

INSTITUTO DE ENERGIA ATÔMICA
SECRETARIA DA INDÚSTRIA, COMÉRCIO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

ATRITO INTERNO EM DIÓXIDO DE URÂNIO

PEDRO IRIS PAULIN FILHO

Dissertação apresentada ao Instituto de Energia Atômica como parte dos requisitos para obtenção do grau de "Mestre - Área de reatores Nucleares de Potência e Tecnologia do Combustível Nuclear".

Orientador: Dr. Clauer Trench de Freitas

São Paulo
1979

INSTITUTO DE ENERGIA ATÔMICA

SECRETARIA DA CULTURA, CIÊNCIA E TECNOLOGIA
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Atrito Interno em Dióxido de Urânio

PEDRO IRIS PAULIN FILHO



Dissertação apresentada ao Instituto de Energia Atômica como parte dos requisitos para obtenção do grau de "Mestre - Área Reatores Nucleares de Potência e Tecnologia do Combustível Nuclear".

Orientador: DR. CLAUER TRENCH DE FREITAS

SÃO PAULO

1979

INSTITUTO DE ENERGIA ATÔMICA

Aos meus pais e à Angela

A G R A D E C I M E N T O S

Agradecemos:

Ao Dr. Clauer Trench de Freitas pela orientação e incentivo no desenvolvimento dos trabalhos.

Ao Dr. Kunihiko Iwasaki pelas discussões e sugestões.

A todos os colegas e colaboradores do Centro de Metalurgia Nuclear que, direta e indiretamente, colaboraram na execução do presente trabalho.

Ao Programa de Recursos Humanos para o Setor Nuclear pelo apoio financeiro.

Ao Dr. Rômulo Ribeiro Pieroni, superintendente do Instituto de Energia Atômica, pelas facilidades/oferecidas, sem as quais este trabalho não poderia ser realizado.

R E S U M O

As propriedades anelásticas do dióxido de urânio foram estudadas através de medidas de atrito interno, a baixas frequências de sollicitação (da ordem de 1Hz). O estudo foi realizado na faixa de temperatura de - 160 a 400°C.

Estudou-se o efeito da variação de estequiometria através da oxidação das amostras, o que afeta a estrutura de defeitos presente no dióxido de urânio não-estequiométrico. Observou-se a presença de largo e irregular / pico de atrito interno a baixas temperaturas devido a oxidação.

Cálculos da energia de ativação indicam a ocorrência de vários processos de relaxação e assumindo-se a existência de um pico entre - 80 e - 70°C o valor obtido para a energia de ativação (0,54 eV) é consistente / com os valores observados, a frequências médias e altas, para reorientação de defeitos induzidos por tensão.

O efeito da microestrutura nas propriedades anelásticas, foi estudado em dióxido de urânio estequiométrico, através da variação do tamanho de grão e porosidade. Estes parâmetros afetam as medidas de atrito inter

no a altas temperaturas. A variação do atrito interno acima de 340°C é atribuída a fenômenos de relaxação por contorno de grão.

A B S T R A T

The uranium dioxide anelastic properties were studied measuring internal friction at low frequencies (of the order of 1 Hz). The work was developed in the - 160 to 400°C temperature range.

The effect of stoichiometry variation was studied oxidizing the sample with consequent change of the defect structure originally present in the non-stoichiometric uranium dioxide. The presence of a wide and irregular peak due to oxidation was observed at low temperatures.

Activation energy calculations indicated the occurrence of various relaxation processes and assuming the existence of a peak between - 80 and - 70°C, the absolute value obtained for the activation energy (0,54 eV) is consistent with the observed values determined at medium and high frequencies for the stress induced reorientation of defects.

The microstructure effect on the anelastic properties was studied for stoichiometric uranium dioxide, by varying grain size and porosity. These parameters have influence on the high temperature measurements of internal friction. The internal friction variation for

temperatures higher than 340°C is thought to be due to grain boundary relaxation phenomena.

S U M Á R I O

	pag.
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1. Considerações Gerais.....	1
1.2. Objetivos.....	4
2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	5
2.1. Teoria da Anelasticidade.....	5
2.1.1. Anelasticidade.....	5
2.1.2. Efeitos Anelásticos.....	8
2.1.3. Tensão ou Deformação Estática.....	8
2.1.4. Tensão ou Deformação Cíclica.....	10
2.1.5. Atrito Interno.....	11
2.1.6. Efeito da Temperatura.....	14
2.2. Fenômenos Anelásticos devido a Defeitos Estruturais..	16
2.2.1. Atrito Interno devido a Defeitos Puntiformes ou Aglomerados de Defeitos.....	16
2.2.2. Atrito Interno devido a Contorno de Grão.....	19
2.2.3. Atrito Interno em Materiais Cerâmicos.....	21
2.3. O Sistema Oxigênio-Urânio.....	26
2.3.1. Estrutura Cristalina do Dióxido de Urânio.....	26
2.3.2. Diagrama de Equilíbrio do Dióxido de Urânio...	28
2.3.3. Aspectos Termodinâmicos.....	32
2.3.4. Não-Estequiometria e Estrutura de Defeitos....	41

3. DESCRIÇÃO EXPERIMENTAL.....	46
3.1. Pêndulo de Torção.....	46
3.1.1. Determinação do Atrito Interno.....	48
3.1.2. Determinação do Período.....	52
3.1.3. Medida da Temperatura.....	52
3.2. Preparação das Amostras.....	53
3.2.1. Matéria Prima.....	54
3.2.2. Método de Conformação.....	54
3.2.3. Sinterização.....	56
3.2.4. Tratamentos Térmicos.....	59
3.2.5. Caracterização Microestrutural.....	60
3.2.6. Corte e Lapidação.....	67
4. RESULTADOS EXPERIMENTAIS E DISCUSSÕES.....	68
4.1. Variação do Atrito Interno com a Temperatura.....	68
4.1.1. Efeito da Variação da Estequiometria.....	68
4.1.2. Cálculo da Energia de Ativação.....	71
4.1.3. Efeito da Microestrutura.....	73
4.2. Variação do Período de Oscilação com a Temperatura..	79
5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	85
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	87

1. INTRODUÇÃO

1.1. CONSIDERAÇÕES GERAIS

A utilização do dióxido de urânio como combustível nuclear, nos reatores de potência comerciais, levou a intensas pesquisas a respeito de suas propriedades físicas, químicas e nucleares.

Dentro do estudo geral desenvolvido sobre as propriedades mecânicas, poucos trabalhos foram realizados acerca das propriedades anelásticas do dióxido de urânio, levando-se em consideração todos os parâmetros envolvidos.

O termo "anelasticidade" se refere a dependência da deformação em relação à tensão e ao tempo. Em estruturas sujeitas a cargas cíclicas ou vibrações, o atraso da deformação em relação à tensão causa uma dissipação de energia ou "amortecimento".

O termo "capacidade de amortecimento" / se refere à habilidade, mostrada por um material sujeito a esforços cíclicos, de dissipar energia por "atrito interno", ou seja, a habilidade de um sólido vibrante, completamente / isolado, de converter energia mecânica de vibração em calor.

Em geral o que ocorre é uma evolução de um sistema termodinâmico com o tempo, através do ajustamento de variáveis internas, para um novo estado de equilíbrio.

Portanto, o atrito interno é um fenômeno que ocorre dentro dos materiais, via variáveis internas / que envolvem processos de transportes como difusão atômica, relaxação de tensões através de contorno de grão, tensão induzindo ordenação, movimento de discordâncias e interações / magnéticas.

As principais técnicas utilizadas na verificação das propriedades anelásticas baseiam-se em três métodos de medida de atrito interno, os quais são:

- a) método do pêndulo de torção à baixas frequências (da ordem de Hz).
- b) método da barra ressonante à frequências médias (100 Hz a 100 kHz).
- c) método do pulso ultra-sônico, à altas frequências (ordem de MHz).

O método utilizado no desenvolvimento / do trabalho foi o do pêndulo de torção, à baixa frequência / de oscilação.

Na primeira parte do trabalho é desenvolvida uma análise da teoria de anelasticidade, onde são destacadas as bases matemáticas e equações que regem os fenômenos anelásticos e também são examinadas teoricamente as origens físicas da variação do atrito interno, devida aos defeitos existentes na estrutura cristalina e ao contorno de grão. É realizada também uma revisão teórica dos trabalhos desenvolvidos neste campo de pesquisa.

Devido ao fato da estrutura de defeitos existentes no dióxido de urânio não estequiométrico ainda não estar totalmente estabelecida, e tendo em vista que esta estrutura defeituosa provoca efeitos nos fenômenos anelásticos, foi efetuada uma análise do sistema oxigênio-urânio e da correspondente estrutura de defeitos.

A seguir foi feita uma descrição experimental do trabalho realizado, destacando-se o equipamento empregado e os procedimentos desenvolvidos na preparação das amostras.

Os resultados obtidos são expostos em forma de gráficos de atrito interno e frequência de oscilação em função da temperatura.

Finalmente, são apresentadas discussões de resultados, conclusões e sugestões para futuros trabalhos.

1.2. OBJETIVOS

O presente trabalho visa contribuir para o estudo do comportamento anelástico do dióxido de urânio a baixas frequências de sollicitação.

As propriedades anelásticas do UO_2 são verificadas através de medidas de atrito interno, na faixa de temperatura de -160 a $400^\circ C$, sendo estudados os efeitos dos principais parâmetros que podem dar origem aos fenômenos de relaxação. Assim, é verificada a influência da microestrutura, através das variações de tamanho de grão e porosidade, bem como o efeito da relação oxigênio-urânio, que afeta a estrutura de defeitos e fases presentes no sólido.

Os picos de atrito interno, observados em dióxidos de urânio estequiométrico e não estequiométrico, são analisados em função das variações microestruturais que afetam fortemente as propriedades dos sólidos, de uma forma geral.

2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1. TEORIA DA ANELASTICIDADE

2.1.1. ANELASTICIDADE

O estudo do comportamento dos sólidos , quando submetidos às solicitações mecânicas, realizado através de idealizações mecânicas e matemáticas, deu origem a vários modelos, onde se destacam os propostos por Voight e Maxwell. Entretanto, o que melhor descreve este comportamento é o do "sólido linear padrão", proposto por Zener⁽⁴²⁾, equivalente ao do "sólido anelástico padrão", proposto por Nowick⁽³⁰⁾.

Uma descrição formal da teoria de anelasticidade deve considerar a estrutura principal da teoria clássica de elasticidade, onde uma rigorosa proporcionalidade é assumida existir entre a tensão e a deformação em um sólido. Portanto, a deformação de um sólido perfeitamente / elástico é função unicamente da tensão aplicada, que pode ser representada pela lei de Hooke, a qual relaciona a tensão aplicada σ , a deformação ϵ , através de uma constante M , conhecida com módulo de elasticidade:

$$\text{onde} \quad \sigma = M \epsilon \quad (2.1)$$

$$\sigma = \frac{E \epsilon}{1 + \nu} \quad (2.2)$$

Estas equações definem o que se chama de "sólido elástico ideal" e nelas estão implícitas três condições que definem este comportamento, as quais são:

- 1) a cada valor de tensão aplicada corresponde um único valor de equilíbrio da deformação e vice-versa.
- 2) o valor de equilíbrio da deformação/é atingido instantaneamente.
- 3) a relação entre tensão e deformação é linear.

Existem certas situações onde para se atingir o equilíbrio deve ocorrer um processo de transporte, através do ajustamento de variáveis internas, que demandam um determinado tempo. Esta dependência da deformação (ou tensão), em obter um estado de equilíbrio, é que caracteriza o tipo de comportamento conhecido como anelasticidade.

Da definição de anelasticidade podem ser deduzidos três postulados:

a) a cada valor de tensão aplicada corresponde um único valor de equilíbrio da deformação e vice-versa.

b) o equilíbrio da deformação (ou tensão) é atingido somente após a passagem de tempo suficiente.

c) a relação entre tensão e deformação é linear.

Os dois primeiros postulados baseiam-se em conceitos termodinâmicos e cinéticos e são satisfeitos / por todo sólido termodinâmico. O terceiro postulado é incorporado à definição de anelasticidade para efeito de facilidade, pois a teoria torna-se bastante difícil de outra forma. Afortunadamente, o comportamento observado dos materiais a baixos níveis de tensão satisfaz o requisito de linearidade.

A evolução de um sistema termodinâmico/ com o tempo para um novo estado de equilíbrio, implícita no segundo postulado, é denominada relaxação. Quando a variável externa é mecânica (tensão ou deformação), o fenômeno é conhecido como relaxação anelástica ou relaxação mecânica.

2.1.2. EFEITOS ANELÁSTICOS

A equação que melhor descreve o comportamento anelástico é deduzida através do "sólido anelástico/padrão" e estabelece uma relação entre tensão e deformação, contendo linearmente as derivadas primeiras em relação ao tempo, da tensão e deformação:

$$\sigma + \tau_E \dot{\sigma} = M (\epsilon + \tau_\sigma \dot{\epsilon}) \quad (2.3)$$

onde:

σ é a tensão aplicada

ϵ é a deformação

τ_E é o tempo de relaxação a deformação constante

τ_σ é o tempo de relaxação a tensão constante

M é o módulo relaxado

Os efeitos anelásticos podem ser estudados de duas formas: sob tensão ou deformação estática, correspondente ao efeito elástico posterior, ou sob tensão ou deformação cíclica, que é o atrito interno (1).

2.1.3. TENSÃO OU DEFORMAÇÃO ESTÁTICA

Quando um sólido é submetido a uma ten-

são ou deformação estática, por exemplo, uma tensão constante aplicada no tempo $t = 0$, a equação (2.3) pode ser resolvida e a deformação será dada por:

$$\epsilon(t) = \epsilon_0 + (\epsilon_\infty - \epsilon_0) [1 - \exp(-t/\tau_0)] \quad (2.4)$$

onde:

$$\epsilon_\infty = \frac{\sigma_0}{M}$$

Esta variação da deformação com o tempo é esquematizada na figura 1, com a aplicação e remoção da tensão.

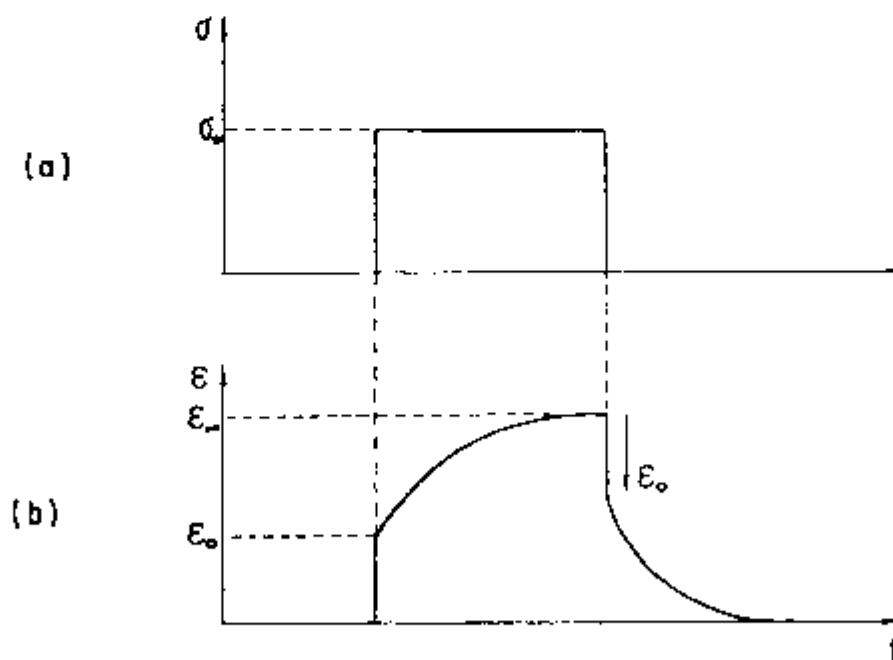


FIGURA 2.1. - Variação da tensão (a) e deformação (b) em função do tempo

σ = Tensão ϵ = Deformação t = Tempo

2.1.4. TENSÃO OU DEFORMAÇÃO CÍCLICA

Quando um sólido é submetido a um esforço ou tensão cíclica a uma frequência f , a tensão pode ser escrita na forma:

$$\sigma = \sigma_0 e^{i\omega t} \quad (2.5)$$

com a frequência angular $\omega = 2\pi f$, sendo f a frequência de sollicitação.

De acordo com o terceiro postulado do comportamento anelástico, a deformação correspondente a aplicação de uma tensão cíclica, será também cíclica, mas atrasada de um ângulo β em relação à tensão, e será da forma:

$$\epsilon = \epsilon_0 e^{i(\omega t - \beta)} \quad (2.6)$$

Substituindo as equações (2.5) e (2.6) na equação (2.3), temos:

$$\sigma = \mu \epsilon \quad (2.7)$$

onde μ é o módulo complexo:

$$\mu = M \frac{1 + i\omega\tau_\sigma}{1 + i\omega\tau_\epsilon} \quad (2.8)$$

e o ângulo de defasagem é dado pelo argumento do módulo:

$$\operatorname{tg} \beta = \frac{\omega \delta\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad (2.9)$$

onde: $\delta\tau = \tau_\epsilon - \tau_\sigma$ e $\tau = \tau_\epsilon \tau_\sigma$, sendo τ o tempo de relaxação médio. A defasagem passará por um máximo para a frequência

$$\omega = \frac{1}{\tau} \quad (2.10)$$

2.1.5. ATRITO INTERNO

Quando um sólido é colocado em oscilação livre, existe uma dissipação de energia por ciclo, dada por:

$$\Delta W = \oint \sigma \delta\epsilon = \int_0^{2\pi} \sigma \frac{\delta\epsilon}{dt} dt = \sigma_0 \epsilon_0 l \operatorname{sen} \beta \quad (2.11)$$

A energia elástica máxima armazenada / por ciclo é dada por:

$$W = \frac{1}{2} \epsilon_0 \sigma_0 \quad (2.12)$$

O atrito interno, Q^{-1} é definido pela relação entre a energia dissipada por ciclo, ΔW , e a energia elástica máxima, W , atingida durante o ciclo. Portanto:

$$\frac{\Delta W}{W} = 2 \pi \operatorname{sen} \beta \quad (2.13)$$

Como em geral, o ângulo de defasagem é muito pequeno ($\sim 10^{-5}$ rd) tem-se:

$$\frac{\Delta W}{W} = 2 \pi \beta \quad (2.14)$$

Sendo a quantidade $\frac{1}{2 \pi} \frac{\Delta W}{W}$ uma medida do ângulo de defasagem e portanto, do atrito interno. Assim:

$$Q^{-1} = \beta = \frac{1}{2 \pi} \frac{\Delta W}{W} \quad (2.15)$$

Pode-se mostrar também que as oscilações livres são amortecidas quando o atrito interno intervem (Figura 2), ou seja, a amplitude de oscilação decai com o tempo segundo uma lei logarítmica do tipo:

$$A(t) = A_0 \exp(-f_0 t \delta) \quad (2.16)$$

onde $\delta = \pi \operatorname{tg} \beta = \pi \beta \quad (2.17)$

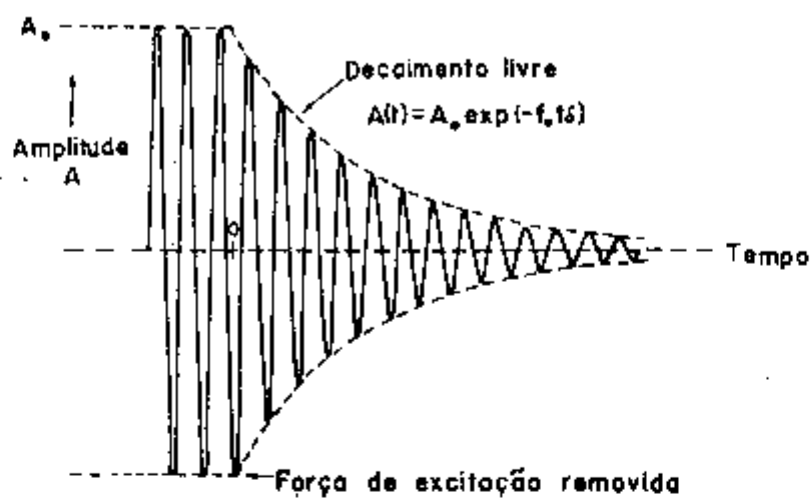


FIGURA 2.2. - Decaimento Livre de Vibrações Naturais de um Sólido Anelástico.

Dimensionalmente a quantidade δ representa o logaritmo natural da razão de n amplitudes sucessivas, ou seja:

$$\delta = \frac{1}{n} \ln \left(\frac{A_0}{A_n} \right) \quad (2.18)$$

Das equações (2.17) e (2.18) tem-se:

$$g = \frac{\delta}{\pi} = \frac{1}{n \pi} \ln \left(\frac{A_0}{A_n} \right) \quad (2.19)$$

que substituída na equação (2.15) dá a expressão para o cálculo do atrito interno

$$Q^{-1} = \frac{1}{n \Pi} \ln \left(\frac{A_0}{A_n} \right) \quad (2.20)$$

2.1.6. EFETO DA TEMPERATURA

Pode-se dizer que a frequência de salto/ dos átomos varia com a temperatura segundo um fator (denominado de Boltzmann) dado pela expressão $\exp(-Q/KT)$ (9).

A ocorrência de um processo de relaxação só é possível após superar uma barreira de energia e a taxa de relaxação τ^{-1} , pode ser expressa pela relação de Arrhenius do tipo:

$$\tau^{-1} = v_0 e^{-Q/KT} \quad (2.21)$$

onde v_0 é um fator de frequência, Q a energia de ativação e K a constante de Boltzmann.

A equação (2.21) pode ser escrita também pela relação:

$$\tau = \tau_0 e^{Q/RT} \quad (2.22)$$

A importância desta relação é que a quantidade τ pode ser variada sob uma larga faixa, simplesmente

te pela mudança de temperatura.

Desta relação podemos escrever:

$$\ln \omega \tau = \ln \omega_0 \tau_0 + (Q/K) (1/T) \quad (2.23)$$

que é uma relação linear entre $\ln \omega \tau$ e o recíproco do valor da temperatura absoluta.

Para o caso de um pico de Debye, a condição na qual $\ln \omega \tau = 0$, isto é, no máximo do pico, tem-se:

$$\ln \omega_0 \tau_0 + (Q/K) (1/T_p) = 0 \quad (2.24)$$

onde T_p é a temperatura do pico.

Se uma série de picos é obtida para diferentes frequências, uma linha reta pode ser traçada de $\ln \omega \times 1/T_p$, cuja inclinação é Q/K , sendo este o método mais comum para obtenção da energia de ativação do processo de relaxação.

A energia de ativação pode ser calculada também através da largura do pico, definida como a separação entre os pontos onde $Q^{-1} = \frac{1}{2} Q_m^{-1}$, onde Q_m^{-1} é o valor máximo do atrito interno. A energia de ativação é dada pela

seguinte relação:

$$\Delta\left(\frac{1}{T}\right) = 2,63 \frac{K}{Q} \quad (2.25)$$

Este método é válido somente quando o pico de relaxação pode ser descrito por uma única expressão de relaxação de Debye.

2.2. FENÔMENOS ANELÁSTICOS DEVIDO A DEFEITOS ESTRUTURAIS

As origens físicas dos processos de relaxação anelástica, através das já mencionadas variáveis internas, podem ser analisadas teoricamente em relação aos defeitos existentes na estrutura cristalina dos materiais, como defeitos puntiformes e contornos de grão. Uma revisão bibliográfica a respeito da influência destas variáveis, no comportamento anelástico dos materiais cerâmicos, é realizada com ênfase nos trabalhos desenvolvidos em dióxidos de urânio.

2.2.1. ATRITO INTERNO DEVIDO A DEFEITOS PUNTIFORMES OU AGLOMERADOS DE DEFEITOS

As considerações que formam a base do

comportamento anelástico do sólido linear padrão, podem ser aplicadas aos sólidos que contêm defeitos puntiformes ou aglomerados de defeitos. Esta condição é que um defeito / submetido a uma tensão externa pode passar por uma mudança / configuracional, adicional a uma deformação do espécime.

Entretanto, a existência de uma deformação devido a um rearranjo do defeito, dentro de um sólido, por si só não é suficiente. A deformação devido ao defeito deve obedecer a uma equação de taxa, de tal forma que se torne dependente do tempo.

Vários problemas devem ser considerados/ na investigação das propriedades anelásticas correspondentes a defeitos puntiformes em cristais. O principal deles consiste em saber, quando um defeito irá dar origem a um comportamento anelástico. Tal problema é solucionado por um estudo termodinâmico.

Um estudo termodinâmico poderá indicar quando um defeito, dentro de um cristal, irá diminuir sua energia pela ocupação de uma posição cristalográfica diferente. Terá tal estudo também possibilidade de prever quando/ ocorrerá um rompimento energético das posições disponíveis / para o defeito, como resultado da aplicação de uma tensão externa ao espécime contendo defeitos.

A resposta a estas questões foram dadas pelos métodos de classificação de defeitos, desenvolvidos / por WACHTMAN et alii (39), chamados respectivamente de aproximação cristalográfica e de método do dipolo elástico, desenvolvido por NOWICK e HELLER (31).

Quando um cristal contendo defeitos exibe efeitos de relaxação, três características são importantes na obtenção de resultados experimentais:

- a) a "tensão de relaxação" determinada / pelo número de defeitos presentes no cristal;
- b) o "tempo de relaxação" que é uma medida da velocidade com que o novo estado de equilíbrio é atingido;
- c) a "dependência do efeito de relaxação com a orientação".

A primeira observação do fenômeno de relaxação devido a defeitos puntiformes foi realizada por / Snoek (35) cuja teoria, em essência, considera que um átomo / de soluto intersticial, em um metal bcc, constitui um dipolo elástico de simetria tetragonal, podendo assim produzir relaxação anelástica, por um processo de tensão induzindo ordena

ção.

2.2.2. ATRITO INTERNO DEVIDO A CONTORNO DE GRÃO

O estudo de fenômenos anelásticos devido à contorno de grão foi realizado principalmente com metais e ligas contendo agregados policristalinos de toda a natureza, cobrindo uma larga distribuição de tipos de contorno e orientação (30).

O fenômeno de relaxação devido à contorno de grão foi previsto por Zener, com base numa variedade / de evidências de que o escoamento viscoso poderia ocorrer entre dois cristais adjacentes. Na descrição de Zener a tensão de cisalhamento, que atua inicialmente em um contorno, é gradualmente reduzida através de escorregamento viscoso, enquanto os extremos do contorno sustentam mais e mais a força de cisalhamento total. A figura 3 mostra esquematicamente/ como este processo ocorre.

