

CEA-R 2472 - SOULE Jean-Louis, PILLARD Denise

LES MOMENTS DE TRANSFERT D'ENERGIE EN THERMALISATION

Sommaire. - Pour tous les modérateurs de type "incohérent gaussien" on peut calculer, à n'importe quelle température, les moments de transfert d'énergie en fonction de l'énergie incidente, sans passer par l'intermédiaire des sections différentielles.

On développe des formules intégrales pour la section efficace intégrale, le premier et le second moment, qui permettent de tabuler directement ces trois fonctions en quelques minutes de calcul sur IBM 7094, pour la plupart des modèles proposés dans la littérature pour les modérateurs usuels.

1964

28 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

CEA-R 2472 - SOULE Jean-Louis, PILLARD Denise

ENERGY TRANSFER MOMENTS IN THERMALISATION

Summary. - For all moderators of the "incoherent gaussian" type, it is possible to calculate, at any temperature, the energy transfer moments as a function of the incident energy without having to use the differential sections.

Integral formulae are derived for the integral cross-section, the first and the second moment, which make it possible to tabulate directly these three functions in a few minutes calculation on IBM 7094, for the most part models proposed in the literature for the common moderators.

1964

28 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

**LES MOMENTS DE TRANSFERT D'ÉNERGIE
EN THERMALISATION**

par

Jean-Louis SOULE , Denise PILLARD

Rapport C E A - R 2472

1964

Ca

CENTRE D'ÉTUDES
NUCLÉAIRES DE SACLAY

Les rapports du COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE sont, à partir du n° 2200, en vente à la Documentation Française, Secrétariat Général du Gouvernement, Direction de la Documentation, 16, rue Lord Byron, PARIS VIIIème.

The C.E.A. reports starting with n° 2200 are available at the Documentation Française, Secrétariat Général du Gouvernement, Direction de la Documentation, 16, rue Lord Byron, PARIS VIIIème.

- Rapport CEA-R 2472 -

Service de Physique Mathématique

LES MOMENTS DE TRANSFERT D'ENERGIE EN THERMALISATION

par

Jean-Louis SOULE, Denise PILLARD

Ce rapport est fait dans le cadre des études du contrat :
EURATOM n° 037-12-RDF "Recyclage du Plutonium".

- Août 1964 -

LES MOMENTS DE TRANSFERT D'ENERGIE EN THERMALISATION

Les sections efficaces différentielles en énergie des milieux usuels de thermalisation présentent un aspect très accidenté. La plupart des modèles destinés à en rendre compte en donnent des expressions analytiques complexes. L'établissement et le maniement des tables de sections différentielles s'avèrent en conséquence longs et délicats.

Or il semble que pour les usages de la thermalisation, les détails exacts de la loi de diffusion aient relativement peu d'importance, et qu'on puisse caractériser suffisamment les propriétés modératrices du milieu par certaines grandeurs globales, telles que les moments de transfert d'énergie (en fonction de l'énergie d'incidence). L'intérêt du choix de ces moments comme "fonctions de sensibilité" est renforcé par le fait qu'il est possible de les calculer sans passer par l'intermédiaire des sections différentielles, lorsqu'on a affaire à un modèle de type "normal" (ou "incohérent gaussien"), ce qui est le cas de tous les modèles récemment proposés pour les modérateurs usuels (du moins si l'on néglige les effets peu importants des interférences).

Le but de ce rapport est de présenter des méthodes mises au point pour le calcul effectif des moments, et des applications de ces méthodes à différents modèles représentant divers modérateurs usuels.

I - LE FORMALISME DE BASE.

1) Rappel du modèle. Si l'on s'en tient pour le moment au cas isotrope, la situation dynamique de chaque atome d'un modérateur normal est entièrement caractérisée par son spectre de vibration. Nous l'exprimerons en fréquences réduites ω (rapportées à kT), et nous adopterons la condition de normalisation:

$$\frac{1}{A} = \int_0^{\infty} \rho(\omega) d\omega \quad (A: \text{masse atomique})$$

A ce spectre $\rho(\omega)$ est associée une "fonction de largeur" complexe $w(z)$, qui dépend de la variable complexe z (notée généralement it) par la formule:

$$w(z) = \int_0^{\infty} \rho(\omega) \frac{\operatorname{ch} \frac{\omega}{2} - \operatorname{ch} \left(\frac{\omega}{2} + \omega z \right)}{\omega \operatorname{sh} \frac{\omega}{2}} d\omega$$

Quelques propriétés générales de $w(z)$ sont les suivantes:

- a) $w(z)$ est réelle avec z et sur l'axe $\Re(z) = -\frac{1}{2}$
- b) le point $z = -\frac{1}{2}$ est un centre de symétrie.
- c) $w(0) = w(-1) = 0$ $w'(0) = -\frac{1}{A}$

d) $w(z)$ est analytique au moins dans la bande: $-1 < \Re(z) < 0$, où sa partie réelle est positive et sa partie complexe est inférieure à $\frac{1}{A} |\Im(z)|$.
 En outre $w(z)$ est entière si $\rho(\omega)$ est à support borné, ou si $\rho(\omega)$ décroît plus vite que toute exponentielle lorsque $\omega \rightarrow +\infty$. Dans la suite, nous supposerons toujours que c'est le cas, sauf mention expresse du contraire.

Dans l'espace des vitesses vectorielles réduites (rapportées à la vitesse la plus probable), la section différentielle de l'espace d'atome considérée s'écrit:

$$\sigma \sum_{\vec{x} \rightarrow \vec{x}'} d\vec{x}' = \frac{\sum(\omega)}{2\pi} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} e^{(\vec{x}'^2 - \vec{x}^2) z} - (\vec{x}' - \vec{x})^2 w(z) d\omega d\vec{x}'$$

$\sum \omega$ étant la section efficace totale pour une énergie d'incidence infinie.

2) Fonction génératrice et moments

Dans l'espace des énergies réduites y ($y = \vec{x}^2$), nous définirons une fonction génératrice G de la loi de diffusion par l'intégrale:

$$G(a, y) = \int_0^{\infty} e^{ay'} \sum(y \rightarrow y') dy' = \iiint e^{a\vec{x}'^2} \sum(\vec{x} \rightarrow \vec{x}') d\vec{x}'$$

Si nous savons calculer $G(a, y)$, nous pourrions en déduire les moments de transfert d'énergie, puisqu'on aura:

$$G(a, y) = \sum(y) + a \int_0^{\infty} \sum(y \rightarrow y') y' dy' + \dots + a^n \int_0^{\infty} \sum(y \rightarrow y') \frac{y'^n}{n!} dy' + \dots$$

Selon les besoins, on peut être conduit à adopter deux définitions pour les moments, à savoir:

$$m_n(y) = \int_0^{\infty} \sum(y \rightarrow y') \frac{y'^n - y^n}{n!} dy'$$

$$\mu_n(y) = \int_0^\infty \Sigma(y \rightarrow y') \frac{(y' - y)^n}{n!} dy'$$

Ils se déduisent simplement les uns des autres. On a en outre:

$$m_n(y) = \frac{1}{n!} \frac{d^n}{da^n} G(0, y) - \frac{y^n}{n!} G(0, y)$$

$$e^{-ay} G(a, y) = \int_0^\infty e^{a(y'-y)} \Sigma(y \rightarrow y') dy' = \Sigma(y) + a \mu_1(y) + a^2 \mu_2(y) + \dots$$

Nous retiendrons particulièrement $\mu_1 = m_1$ et $\mu_2 = m_2 - y m_1$.
Ce sont ces deux moments qui feront l'objet de nos calculs (en même temps que la section intégrale).

3) Expressions intégrales des moments.

Dans l'expression de G nous pouvons substituer l'expression intégrale de $\Sigma(\vec{x} \rightarrow \vec{x}')$, puis intervertir l'ordre d'intégration en \vec{z} et \vec{x}' . D'où:

$$x G(a, y) = \frac{\Sigma(\infty)}{4\pi^2} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} dz \iiint e^{a\vec{x}'^2 + z(\vec{x}'^2 - \vec{x}^2) - (\vec{x}' - \vec{x})^2 w(z)} d\vec{x}'$$

L'intégration en \vec{x}' est celle d'une loi de Gauss à trois dimensions excentrée.
On obtient ainsi:

$$x G(a, y) = \frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} dz \frac{e^{\frac{z^2 + aw + az}{w - z - a} y}}{(w - z - a)^{3/2}} dz$$

Le radical à considérer au dénominateur est la détermination principale.

Le développement en puissances de a s'effectue aisément sous le signe d'intégration. On peut obtenir des formules compactes en faisant appel aux polynômes de Laguerre; on aboutit à l'expression générale:

$$x m_n(y) = \frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} dz \frac{e^{\frac{z^2}{w-z} y}}{(w-z)^{n+\frac{1}{2}}} dz \left\{ \sum_{p=0}^{p=n} \frac{(n+\frac{1}{2}) \dots (p+\frac{3}{2})}{p! (n-p)!} \left(\frac{wy}{w-z}\right)^p - \frac{y^n}{n!} (w-z)^n \right\}$$

En particulier:

$$\begin{aligned}
 x \Sigma(y) &= \frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} \frac{e^{\frac{z^2}{w-z} y}}{(w-z)^{3/2}} dz \\
 x m_1(y) &= \frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} \frac{e^{\frac{z^2}{w-z} y}}{(w-z)^{5/2}} dz \left\{ \frac{3}{2} + y \frac{2wz - z^2}{w-z} \right\} \\
 2 x \mu_2(y) &= \frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} \frac{e^{\frac{z^2}{w-z} y}}{(w-z)^{7/2}} dz \left\{ \frac{15}{4} + y \frac{2w^2 + 6wz - 3z^2}{w-z} + y^2 \frac{z^2(2w-z)^2}{(w-z)^2} \right\}
 \end{aligned}$$

Ce sont ces formules qui nous serviront de base.

4) Propriétés intégrales des moments.

Notre intention est de calculer les valeurs des moments pour tout un ensemble d'énergies d'incidence y . Ces calculs seront en partie indépendants, de telle sorte qu'il pourra être utile de contrôler leur exactitude en vérifiant que les résultats obtenus satisfont certaines propriétés intégrales valables de façon générale.

