leur qualité 1 pour les rayons γ , 2 pour les neutrons, leur énergie E et le cosinus de l'angle de leur direction avec la normale à Σ_η , l'intégrale $\int_{[S]} F(S') dS'$ estidentique à $\int_0^1 \int_0^{E_0(i)} F(\mu, E) dE d\mu$ $E_0(i)$ étant l'énergie maximum possible pour la particule i .

Nous considérons alors l'approximation

$$\sum_{k=1}^F a_k^P \sum_{l=1}^q a_l^q f(\mu_k, E_k) \text{ et la classification des états } (1,1,1) (1,1,2) \dots (1,1,p) (1,2,1) \dots (1,q,p) (2,1,1) \dots (2,q,p) \quad (4.1)$$

En posant $\frac{\partial}{\partial S_l} \left(\frac{dS'}{d\eta} \right)_{S=S_l} = G_l(\eta)$, l'équation (2.7) donne :

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\eta} R_{ij}(\eta) + [P_i(\eta) + P_j(\eta) + G_i(\eta)] R_{ij}(\eta) = P_j(\eta) B_{ij}(\eta) \\ + \sum_k a_k P_k(\eta) B_{ik}(\eta) R_{kj}(\eta) + \sum_l a_l P_j(\eta) B_{lj}(\eta) R_{il}(\eta) \\ + \sum_k \sum_l a_k a_l R_{il}(\eta) B_{lk}(\eta) P_k(\eta) \cdot R_{kj}(\eta). \quad (4.2) \end{aligned}$$

Si nous considérons les matrices :

$$\begin{aligned} R(\eta) &= \{ R_{ij}(\eta) \} \\ T(\eta) &= \{ T_{ij}(\eta) \} \\ A &= \{ P_j(\eta) B_{ij}(\eta) \} \\ B &= \{ a_j P_j(\eta) B_{ij}(\eta) - \delta_{ij} [P_j(\eta) + G_j(\eta)] \} \\ C &= \{ P_j(\eta) [a_j B_{ij}(\eta) - \delta_{ij}] \} \\ D &= \{ a_i a_j P_j(\eta) B_{ij}(\eta) \} \end{aligned}$$

nous avons la notation matricielle pour (4.2) et (3.1) :

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\eta} R(\eta) &= A + B R(\eta) + R(\eta) C + R(\eta) D R(\eta) \\ \frac{d}{d\eta} T(\eta) &= [B + R(\eta) D] T(\eta) \end{aligned} \quad (4.3)$$

Les conditions initiales doivent être précisées selon le cas particulier mais ne dépendent que de la géométrie du système. Pour une plaque par exemple $R(0) = 0$, $T(0) = I$, matrice unité.

La résolution se ramène donc à l'intégration de deux systèmes d'équations différentielles non linéaires, simultanées, le premier étant indépendant du second. Il faut remarquer que les matrices de transfert A , B , C , D ont une disposition particulière qui permet de simplifier le calcul du fait du dénombrement choisi. On peut, en effet, les décomposer en 4 sous-matrices carrées que l'on notera :

- $(\gamma \rightarrow \gamma)$: rayon γ donnant des rayons γ après un choc
- $(\gamma \rightarrow n)$: — γ — — neutrons — — (photo-neutrons)
- $(n \rightarrow \gamma)$: neutron donnant des rayons γ après un choc (captures radiatives)
- $(n \rightarrow n)$: neutron donnant des neutrons après un choc

et R et T peuvent ainsi se décomposer :

$$\begin{aligned} R &= \begin{pmatrix} R(\gamma \rightarrow \gamma) & R(n \rightarrow \gamma) \\ R(\gamma \rightarrow n) & R(n \rightarrow n) \end{pmatrix} \\ T &= \begin{pmatrix} T(\gamma \rightarrow \gamma) & T(n \rightarrow \gamma) \\ T(\gamma \rightarrow n) & T(n \rightarrow n) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

A l'aide d'un même programme il est donc possible de ne calculer qu'une ou plusieurs de ces sous-matrices selon que certains changements d'états sont impossibles ou négligeables.