O grão 1 desliza sobre o grão 2 sob a influência de uma tensão de cisalhamento aplicada, originando/ tensões opostas nas extremidades dos contornos e no interior dos grãos 3 e 4.

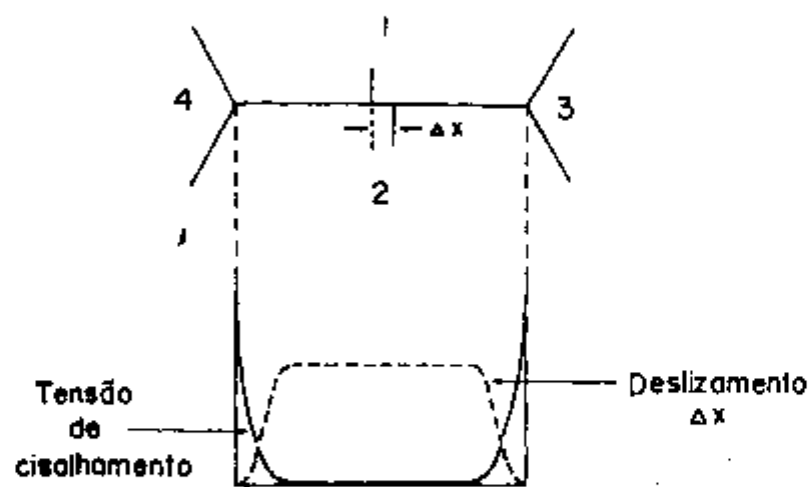


FIGURA 2.3. - Relaxação da tensão de cisalhamento, inicialmente uniforme, por deslizamento de contorno de grão.

Este processo de relaxação tende a de cair quando a tensão de cisalhamento atingir zero através do comprimento do contorno. A baixos níveis de tensão, a dis torção nas extremidades do contorno é puramente elástica. / Após remoção da tensão aplicada, a distorção submete o con torno a uma tensão de cisalhamento reversa e produz o efeito elástico posterior.

Se a relaxação do contorno de grão é de vida ao cisalhamento entre grãos, tal movimento pode ser observado diretamente como um deslocamento nos contornos de grão em bicristais ou policristais. Alguns experimentos /

mostram que isto ocorre numa escala muito maior que em experimentos de atrito interno ($\sim 10^8$ Å), desde que os movimentos devem ser de pelo menos 100 Å para serem detectados.

Embora os trabalhos experimentais de relaxação de contorno de grão sejam realizados a bastante tempo, uma teoria atomística quantitativa do fenômeno, ou mesmo o mecanismo envolvido, não estão ainda perfeitamente estabelecidos.

O primeiro trabalho experimental que confirma o modelo de escoamento viscoso proposto por Zener foi realizado por Kê (22), o qual obteve resultados que complementados posteriormente levaram a uma série de ambiguidades, tornando o fenômeno bem mais complexo do que o inicialmente previsto por Kê.

2.2.3. ATRITO INTERNO EM MATERIAIS CERÂMICOS

As propriedades anelásticas dos materiais cerâmicos, verificadas através de medidas de atrito interno em função da temperatura, frequência e porosidade foram objeto de uma revisão bibliográfica realizada por MARLOWE et alii (26) e ASTBURY et alii (5).

As verificações das propriedades anelás

ticas do dióxido de urânio não tem sido frequentes, quando se observa os trabalhos publicados sobre atrito interno a frequências altas e médias de vibração.

Um dos principais estudos realizados em dióxido de urânio foi desenvolvido por KASIGUTI et alii (16) à altas frequências de vibração. Os resultados obtidos mostram um pico largo cuja temperatura não é claramente estabelecida. Embora a energia de ativação não tenha sido determinada exatamente, calcula-se um valor menor que 0,1 eV, o que leva a considerar que este pico seja devido a relaxação/de discordâncias.

NAGELS et alii (28) investigaram o atrito interno do dióxido de urânio na faixa de frequência médias, onde observaram a presença de dois picos, que foram associados a reorientação de defeitos produzidos por oxidação.

No trabalho realizado por SOCINO et alii (36), em monocristais de UO_2 , o efeito de orientação do espécime é observado a frequências médias de vibração. Nota-se o aparecimento de picos de atrito interno cuja energia de ativação é calculada em 0,47 eV, o qual se julgou devido a reorientação de defeitos introduzidos por oxidação.

Os picos de relaxação observados em dióxido de urânio não estequiométrico foram bem estabelecidos /

por DOMOTO et alii (11), na faixa de temperatura de -196 a 200°C , incluindo-se também a fase U_4O_9 .

Os resultados foram obtidos a altas frequências de oscilação, mostrando a presença de um pico de atrito interno a temperaturas abaixo de -100°C ; observou-se/ser a altura do pico proporcional a quantidade da fase U_4O_9 e sensível à deformação por compressão. Afirma-se que o pico pode ser causado por relaxação devido ao movimento de discordância.

A temperaturas acima do ambiente são observados dois picos de atrito interno, sendo o primeiro atribuído a transição de fase para U_4O_{9-y} . O segundo pico observado, a cerca de 105°C , é atribuído à relaxação de oxigênio/em excesso na rede cristalina. Em uma curva de Arrhenius, este segundo pico está próximo à linha extrapolada utilizando-se os valores obtidos por Socino, que resulta numa energia de ativação de $11,5$ Kcal/mol.

Embora o efeito da microestrutura afete de uma maneira geral as propriedades dos materiais (20), poucos foram os trabalhos realizados relacionando os fenômenos/anelásticos à variação de microestrutura. FORLANO et alii (12) desenvolveram um trabalho no sentido de observar a comportamento elástico e anelástico do dióxido de urânio à temperatura ambiente, em função de aspectos microestruturais /

tais como porosidade, tamanho de grão e fases presentes.

O estudo do comportamento anelástico a altas temperaturas estão relacionados à relaxação de contornos de grão como mostrado por CHANG ⁽⁸⁾, para vários materiais cerâmicos.

Os trabalhos desenvolvidos a altas temperaturas com materiais cerâmicos de interesse nuclear, realizados por HALL ⁽¹⁵⁾ e PADEL et alii ⁽³³⁾, englobam carbonetos, nitretos e óxidos de urânio e plutônio.

O trabalho de HALL para dióxido de urânio estequiométrico, em frequências médias, mostrou a presença de um pequeno pico de atrito interno a 680°C, que foi atribuído a relaxação de contorno de grão.

Os trabalhos desenvolvidos por PADEL, a altas frequências de oscilação, mostrando a variação do atrito com a temperatura para dióxido de urânio indicam a presença de um pico de atrito interno que se localiza entre 400 e 700°C, dependendo da densidade do material. Observa-se também um aumento do atrito interno a temperaturas acima de 1000°C, o qual provavelmente seria ligado a transição frágil-dúctil.

Na literatura existente sobre as proprie

dades anelásticas observa-se a total inexistência de experimentos realizados a baixas frequências de oscilação, o que poderia confirmar muitos dos resultados obtidos a frequências altas e médias. A falta de experimentos nesta faixa de frequência deve ser creditada, inicialmente, à dificuldade de preparação das amostras e também a impossibilidade de se atingir altas temperaturas nas aparelhagens existentes.

2.3. O SISTEMA OXIGÊNIO-URÂNIO

A compreensão do sistema de fases oxigênio-urânio e de suas propriedades termodinâmicas é de fundamental importância na indústria nuclear, devido ao crescente aumento do uso de dióxido de urânio como combustível. Esta importância pode ser apreciada melhor quando consideramos / que muitas propriedades físicas da fase UO_{2+x} dependem da relação oxigênio-urânio do óxido, que por sua vez depende da pressão parcial de oxigênio do meio (ao qual está exposto). Por exemplo, propriedades dependentes da pressão parcial de oxigênio são as condutividades elétrica e térmica do óxido, bem como a difusão dos seus constituintes e solutos (32).

O alto ponto de fusão do óxido de urânio e sua estabilidade sob irradiação levou-o a ser usado como combustível nuclear em reatores comerciais. Uma larga faixa de estudos físicos e químicos tem sido estimulada por estas circunstâncias e pela natureza da fase dióxido de urânio. Uma complexa sequência de fases O-U pode ser formada durante a preparação do pó ou durante o processo de sinterização, afetando a microestrutura e as propriedades do produto final.

2.3.1. ESTRUTURA CRISTALINA DO DIÓXIDO DE URÂNIO

Uma rede periódica tri-dimensional de

átomos em um sólido cristalino constitui a rede cristalina / de uma substância.

A estrutura da rede é restrita pela es-
tequiometria do composto químico e pelo fato de que os vizi-
nhos mais próximos de um íon particular, irão ser íons de
cargas opostas, para maximizar a energia de Coulomb da estru-
tura (20).

A estrutura do tipo fluorita consiste /
de uma rede cúbica empacotada de cations na qual todas as po-
sições tetraedrais estão ocupadas por anions, como ilustrado
na figura 2.4.

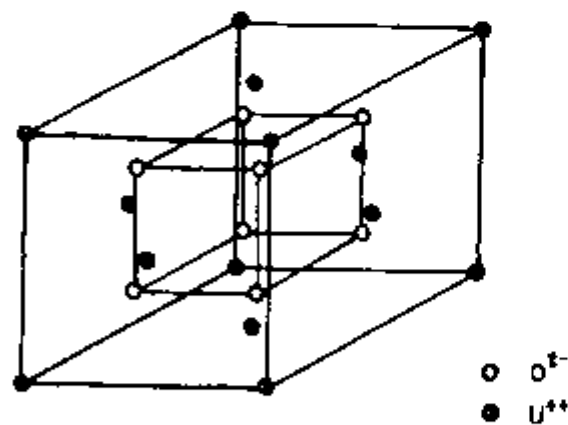


FIGURA 2.4. - Estrutura cristalina do tipo fluorita.

Esta estrutura é importante porque ela

é a fase estável do dióxido de urânio em uma considerável / faixa de temperaturas. O UO_2 cristalino consiste de íons U^{4+} e O^{2-} , onde os íons oxigênio são arranjados numa rede cúbica simples e os íons U^{4+} formam uma sub-rede do tipo cúbica de face centrada.

2.3.2. DIAGRAMA DE EQUILÍBRIO DO DIÓXIDO DE URÂNIO

O sistema oxigênio-urânio é um dos mais complexos sistemas de óxidos metálicos devido ao fato do íon urânio existir com um número de diferentes estados de valência.

Os óxidos de urânio mostram uma larga faixa de não-estequiometria, onde a relação oxigênio-urânio/ (O/U) difere substancialmente de 2,00, ainda que o sistema consista de uma única fase. O sistema U-O pode apresentar/ uma variedade de compostos de fórmula geral M_aX_b . A distinção entre uma verdadeira solução sólida de oxigênio no óxido, onde a relação O/U é variável continuamente dentro uma região de fase única, e uma mistura de dois compostos de diferentes relações O/U, pode ser feita de 2 modos:

- a) pela observação metalográfica das duas fases;
- b) pela medida da pressão parcial de

oxigênio, que é independente da relação O/U em uma mistura de duas fases, quando a medida é realizada a temperatura constante. Ao contrário, numa solução sólida, de uma única fase, a pressão parcial de oxigênio, é fortemente dependente da relação O/U.

Parte do diagrama de equilíbrio do sistema oxigênio-urânio (23) é mostrado na figura 2.5. As linhas verticais internas ao diagrama representam compostos, onde apenas dois são mostrados na figura. O composto estável UO_2 aparece quando $O/U = 2,00$. Em $O/U = 2,25$, o óxido U_4O_9 é formado. Adição de oxigênio ao U_4O_9 produz U_5O_{13} ($O/U = 2,6$). Outros compostos com uma relação O/U maior são o U_3O_8 e UO_3 . Estes dois últimos óxidos não são de muita importância como combustíveis, mas são encontrados no reprocessamento de combustíveis e na preparação do material.

As áreas sombreadas da figura 2.5. indicam regiões de uma única fase dos óxidos não estequiométricos UO_{2+x} e U_4O_{9-y} . Acima de aproximadamente $400^\circ C$ e dependendo da relação O/U, o óxido de urânio pode dissolver / oxigênio intersticialmente na rede cristalina, para formar / dióxido de urânio hiper-estequiométrico, UO_{2+x} . No resfriamento, o UO_{2+x} desproporcionar-se-á em uma forma menos oxida

da de UO_{2+x} e em U_4O_9 , ou mais exatamente em U_4O_{9-y} não estequiométrico, onde y é muito pequeno.

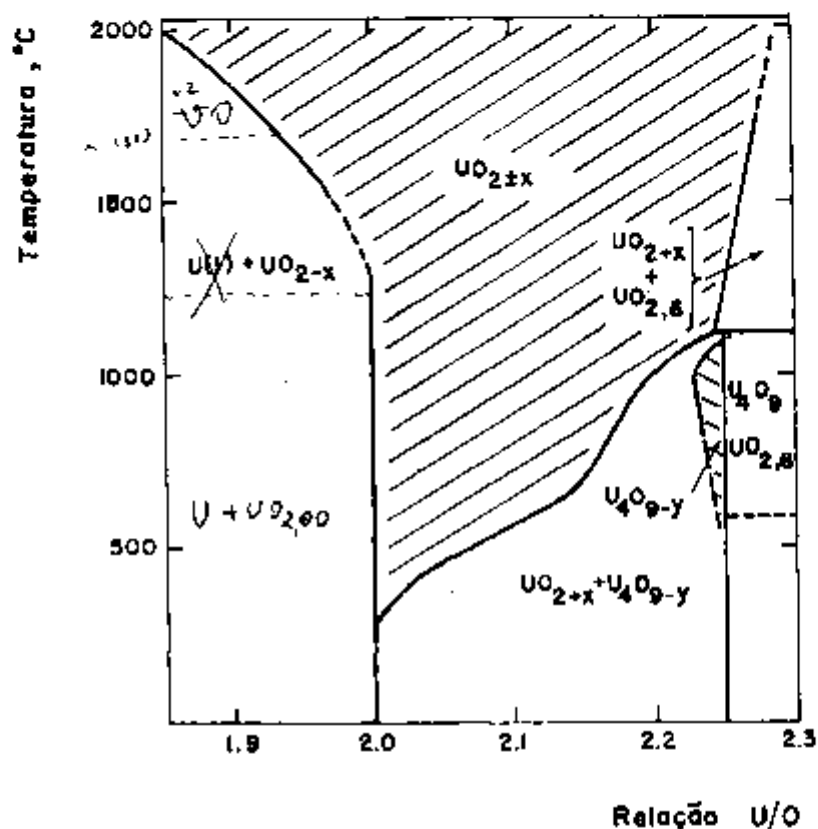


FIGURA 2.5. - Diagrama de Equilíbrio do sistema oxigênio-urânio.

Para temperaturas mais baixas o diagrama de equilíbrio pode ser melhor detalhado, observando-se o diagrama mostrado na figura 2.6. (37).

Neste diagrama são mostrados também as fases alotrópicas estáveis do dióxido de urânio, como o U_3O_8

e UO_3 . Observa-se na figura 2.6. que, para uma relação O/U menor que 2,00, a presença de várias fases do urânio metálico em equilíbrio com o dióxido de urânio estequiométrico. Para O/U maior que 2,00 observa-se a presença, a baixas temperaturas, da fase UO_{2+x} que transforma em $\text{UO}_2 + \text{U}_4\text{O}_9$ ao redor de 220°C .

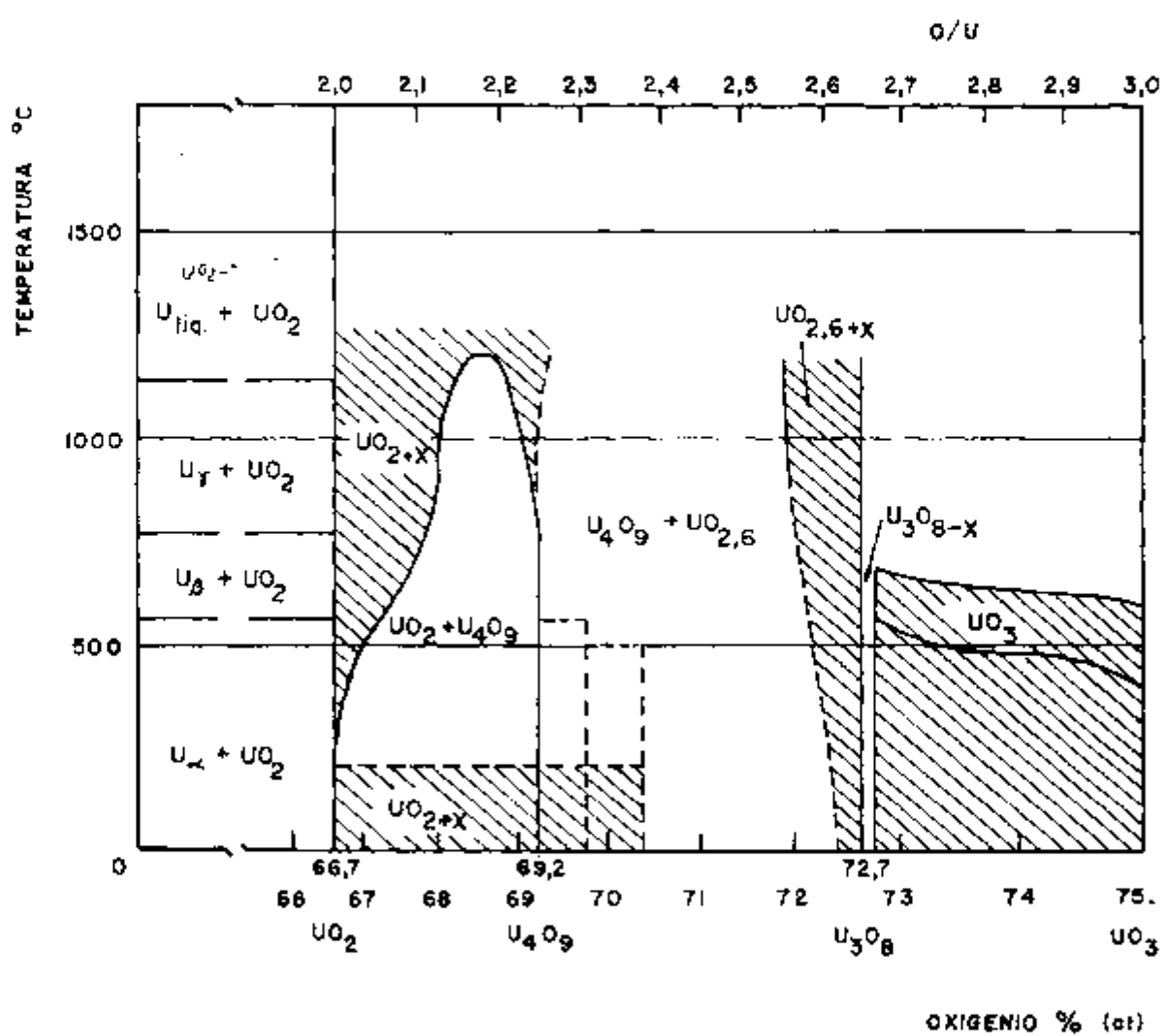


FIGURA 2.6. - Diagrama de equilíbrio do sistema oxigênio-urânio.

2.3.2. ASPECTOS TERMODINÂMICOS

Se um sistema contém mais que um componente, seu estado termodinâmico é fixado por apenas duas propriedades. Num sistema de um único componente a energia interna U , é determinada especificando-se a entropia S , e o volume V , o que implica numa relação entre as diferenciais destas variáveis dada por:

$$dU = \left(\frac{\delta U}{\delta S}\right) dS + \left(\frac{\delta U}{\delta V}\right) dV = TdS - pdV \quad (2.26)$$

Se o sistema contém mais de um componente e se a proporção relativa dos componentes muda quando U , S e V são aumentados, então U dependerá da quantidade de cada componente e será dada por:

$$dU = \left(\frac{\delta U}{\delta S}\right)_{V, N_i} dS + \left(\frac{\delta U}{\delta V}\right)_{S, N_i} dV + \sum_i \left(\frac{\delta U}{\delta N_i}\right)_{S, V, N_j} dN_i \quad (2.27)$$

onde N_i é a quantidade de cada componente.

Em virtude das definições de H , F e G , onde H é a entalpia, F é a energia livre de Helmholtz e G , a energia livre de Gibbs, quando modificadas para sistemas de multicomponentes, o potencial químico é dado por:

$$\begin{aligned}
\mu_i &= \left(\frac{\delta U}{\delta N_i} \right)_{S, V, N_j} \\
&= \left(\frac{\delta H}{\delta N_i} \right)_{S, P, N_j} \\
&= \left(\frac{\delta F}{\delta N_i} \right)_{T, V, N_j} \\
&= \left(\frac{\delta G}{\delta N_i} \right)_{T, P, N_j}
\end{aligned}
\tag{2.28}$$

Se os componentes de uma mistura podem ser convertidos de um para o outro (como em uma reação química ou em um processo produtor de defeitos em cristais), a quantidade N_i irá, com o devido tempo, atingir valores de equilíbrio. No estado de equilíbrio químico, não existe uma tendência espontânea para a composição de uma mistura mudar.

Uma descrição quantitativa do equilíbrio químico pode ser obtida da segunda lei da termodinâmica. Em um sistema isolado (isto é, onde U e V são fixos), o estado mais provável, ou de equilíbrio, é aquele onde a entropia é máxima. Se o sistema consiste de uma mistura de espécies capazes de se transformarem uma em outra, a entropia atinge um máximo numa composição particular.

Considerando uma mistura de reagentes / restrita a um sistema isolado, quando o equilíbrio é atingido $dS = 0$ e, sendo isolado, $dU = dV = 0$ para qualquer mudança de composição. Da equação 2.27. teremos:

$$\sum_i \mu_i dN_i = 0 \quad (2.29)$$

Embora a equação 2.29. seja o ponto inicial para cálculos termodinâmicos de equilíbrio, ela não é conveniente para analisar o equilíbrio de defeitos em cristais, devido à dificuldade de se delinear claramente as espécies e as reações envolvidas.

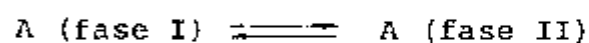
Medidas de equilíbrio em cristais ou sistemas cristalinos, especificam a temperatura e pressão melhor que a entropia e o volume. O equilíbrio pode ser convenientemente descrito em termos de energia livre de Gibbs, na qual T e p são variáveis naturais.

Para um sistema em equilíbrio, a variação da energia livre de Gibbs deve ser zero, ou:

$$(dG)_{T,p} = 0 \quad (2.30)$$

As equações 2.29 e 2.30. podem ser usadas como base para determinações de equilíbrio. Quando a

equação 2.29. é empregada, importantes relações podem ser obtidas. Considerando o equilíbrio de duas fases, num sistema de um único componente, teremos no equilíbrio:



A condição de equilíbrio, equação 2.29. torna-se:

$$\mu_A^I dN_A^I + \mu_A^{II} dN_A^{II} = 0 \quad (2.31)$$

onde μ_A^I e μ_A^{II} são os potenciais químicos da substância A nas fases I e II, respectivamente.

Desde que o sistema contém uma massa total A, uma perda de A numa fase implica num ganho equivalente de A na outra fase, ou $dN_A^I = -dN_A^{II}$. Com esta restrição, a equação 2.31. torna-se:

$$\mu_A^I = \mu_A^{II} = \dots \quad (2.32)$$

Em geral, a condição de equilíbrio químico requer que o potencial químico de todos os componentes/ seja o mesmo em todas as fases. Assim:

$$\mu_i^I = \mu_i^{II} = \dots \quad (2.33)$$

e para aqueles componentes que são ligados por uma reação / química

$$\sum v_i \mu_i = 0 \quad (2.34)$$

onde v_i são os coeficientes da reação.

Para determinar o potencial químico μ pela equação $\mu = \left(\frac{\delta G}{\delta N_i} \right)_{T,p,N_j}$, devemos obter a energia livre de Gibbs total do equilíbrio da mistura. Como a energia livre não é uma quantidade absoluta, seu valor é referido a um estado de referência arbitrário ou estado padrão. O estado padrão de um gás ideal é definido para uma substância a uma temperatura T , na qual estamos interessados e a uma pressão p_0 (que usualmente é tomada como sendo 1 atm).

O método para preparação de uma mistura em equilíbrio a partir dos componentes puros consiste, numa primeira fase, numa expansão ou compressão isotérmica e reversível de cada um dos gases puros para a pressão parcial / final, que eles tem na mistura em equilíbrio. A mudança na energia livre de Gibbs de cada componente, associada com esta fase, é determinada da relação:

$$\left(\frac{\delta G}{\delta p} \right) = v = \frac{RT}{p} \quad (2.35)$$

Se a pressão do gás é mudada de p_0 (no estado padrão) para p_i (a pressão parcial final na mistura em equilíbrio), a mudança associada na energia livre do componente i é:

$$G_i = G_i^0 + RT \ln \left(\frac{p_i}{p_0} \right) \quad (2.36)$$

Onde G_i é a energia livre de Gibbs por mol do componente i , no estado padrão.

A fase final é uma mistura isotérmica / reversível dos gases que, sendo ideais, não implica em mudança na entropia e entalpia, não havendo alteração na energia livre de Gibbs nesta segunda fase.

A energia livre da mistura em equilíbrio difere da energia livre dos componentes em seu estado / padrão, devido somente à fase de compressão - expansão, sendo dada por:

$$\mu_i = G_i^0 + RT \ln \left(\frac{p_i}{p_0} \right) \quad (2.37)$$

Uma das mais importantes propriedades / químicas, num óxido utilizado como combustível nuclear, é a pressão de oxigênio em equilíbrio na fase gasosa do elemento combustível (32).

O dióxido de urânio, de fórmula geral UO_{2+x} , a uma temperatura particular T, é caracterizado por uma pressão parcial de oxigênio gasoso, bem definida, correspondente ao equilíbrio termodinâmico gás-sólido.