Ces propriétés intégrales dérivent toutes de la propriété du bilan détaillé satisfaite par la section $\Sigma(y \rightarrow y')$ et qui s'écrit: $y e^{-y} \Sigma(y \rightarrow y') =$

$$y' e^{-y'} \Sigma(y' \rightarrow y) .$$

$$\text{On a: } \int_0^\infty y e^{-y} m_n(y) dy = \int_0^\infty \int_0^\infty y e^{-y} \Sigma(y \rightarrow y') \frac{y'^n - y^n}{n} dy dy' = 0$$

$$\text{et: } k! \int_0^\infty y^{k+1} e^{-y} m_k(y) dy = \int_0^\infty \int_0^\infty y e^{-y} \Sigma(y \rightarrow y') (y^j y'^k - y^{j+k}) dy dy' = j! \int_0^\infty y^{k+1} e^{-y} m_j(y) dy$$

Ainsi le système des k premiers moments satisfait à $\frac{k(k+1)}{2}$ propriétés intégrales.

En particulier le système m_1, μ_2 satisfait aux trois égalités suivantes:

$$\begin{aligned}
 \int_0^\infty y e^{-y} m_1(y) dy &= 0 \\
 \int_0^\infty y e^{-y} \mu_2(y) dy + \int_0^\infty y^2 e^{-y} m_1(y) dy &= 0 \\
 2 \int_0^\infty y^2 e^{-y} \mu_2(y) dy + \int_0^\infty y^3 e^{-y} m_1(y) dy &= 0
 \end{aligned}$$

5) Extension aux "mélanges".

Il est clair qu'il n'y aura pas de difficulté de principe à généraliser les calculs de moments aux cas où la section de diffusion est la somme de sections partielles indépendantes, correspondant chacune à des atomes différents ou à des atomes en situations dynamiques différentes.

Ceci nous permettra d'abord de traiter les modérateurs à l'état moléculaire, comme H_2O ou D_2O . En particulier pour l'eau lourde, la contribution de l'oxygène n'est pas négligeable (les deux atomes de deutérium étant par ailleurs indiscernables).

Nous pourrions ensuite traiter de la sorte les mélanges effectifs (par exemple eau légère + eau lourde).

Enfin, par extension aux "mélanges continus", nous pourrions tenir compte de l'anisotropie microscopique. En effet dans ce cas le spectre de vibrations est fonction d'une direction angulaire $\vec{\ell}$ et on doit pondérer les sections partielles selon une distribution uniforme de $\vec{\ell}$. Par exemple, s'il y a symétrie cylindrique (cas du graphite), on a:

$$\rho(\vec{\ell}, \omega) = \mu^2 \rho_{\perp}(\omega) + (1 - \mu^2) \rho_{\parallel}(\omega)$$

et l'on doit effectuer simplement la pondération pour μ variant entre 0 et 1.

II - LE CALCUL DES MOMENTS POUR LES PETITES ENERGIES INITIALES

Pour les petites valeurs de y , il est commode de conserver le parcours d'intégration initial (la droite verticale $-i\infty - \frac{1}{2}$, $+i\infty - \frac{1}{2}$) sur lequel $w(\zeta)$ reste réel. Cependant il est bon d'effectuer certaines transformations qui ont pour but d'accroître la rapidité de convergence des intégrales.

1) Déduction d'un terme tout intégré pour la section intégrale.

Il est facile de préciser le comportement de $w(\zeta)$ pour $\zeta \rightarrow \pm i\infty - \frac{1}{2}$, compte tenu des propriétés de $\rho(\omega)$. En général (sauf pour les modèles de type "liquide") on a:

$$w(\zeta) = -\alpha(\zeta + \zeta^2) + \gamma + \epsilon(\zeta)$$

où $\epsilon(\zeta)$ tend vers zéro (de façon alternée) lorsque $\zeta \rightarrow \pm i\infty + k$. α correspond à la partie gazeuse du spectre (fonction delta à l'origine) et γ est le facteur de Debye-Waller de la partie solide:

$$\gamma = \int_0^{\infty} \frac{\rho(\omega)}{\omega \tanh \frac{\omega}{2}} d\omega$$

Il est donc intéressant de considérer ce que devient la formule lorsque

$$w(z) = w^*(z) = -\alpha z^2 - \alpha z + \gamma \quad . \quad \text{On obtient alors:}$$

$$x \sum^*(y) = \frac{\sum(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} \frac{e^{-\alpha z^2 - (\alpha+1)z + \gamma} y}{[-\alpha z^2 - (\alpha+1)z + \gamma]^{3/2}} dz$$

soit

$$x \sum^*(y) = \frac{\sum(\infty)}{4\gamma x} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \left\{ \operatorname{erf} \frac{x}{\sqrt{\alpha}} - \int e^{\frac{s-1}{\alpha} y} \operatorname{erf} \frac{\sqrt{x}}{\sqrt{\alpha}} \right\}$$

avec

$$\frac{1}{s^2} = 1 + \frac{4\alpha\gamma}{(\alpha+1)^2}$$

Lorsque le comportement de w est celui indiqué plus haut, on améliorera évidemment la convergence en soustrayant cette intégrale toute calculée. Si le comportement de w n'est pas du type indiqué (modèle liquide) on pourra tout de même choisir un couple α, γ approprié (de façon à ce que $w^*(z)$ rejoigne w à une valeur de z convenable).

Cependant il est préférable d'effectuer un changement de variable pour que le terme tout intégré ait le même facteur exponentiel que l'intégrand initial. On posera donc:

$$\frac{s^2}{\gamma - (\alpha+1)s - \alpha s^2} = \frac{z^2}{w(z) - z} \quad \rightarrow \quad \frac{\alpha+1}{s} - \frac{\gamma}{s^2} = \frac{\alpha+1}{z} - \frac{\gamma + \varepsilon(z)}{z^2}$$

et c'est l'intégrale en s qu'on déduira (après l'avoir exprimée en z). En définitive on voit que la quantité soustraite est:

$$x \sum^*(y) = \frac{\sum(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} \frac{e^{-\frac{z^2}{w-z} y}}{(w-z)^{3/2}} \frac{z^3}{s^2} \frac{ds}{dz} dz$$

(on notera que s est équivalent à z pour $z \rightarrow \pm i\infty$).

L'intégrale résiduelle sera donc:

$$x \sum_2(y) = \frac{\sum(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} \frac{e^{-\frac{z^2}{w-z} y}}{(w-z)^{3/2}} \left[1 - \frac{z^3}{s^2} \frac{ds}{dz} \right] dz$$

Pour bénéficier de la modification effectuée, il faut éviter les effets de différence dans le calcul du crochet. Or on obtient d'abord:

$$1 - \frac{\beta^3}{s^3} \frac{ds}{d\beta} = \frac{(\alpha+1)(s-\beta) - \beta F'(\beta) + 2E(\beta)}{(\alpha+1)s - 2\gamma}$$

On considère ensuite:

$$\eta(\beta) = \frac{(\alpha+1)(s-\beta)}{(\alpha+1)s - 2\gamma} = \frac{(\alpha+1)\beta}{2\gamma} \left\{ 1 - \left[1 + \frac{4\gamma E(\beta)}{[(\alpha+1)\beta - 2\gamma]^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \right\}$$

et on évite les effets de différence dans le calcul de η en utilisant, lorsque $\frac{4\gamma E}{[(\alpha+1)\beta - 2\gamma]^2}$ est petit en module, la formule approchée:

$$\eta = \frac{(\alpha+1)\beta E(\beta)}{[(\alpha+1)\beta - 2\gamma]^2 + 3\gamma E(\beta)}$$

A l'aide de η on pourra écrire:

$$1 - \frac{\beta^3}{s^3} \frac{ds}{d\beta} = \eta - \frac{(\beta E' - 2E)(1-\eta)}{(\alpha+1)\beta - 2\gamma}$$

On notera que dans le cas des modèles solides ($\alpha = 0$), Σ^* correspond à une diffusion élastique, qui ne doit pas être comprise au sens strict dans la diffusion inélastique (en fait, dans ce cas, on calculera la vraie section inélastique et aussi la section totale).

2) Déduction d'un terme tout intégré pour les moments.

Le procédé s'étend aux moments. On aboutit aux formules:

$$\begin{aligned} x m_{1,z}(y) &= \frac{\sum(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} \frac{e^{\frac{\beta^2}{w-\beta} y}}{(w-\beta)^{5/2}} d\beta \left\{ \left[\frac{\beta}{2} + y \frac{\beta^2}{w-\beta} \right] \left[1 - \frac{\beta^5}{s^5} \frac{ds}{d\beta} \right] + 2y\beta \left[1 - \frac{\beta^4}{s^4} \frac{ds}{d\beta} \right] \right\} \\ 2x \mu_{2,z}(y) &= \frac{\sum(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} \frac{e^{\frac{\beta^2}{w-\beta} y}}{(w-\beta)^{7/2}} d\beta \left\{ \left[\frac{15}{4} + 5y \frac{\beta^2}{w-\beta} + y^2 \left(\frac{\beta^2}{w-\beta} \right)^2 \right] \left[1 - \frac{\beta^7}{s^7} \frac{ds}{d\beta} \right] + \right. \\ &\quad \left. \left[10y\beta + 4y^2 \beta \frac{\beta^2}{w-\beta} \right] \left[1 - \frac{\beta^6}{s^6} \frac{ds}{d\beta} \right] + \left[2y(w-\beta) + 4y^2\beta^2 \right] \left[1 - \frac{\beta^5}{s^5} \frac{ds}{d\beta} \right] \right\} \end{aligned}$$

On a donc besoin de connaître la valeur de $1 - \frac{\beta^{3+n}}{s^{3+n}} \frac{ds}{d\beta}$ pour $n = 1, 2, 3$ et 4; or ces quantités valent:

$$1 - \frac{\delta^n}{s^n} \frac{(\alpha+1)\delta - 2\gamma + \delta \varepsilon' - 2\varepsilon}{(\alpha+1)s - 2\gamma} = \frac{-\delta \varepsilon' + 2\varepsilon}{(\alpha+1)\delta - 2\gamma} + \eta + \frac{\eta(\delta \varepsilon' - 2\varepsilon)}{(\alpha+1)\delta - 2\gamma} + \frac{\eta}{(\alpha+1)\delta} \left[(\alpha+1)\delta - 2\gamma + \delta \varepsilon' - 2\varepsilon \right] \left[\frac{\delta}{s} + \frac{\delta^2}{s^2} + \dots + \frac{\delta^n}{s^n} \right]$$

Elles se déterminent donc par récurrence à partir des puissances successives de $\frac{\delta}{s}$, en notant que:

$$s = \frac{(\alpha+1)\delta - 2\gamma\eta}{(\alpha+1)(1-\eta)}$$

3) Calcul effectif des termes tout intégrés.