APPENDICE II

EXEMPLE DE CALCULS PRÉPARATOIRES
FONCTION CHELN (Chocs Elastiques Neutrons)

Cette fonction a pour but de calculer le coefficient de transfert du groupe $(E_{g'+1} - E_g')$ au groupe $(E_{g+1} - E_g)$, selon les angles μ_i, μ_j .

Sous sa forme générale ce coefficient, $\sigma_{gg'}^{ij}$, s'écrit :

$$\sigma_{gg'}^{ij} = \frac{N\rho}{A(E_{g'+1} - E_g')} \cdot \int_{E_g'}^{E_{g'+1}} \int_{E_g}^{E_{g+1}} \int_0^{2\pi} \sigma_d(E, E') \cdot \frac{\partial \mu(E, E')}{dE} \cdot \delta[\mu(E, E') - \mu(\varphi)] d\varphi dE dE'$$

(voir Rapports L.C.A. - Etudes 07.1 - Note n° 55).

On peut simplifier cette expression en intégrant une fois :

$$\sigma_{gg'}^{ij} = \frac{2 N\rho}{A(E_{g'+1} - E_g')} \cdot \int_{E_g'}^{E_{g'+1}} \int_{\bar{\mu}_1}^{\bar{\mu}_2} \sigma_d(E', \mu) \frac{\partial \varphi(\mu)}{\partial \mu} \cdot d\mu dE'$$

avec

$$\begin{aligned} \bar{\mu}_1 &= \text{Max} [\mu(E_g, E'), \mu(\varphi = \pi)] \\ \bar{\mu}_2 &= \text{Min} [\mu(E_{g+1}, E'), \mu(\varphi = 0)] \end{aligned}$$

mais il faut avoir $\bar{\mu}_1 < \bar{\mu}_2$ pour que $\int_{\bar{\mu}_1}^{\bar{\mu}_2} () d\mu$ ne soit pas nulle et nous pouvons alors limiter les bornes en E' , ce qui donne :

$$\begin{aligned} \sigma_{gg'}^{ij} &= \frac{2 N\rho}{A(E_{g'+1} - E_g')} \int_{E'_1}^{E'_2} \int_{\bar{\mu}_2}^{\bar{\mu}_1} \sigma_d(E', \mu) \cdot \frac{\partial \varphi(\mu)}{\partial \mu} d\mu dE' \\ E'_1 &= \text{Max} \left[E_g', E_g \times \left(\frac{-\mu(\varphi = 0) + \sqrt{\mu(\varphi = 0)^2 + A^2 - 1}}{A - 1} \right)^2 \right] \\ E'_2 &= \text{Min} \left[E_{g'+1}, E_{g+1} \times \left(\frac{-\mu(\varphi = \pi) + \sqrt{\mu(\varphi = \pi)^2 + A^2 - 1}}{A - 1} \right)^2 \right] \end{aligned}$$

Si $E'_1 < E'_2$ on est sûr qu'il existera $\mu_1 < \mu_2$ et le calcul peut donc être conduit sans perte de précision du fait de la nullité d'un ou plusieurs points d'intégration numérique.

Plusieurs cas physiques se présentent alors :

1) Les chocs élastiques sont isotropes dans le système du C.M. (toujours le cas à faible énergie). Deux sous-groupes se présentent alors :

- 1a) section efficace constante
- 1b) section efficace variable en fonction de l'énergie.

2) Cas général donné sous forme d'un développement du 8^{ième} ordre (9 coefficients) en polynômes de Legendre.