A situação de equilíbrio termodinâmico/entre oxigênio gasoso e o óxido sólido é mostrada na figura 2.7.. Este equilíbrio pode ser expresso pelas reações:

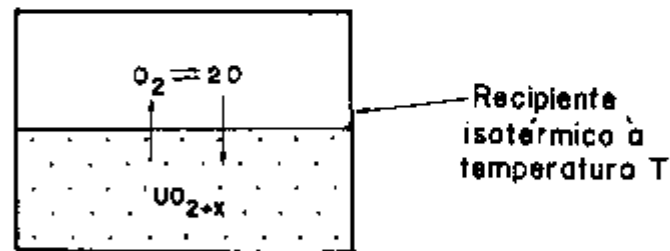
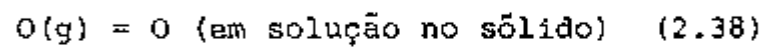
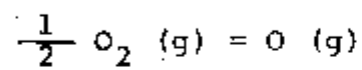


FIGURA 2.7. - Equilíbrio termodinâmico de oxigênio gasoso com óxido de urânio sólido.

O critério de equilíbrio químico é a igualdade dos potenciais químicos de oxigênio atômico nas fases gasosa e sólida e das formas atômicas e molecular do

oxigênio do gás. Portanto:

$$\frac{1}{2} \mu_{O_2} (g) = \mu_O (g) \quad (2.39)$$

$$\mu_O (g) = \mu_O (\text{em solução})$$

O potencial químico do $O_2(g)$ é dado pela equação 2.37.

$$\mu_{O_2} (g) = G_{O_2}^o + RT \ln p_{O_2} \quad (2.40)$$

onde $G_{O_2}^o$ é a energia livre de Gibbs do gás oxigênio na temperatura T, na pressão padrão, que normalmente é tomada como 1 atm.

Combinando as equações 2.39 e 2.40, teremos:

$$\overline{\Delta G}_{O_2} = RT \ln p_{O_2} = 2 \mu_O (\text{em solução}) - G_{O_2}^o \quad (2.41)$$

A quantidade $RT \ln p_{O_2}$ é designada por $\overline{\Delta G}_{O_2}$, correspondendo à energia livre parcial molal de oxigênio no sólido por mol de O_2 , ou o potencial de oxigênio do sólido. Ela é a diferença entre o potencial químico de oxigênio no sólido e o do oxigênio gasoso puro na mesma tempera

tura e a 1 atm de pressão.

A pressão de oxigênio, em equilíbrio / com o dióxido de urânio hiperestequiométrico, é mostrada su perposta ao diagrama de equilíbrio na figura 2.7. (21).

Uma revisão do comportamento termodinâmico do oxigênio em dióxido de urânio não-estequiométrico, através de dados experimentais, foi realizada por PERRON (34). Nela são calculados valores de entropia e entalpia em função da relação O/U.

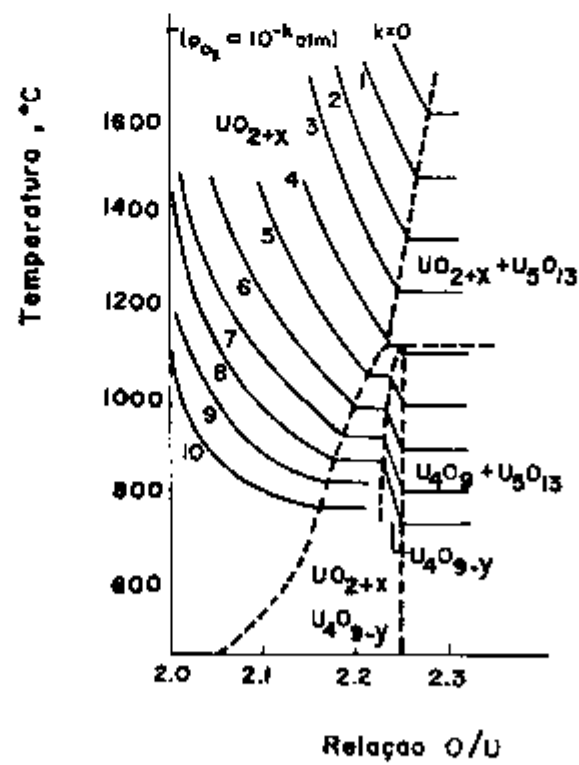


FIGURA 2.8. - Equilíbrio da pressão parcial de oxigênio em UO_{2+x} . ---- linha de equilíbrio de fase.
 _____ Isóbara de oxigênio.

2.3.3. NÃO-ESTEQUIOMETRIA E ESTRUTURA DE DEFEITOS

O conhecimento da estrutura atômica das fases não-estequiométricas é importante, tanto na interpretação do comportamento termodinâmico de um composto, quanto na dependência das propriedades com a variação da relação O/U, que são fortemente dependentes da posição dos átomos de oxigênio em excesso na estrutura cristalina.

Um estudo dos compostos não estequiométricos deve considerar alguns aspectos teóricos ⁽¹⁴⁾, como o modo de incorporação do desvio estequiométrico no cristal, a estabilidade termodinâmica das fases e os fatores que influem na composição sob a qual tais fases podem variar.

A incorporação de um excesso ou deficiência estequiométrica pode se dar através de três métodos : substitucional, intersticial e subtrativo. A incorporação/intersticial ocorre quando uma sub-rede de cations ou anions está idealmente ocupada e algumas posições intersticiais são também preenchidas por um dos componentes.

Um cristal, em contacto com o vapor de um de seus constituintes, é potencialmente um composto não estequiométrico, sendo o equilíbrio termodinâmico de uma composição na fase sólida dependente da concentração deste /

constituente na fase vapor.

Quatro casos principais se destacam na descrição fenomenológica de fases iônicas no cristal, que variam em composição com a pressão de vapor do meio. Dois dos casos aplicam-se a situações onde existe um excesso do componente anionico. Os casos restantes correspondem a situações onde existe uma deficiência do componente anionico.

Se a pressão de um gás X_2 em contato com o cristal MX é levada acima do valor $p(0)$ apropriado à composição estequiométrica $MX_{1,00}$, a concentração de X^- do cristal irá aumentar para manter o equilíbrio. No limite de pequenas mudanças na concentração, antes de fases de diferentes composições terem sido nucleadas, pode ocorrer que um excesso de anions X^- permaneça na superfície do cristal em posições normais da rede, criando assim vacâncias catiônicas que difundem no cristal, ou ainda, o excesso de anions X^- vai para posições intersticiais e um número equivalente de cations M^+ é oxidado a M^{2+} para balanço de carga. Este último caso é de maior interesse pois pode-se observá-lo experimentalmente em certos compostos com estrutura cristalina do tipo fluorita, como o UO_2 .

Desvios da estequiometria ideal envolvem uma mudança de valência de pelo menos um íon do cristal, normalmente o cation.

Para pequenos desvios da estequiometria assume-se a existência de uma rede homogênea de defeitos distribuídos quase ao acaso. Para desvios maiores da estequiometria aparecem várias possibilidades, sendo que, a que se aplica ao dióxido de urânio não-estequiométrico correspondendo ao conceito da formação de uma sub-microheterogeneidade, dentro de uma única fase.

Este conceito foi introduzido por ARIYA (2, 3, 4) que indicou ser possível, dentro de uma fase homogênea, a existência de microdomínios isolados cuja simetria local aproxima-se de outra estrutura cristalina, sendo estes microdomínios suficientemente pequenos para agirem como núcleos de crescimento de uma segunda fase.

A estrutura sub-microheterogênea foi considerada estando em equilíbrio dinâmico dentro do cristal, com as regiões de composição diferente migrando continuamente e mudando constantemente sua forma e dimensões.

Os argumentos no qual se fundamentam estes conceitos são baseados na entalpia de formação e propriedades magnéticas de fases não-estequiométricas. São válidos/ para sistemas como $Fe_{1-x}O$ e UO_{2+x} .

De acordo com os trabalhos de ARIYA em monóxidos de titânio e vanádio, o tamanho dos microdomínios/

na qual a estrutura sub-microheterogênea se baseia, é de 200 células unitárias para o $TiO_{1,00}$ e 1000 células unitárias para o $VO_{1,00}$.

Desvios da estequiometria no UO_2 são possíveis porque o urânio possui vários estados de valência. O urânio nos estados U^{4+} , U^{5+} , e U^{6+} tende a ser / mais estável. Nos óxidos estequiométricos os íons de metais pesados tem uma valência 4^+ e quando os íons oxigênio são removidos ou adicionados ao material, é necessária a mudança de valência de alguns cátions. Assim, os íons urânio no UO_{2+x} são uma mistura de U^{4+} e U^{5+} ou ainda de U^{4+} e U^{6+} .

O excesso de oxigênio no UO_{2+x} é acomodado intersticialmente na estrutura do tipo fluorita. Os estudos de difração de neutrons em UO_{2+x} (40, 41), demonstrou que existem duas posições intersticiais para o oxigênio, as quais são mostradas na figura 2.8..

Estes defeitos não são distribuídos ao acaso, mas aglomeram-se em complexos ou aglomerados de defeitos. O conceito de aglomerados de defeitos tem sido adotado por vários pesquisadores (7, 27) no estudo teórico da energia e estrutura de defeitos.

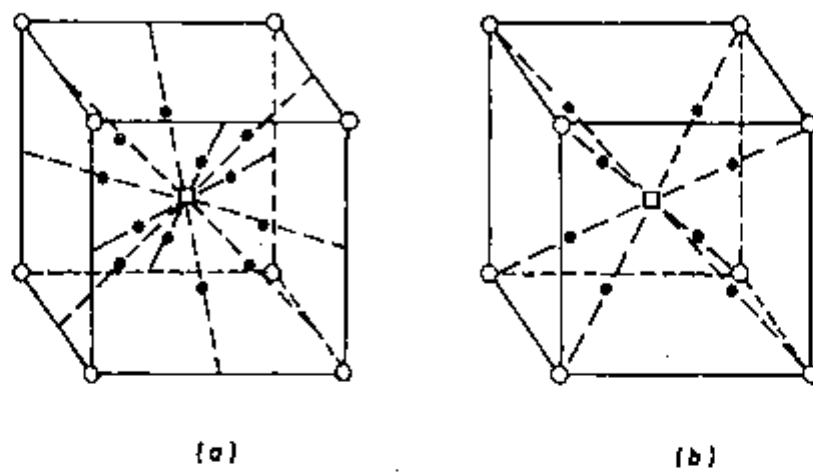


FIGURA 2.9. - Posições possíveis para oxigênio intersticial
no UO_2
o - posição normal dos Ions oxigênio.
a) ● - posição intersticial tipo 1;
b) ● - posição intersticial tipo 2.

3. DESCRIÇÃO EXPERIMENTAL

3.1. PÊNDULO DE TORÇÃO

As medidas de atrito interno realizadas a baixas frequências de oscilação foram desenvolvidas utilizando-se um pêndulo de torção, do tipo invertido, semelhante ao concebido por Norton (29). A utilização do pêndulo invertido apresenta a vantagem de diminuir sensivelmente a tensão longitudinal sobre a amostra, devido a:

- a) a massa de inércia ser localizada /
acima da amostra, que é fixa na
parte inferior;
- b) o equilíbrio ser mantido por um con-
tra-peso.

A figura 3.1. mostra esquematicamente o pêndulo de torção invertido.

A amostra é fixa através de pinças e a oscilação é realizada magnetostaticamente, através da ação do campo provocado por duas bobinas sobre imãs solidários ao sistema de sustentação. A oscilação é transmitida à amostra por meio de uma haste girante e o sistema é equili -

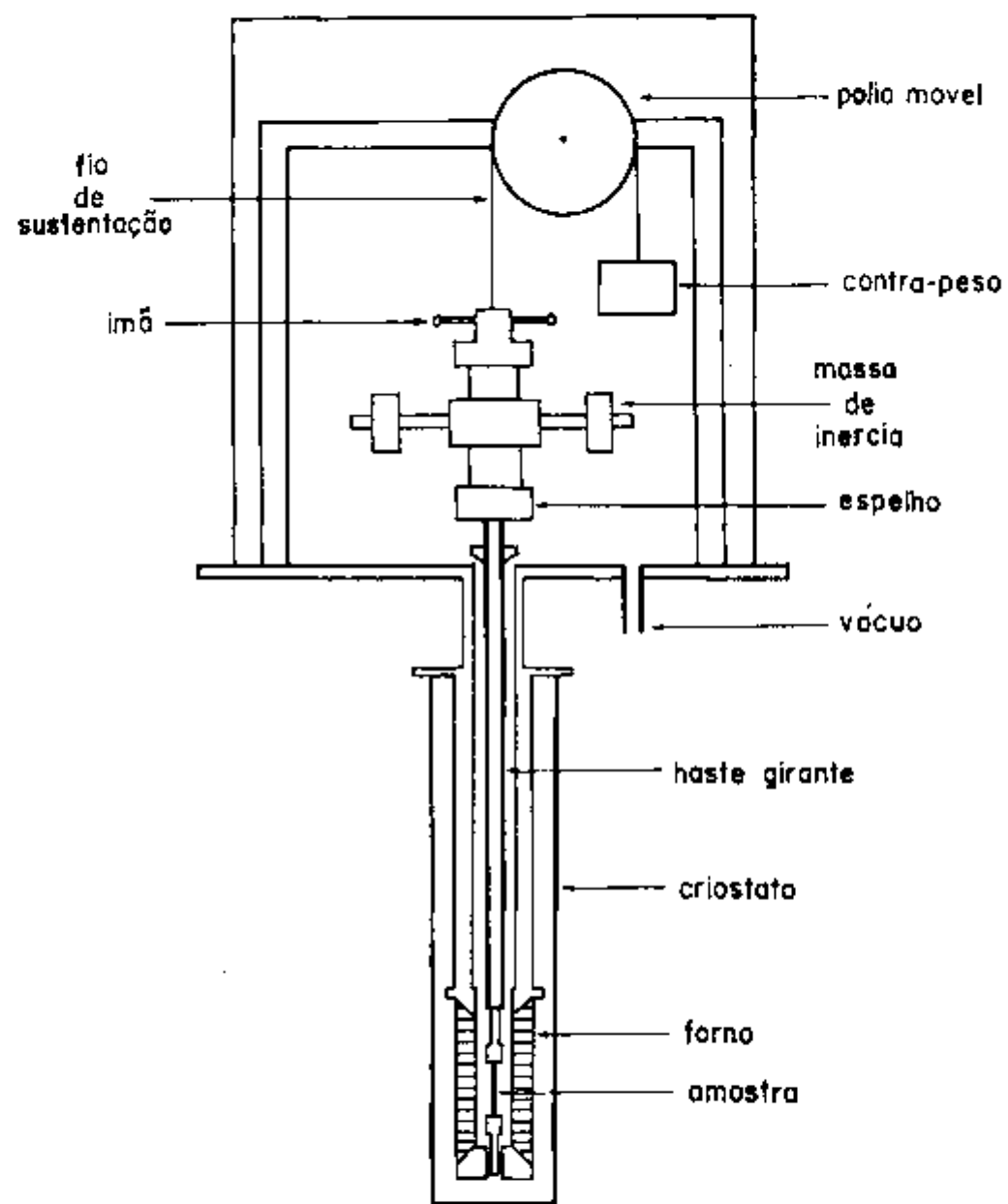


FIGURA 3.1. - Esquema do Pêndulo de Torção.

librado por um contra-peso suspenso por um fio de sustentação, através de uma polia móvel. Observa-se que o atrito interno do fio não varia com a amplitude e nem com a frequência, contribuindo apenas para o fundo de 10% (24).

A frequência da oscilação é controlada / pela variação da distância entre as massas de inércia. As medidas de atrito interno são realizadas em regime de oscilação livre, por meio de um sistema ótico, utilizando-se um espelho, fixo à haste girante.

A variação da temperatura é feita por meio de um forno de enrolamento de resistência (termocoax) / que envolve totalmente a amostra. O conjunto é encerrado / dentro de um criostato de aço inoxidável.

O método do pêndulo de torção apresenta, ainda as vantagens de possibilitar medidas de valores elevados de atrito interno e de poder atingir altas temperaturas. Apresenta como principais desvantagens um fundo de atrito interno muito elevado e dificuldade de fabricação de amostras adequadas.

3.1.1. DETERMINAÇÃO DO ATRITO INTERNO

A oscilação imposta à amostra, pela pas-

sagem de pulsos de corrente nas bobinas, é detectada utilizando-se um sistema óptico como mostrado na figura 3.2. Uma fonte luminosa faz incidir um feixe de luz no espelho preso à haste girante, que acompanha o movimento oscilatório da amostra. O feixe de luz refletido é direcionado por um conjunto de espelhos ao seguidor de sinal luminoso (Photodyne / TYPE PHA - SERFRAN). O registro obtido em papel milimetrado é da forma mostrada pela figura 3.2.

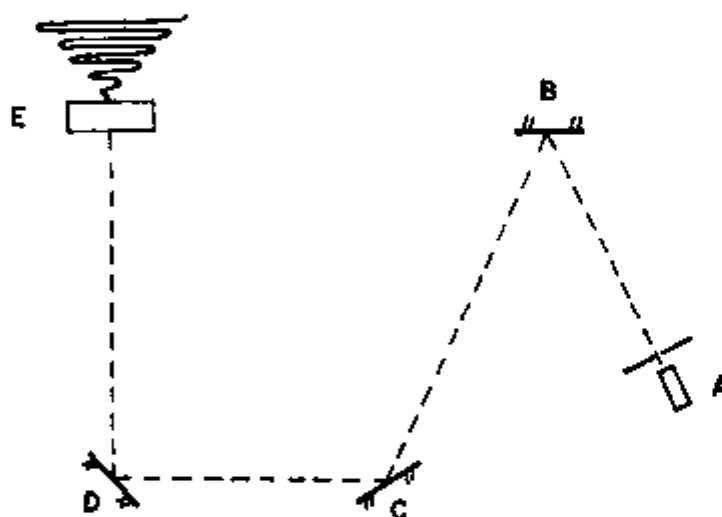


FIGURA 3.2. - Detecção do movimento oscilatório.

- A - fonte de luz;
- B - espelho solidário ao porta amostra;
- C e D - espelhos fixos;
- E - seguidor do feixe de luz.

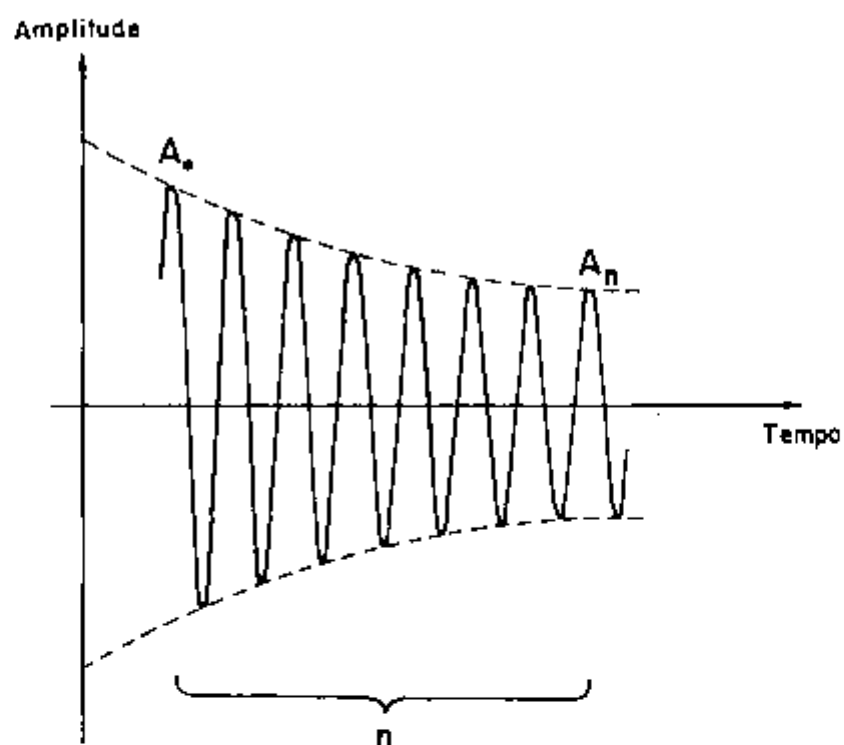


FIGURA 3.3. - Registro de oscilações livres.

O atrito interno é calculado por intermédio da equação (2.20) dada por:

$$Q^{-1} = \frac{1}{n\pi} \ln \frac{A_0}{A_n}$$

onde n é o número de oscilações entre A_0 , a amplitude inicial, e A_n , a amplitude após n oscilações.

O número de oscilações entre as amplitudes inicial e final é fixo e igual a 20.

A deformação resultante da aplicação de torção à amostra é calculada através da seguinte relação, que nos dá a amplitude de deformação:

$$\epsilon = \frac{A_0 r}{4Ll} \quad (3.1)$$

onde A_0 é a amplitude máxima de oscilação.

r é o raio da amostra.

L é a distância do espelho ao seguidor de sinal luminoso.

l é o comprimento da amostra.

A amplitude de deformação utilizada em todos os experimentos foi de 12×10^{-4} .

Os ensaios foram realizados em atmosfera de argônio e hidrogênio para as amostras não-estequiométricas e estequiométricas, respectivamente, sob uma pressão de 15 mm de Hg inferior a atmosfera. Tal foi conseguido evacuando-se o criostato até 10^{-2} mm de Hg e introduzindo-se o gás. A seguir diminuía-se a pressão até 10^{-2} mm de Hg e reintroduzia-se novamente o gás. Este procedimento foi realizado /

quatro vezes, após o que introduzia-se gás até atingir a pressão indicada.

3.1.2. DETERMINAÇÃO DO PERÍODO

A determinação do período de oscilação é feita por intermédio de uma célula fotoelétrica colocada / no seguidor de sinal luminoso, conectada a um contador eletrônico modelo 5245 L da Hewlet Packard.

3.1.3. MEDIDA DA TEMPERATURA

As medidas de temperatura foram determinadas utilizando-se um termopar de cromel - alumel colocado a meia altura da amostra e registradas num Registrador Multicanal Rikadenki modelo 606, com um erro de medida de aproximadamente 1°C.

Uma variação linear da temperatura com o tempo foi obtida usando-se um regulador de temperatura Setaram RT 300.

3.2. PREPARAÇÃO DAS AMOSTRAS

Dentro das etapas de desenvolvimento do trabalho, o de preparação das amostras é de importância fundamental desde que envolve todo o processamento normal para fabricação de corpos cerâmicos, exigindo ainda um processamento especial, devido à forma das amostras e dos requisitos nucleares necessários na fabricação de combustível nuclear.

A obtenção dos corpos de prova para utilização no pêndulo de torção exige um processamento especial da matéria prima, no caso sais de urânio, até atingir o estágio no qual este material possa ser conformado por métodos / convencionais.

A etapa mais importante neste estágio do trabalho é sem dúvida o processo de sinterização ⁽³⁸⁾, que em última análise irá definir as características do produto final em termos de suas propriedades e microestrutura.

A forma final das amostras é atingida por meio de processos de corte e lapidação, que deixam os corpos de prova em condições de serem ensaiados diretamente/ no pêndulo de torção.

3.2.1. MATÉRIA PRIMA

Neste estágio de preparação das amostras o objetivo é produzir dióxido de urânio estequiométrico na forma de um pó, para posterior processamento. Para isto, a matéria prima principal consiste de um sal de urânio, de pureza nuclear, obtido pelo Centro de Engenharia Química do Instituto de Energia Atômica.

Partiu-se inicialmente do diuranato de amônio (DUA) produzido por precipitação do nitrato de urânio. Este material foi calculado a 650°C ao ar durante 3 horas, resultando em uma das fases alotrópicas dos óxidos de urânio, o U_3O_8 . A seguir foi realizada a redução do U_3O_8 para UO_2 , com aquecimento a 750°C durante 1 hora, em atmosfera de hidrogênio, resultando num material em forma de pó, com uma superfície específica, determinada pelo método BET ⁽¹⁸⁾, de $2 \text{ m}^2/\text{g}$.

3.2.2. MÉTODO DE CONFORMAÇÃO

O pó obtido na preparação da matéria prima foi desagregado num misturador Spex por 15 minutos e a seguir compactado na forma de barras de aproximadamente $64 \times 32 \times 3,5 \text{ mm}$.

A conformação das barras foi realizada utilizando-se uma prensa hidrostática "FAREX", em molde de aço com as paredes lubrificadas com estearato de zinco. A figura 3.4. mostra esquematicamente a operação de compactação do pó.

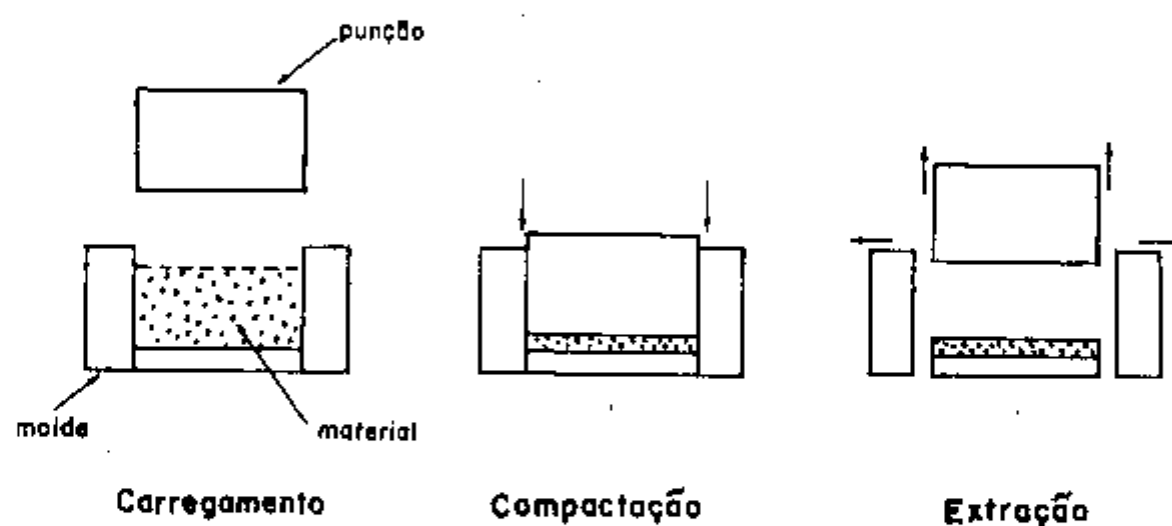


FIGURA 3.4. - Operação de compactação do pó.

A pressão utilizada no processo de compactação foi determinada com base em trabalhos já desenvolvidos pelo Centro de Metalurgia Nuclear na fabricação de elementos combustíveis ⁽¹³⁾. A pressão utilizada foi de 1560 Kg/cm^2 , obtendo-se desta forma barras de dióxido de urânio.

nio com uma densidade a verde de $5,12 \text{ g/cm}^3$, isto é, cerca de 46,6% da densidade teórica, admitida esta como sendo / igual a $10,98 \text{ g/cm}^3$.