L'expression analytique des parties tout intégrés des moments s'obtiendra commodément à l'aide d'une fonction génératrice. Soit:

$$G_1(a, y) = e^{-ay} G(a, y) = \frac{\sum(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} \frac{e^{\frac{(\delta+a)^2}{w-\delta-a} y}}{(w-\delta-a)^{3/2}} dz$$

$$= \frac{\sum(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} \frac{e^{\frac{\delta^2}{w(\delta-a)-\delta} y}}{[w(\delta-a)-\delta]^{3/2}} dz$$

(cette dernière formule étant obtenue en posant $z = w - a$ et en effectuant une translation sur le chemin d'intégration).

Dans le cas où $w = \gamma - \alpha\delta - \alpha\delta^2$, $G_1(a, y)$ prend une forme analogue à Σ^* , d'où l'on déduit par simple modification des coefficients:

$$x G_1^*(a, y) = \frac{\sum(\infty)}{4x} \frac{\left(1 + \frac{1}{A}\right)^2}{\gamma + \alpha a - \alpha a^2} \left\{ \operatorname{erf} \frac{x}{\sqrt{\alpha}} - \frac{\alpha + 1 - 2\alpha a}{\sqrt{(\alpha+1)^2 + 4\alpha(\gamma-a)}} e^{-\frac{4(\gamma + \alpha a - \alpha a^2)y}{(\alpha+1)^2 + 4\alpha(\gamma-a)}} \operatorname{erf} \left[\frac{x}{\sqrt{\alpha}} \frac{\alpha + 1 - 2\alpha a}{\sqrt{(\alpha+1)^2 + 4\alpha(\gamma-a)}} \right] \right\}$$

et par développement en puissances de a :

$$x \mu_1^*(y) = \frac{\sum(\infty)}{4x} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{2\alpha\delta(\alpha+1-\delta^2)}{(\alpha+1)^2\gamma} \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\delta x}{\sqrt{\alpha}} e^{-\frac{y}{\alpha}} + \left(1 + \frac{2y\delta^2}{\alpha}\right) e^{\frac{\delta^2 - 1}{\alpha} y} \operatorname{erf} \frac{\delta x}{\sqrt{\alpha}} \right\} - \frac{\alpha}{\gamma} x \Sigma^*(y)$$

$$x \mu_2^*(y) = -\frac{\sum(\infty)}{4x} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{4\alpha^2\delta(\alpha+1-\delta^2)^2}{(\alpha+1)^4\gamma} \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\delta x}{\sqrt{\alpha}} e^{-\frac{y}{\alpha}} \left(1 + \frac{y\delta^2}{\alpha}\right) + \left(3\frac{y\delta^2}{\alpha} + \frac{2y^2\delta^4}{\alpha^2}\right) \operatorname{erf} \frac{\delta x}{\sqrt{\alpha}} e^{\frac{\delta^2 - 1}{\alpha} y} \right\}$$

$$+ \frac{\alpha}{\gamma} \left[1 + \frac{2(\alpha+1) - 3\delta^2}{(\alpha+1-\delta^2)(\alpha+1)^2} \delta^2 \right] x \Sigma^*(y) + \left[\frac{2(\alpha+1) - 3\delta^2}{(\alpha+1-\delta^2)(\alpha+1)^2} \delta^2 - \frac{\alpha}{\gamma} \right] x \mu_1^*(y)$$

Lorsque γ est petit (cas proche du modèle gazeux pur) les formules analytiques pour les trois termes tout intégrés donnent lieu à des effets de différence aux petites valeurs de y .

On les remplacera alors par des développements en série, à savoir:

$$\begin{aligned} x \Sigma^*(y) &= \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{\sqrt{\alpha}}{D} e^{-\frac{4\gamma}{D}y} \left[Z_1\left(\frac{\kappa y}{\alpha}\right) + \lambda Z_2\left(\frac{\kappa y}{\alpha}\right) + \lambda^2 Z_3\left(\frac{\kappa y}{\alpha}\right) + \dots \right] \\ x m_1^*(y) &= \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{\sqrt{\alpha}}{D} e^{-\frac{4\gamma}{D}y} \left[\frac{4\alpha}{D} Z_1\left(\frac{\kappa y}{\alpha}\right) - \frac{4\alpha^2}{(\alpha+1)^2} (Z_2 + \lambda Z_3 + \lambda^2 Z_4 + \dots) \right] \\ x \mu_2^*(y) &= \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{\sqrt{\alpha}}{D} e^{-\frac{4\gamma}{D}y} \left[\frac{16\alpha^2}{D^2} Z_1\left(\frac{\kappa y}{\alpha}\right) + \frac{4\alpha^2}{(\alpha+1)^2} \left(1 - \frac{8\alpha}{D} - \frac{16\alpha\gamma}{D^2}\right) Z_2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{16\alpha^3(\alpha+\gamma)}{(\alpha+1)^4} (Z_3 + \lambda Z_4 + \lambda^2 Z_5 + \dots) \right] \end{aligned}$$

où $D = (1+\alpha)^2 + 4\alpha\gamma$ $\lambda = \frac{4\alpha\gamma}{(1+\alpha)^2}$ $\kappa = \frac{(\alpha+1)^2}{(\alpha+1)^2 + 4\alpha\gamma}$

et où les fonctions Z_n sont définies par récurrence:

$$\begin{aligned} Z_1(y) &= \left(y + \frac{1}{2}\right) \frac{e^{\frac{1}{2}\sqrt{y}}}{\sqrt{y}} + \frac{e^{-y}}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_0^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n!} \frac{y^n}{(n-\frac{1}{2})(n+\frac{1}{2})} \\ Z_2(y) &= \left(\frac{y^2}{2} + \frac{y}{2} - \frac{1}{8}\right) \frac{e^{\frac{1}{2}\sqrt{y}}}{\sqrt{y}} + \left(\frac{y}{2} + \frac{1}{4}\right) \frac{e^{-y}}{\sqrt{\pi}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_0^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n!} \frac{y^{n+1}}{(n-\frac{1}{2})(n+\frac{1}{2})(n+\frac{3}{2})} \\ Z_p(y) &= \frac{(y-p+\frac{3}{2})Z_{p-1} + y Z_{p-2}}{p} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_0^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n!} \frac{y^{n+p-1}}{(n-\frac{1}{2})(n+\frac{1}{2}) \dots (n+p-\frac{1}{2})} \end{aligned}$$

Il est facile de savoir dans quel cas on doit abandonner les formules compactes. En effet, si ϵ est l'erreur sur $\frac{e^{\frac{1}{2}\sqrt{y}}}{\sqrt{y}}$, l'erreur absolue sur $x \Sigma^*$ est de l'ordre de $\sum(\infty) \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{\epsilon}{4\gamma x}$, celle sur $x m_1^*$ est de l'ordre de $\sum(\infty) \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{\epsilon}{4\gamma x} \cdot \frac{\alpha}{\gamma}$ et celle sur $x \mu_2^*$ est de l'ordre de $\sum(\infty) \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \times \frac{\epsilon}{4\gamma x} \left(\frac{\alpha}{\gamma} + \frac{\alpha^2}{\gamma^2}\right)$.

III - LE CALCUL DES MOMENTS POUR LES GRANDES ENERGIES INITIALES.

Pour les grandes valeurs de y , il est nécessaire de déplacer le con-

tour d'intégration de façon à ce que la partie réelle de l'exposant prenne des valeurs aussi basses que possible (sinon il y aura des effets de différence importants dans le calcul de l'intégrale). On constate que ce résultat sera atteint en déplaçant le contour vers la droite. Toutefois on ne peut pas franchir l'origine, qui est un point de branchement pour la racine carrée de $w - \zeta$. On ne peut pas franchir non plus les racines complexes (à partie réelle positive) de $w - \zeta$; en fait, on a intérêt à situer le parcours dans une zone moins éloignée, celle des cols de $\frac{\zeta^2}{w - \zeta}$.

L'origine joue un rôle particulier, étant racine et non pôle de $\frac{\zeta^2}{w - \zeta}$, mais singularité des intégrants par l'intermédiaire des puissances négatives demi-entières de $w - \zeta$. Il n'est donc pas possible de faire passer par l'origine le parcours d'intégration, sans avoir opéré des modifications préalables. La méthode que nous emploierons consistera à déduire des termes tout intégrés qui compensent les singularités à l'origine, tout en comportant exactement la même exponentielle en facteur.

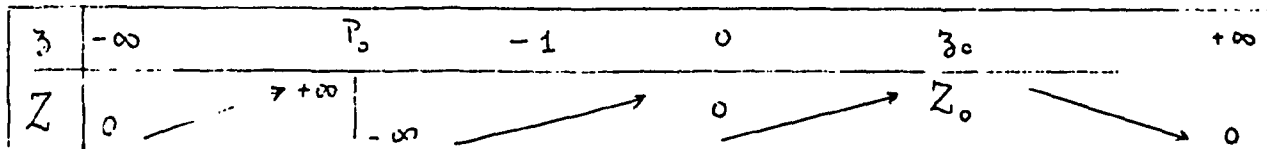
1) Variation de l'exposant dans le plan complexe.

Pour aboutir à un calcul satisfaisant, il faut étudier au préalable la fonction complexe:

$$Z(\zeta) = \frac{\zeta^2}{\zeta - w(\zeta)}$$

En fait on doit raisonner en traitant Z comme la véritable variable d'intégration.

