

CEA-N-1993

FR7702825

- Note CEA-N-1993

Centre d'Etudes de Bruyères-le-Châtel

**TRANSFORMATION DES DISTRIBUTIONS ANGULAIRES  
LORS DU CHANGEMENT DE REFERENTIEL  
CENTRE DE MASSE ↔ LABORATOIRE**

par

Olivier BERSILLON, Roger PERRIER

- Septembre 1977 -

Note CEA-N-1993

**DESCRIPTION-MATIERE** (*mots clefs extraits du thesaurus SIDON/INIS*)

*en français*

REACTIONS NUCLEAIRES  
DISTRIBUTION ANGULAIRE  
SYSTEME DU CENTRE DE MASSE  
SYSTEME DU LABORATOIRE  
TRANSFORMATIONS  
MATRICES  
POLYNOMES DE LEGENDRE  
TRAITEMENT DE L'INFORMATION

*en anglais*

NUCLEAR REACTIONS  
ANGULAR DISTRIBUTION  
CENTER-OF-MASS SYSTEM  
LABORATORY SYSTEM  
TRANSFORMATIONS  
MATRICES  
LEGENDRE POLYNOMIALS  
DATA PROCESSING

- Note CEA-N-1993 -

Centre d'Etudes de Bruyères-le-Châtel  
Service de Physique Nucléaire

TRANSFORMATION DES DISTRIBUTIONS ANGULAIRES  
LORS DU CHANGEMENT DE REFERENTIEL  
CENTRE DE MASSE  $\leftrightarrow$  LABORATOIRE

par

Olivier BERSILLON, Roger PERRIER

CEA-N-1993 - BERSILLON Olivier, PERRIER Roger

TRANSFORMATION DES DISTRIBUTIONS ANGULAIRES LORS DU CHANGEMENT DE  
REFERENTIEL CENTRE DE MASSE ↔ LABORATOIRE

Sommaire.- Le changement de référentiel du centre de masse au laboratoire de distributions angulaires caractérisées par les coefficients de leur développement en polynômes de Legendre s'effectue à l'aide d'une matrice de passage T. Plusieurs méthodes de calcul de cette matrice sont présentées et comparées. Ces méthodes permettent de constituer la matrice pour la diffusion élastique et d'autres réactions nucléaires afin d'exploiter de façon plus complète les fichiers ENDF.

1977

53 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

CEA-N-1993 - BERSILLON Olivier, PERRIER Roger

TRANSFORMATION OF ANGULAR DISTRIBUTIONS FROM THE CENTER OF MASS TO  
THE LABORATORY SYSTEM

Summary.- The Legendre polynomial expansion coefficients of a differential cross section in the laboratory system are deduced from those of the center of mass system by using a transformation matrix T. Several methods for calculating this matrix are presented and compared. These methods can be used to create the matrix for elastic scattering and other nuclear reactions in order to process more completely ENDF files.

1977

53 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

## TABLE DES MATIERES

ABSTRACT	2
RESUME	2
INTRODUCTION	3
I - RAPPELS ET DEFINITIONS	4
II - CALCUL DES COEFFICIENTS DE PASSAGE $T_{ll'}$	6
1 - Quelques cas particuliers	6
2 - Autre relation définissant $\mu$	8
3 - Formule de récurrence	10
4 - Calcul direct des coefficients $T_{ll'}$	11
5 - Comparaison des deux méthodes de calcul de la matrice T	15
III - UTILISATION DE LA MATRICE T DANS LES FICHIERS ENDF	17
IV - CONCLUSION	18
REFERENCES	19
ANNEXE 1 - Programme CDMLABR	A1
ANNEXE 2 - Programme CDMLABD	A2
ANNEXE 3 - Programme CDMLAB	A3



## INTRODUCTION

Les distributions angulaires des particules émises par une réaction nucléaire sont évidemment toujours mesurées dans le référentiel du laboratoire, mais analysées dans le référentiel du centre de masse, généralement par un développement en polynômes de Legendre, pour en déduire des informations nucléaires ( $l, j, \pi \dots$ ).

Par contre ces mêmes distributions angulaires sont utilisées dans le système du laboratoire pour le calcul de certaines corrections expérimentales (par exemple diffusions multiples).

L'objet de la présente note est de résoudre le problème qui se pose de la façon suivante : connaissant dans un système de référence une distribution angulaire caractérisée par les coefficients de son développement en polynômes de Legendre, comment obtenir les coefficients de ce développement dans l'autre système de référence.

Le paragraphe I, après quelques rappels, montre que cette transformation s'effectue à l'aide d'une matrice de passage  $T$  dont les éléments  $T_{ll'}$  sont calculés par des formules démontrées au paragraphe II.

Dans les fichiers de données neutroniques ENDF, la matrice de passage est donnée uniquement dans le cas de la diffusion élastique. Le calcul et l'utilisation de cette matrice sont étendus ici au cas le plus général d'une réaction nucléaire afin d'exploiter pleinement toutes les informations relatives aux distributions angulaires données dans les fichiers ENDF, dans la mesure où celles-ci sont présentées sous forme de développement en polynômes de Legendre. Cette utilisation est décrite dans le paragraphe III.

Enfin plusieurs méthodes sont présentées et comparées dans cette note, méthodes qui permettent de constituer la matrice de passage lors de la création de nouveaux fichiers.

## I - RAPPELS ET DEFINITIONS

Soit une particule de masse  $m_1$ , d'énergie  $E$ , frappant une particule au repos de masse  $m_2$  et produisant une particule de masse  $m_3$  (dont on mesure la distribution angulaire) et une particule de masse  $m_4$ . Soit  $Q$  le bilan énergétique de la réaction.

La section efficace différentielle, exprimée dans le centre de masse, est  $\frac{d\sigma}{d\bar{\omega}}(\bar{u}, \bar{E})$  dans l'angle solide  $d\bar{\omega} = 2\pi d\bar{u}$ , exprimée dans le laboratoire elle est  $\frac{d\sigma}{d\omega}(\mu, E)$  dans l'angle solide  $d\omega = 2\pi d\mu$ .  $\bar{u}$  et  $\mu$  sont les cosinus de l'angle entre les directions de  $m_1$  et  $m_3$  dans les systèmes du centre de masse et du laboratoire respectivement. La formule de transformation de la section efficace entre les deux référentiels s'écrit [1]

$$\frac{d\sigma}{d\omega}(\mu, E) = \frac{d\sigma}{d\bar{\omega}}(\bar{u}, \bar{E}) \frac{d\bar{u}}{d\mu} \quad (1)$$

$\bar{u}$  et  $\mu$  sont liés, dans le cas non relativiste, par [2]

$$(1 - \bar{u}^2)^{1/2} / (\gamma + \bar{u}) = (1 - \mu^2)^{1/2} / \mu \quad (2)$$

avec

$$\gamma = \left[ \frac{m_1 m_3}{m_2 m_4} \cdot \frac{\bar{E}}{\bar{E} + Q} \right]^{1/2} \quad (3)$$

où  $\bar{E}$  est l'énergie cinétique totale disponible dans le centre de masse

$$\bar{E} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} E \quad (4)$$

Le paramètre  $\gamma$  représente le rapport entre la vitesse du centre de masse dans le système du laboratoire et la vitesse de la particule  $m_3$  dans le système du centre de masse.

Pour une diffusion élastique  $Q = 0$  et  $\gamma = \frac{m_1}{m_2} = \text{constante}$  (5)

Tous les calculs ultérieurs sont faits dans le cas général de la relation (3) où  $\gamma$  n'est pas une constante, avec néanmoins la restriction  $\gamma \leq 1$ . En effet, dans ce cas, qui correspond à la majorité des situations physiques avec  $Q > 0$  ou  $Q < 0$ ,  $\mu$  et  $\bar{u}$  varient tous deux

---

\* Toutes les quantités exprimées dans le centre de masse sont surmontées d'une barre, par exemple :  $\bar{u}$ ,  $\bar{E}$ ,  $\bar{\omega}$ .



entre  $-1$  et  $+1$  et sont liés par une relation biunivoque. Par contre, si  $\gamma > 1$ , il existe deux valeurs de  $\mu$  pour une seule valeur de  $\bar{u}$ . C'est par exemple le cas dans une diffusion inélastique où  $\gamma = \infty$  à l'énergie seuil  $E_s$ . La bande d'énergie incidente pour laquelle  $\gamma > 1$  avec  $Q < 0$  est limitée par

$$E_s < E < E_s \left(1 - \frac{m_1 m_3}{m_2 m_4}\right)^{-1}$$

Si  $m_1 = m_3 = 1$ ,  $m_2 = m_4 = 100$ ,  $E_s = 1$  MeV, la largeur de cette bande est de 0,1 keV.

La distribution angulaire peut s'écrire sous la forme [3] :

. dans le centre de masse

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\bar{\omega}}(\bar{u}, \bar{E}) \equiv \frac{d\bar{\sigma}}{d\bar{\omega}}(\bar{u}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \bar{a}_{\ell} P_{\ell}(\bar{u}) \quad (6)$$

. dans le laboratoire

$$\frac{d\sigma}{d\omega}(\mu, E) \equiv \frac{d\sigma}{d\omega}(\mu) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) a_{\ell} P_{\ell}(\mu) \quad (7)$$

où  $P_{\ell}(\mu)$  sont les polynômes de Legendre d'ordre  $\ell$ . Les coefficients  $a_{\ell}$  sont équivalents aux coefficients  $B_{\ell}$  de la référence [3] au facteur  $4\pi \cdot \ell^2$  près.

La section efficace  $\sigma(E)$ , intégrale de la section efficace différentielle dans  $4\pi$ , est la même dans les deux référentiels, soit

$$\sigma(E) = \int_{4\pi} \bar{\sigma}(\bar{u}) d\bar{\omega} = \int_{4\pi} \sigma(\mu) d\omega = \bar{a}_0 = a_0 \quad (8)$$

Connaissant les coefficients  $\bar{a}_{\ell}$ , déduits de l'analyse de la distribution angulaire, les coefficients  $a_{\ell}$  s'écrivent [4], en utilisant l'orthogonalité des polynômes de Legendre et la relation (1),

$$a_{\ell} = 2\pi \int_{-1}^{+1} P_{\ell}(\mu) \frac{d\sigma}{d\omega}(\mu) d\mu = 2\pi \int_{-1}^{+1} P_{\ell}(\mu) \frac{d\bar{\sigma}}{d\bar{\omega}}(\bar{u}) d\bar{u}$$

soit 
$$a_l = \frac{1}{2} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l'+1) \bar{a}_{l'} \int_{-1}^{+1} P_l(u) P_{l'}(\bar{u}) d\bar{u} \quad (9)$$

Posons, par définition

$$T_{ll'} = \frac{2l'+1}{2} \int_{-1}^{+1} P_l(u) P_{l'}(\bar{u}) d\bar{u} \quad (10)$$

il vient alors

$$a_l = \sum_{l'=0}^{\infty} T_{ll'} \bar{a}_{l'} \quad (11)$$

qui est la relation de transformation cherchée. Les coefficients  $T_{ll'}$  peuvent être considérés comme les éléments d'une matrice carrée  $T = \{T_{ll'}\}$ .