As barras obtidas foram cortadas a verde nas dimensões de $64 \times 15 \times 3,5 \text{ mm}$.

3.2.3. SINTERIZAÇÃO

Como já salientado anteriormente, o processo de sinterização é um dos mais importantes na preparação das amostras.

A sinterização das amostras foi realizada em duas atmosferas, com gases fornecidos pelo Oxigênio do Brasil S.A. A utilização de argônio para sinterização de amostras permite obter dióxido de urânio não estequiométrico, pois a quantidade de oxigênio presente no gás, aproximadamente correspondente à pressão parcial de oxigênio (p_{O_2}), fará com que o equilíbrio se desvie para a direita do diagrama de equilíbrio ⁽²¹⁾, para um valor de $p_{O_2} \approx 10^{-6}$.

A utilização de hidrogênio na sinterização nos permite obter uma atmosfera redutora, resultando numa amostra bem próxima à do valor estequiométrico. A eliminação da água existente no gás é possível utilizando-se um

"trap" de nitrogênio líquido, na parte anterior do forno de sinterização. Isto é necessário porque a atmosfera redutora, aliada à alta temperatura, provoca uma redução das partículas de água, dando origem a oxigênio dissociado na atmosfera do forno, o qual se difundirá na amostra para manter o equilíbrio termodinâmico.

O forno utilizado na sinterização é de resistência de platina da LEITZ WETZLAR, que possui uma zona "quente", ou seja, uma zona de temperatura constante de aproximadamente 60mm. O esquema do forno de sinterização é mostrado esquematicamente na figura 3.5.

Para o controle e medida de temperatura foi utilizado um termopar de Pt - Pt 10%Rh, colocado no interior do forno e controlado por um aparelho ENGRO, mantendo-se a temperatura constante dentro de aproximadamente 5°C e sendo registrada num instrumento LEEDS & NORTHRUP.

As barras de dióxido de urânio foram / acondicionadas em um recipiente de molibdênio.

O processo de sinterização em atmosfera de argônio foi realizado a 1600°C durante 1 hora, obtendo-se um tamanho médio de grãos de 15 µm, medido pelo método da intersecção (19), com a densidade aparente atingindo 92,5% da densidade teórica. A obtenção das amostras estequiométricas -

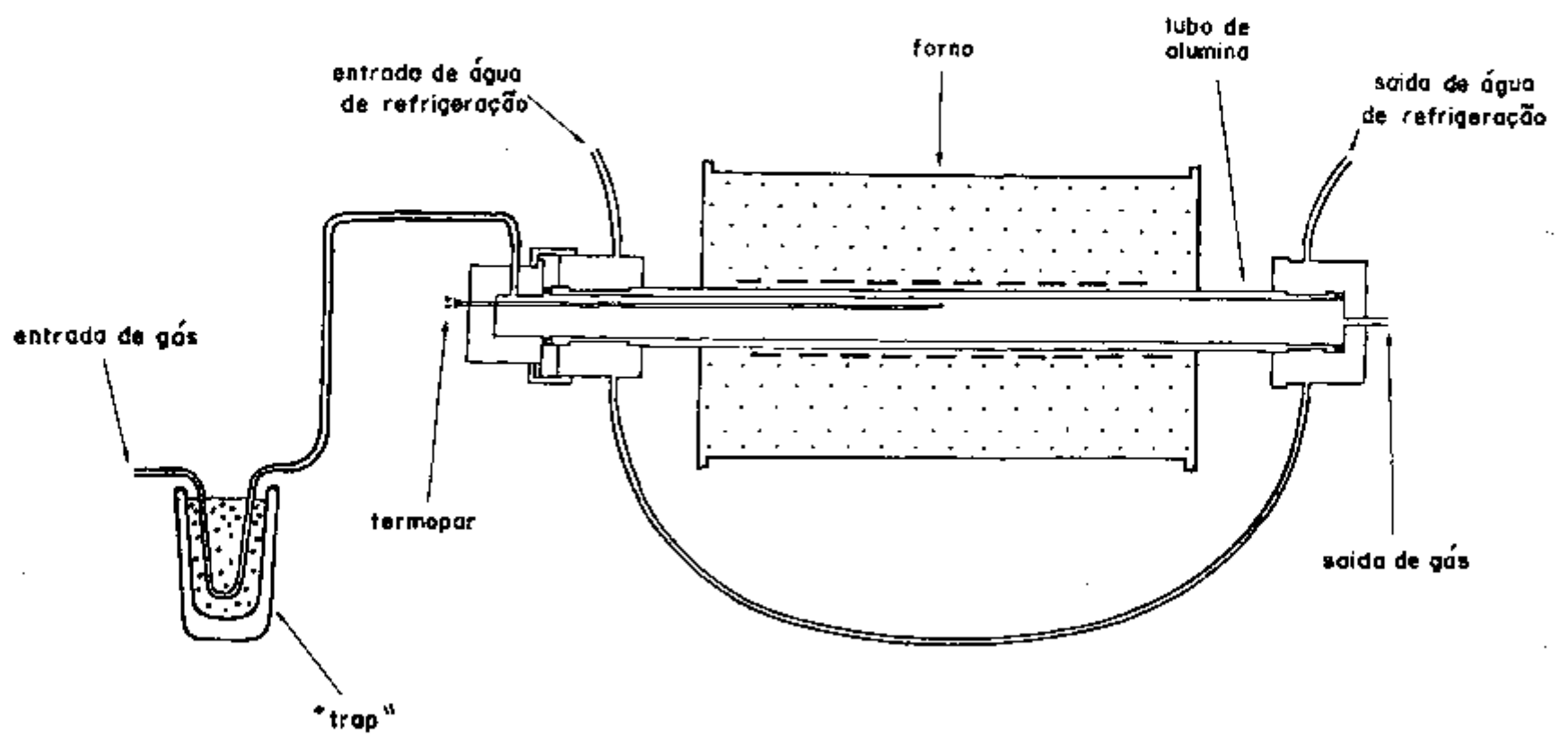


FIGURA 3.5. - Esquema do forno de sinterização

cas foi realizada sinterizando à 1600°C por 1 h , obtendo-se um tamanho médio do grão de 13 µm, com densidade aparente de 91,5%.

As velocidades de aquecimento e resfriamento foram, respectivamente, 400 a 500°C por hora.

3.2.4. TRATAMENTO TÉRMICO

Os tratamentos térmicos realizados nas amostras tem como objetivo obter uma variação do tamanho de grão através da colocação das amostras, por diferentes períodos de tempo, a altas temperaturas (25).

Nos tratamentos térmicos realizados utilizaram-se corpos de prova já sinterizados em atmosfera de hidrogênio, conforme já descrito, cortados em dimensões próximas as necessárias para ensaio no pêndulo de torção.

Os tratamentos térmicos foram realizados em forno "WILD - BARFIELD" com resistência de tungstênio (produzido pela NATIONAL RESEARCH CORPORATION), em atmosfera de hidrogênio. Os resultados obtidos, bem como os tratamentos térmicos realizados, são mostrados na tabela 3.1.

TABELA 3.1. - Tratamentos Térmicos.

Temperatura	Tempo	Temperatura	Tempo	Tamanho de Grão	Densidade Aparente
°C	h	°C	h	µm	%
1800	2	-	-	19,3 ± 1,2	94,5
1800	2	1850	4	25,7 ± 1,1	95,0

Após a realização dos tratamentos térmicos as amostras foram novamente aquecidas a 1600°C por 1 h em atmosfera de hidrogênio, no forno LEITZ, para manutenção da estequiometria.

3.2.5. - CARACTERIZAÇÃO MICROESTRUTURAL

A caracterização microestrutural das amostras sinterizadas e tratadas termicamente foi desenvolvida utilizando-se microscópios óticos do Centro de Metalurgia Nuclear.

Inicialmente foi realizado o embutimento das amostras que a seguir eram polidas mecanicamente, com li

xas d'água número 600. Os passos seguintes eram realizados com polimento mecânico, utilizando-se pastas de diamante de 6 e 1 μm , com um acabamento dado por polimento automático em alumina gama de 0,05 μm .

Após o polimento, os corpos de prova eram levados ao microscópio para observação da distribuição, forma da porosidade e registro fotográfico. A seguir procedia-se ao ataque das amostras em uma solução de ácido sulfúrico em água oxigenada, sendo então o corpo de prova conduzido novamente ao microscópio ótico para observação da microestrutura, contagem de tamanho de grão e registro fotográfico.

As microestruturas das amostras sinterizadas em argônio e hidrogênio podem ser observadas nas figuras 3.6, 3.7, 3.8 e 3.9, 3.10 e 3.11, respectivamente. As figuras 3.6 e 3.9 mostram uma distribuição uniforme de porosidades, podendo-se observar que os tamanhos dos poros da amostra sinterizada em argônio são maiores e em quantidade / superior àquela correspondente a amostra sinterizada em hidrogênio.

As figuras 3.7 e 3.9 mostram uma distribuição relativamente uniforme de grãos em toda a amostra e também uma porosidade maior da amostra sinterizada em argônio.

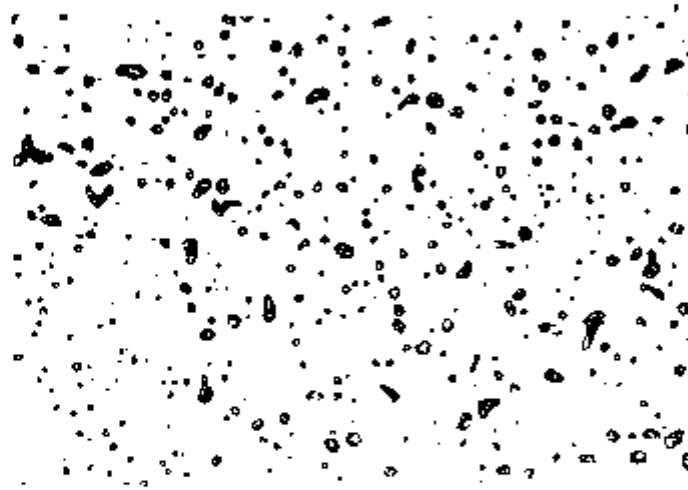


FIG. 3.6. - Micrografia de dióxido de urânio sinterizado em argônio.
Sem ataque.
Aumento: 640 X

FIG. 3.7. - Micrografia de dióxido de urânio sinterizado em argônio.
Ataque: H_2O_2 +
+ 10% H_2SO_4 .
Aumento: 128 X

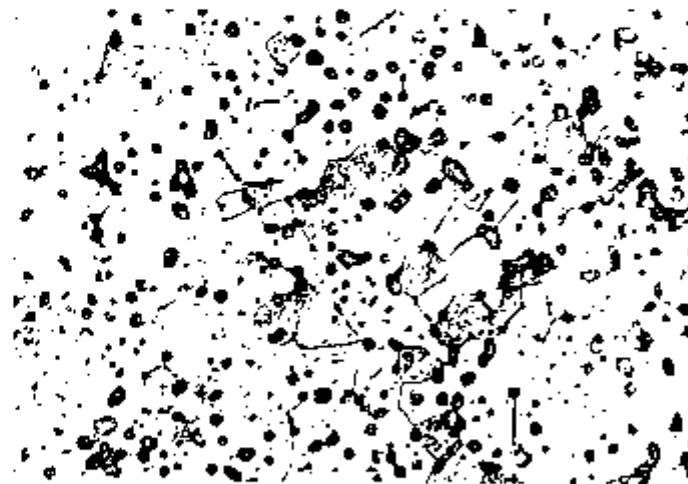
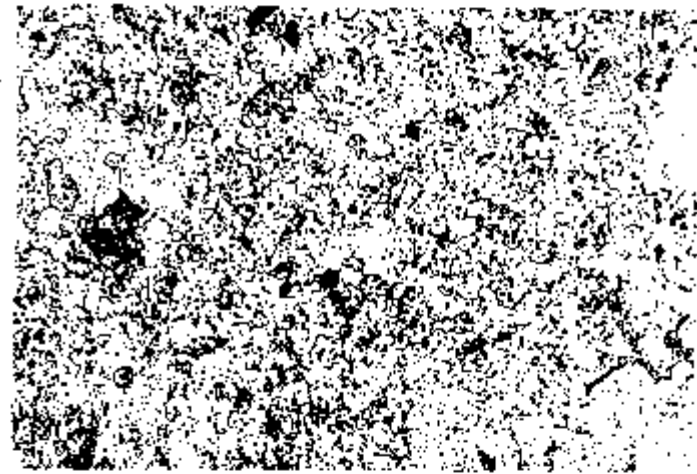


FIG. 3.8. - Micrografia de dióxido de urânio sinterizado em argônio.
Ataque: H_2O_2 +
+ 10% H_2SO_4 .
Aumento: 1000 X

FIG. 3.9. - Micrografia
do dióxido de urânio sinterizado em
hidrogênio.
Sem ataque.
Aumento: 640 X

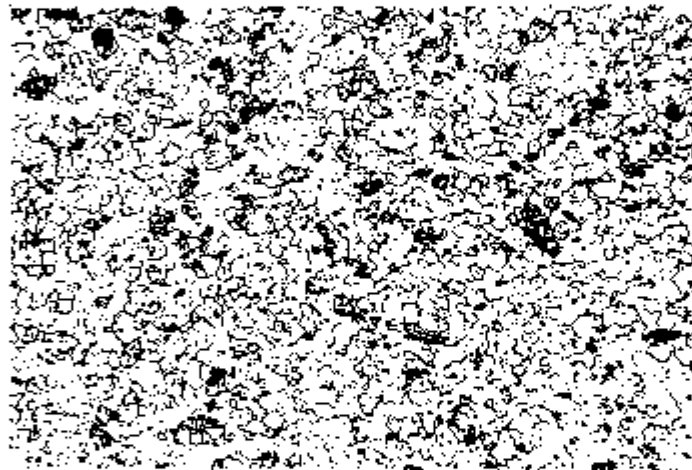
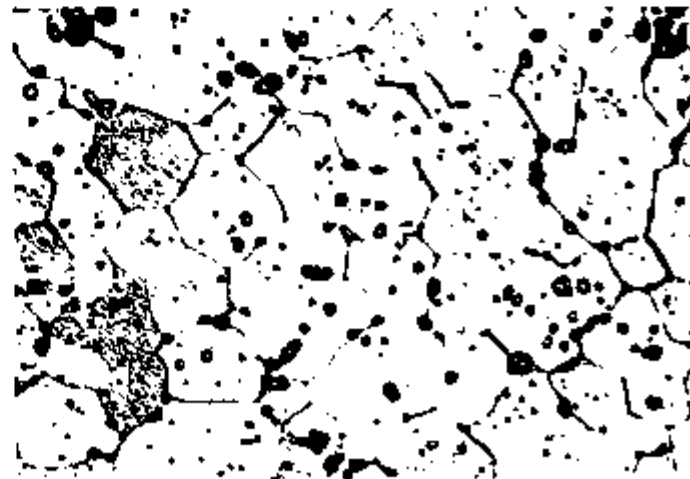


FIG. 3.10. - Microgra -
fia do dióxido de
urânio sinterizado
em hidrogênio.
Ataque: H_2O_2 +
+ 10% H_2SO_4 .
Aumento: 128 X

FIG. 3.11. - Micrografia
de dióxido de urânio sinterizado em
hidrogênio.
Tamanho médio de
grão: 13 μm .
Aumento: 1000 X



Para aumentos maiores pode-se observar que a estrutura de poros da amostra sinterizada em argônio, apresenta poros bastante grandes e localizadas nos contornos, o que não é verificado na amostra sinterizada em hidrogênio, onde os poros estão localizados principalmente no interior e nos contornos de grão.

As microestruturas das amostras tratadas termicamente podem ser observadas, sem ataque, nas figuras 3.12 e 3.15, onde se verifica a presença de poros bastante grandes e de forma circular, característica dos últimos estágios de sinterização (6).

Uma distribuição uniforme dos tamanhos de grão e porosidades pode ser observada nas figuras 3.13 e 3.15, para as amostras de tamanho de grão de 19 μm e 25 μm , respectivamente.

As figuras 3.14 e 3.17 mostram a localização dos poros em relação aos contornos de grão. Na figura 3.14, observa-se a presença de poros grandes e circulares junto aos contornos e poros menores localizados no interior dos grãos, sendo o mesmo observado na amostra de 25 μm , figura 3.17, apenas com grãos maiores junto ao contorno.

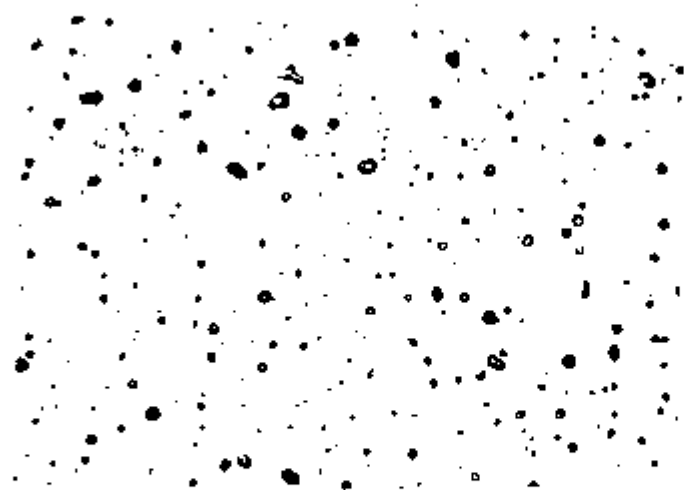


FIG. 3.12. - Micrografia de dióxido de urânio estequiométrico Sem ataque.
Aumento: 640 X

FIG. 3.13. - Micrografia de dióxido de urânio estequiométrico
Ataque: H_2O_2 +
+ 10% H_2SO_4 .
Aumento: 128 X

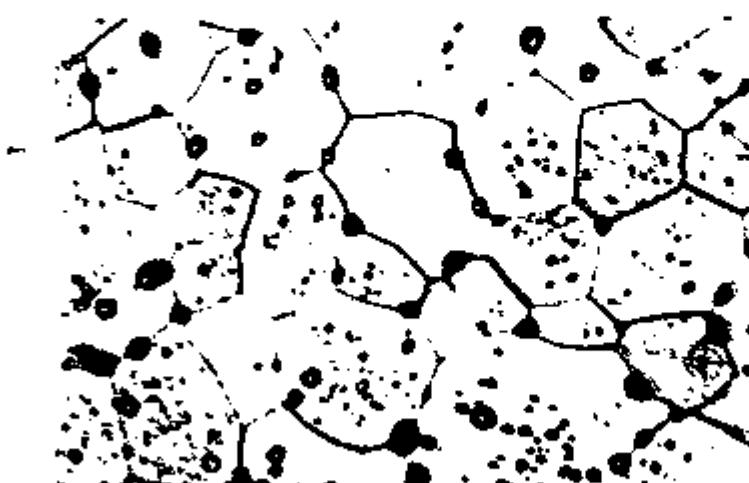
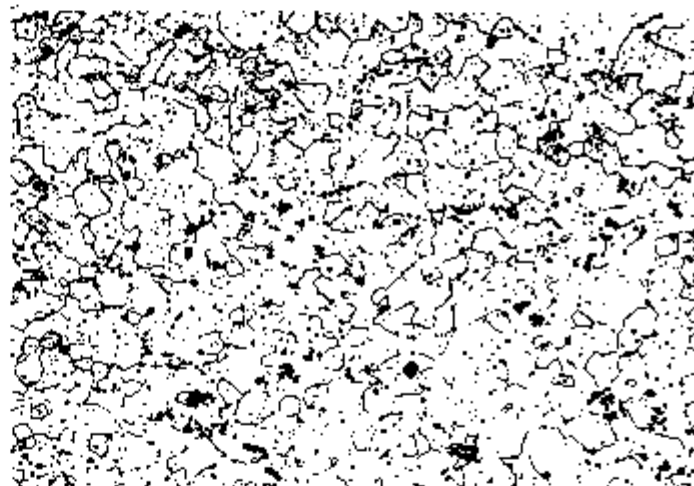


FIG. 3.14. - Distribuição de porosidade e tamanho de grão do dióxido de urânio estequiométrico.
Tamanho médio de grão: 19 μm .
Aumento: 1000 X

FIG. 3.15. - Micrografia
de dióxido de urânio estequiométrico
Sem ataque.
Aumento: 640 X

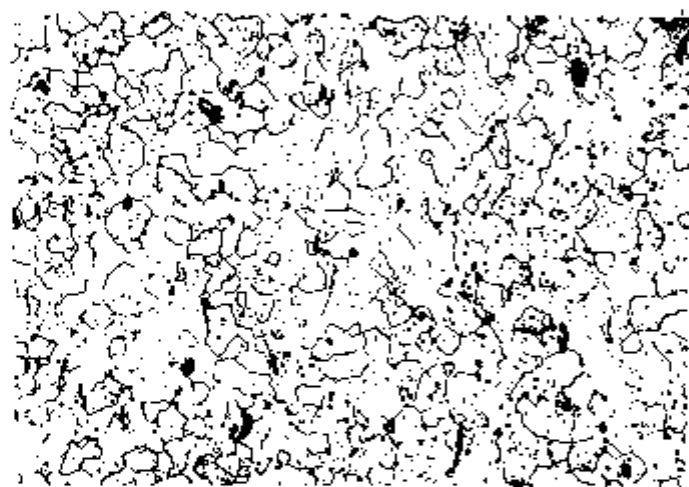
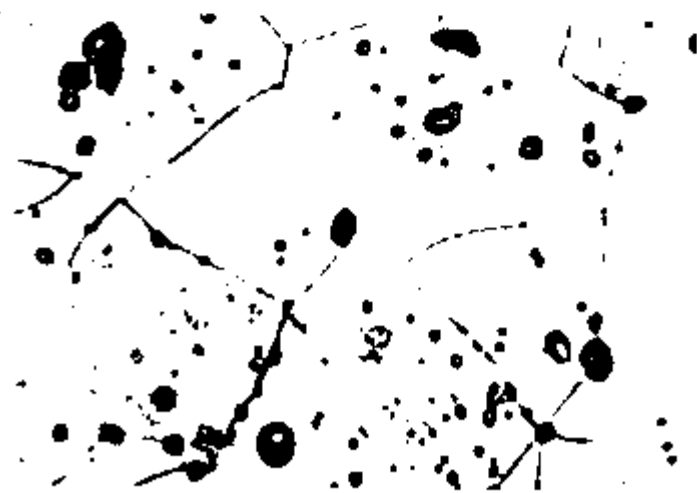


FIG. 3.16. - Micrografia
de dióxido de urânio estequiométrico
Ataque: H₂O₂ +
+ 10% H₂SO₄.
Aumento: 128 X

FIG. 3.17. - Distribuição de porosidade e tamanho de grão de dióxido de urânio estequiométrico.
Tamanho médio de grãos: 25 µm.
Aumento: 1000 X



3.2.6. - CORTE E LAPIDAÇÃO

As amostras obtidas na sinterização foram cortadas com discos diamantados nas dimensões aproximadas de 50,0 X 2,30 X 1,3 mm. Após os tratamentos térmicos, as amostras foram lapidadas, utilizando-se inicialmente pó de carbeto de silício malha 400 e logo após carbeto de silício malha 1000, até atingir as dimensões necessárias para utilização, que foram de 50,00 X 2,000 X 1,000 mm, com um erro aproximado de 0,002 mm.

4. RESULTADOS EXPERIMENTAIS E DISCUSSÕES

4.1. - VARIAÇÃO DO ATRITO INTERNO COM A TEMPERATURA

4.1.1. - EFEITO DA VARIAÇÃO DE ESTEQUIOMETRIA

A figura 4.1. mostra a variação do atrito interno para o dióxido de urânio não-estequiométrico. / Observa-se inicialmente um decréscimo do atrito interno a partir de -160°C , que pode estar associado a processos de relaxação que ocorrem a temperaturas mais baixas, como relaxação de discordâncias ⁽¹⁷⁾, observado a frequências altas de oscilação, ou fenômenos de relaxação devidos a tensão induzindo ordenação na fase U_4O_9 ⁽¹⁰⁾.

A partir de -120°C até aproximadamente 100°C observa-se um largo e irregular pico de atrito interno, o que não ocorre em dióxido de urânio estequiométrico, como mostrado na figura 4.2. A presença deste pico deve ser atribuída à oxidação do dióxido de urânio, podendo estar associada à relaxação de oxigênio presente intersticialmente / na rede cristalina e também à presença de U_4O_{9-y} , como observado por outros autores ^(11, 36).

A forma irregular deste pico pode estar

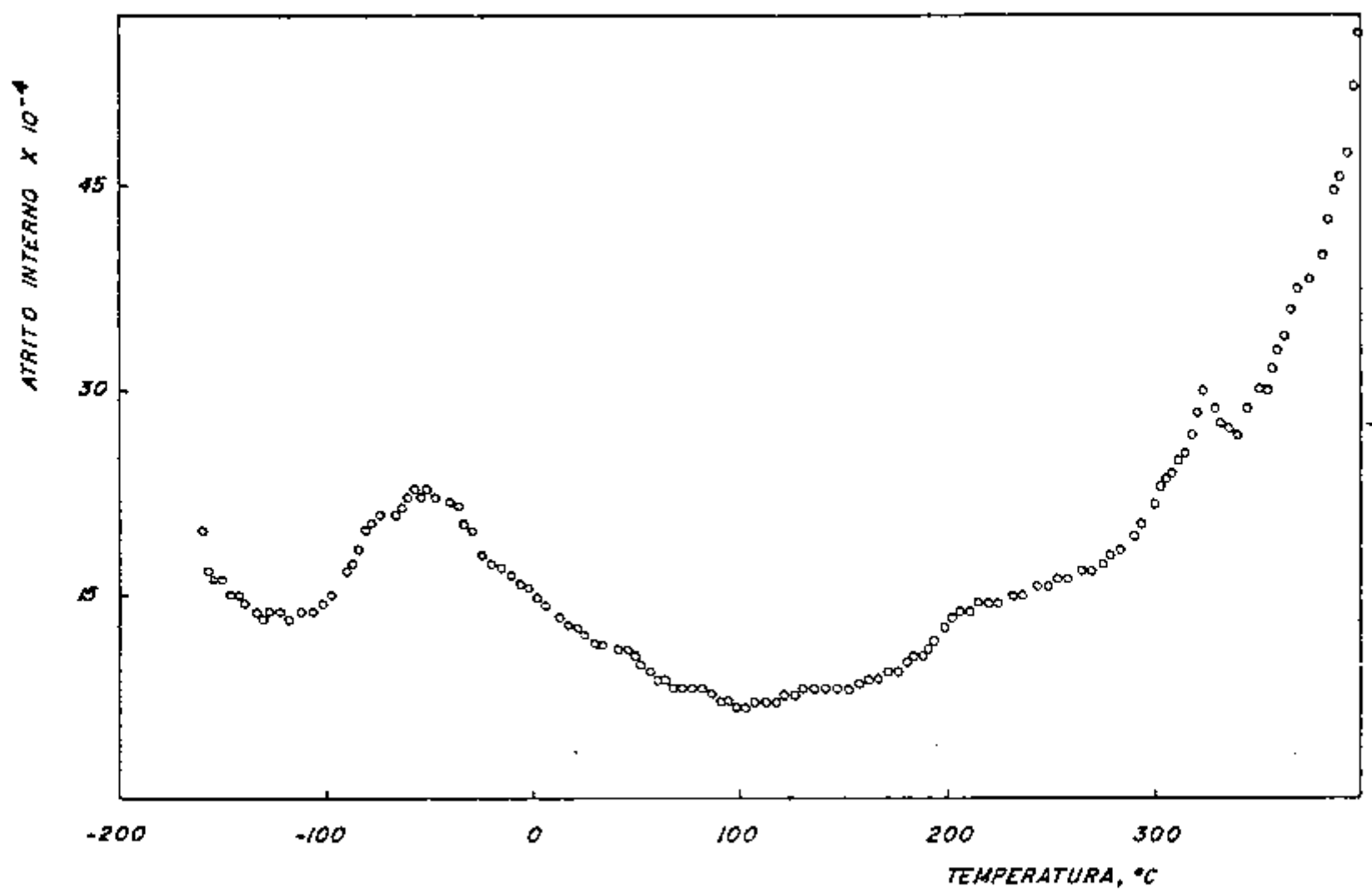


FIGURA 4.1. - Variação do atrito interno com a temperatura para dióxido de urânio não-estequiométrico.