Un premier résultat est le suivant: sur l'axe réel, la fonction Z est réelle et possède un pôle et un seul P_0 (situé à gauche de -1), un col et un seul C_0 d'abscisse ζ_0 positive. Plus précisément Z varie de la façon suivante:



Pour la démonstration, on remarque d'abord que sur l'axe réel $w - \zeta$ est une fonction réelle, convexe, nulle pour $\zeta = 0$ et positive pour $\zeta = -1$, ce qui établit l'unicité et la situation du pôle P_0 . Ensuite, on considère:

$$\frac{dZ}{d\zeta} = \frac{\zeta f(\zeta)}{(\zeta - w)^2} \quad \begin{aligned} f(\zeta) &= w'\zeta + \zeta - 2w \\ f'(\zeta) &= w''\zeta + 1 - w' \\ f''(\zeta) &= w'''\zeta = -\zeta \int_0^\infty \frac{w^2 p(w)}{\operatorname{sh} \frac{w}{2}} \operatorname{sh} \left(\frac{w}{2} + w\zeta \right) dw \end{aligned}$$

On voit que $f''(\zeta)$ est positive entre $-1/2$ et 0 , négative ailleurs; comme on vérifie directement que $f'(\zeta)$ est positive pour $\zeta = -\frac{1}{2}$, elle l'est de $-\infty$ à un

certain β positif, puis elle est négative ensuite; $f(\beta)$ est d'abord croissante, puis décroissante, et comme elle s'annule pour $\beta=0$, elle a une seule autre racine, positive. D'où le résultat.

La variation de Z s'écarte légèrement du schéma ci-dessus dans le cas du modèle purement gazeux, C_0 étant alors rejeté à l'infini. Dans les modèles où w n'est pas entière (parce que ρ n'est pas de support borné) le schéma est valable pour le segment de l'axe réel où w est régulière.

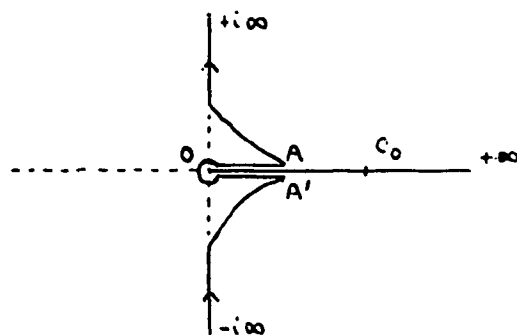
Un second résultat est le suivant: Z a une partie réelle positive sur toute la droite $\Re \beta = 0$ (sauf à l'origine). En effet, si $\beta = it$, on a:

$$Z = \frac{-t^2}{it - \Re w - i \Im w} = \frac{t^2 \Re w + it^2(t - \Im w)}{(\Re w)^2 + (t - \Im w)^2}$$

or $\Re w > 0$ sur toute la droite. (En outre, comme $|\Im w| < |t|$, la partie imaginaire de Z est du signe de celle de β). Si $\alpha = 0$, lorsque $t \rightarrow \pm \infty$, $\Re Z \rightarrow \gamma$. Si $\alpha \neq 0$, $\Re Z \rightarrow \frac{1}{\alpha}$.

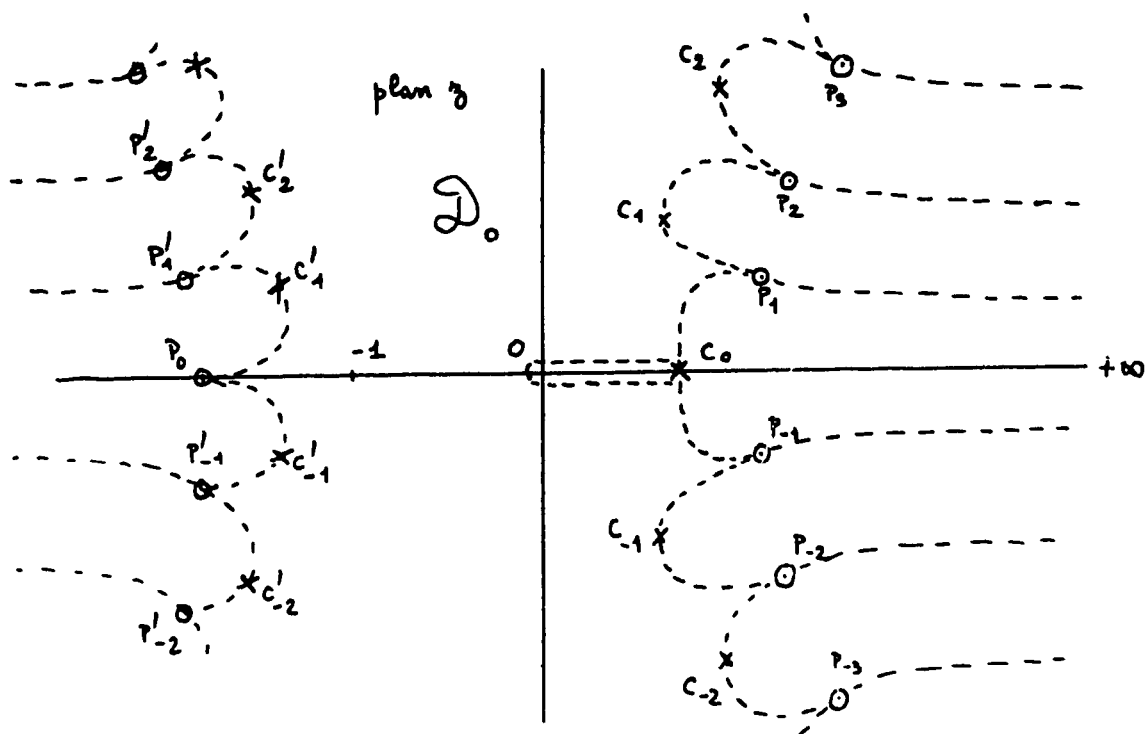
Un troisième résultat est le suivant: Z est régulière dans toute la bande $-1 < \Re \beta < 0$. En effet, $w(\beta)$ y est régulière. En outre $\beta - w/\beta$ ne peut s'y annuler, puisqu'on y a toujours: $|\Im w| < \frac{|\Im \beta|}{A} \leq |\Im \beta|$.

Des résultats généraux précédents, on conclut déjà qu'on peut toujours adopter un contour d'intégration analogue au suivant, où les deux branches



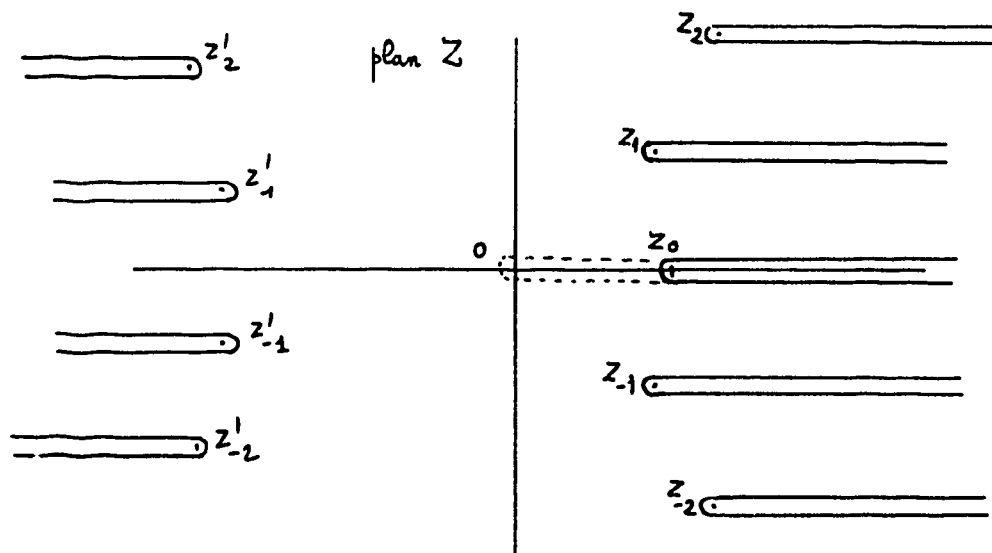
complexes $(-i\infty, A')$ et $(A, i\infty)$ sont telles que Z y conserve une partie réelle positive (de sorte que leur contribution aux intégrales est bornée par une quantité du type e^{-ky}).

Mais il est généralement préférable de déplacer davantage encore vers la droite le contour d'intégration. Il semble difficile d'obtenir d'autres résultats généraux concernant la disposition des pôles et des cols de Z , mais sur des exemples simples on peut constater l'allure indiquée sur la figure suivante (où les cols sont signalés par des croix et les pôles par des cercles).



Conformément à la théorie des fonctions de variable complexe, on peut décomposer le plan ζ en une infinité de domaines dans lesquels Z prend une fois et une seule chaque valeur. Cette décomposition n'est pas unique. Celle qui est représentée sur la figure est choisie de façon à ce que Z conserve une partie imaginaire constante sur chacune des coupures. En particulier, sur la courbe P, C, P_{-1} , Z est réel.

De cette façon le domaine fondamental \mathcal{D}_0 de la fonction Z se trouve représenté comme suit dans le plan Z :



Les valeurs $\dots, z_{-2}, z_{-1}, z_0, z_1, z_2, \dots$ et $\dots, z'_{-1}, z'_1, z'_2, \dots$ sont les valeurs que prend Z aux différents cols. Tout chemin d'intégration en ζ qui reste dans \mathcal{D}_0 se traduira par un chemin en Z qui respecte les coupures. En particulier, si on choisit comme chemin en ζ la frontière de droite de \mathcal{D}_0 , le chemin en Z sera constitué par les lacets de droite autour de $\dots, z_{-2}, z_{-1}, z_0, z_1, z_2, \dots$. (Puis-

On est donc conduit à prendre comme partie tout intégrée:

$$\frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{z_0}^{z_0} e^{-zy} dz \left(\frac{A}{A+i}\right)^2 \left[\frac{1}{(-z)^{3/2}} + \frac{B}{A} \frac{1}{(-z)^{1/2}} \right] = \Sigma(\infty) \left[\left(y + \frac{B}{2A}\right) \frac{\operatorname{erf} \sqrt{y z_0}}{z} + \frac{e^{-y z_0}}{\sqrt{\pi z_0}} \right]$$

En revenant à z on obtient l'intégrale résiduelle sous la forme suivante (dans laquelle on a fait la modification immédiate qui ramène à un intégrant réel):

$$- \frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 2 \int_0^{z_0} \frac{e^{-\frac{z^2}{z-w} y}}{(z-w)^{3/2}} dz \left[1 - \frac{\left(1 - \frac{zw}{z} + w'\right) \left(1 - \frac{w}{z} - \frac{B}{A} z\right)}{\left(1 + \frac{1}{A}\right)^2} \right]$$