La relation inverse (passage du laboratoire au centre de masse) s'écrit

$$\bar{a}_l = \sum_{l'=0}^{\infty} T_{ll'}^{-1} a_{l'} \quad (12)$$

où  $T_{ll'}^{-1}$  sont les éléments de la matrice inverse  $T^{-1}$ , définis par

$$T_{ll'}^{-1} = \frac{2l'+1}{2} \int_{-1}^{+1} P_l(\bar{u}) P_{l'}(u) du \quad (10a)$$

## II - CALCUL DES COEFFICIENTS DE PASSAGE $T_{ll'}$

### 1 - Quelques cas particuliers

Le calcul direct des coefficients  $T_{ll'}$ , par leur définition sous forme d'intégrale est long et délicat sauf pour des valeurs de  $l$  ou  $l'$  petites.

a/  $l = 0$

$$T_{0l'} = \delta_{0l'} \quad (13)$$

b/  $l = 1$

La relation (2) peut se mettre sous la forme

$$u = (\gamma + \bar{u})(1 + 2\gamma\bar{u} + \gamma^2)^{-1/2} \quad (14)$$

qui fait apparaître une fonction génératrice des polynômes de Legendre, d'où

$$u = (\gamma + \bar{u}) \sum_{n=0}^{\infty} (-\gamma)^n P_n(\bar{u}) \quad \rightarrow \quad \gamma < 1 \quad (15)$$

or, par définition

$$T_{1\ell} = \frac{2\ell+1}{2} \int_{-1}^{+1} u P_{\ell}(\bar{u}) d\bar{u} \quad (16)$$

En insérant (15) dans (16) il vient

$$T_{1\ell} = \frac{2\ell+1}{2} \int_{-1}^{+1} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ -(-\gamma)^{n+1} P_n(\bar{u}) + (-\gamma)^n \bar{u} P_n(\bar{u}) \right\} P_{\ell}(\bar{u}) d\bar{u} \quad (17)$$

La relation de récurrence sur les polynômes de Legendre donne

$$\bar{u} P_n(\bar{u}) = \frac{n+1}{2n+1} P_{n+1}(\bar{u}) + \frac{n}{2n+1} P_{n-1}(\bar{u}) \quad (18)$$

d'où, en inversant la sommation et l'intégrale dans (17)

$$T_{1\ell} = \frac{2\ell+1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ -(-\gamma)^{n+1} \int_{-1}^{+1} P_n(\bar{u}) P_{\ell}(\bar{u}) d\bar{u} + (-\gamma)^n \frac{n+1}{2n+1} \int_{-1}^{+1} P_{n+1}(\bar{u}) P_{\ell}(\bar{u}) d\bar{u} \right. \\ \left. + (-\gamma)^n \frac{n}{2n+1} \int_{-1}^{+1} P_{n-1}(\bar{u}) P_{\ell}(\bar{u}) d\bar{u} \right\} \quad (19)$$

La relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre implique que la somme n'a de terme non nul que pour  $n = \ell'-1, \ell', \ell'+1$  soit

$$T_{1\ell} = \frac{2\ell'+1}{2} \left[ -(-\gamma)^{\ell'+1} \frac{2}{2\ell'+1} + (-\gamma)^{\ell'-1} \frac{\ell'}{2\ell'-1} \cdot \frac{2}{2\ell'+1} + (-\gamma)^{\ell'+1} \frac{\ell'+1}{2\ell'+3} \cdot \frac{2}{2\ell'+1} \right] \quad (20)$$

$$T_{1\ell} = \frac{\ell'}{2\ell'-1} (-\gamma)^{\ell'-1} - (-\gamma)^{\ell'+1} \frac{\ell'+2}{2\ell'+3} \quad (21)$$

c/  $l' = 0$  L'intégrale de la définition (10) des coefficients  $T_{l,l'}$ , peut être calculée en introduisant une nouvelle variable  $u$  qui représente le logarithme du rapport de l'énergie qu'aurait la particule  $m_3$  émise à  $0^\circ$  et de l'énergie qu'elle a dans l'angle solide  $d\bar{\omega}$  (énergies mesurées dans le système du laboratoire). Alors, d'après [9]

$$u(u) = 1 - \frac{(1+\gamma)^2}{2\gamma} (1 - e^{-u}) \quad (22)$$

$$u(u) = \frac{1}{2\gamma} \left[ (1+\gamma)e^{-\frac{u}{2}} - (1-\gamma)e^{\frac{u}{2}} \right]$$

avec  $0 < u < \text{Log} \left( \frac{1+\gamma}{1-\gamma} \right)^2$

Reportant ces relations dans la définition (10), il vient

$$T_{l,l'} = - \frac{2l+1}{2} \int_0^{\text{Log} \left( \frac{1+\gamma}{1-\gamma} \right)^2} P_l[u(u)] P_{l'}[\bar{u}(u)] \frac{du}{du} du \quad (23)$$

L'intégrale se réduit alors, en utilisant les expressions développées des polynômes de Legendre, à la somme d'intégrales de fonctions exponentielles. Néanmoins les calculs deviennent rapidement fastidieux pour des valeurs de  $l$  et  $l'$  grandes.

Dans le cas  $l' = 0$  on trouve

$$T_{00} = 1$$

$$T_{10} = \frac{2}{3} \gamma$$

$$T_{20} = \frac{9\gamma^2 - 3}{8\gamma^2} + \frac{3(1-\gamma^2)^2}{32\gamma^3} \text{Log} \left( \frac{1+\gamma}{1-\gamma} \right)^2$$

$$T_{30} = 0$$

$$T_{40} = \frac{35(3-8\gamma^2+9\gamma^4)}{96\gamma^4} - \frac{35(1-\gamma^2)^3}{128\gamma^5} \text{Log} \left( \frac{1+\gamma}{1-\gamma} \right)^2 - \frac{5}{2} T_{20} + \frac{3}{8}$$

$$T_{50} = 0 \quad \text{et de façon générale } T_{2k+1,0} = 0 \text{ pour } k > 1.$$

## 2 - Autre relation définissant $u$

Les relations (15) et (21) permettent de définir une nouvelle expression de  $u$ . En effet la relation (15) développée s'écrit :

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ -(-\gamma)^{n+1} P_n(\bar{u}) + (-\gamma)^n \bar{u} P_n(\bar{u}) \right\} \quad (24)$$

En utilisant la relation de récurrence (18)

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ -(-\gamma)^{n+1} P_n(\bar{u}) + (-\gamma)^n \left[ \frac{n+1}{2n+1} P_{n+1}(\bar{u}) + \frac{n}{2n+1} P_{n-1}(\bar{u}) \right] \right\} \quad (25)$$

soit :

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} -(-\gamma)^{n+1} P_n(\bar{u}) + \sum_{n=0}^{\infty} (-\gamma)^n \frac{n+1}{2n+1} P_{n+1}(\bar{u}) + \sum_{n=0}^{\infty} (-\gamma)^n \frac{n}{2n+1} P_{n-1}(\bar{u}) \quad (26)$$

En effectuant les changements d'indice  $m = n+1$  dans la deuxième somme et  $l = n-1$  dans la troisième, il vient :

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} -(-\gamma)^{n+1} P_n(\bar{u}) + \sum_{m=1}^{\infty} (-\gamma)^{\frac{m-1}{2m-1}} P_m(\bar{u}) + \sum_{l=-1}^{\infty} (-\gamma)^{\frac{l+1}{2l+3}} P_l(\bar{u}) \quad (27)$$

Les termes correspondants à  $m = 0$  dans la deuxième somme et  $l = -1$  dans la troisième sont nuls. Donc, les trois indices  $n$ ,  $m$ ,  $l$  pouvant partir de zéro, les trois sommes se regroupent en une seule

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{n}{2n-1} (-\gamma)^{n-1} - \frac{n+2}{2n+3} (-\gamma)^{n+1} \right\} P_n(\bar{u}) \quad (28)$$

or le terme entre crochets est, d'après la relation (21),  $T_{1n}$  d'où

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} T_{1n} P_n(\bar{u}) \quad (29)$$

### 3 - Formule de récurrence

Les relations (13) et (21) peuvent servir de base à une formule de récurrence sur  $l$  [5] pour déterminer les coefficients  $T_{2l}$ , ( $l > 1$ ).

Partant de la définition

$$T_{2l+1, l'} = \frac{2l'+1}{2} \int_{-1}^{+1} P_{2l+1}(u) P_{l'}(\bar{u}) d\bar{u} \quad (30)$$

et en utilisant la relation (18), il vient

$$\begin{aligned} T_{2l+1, l'} &= \frac{2l'+1}{2} \cdot \frac{2l+1}{l+1} \int_{-1}^{+1} u P_l(u) P_{l'}(\bar{u}) d\bar{u} \\ &\quad - \frac{2l'+1}{2} \cdot \frac{l}{l+1} \int_{-1}^{+1} P_{l-1}(u) P_{l'}(\bar{u}) d\bar{u} \end{aligned} \quad (31)$$

Le second terme est par définition  $-\frac{l}{l+1} T_{2l-1, l'}$ .

Le premier terme est calculé en utilisant la relation (29) et en inversant la sommation et l'intégrale

$$I \equiv \int_{-1}^{+1} u P_l(u) P_{l'}(\bar{u}) d\bar{u} = \sum_{n=0}^{\infty} T_{1n} \int_{-1}^{+1} P_l(u) P_n(\bar{u}) P_{l'}(\bar{u}) d\bar{u} \quad (32)$$

La relation de composition des harmoniques sphériques [6] permet d'écrire

$$P_n(\bar{u}) P_{l'}(\bar{u}) = \sum_{m=|n-l'|}^{n+l'} \langle n l' 00 | m 0 \rangle^2 P_m(\bar{u}) \quad (33)$$

d'où

$$I = \sum_{n=0}^{\infty} T_{1n} \sum_{m=|n-l'|}^{n+l'} \langle n l' 00 | m 0 \rangle^2 \int_{-1}^{+1} P_l(u) P_m(\bar{u}) d\bar{u} \quad (34)$$

La dernière intégrale est, par définition,  $\frac{2}{2m+1} T_{2m}$  d'où

$$I = 2 \sum_{n=0}^{\infty} T_{1n} \sum_{m=|n-l|}^{n+l} \langle n'l'00 | m0 \rangle^2 \frac{T_{lm}}{2m+1} \quad (35)$$

et la relation de récurrence cherchée s'écrit

$$T_{l+1,l} = (2l+1) \frac{2l+1}{l+1} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} T_{1n} \sum_{m=|n-l|}^{n+l} \langle n'l'00 | m0 \rangle^2 \frac{T_{lm}}{2m+1} \right\} - \frac{l}{l+1} T_{l-1,l} \quad (36)$$

Cette formule est calculée par le programme CDMLABR (voir annexe 1).

#### 4 - Calcul direct des coefficients $T_{ll}$ ,

Le calcul des coefficients  $T_{ll}$ , par la relation de récurrence (36) semble simple mais, en fait, se heurte rapidement à des problèmes de précision numérique (les deux termes du second membre deviennent extrêmement voisins). Une méthode de calcul direct apparaît donc nécessaire.

Cette méthode consiste, partant de la définition

$$T_{ll} = \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^{+1} P_l(u) P_l(\bar{u}) du \quad (10)$$

à transformer le polynôme  $P_l(u)$  en une fonction explicite de  $\bar{u}$ .