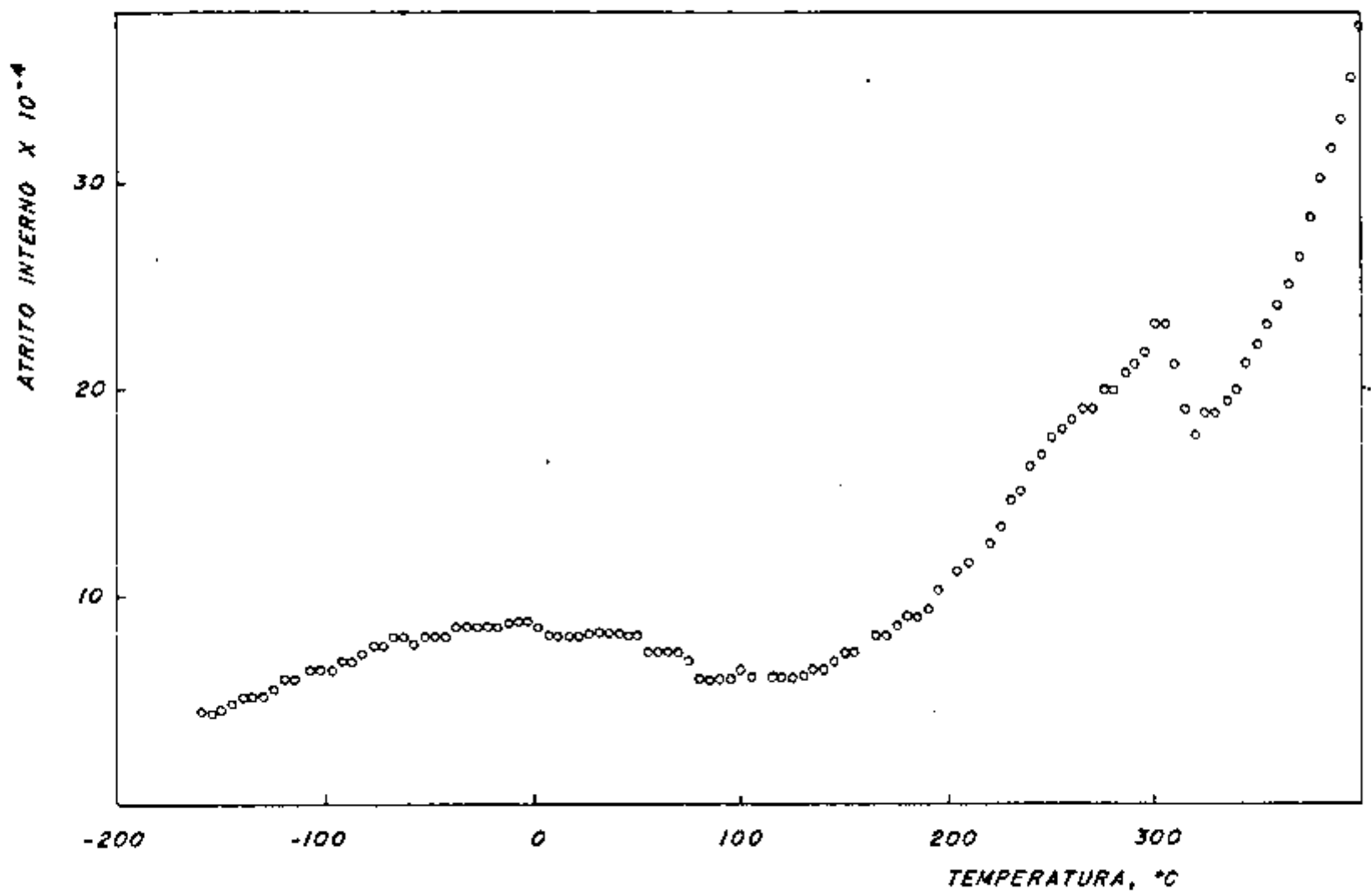


FIGURA 4.2. - Variação do atrito interno para dióxido de urânio estequiométrico com tamanho médio de grão de 13 μm.

associada não somente a um único pico de relaxação, o que é confirmado pelo cálculo da energia de ativação do processo / (seção 4.1.2). Associando-se a variação do atrito interno observada no pico entre - 80 e - 70°C, a um pico de relaxação devido a defeitos produzidos por oxidação, o valor da energia de ativação calculada é bem próxima aos resultados / já observados para este fenômeno.

O comportamento da curva acima de 100°C é bastante semelhante ao da amostra estequiométrica, sendo o aumento do atrito interno observado acima de 340°C, atribuído à relaxação de contorno de grão (seção 4.1.3.).

4.1.2. - CÁLCULO DA ENERGIA DE ATIVAÇÃO

Devido à forma irregular do pico observado a baixas temperaturas, mais de um processo de relaxação pode estar ocorrendo. Isto pode ser confirmado pelo cálculo da energia de ativação, através da largura do pico, tomada à meia altura (figura 4.3.).

O valor da energia de ativação é calculado através da equação (2.25), onde Q é a energia de ativação do processo. O valor obtido para a energia de ativação por este método é de 0,14 eV, o que é cerca de 3,4 vezes menor que o calculado por Domoto para relaxação de oxigênio in

tersticial. Portanto, o pico observado deve-se não somente a um processo de relaxação, mas a vários.

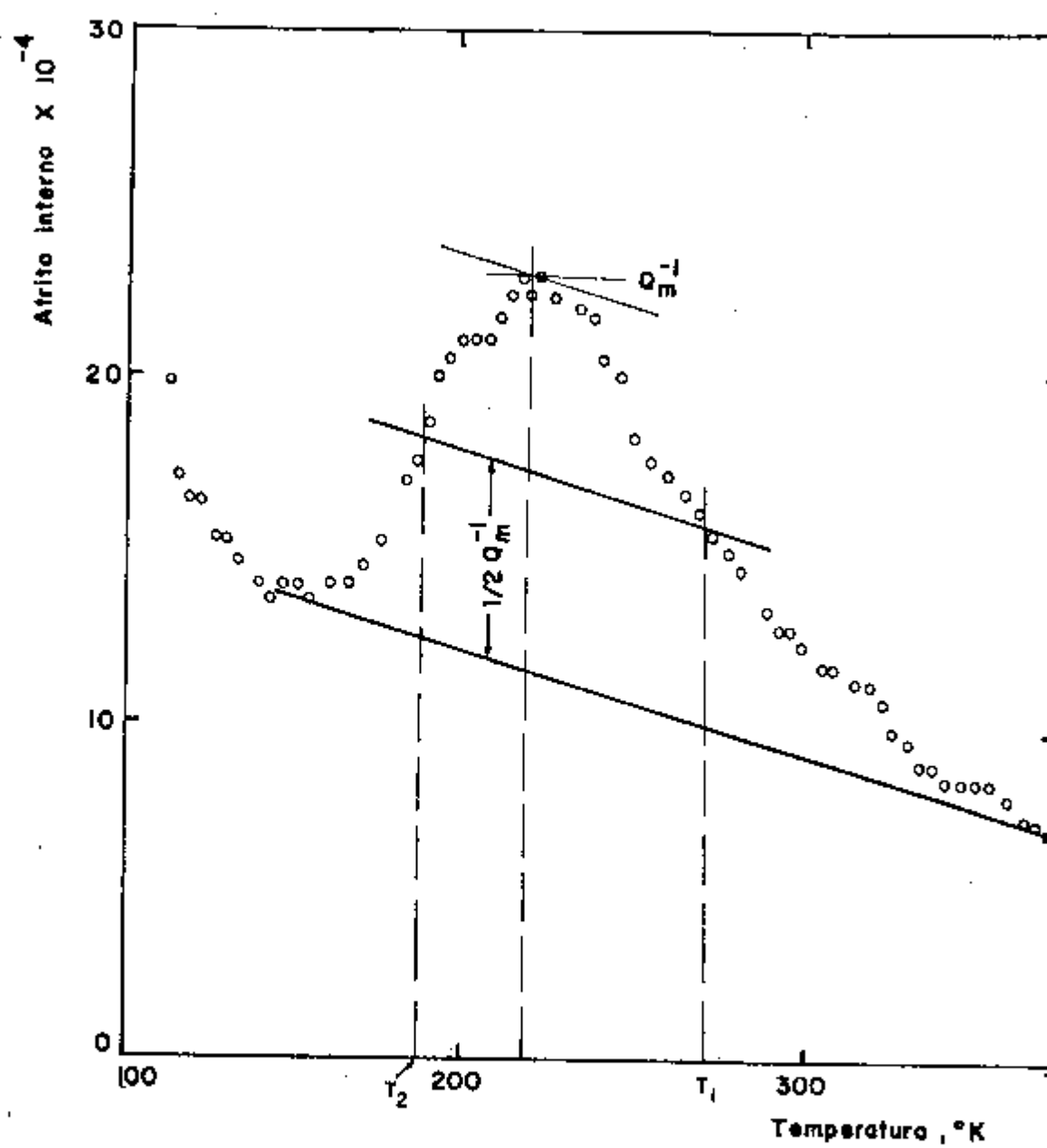


FIGURA 4.3. - Cálculo da energia de ativação através da largura do pico.

Assumindo-se a variação do atrito interno observada entre -80 e -70°C , como sendo devido a relaxação de defeitos produzidos por oxidação, a energia de ativação pode ser calculada pela equação de Arrhenius. A partir da curva de $\ln \omega$ em função de $1/T$, mostrada na figura 4.4, obtem-se um valor para a energia de ativação de $0,54 \pm 0,04$ eV, o que é bem próximo ao calculado anteriormente, considerando-se os erros e a variação da posição do pico com a relação oxigênio-urânio, observada nos trabalhos de SOCINO⁽³⁶⁾ e DOMOTO⁽¹¹⁾. O coeficiente de correlação da reta média da figura 4.4, é de 0,99.

4.1.3. - EFEITO DA MICROESTRUTURA

O efeito da microestrutura em dióxido de urânio estequiométrico, através da variação do tamanho de grão é mostrado nas figuras 4.2, 4.5 e 4.6 para tamanhos de grão de 13, 19 e 25 μm , respectivamente.

Na faixa de temperatura entre -160 e 140°C não se observa nenhuma influência da microestrutura.

O efeito da microestrutura no comportamento anelástico do dióxido de urânio pode ser observado a partir de aproximadamente 340°C , onde se verifica um aumento do atrito interno até a temperatura máxima de trabalho. Es

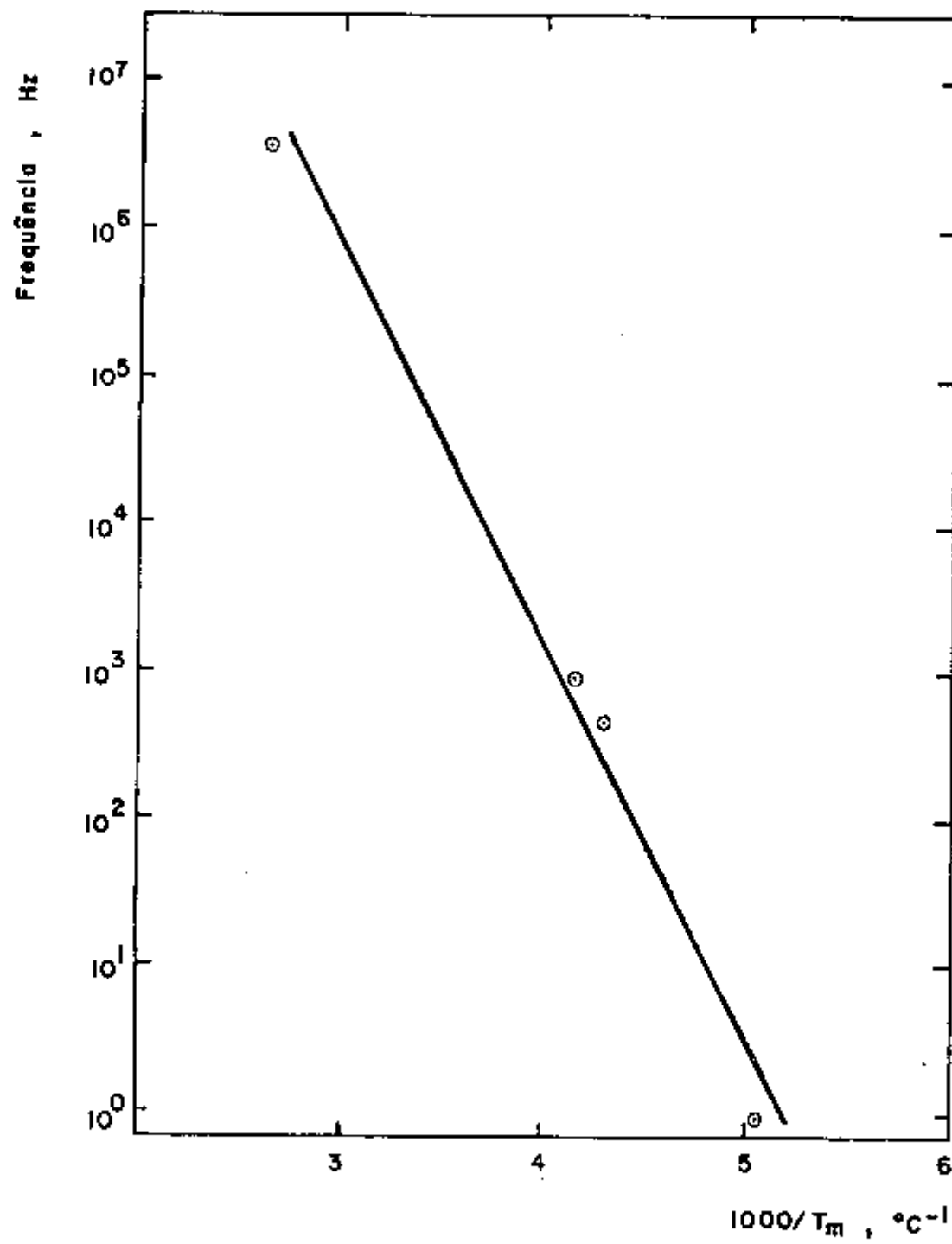


FIGURA 4.4. - Variação da frequência de oscilação com o inverso da temperatura.

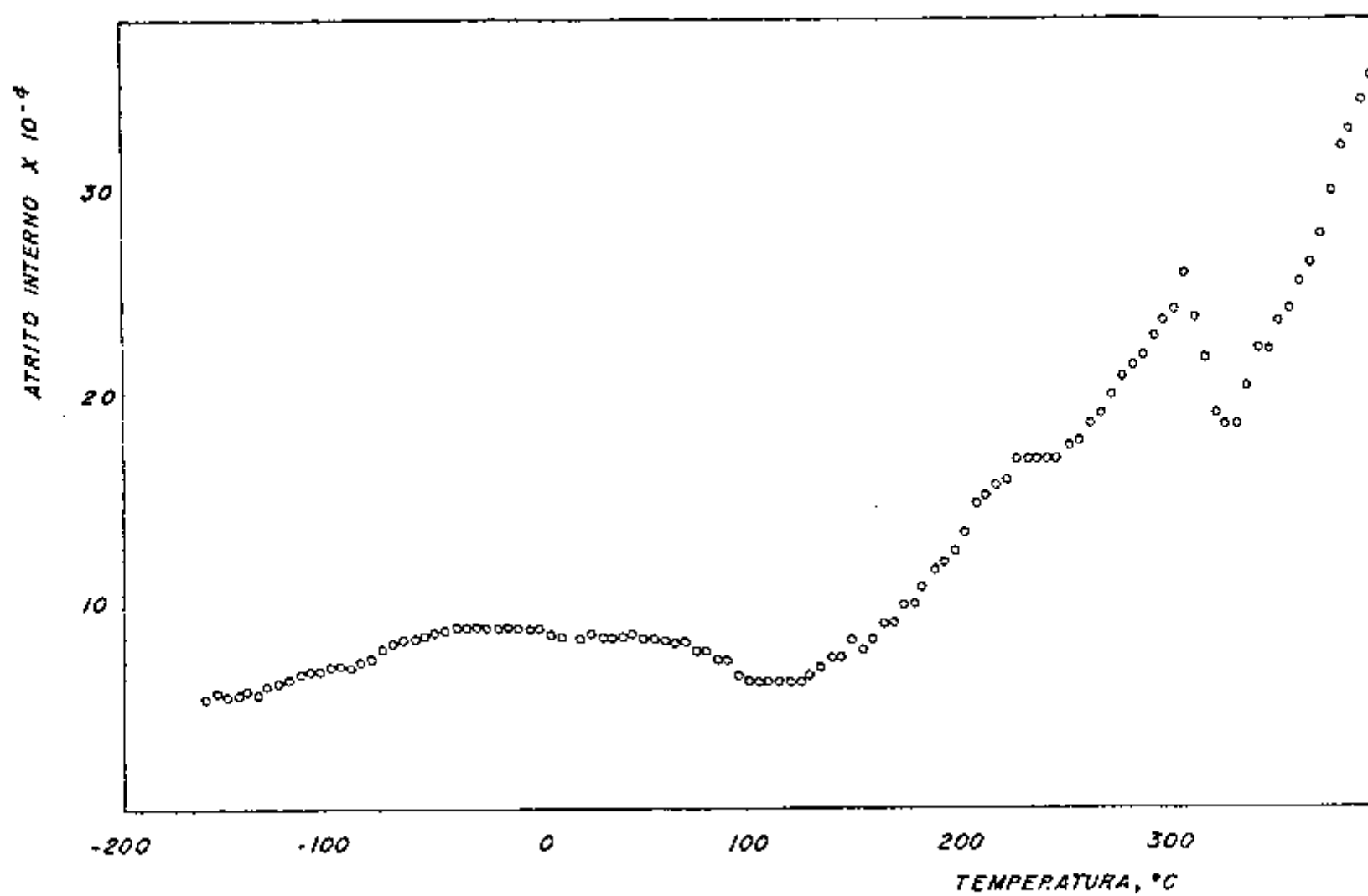


FIGURA 4.5. - Variação do atrito interno para dióxido de urânio estequiométrico com tamanho médio de grão de 19 μm .

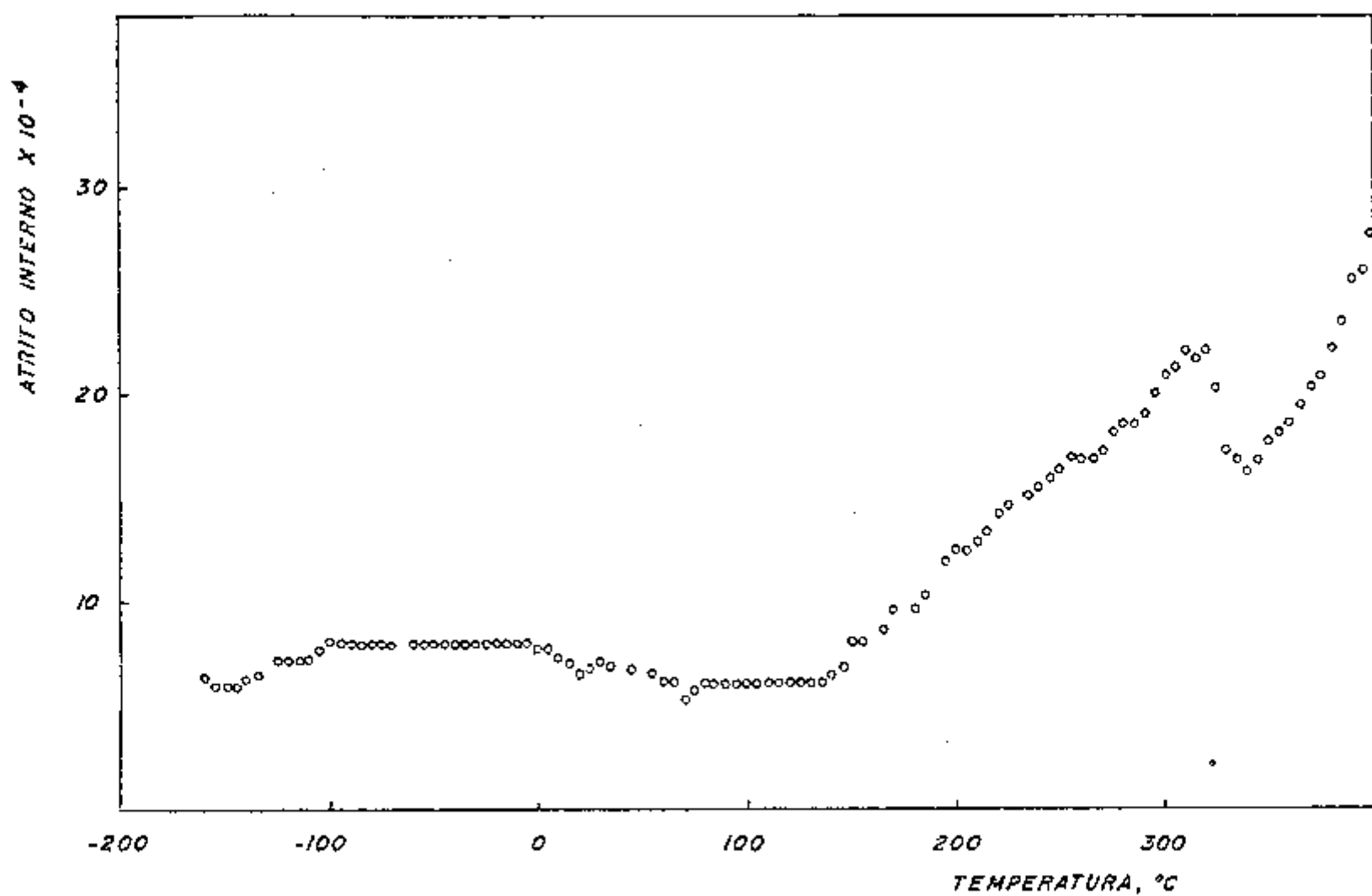


FIGURA 4.6. - Variação do atrito interno para dióxido de urânio estequiométrico com tamanho médio de grão de 25 μm .

te comportamento é observado também por outros autores (15), (33), a frequências mais elevadas, com a ocorrência de um pico de atrito interno, associado a relaxação através do contorno de grão.

O efeito do tamanho de grão nos valores de atrito interno mostram uma tendência para a diminuição do atrito interno com o aumento do tamanho de grão, o que pode ser observado na figura 4.7, para valores de atrito interno/ à máxima temperatura de trabalho (400°C). Isto é consistente com a observação de que com o crescimento de grão tendemos a ter um monocristal, onde inexistente o pico de relaxação devido a contorno de grão.

A presença de poros nas amostras pode afetar os valores de atrito interno pela diminuição do comprimento do contorno de grão, pois a relaxação ocorre ao longo do contorno, através de um escorregamento entre eles. Portanto, a presença de poros junto ao contorno pode afetar as medidas de atrito interno, diminuindo-o, enquanto a presença de poros no interior dos grãos não terá efeito algum.

O efeito da porosidade nos resultados obtidos pode ser observado por intermédio da microestrutura das amostras. Na figura 3.11 observa-se que na amostra de 13 µm, os poros estão localizados principalmente no interior dos grãos, com porosidades superior a das demais amostras.

Nas amostras de 19 e 25 μm , figuras 3.14 e 3.17, observa-se a presença de poros maiores e localizados principalmente nos contornos de grão, o que contribui para uma diminuição do atrito interno, ou seja, uma relaxação menor.