Pour éviter les effets de différence dans le calcul du crochet au voisinage de l'origine, il n'est pas satisfaisant d'utiliser un développement en série de w (présence éventuelle de grands w); on pose donc:

$$-w(z) = \frac{z}{A} + \frac{B}{A} z^2 + \frac{C}{A} z^3 + \left(1 + \frac{1}{A}\right) z^4 p(z) = \frac{z}{A} + \frac{B}{A} z^2 + \left(1 + \frac{1}{A}\right) z^3 r(z)$$

$$-w'(z) = \frac{1}{A} + 2 \frac{B}{A} z + 3 \frac{C}{A} z^2 + \left(1 + \frac{1}{A}\right) z^3 q(z) = \frac{z}{A} + \frac{2B}{A} z + \left(1 + \frac{1}{A}\right) z^2 s(z)$$

ce qui donne pour $p(z)$ et $q(z)$ les définitions:

$$p(z) = \frac{A}{A+1} \int_0^{\infty} \frac{w^3 p(w)}{\operatorname{sh} \frac{w}{2}} \left[\operatorname{ch} \frac{w}{2} f(wz) + \operatorname{sh} \frac{w}{2} h(wz) \right] dw$$

$$q(z) = \frac{A}{A+1} \int_0^{\infty} \frac{w^3 p(w)}{\operatorname{sh} \frac{w}{2}} \left[\operatorname{ch} \frac{w}{2} h(wz) + \operatorname{sh} \frac{w}{2} wz f(wz) \right] dw$$

avec $f(u) = \frac{\operatorname{ch} u - 1 - \frac{u^2}{2}}{u^4}$ qu'on remplace par $\frac{1}{24} \left(1 + \frac{u^2}{30}\right)$ pour $u < 0, 2$

$h(u) = \frac{\operatorname{sh} u - u - \frac{u^3}{6}}{u^4}$ qu'on remplace par $\frac{u}{120} \left(1 + \frac{u^2}{42}\right)$ pour $u < 0, 2$

(on remarque que l'emploi de séries limitées dépend de wz et non de z).

$$r(u) = \frac{1}{6} + u R(u) \quad r(z) = \frac{C}{A+1} + z p(z) \quad s(z) = \frac{3C}{A+1} + z q(z)$$

Ce sont p et q et non w et w' qu'on calculera directement à partir de $p(w)$.

L'intégrale résiduelle pour $x \Sigma$ s'écrira alors:

$$-\frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \int_0^{z_0} \frac{z^{3/2}}{\left(1 - \frac{y}{z}\right)^{3/2}} e^{-\frac{z}{1-\frac{y}{z}} y} dz \quad (q - 3p - 2yz^2 + yz^3)$$

avec $1 - \frac{y}{z} = 1 + \frac{1}{A} + \frac{B}{A} z + \left(1 + \frac{1}{A}\right) z^2$

Pour les deux moments on commencera par modifier les formules de base. En considérant les dérivées en z de $(w-z)^{-3/2} e^{-\frac{z^2}{w-z} y}$ et de

$$(w-z)^{-5/2} e^{-\frac{z^2}{w-z} y} \left(\frac{3}{2} + y \frac{2wz - z^2}{w-z}\right) \text{ on montre aisément que les intégrales sont égales}$$

aussi bien à:

$$x \mu_1(y) = \frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} w'(z) \frac{e^{-\frac{z^2}{w-z} y}}{(w-z)^{5/2}} dz \left(\frac{3}{2} + y \frac{z^2}{w-z}\right)$$

$$2x \mu_2(y) = \frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{-i\infty - \frac{1}{2}}^{+i\infty - \frac{1}{2}} w'(z) \frac{e^{-\frac{z^2}{w-z} y}}{(w-z)^{7/2}} dz \left[\frac{15}{4} + \frac{5y w z}{w-z} + \frac{y^2 z^3 (2w-z)}{(w-z)^2}\right]$$

Pour $x \mu_1$, on déduira le terme tout intégré suivant:

$$\frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{z_0}^{z_0} - \frac{(A-Bz)^2 [A + (2A+1)Bz]}{(z)^{5/2} (A+1)^4} \left(\frac{3}{2} - yz\right) e^{-zy} dz =$$

$$\Sigma(\infty) \frac{2A}{(A+1)^2} \left\{ \frac{\exp \sqrt{y} z_0}{x} \left[-y^2 + \left(2 - \frac{1}{A}\right) By + \frac{4A+1}{4A^2} B^2\right] + \frac{e^{-y z_0}}{\sqrt{y} z_0} \left[-y + \frac{1}{4z_0} + \frac{3}{4} \left(2 - \frac{1}{A}\right) B + \frac{4A+1}{4A^2} B^2 z_0 - \frac{(2A+1)^2}{4A^3} B^2 z_0^2\right] \right\}$$

Pour $2x \mu_2$, on déduira le terme tout intégré suivant:

$$\begin{aligned} & \frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{z_0}^{z_0} \left(\frac{15}{4} - 5yz + y^2 z^2\right) \left\{ \frac{(A-Bz)^5}{(A+1)^5 z^5} + 2B \frac{(A-Bz)^4}{(A+1)^4 z^4} + C \frac{3A-1}{A+1} \frac{(A-Bz)^3}{(A+1)^3 z^3} \right\} \frac{(-z)^{3/2} e^{-2y}}{A+1} dz \\ & + \frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{1}{i} \int_{z_0}^{z_0} y(5-2yz) \left\{ \frac{(A-Bz)^4}{(A+1)^4 z^4} + 2B \frac{(A-Bz)^3}{(A+1)^3 z^3} \right\} \frac{(-z)^{3/2} e^{-2y}}{A+1} dz \\ & = \Sigma(\infty) \frac{3}{8} \frac{A^2}{(A+1)^4} \left\{ (y^3 + \lambda_1 y^2 + \lambda_2 y + \lambda_3) \frac{e^{\lambda_4 \sqrt{y} z_0}}{x} + (y^2 - \lambda_4 y - \lambda_5) \frac{e^{-y z_0}}{\sqrt{\pi z_0}} \right\} \end{aligned}$$

où $\lambda_1 = \frac{3}{4} \frac{B}{A} (A^2 - 6A + 3)$ $\lambda_2 = \frac{9}{8} \frac{B^2}{A^2} (6A^2 - 4A - E)$

$\lambda_3 = \frac{3}{16} \frac{B^3}{A^3} (15A^2 + 6A + 1 - 3E)$ $E = \frac{CA(A+1)(3A-1)}{B^2}$

$\lambda_4 = \frac{3}{32z_0} \left[\frac{10}{3} - A - \frac{5Bz_0}{A} (2A^2 - 9A + 4) + \frac{B^2 z_0^2}{A^2} (4A^2 + 14A + E) - \frac{B^3 z_0^3}{A^3} (14A + 4 + 3E) \right.$
 $\left. - \frac{B^4 z_0^4}{A^4} (4A^2 - 3A - 2 - 3E) + \frac{B^5 z_0^5}{A^5} (2A^2 + A - E) \right]$

$\lambda_5 = \frac{3}{64z_0^2} \left[3A + \frac{5Bz_0}{A} (2A^2 - 3A) - \frac{15B^2 z_0^2}{A^2} (8A^2 - 2A - E) - \frac{B^3 z_0^3}{A^3} (60A^2 - 18A - 8 - 21E) \right.$
 $\left. + \frac{5B^4 z_0^4}{A^4} (8A^2 + 3A - E) - \frac{3B^5 z_0^5}{A^5} (2A^2 + A - E) \right]$

Les intégrales résiduelles sont respectivement:

$$\frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{2}{A} \int_0^{z_0} \frac{dz}{\sqrt{z}} \frac{e^{-\frac{z}{1-\frac{y}{z}}}}{\left(1 - \frac{y}{z}\right)^{3/2}} \left(\frac{3}{2} - y \frac{z}{1-\frac{y}{z}}\right) \left[\varphi_1(z) - (A+1)s(z) + 2Bz \varphi_5(z) \right]$$

et $-\frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \frac{2}{A} \int_0^{z_0} \frac{dz}{\sqrt{z}} \frac{e^{-\frac{z}{1-\frac{y}{z}}}}{\left(1 - \frac{y}{z}\right)^{3/2}} \left\{ \left[\frac{15}{4} - 5y \frac{z}{1-\frac{y}{z}} + y^2 \frac{z^2}{\left(1-\frac{y}{z}\right)^2} \right] \varphi_1(z) + y \left(5 - 2y \frac{z}{1-\frac{y}{z}}\right) \varphi_2(z) \right\}$

avec $\varphi_1(z) = 5p - (A+1)q + (2p-q)(1+z^2)^5 - \frac{5C}{A+1} z^2 + 2B \varphi_3(z) + C \frac{3A-1}{A+1} z \varphi_4(z)$
 $+ \left(1 - \frac{Cz^2}{A+1}\right) z (10z^2 + 10z^3 z^2 + 5z^4 z^4 + 2^5 z^6)$

$\varphi_2(z) = \varphi_3(z) - (A+1)s + 2Bz \varphi_4(z)$

$\varphi_3(z) = z + (1+z^2) \varphi_4(z)$ $\varphi_4(z) = z + (1+z^2) \varphi_5(z)$

$\varphi_5(z) = 4z + 5z^2 z^2 + 2z^3 z^4 - s(1+z^2)^2$

Pour terminer, indiquons que sur la verticale de z_0 nous conserverons pour m_1 et m_2 les nouveaux intégrants, et pour Σ nous déduirons le terme tout

intégré obtenu en négligeant w , lequel vaut:

$$\Sigma(\infty) \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \left[\frac{e^{-y z_0}}{\sqrt{\pi z_0}} + x - x \operatorname{erf} \sqrt{y z_0} \right]$$

(Il ne faut ^{pas} oublier, dans le cas où $\alpha = 0$, de déduire le terme de diffusion élastique). Finalement les intégrales sur la verticale de z_0 seront pour $x \Sigma$, $x m_1$ et $2x \mu_2$:

$$-\frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 2 \mathcal{R} \int_{z_0}^{z_0+i\infty} \frac{e^{-\frac{z^2}{z-w} y} dz}{(z-w)^{3/2}} \left[1 - \left(1 - \frac{w}{z}\right) \left(1 + w' - \frac{2w}{z}\right) \right]$$

$$\frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 2 \mathcal{R} \int_{z_0}^{z_0+i\infty} \frac{e^{-\frac{z^2}{z-w} y} dz}{(z-w)^{5/2}} \left[\frac{3}{2} - y \frac{z^2}{z-w} \right] w'(z)$$

$$-\frac{\Sigma(\infty)}{4\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 2 \mathcal{R} \int_{z_0}^{z_0+i\infty} \frac{e^{-\frac{z^2}{z-w} y} dz}{(z-w)^{7/2}} \left[\frac{15}{4} - \frac{5y w z}{z-w} - \frac{y^2 z^3 / (z-2w)}{(z-w)^2} \right] w'(z)$$

où les puissances demi-entières ont la détermination positive pour z_0 et sont ensuite définies par continuité. Puisque dz est imaginaire pur, la partie réelle des intégrales s'obtiendra en conservant la partie imaginaire des intégrands.