Or  $P_l(u)$  est une fonction implicite de  $\bar{u}$  et  $\gamma$  par l'intermédiaire de  $u$ , fonction que l'on peut développer en série de Taylor au voisinage de  $\gamma = 0$ , soit

$$P_l[u(\bar{u}, \gamma)] = \sum_{\pi=0}^{\infty} \gamma^{\pi} \frac{1}{\pi!} \left| \frac{\partial^{\pi} P_l(u)}{\partial \gamma^{\pi}} \right|_{\gamma=0} \quad (37)$$

Les dérivées partielles  $\frac{\partial^{\pi} P_l(u)}{\partial \gamma^{\pi}}$  sont de la forme [7]

$$\frac{\partial^\pi P_\ell(u)}{\partial \gamma^\pi} = (1+2\gamma\bar{u}+\gamma^2)^{-\frac{\pi}{2}} \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^\pi P_p(u) \quad (38)$$

avec

$$b_{\ell,p}^{\pi+1} = \frac{(p+1)(p+2-\pi)}{(2p+3)(\pi+1)} b_{\ell,p+1}^\pi - \frac{p(p+\pi-1)}{(2p-1)(\pi+1)} b_{\ell,p-1}^\pi \quad (39)$$

et 
$$b_{\ell,p}^0 = \delta_{\ell,p}$$

Ce résultat se démontre par récurrence. On suppose la relation (38) vraie pour une certaine valeur de  $\pi$ , puis, en la dérivant par rapport à  $\gamma$ ,

$$\frac{\partial^{\pi+1} P_\ell(u)}{\partial \gamma^{\pi+1}} = -\pi(1+2\gamma\bar{u}+\gamma^2)^{-\frac{\pi}{2}-1} (\gamma+\bar{u}) \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^\pi P_p(u) \quad (40)$$

$$+ (1+2\gamma\bar{u}+\gamma^2)^{-\frac{\pi}{2}} \frac{\partial u}{\partial \gamma} \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^\pi \frac{\partial P_p(u)}{\partial u}$$

Le coefficient devant la première sommation de (40) peut se mettre sous la forme, en utilisant (14)

$$- \pi(1+2\gamma\bar{u}+\gamma^2)^{-\frac{\pi+1}{2}} u$$

De plus, à l'aide de la relation de récurrence (18), le premier terme s'écrit

$$- \pi(1+2\gamma\bar{u}+\gamma^2)^{-\frac{\pi+1}{2}} \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^\pi \left[ \frac{p+1}{2p+1} P_{p+1}(u) + \frac{p}{2p+1} P_{p-1}(u) \right] \quad (41)$$



Par ailleurs, toujours d'après (14)

$$\frac{\partial u}{\partial \gamma} = (1-u^2) (1+2\gamma\bar{u}+\gamma^2)^{-1/2} \quad (42)$$

Le second terme de (40) s'écrit donc

$$(1+2\gamma\bar{u}+\gamma^2)^{-\frac{\pi+1}{2}} \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^{\pi} (1-u^2) \frac{\partial P_p(u)}{\partial u} \quad (43)$$

or,

$$(1-u^2) \frac{\partial P_p(u)}{\partial u} = (p+1)u P_p(u) - (p+1)P_{p+1}(u)$$

Développant  $uP_p(u)$  à l'aide de la relation (18)

$$(1-u^2) \frac{\partial P_p(u)}{\partial u} = \frac{p(p+1)}{2p+1} [P_{p-1}(u) - P_{p+1}(u)]$$

La relation (40) s'écrit alors

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{\pi+1} P_{\ell}(u)}{\partial \gamma^{\pi+1}} &= -\pi(1+2\gamma\bar{u}+\gamma^2)^{-\frac{\pi+1}{2}} \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^{\pi} \left[ \frac{p+1}{2p+1} P_{p+1}(u) + \frac{p}{2p+1} P_{p-1}(u) \right] \\ &+ (1+2\gamma\bar{u}+\gamma^2)^{-\frac{\pi+1}{2}} \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^{\pi} \frac{p(p+1)}{2p+1} [P_{p-1}(u) - P_{p+1}(u)] \end{aligned}$$

soit en regroupant les termes

$$\frac{\partial^{\pi+1} P_{\ell}(u)}{\partial \gamma^{\pi+1}} = (1+2\gamma\bar{u}+\gamma^2)^{-\frac{\pi+1}{2}} (\pi+1)! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} \left[ \frac{p(p+1-\pi)}{(2p+1)(\pi+1)} P_{p-1}(u) - \frac{(p+1)(p+\pi)}{(2p+1)(\pi+1)} P_{p+1}(u) \right] b_{\ell,p}^{\pi} \quad (44)$$

La sommation se décompose de la façon suivante :

$$\sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^{\pi} \frac{p(p+1-\pi)}{(2p+1)(\pi+1)} P_{p-1}(u) - \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^{\pi} \frac{(p+1)(p+\pi)}{(2p+1)(\pi+1)} P_{p+1}(u)$$

puis, faisant les décalages d'indices  $p-1 \rightarrow p$  dans la première somme et  $p+1 \rightarrow p$  dans la seconde, il vient

$$\sum_{p=l-\pi-1}^{l+\pi-1} b_{l,p+1}^{\pi} \frac{(p+1)(p+2-\pi)}{(2p+3)(\pi+1)} P_p(u) - \sum_{p=l-\pi+1}^{l+\pi+1} b_{l,p-1}^{\pi} \frac{p(p+\pi-1)}{(2p-1)(\pi+1)} P_p(u)$$

Regroupant alors ces deux sommes

$$\sum_{p=l-(\pi+1)}^{l+(\pi+1)} \left[ \frac{(p+1)(p+2-\pi)}{(2p+3)(\pi+1)} b_{l,p+1}^{\pi} - \frac{p(p+\pi-1)}{(2p-1)(\pi+1)} b_{l,p-1}^{\pi} \right] P_p(u)$$

Le terme entre crochets est exactement  $b_{l,p}^{\pi+1}$ , donc si la relation (38) est vraie pour  $\pi$ , elle est vraie pour toute valeur supérieure de  $\pi$ . Or cette relation est triviale pour  $\pi = 0$  ( $P_l(u) = P_l(u)$ ), et de ce fait vraie pour tout  $\pi$ .

La relation (37) s'écrit alors

$$P_l(u) = \sum_{\pi=0}^{\infty} \gamma^{\pi} \frac{1}{\pi!} \left| (1+2\gamma\bar{u}+\gamma^2)^{-\frac{\pi}{2}} \pi! \sum_{p=l-\pi}^{l+\pi} b_{l,p}^{\pi} P_p(u) \right|_{\gamma=0}$$

or, si  $\gamma = 0$ ,  $u = \bar{u}$  d'après (14), donc

$$P_l(u) = \sum_{\pi=0}^{\infty} \gamma^{\pi} \sum_{p=l-\pi}^{l+\pi} b_{l,p}^{\pi} P_p(\bar{u}) \quad (45)$$

En reportant cette relation dans la définition (10), il vient

$$T_{ll'} = \sum_{\pi=0}^{\infty} \gamma^{\pi} \sum_{p=l-\pi}^{l+\pi} b_{l,p}^{\pi} \frac{2l'+1}{2} \int_{-1}^{+1} P_p(\bar{u}) P_{l'}(\bar{u}) d\bar{u} \quad (46)$$

or

$$\frac{2l'+1}{2} \int_{-1}^{+1} P_p(\bar{u}) P_{l'}(\bar{u}) d\bar{u} = \delta_{p,l'}$$

La sommation sur  $p$  se limite au seul terme  $p = l'$ , avec la condition  $l - r \leq l' \leq l + r$  soit  $r \geq |l - l'|$ , et la relation (46) s'écrit

$$T_{ll'} = \sum_{r=|l-l'|}^{\infty} \gamma^r b_{l,l'}^r \quad (47)$$

qui à l'aide de la définition (39) permet donc de calculer directement les coefficients  $T_{ll'}$ .

Cette formule est calculée par le programme CDMLABD (voir annexe 2).

##### 5- Comparaison des deux méthodes de calcul de la matrice T.

Les éléments de la matrice de passage ont été calculés, dans le cas  $\gamma = 0,01$  et  $l_{\max} = 19$ , à l'aide des deux formulations précédentes (récurrente et directe) afin de comparer la précision et la rapidité de calcul de celles-ci. Le tableau I présente, dans sa partie supérieure, un extrait de la matrice calculée par la méthode récurrente et, dans sa partie inférieure, le même extrait calculé par la méthode directe. L'examen de ce tableau permet de constater deux types de différences :

- . les coefficients  $T_{ll}$ , rigoureusement nuls dans la méthode directe (et qui le sont analytiquement) ne le sont pas dans la méthode récurrente (soulignés en tiretés).
- . les termes soulignés en trait plein, calculés par la méthode récurrente, sont approchés voire faux du fait de la précision numérique limitée, malgré l'utilisation de 30 chiffres significatifs pour effectuer le calcul.

De plus le calcul direct est 200 fois plus rapide que le calcul récurrent (0,17 secondes au lieu de 35 secondes sur ordinateur CDC 7600).

Ceci montre la supériorité de la méthode directe qui est rapide et qui permet de s'affranchir des problèmes de précision numérique.

TABIEAU I

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11									
Méthode récurrente	1 1.0000E+00 0.	2 6.0667E-03 9.9994E-01 0.6001E-03 5.9994E-03 0.	3 2.0000E-05 1.2000E-02 9.9984E-01 1.1998E-02 1.3712E-04 1.5235E-06 1.6621E-08 1.7499E-10 1.9093E-12 2.0210E-14 2.1285E-16	4 3.0000E-10 6.0000E-07 1.7142E-02 9.9969E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01	5 5.1.5874E-10 1.9048E-07 1.4285E-04 2.2219E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02	6 4.0045E-10 9.0045E-07 6.9264E-04 2.2219E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02	7 2.3376E-15 1.1987E-12 1.7483E-09 1.6168E-06 3.6702E-04 3.1324E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02	8 3.9209E-10 1.0950E-07 2.7295E-04 6.9194E-09 1.6168E-06 3.6702E-04 3.1324E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01	9 4.1141E-20 1.9748E-17 1.1519E-14 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11	10 5.2511E-30 1.3121E-27 1.1212E-24 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21	11 7.9334E-25 3.4024E-22 1.5317E-19 9.570E-17 1.5004E-15 1.5004E-15 1.5004E-15 1.5004E-15 1.5004E-15 1.5004E-15 1.5004E-15	12 9.9556E-10 1.1337E-27 3.3555E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	13 5.3461E-20 4.4301E-27 2.4311E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	14 5.7395E-30 1.1461E-27 4.2491E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	15 5.1121E-20 2.1109E-27 2.2243E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	16 8.5576E-30 1.4453E-27 3.0121E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	17 4.1856E-20 2.1261E-27 2.4311E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	18 5.4527E-20 1.4453E-27 3.0121E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	19 5.8224E-20 1.4453E-27 3.0121E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	20 5.1121E-20 2.1109E-27 2.2243E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21
Méthode directe	1 1.0000E+00 0.	2 6.0667E-03 9.9994E-01 0.6001E-03 5.9994E-03 0.	3 2.0000E-05 1.2000E-02 9.9984E-01 1.1998E-02 1.3712E-04 1.5235E-06 1.6621E-08 1.7499E-10 1.9093E-12 2.0210E-14 2.1285E-16	4 3.0000E-10 6.0000E-07 1.7142E-02 9.9969E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01	5 5.1.5874E-10 1.9048E-07 1.4285E-04 2.2219E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02	6 4.0045E-10 9.0045E-07 6.9264E-04 2.2219E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02	7 2.3376E-15 1.1987E-12 1.7483E-09 1.6168E-06 3.6702E-04 3.1324E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02	8 3.9209E-10 1.0950E-07 2.7295E-04 6.9194E-09 1.6168E-06 3.6702E-04 3.1324E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01 1.7138E-02 9.9949E-01	9 4.1141E-20 1.9748E-17 1.1519E-14 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11 1.6126E-11	10 5.2511E-30 1.3121E-27 1.1212E-24 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21 1.2121E-21	11 7.9334E-25 3.4024E-22 1.5317E-19 9.570E-17 1.5004E-15 1.5004E-15 1.5004E-15 1.5004E-15 1.5004E-15 1.5004E-15 1.5004E-15	12 9.9556E-10 1.1337E-27 3.3555E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	13 5.3461E-20 4.4301E-27 2.4311E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	14 5.7395E-30 1.1461E-27 4.2491E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	15 5.1121E-20 2.1109E-27 2.2243E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	16 8.5576E-30 1.4453E-27 3.0121E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	17 4.1856E-20 2.1261E-27 2.4311E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	18 5.4527E-20 1.4453E-27 3.0121E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	19 5.8224E-20 1.4453E-27 3.0121E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21	20 5.1121E-20 2.1109E-27 2.2243E-24 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21 1.1199E-21

Comparaison des coefficients  $T_{11}$  calculés par la méthode  
récurrente et la méthode directe pour  $\gamma = 0.01$

### III - UTILISATION DE LA MATRICE T DANS LES FICHIERS ENDF

Dans les fichiers ENDF, les distributions angulaires font l'objet de la "file 4" [3].