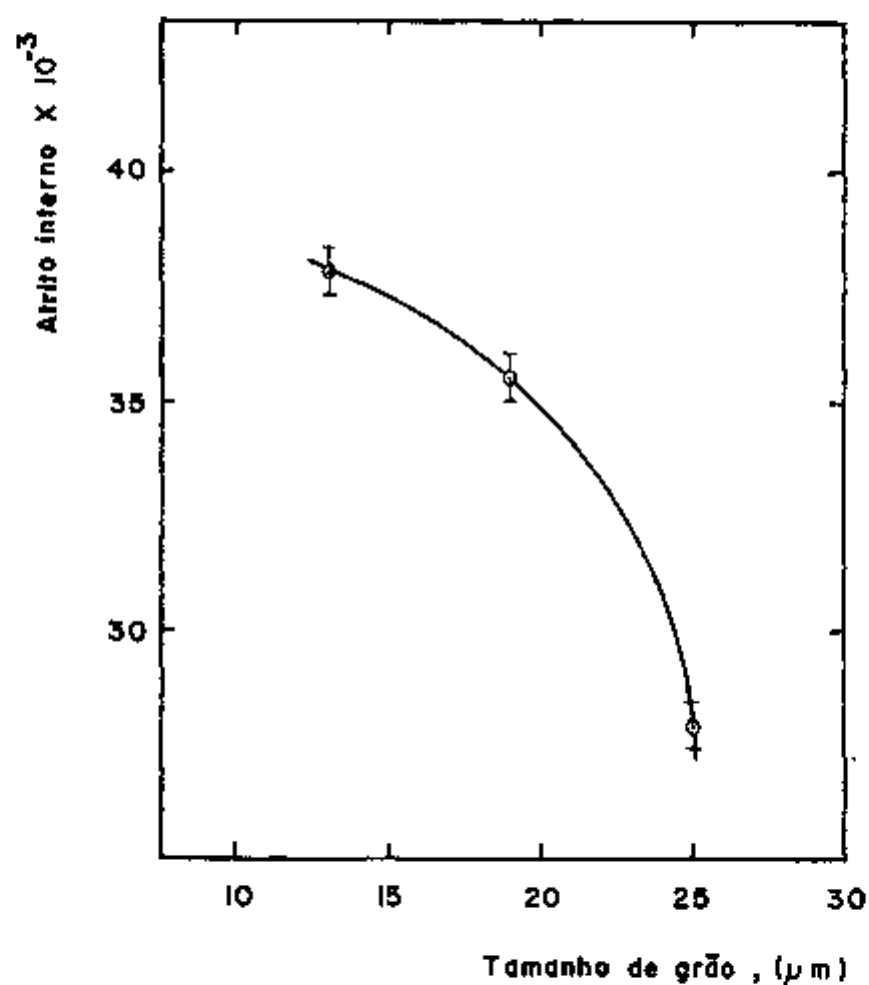


FIGURA 4.7. - Variação do atrito interno com o tamanho de grão à 400°C.

O aumento do atrito interno observado a partir de 200°C, com a presença de um pico em torno de 310°C, é devido a processos de relaxação inerentes ao equipamento / utilizado.

4.2. - VARIAÇÃO DO PERÍODO DE OSCILAÇÃO COM A TEMPERATURA

A determinação do período ou frequência de oscilação da amostra é importante não somente no cálculo/ da energia de ativação do processo, mas também na determinação do módulo dinâmico, que em sistemas de oscilação livre, é inversamente proporcional ao quadrado do período (9).

A variação do período de oscilação é mostrada na figura 4.8 para a amostra não-estequiométrica e nas figuras 4.9, 4.10 e 4.11 para amostras de 13, 19 e 25 µm, respectivamente.

Os comportamentos observados em todas / as amostras são semelhantes, com uma diminuição do período / de oscilação a partir de - 160°C, atingindo valores mínimos/ entre - 80 e - 60°C. Tais comportamentos análogos são ex plicáveis por transformações de fase e/ou efeitos de trata - mentos térmicos em materiais deformados. Esta diminuição / do período de oscilação pode estar associada a influências inerentes ao equipamento.

O comportamento da curva até 300°C mostra um aumento gradual do período de oscilação, ou seja, uma diminuição do módulo, quando ocorre uma variação na inclinação da curva, com a mudança do período. Tal mudança está associada ao pico de atrito interno observado próximo a 300°C . Um aumento linear do período passa a ocorrer novamente a partir de aproximadamente 350°C , até a temperatura máxima de trabalho.

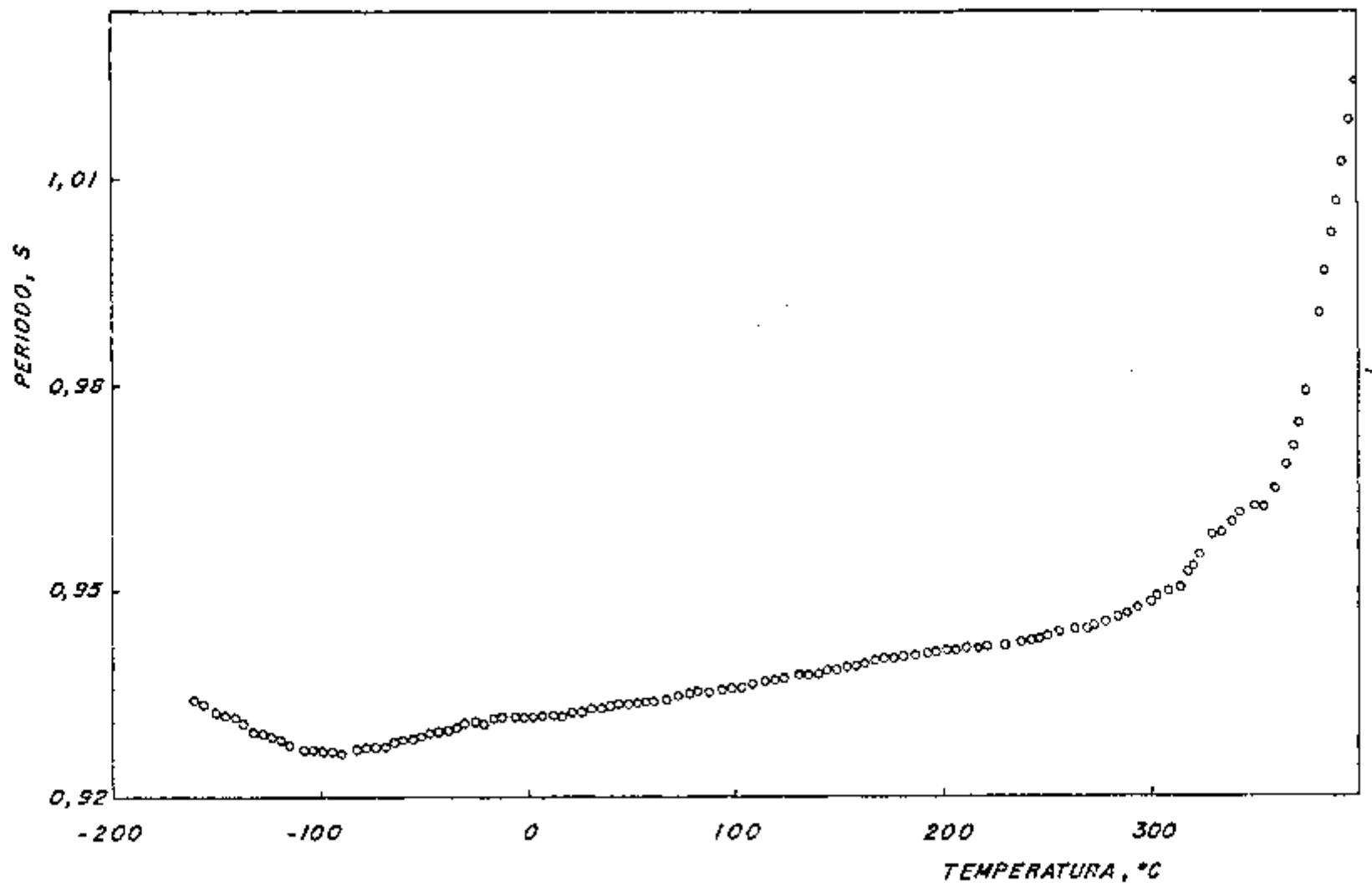


FIGURA 4.8. - Variação da frequência de oscilação para dióxido de urânio não-estequiométrico.

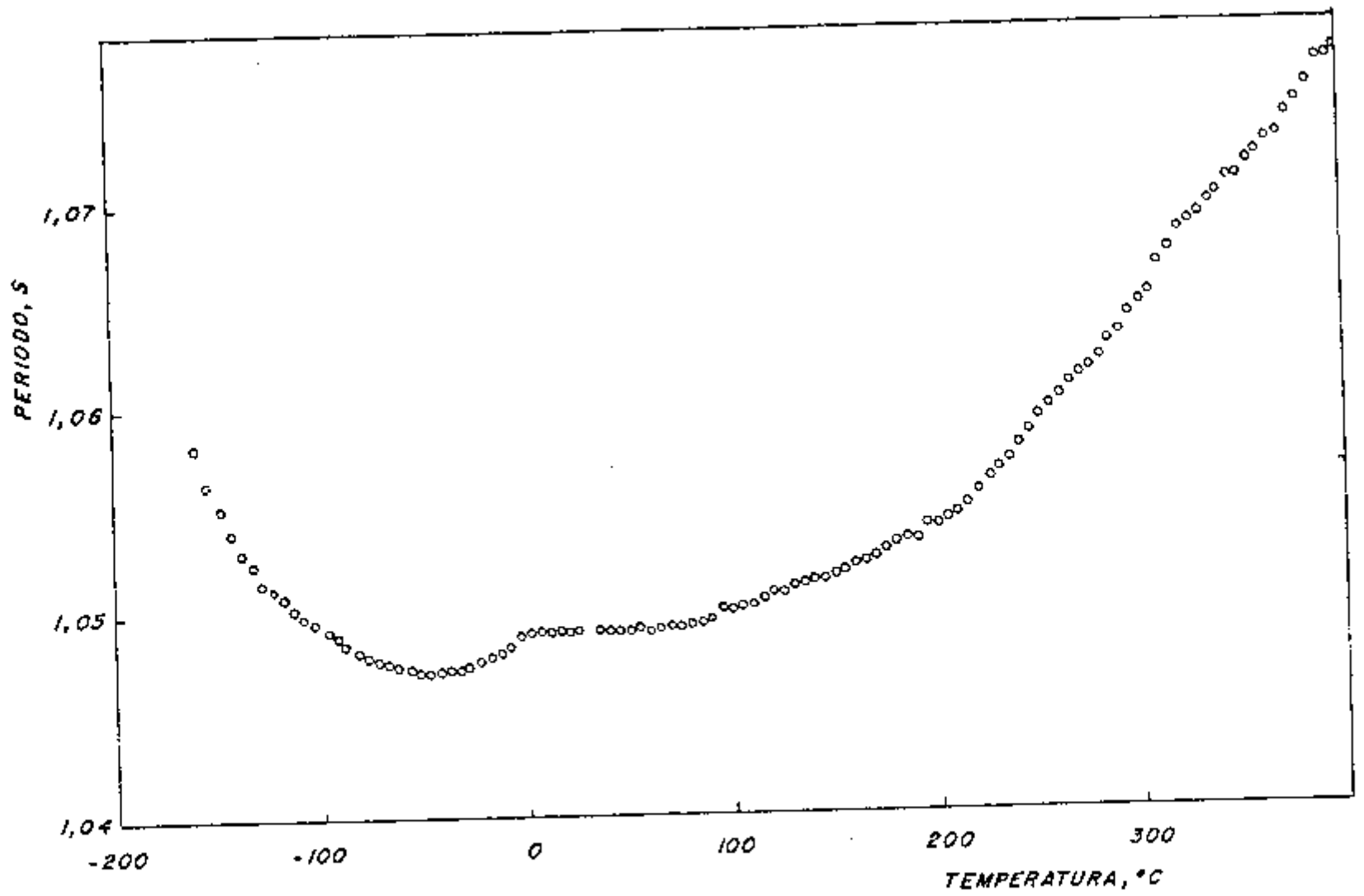


FIGURA 4.9. - Variação da frequência de oscilação para dióxido de urânio es tequiométrico com tamanho de grãos de 13 μm .

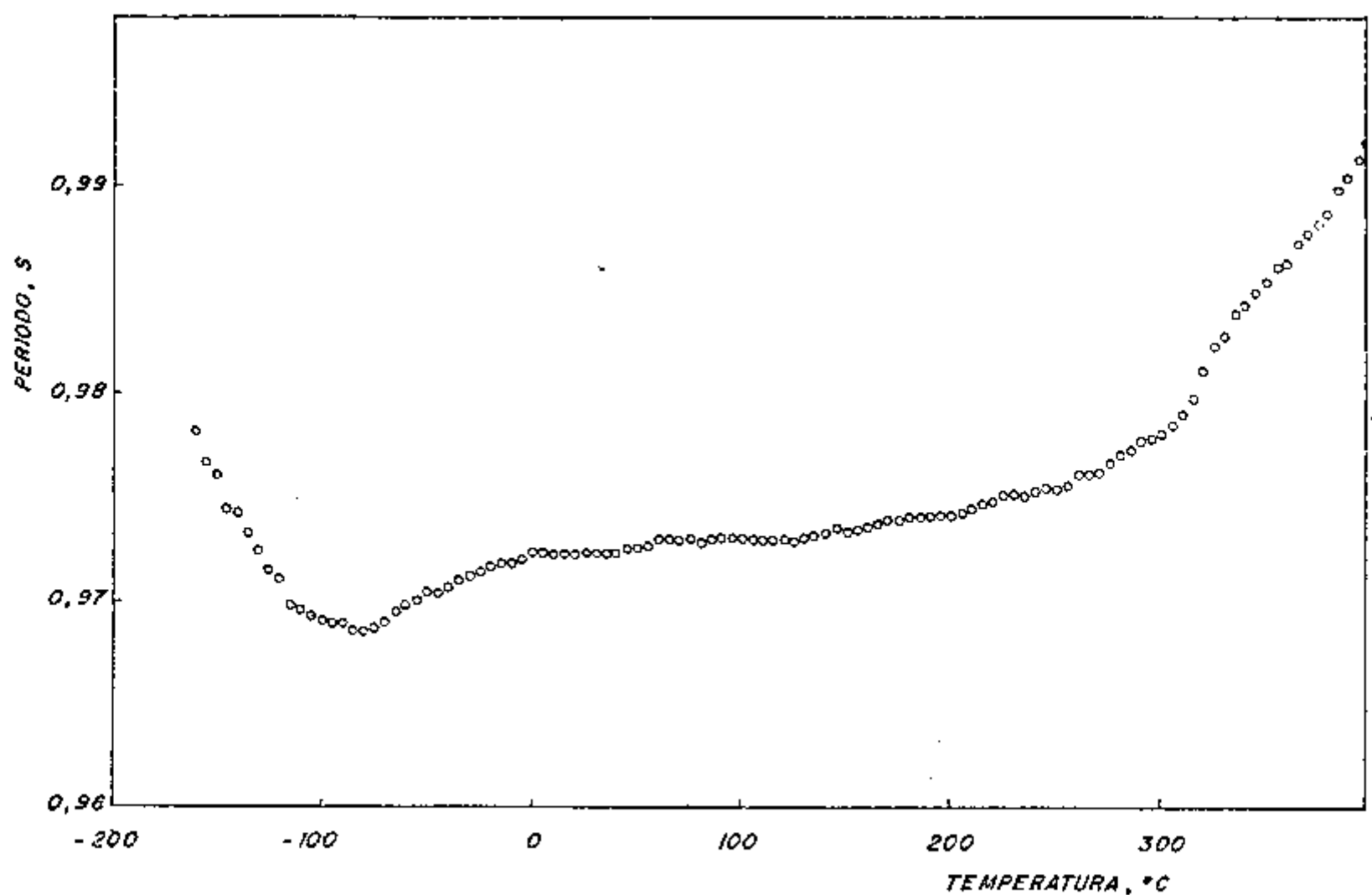


FIGURA 4.10 - Variação da frequência de oscilação para dióxido de urânio estequiométrico com tamanho médio de grãos de 19 μm .

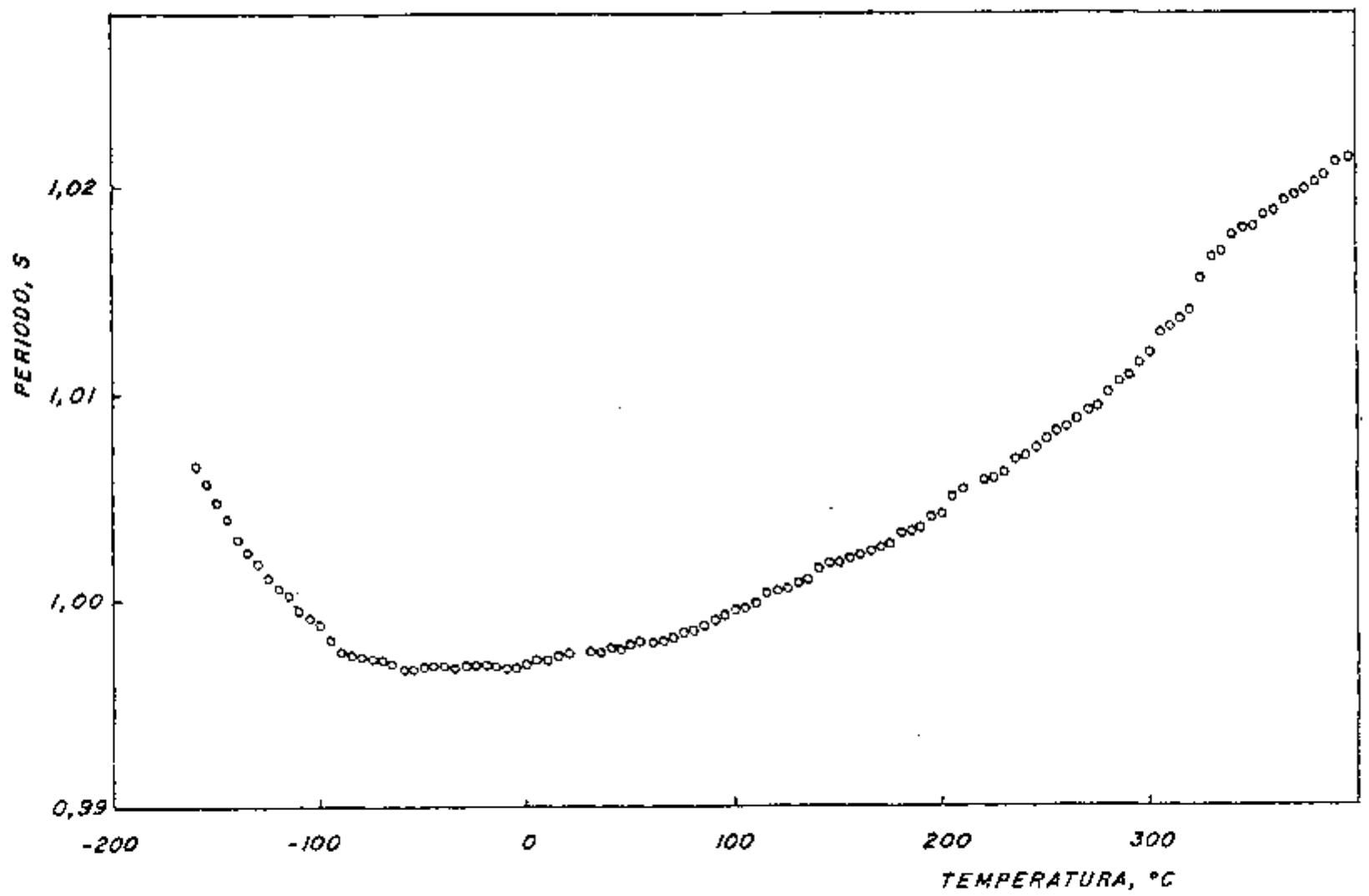


FIGURA 4.11. - Variação da frequência de oscilação para dióxido de urânio estequiométrico com tamanho médio de grãos de 25 μm .

5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Dos resultados obtidos neste trabalho podemos concluir que:

a) o efeito da variação de estequiometria nas propriedades anelásticas do dióxido de urânio é bastante acentuado na faixa de -100 a 0°C , com a ocorrência de um largo e irregular pico de atrito interno.

b) cálculos da energia de ativação do processo mostram que a presença deste pico mencionado acima, é devida a vários processos de relaxação.

c) assumindo-se a presença de um pico de atrito interno entre -80 e -70°C , o valor da energia de ativação obtido ($0,54$ eV) é consistente com os valores observados a frequências médias e altas, para reorientação de defeitos induzidos por tensão.

d) o efeito da microestrutura é observado somente acima de 340°C , através do aumento do atrito interno, por processos de relaxação através de contorno de grão.

e) o aumento do tamanho de grão impli

numa diminuição do atrito interno. A porosidade presente / nas amostras afeta o atrito interno, quando localizada no contorno de grão, diminuindo seus valores.

SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS:

Através do desenvolvimento do presente trabalho, foram observados alguns aspectos que poderão / ser objeto de estudos úteis e detalhados futuramente. Nesse contexto, são sugeridos os seguintes trabalhos:

a) verificar a posição do pico devido à oxidação, para amostras com diferentes valores da relação O/U, e também a variação do atrito interno com a quantidade de fase U_4O_9-y .

b) realizar ensaios numa larga faixa de frequências, para amostras com a mesma relação O/U e mesmo histórico térmico, o que possibilitará alcançar valores / mais corretos para a energia de ativação.

c) desenvolver ensaios a altas temperaturas para se determinar de forma mais completa o fenômeno de relaxação por contorno de grão; empregar também monocristais, nas determinações de atrito interno a elevadas temperaturas, eliminando assim o efeito dos contornos de grão.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ADDA, Y. & PHILIBERT, J. *La diffusion dans les solides*. Paris, Universitaires, 1966.
2. ARIYA, S.M. & MOROZOVA, M.P. The properties of salt-form compounds of variable composition and views on their chemical structure, *J. gen. Chem.*, 28: 2647-52, 1957.
3. ARIYA, S.M. & POPOV, Y.G. Lattice structure of titanium and vanadium monoxides. *J. gen. Chem.*, 32: 2054-7, 1962.
4. ARIYA, S.M.; MOROZOVA, M.P.; VOL'F, E. Production of the preparations and the method of calorimetric determinations. *Russ. J. inorg. Chem.*, 2: 17-30, 1957.
5. ASTBURY, N.F. & DAVIS, W.R. Internal friction in ceramics. *Proc. Br. Ceram. Soc.*, 7: 1-19, 1965.
6. BURTON, B. & REYNOLDS, G.L. The sintering of grain boundary cavities in uranium dioxide. *J. nucl. Mat.*, 45:10-4, 1972.
7. CATLOW, C.R.A. Point defects and electronic properties of uranium dioxide. *Proc. R. Soc. London*, A 335: 533-61, 1977.

8. CHANG, R. The elastic and anelastic properties of refractory materials for high-temperature applications. In : KRIEGEL, W.W. & PALMOUR, H., eds. *Mechanical properties of engineering ceramics: proceedings of a conference on ... held in Raleigh, 9 - 11 March 1960*. New York, N.Y., Interscience, 1961. p.209-19.
9. DE BATIST, R. *Internal friction of structural defects in crystalline solids*. Amsterdam, North-Holland, 1972.
10. DOI, H. Internal friction of single crystal U_4O_9 . *J. appl. Phys.*, 40: 3080-6, 1969.
11. DOMOTO, K.; IGATA, I.; KOBAYASHI, S. Relaxation peaks in sintered $UO_2 - U_4O_9$ pellets. *J. nucl. Mater.*, 33: 90-8, 1969.
12. FORLANO, R.J.; ALLEN, A.W.; BEALS, R.J. *Elasticity and anelasticity of uranium oxides at room temperature*. Argonne, Ill., Argonne National Laboratory, 1965. (ANL - 7101).
13. FREITAS, C.T. & SOUZA SANTOS, T.D. *Sinterização em atmosfera redutora e retificação de pastilhas de oxido de urânio no Instituto de Energia Atômica de São Paulo*. São Paulo, Instituto de Energia Atômica, out. 1976. (IEA - Pub - 438).

14. GREENWOOD, N.N. *Ionic crystals, lattice defects and nonstoichiometry*. London, Butterworths, 1970.
15. HALL, A.R. Elastic moduli and Internal friction of some uranium ceramics. *J. nucl. Mat.*, 37: 314-23, 1970.
16. HASIGUTI, R.R.; IGATA, N.; TONOMAE, R.; NAKAMURA, Y; SAO, N.; DOMOTO, R. Measurements of internal friction on nuclear materials. In: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Nondestructive testing in nuclear technology : proceedings of a symposium on...held in Bucharest , 17-21 May 1965*. Vienna, 1965. p. 307-29.
17. IGATA, N.; DOMOTO, K., HASIGUTI, R.R. Frictional force coefficient of a moving dislocation in uranium dioxide with excess oxygen. *J. phys. Chem. Sol.*, 31: 1883-8 , 1970.
18. INSTITUTO DE ENERGIA ATÔMICA. *Método de determinação de área de superfície específica de pós*. São Paulo, ag. 1974. (Norma interna CMN/IEA M-5).
19. INSTITUTO DE ENERGIA ATÔMICA. *Método de determinação do tamanho de grão de partículas sinterizadas de UO_2 (método da intersecção com circunferência)*. São Paulo, ag. 1974. (Norma interna CMN/IEA M-5).

20. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Thermodynamics and transport properties of uranium dioxide and related phases: report of the panel on ... held in Vienna, 16-20, March, 1964*. Vienna, 1965. (Technical report series, nº 39).
21. ISHII, T.; NAITO, R.; OSHIMA, K. Electrical conductivity and defect structures in non-stoichiometric UO_{2+x} . *J. nucl. Mater.*, 36: 288-96. 1970.
22. KÉ, T.S. Experimental evidence of the viscous behavior of grain boundaries in metals. *Phys. Rev.*, 71: 533-46, 1947.
23. KOFSTAD, P. *Nonstoichiometry, diffusion, and electrical conductivity in binary metal oxides*. New York, N.Y. , Wiley, 1972.
24. KOSHIMIZU, S. *Restauração do atrito interno dependente da amplitude em LiF monocristalino e deformado plasticamente*. São Paulo, Instituto de Energia Atômica, nov. 1977. (Dissertação de Mestrado). (IEA-Diss-032).
25. MAC EWAN, J.R. & HAYASHI, J. Grain growth in UO_2 : some factors influencing equiaxed grain growth. *Proc. Brit. Cer. Soc.*, 7, 245-72, 1967.

26. MARLOWE, M.O. & WILDER, D.R. *Elasticity and internal friction through the kilocycle range: review and annotated bibliography*. Ames, Iowa State University of Science and Technology, 1964. (IS-925).
27. MATZKE, H. Lattice and irradiation damage in ThO_2 , UO_2 and (U, Pu) O_2 . In: BLANK, H. & LINDER, R. *Plutonium and other actinides 1975: proceedings of the conference...*, Baden Baden, 10-13 Sept 1975. Amsterdam, North Holland, 1976. p.801-31.
28. NAGELS, P.; VAN LIERDE, W.; DE BATIST, R.; DENAYER, M.; DE JONGUE, L; GEVERS, R. Migration and re-orientation of oxygen interstitials, and migration and self-diffusion of uranium in UO_2 . In: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Thermodynamics with emphasis on nuclear materials and atomic transport in solids: proceedings of a symposium on... held in, Vienna, 22-27 July 1965*. Vienna, 1966. p. 311-26.
29. NORTON, J.T. A torsion pendulum instruments for measuring, internal friction. *Rev. scient, Instrum.*, 10: 77-81, 1939.
30. NOWICK, A.S. & BERRY, B.S. *Anelastic relaxation in crystalline solids*. New York, N.Y., Academic, 1972.