IV - LE CALCUL EFFECTIF DE $w(z)$ ET $w'(z)$.

Il y a lieu maintenant de préciser comment on calculera effectivement w et w' ou leurs substitués ξ et ξ' , p et q , le long des contours d'intégration, selon les modèles. L'idée essentielle à respecter est que l'approximation éventuelle doit porter sur $\rho(w)$ et non sur $w(z)$ si on veut maintenir sûrement la cohérence des calculs.

1) Différents termes pour $\rho(w)$.

Pour pouvoir rendre compte de tous les modèles rencontrés, il est nécessaire de pouvoir superposer dans le spectre $\rho(w)$ des termes des types suivants (écrits avec leurs coefficients de normalisation):

- a) type "gazeux": $\rho(w) = \delta(w) \rightarrow w(z) = -z - z^2$
- b) type "discret": $\rho(w) = \delta(w - w_i) \rightarrow w(z) = \frac{\operatorname{ch} \frac{w_i}{z} - \operatorname{ch} \left(\frac{w_i}{z} + w_i z \right)}{w_i \operatorname{sh} \frac{w_i}{z}}$
- c) type "singulier": $\rho(w) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{w_i I_1 \left(\frac{w_i}{z} \right)} \frac{w \operatorname{sh} \frac{w}{z}}{\sqrt{w_i^2 - w^2}} \rightarrow w(z) = \frac{I_0 \left(\frac{w_i}{z} \right) - I_0 \left(\frac{w_i}{z} + w_i z \right)}{w_i I_1 \left(\frac{w_i}{z} \right)}$

pour $0 < \omega < \omega_i$ (et 0 pour $\omega > \omega_i$)

d) type "continu" (solide): $\rho(\omega)$ fonction continue dans un intervalle fini, avec comportement en ω^2 à l'origine si l'origine est une extrémité de l'intervalle.

e) type continu diffusif (liquide): $\rho(\omega)$ tend vers une constante non nulle pour $\omega \rightarrow 0$ (avec $\rho'(0) = 0$). On peut alors se ramener au type précédent en déduisant un terme de forme analytique donné, qui sera:

$$\text{type "diffusif" (liquide): } \rho(\omega) = \frac{e}{\pi} \frac{\sqrt{q^2 + \frac{1}{4}}}{q^2} \operatorname{sh} \frac{\omega}{2} K_1 \left[\frac{\sqrt{q^2 + \frac{1}{4}}}{2q} \omega \right] \rightarrow w(\zeta) = \frac{e}{q^2} \left[\sqrt{1 - q^2(\zeta + \zeta^*)} - 1 \right]$$

(Noter que ce type correspond à une densité s'étendant à l'infini; il faudra éventuellement enlever des termes).

Dans le type diffusif, $w(\zeta)$ croît comme $|\zeta|$ pour $\zeta \rightarrow \pm i\infty$; pour le calcul aux petites énergies (définition de S) on associera à ce type un γ fictif de l'ordre du $|\omega|$ final.

Le type "singulier" oblige à faire appel à des fonctions de Bessel d'argument complexe. Il permet de traiter des spectres continus présentant des singularités du type indiqué, en les déduisant au préalable du spectre continu proprement dit.

Seul le type "continu" nécessite un mode d'approximation spécifique.

2) Approximation de la partie "continue".

Au lieu de remplacer $\rho(\omega)$ par une somme de fonctions delta, il est beaucoup plus efficace (surtout aux grandes valeurs de ζ) de l'approcher par une fonction en escalier. Plus précisément, pour qu'on puisse intégrer exactement chaque "marche", c'est $g(\omega) = \frac{\rho(\omega)}{\omega \operatorname{sh} \frac{\omega}{2}}$ qui devra être approché de cette façon (ce qui ne crée pas de difficulté à l'origine, où ρ est en ω^2).

Dans chaque intervalle partiel $(\omega_i - \Delta_i, \omega_i + \Delta_i)$, $g(\omega)$ sera remplacé par $g(\omega_i) = g_i$ et on aura ainsi:

$$\begin{aligned} w(\zeta) &= \sum_i g_i \int_{\omega_i - \Delta_i}^{\omega_i + \Delta_i} \left[\operatorname{ch} \frac{\omega}{2} - \operatorname{ch} \left(\frac{\omega}{2} + \omega_i \zeta \right) \right] d\omega \\ &= \sum_i 2 \Delta_i g_i \left[\operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} \frac{\operatorname{sh} \frac{\Delta_i}{2}}{\frac{\Delta_i}{2}} - \frac{\operatorname{ch} \left(\frac{\omega_i}{2} + \omega_i \zeta \right) \operatorname{sh} \left(\frac{\Delta_i}{2} + \Delta_i \zeta \right)}{\frac{\Delta_i}{2} + \Delta_i \zeta} \right] \\ w'(\zeta) &= \sum_i 2 \Delta_i g_i \left\{ -\omega_i \operatorname{sh} \left(\frac{\omega_i}{2} + \omega_i \zeta \right) \frac{\operatorname{sh} \left(\frac{\Delta_i}{2} + \Delta_i \zeta \right)}{\frac{\Delta_i}{2} + \Delta_i \zeta} - \Delta_i \operatorname{ch} \left(\frac{\omega_i}{2} + \omega_i \zeta \right) \left[\frac{\operatorname{ch} \left(\frac{\Delta_i}{2} + \Delta_i \zeta \right)}{\frac{\Delta_i}{2} + \Delta_i \zeta} - \frac{\operatorname{sh} \left(\frac{\Delta_i}{2} + \Delta_i \zeta \right)}{\left(\frac{\Delta_i}{2} + \Delta_i \zeta \right)^2} \right] \right\} \end{aligned}$$

Les Δ_i étant petits, il peut se produire des effets de différence; on les fera disparaître en remplaçant $\frac{\text{sh } u}{u}$ et $\frac{\text{ch } u}{u} - \frac{\text{sh } u}{u^2}$ par des développements limités, dès que $|u|$ tombe en-dessous d'une certaine valeur.

Pour les petites valeurs de y , la contribution de $w(y)$ à γ et à $\varepsilon(y)$ reste en évidence.

Pour les grandes valeurs de y , il reste à indiquer comment on détermine la contribution à $\frac{1}{A}$, $\frac{B}{A}$, $\frac{C}{A}$ ainsi qu'aux fonctions $p(y)$ et $q(y)$ (sur l'axe réel).

On utilisera pour cela la formule:

$$\frac{\text{sh} \left(\frac{\Delta_i}{2} + \Delta_i y \right)}{\frac{\Delta_i}{2} + \Delta_i y} = p_0(\Delta_i) + y p_1(\Delta_i) + y^2 p_2(\Delta_i) + \dots$$

avec

$$p_0(\Delta_i) = \frac{2}{\Delta_i} \text{sh} \frac{\Delta_i}{2}$$

$$p_1(\Delta_i) = 2 \text{ch} \frac{\Delta_i}{2} - \frac{4}{\Delta_i} \text{sh} \frac{\Delta_i}{2}$$

$$p_n(\Delta_i) = \frac{2}{\Delta_i} \left\{ (-2)^n \text{sh} \frac{\Delta_i}{2} + (-2)^{n-1} \frac{\Delta_i}{1!} \text{ch} \frac{\Delta_i}{2} + (-2)^{n-2} \frac{\Delta_i^2}{2!} \text{sh} \frac{\Delta_i}{2} + \dots + \frac{\Delta_i^n}{n!} \text{ch} \frac{\Delta_i}{2} \right\}$$

$$= \frac{2^n}{n!} \sum_{p \geq \frac{n}{2}} \left(\frac{\Delta_i}{2} \right)^{2p} \frac{1}{(2p-n)! (2p+1)}$$

D'où

$$w(y) = - \sum_i 2 \Delta_i g_i \left\{ p_0(\Delta_i) \left[\text{ch} \frac{\omega_i}{2} (\text{ch} \omega_i y - 1) + \text{sh} \frac{\omega_i}{2} \text{sh} \omega_i y \right] + \left[y p_1(\Delta_i) + y^2 p_2(\Delta_i) + \dots \right] \text{ch} \left(\frac{\omega_i}{2} + \omega_i y \right) \right\}$$

On en déduit:

$$\frac{1}{A} = \sum_i 2 \Delta_i g_i \left[\omega_i \text{sh} \frac{\omega_i}{2} p_0(\Delta_i) + \text{ch} \frac{\omega_i}{2} p_1(\Delta_i) \right]$$

$$\frac{B}{A} = \sum_i 2 \Delta_i g_i \left[\frac{\omega_i^2}{2} \text{ch} \frac{\omega_i}{2} p_0(\Delta_i) + \omega_i \text{sh} \frac{\omega_i}{2} p_1(\Delta_i) + \text{ch} \frac{\omega_i}{2} p_2(\Delta_i) \right]$$

$$\frac{C}{A} = \sum_i 2 \Delta_i g_i \left[\frac{\omega_i^3}{6} \text{sh} \frac{\omega_i}{2} p_0(\Delta_i) + \frac{\omega_i^2}{2} \text{ch} \frac{\omega_i}{2} p_1(\Delta_i) + \omega_i \text{sh} \frac{\omega_i}{2} p_2(\Delta_i) + \text{ch} \frac{\omega_i}{2} p_3(\Delta_i) \right]$$

La valeur de $\frac{1}{A}$ sert à renormaliser les g_i .