Pour une réaction elles sont données pour une série d'énergies croissantes.

Les distributions angulaires sont présentées sous deux formes, et pour chacune de ces formes, elles sont données dans le système du laboratoire ou du centre de masse:

Cas 1 . soit directement sous forme de distributions de probabilités normalisées  $p(\mu, E)$  telles que

$$\int_{-1}^{+1} p(\mu, E) d\mu = 1 \quad (48)$$

$p(\mu, E)$  est la probabilité qu'un neutron d'énergie incidente  $E$  soit diffusé dans un intervalle  $d\mu$  autour d'un angle dont le cosinus est  $\mu$ .

La distribution angulaire s'écrit alors

$$\frac{d\sigma}{d\omega}(\mu, E) = \frac{\sigma(E)}{2\pi} p(\mu, E) \quad (49)$$

Dans ce cas le changement de référentiel peut s'effectuer à l'aide des transformations cinématiques classiques sur les angles et les sections efficaces [1]. Ce problème n'a pas été abordé ici.

Cas 2 . soit à partir des coefficients du développement en polynômes de Legendre, tabulés à partir de  $l = 1$  (il est sous-entendu que  $a_0 = 1$ ).

Dans ce cas la distribution angulaire s'écrit

$$\frac{d\sigma}{d\omega}(\mu, E) = \frac{\sigma(E)}{4\pi} \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1) a_l(E) P_l(\mu) \quad (50)$$

et le passage du système du centre de masse à celui du laboratoire est effectué par le programme CDMLAB (voir annexe 3).

Pour la diffusion élastique, il utilise la matrice T donnée dans les fichiers ENDF.

Pour la diffusion inélastique et les réactions du type  $(n,p)$ ,  $(n,\alpha)$ ..., le programme calcule la matrice T, qui pour ces réactions ne figure pas dans les fichiers ENDF, et effectue le changement de référentiel.

#### IV - CONCLUSION

Le passage du centre de masse au laboratoire d'une distribution angulaire définie par les coefficients de son développement en polynômes de Legendre nécessite l'utilisation d'une matrice de passage T qui est donnée dans les fichiers ENDF uniquement dans le cas de la diffusion élastique. Les deux méthodes qui viennent d'être décrites permettent d'étendre le calcul de la matrice T au cas général où le paramètre  $\gamma$  n'est pas une constante. La comparaison de ces méthodes montre la grande importance des problèmes de précision numérique lors du calcul et, de ce fait, la supériorité de la méthode directe.

Cette extension permet donc d'exploiter de façon plus complète les données contenues dans les fichiers ENDF.

Les auteurs tiennent à remercier Monsieur C. PHILIS pour l'intérêt constant qu'il a porté à ce travail.

REFERENCES

- [1] MICHALOWICZ A., Cinématique des réactions nucléaires, Dunod, 1964.
- [2] EVANS R.D., Le noyau atomique, p.461, Dunod, 1961.
- [3] BLATT J.M., BIEDENHARN L.C., Rev. Mod. Phys. 24 (1952) 258.
- [4] ZWEIFEL P.F., HURWITZ H., J. Appl. Phys. 25 (1954) 1241.
- [5] AMSTER H., J. Appl. Phys. 27 (1956) 307.
- [6] MESSIAH A., Mécanique Quantique, Tome 2, p.909, Dunod, 1964.
- [7] AMSTER H., J. Appl. Phys. 29 (1958) 623.
- [8] BNL-NCS-50496 (1975).
- [9] MARSHAK, BROOKS, HURWITZ, Nucleonics 2 (1948) 53.

*Manuscrit reçu le 4 août 1977*

ANNEXE 1 - Programme CDMLABR

Le programme CDMLABR calcule les coefficients  $T_{ii}'$  à l'aide de la relation de récurrence (36). Du fait que les deux termes du second membre de cette relation sont extrêmement voisins les problèmes de précision numérique sont très importants, ce qui a conduit à implanter ce programme en double précision sur l'ordinateur CDC 7600.

Une fois la matrice  $T$  calculée, elle est transformée en un vecteur  $V$  présenté sous format ENDF grâce au sous programme CXFP.

Données

Les seules données sont  $\gamma$  et  $l_{\max}$  :  
GAM, LMAX lues dans le format (E14.7,I3).

Cas test

Le cas test présenté correspond à  $\gamma = 0,01$  et  $l_{\max} = 19$ . Les coefficients soulignés sont douteux du fait de la précision limitée ( $\sim 10^{-30}$ ).

De plus, les coefficients qui doivent être nuls analytiquement sont remis à zéro par programme pour éviter la propagation des erreurs par la formule récurrente. Ceci n'apparaît pas au paragraphe II.5 lors de la comparaison des deux méthodes de calcul.

Le temps du calcul est de 35 secondes (CDC 7600).

Listing



GAMMA = .7000000E-01

ORDNE = 20

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1 1.0000E+00	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
2 6.6667E-03	9.9994E-01	6.6667E-03	5.9994E-03	5.7137E-07	5.5550E-04	5.4540E-11	5.3841E-13	5.3328E-15	5.2936E-17	5.2626E-19
3 2.0000E-05	1.2000E-02	9.9984E-01	1.1998E-02	1.3712E-04	1.5236E-06	1.6621E-08	1.7899E-10	1.9093E-12	2.0216E-14	2.1280E-16
4 0.	6.8571E-05	1.7142E-02	9.9969E-01	1.7138E-02	2.3804E-04	3.0296E-06	3.6705E-08	4.3067E-10	4.9401E-12	5.5716E-14
5 -1.5874E-10	1.9048E-07	1.4285E-04	2.2219E-02	9.9949E-01	2.2214E-02	3.6351E-04	5.2198E-06	6.9598E-08	8.8431E-10	1.0860E-11
6 0.	0.	6.9264E-07	2.4240E-04	2.7266E-02	9.9924E-01	2.7258E-02	5.1375E-04	8.2204E-06	1.1968E-07	1.6378E-09
7 2.3312E-15	-1.3987E-12	1.7483E-09	1.6316E-06	3.6708E-04	3.2295E-02	9.9894E-01	3.2785E-02	6.8883E-04	1.2156E-05	1.9195E-07
8 0.	0.	0.	6.9619E-09	3.1326E-06	5.1680E-04	3.7314E-02	9.9859E-01	3.7300E-02	8.8876E-04	1.7153E-05
9 -4.1747E-20	1.9748E-17	-1.7519E-14	1.6126E-11	1.8140E-08	3.3205E-06	6.9153E-04	4.2323E-02	9.9819E-01	4.2305E-02	1.1135E-03
10 0.	0.	0.	0.	6.9835E-11	3.8406E-08	8.3201E-06	8.9124E-04	4.7326E-02	9.9774E-01	4.7303E-02
11 7.9419E-25	-3.4028E-22	1.5312E-19	-9.5270E-17	1.5004E-13	1.9804E-10	7.1506E-08	1.2756E-05	1.1159E-03	5.2322E-02	9.9725E-01
12 0.	0.	0.	0.	0.	6.9979E-13	4.5482E-10	1.2181E-07	1.7253E-05	1.3655E-03	5.7312E-02
13 -1.9778E-28	6.4645E-27	-2.5393E-24	1.1847E-21	-7.9965E-19	1.4073E-15	2.1342E-12	9.1457E-10	1.9432E-07	2.3436E-05	1.6399E-03
14 0.	0.	0.	0.	0.	0.	7.0083E-15	5.2557E-12	1.6751E-09	2.9464E-07	3.0929E-05
15 1.6865E-28	-1.8616E-30	4.9444E-28	-1.8779E-26	9.2947E-24	-6.4153E-21	1.3289E-17	2.2779E-14	1.1293E-11	2.8606E-09	4.2900E-07
16 0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	7.0161E-17	5.9631E-14	2.2028E-11	4.6251E-09
17 -1.5811E-28	1.6234E-30	-4.7953E-28	2.9070E-30	-7.7622E-28	7.4135E-26	-5.8893E-23	1.2619E-19	2.4132E-16	1.3584E-13	3.9931E-11
18 0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	7.0222E-19	6.6704E-16	2.8013E-13
19 1.4933E-28	-1.5332E-30	5.9622E-28	-2.4224E-30	5.4381E-28	-9.4948E-31	1.2816E-27	-5.1507E-25	1.2039E-21	2.5413E-18	1.6009E-15
20 0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	7.0270E-21	7.3777E-16