31. NOWICK, A.S. & HELLER, W.R. Anelasticity and stress-induced ordering of point defects in crystals. *Adv. Phys.*, 12: 251-98, 1963.
32. OLANDER, D.R. *Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements*. Oak Ridge, Tenn., U.S. Atomic Energy Commission, 1976. (TID - 26711-P1).
33. PADEL, A. & NOVION, C. Constantes elastiques des carbures, nitrures et oxydes d'uranium et de plutonium. *J. nucl. Mat.*, 33: 40-51, 1969.
34. PERRON, P.O. *Thermodynamics of non-stoichiometric uranium dioxide*. Chalk River, Ont., Atomic Energy of Canada Limited, May 1968. (AECL - 3072).
35. SNOEK, J.L. Effect of small quantities of carbon and nitrogen on the elastic and plastic properties of iron. *Physics*, 8: 711-33, 1941.
36. SOCINO, G. DEBATIST, R.; GEVERS, R. Relaxation processes in single-crystal UO_2 . *Proc. Br. Ceram. Soc.*, 9: 73-81, 1967.

37. SOUZA SANTOS, T.D. *Combustíveis cerâmicos e grafita*.
Rio de Janeiro, Comissão Nacional de Energia Nuclear,
1961. (Série engenharia nuclear). (CNEN - I - EN).
38. THUMMLER, F. & THOMMA, W. The sintering process. *Metals Rev.*, 115: 69 - 118, 1967.
39. WACHTMAN, J.B. & PEISER, H.S. Symmetry conditions for internal friction caused by jumping of point defects in crystals. *Appl. Phys. Lett.*, 1: 20 - 2, 1962.
40. WILLIS, B.T.M. The defect structure of hiper-stoichiometric uranium dioxide. *Acta crystallogr.*, A34: 88-90, 1978.
41. WILLIS, B.T.M. Positions of the oxygen atoms in $UO_{2.13}$. *Nature (London)*, 197: 755-6, 1963.
42. ZENER, C. *Élasticité et anélasticité des métaux*. Paris, Dunod, 1955.



**THE F_N METHOD APPLIED TO
MULTIGROUP TRANSPORT THEORY
IN PLANE GEOMETRY**

by
ROBERT DAVID MARTINEZ GARCIA

**DEPARTMENT OF NUCLEAR ENGINEERING
NORTH CAROLINA STATE UNIVERSITY AT RALEIGH**

1982

ABSTRACT

GARCIA, ROBERTO DAVID MARTINEZ. The F_N Method Applied to Multigroup Transport Theory in Plane Geometry. (Under the direction of CHARLES EDWARD SIEWERT.)

A study of multigroup transport theory for the special case of slowing-down in plane geometry is reported. Anisotropic scattering effects are included by using an L^{th} order Legendre expansion of the transfer cross section. The theory reduces the calculation of the reflected and transmitted angular fluxes to a sequence of one-group problems involving only angular fluxes at the boundaries. The theory is then extended to yield the angular flux at any location within a slab. The F_N method is used to establish particularly accurate solutions for several test problems. The computational aspects of the method are studied, and numerical results are given, accurate to five significant figures, for all considered problems.

THE F_N METHOD APPLIED TO
MULTIGROUP TRANSPORT THEORY IN PLANE GEOMETRY

by
ROBERTO DAVID MARTINEZ GARCIA

Orientador: C. E. Siewert

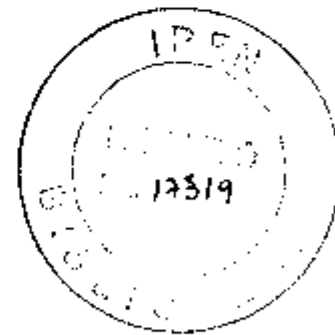
A thesis submitted to the Graduate Faculty of
North Carolina State University
in partial fulfillment of the
requirements for the Degree of
Doctor of Philosophy

DEPARTMENT OF NUCLEAR ENGINEERING

Raleigh

1982

APPROVED BY:



Chairman of Advisory Committee

INSTITUTO DE FÍSICA DE PERNAMBUCO
IPEN

BIOGRAPHY

Roberto David Martínez Garcia was born in Vigo, Spain on June 5, 1950 and became a Brazilian citizen in 1977. He received his high-school education in São Paulo, Brazil at the Instituto Estadual de Educação Professor Alberto Conte, entered Universidade de São Paulo, São Paulo, Brazil in 1969, and received a Bachelor of Science degree in Physics in 1974.

In 1975 the author accepted employment with the Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo, Brazil as a Researcher at the Reactor Physics Division. In the same year he initiated his graduate studies at the Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brazil and received a Master of Science degree in Nuclear Engineering in 1977 with a thesis in neutron transport theory.

The author entered North Carolina State University in August 78 and since then has been working towards the Doctor of Philosophy degree in Nuclear Engineering.

The author is married to the former Iara Maria Pinheiro Simões and has a daughter, Juliana.

ACKNOWLEDGEMENTS

The author wishes to express his deepest appreciation to Dr. C. E. Siewert, Chairman of his Advisory Committee for his invaluable guidance and encouragement during the course of this and related work. The author wishes to thank the other members of the Committee, Dr. E. E. Burniston, Dr. M. N. Özişik, and Dr. K. Verghese for their support and encouragement. Special thanks are also extended to Dr. J. H. Renken of Sandia National Laboratories for several helpful discussions concerning this work, for suggesting one of the test problems, and for permitting the quotation of the DTF69 results in Chapters 4, 5, and 6, and to Dr. D. H. Roy for the interest shown in this study.

Support of this research by the Babcock & Wilcox Company and the National Science Foundation is gratefully acknowledged. The author is particularly grateful to the Comissão Nacional de Energia Nuclear and the Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, both of Brazil, for their financial support.

Finally, the author would like to express his gratitude to his wife, Iara, and daughter, Juliana, for their patience and encouragement throughout the course of this study.

TABLE OF CONTENTS

	Page
LIST OF TABLES	v
1. INTRODUCTION	1
2. REVIEW OF LITERATURE	3
2.1 Multigroup Methods	3
2.2 The F_N Method	5
3. THE MULTIGROUP EQUATIONS	7
4. A SINGLE SLAB WITH ISOTROPIC SCATTERING	11
4.1 Introduction	11
4.2 Analysis	12
4.3 The F_N Method	21
4.4 Computational Aspects and Numerical Results	28
5. A SINGLE SLAB WITH L-TH ORDER ANISOTROPIC SCATTERING	40
5.1 Introduction	40
5.2 Analysis	41
5.3 The F_N Method	56
5.4 The Interior Angular Fluxes	65
5.5 Computational Aspects and Numerical Results	74
6. MULTISLABS WITH L-TH ORDER ANISOTROPIC SCATTERING	98
6.1 Introduction	98
6.2 The F_N Method	99
6.3 A Test Problem	104
7. CONCLUSIONS	118
8. LIST OF REFERENCES	121

LIST OF TABLES

	Page
4.1 The exit angular fluxes $\psi_i(L, -\mu)$ for $i = 1$ to 8	33
4.2 The exit angular fluxes $\psi_i(L, -\mu)$ for $i = 9$ to 16	34
4.3 The exit angular fluxes $\psi_i(R, \mu)$ for $i = 1$ to 8	35
4.4 The exit angular fluxes $\psi_i(R, \mu)$ for $i = 9$ to 16	36
4.5 A_i^* and B_i^* for the 16-group problem	37
4.6 A_i^* and B_i^* for the 19-group problem	39
5.1 The positive discrete eigenvalues $\nu_{i,0}$	80
5.2 The exit angular fluxes $\psi_i(L, -\mu)$ for $i = 1$ to 5	81
5.3 The exit angular fluxes $\psi_i(L, -\mu)$ for $i = 6$ to 10	81
5.4 The exit angular fluxes $\psi_i(L, -\mu)$ for $i = 11$ to 15	82
5.5 The exit angular fluxes $\psi_i(L, -\mu)$ for $i = 16$ to 20	82
5.6 The exit angular fluxes $\psi_i(R, \mu)$ for $i = 1$ to 5	83
5.7 The exit angular fluxes $\psi_i(R, \mu)$ for $i = 6$ to 10	83
5.8 The exit angular fluxes $\psi_i(R, \mu)$ for $i = 11$ to 15	84
5.9 The exit angular fluxes $\psi_i(R, \mu)$ for $i = 16$ to 20	84
5.10 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/4$ and $i = 1$ to 5	85
5.11 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/4$ and $i = 6$ to 10	85
5.12 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/4$ and $i = 11$ to 15	86
5.13 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/4$ and $i = 16$ to 20	86
5.14 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/2$ and $i = 1$ to 5	87

LIST OF TABLES (Continued)

	Page
5.15 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/2$ and $i = 6$ to 10	87
5.16 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/2$ and $i = 11$ to 15	88
5.17 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/2$ and $i = 16$ to 20	88
5.18 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + 3\Delta/4$ and $i = 1$ to 5	89
5.19 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + 3\Delta/4$ and $i = 6$ to 10	89
5.20 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + 3\Delta/4$ and $i = 11$ to 15	90
5.21 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + 3\Delta/4$ and $i = 16$ to 20	90
5.22 The group fluxes $\phi_i(z)$	93
5.23 A_i^* and B_i^* for the 20-group problem	94
5.24 A_i^* and B_i^* for the 19-group problem with P_5 scattering	97
6.1 The positive discrete eigenvalues $\nu_{i,0}^r$	107
6.2 The exit angular fluxes $\psi_i(z_0, -\mu)$ for $i = 1$ to 5	110
6.3 The exit angular fluxes $\psi_i(z_0, -\mu)$ for $i = 6$ to 10	110
6.4 The exit angular fluxes $\psi_i(z_0, -\mu)$ for $i = 11$ to 15	111
6.5 The exit angular fluxes $\psi_i(z_0, -\mu)$ for $i = 16$ to 20	111
6.6 The exit angular fluxes $\psi_i(z_5, \mu)$ for $i = 1$ to 5	112
6.7 The exit angular fluxes $\psi_i(z_5, \mu)$ for $i = 6$ to 10	112
6.8 The exit angular fluxes $\psi_i(z_5, \mu)$ for $i = 11$ to 15	113
6.9 The exit angular fluxes $\psi_i(z_5, \mu)$ for $i = 16$ to 20	113

LIST OF TABLES (Continued)

	Page
6.10 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = z_2 + \Delta_3/2$ and $i = 1$ to 5	114
6.11 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = z_2 + \Delta_3/2$ and $i = 6$ to 10	114
6.12 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = z_2 + \Delta_3/2$ and $i = 11$ to 15	115
6.13 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = z_2 + \Delta_3/2$ and $i = 16$ to 20	115
6.14 The group fluxes $\phi_i(z)$	116
6.15 The group albedos A_i^* and the transmission factors R_i^*	117

1. INTRODUCTION

The task of solving the steady-state, energy-dependent, linear transport (Boltzmann) equation in plane geometry without azimuthal dependence

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \psi(z, \mu, E) + \sigma(z, E) \psi(z, \mu, E) \\ = \iint \sigma(z, E') f(z; \mu', E' \rightarrow \mu, E) \psi(z, \mu', E') d\mu' dE' \\ + Q(z, \mu, E) \end{aligned} \quad (1.1)$$

is frequently encountered in transport problems. It is well known that the Boltzmann equation, formulated in early studies on kinetic theory of gases (Boltzmann, 1872), plays also an important role in the fields of radiative transfer (Chandrasekhar, 1950), neutron transport theory (Davison, 1957), radiation shielding (Goldstein, 1959), and rarefied gas dynamics (Cercignani, 1969). In the context of neutron transport theory $\psi(z, \mu, E)$, the fundamental quantity in equation (1.1), is known as the energy-dependent angular flux, a function of the space variable (z), the direction cosine of the neutron velocity with respect to the z -axis (μ), and the neutron energy (E). In addition, $\sigma(z, E)$ denotes the macroscopic total cross section, $f(z; \mu', E' \rightarrow \mu, E)$ the transfer probability (both are assumed to be known experimentally) and $Q(z, \mu, E)$ represents extraneous sources that may be present throughout the host medium.

In this work the multigroup method (Davison, 1957; Bell and Glasstone, 1970) is employed to discretize the energy dependence of equation (1.1) and the resulting set of multigroup equations for a class of radiation transport problems is solved by an extension of the F_N method initially introduced for monoenergetic neutron transport theory (Siewert and Benoist, 1979).

In Chapter 2, a review of previous work in multigroup transport theory is presented and applications of the F_N method since its introduction as well as its main characteristics are summarized.

In Chapter 3 a derivation of the multigroup equations from equation (1.1) is presented in an abbreviated manner and in Chapters 4, 5, and 6 basic multigroup problems are solved and accurate numerical results are reported.

2. REVIEW OF LITERATURE

2.1 Multigroup Methods

Historically the multigroup approach to the Boltzmann equation originated from attempts to describe the phenomenon of neutron transport in a more realistic manner than that provided by one-speed theory.

Early methods for solving the neutron transport equation (Davison, 1957) include the spherical harmonics method, generalized for multigroup theory (Mandl, 1953) some years after its introduction (Mark, 1944, 1945; Marshak, 1947) and the discrete ordinates method, based on replacing the integral term in the transport equation by a numerical quadrature (Wick, 1943; Chandrasekhar, 1944). The S_N method (Carlson, 1953), a different version of the original discrete ordinates method, proved to be very important from a practical point of view due to its capability of handling problems with a high degree of complexity. In today's computer codes this method, including a series of improvements incorporated since its introduction, is the most widely employed technique for solving the one-dimensional multigroup transport equation. Although its utilization in practical calculations is evidence of its merits, the S_N method is known to have difficulties in dealing with deep-penetration problems and strong absorbing media (e.g., reactor control rods).

Analytical methods were also developed for studying the multigroup transport equation. Because these methods have limitations impeding

their application to practical calculations they are mainly used to obtain highly accurate solutions to basic problems which can be used as standards for accuracy assessment of numerical methods. Another important aspect of analytical methods is the fact that solutions can be carried out in a systematic and rigorous way and thus a greater insight into the mathematical structure of the transport equation is gained. In the past twenty years the method of singular eigenfunction expansions has been employed much more than any other analytical method, especially in multigroup theory, and for this reason a summary of the most important achievements of this method seems appropriate here. Some basic proofs were carried out initially by Davison (1945) but several aspects remained obscure until Case (1960) demonstrated clearly the adequacy of the method for one-speed neutron transport theory. A large number of papers devoted to two-group neutron transport theory with isotropic or linearly anisotropic scattering is available in the literature (McCormick and Kušcer, 1973). The reader is referred, for example, to the works of Želazny and Kuszell (1961), Siewert and Shieh (1967), Metcalf and Zweifel (1968a, 1968b), Siewert and Ishiguro (1972), Reith and Siewert (1972), Siewert, Burniston, and Kriese (1972) and Burniston, Mullikin, and Siewert (1972). Several papers with numerical results for various basic problems in two-group theory are also available and some studies not restricted to the two-group case have been reported, for example, by Yoshimura and Katsuragi (1968) and Pahor and Shultis (1969a, 1969b) for isotropic scattering and Leuthäuser (1971) for linearly anisotropic scattering. Some works based on modal expansions for the energy variable

in the transport equation that yield essentially the same multigroup equations have been reported in the literature. Among others, reference can be made to the works of Bednarz and Mika (1963), Zumbrunn (1965), Leonard and Ferziger (1966a, 1966b), Shultis (1969), and Silvennoinen and Zweifel (1972). The method of Bowden and co-workers, based on the analytic continuation of the μ -variable into the complex plane (Bowden, McCrosson, and Rhodes, 1968; Bowden and Bullard, 1969), has also been extended to multigroup transport theory with isotropic scattering (Bowden and McCrosson, 1971). It is apparent from all these works, however, that an extraordinary computational effort would be required to solve multigroup problems with very general scattering laws by purely analytical methods.

Several additional methods applicable to multigroup theory are available in the literature (Williams, 1971); a review of numerical methods in neutron transport theory has been recently completed by Sanchez and McCormick (1981).

2.2 The F_N Method

The F_N method was introduced initially in one-speed neutron transport theory by Siewert and Benoist (1979). Some similarities with the C_N method (Benoist and Kavenoky, 1968) were apparent but soon it was realized that the method could be derived in an independent and simpler way (Grandjean and Siewert, 1979) by using the full-range orthogonality properties of the singular eigenfunctions (Case and Zweifel, 1967). The method was extended for solving problems with L^{th} order anisotropic

scattering (Siewert, 1978), for problems in spherical geometry (Siewert and Grandjean, 1979), and for multiregion problems (Devaux, Grandjean, Ishiguro, and Siewert, 1979). Other applications include polarization studies (Siewert, 1979; Maforino and Siewert, 1980), rarefied gas dynamics (Siewert, Garcia, and Grandjean, 1980), radiative transfer in inhomogeneous atmospheres (Mullikin and Siewert, 1980; Garcia and Siewert, 1981a, 1982a), azimuthally-dependent problems (Devaux and Siewert, 1980), transport of neutral hydrogen in plasmas (Garcia, Pomraning, and Siewert, 1982) and kinetic theory (Loyalka, Siewert, and Thomas, 1982).

Basically, in plane geometry, the method starts by deriving a set of singular integral equations and constraints for the surface angular fluxes. By approximating the unknown surface fluxes in terms of appropriate basis functions and using collocation, a set of linear algebraic equations that can be solved by standard techniques is obtained for the coefficients in the approximation. Once the linear system is solved and the surface fluxes are established, similar ideas can be used to derive the angular flux at any position inside the slab (Devaux, Siewert, and Yuan, 1982; Garcia and Siewert, 1982b). Computationally, the method is easy to use and can yield accurate numerical results.

With regard to multigroup transport theory, Siewert and Benoist (1981) and Garcia and Siewert (1981b) generalized the F_N method for slowing-down problems with isotropic scattering. An extension of the method to multigroup problems with L^{th} order anisotropic scattering was also developed (Garcia and Siewert, 1982c).

3. THE MULTIGROUP EQUATIONS

In this chapter we review briefly how the multigroup equations can be obtained from equation (1.1). Further details can be found in standard references on neutron transport theory (Davison, 1957; Bell and Glasstone, 1970).

Here we assume rotational symmetry for scattering events, i.e., the transfer probability is a function of the cosine of the scattering angle as viewed in the laboratory system (ν_0). In addition, we assume the following Legendre representation to be valid:

$$\sigma(z, E') f(z; E'+E, \nu_0) = \frac{1}{2} \sum_{\ell=0}^L (2\ell+1) \sigma_{\ell}(z; E'+E) P_{\ell}(\nu_0) \quad (3.1)$$

where

$$\sigma_{\ell}(z; E'+E) = \int_{-1}^1 \sigma(z, E') f(z; E'+E, \nu_0) P_{\ell}(\nu_0) d\nu_0 \quad (3.2)$$

If equation (3.1) is substituted into equation (1.1) and the addition theorem for the Legendre polynomials is used, we obtain

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial z} \psi(z, \mu, E) + \sigma(z, E) \psi(z, \mu, E) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\ell=0}^L (2\ell+1) P_{\ell}(\mu) \sigma_{\ell}(z; E'+E) \int_{-1}^1 \psi(z, \mu', E') P_{\ell}(\mu') d\mu' dE' \\ & \quad + Q(z, \mu, E) \quad (3.3) \end{aligned}$$

At this point the energy interval of interest is divided in M subintervals (groups) and equation (3.3) is integrated over the energy range for each subinterval. In general, the groups are numbered such that the i^{th} group contains all energies $E_i < E < E_{i-1}$. We obtain, for $i = 1, 2, \dots, M$, in the absence of upscattering:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_i(z, \mu) + \sigma_i(z) \psi_i(z, \mu) \\ = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^i \sum_{\ell=0}^L \sigma_{ij}(\ell, z) P_{\ell}(\mu) \phi_{j, \ell}(z) + Q_i(z, \mu) \end{aligned} \quad (3.4)$$

where

$$\psi_i(z, \mu) = \int_{E_i}^{E_{i-1}} \psi(z, \mu, E) dE, \quad (3.5)$$

$$\sigma_i(z) = \psi_i^{-1}(z, \mu) \int_{E_i}^{E_{i-1}} \sigma(z, E) \psi(z, \mu, E) dE, \quad (3.6)$$

$$\phi_{j, \ell}(z) = \int_{-1}^1 \psi_j(z, \mu) P_{\ell}(\mu) d\mu, \quad (3.7)$$

and

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(\ell, z) \\ = (2\ell+1) \phi_{j, \ell}^{-1}(z) \int_{E_j}^{E_{j-1}} \phi_{\ell}(z, E') \int_{E_i}^{E_{i-1}} \sigma_{\ell}(z; E' \rightarrow E) dE dE' \end{aligned} \quad (3.8)$$

with

$$\phi_{\ell}(z, E) = \int_{-1}^1 \psi(z, \mu, E) P_{\ell}(\mu) d\mu. \quad (3.9)$$

In addition,

$$Q_i(z, \mu) = \int_{E_i}^{E_{i-1}} Q(z, \mu, E) dE \quad (3.10)$$

Strictly speaking, equations (3.4) through (3.9) define a system of coupled nonlinear equations and one could argue that very little was accomplished in this step. Furthermore the right-hand-side of equation (3.6) depends on μ and thus it would be logical to expect $\sigma_i(z)$ also to be dependent on μ . One simple way to avoid this unpleasant situation is to postulate that the energy-dependent angular flux can be represented by a separable function inside each energy group $j = 1, 2, \dots, i$:

$$\psi(z, \mu, E) = F_j(z, \mu) G_j(E), \quad E \in [E_j, E_{j-1}] \quad (3.11)$$

with the arbitrary normalization

$$\int_{E_j}^{E_{j-1}} G_j(E) dE = 1 \quad (3.12)$$

With these assumptions the nonlinear system reduces to equation (3.4) plus

$$\sigma_i(z) = \int_{E_i}^{E_{i-1}} \sigma(z, E) G_i(E) dE \quad (3.13)$$

and

$$\sigma_{ij}(z, z) = (2\ell+1) \int_{E_j}^{E_{j-1}} G_j(E') \int_{E_i}^{E_{i-1}} \sigma_{\ell}(z; E'+E) dE dE' \quad (3.14)$$

We cannot expect to carry out an exact approach any further. A reasonable procedure is to choose explicit representations for $G_j(E)$, $j = 1, 2, \dots, i$ --infinite medium solutions are usually the best choice--and use $\sigma_i(z)$ and $\sigma_{ij}(\ell, z)$ from equations (3.13) and (3.14) as given inputs for solving equation (3.4). Once $\psi_i(z, \mu)$ is available for $i = 1, 2, \dots, M$, a better representation for $\psi(z, \mu, E)$ in terms of energy may be available and improved group-averaged cross sections may be computed from equations (3.13) and (3.14). If any significant difference is found in the solution of equation (3.4) with this improved cross-section set an iterative procedure may be used until the agreement is satisfactory. Alternative approaches to the problem have been reported in the literature (Bell and Glasstone, 1970).

We note that so far no specification concerning the nature of the interacting particles has been made. Since we are interested in applications for radiation shielding, equation (3.4) can be considered specifically for neutrons and gamma rays. Of course the appropriate slowing-down mechanisms must be considered for each case when defining the group-averaged cross sections by equations (3.13) and (3.14). Thus, for neutrons in the absence of fissionable material, absorption and scattering are the dominant interactions (Davison, 1957) while, for gamma rays, photoelectric effect, Compton scattering and pair production (for energies above 1.022 MeV) must be considered (Goldstein, 1959).

4. A SINGLE SLAB WITH ISOTROPIC SCATTERING¹

4.1 Introduction

In this chapter we consider the problem of solving equation (3.4) for the case of a homogeneous, source-free, non-multiplying slab, $z \in [L, R]$, in the isotropic scattering model. We thus write, for $i = 1, 2, \dots, M$,

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_i(z, \mu) + \sigma_i \psi_i(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^i \sigma_{ij} \phi_j(z) \quad (4.1)$$

subject to the boundary conditions

$$\psi_i(L, \mu) = L_i(\mu) \quad , \quad \mu > 0 \quad , \quad (4.2a)$$

and

$$\psi_i(R, -\mu) = R_i(\mu) \quad , \quad \mu > 0 \quad , \quad (4.2b)$$

where $L_i(\mu)$ and $R_i(\mu)$ are considered specified. Here we follow the analysis of Siewert and Benoist (1981) to reduce the problem of finding the emerging angular fluxes relevant to equations (4.1) and (4.2) to a sequence of one-group problems involving only the boundary data and established emerging fluxes for preceding groups.

¹ This chapter is partially based on a paper published in Nuclear Science and Engineering (Garcia and Siewert, 1981b).