En pratique on s'imposera de ne pas dépasser $\Delta_i = 0,5$, ce qui permet d'utiliser systématiquement pour les $p_n(\Delta_i)$ les développements limités arrêtés à $2p = 4$; les p_n seront alors nuls à partir de $n = 5$.

On obtient d'autre part:

$$p(z) = \frac{A}{A+1} \sum_i 2\Delta_i g_i \left\{ \begin{aligned} &\omega_i^4 p_0(\Delta_i) \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} k(\omega_i z) + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} f(\omega_i z) \right] \\ &+ \omega_i^3 p_1(\Delta_i) \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} k(\omega_i z) + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} \omega_i z f(\omega_i z) \right] \\ &+ \omega_i^2 p_2(\Delta_i) \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} \omega_i z k(\omega_i z) + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} j(\omega_i z) \right] \\ &+ \omega_i p_3(\Delta_i) \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} l(\omega_i z) + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} \omega_i z j(\omega_i z) \right] \\ &+ \left[p_4(\Delta_i) + 3 p_5(\Delta_i) + \dots \right] \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} \operatorname{sh} \omega_i z + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} \operatorname{ch} \omega_i z \right] \end{aligned} \right\}$$

$$q(z) = \frac{A}{A+1} \sum_i 2\Delta_i g_i \left\{ \begin{aligned} &\omega_i^4 p_0(\Delta_i) \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} \omega_i z f(\omega_i z) + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} k(\omega_i z) \right] \\ &+ \omega_i^3 p_1(\Delta_i) \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} j(\omega_i z) + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} \omega_i z k(\omega_i z) \right] \\ &+ \omega_i^2 p_2(\Delta_i) \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} \omega_i z j(\omega_i z) + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} l(\omega_i z) \right] \\ &+ \omega_i \left[p_3(\Delta_i) + 3 p_4(\Delta_i) + \dots \right] \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} \operatorname{ch} \omega_i z + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} \operatorname{sh} \omega_i z \right] \\ &+ \omega_i^3 p_1(\Delta_i) \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} k(\omega_i z) + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} \omega_i z f(\omega_i z) \right] \\ &+ 2\omega_i^2 p_2(\Delta_i) \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} \omega_i z k(\omega_i z) + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} j(\omega_i z) \right] \\ &+ 3\omega_i p_3(\Delta_i) \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} l(\omega_i z) + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} \omega_i z j(\omega_i z) \right] \\ &+ \left[4 p_4(\Delta_i) + 5 p_5(\Delta_i) + \dots \right] \left[\operatorname{sh} \frac{\omega_i}{2} \operatorname{sh} \omega_i z + \operatorname{ch} \frac{\omega_i}{2} \operatorname{ch} \omega_i z \right] \end{aligned} \right\}$$

Dans ces formules, on s'est servi à nouveau des fonctions $f(u)$, $h(u)$, $k(u)$ définies plus haut, complétées par:

$$j(u) = \frac{\operatorname{ch} u - 1}{u^2} = \frac{1}{2} + u^2 f(u) \qquad l(u) = \frac{\operatorname{sh} u}{u} = 1 + u^2 k(u)$$

En pratique, on s'imposera de ne pas dépasser $\Delta_i = 0,5$, ce qui permettra d'utiliser systématiquement pour les $p_n(\Delta_i)$ les développements limités arrêtés à $2p = 4$, de sorte que $p_n(\Delta_i) = 0$ pour $n \gg 5$ et:

$$\begin{aligned} p_0(\Delta_i) &= 1 + \frac{\Delta_i^2}{24} + \frac{\Delta_i^4}{1920} & p_1(\Delta_i) &= \frac{\Delta_i^2}{6} + \frac{\Delta_i^4}{240} \\ p_2(\Delta_i) &= \frac{\Delta_i^2}{6} + \frac{\Delta_i^4}{80} & p_3(\Delta_i) &= \frac{\Delta_i^4}{60} & p_4(\Delta_i) &= \frac{\Delta_i^4}{120} \end{aligned}$$

V - EXECUTION DES CALCULS

1) Leur organisation générale.

Le but des calculs est d'obtenir une table des valeurs de $x\bar{\Sigma}$, $x\mu_1$ et $x\mu_2$ pour un ensemble choisi de valeurs de y , que nous prendrons entre 0 et 100 (au delà de 100, et même bien avant, en général, on peut se contenter de formules asymptotiques).

La normalisation sera toujours fixée par $\bar{\Sigma}(\infty) = 1$.

Nous avons pu constater à l'usage qu'il était presque toujours possible d'atteindre ce but en effectuant les calculs soit par la méthode des "petites énergies initiales" (paragr. II), soit par la méthode des "grandes énergies initiales" (paragr. III). Il existe même une zone de recouvrement entre les deux domaines de validité, ce qui nous a permis de déceler les erreurs au cours de la mise au point des programmes, et fournit maintenant une évaluation de la précision dans le programme définitif (la zone de recouvrement correspond aux valeurs les plus difficiles à calculer par les deux méthodes).

Il y a évidemment une partie commune très importante dans le calcul des intégrales relatives aux différents y dans chacune des deux méthodes, de sorte qu'il y a lieu de mener de front leur évaluation, en progressant simultanément en y . On comprend l'intérêt qu'il y avait à remplacer les formules initiales par des formules plus compliquées mais plus puissantes, en constatant que les calculs supplémentaires qu'elles entraînent servent ensuite sans changement pour tous les y .

Eu égard à diverses considérations, nous avons été conduits à fixer le choix des y selon un pas constant en $\sqrt{y} = x$ (en pratique 0,02 pour les petites énergies jusqu'à $x = 2,5$ et 0,05 pour les grandes énergies entre $x = 2$ et $x = 10$). Mais bien entendu, on pourrait les choisir arbitrairement.

Les tables de $x\bar{\Sigma}$, $x\mu_1$ et $x\mu_2$ sont complétées par $x\mu_2$ et $x\bar{\Sigma}_{tot}$ (en rajoutant à $x\bar{\Sigma}$ la section élastique dans le cas des modèles solides).

2) Le procédé d'intégration.

Les diverses intégrations numériques sont toutes effectuées par la formule de Simpson. Les doubles pas nécessaires sont de largeur variable, commandée automatiquement par un test de précision. Ce test est effectué seulement sur quelques-unes des intégrales, réparties sur toute l'étendue en x .

Pour se mettre à l'abri des imprécisions dues aux oscillations des intégrands, la largeur du pas est de toute façon limitée supérieurement, compte tenu de la fréquence maximum ω_m présente dans le spectre, ainsi que de la partie complexe de l'exposant $\frac{z^2}{z-w} y$.

Pour les intégrales complexes qui devraient s'étendre à l'infini (on peut évidemment ramener les contours à des demi-droites du demi-plan supérieur)

fonctionne un double test d'arrêt sur les intégrales sélectionnées, l'un qui profite de la nature alternée des résultats et joue sur l'amplitude des oscillations, l'autre qui tient compte du type de décroissance du module des intégrands complexes. Là aussi, on impose de toutes façons un parcours minimum d'intégration.

Pour l'intégration sur le chemin réel $0, z_0$, en raison du comportement à l'origine des intégrands de μ_1 et μ_2 , on prend un pas en \sqrt{z} .

3) Détermination du parcours (pour les grandes énergies).

Le choix du parcours se réduit au choix de la position de la verticale. Ce choix peut être exercé a priori si on dispose d'une information préalable adéquate sur le modèle considéré ou les modèles voisins. Sinon il est prévu de procéder automatiquement comme suit. D'abord la détermination de z_0 est effectuée par la recherche de la racine réelle positive unique de $\frac{f(z)}{z} = w' + 1 - \frac{2w}{z} = 1 + \frac{1}{A} - \frac{C}{A} z^2 + (1 + \frac{1}{A}) z^3 (2p - q)$. L'intégration complexe est alors essayée sur la verticale de z_0 . Si elle réussit (c'est-à-dire si on arrive au bout sans utiliser un nombre de pas excessif, sans que le pas devienne trop petit, et sans que l'exposant $\zeta = \frac{z^2}{z-w}$ passe par une valeur interdite, de partie réelle trop négative ou d'argument compris entre π et $\frac{3\pi}{2}$), on s'en tient là. Sinon on essaye une nouvelle valeur, fraction donnée de z_0 .

4) Evaluation des quantités complexes.

Le calcul des quantités complexes pose des problèmes spécifiques. Tout d'abord, il y a lieu de fixer un critère convenable pour lever l'ambiguïté de signe dans les radicaux complexes. Pour cela on prend pour $(z-w)^{\frac{1}{2}}$ la détermination à partie réelle positive et on calcule $(z-w)^{\frac{1}{2}+n}$ en multipliant $(z-w)^{\frac{1}{2}}$ par $(z-w)^n$.

D'autre part, il s'agit de calculer les quantités complexes de la façon la plus économique, surtout les exponentielles complexes qui sont très nombreuses (une exponentielle pour chaque pas et chaque y).

On a intérêt pour cela à expliciter au maximum les expressions, plutôt qu'à faire les calculs "en complexe".

5) Contrôle par les propriétés intégrales.

Le contrôle complémentaire des calculs par les propriétés énoncées au paragraphe I, 4 peut se faire de la façon suivante.

Pour les petits y , une fois la table constituée, on calcule et on tabule les intégrales indéfinies suivantes:

$$\int_0^y y' e^{-y'} \mu_1(y') dy'$$

$$\int_0^y y' e^{-y'} \mu_2(y') dy' + \int_0^y y'^2 e^{-y'} \mu_1(y') dy'$$

$$2 \int_0^y y' e^{-y'} \mu_2(y') dy' + \int_0^y y'^3 e^{-y'} \mu_1(y') dy'$$

De même, pour les grands y , on calcule et on tabule:

$$- \int_y^{\infty} y' e^{-y'} m_1(y') dy' \quad \text{etc...}$$

Ensuite il n'y a plus qu'à comparer les tables obtenues dans la zone de recouvrement.

En fait, nous effectuons ce calcul de contrôle par ailleurs.

6) Développements asymptotiques.