Nous devons introduire les formules C.M. \rightarrow Labo, Labo \rightarrow C.M., etc.

$$\begin{aligned}\mu_{CM} &= \frac{(A+1)^2 E - (A^2+1) E'}{2 A E'} \\ \mu_L &= \frac{(A+1) E - (A-1) E'}{2 \sqrt{E E'}} \\ \mu_{CM} &= \frac{\mu_L}{A} \left[\mu_L + \sqrt{A^2 + \mu_L^2 - 1} \right] - \frac{1}{A} \\ \mu_L &= \frac{1 + A \mu_{CM}}{\sqrt{A^2 + 1 + 2 \mu_{CM}}} \\ \frac{d\mu_{CM}}{d\mu_L} &= \frac{(\mu_L + \sqrt{A^2 + \mu_L^2 - 1})^2}{A \sqrt{A^2 + \mu_L^2 - 1}} \\ \mu_L &= \mu_i \mu_j + \sqrt{1 - \mu_i^2} \sqrt{1 - \mu_j^2} \cdot \cos \varphi \\ \frac{d\varphi}{d\mu} &= 1 \frac{1}{\sqrt{(1 - \mu_i^2)(1 - \mu_j^2) - (\mu_j \mu_i - \mu_L)^2}}\end{aligned}$$

$$\text{Cas 1a : } \sigma_{gg'}^{ij} = \frac{N \rho \cdot \sigma_j}{2 \pi A (E_{g'+1} - E_{g'})} \int_{E'_1}^{E'_2} \int_{\bar{\mu}_{1CM}}^{\bar{\mu}_{2CM}} \left(\frac{\partial \varphi(\mu_L)}{d \mu_L} \right)_{\mu_L = \mu_L(\mu_{CM})} d\mu_{CM} dE'$$

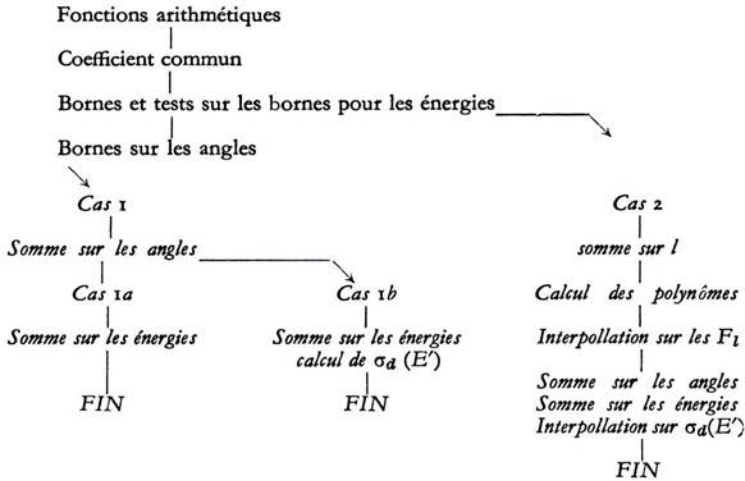
$$\text{car } \sigma_d(E', \mu_L) d\mu_L = \frac{\sigma_d}{4\pi} d\mu_{CM}$$

$$\text{Cas 1b : } \sigma_{gg'}^{ij} = \frac{N \cdot \rho}{2 \pi A (E_{g'+1} - E_{g'})} \int_{E'_1}^{E'_2} \sigma_d(E') \int_{\bar{\mu}_{1CM}}^{\bar{\mu}_{2CM}} \left(\frac{\partial \varphi(\mu_L)}{d \mu_L} \right)_{\mu_L = \mu_L(\mu_{CM})} d\mu_{CM} dE'$$

il nous faudra donc entrer $\sigma_d(E')$ et interpoler

$$\begin{aligned}\text{Cas 2 : } \sigma_{gg'}^{ij} &= \frac{N \cdot \rho}{2 \pi A (E_{g'+1} - E_{g'})} \int_{E'_1}^{E'_2} \sigma_d(E') \int_{\mu_{1CM}}^{\mu_{2CM}} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mu_L} \right)_{\mu_L = \mu_L(\mu_{CM})} \\ &\quad \times \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(E') P_l(\mu_{CM}) d\mu_{CM} dE\end{aligned}$$

On voit qu'un tronçon commun aux trois cas va jusqu'à l'intégration sur μ_{CM} mis à part la légère différence entre 1a et 1b. Le schéma du programme se déduit immédiatement de ces formules :



Les données suivantes sont nécessaires :

- 1) communes aux trois cas :
 - Pôles de Gauss pour l'intégration.
 - Poids correspondants.
 - Ordre de l'intégration.
 - Cosinus des angles $\mu_i \mu_j$.
 - Valeurs des extrémités des groupes d'énergie.
 - Densité.
 - Poids atomique.
 - K , numéro du cas;
- 2) constantes cas 1a :
 - σ_d en barns
- 3) constantes cas 1b
 - $E_i, \sigma_d(E_i), i = 1 \dots MN, MN$
- 4) constantes cas 2
 - $E_i, \sigma_d(E_i), (F_j)(E)_j, j = 0, \dots, 8, i = 0 \dots MN, MN$.