12	13	14	15	16	17	18	19	20
1 0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
2 5.2576E-27	-5.2769E-25	5.1995E-23	-5.1847E-21	5.1719E-19	-5.1608E-17	5.1510E-15	-5.1423E-13	5.1346E-11
3 -2.2293E-18	2.3262E-20	-2.4193E-22	2.5089E-24	-2.5954E-26	2.6791E-28	-2.7603E-30	2.8392E-32	-2.9159E-34
4 6.2017E-16	-6.8309E-18	7.4593E-20	-8.0872E-22	8.7147E-24	-9.3418E-26	9.9686E-28	-1.0595E-29	1.1222E-31
5 -1.3003E-13	1.5264E-15	-1.7638E-17	2.0121E-19	-2.2707E-21	2.5393E-23	-2.8175E-25	3.1050E-27	-3.4015E-29
6 2.1447E-11	-2.7176E-13	3.3562E-15	-4.0606E-17	4.8308E-19	-5.6666E-21	6.5681E-23	-7.5353E-25	8.5682E-27
7 -2.8154E-09	3.9171E-11	-5.2378E-13	6.7898E-15	-8.5848E-17	1.0634E-18	-1.2949E-20	1.5538E-22	-1.8413E-24
8 2.9202E-07	-4.5709E-09	6.7347E-11	-9.4786E-13	1.2870E-14	-1.6975E-16	2.1863E-18	-2.7598E-20	3.4249E-22
9 -2.3334E-05	4.2613E-07	-7.0911E-09	1.1031E-10	-1.6302E-12	2.3139E-14	-3.1788E-16	4.2505E-18	-5.5560E-20
10 1.3632E-03	-3.0824E-05	6.0113E-07	-1.0598E-08	1.7360E-10	-2.6881E-12	3.9813E-14	-5.6877E-16	7.8860E-18
11 -5.2294E-02	1.6376E-03	-3.9747E-05	8.2448E-07	-1.5354E-08	2.6416E-10	-4.2771E-12	6.5991E-14	-9.7899E-16
12 9.9670E-01	-5.7279E-02	1.9369E-03	-5.0228E-05	1.1043E-06	-2.1600E-08	3.9057E-10	-6.6001E-12	1.0592E-13
13 6.2297E-02	9.9610E-01	-6.2258E-02	2.2610E-03	-6.2388E-05	1.4493E-06	-2.9867E-08	5.6324E-10	-9.9171E-12
14 1.9392E-03	6.7276E-02	9.9545E-01	-6.7230E-02	2.0098E-03	-7.6353E-05	1.8687E-06	-4.0369E-08	7.9472E-10
15 3.9855E-05	2.2634E-03	7.2249E-02	9.9475E-01	-7.2197E-02	2.9833E-03	-9.2245E-05	2.3725E-06	-5.3615E-08
16 6.0428E-07	5.0340E-05	2.6123E-03	7.7216E-02	9.9400E-01	-7.7156E-02	3.3814E-03	-1.1019E-04	2.9713E-06
17 7.1552E-09	8.2794E-07	6.2506E-05	2.9860E-03	8.2177E-02	9.9321E-01	-8.2109E-02	3.8043E-03	-1.3030E-04
18 6.8323E-11	1.0673E-08	1.1081E-06	7.6477E-05	3.3844E-03	8.7131E-02	9.9236E-01	-8.7055E-02	4.2517E-03
19 5.3550E-13	1.1154E-10	1.5441E-08	1.4534E-06	9.2377E-05	3.8076E-03	9.2079E-02	9.9166E-01	-9.1994E-02
20 3.4705E-15	9.6388E-13	1.7513E-10	2.1741E-08	1.8732E-06	1.1033E-04	4.2553E-03	9.7020E-02	9.9052E-01

```

      PROGRAM CONLAB(INPUT,OUTPUT,TAPES=INPUT,TAPE6=OUTPUT)
C      PROGRAMME : CONLABR
C      *****
C                      DEC 1976
C
C*****
C      CALCUL DE LA MATRICE DE PASSAGE CENTRE DE MASSE --> LABO
C      POUR LES COEFFICIENTS DU DEVELOPPEMENT EN POLYNOMES DE LEGENDRE
C      DES DISTRIBUTIONS ANGULAIRES
C      METHODE DE RECURRENCE
C*****
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      LOGICAL KP
      DIMENSION FF(6),S(6),NH(6)
      COMMON/MAT/T(21,100)
      COMMON/VEC/V(441)
C
      IE=5
      IS=6
C
      READ(IE,5) GAM,LMAX
      LMAX=LMAX+1
      WRITE(IS,6)
      WRITE(IS,7) GAM,LMAX
C
      UN=1,U0+00
      DEU=2,00+00
      TRO=3,00+00
      EPS=1,0E-30
      IDIM=100
      IDIM1=IDIM-1
C
      DO 100 I=1,21
      DO 100 J=1,IDIM
100  T(I,J)=0,U0+00
C
      T(1,1)=UN
      T(2,1)=(DEU+GAM)/TRO
C
      S=UN
      S1=GAM+GAM
      DO 110 J=2,IDIM
      ALP=FLOAT(J-1)
      SIGN=-UN
      IF((ALP/DEU=FLOAT((J-1)/6)),GT,U,001) SIGN=UN
      T(2,J)=(ALP+S)/(DEU+ALP-UN)-((ALP+DEU)+S1)/(DEU+ALP+TRO)
      T(2,J)=SIGN*T(2,J)
      S=S+GAM
      S1=S1+GAM
110  CONTINUE
C
      KP=,FALSE,
      DO 800 K=3,LMAX
      KP=,NOT,KP
      LL=K-1
      L=K-2
      AL=FLOAT(L)

```

```

DO 700 LPR=1, IDIM1
  LP=LPR-1
  ALP=FLOAT(LP)
  CONST=(DEU*ALP+UN)*(DEU*AL+UN)/(AL+UN)
  S2=0.00+00
  DO 600 NN=1, IDIM1
    N=NN-1
    AN=FLOAT(N)
    S1=0.00+00
    MMIN=IABS(N-LP)+1
    MMAX=N+LP+1
    MMIN=MINO(MMIN, IDIM)
    MMAX=MINO(MMAX, IDIM)
    DO 500 MM=MMIN, MMAX
      M=MM-1
      AM=FLOAT(M)
      Z=CGO(AN, ALP, AM)
      SS1=Z+Z*T(LL, MM)/(DEU*AM+UN)
      S1=S1+SS1
      IF(DABS(S1).GT.0.0.AND.VABS(S1).LT.EPS) GO TO 501
500 CONTINUE
501 CONTINUE
      SS2=T(2, NN)*S1
      S2=S2+SS2
      IF(DABS(S2).GT.0.0.AND.VABS(S2).LT.EPS) GO TO 601
600 CONTINUE
601 CONTINUE
      T(K, LPR)=CONST+S2-AL*T(L, LPR)/(AL+UN)
      IF(KP) GO TO 602
      IF(LPR.LE.(K/2-1)) T(K, LPR)=0.00+00
602 CONTINUE
     >NNLPR=NN+LPR
      IF(NNLPR.GT.IDIM) WRITE(15, 51) K, LPR,>NNLPR, IDIM
700 CONTINUE
800 CONTINUE

C
C   ECHITURE DE LA MATRICE
C
      LM=MINO(11, LMAX)
      WRITE(15, 890) (I, I=1, LM)
      WRITE(15, 891)
      DO 900 LPR=1, LMAX
900 WRITE(15, 901) LPR, (T(LPR, J), J=1, LM)
      IF(LMAX.LE.11) GO TO 905
      WRITE(15, 904)
      WRITE(15, 890) (I, I=12, LMAX)
      WRITE(15, 891)
      DO 902 LPR=1, LMAX
902 WRITE(15, 901) LPR, (T(LPR, J), J=12, LMAX)
905 CONTINUE

C
C   TRANSFORMATION DE LA MATRICE EN VECTEUR
C
      WRITE(15, 9)
      DO 950 J=1, LMAX
      DO 950 I=1, LMAX
      L=(J-1)*LMAX+I

```

```

950 V(L)=T(I,J)
    LMAX2=LMAX+LMAX
    NL=LMAX2/6
    IF((LMAX2-6*NL).GT.0) NL=NL+1
    DO 960 I=1,NL
        KI=(I-1)*6+1
        KF=I*6
        KF=MIN0(KF,LMAX2)
960 WRITE(15,961) (V(L),L=KI,KF)
C
C      ECRITURE DU VECTEUR SOUS FORMAT ENDF (E11,5)
C
    WRITE(15,6)
    DO 970 I=1,NL
        KI=(I-1)*6+1
        KF=I*6
        KF=MIN0(KF,LMAX2)
        DO 971 K=KI,KF
            J=K-KI+1
            CALL CXFP(V(K),F,S,N)
            FF(J)=F
            SS(J)=S
            NM(J)=N
971 CONTINUE
            JF=J
            WRITE(15,972) ((FF(J),SS(J),NM(J)),J=1,JF)
970 CONTINUE
C
C      FORMATS
C
    5 FORMAT(E14.7,I3)
    6 FORMAT(1H1)
    7 FORMAT(1H ,10X,8H GAMMA = ,E14.7,10X,8H ORDRE = ,I3,/)
    81 FORMAT(1H ,8H POUR K =,I4,9H ET LPR =,I4,8H N+LPR =,I4,3H GT,I4)
890 FORMAT(1H ,7X,I2,10(9X,I2))
891 FORMAT(56X)
901 FORMAT(1H ,I2,1P11E11,4)
904 FORMAT(/)
961 FORMAT(1H ,1P6E12,5)
972 FORMAT(1H ,6(F8.5,A1,I2))
C
    STOP
    END

```

```

      DOUBLE PRECISION FUNCTION CGO(A,B,C)
C-----
C      PARTICULAR CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENT <J1,0,J2,0 J,0>
C      CG ARGUMENT SEQUENCE CGU(J1,J2,J)
C-----
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)

C
      CGU=U,0
      G=A+B+C
      IG=IDINT(A+B+C+U,001)
      X1=FLOAT(IG/2)
      IF((G/2.00+00-X1).GT.U,001) GU TO 100

C
      G=G/2.00+00
      IG=IG/2
      IGA=IDINT(G-A+U,001)
      IGB=IDINT(G-B+0,001)
      IGC=IDINT(G-C+0,001)
      S=1.00+00
      DO 200 I=1,200
      AI=I
      IF(I-IGA)211,211,201
211 S=S/AI
201 IF(I-IGB)212,212,202
212 S=S/AI
202 IF(I-IGC)213,213,203
213 S=S/AI
203 IF(I-IG)214,214,204
214 S=S/AI
200 CONTINUE
204 CONTINUE

C
      IDA=IDINT(-A+B+C+U,001)
      IDB=IDINT(+A-B+C+U,001)
      IDC=IDINT(+A+B-C+U,001)
      ID1=IDINT(+A+B+C+1,001)
      S1=1.00+00
      DO 300 I=1,200
      AI=I
      IF(I-IDA)311,311,301
311 S1=S1*AI
301 IF(I-IDB)312,312,302
312 S1=S1*AI
302 IF(I-IDC)313,313,303
313 S1=S1*AI
303 IF(I-ID1)314,314,304
314 S1=S1/AI
300 CONTINUE
304 CONTINUE

C
      S1=DSQRT(S1)
      SIGN=+1.00+00
      SI=G+C
      X1=FLOAT(IDINT(SI+U,001)/2)
      IF((SI/2.00+00-X1).GT.0,001) SIGN=-1.00+00
      CGU=SIGN*DSQRT(2.00+00+C+1.00+00)*S1*S
100 RETURN
      END

```

```

SUBROUTINE CXFP(X,F,S,N)
C*****
C  CONVERSION D'UN REEL EN FORMAT ENDF E11.5
C*****
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  DATA SP/1H+/,SM/1H-/
  IF(X.NE.0.0)GO TO 10
  F=0.
  S=SP
  N=0
  RETURN
10  N=DLOG10(ABS(X))
  IF(ABS(X)-1.)40,40,20
20  F=X/10.**N
  S=SP
  IF(ABS(F)-9.999995)70,30,30
30  F=F/10.
  N=N+1
  GO TO 70
40  N=1-N
  F=X*10.**N
  S=SM
  IF(ABS(F)-9.999995)70,50,50
50  F=F/10.
  N=N-1
  IF(N)60,60,70
60  S=SP
70  N=IABS(N)
  RETURN
  END

```

ANNEXE 2 - Programme CDMLABD

Le programme CDMLABD effectue le calcul direct des coefficients  $T_{ll}'$  à l'aide des formules (39) et (47).