Le procédé d'intégration adopté pour les grandes énergies permet de retrouver les développements asymptotiques connus (pour $y \rightarrow +\infty$). Outre les quantités tout intégrées, les intégrales réelles contribuent à ces développements à partir de leur troisième terme; l'évaluation se fait sans difficulté de principe à partir d'un développement limité de l'intégrand en puissances successives de Z . Nous rappellerons les résultats suivants:

$$\begin{aligned} \Sigma(y) &= 1 + \frac{1}{2} \frac{B}{A} \frac{1}{y} + o\left(\frac{1}{y^2}\right) \\ m_1(y) &= \frac{2A}{(A+1)^2} \left\{ -y + (2A-1) \frac{B}{A} + \left[\frac{4A+1}{4} \left(\frac{B}{A}\right)^2 - \frac{(A+1)(3A+1)}{4A} \frac{C}{A} \right] \frac{1}{y} + o\left(\frac{1}{y^2}\right) \right\} \\ \mu_2(y) &= \frac{8}{3} \frac{A^2}{(A+1)^4} \left\{ y^2 + \frac{3}{4} (A^2 - 6A + 3) \frac{B}{A} y + \frac{9}{4} \left[(3A^2 - 2A) \left(\frac{B}{A}\right)^2 - (A^2 - 1) \frac{C}{A} \right] + o\left(\frac{1}{y}\right) \right\} \end{aligned}$$

Dans le cas des mélanges, chacun des coefficients suit évidemment la loi des mélanges.

Outre ces expressions asymptotiques, il est utile de calculer certaines constantes (qui suivent aussi la loi des mélanges), à savoir:

$$\begin{aligned} \xi &= 1 - \frac{(A-1)^2}{2A} \log \frac{A+1}{A-1} \\ \xi_2 &= 1 - \frac{(A-1)^2}{2A} \left[\log \frac{A+1}{A-1} + \left(\log \frac{A+1}{A-1} \right)^2 \right] \\ \nu &= \frac{3A-1}{3A(A+1)} \end{aligned}$$

7) Les deux codes MOTHER

Deux codes indépendants ont été mis au point pour IBM 7094, selon toutes les formules et les principes que nous venons d'indiquer. Le premier (SPM 101) met en oeuvre la méthode des petites énergies (LITTLE MOTHER), le second (SPM 102) la méthode des grandes énergies (GRAND MOTHER). Les indications nécessaires à leur emploi font l'objet de spécifications, déposées au S.C.E. de Saclay.

8) Choix de la précision.

Dans ces codes l'erreur tolérée sur chacun des résultats est fixée par l'utilisateur, mais selon un choix unique. Compte tenu de différents éléments, nous

nous sommes arrêtés aux formules suivantes: E_0 étant choisi, l'erreur absolue maximum sur $x \sum$ est E_0 pour tout x ; les erreurs absolues maximum pour $x \mu_1$ et $x \mu_2$ sont $E_0 \frac{4A}{(A+1)^2}$ et $E_0 \frac{8A}{(A+1)^2}$ dans LM et $E_0 \frac{2A}{(A+1)^2} x$ et $E_0 \frac{2A}{(A+1)^2} x^2$ dans GM (raccord pour $x = 2$). L'erreur est répartie automatiquement entre les différentes contributions.

VI - RESULTATS OBTENUS.

Des modèles très divers ont déjà fait l'objet de calculs avec ces codes. Ils se répartissent en deux catégories: d'une part des modèles "fictifs", construits pour mettre à l'épreuve les possibilités des codes, d'autre part des modèles "réels" destinés à représenter les modérateurs usuels.

1) Modèles fictifs.

Ils permettent de constater que les tests de précision les plus difficiles à satisfaire sont presque toujours ceux qui portent sur $x \mu_2$. Lorsque le calcul se passe bien, on constate chaque fois que la précision demandée est bien obtenue (comparaison LM - GM).

Les modèles qui ont conduit à des difficultés sont de deux sortes. Il y a d'une part ceux qui comportent une raie importante très voisine de l'origine (la valeur correspondante de γ est alors très grande); il y a lieu d'éviter de tels modèles en ramenant la raie à l'origine.

Il y a d'autre part les modèles constitués par un spectre discret (ou singulier) à un seul terme (modèle d'Einstein), lorsque la valeur de ω est grande ($\omega > 3$?); l'importance des oscillations se manifeste par la difficulté qu'on rencontre dans le calcul de l'intégrale complexe de GM. On arrive tant bien que mal à un résultat admissible par le changement de verticale. Mais une étude systématique de ce modèle extrême serait nécessaire.

2) Modèles réels

Nous ne discuterons pas ici du choix des modèles destinés à représenter les propriétés des modérateurs usuels, car il s'agit seulement ici de voir si leur calcul soulève ou non des difficultés. Nous n'avons évidemment pas essayé tous les modèles figurant dans la littérature, mais l'expérience déjà acquise permet d'affirmer qu'ils peuvent en principe être tous traités, sauf peut-être certains modèles du type Einstein pur (lesquels ne sont d'ailleurs jamais tout à fait réalistes).

Pour le graphite, on a pris un spectre du type purement continu, de la forme du spectre proposé par P.A. Egelstaff. Nous n'avons pas encore essayé les spectres comportant des termes singuliers, ni les modèles anisotropes (à traiter comme des mélanges), mais il est certain que seul en résultera un allongement de la durée de calcul.

Pour l'eau légère, on a traité d'une part des modèles purement discrets à plusieurs raies dont une à l'origine (type Nelkin), d'autre part des modèles mixtes discrets-continus.

Pour l'eau lourde, on a traité des modèles purement discrets à plusieurs raies (type Butler), en tenant compte séparément des atomes D et des atomes O.

Pour le béryllium, on a traité un modèle de type purement continu, avec un spectre de Debye.

Pour l'hydrure de zirconium, on a traité un modèle très voisin du modèle d'Einstein, avec cependant une raie à l'origine de poids 0,02. On a pu atteindre une précision 10^{-3} , en prenant comme abscisse d'intégration complexe 0,1 alors que ζ_0 valait 0,38.

Plusieurs de ces modèles ont été calculés pour différentes températures.

3) Précision et temps de calcul.

Si cela est possible, on réalise en principe les calculs avec $E_0 = 10^{-3}$. L'erreur E_2 imposée sur $\times \mu_2$ (la quantité la plus inexacte) dépend alors de A (cf V.8), mais assez peu. On constate que l'écart sur $\times \mu_2$ entre LM et GM dans la zone de recouvrement se situe entre 10^{-3} et 10^{-4} selon les cas, ce qui satisfait largement à la condition imposée. Il en est de même pour les contrôles par intégration.

Le temps de calcul est variable selon la complexité du modèle et la précision demandée. Il se situe généralement autour de 3 à 5 minutes pour LM d'une part et pour GM d'autre part (davantage s'il y a mélange).

4) Conclusions.

Le fait de disposer de codes "autonomes" pour le calcul des moments des thermaliseurs usuels présente à l'usage plusieurs avantages.

Tout d'abord, il permet de dresser en quelques minutes de calcul (IBM 7094) une table de la section efficace et des deux premiers moments de n'importe quel modèle, avec une précision relative qui atteint partout le millième. En outre, du fait que les calculs pour les différentes énergies sont menés en parallèle, les erreurs varient assez régulièrement d'un point au suivant et on peut dériver numériquement avec une bonne précision les fonctions calculées.

Les moments ainsi obtenus peuvent servir comme "fonctions de sensibilité" des modèles. Mais nous les utilisons essentiellement pour ajuster sur les lois exactes de thermalisation des "modèles secondaires", selon un procédé qui est développé dans un autre rapport CEA. C'est cet objectif principal qui nous a conduit à développer le code MOTHER.

Etant donnée la précision atteinte, un autre intérêt pratique est de pouvoir se servir des résultats pour contrôler les calculs de sections différentielles en énergie qui sont menés par ailleurs avec les différents codes existants. Du moins contrôle-t-on ainsi certaines intégrales importantes effectuées sur les sections différentielles. Il est à noter que, du fait de la microréversibilité, on peut

interpréter m_1 et m_2 comme le résultat de l'action de l'opérateur de thermalisation sur deux flux thermiques particuliers qui sont: le flux de Maxwell multiplié par y et le flux de Maxwell multiplié par $\frac{y^2}{2}$. Tout code de calcul de flux homogène doit nécessairement pouvoir effectuer ces opérations: on peut donc dire qu'on contrôle ce type de code dans deux cas particuliers.

Manuscrit reçu le 18 juin 1964

BIBLIOGRAPHIE

- G. PLACZEK, The Scattering of neutrons by systems of heavy nuclei,
Phys. Rev. 86 377 - 388 (1952)
- G.C. WICK, The Scattering of neutrons by systems containing light nuclei,
Phys. Rev. 94 1228 - 1242 (1954)
- L. VAN HOVE, Correlations in space and time and Born approximation scattering in
systems of interacting particles,
Phys. Rev. 95 249 - 262 (1954)
- A.C. ZEMACH and R.J. GLAUBER, Dynamics of neutron Scattering by molecules.
Neutron diffraction by gases.
Phys. Rev. 101 118 - 136 (1956)
- M.S. NELKIN, D.E. PARKS Effects of chemical binding on nuclear recoil,
Phys. Rev. 119 1060 - 1068 (1960)
- S.N. PUROHIT, Neutron thermalization in a crystalline medium in incoherent
approximation, Conf. on Neutron Therm., BNL 719, I, 203-37 (1962)
- S.N. PUROHIT and A.K. RAJAGOPAL, Scattering of thermal neutrons in the Doppler
approximation, Conf. on Neutron Therm., BNL 719, I, 238-75 (1962)
- P. SCHOFIELD, The thermal neutron Scattering law and neutron thermalization,
BNL 770 (1962)
- P.A. EGELSTAFF, The Physics of the thermal neutron Scattering law, AERE-NP/GEN 29
(1962)
- M. CADILHAC, Modèles simples de thermaliseurs, Note CEA n° 439 (1963)
- J.L. SOULÉ, Les lois de diffusion, Note CEA n° 440 (1963)
- M. CADILHAC, Méthodes théoriques pour l'étude de la thermalisation des neutrons
dans les milieux absorbants infinis et homogènes.
Rapport CEA n° 2368 (1964)

FIN