Function CHELN

CHELN(X,A,N,XX,YY,EPSUP,EPLNF,ESUP,EINF,RØ,AA,K,E,SD,F,MN,K1)
 DIMENSION X(N),A(N),E(MN),SD(MN),F(MN),XF(9),P(9)

$XK(TA) = ((TA + \sqrt{TA^2 + AA^2}) / (AA)) \times 2$
 $DCMDL(TF) = ((TF + \sqrt{AA^2 + TF^2}) \times 2) / (AA \times \sqrt{AA^2 + TF^2})$
 $XMU(TB,TC) = ((AA + 1) \times TB - (AA - 1) \times TC) / (2 \times \sqrt{TC \times TB})$
 $XLAB(TE) = (1 + AA \times TE) / \sqrt{AA^2 + 1 + 2 \times AA \times TE}$
 $XCM(TB) = (TD \times (TD + \sqrt{TD^2 + AA^2}) - 1) / AA$

$AX = XX \times YY$
 $BX = \sqrt{(1 - XX^2) \times (1 - YY^2)}$
 $APB = AX + BX$
 $AMB = AX - BX$

$EP1 = \text{Max}(EPLNF, EINF \times XK(APB))$
 $EP2 = \text{Min}(EPSUP, ESUP \times XK(AMB))$
 $CHELN = 0$