Dans ce calcul les questions de précision numériques sont minimales car, à chaque itération sur  $n$ , les coefficients  $T_{ll}$  sont modifiés d'une quantité de l'ordre de  $\gamma^n < \gamma^{n-1}$ .

Ceci a donc permis d'implanter ce programme sur l'ordinateur CII 10020.

Une fois la matrice  $T$  calculée, elle est transformée en un vecteur  $V$  présenté sous le format ENDF grâce au sous programme CXFP.

Données

Les seules données sont  $\gamma$  et  $l_{\max}$  :  
GAM, LMAX lues dans le format (E14.7, I3).

Cas test

Le cas test présenté correspond à  $\gamma = 0,01$  et  $l_{\max} = 19$ .

Le temps de calcul est de l'ordre de 3 minutes (CII 10020).

Listing

[illegible]



```

C      PROGRAMME : COMLABD
C                      *****
C                      JANV 1977
C
C.....
C      CALCUL DE LA MATRICE DE PASSAGE CENTRE DE MASSE --> LABD
C      POUR LES COEFFICIENTS DU DEVELOPPEMENT EN POLYNOMES DE LEGENDRE
C      DES DISTRIBUTIONS ANGULAIRES
C      METHODE DIRECTE
C.....
C      DIMENSION V(441)
C      DIMENSION FF(6),SS(6),NM(6)
C      DIMENSION B(20,20),C(20,20),T(20,20),TP(20,20)
C
C      IE=105
C      IS=108
C
C      READ(IE,5) GAM,LMAX
C      LMAX=LMAX+1
C      WRITE(IS,7) GAM,LMAX
C
C      UN=1.0
C      DEU=2.0
C      TRO=3.0
C
C      DO 10 I=1,LMAX
C      DO 10 J=1,LMAX
C      R(I,J)=0.0
C      C(I,J)=0.0
C      T(I,J)=0.0
C      TP(I,J)=0.0
C 10 CONTINUE
C
C      DO 20 I=1,LMAX
C      R(I,I)=UN
C      T(I,I)=UN
C 20 CONTINUE
C      GAMR=GAM
C
C      NITER=LMAX+10
C      DO 200 IR=1,NITER
C      GAMR=GAMR+GAM
C      R=FLRAT(IR-1)
C
C      DO 110 I=1,LMAX
C      DO 120 J=1,LMAX
C      ALP=FLRAT(J-1)
C      IF(J.EQ.1) GO TO 121
C      IF(J.EQ.LMAX) GO TO 122
C      C(I,J)=(ALP+UN)*(ALP+DEU-R)*B(I,J+1)/((DEU*ALP+TRO)*(R+UN))

```

```

      * -ALP*(ALP+P-UN)*B(I,J-1)/((DEU*ALP-LN)*(P+UN))
      GO TO 120
121 C(I,J)=(ALP+UN)*(ALP+DEU-P)*B(I,J+1)/((DEU*ALP+TRR)*(P+UN))
      GO TO 120
122 C(I,J)=-ALP*(ALP+P-UN)*B(I,J-1)/((DEU*ALP-LN)*(P+UN))
120 CONTINUE
110 CONTINUE

C
C
      DO 140 I=1,LMAX
      DO 140 J=1,LMAX
140 TR(I,J)=C(I,J)*GAMP

C
      DO 150 I=1,LMAX
      DO 150 J=1,LMAX
      IF(IP.LT.IARS(I-J)) GO TO 150
      T(I,J)=T(I,J)+TR(I,J)
150 CONTINUE

C
      DO 180 I=1,LMAX
      DO 180 J=1,LMAX
180 R(I,J)=C(I,J)

C
      DO 190 I=1,LMAX
      DO 190 J=1,LMAX
      C(I,J)=C+C
      TR(I,J)=C+C
190 CONTINUE

C
200 CONTINUE

C
C
      ECRITURE DE LA MATRICE DE PASSAGE

      LM=MINO(11,LMAX)
      WRITE(IS,200) (I,I=1,LM)
      WRITE(IS,306)
      DO 300 I=1,LMAX
300 WRITE(IS,301) I,(T(I,J),J=1,LM)
      IF(LMAX*LE+11) GO TO 305
      WRITE(IS,304)
      WRITE(IS,200) (I,I=12,LMAX)
      WRITE(IS,306)
      DO 302 I=1,LMAX
302 WRITE(IS,301) I,(T(I,J),J=12,LMAX)
305 CONTINUE

C
C
      TRANSFORMATION DE LA MATRICE EN VECTEUR

      WRITE(IS,904)
      DO 950 J=1,LMAX
      DO 950 I=1,LMAX
      L=(J-1)*LMAX+I
950 V(L)=T(I,J)

```

```

C      ECRITURE DU VECTEUR
      LMAX2=LMAX*LMAX
      NL=LMAX2/6
      IF((LMAX2-6*NL).GT.0) NL=NL+1
      DO 960 I=1,NL
        KI=(I-1)*6+1
        KF=I*6
        KF=MINO(KF,LMAX2)
960    WRITE(15,961) (V(L),L=KI,KF)
C
C      ECRITURE DU VECTEUR SOUS FORMAT ENDF (F11.5)
C
      WRITE(15,966)
      DO 970 I=1,NL
        KI=(I-1)*6+1
        KF=I*6
        KF=MINO(KF,LMAX2)
        DO 971 K=KI,KF
          JK=KI+1
          CALL CXFP(V(K),F,S,N)
          FF(J)=F
          SS(J)=S
          NM(J)=N
971      CONTINUE
          JF=J
          WRITE(15,972) ((FF(J),SS(J),NM(J)),J=1,JF)
970    CONTINUE
C
C      FORMATS
C
      5 FORMAT(E14.7,I3)
      7 FORMAT(14I,10X,84GAMMA = ,E14.7,10X,2404095 = ,I3,/)
      200 FORMAT(14 ,7X,I2,I2(9X,I2))
      301 FORMAT(14 ,I2,1P11E11.4)
      304 FORMAT(/)
      306 FORMAT(56X)
      906 FORMAT(14I)
      961 FORMAT(14 ,1P4E12.5)
      972 FORMAT(14 ,6(F3.5,A1,I2))
C
      STOP
      END

```

```

SUBROUTINE CXPR(X,F,S,N)
C.....
C  CONVERSION FROM REEL EN. FORMAT ENDF E111E
C.....

```

```

DATA SP/14+/,SM/14-/
IF(X.NE.0.0)GA TO 10
P=0.
S=SP
N=C
RETURN
10 N=ALOG10(ABS(X))
IF(ABS(X)-1.)40,20,20
20 P=X/10.***N
S=SP
IF(ABS(F)-9.999995)70,30,30
30 P=F/10.
N=N+1
GA TO 70
40 N=1-***N
P=X*10.***N
S=SM
IF(ABS(F)-9.999995)70,50,50
50 P=F/10.
N=N+1
IF(N)40,60,70
60 S=SP
70 N=ABS(P)
RETURN
END

```

### ANNEXE 3 - Programme CDMLAB

Le programme CDMLAB calcule, à partir d'un fichier ENDF existant, les distributions angulaires, dans le système du laboratoire, de la particule émise dans une réaction donnée pour certaines énergies données.

Pour ces énergies, le programme recherche dans la "file 3" les sections efficaces de réaction correspondantes avec les interpolations nécessaires.

Puis, après avoir soit lu la matrice de passage dans le cas de la diffusion élastique, soit calculé cette matrice pour les autres types de réaction, il recherche les coefficients des développements en polynômes de Legendre des distributions angulaires, donnés dans le centre de masse, avec une interpolation linéaire si nécessaire.

Une fois la transformation (50) effectuée, il calcule les distributions angulaires dans le laboratoire par pas de  $2^\circ$ .

Ce programme est implanté sur l'ordinateur CII 10020.

#### Données

Les données du programme sont :

1. MAT, MT, NF, NOUT, NE lues dans le format (5I4)
  - MAT = numéro ENDF du matériau à traiter.
  - MT = numéro ENDF de la réaction à traiter.
  - NF = numéro logique de l'unité sur laquelle se trouve le fichier ENDF.
  - NOUT = numéro logique de l'unité de sortie.
  - NE = nombre d'énergies pour lesquelles sont calculées les distributions angulaires ( $NE \leq 50$ ).
2. (TE(I), I = 1, NE) lues dans le format (6E12.5)
  - TE = tableau des énergies (en eV).

Pour traiter un nouvel élément il suffit de placer à la suite de nouvelles cartes 1 et 2.

#### Cas test

Le cas test présenté correspond à MAT = 1189 ( $^{93}\text{Nb}$ ), MT = 2 (diffusion élastique) et  $E = 12,5$  MeV. Le temps de calcul et de recherche est d'environ 5 minutes (CII 10020).

#### Listing

FCu

C.10CCCE+G1  
 C.83E98E+CC  
 C.73E48E+CC  
 C.62122E+CC  
 C.5129CE+CC  
 C.40732E+CC  
 C.30216E+CC  
 C.20603E+CC  
 C.12419E+CC  
 C.69E66E-C1  
 C.37791E-C1  
 C.216E4E-C1  
 C.41E1E-C2  
 C.CCCCE+CC  
 C.CCCCE+CC  
 C.CCCCE+CC  
 C.CCCCE+CC  
 C.CCCCE+CC  
 C.CCCCE+CC

FLAB

C.10CCCE+G1  
 C.83788E+CC  
 C.73825E+CC  
 C.6252CE+CC  
 C.524C1E+CC  
 O.41356E+CC  
 O.31516E+CC  
 O.21346E+CC  
 C.13051E+CC  
 C.73776E-C1  
 C.40548E-C1  
 C.23779E-C1  
 C.55454E-C2  
 C.35219E-C3  
 C.1212CE-C4  
 C.28037E-C6  
 C.40784E-C8  
 -C.24542E-1C  
 O.C00CCE+CC  
 C.C00CCE+CC  
 C.C00CCE+CC

a<sub>1</sub>(E)a<sub>1</sub>(E)



C PROGRAMME : CMLAB

C \*\*\*\*\*

C JANV 1977

C

COMMON E(2500),S(2500)

DIMENSION TE(50)

COMMON MAP

COMMON BLOCK / / LENGTH 2710

E 0000 S 1338

5 FORMAT(1H1,46H \*\*\*ERROR: DONNEES LUES SUR CARTES INCORRECTES)

10 FORMAT(514)

20 FORMAT(6E12.5)

C

IN=5

C

30 CONTINUE

READ(14,10,END=50,ERR=40)MAT,MT,NF,NOUT,NE

READ(14,20,END=50,ERR=40)(TE(I),I=1,NE)

C

C MAT = NUMERO ENDF DU MATERIAU A TRAITER

C NF = NUMERO LOGIQUE DE L'UNITE SUR LAQUELLE SE TROUVE LE FICHIER  
C ENDF

C NOUT = NUMERO LOGIQUE DE L'UNITE DE SORTIE

C NE = NOMBRE D'ENERGIES POUR LESQUELLES SONT CALCULEES LES  
C DISTRIBUTIONS ANGULAIRES

C TE = TABLEAU DES ENERGIES

C

CALL CMLAB(TE,NE,MAT,MT,NF,NOUT)

REWIND NF

GO TO 30

40 WRITE(NOUT,5)

50 REWIND NF

C

STOP

END



SUBROUTINE CMLAB(TE,NE,MATQ,MTQ,NF,NOUT)

```

C .....
C *
C * ----- SUBROUTINE CMLAB :
C * ----- OBJET : CALCUL DES DISTRIBUTIONS ANGULAIRES DE NEUTRONS
C * ----- DANS LE LABO.
C * ----- ARGUMENTS :
C *      TE : = TABLEAU DES ENERGIES
C *      NE : = NOMBRE D'ENERGIES
C *      MATQ : = NUMERO DU MATERIAU
C *      MTQ : = NUMERO DE SECTION (MTQ=2 EXCLUSIVEMENT)
C *      NF : = NUMERO LOGIQUE DU FICHIER D'ENTREE
C *      NOUT : = NUMERO LOGIQUE DU FICHIER DE SORTIE
C .....

```

```

COMMON E(2500),S(2500)
DIMENSION CHAR(20),TETA( 91),SIG( 91),INT(30),
1IS(30),FL0TE(4),SIGNE(6),IEXPE(6),FL0T(3),SIGN(3),IEXP(3),FLC(50),
2FL1(50),FLAB(50),FCM(50)
DIMENSION TE(50),TS(50),IN(50)
EQUIVALENCE (E(1),FLC(1)),(E(51),FL1(1)),(E(101),FLAB(1)),
1(E(151),FCM(1)),(E(201),SIG(1))

```

COMMON MAP

COMMON BLOCK / / LENGTH 2710

E 0000 S 1388

EQUIV COMMON MAP

FL0 0000 FL1 0064 FLAB 0008 FCM 0120 SIG 0190

```

1  FORMAT(//,10X,2CHMATRICE DE PASSAGE,(,4H VT=12,2X,4H LT=12,2X,
14H LCT=12,2X,3H NK=14,2X,3H NM=14,(14))
2  FORMAT(8(2X,E12.5))
3  FORMAT(11X,F8.5,A1,12,4X,14,12,13)
4  FORMAT(//,141,15X,6H ***E=E12.5,2HEV,5X,5HSIGS=E12.5,5HBARNS)
5  FORMAT(14,35H ***ERROR: MATERIAU NON TROUVE,MAT=,16)
10  FORMAT(20A4)
13  FORMAT(141,10X,20A4)
20  FORMAT(22X,4[11,14,12,13)
22  FORMAT(11X,F8.5,A1,12,4[11,14)
25  FORMAT(14,55H ***ERROR: MATRICE DE TRANSFORMATION CM.,LAB NON CON
1NFE)
30  FORMAT(66X,14,12,13)
35  FORMAT(14,10X,2HE(,12,2H)=,E12.5,4X,2HS(,12,2H)=,E12.5)
40  FORMAT(14,40H ***ERROR: MT NON TROUVE DANS FILE 3,MT=,16)

```

```

45  FORMAT(1H ,40H ***ERROR: MT NON TROUVE DANS FILE 4,MT,,16)
50  FORMAT(6(F8.5,A1,I2),I4,I2,I3,I5)
55  FORMAT(1H ,59H ***ERROR: DISTRIBUTIONS ANGULAIRES TABLEES,CAS 199
1  TRAITE)
60  FORMAT(6I11)
65  FORMAT(///,15X,3HNL=I4,4H NM=I4,4H E1=E12.5,2X,3H E=E12.5///,15X,
13HFLC,22X,3HFL1,22X,3HFCM,22X,4HFLAB)
70  FORMAT(1H ,10X,6(F8.5,A1,I2),I4,I2,I3,I5)
75  FORMAT(4(12X,F12.5))
80  FORMAT(11X,F8.5,A1,I2,4I11,I4,I2,I3)
85  FORMAT(///,14I1,15X,4HTETA,20X,5HSIGMA,20X,4HTETA,20X,5HSIGMA,
18H ,SIGM=E12.5)
90  FORMAT(///,10X,39HINTERVALLES ET SCHEMAS d'INTERPOLATION:,,)
95  FORMAT(3(5X,I6))
C
  READ(NF,10)CHAR
  WRITE(NOUT,15)CHAR
C ----- RECHERCHE DU MATERIAU (MATC)
100  CONTINUE
  READ(NF,20)I1,L2,N1,N2,MAT
  IF(MAT-MATC)110,120,110
110  CONTINUE
  READ(NF,30,EPR=110 )MAT
  IF(MAT)115,100,110
115  WRITE(NOUT,5)MATC
  RETURN
120  READ(NF,20)I1,L2,N1,N2,MAT
C ----- RECHERCHE DU DICTIONNAIRE POUR TESTS
  DO 130 I=1,N1
  READ(NF,10)CHAR
130  CONTINUE
  MF2=0
  MF3=0
  MF4=0
  MT3=0
  MT4=0
  DO 140 I=1,N2
  READ(NF,20)L1,L2
  IF(L1.EQ.2)MF2=1
  IF(L1.EQ.3)MF3=1
  IF(MF3.EQ.1.AND.L2.EQ.MT0)MT3=1
  IF(L1.EQ.4)MF4=1
  IF(MF4.EQ.1.AND.L2.EQ.MT0)MT4=1
140  CONTINUE
  IF(MT3)150,150,160
150  WRITE(NOUT,40)MT0
  RETURN
160  IF(MT4)170,170,180
170  WRITE(NOUT,45)MT0
  RETURN
180  DO 190 I=1,2
  READ(NF,10)CHAR
190  CONTINUE

```

```

C ----- POSITIONNEMENT AU DEBUT DE LA FILE 3
  IF(MF)200,220,200
200  CONTINUE
  READ(NF,30)MAT,MF,MT
  IF(MF)200,210,200
C ----- RECHERCHE DU TYPE DE REACTION (MTC) DANS LA FILE 3
210  IF(MT)200,220,200
220  CONTINUE
  READ(NF,3)FLOT(1),SIGN(1),IEXP(1),MAT,MF,MT
  IF(MAT)230,225,230
225  WRITE(NBUT,40)MT
  RETURN
230  IF(MT-MTC)220,235,220
235  AWP=FEND(FLOT(1),SIGN(1),IEXP(1))
  READ(NF,22)FLOT(1),SIGN(1),IEXP(1),L1,L2,NRC,NP
  C=FEND(FLOT(1),SIGN(1),IEXP(1))
  NR=2+NRC
  NL=NR/6
  IF(MOD(NR,6).NE.0)NL=NL+1
  LI=1
C ----- LECTURE ET MISE EN MEMOIRE DES SECTIONS EFFICACES (TABLEAU F ET S)
DO 240 J=1,NL
  L2=L1+2
  READ(NF,60)(INT(I),IS(I),I=L1,L2)
  L1=L1+3
240  CONTINUE
  NL=NP/3
  IF(MOD(NP,3).NE.0)NL=NL+1
  J=0
  DO 260 K=1,NL
  READ(NF,50)((FLOT(I),SIGNE(I),IEXPE(I),FLOT(I),SIGN(I),IEXP(I),
1 I=1,3),MAT,MF,MT,NB)
  WRITE(NBUT,70)((FLOT(I),SIGNE(I),IEXPE(I),FLOT(I),SIGN(I),IEXP(I),
1 I=1,3),MAT,MF,MT,NB)
  DO 250 I=1,3
  J=J+1
  IF(J.GT.NP)GO TO 260
  F(J)=FEND(FLOT(I),SIGNE(I),IEXPE(I))
  S(J)=FEND(FLOT(I),SIGN(I),IEXP(I))
250  CONTINUE
260  CONTINUE
C ----- RECHERCHE DES SECTIONS EFF. CORRESPONDANT AUX ENERGIES DONNEES
C ----- SUIVANT LE SCHEMA D'INTERPRETATION SPECIFIE
DO 320 I=1,NE
  VP=C.
  XP=TF(I)
  IF(XP.LT.E(1))GO TO 310
DO 270 K=2,NP
  IF(XP.LE.E(K))GO TO 280
270  CONTINUE
  IF(XP.GT.E(NP))GO TO 310
280  DO 290 J=1,NRC
  IF(K.LE.INT(J))GO TO 300

```

```

290 CONTINUE
300 ITYP=IS(J)
   CALL TERP1(E(K-1),S(K-1),E(K),S(K),XP,YP,ITYP,NOUT)
310 TS(I)=YP
320 CONTINUE
   WRITE(NOUT,90)
   WRITE(NOUT,95)(I,INT(I),IS(I),I=1,NRC)
   WRITE(NOUT,95)(I,TE(I),I,TS(I),I=1,NE)
C ----- POSITIONNEMENT AU DEBUT DE LA FILE *
330 CONTINUE
   READ(NF,30)MAT,MF,MT
   IF(MF)330,340,330
C ----- LECTURE DES PARAMETRES LVT, LTT, NK, NM
340 IF(MT)330,350,330
350 READ(NF,20)LVT,LTT,L3,L4,MAT1,MF1,MT1
   IF(MT1.EG.2.AND.MTC.NE.2)READ(NF,20)L1,L2,L4,MM
   IF(MT1.EG.MTC)GO TO 354
352 READ(NF,30)MAT1,MF1,MT1
   IF(MT1)352,350,352
354 READ(NF,20)I1,LCT,NK,NM
C ----- LVT=0 : LA MATRICE DE TRANSFORMATION COM-LAB N'EST PAS DONNEE
C ----- ON FAIT APPEL A CALMAT POUR FAIRE LE CALCUL.
   IF(LVT)370,360,370
360 CONTINUE
C ----- LTT=2 : DISTRIBUTIONS ANGULAIRES TABULEES (CAS NON TRAITES)
370 IF(LTT-1)380,390,380
380 WRITE(NOUT,55)
   RETURN
390 IF(LVT.EG.0)GO TO 408
   LI=NK/6
   IF(MOD(NK,6).NE.0)LI=LI+1
C ----- LVT=1 : LECTURE DE LA MATRICE DE TRANSFORMATION GLE L'ON MET DANS S
   J=0
   DO 405 K=1,LI
   READ(NF,50)(FLSTE(I),SIGNE(I),IEXPE(I),I=1,6)
   DO 400 I=1,6
   J=J+1
   IF(J.GT.NK)GO TO 405
   S(J)=FEND(FLSTE(I),SIGNE(I),IEXPE(I))
400 CONTINUE
405 CONTINUE
408 READ(NF,20)L1,L2,N1,NEV
   READ(NF,10)CHAR
   DO 410 I=1,50
   FLO(I)=0.
   FLI(I)=0.
   FLAB(I)=0.
410 FCM(I)=0.
   DO 415 I=1,NE
415 I1(I)=0
   KK=C
   FOLD=0.
420 KK=KK+1