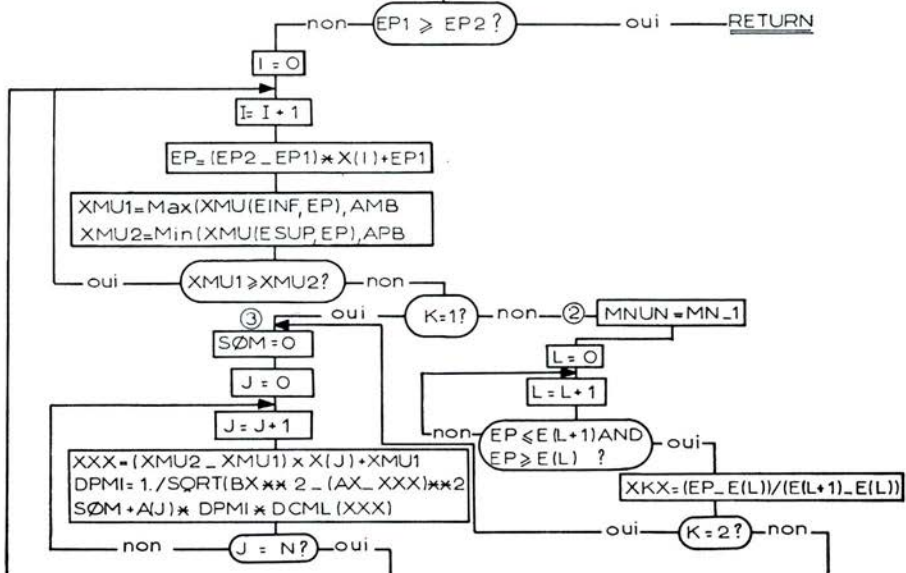


FIG. 14

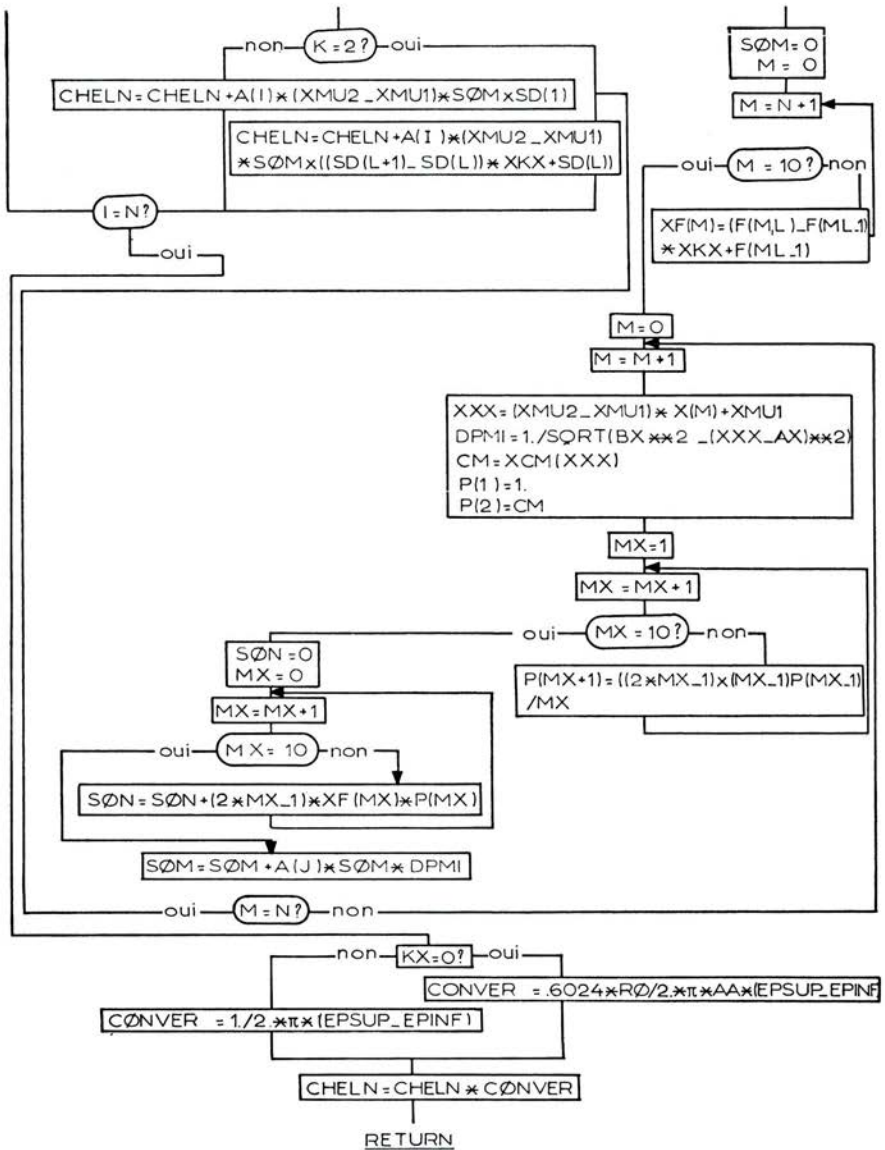


FIG. 15

L'organigramme du sous-programme CHELN se construit donc immédiatement :

Règles d'appel

CHELN (X, A, N, XX, YY, EPSUP, EPINF, ESUP, EINF, RO, AA, K, E, SD, F, MN, K1)

- X, A, N : intégration de Gauss d'ordre N , X pôles et A poids.
 (EPSUP-EPINF) : groupe d'énergie incident, EPSUP borne supérieure.
 (ESUP-EINF) : groupe d'énergie résultant.
 XX, YY : cosinus des angles d'incidence et de diffusion.
 RO, AA : densité et poids atomique du corps.
 K : constante dirigeant la qualité du calcul
 1 : isotropie C.M., section de diffusion constante
 2 : isotropie C.M.
 3 : cas général.
 E, SD, F, MN : MN valeurs de la section efficace de diffusion SD sont données aux énergies E . F sont les coefficients du développement de Troubetzkoï correspondant.
 K1 : coefficient commandant les unités :
 $K = 0$ SD est donnée en barns
 $K \neq 0$ SD est donnée en cm^{-1} .

Le programme appelant doit posséder des dimensions au moins égales à N pour X et A et $E(M), SD(M), F(9, M)$ avec $M \geq MN$.