```

```

      READ(NF,80)FLSTE(1),SIGNE(1),IEXPE(1),L1,L2,NLNEW,N1,MAT,NF,MT
      IF(KK.EQ.1)NLALO=NLNEW
      IF(MT)425,580,425
425  ENEW=FEND(FLSTE(1),SIGNE(1),IEXPE(1))
      NL=NLNEW/6
      IF(MOD(NLNEW,6).NE.0)NL=NL+1
      J=0
C ----- LECTURE DES COEF. DU DEVELOPPEMENT EN POLYNOMES DE LEGENDRE
C ----- CORRESPONDANT A L'ENERGIE ENEW (TABLEAU FL1)
      DO 440 K=1,NL
      READ(NF,50)(FI STE(I),SIGNE(I),IEXPE(I),I=1,6)
      DO 430 I=1,6
      J=J+1
      IF(J.GT.NLNEW)GO TO 440
      FL1(J)=FEND(FI STE(I),SIGNE(I),IEXPE(I))
430  CONTINUE
440  CONTINUE
C ----- ON TEST SI (TE(I),I=1,NF)<=ENEW
      NI=NLNEW
      DO 560 II=1,NF
      J=0
      DO 470 K=1,NF
      IF(IN(K).EQ.1)GO TO 470
      IF(TE(K).LE.ENEW)J=1
      IF(J-1)470,460,470
460  YP=TE(K)
      IN(K)=1
      LL=K
      GO TO 480
470  CONTINUE
480  IF(J)485,535,485
485  NL=NLNEW
      IF(NLALO.GT.NL)NL=NLALO
      WRITE(NBUT,4)TE(LL),TS(LL)
      FLAB(1)=1
      FCM(1)=1.
C ----- CALCUL DES COEF. DU DEVELOPPEMENT EN POLY. DE LEGENDRE
C ----- CORRESPONDANT A L'ENERGIE TE(LL) PAR INTERPOLATION LINEAIRE
C ----- ENTRE LES COEF. FLC(EBLO) ET FL1(ENEW)
      DO 490 I=1,NL
      CALL TERP1(EBLO,FLC(I),ENEW,FL1(I),XP,YP,2,NBUT)
      FCM(I+1)=YP
      FLAB(I+1)=YP
490  CONTINUE
      IF(MTC.NE.2)NM=NM
      IF(LVT.EQ.0)CALL CALMAT(MTC,NM,AWR,G,XP,NBUT)
      IF(LVT.EQ.0)NK=(NM+1)*(NM+1)
      WRITE(NBUT,1)LVT,LTT,LCT,NK,NM
      WRITE(NBUT,2)(S(I),I=1,NK)
      NI=NL+1
      IF(LCT-1)495,515,495
495  L2=NM+1
C ----- CALCUL DES COEF. DANS LE LABORATOIRE(FLAB)

```

```

      DO 510 I=1,N2
        L=I-1
        YP=C.
      DO 500 J=1,N2
        V=J-1
        K=1+L+V*N2
        VP=YP+S(K)+FCM(J)
500    CONTINUE
        FLAB(I)=VP
510    CONTINUE
515    WRITE(NOUT,65)N1,N2,ENEW,XP
        WRITE(NOUT,75)(FLC(I),FL1(I),FCM(I),FLAB(I),I=1,N2)
C ----- CALCUL DES DISTRIBUTIONS ANGULAIRES
      PI2=6.2831853072
      XP=C.
      PHI=-2.
      NTETA=91
      SIGS=C.
      DO 530 I=1,NTETA
        PHI=PHI+2.
        TETA(I)=PHI
        YP=TETA(I)+C.01745329252
        VP=C+S(XP)
        SM=C.
      DO 520 J=1,N1
        L=J-1
        XL=FL*AT(L)+2.C+1.C
        SM=SM+FLAB(J)*PBLG(YP,L)+XL/2.C
520    CONTINUE
        SIG(I)=TS(LL)*SM/PI2
        SIGSC=SIG(I)
        IF(I.EQ.1.OR.I.EQ.NTETA)SIGSC=SIGSC/2
        SIGS=SIGS+SIGSC*SIN(XP)
530    CONTINUE
        SIGS=PI2+C.03490658504*SIGS
        WRITE(NOUT,85)SIGS
        WRITE(NOUT,75)(TETA(I),SIG(I),I=1,NTETA)
      GO TO 560
535  DO 540 I=1,50
        FLC(I)=C.
        FLAB(I)=C.
        FCM(I)=C.
540    CONTINUE
      DO 550 I=1,N1
550    FLC(I)=FL1(I)
        NLBLC=NLNE
        EPLC=ENEW
560    CONTINUE
      DO 565 I=1,50
565    FL1(I)=C.
        N2=C
      DO 575 I=1,NE
        IF(IN(I).EQ.1)N2=N2+1

```

```

575 CONTINUE
    IF (N2-NE) 420, 580, 580
580 RETURN
    END

```

```

SUBROUTINE TERP1(X1,Y1,X2,Y2,X,Y,I,NEUT)
C.....
C    SAUS PROGRAMME D'INTERPOLATION
C.....

    XA=X1
    YA=Y1
    XB=X2
    YB=Y2
    XP=X
    IF (I)
    IF (XA.EQ.XB) WRITE (NEUT,130)
    IF (1) 10,10,20
10    WRITE (NEUT,140)
20    IF (11-5) 30,30,10
30    GO TO (40,50,60,90,110),11
40    Y=YA
    RETURN
50    Y=YA+(XP-XA)*(YB-YA)/(XB-XA)
    RETURN
60    IF (YA.LE.0.C.O.PP.XB.LE.0.C.O) GO TO 50
    IF (XP) 70,70,80
70    WRITE (NEUT,150)
80    Y=YA+ALOG(XP/XA)*(YB-YA)/ALOG(XB/XA)
    RETURN
90    IF (YA.LE.0.C.O.PP.YB.LE.0.C.O) GO TO 50
100    Y=YA*EXP((XP-XA)*ALOG(YB/YA)/(XB-XA))
    RETURN
110    IF (YA.LE.0.C.O.PP.YB.LE.0.C.O) GO TO 60
    IF (XA.LE.0.C.O.PP.XB.LE.0.C.O) GO TO 100
    IF (XP) 70,70,120
120    Y=YA*EXP(ALOG(XP/XA)*ALOG(YB/YA)/ALOG(XB/XA))
130    FORMAT(1H,43H ***ERREUR DANS TERP1: X1*Y2(DISCONTINUITE))
140    FORMAT(1H,41H ***ERREUR DANS TERP1: X EN-DEHORS DU DOMAINE D'INTERPOLATION)
150    FORMAT(1H,74H ***ERREUR DANS TERP1: VALEUR NEGATIVE OU NULLE POUR UNE INTERPOLATION LOG.)
    RETURN
    END

```

```

SUBROUTINE CALMAT(MT,NM,AWR,G,ENEW,NOUT)
C.....
C   CALCUL DE LA MATRICE DE PASSAGE CENTRE DE MASSE ---> LAB*
C.....
COMMON ETC(2500),S(2500)
DIMENSION AM(6)
DIMENSION B(21,21),C(21,21),TM(21,21),TP(21,21)

```

COMMON MAP

COMMON BLOCK /                      LENGTH 2710

ETC        0000    S            1328

```

DATA AM/1.008665,1.007825,2.014102,3.016450,3.016030,4.002403/
C
30  FORMAT(14,46H***ERROR: REACTION NON TROUVE DANS CALMAT, MT=,I4)
C
C   RECHERCHE DU TYPE DE LA PARTICULE SORTANTE
C
E=ENEW
IPAR=0
IF(MT.EQ.21) IPAR=1
IF(MT.GE.51.AND.MT.LE.90) IPAR=1
IF(MT.EQ.103) IPAR=2
IF(MT.GE.700.AND.MT.LE.717) IPAR=2
IF(MT.EQ.104) IPAR=3
IF(MT.GE.720.AND.MT.LE.737) IPAR=3
IF(MT.EQ.105) IPAR=4
IF(MT.GE.740.AND.MT.LE.749) IPAR=4
IF(MT.EQ.106) IPAR=5
IF(MT.GE.760.AND.MT.LE.777) IPAR=5
IF(MT.EQ.107) IPAR=6
IF(MT.GE.780.AND.MT.LE.797) IPAR=6
IF(IPAR) 20,10,20
10  WRITE(NOUT,30) MT
RETURN
20  CONTINUE
C
AM4=AM(1)*(AWR+1.0)-AM(IPAR)-G/9.315016E+08
E5=E+AWR/(AWR+1.0)
GAM=AM(IPAR)+E5/(AWR+AM4*(E5+G))
GAM=SQRT(GAM)
LMAX=NM+1
NITER=LMAX+10
IN=1.0
DEU=2.0
TR0=3.0
C
DO 1010 I=1,LMAX

```



```

      DO 1010 J=1,LMAX
      B(I,J)=C.C
      C(I,J)=C.C
      TM(I,J)=C.C
      TR(I,J)=C.C
1010 CONTINUE
C
      DO 1020 I=1,LMAX
      B(I,I)=UN
      TM(I,I)=UN
1020 CONTINUE
      GAMR=UN
C
      DO 1200 IR=1,ITER
      GAMR=GAMR+GAM
      P=FLRAT(IR-1)
C
      DO 1110 I=1,LMAX
      DO 1120 J=1,LMAX
      ALP=FLRAT(J-1)
      IF(J.EQ.1) GO TO 1121
      IF(J.EQ.LMAX) GO TO 1122
      C(I,J)=(ALP+UN)*(ALP+DEU-R)*B(I,J+1)/((DEU*ALP+TRB)*(R+UN))
      -ALP*(ALP+R-UN)*B(I,J-1)/((DEU*ALP-LV)*(R+UN))
      GO TO 1120
1121 C(I,J)=(ALP+UN)*(ALP+DEU-R)*B(I,J+1)/((DEU*ALP+TRB)*(R+UN))
      GO TO 1120
1122 C(I,J)=-ALP*(ALP+R-UN)*B(I,J-1)/((DEU*ALP-LV)*(R+UN))
1120 CONTINUE
1110 CONTINUE
C
      DO 1140 I=1,LMAX
      DO 1140 J=1,LMAX
1140 TR(I,J)=C(I,J)*GAMR
C
      DO 1150 I=1,LMAX
      DO 1150 J=1,LMAX
      IF(IR.LT.IARS(I-J)) GO TO 1150
      TM(I,J)=TM(I,J)+TR(I,J)
1150 CONTINUE
C
      DO 1180 I=1,LMAX
      DO 1120 J=1,LMAX
1180 B(I,J)=C(I,J)
C
      DO 1190 I=1,LMAX
      DO 1190 J=1,LMAX
      C(I,J)=C.C
      TR(I,J)=C.C
1190 CONTINUE
C
1200 CONTINUE
C

```

```

C      TRANSFORMATION DE LA MATRICE EN VECTEUR
C

```

```

      DO 1950 J=1,LMAX
      DO 1950 I=1,LMAX
      L=(J-1)*LMAX+I
1950 S(L)=TM(I,J)
C

```

```

      RETURN
      END

```

```

      FUNCTION PBLG(X,ND)

```

```

C.....
C      CALCUL DES POLYNOMES DE LEGENDRE
C.....

```

```

      PC=1.0
      PBLG=PC
      IF(ND)10,40,10
10      P1=X
      PBLG=P1
      IF(ND-1)20,40,20
20      X=ND-1
      DO 30 K=1,X
      XN=FLOAT(K)
      P2=((XN+2.0+1.0)*X*P1-XN*PC)/(XN+1.0)
      PC=P1
      P1=P2
30      CONTINUE
      PBLG=P2
40      RETURN
      END

```

```

      FUNCTION FEND(FLST,SIGN,IEXP)

```

```

C.....
C      RECOPIAGE DES VALEURS LUES DANS LE FORMAT ENDF
C.....

```

```

      DATA SM/14-/
      IS=1
      IF(SIGN.EQ.SM)IS=-1
      IEX=IS*IEXP
      FEND=FLST*10.0**IEX
      RETURN
      END

```

*Edité par*  
*le Service de Documentation*  
*Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay*  
*Boîte Postale n° 2*  
*91190 - Gif-sur-YVETTE (France)*