4.2 Analysis

We note that a Wiener-Hopf factorization for the dispersion matrix in the case of a triangular transfer matrix has been investigated by Larsen and Zweifel (1976). Our approach, however, is based on solving a sequence of one-group problems. We thus begin by expressing the solution for the first group in terms of the elementary solutions (Case and Zweifel, 1967):

$$\psi_1(z, \mu) = A(v_1)\phi_1(v_1, \mu) e^{-\sigma_1 z/v_1} + A(-v_1)\phi_1(-v_1, \mu) e^{\sigma_1 z/v_1} + \int_{-1}^1 A_1(v)\phi_1(v, \mu) e^{-\sigma_1 z/v} dv \quad (4.3)$$

where, in general,

$$\phi_j(v_j, \mu) = \frac{1}{2} c_j v_j \left(\frac{1}{v_j - \mu} \right) \quad (4.4a)$$

and

$$\phi_j(v, \mu) = \frac{1}{2} c_j v P_v \left(\frac{1}{v - \mu} \right) + (1 - c_j v \tanh^{-1} v) \delta(v - \mu) \quad (4.4b)$$

Here $c_j = \sigma_{fj}/\sigma_j$ and v_j is the positive zero of the dispersion function

$$\Lambda_j(z) = 1 + \frac{1}{2} c_j z \int_{-1}^1 \frac{d\mu}{\mu - z} \quad (4.5)$$

If we use the full-range orthogonality condition (Case and Zweifel, 1967),

$$(\xi - \xi') \int_{-1}^1 \mu \phi_i(\xi, \mu) \phi_i(\xi', \mu) d\mu = 0, \quad (4.6)$$

where $\pm\xi, \pm\xi' \in P_i = \nu_i \cup [0, 1]$, we can deduce from equation (4.3) the following singular integral equations and constraints for the emerging fluxes $\psi_1(L, -\mu)$ and $\psi_1(R, \mu)$, $\mu > 0$:

$$\int_{-1}^1 \mu \phi_1(\pm\xi, \mu) [\psi_1(L, \mu) - e^{\pm\Delta_1/\xi} \psi_1(R, \mu)] d\mu = 0, \quad \xi \in P_1, \quad (4.7)$$

where, in general, $\Delta_i = \sigma_i(R-L)$. We can rewrite equation (4.7) as

$$\int_0^1 \mu \phi_1(\xi, \mu) \psi_1(L, -\mu) d\mu + e^{-\Delta_1/\xi} \int_0^1 \mu \phi_1(-\xi, \mu) \psi_1(R, \mu) d\mu = U_1(\xi) \quad (4.8a)$$

and

$$\int_0^1 \mu \phi_1(\xi, \mu) \psi_1(R, \mu) d\mu + e^{-\Delta_1/\xi} \int_0^1 \mu \phi_1(-\xi, \mu) \psi_1(L, -\mu) d\mu = V_1(\xi) \quad (4.8b)$$

where $\xi \in P_1$ and the known inhomogeneous terms are, in general,

$$U_i(\xi) = \int_0^1 \mu \phi_i(-\xi, \mu) L_i(\mu) d\mu + e^{-\Delta_i/\xi} \int_0^1 \mu \phi_i(\xi, \mu) R_i(\mu) d\mu \quad (4.9a)$$

and

$$V_1(\xi) = \int_0^1 \mu \phi_1(-\xi, \mu) R_1(\mu) d\mu + e^{-\Delta_1/\xi} \int_0^1 \mu \phi_1(\xi, \mu) L_1(\mu) d\mu \quad (4.9b)$$

Equations (4.8) can be solved, for example, by the F_N method (Siewert and Benoist, 1979), and thus we now consider the second group. We write

$$\begin{aligned} \psi_2(z, \mu) = & A(\nu_2) \phi_2(\nu_2, \mu) e^{-\sigma_2 z/\nu_2} + A(-\nu_2) \phi_2(-\nu_2, \mu) e^{\sigma_2 z/\nu_2} \\ & + \int_{-1}^1 A_2(\nu) \phi_2(\nu, \mu) e^{-\sigma_2 z/\nu} d\nu + \frac{1}{2} \sigma_{21} \psi_{21}^\dagger(z, \mu) \end{aligned} \quad (4.10)$$

where $\psi_{21}^\dagger(z, \mu)$ denotes a particular solution of

$$\nu \frac{\partial}{\partial z} \psi(z, \mu) + \sigma_2 \psi(z, \mu) = \frac{1}{2} \sigma_{22} \int_{-1}^1 \psi(z, \mu') d\mu' + \phi_1(z) \quad (4.11)$$

We can use equations (4.6) and (4.10) to deduce, for $\xi \in P_2$,

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \mu \phi_2(\pm \xi, \mu) [\psi_2(L, \mu) - e^{\pm \Delta_2/\xi} \psi_2(R, \mu)] d\mu \\ = \frac{1}{2} \sigma_{21} W_{21}(\pm \xi) \end{aligned} \quad (4.12)$$

where

$$W_{21}(\xi) = \int_{-1}^1 \mu \phi_2(\xi, \mu) [\psi_{21}^\dagger(L, \mu) - e^{\Delta_2/\xi} \psi_{21}^\dagger(R, \mu)] d\mu \quad (4.13)$$

Noting that $\psi_{21}^\dagger(z, \mu)$ can be expressed in terms of the infinite-medium Green's function (Case and Zweifel, 1967) basic to equation (4.11), we write

$$\psi_{21}^\dagger(z, \mu) = \int_L^R G_2(z_0 + z; \mu) \phi_1(z_0) dz_0 \quad (4.14)$$

where, in general, for $z > z_0$,

$$G_1(z_0 + z; \mu) = \frac{1}{N_1(v_1)} \phi_1(v_1, \mu) e^{-\sigma_1(z-z_0)/v_1} + \int_0^1 \frac{1}{N_1(v)} \phi_1(v, \mu) e^{-\sigma_1(z-z_0)/v} dv \quad (4.15a)$$

and, for $z < z_0$,

$$G_1(z_0 + z; \mu) = -\frac{1}{N_1(-v_1)} \phi_1(-v_1, \mu) e^{\sigma_1(z-z_0)/v_1} - \int_0^1 \frac{1}{N_1(-v)} \phi_1(-v, \mu) e^{\sigma_1(z-z_0)/v} dv \quad (4.15b)$$

In addition,

$$N_1(v_1) = \frac{1}{2} c_1 v_1^3 \left(\frac{c_1}{v_1^2 - 1} - \frac{1}{v_1^2} \right) \quad (4.16a)$$

and

$$N_1(v) = v[(1 - c_1 v \tanh^{-1} v)^2 + \frac{1}{4} \pi^2 v^2 c_1^2] \quad (4.16b)$$

After using equations (4.14) and (4.15) in equation (4.13) we find

$$W_{21}(\xi) = -e^{-\sigma_2 L/\xi} \int_L^R \phi_1(z) e^{\sigma_2 z/\xi} dz \quad (4.17)$$

and thus we can write equation (4.12), for $\xi \in P_2$, as

$$\begin{aligned} & \int_0^1 \mu \phi_2(\xi, \mu) \psi_2(L, -\mu) d\mu \\ & + e^{-\Delta_2/\xi} \int_0^1 \mu \phi_2(-\xi, \mu) \psi_2(R, \mu) d\mu = U_2(\xi) + \frac{1}{2} \sigma_{21} \xi I_{21}(\xi) \end{aligned} \quad (4.18a)$$

and

$$\begin{aligned} & \int_0^1 \mu \phi_2(\xi, \mu) \psi_2(R, \mu) d\mu + e^{-\Delta_2/\xi} \int_0^1 \mu \phi_2(-\xi, \mu) \psi_2(L, -\mu) d\mu \\ & = V_2(\xi) + \frac{1}{2} \sigma_{21} \xi J_{21}(\xi) \end{aligned} \quad (4.18b)$$

where

$$\xi I_{21}(\xi) = e^{\sigma_2 L/\xi} \int_L^R \phi_1(z) e^{-\sigma_2 z/\xi} dz \quad (4.19a)$$

and

$$\xi J_{21}(\xi) = e^{-\sigma_2 R/\xi} \int_L^R \phi_1(z) e^{\sigma_2 z/\xi} dz \quad (4.19b)$$

Because $I_{21}(\xi)$ and $J_{21}(\xi)$ are given in terms of $\phi_1(z)$ it is clear that the right-hand sides of equations (4.18) can be determined once the solution for the first group is available for all z . However, if the primary interest is in the solution at the boundaries, a theory that

deals exclusively with the solution at the boundaries can be developed. Clearly, to accomplish this we need to express $I_{21}(\xi)$ and $J_{21}(\xi)$ in terms of $\psi_1(L, \mu)$ and $\psi_1(R, \mu)$, $\mu \in [-1, 1]$. We can write equation (4.1) for the first group as

$$\nu \frac{\partial}{\partial z} [\psi_1(z, \mu) e^{\sigma_1 z / \mu}] = \frac{1}{2} \sigma_{11} e^{\sigma_1 z / \mu} \phi_1(z) \quad (4.20)$$

and integrate equation (4.20) to find, for $\xi \in [0, \sigma_2 / \sigma_1]$,

$$I_{21}(\xi) = \frac{2}{\sigma_{11}} \frac{\sigma_1}{\sigma_2} [\psi_1(L, -\sigma_1 \xi / \sigma_2) - R_1(\sigma_1 \xi / \sigma_2) e^{-\Delta_2 / \xi}] \quad (4.21a)$$

and

$$J_{21}(\xi) = \frac{2}{\sigma_{11}} \frac{\sigma_1}{\sigma_2} [\psi_1(R, \sigma_1 \xi / \sigma_2) - L_1(\sigma_1 \xi / \sigma_2) e^{-\Delta_2 / \xi}] \quad (4.21b)$$

It is clear that equations (4.21) express $I_{21}(\xi)$ and $J_{21}(\xi)$ in terms of the boundary fluxes; however these equations are not sufficient since $I_{21}(\xi)$ and $J_{21}(\xi)$ are required for all $\xi \in P_2$ in equations (4.18). In addition, equations (4.21) cannot be used if $\sigma_{11} = 0$ and alternative expressions needed for this special case will be provided later. We can formally solve equation (4.20) and integrate the resulting equation to find

$$\phi_1(z) = K_1(z) + \frac{1}{2} \sigma_{11} \int_L^R \phi_1(z') E_1(\sigma_1 |z - z'|) dz' \quad , \quad (4.22)$$

where $E_1(x)$ is one of the exponential integral functions and, in general,

$$K_j(z) = \int_0^1 [L_j(\mu) e^{-\sigma_j(z-L)/\mu} + R_j(\mu) e^{-\sigma_j(R-z)/\mu}] d\mu \quad (4.23)$$

If we multiply equation (4.22) by $\exp(-z/s)$, integrate over z and use equations (4.19) and (4.21), we find that

$$\begin{aligned} \Lambda_1(\sigma_1 \xi / \sigma_2) I_{21}(\xi) &= \int_{-1}^1 \mu [\psi_1(L, \mu) - \psi_1(R, \mu) e^{-\Delta_2/\xi}] \frac{d\mu}{\sigma_2 \mu + \sigma_1 \xi} \quad (4.24a) \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} \Lambda_1(\sigma_1 \xi / \sigma_2) J_{21}(\xi) &= \int_{-1}^1 \mu [\psi_1(R, \mu) - \psi_1(L, \mu) e^{-\Delta_2/\xi}] \frac{d\mu}{\sigma_2 \mu - \sigma_1 \xi} \quad (4.24b) \end{aligned}$$

for $\xi \notin [-\sigma_2/\sigma_1, \sigma_2/\sigma_1]$. Equations (4.24) can therefore be used to compute the $I_{21}(\xi)$ and $J_{21}(\xi)$ required in equations (4.18) for $\xi \notin [0, \sigma_2/\sigma_1]$, except if $\sigma_1 \xi / \sigma_2 = \nu_1$. This special case will be discussed later.

We now consider the extension of the foregoing analysis to the i th group. As before, we write

$$\begin{aligned} \psi_i(z, \mu) &= A(\nu_i) \phi_i(\nu_i, \mu) e^{-\sigma_i z / \nu_i} + A(-\nu_i) \phi_i(-\nu_i, \mu) e^{\sigma_i z / \nu_i} \\ &+ \int_{-1}^1 A_j(\nu) \phi_j(\nu, \mu) e^{-\sigma_j z / \nu} d\nu + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} \psi_{ij}^\dagger(z, \mu) \quad (4.25) \end{aligned}$$

where

$$\psi_{ij}^\dagger(z, \mu) = \int_L^R G_j(z_0 + z; \mu) \phi_j(z_0) dz_0 \quad (4.26)$$

The appropriate generalizations of equations (4.18) are, for $\xi \in P_i$,

$$\int_0^1 \mu \phi_i(\xi, \mu) \psi_i(L, -\mu) d\mu + e^{-\Delta_i/\xi} \int_0^1 \mu \phi_i(-\xi, \mu) \psi_i(R, \mu) d\mu = U_i(\xi) + \frac{1}{2} \xi \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} I_{ij}(\xi) \quad (4.27a)$$

and

$$\int_0^1 \mu \phi_i(\xi, \mu) \psi_i(R, \mu) d\mu + e^{-\Delta_i/\xi} \int_0^1 \mu \phi_i(-\xi, \mu) \psi_i(L, -\mu) d\mu = V_i(\xi) + \frac{1}{2} \xi \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} J_{ij}(\xi) \quad (4.27b)$$

where

$$\xi I_{ij}(\xi) = e^{\sigma_{ij}L/\xi} \int_L^R \phi_j(z) e^{-\sigma_{ij}z/\xi} dz \quad (4.28a)$$

and

$$\xi J_{ij}(\xi) = e^{-\sigma_{ij}R/\xi} \int_L^R \phi_j(z) e^{\sigma_{ij}z/\xi} dz \quad (4.28b)$$

We now write equation (4.1) for the j^{th} group as

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} [\psi_j(z, \mu) e^{\sigma_j z/\mu}] = \frac{1}{2} e^{\sigma_j z/\mu} \sum_{k=1}^j \sigma_{jk} \phi_k(z) \quad (4.29)$$

and integrate to find the generalizations of equations (4.21) to be, for $\xi \in [0, 1/\sigma_{ij}]$,

$$I_{ij}(\xi) = \frac{1}{\sigma_{jj}} [X_{ij}(\xi) - \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} I_{ik}(\xi)] \quad (4.30a)$$

and

$$J_{ij}(\epsilon) = \frac{1}{\sigma_{jj}} \left[Y_{ij}(\epsilon) - \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} J_{ik}(\epsilon) \right] \quad (4.30b)$$

where $s_{ij} = \sigma_j / \sigma_i$,

$$X_{ij}(\epsilon) = 2 s_{ij} \left[\psi_j(L, -s_{ij}\epsilon) - R_j(s_{ij}\epsilon) e^{-\Delta_j/\epsilon} \right] \quad (4.31a)$$

and

$$Y_{ij}(\epsilon) = 2 s_{ij} \left[\psi_j(R, s_{ij}\epsilon) - L_j(s_{ij}\epsilon) e^{-\Delta_j/\epsilon} \right] \quad (4.31b)$$

We can multiply the generalization of equation (4.22),

$$\phi_j(z) = K_j(z) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^j \sigma_{jk} \int_L^R \phi_k(z') E_1(\sigma_j |z - z'|) dz' \quad (4.32)$$

by $\exp(-z/s)$ and integrate over z to find, for $\epsilon \in [-1/s_{ij}, 1/s_{ij}]$,

$$\begin{aligned} \Lambda_j(s_{ij}\epsilon) I_{ij}(\epsilon) &= \int_{-1}^1 \mu \left[\psi_j(L, \mu) - \psi_j(R, \mu) e^{-\Delta_j/\epsilon} \right] \frac{d\mu}{\sigma_i \mu + \sigma_j \epsilon} \\ &\quad - \frac{1}{\sigma_j} \Delta(s_{ij}\epsilon) \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} I_{ik}(\epsilon) \end{aligned} \quad (4.33a)$$

and

$$\begin{aligned} \Lambda_j(s_{ij}\epsilon) J_{ij}(\epsilon) &= \int_{-1}^1 \mu \left[\psi_j(R, \mu) - \psi_j(L, \mu) e^{-\Delta_j/\epsilon} \right] \frac{d\mu}{\sigma_i \mu - \sigma_j \epsilon} \\ &\quad - \frac{1}{\sigma_j} \Delta(s_{ij}\epsilon) \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} J_{ik}(\epsilon) \end{aligned} \quad (4.33b)$$

where

$$\Delta(z) = \frac{1}{2} z \int_{-1}^1 \frac{d\mu}{\mu - z} \quad (4.34)$$

Equations (4.30) and (4.33) can be used to compute the $I_{ij}(\xi)$ and $J_{ij}(\xi)$ required in equations (4.27), provided that $\sigma_{jj} \neq 0$ in equations (4.30) and $s_{ij}\xi \neq v_j$ in equations (4.33). The following alternatives to equations (4.30) for $\sigma_{jj} = 0$ can be derived by letting ξ approach the cut in equations (4.33), using the Plemelj formulas (Muskhelishvili, 1953), and considering equations (4.30):

$$\begin{aligned} \sigma_i I_{ij}(\xi) &= P \int_{-1}^1 \mu [\psi_j(L, \mu) - \psi_j(R, \mu) e^{-\Delta_j/\xi}] \frac{d\mu}{\mu + s_{ij}\xi} \\ &\quad - \frac{1}{2} \xi X_{ij}(\xi) P \int_{-1}^1 \frac{d\mu}{\mu - s_{ij}\xi}, \quad \sigma_{jj} = 0, \quad (4.35a) \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} \sigma_i J_{ij}(\xi) &= P \int_{-1}^1 \mu [\psi_j(R, \mu) - \psi_j(L, \mu) e^{-\Delta_j/\xi}] \frac{d\mu}{\mu - s_{ij}\xi} \\ &\quad - \frac{1}{2} \xi Y_{ij}(\xi) P \int_{-1}^1 \frac{d\mu}{\mu - s_{ij}\xi}, \quad \sigma_{jj} = 0. \quad (4.35b) \end{aligned}$$

In the case that $s_{ij}\xi = v_j$ a limiting procedure may be used as shown in the following section to find alternative expressions to equations (4.33).

4.3 The FN Method

In the previous section, exact analysis was used to reduce the problem of finding the surface angular distributions relevant to

equations (4.1) and (4.2) to a system of one-group problems, each of which is based only on surface results. We now wish to demonstrate that the F_N method (Siewert and Benoist, 1979) can be used to establish accurate numerical results for the considered multigroup model and especially for the challenging deep-penetration problem.

It is evident that the H-function (Chandrasekhar, 1950), for example, can be used to convert equations (4.8) to a system of Fredholm integral equations which can, of course, be solved by an iterative numerical method to yield $\psi_1(L, -\mu)$ and $\psi_1(R, \mu)$, $\mu > 0$. It follows that equations (4.27) can, in a like manner, be solved for $i = 2$, then $i = 3$ and so on. Rather than pursue this exact analysis, we prefer here to use the F_N method to develop a concise approximate solution. We therefore introduce, for the i^{th} group and $\mu > 0$,

$$\psi_i(L, -\mu) = R_i(\mu)\exp(-\Delta_i/\mu) + \sum_{\alpha=0}^N a_{i,\alpha} P_{\alpha}(2\mu - 1) \quad (4.36a)$$

and

$$\psi_i(R, \mu) = L_i(\mu)\exp(-\Delta_i/\mu) + \sum_{\alpha=0}^N b_{i,\alpha} P_{\alpha}(2\mu - 1) \quad (4.36b)$$

into equations (4.27) to find

$$\sum_{\alpha=0}^N \{a_{i,\alpha} B_{i,\alpha}(\xi) + c_i \exp(-\Delta_i/\xi) b_{i,\alpha} A_{\alpha}(\xi)\} = c_i I_i(\xi) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} I_{ij}(\xi) \quad (4.37a)$$

and

$$\sum_{\alpha=0}^N \{b_{i,\alpha} B_{i,\alpha}(\xi) + c_i \exp(-\Delta_i/\xi) a_{i,\alpha} A_{\alpha}(\xi)\} = c_i J_i(\xi) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} J_{ij}(\xi) \quad (4.37b)$$

for all $\xi \in P_i$. Here, for $\alpha > 1$,

$$B_{i,\alpha}(\xi) = \left(\frac{2\alpha-1}{\alpha}\right) (2\xi - 1) B_{i,\alpha-1}(\xi) - \left(\frac{\alpha-1}{\alpha}\right) B_{i,\alpha-2}(\xi) - \frac{1}{2} c_i \delta_{\alpha,2} - c_i \delta_{\alpha,1} \quad (4.38a)$$

with

$$B_{i,0}(\xi) = 2 - c_i [1 + \xi \ln(1 + 1/\xi)] \quad (4.38b)$$

and

$$A_{\alpha}(\xi) = -\left(\frac{2\alpha-1}{\alpha}\right) (2\xi + 1) A_{\alpha-1}(\xi) - \left(\frac{\alpha-1}{\alpha}\right) A_{\alpha-2}(\xi) + \frac{1}{2} \delta_{\alpha,2} + \delta_{\alpha,1} \quad (4.39a)$$

with

$$A_0(\xi) = 1 - \xi \ln|1 + 1/\xi| \quad (4.39b)$$

In equations (4.36) we use a Legendre basis $P_{\alpha}(2\mu-1)$ that is orthogonal on the half range $\mu \in [0,1]$ in order to avoid, in subsequent systems of linear algebraic equations, the inversion of ill-conditioned matrices that have been encountered, for large N , with the use (Siewert and Benoist, 1979; Grandjean and Siewert, 1979) of the simple basis functions μ^{α} . The functions $I_i(\xi)$ and $J_i(\xi)$ required in equations (4.37) are given in terms of the boundary data for the i^{th} group, i.e.,

$$I_i(\xi) = \int_0^1 \mu [L_i(\mu) S_i(\mu, \xi) + R_i(\mu) C_i(\mu, \xi)] d\mu \quad (4.40a)$$

and

$$J_i(\xi) = \int_0^1 \mu [L_i(\mu) C_i(\mu, \xi) + R_i(\mu) S_i(\mu, \xi)] d\mu \quad (4.40b)$$

where

$$S_i(\mu, \xi) = \frac{1 - \exp(-\Delta_i/\mu) \exp(-\Delta_i/\xi)}{\mu + \xi} \quad (4.41a)$$

and

$$C_i(\mu, \xi) = \frac{\exp(-\Delta_i/\mu) - \exp(-\Delta_i/\xi)}{\mu - \xi} \quad (4.41b)$$

The additional known terms in equations (4.37) represent "slowing-down" contributions to the i th group. Thus for $\xi \in [0, 1/s_{ij}]$ we write equations (4.30) as

$$\sigma_{jj} I_{ij}(\xi) = 2s_{ij} \sum_{\alpha=0}^N a_{j,\alpha} p_{\alpha}(2s_{ij}\xi^{-1}) - \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} I_{ik}(\xi) \quad (4.42a)$$

and

$$\sigma_{jj} J_{ij}(\xi) = 2s_{ij} \sum_{\alpha=0}^N b_{j,\alpha} p_{\alpha}(2s_{ij}\xi^{-1}) - \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} J_{ik}(\xi) \quad (4.42b)$$

For $\xi \notin [0, 1/s_{ij}]$ we deduce from equations (4.33) that

$$\Lambda_j(s_{ij}\xi) \sigma_{ij} I_{ij}(\xi) = \tau_j(s_{ij}\xi) + \xi \tanh^{-1} \left(\frac{1}{s_{ij}\xi} \right) \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} I_{ik}(\xi) \quad (4.43a)$$

and

$$\Delta_j(s_{ij}\epsilon)\sigma_i J_{ij}(\epsilon) = \Xi_j(s_{ij}\epsilon) + \epsilon \tanh^{-1}\left(\frac{1}{s_{ij}\epsilon}\right) \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} J_{ik}(\epsilon) \quad (4.43b)$$

where

$$T_j(\epsilon) = I_j(\epsilon) + \sum_{\alpha=0}^N \{a_{j,\alpha} A_\alpha(-\epsilon) - \exp(-\Delta_j/\epsilon) b_{j,\alpha} A_\alpha(\epsilon)\} \quad (4.44a)$$

and

$$\Xi_j(\epsilon) = J_j(\epsilon) + \sum_{\alpha=0}^N \{b_{j,\alpha} A_\alpha(-\epsilon) - \exp(-\Delta_j/\epsilon) a_{j,\alpha} A_\alpha(\epsilon)\} \quad (4.44b)$$

It is clear that equations (4.42) and (4.43) establish the required $I_{ij}(\epsilon)$ and $J_{ij}(\epsilon)$ except when $\sigma_{jj} = 0$ and thus alternatives to equations (4.42) are required. For this case, we find from equations (4.35), for $\epsilon \in [0, 1/s_{ij}]$,

$$\begin{aligned} \sigma_i I_{ij}(\epsilon) &= I_j(s_{ij}\epsilon) + [1 + s_{ij}\epsilon \ln(1 + 1/s_{ij}\epsilon)] \sum_{\alpha=0}^N a_{j,\alpha} P_\alpha(2s_{ij}\epsilon - 1) + \\ &+ \sum_{\alpha=0}^N \{a_{j,\alpha} G_\alpha(s_{ij}\epsilon) - \exp(-\Delta_j/s_{ij}\epsilon) b_{j,\alpha} A_\alpha(s_{ij}\epsilon)\} \quad (4.45a) \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} \sigma_i J_{ij}(\epsilon) &= J_j(s_{ij}\epsilon) + [1 + s_{ij}\epsilon \ln(1 + 1/s_{ij}\epsilon)] \sum_{\alpha=0}^N b_{j,\alpha} P_\alpha(2s_{ij}\epsilon - 1) + \\ &+ \sum_{\alpha=0}^N \{b_{j,\alpha} G_\alpha(s_{ij}\epsilon) - \exp(-\Delta_j/s_{ij}\epsilon) a_{j,\alpha} A_\alpha(s_{ij}\epsilon)\} \quad (4.45b) \end{aligned}$$

where $G_0(\epsilon) = 0$ and, for $\alpha > 1$,

$$G_{\alpha}(\xi) = \left(\frac{2\alpha-1}{\alpha}\right) (2\xi - 1)G_{\alpha-1}(\xi) - \left(\frac{\alpha-1}{\alpha}\right) G_{\alpha-2}(\xi) + \frac{1}{2} \delta_{\alpha,2} + \delta_{\alpha,1} \quad (4.46)$$

We also note that alternatives to equations (4.43) are required if $s_{ij}\xi = v_j$. Clearly if $\xi = v_j/s_{ij}$ happens to be a collocation point in the continuum $[0,1]$ we can avoid the difficulty simply by choosing a different point. However, if $\xi = v_i = v_j/s_{ij}$, such a simple remedy is not possible. We note that, from the point-of-view of a matrix formulation of this multi-group model, the phenomenon $v_i = v_j/s_{ij}$ appears as a degenerate eigenvalue, i.e., a double zero of the dispersion function. On the other hand, if we view the problem as a sequence of one-group problems, this phenomenon is clearly equivalent to seeking a particular solution corresponding to an inhomogeneous source of the form $\exp(-x/n_0)$ where n_0 is the eigenvalue for the homogeneous equation. To find the desired particular solution requires, as noted previously, special attention (Siewert, 1975). For our purpose here we find we can use l'Hospital's rule to obtain the following alternatives to equations (4.43) for $\xi = v_j/s_{ij}$:

$$\sigma_i I_{ij}(\xi) = \frac{1}{2} c_j (s_{ij}\xi)^2 N_j^{-1}(s_{ij}\xi) [r_j(s_{ij}\xi) + \frac{\sigma_i}{s_{ij}\sigma_{jj}} \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} \frac{d}{d\xi} I_{ik}(\xi)] - \frac{\sigma_i}{\sigma_{jj}} \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} I_{ik}(\xi) \quad (4.47a)$$

and

$$\begin{aligned} \sigma_j J_{ij}(\xi) &= \frac{1}{2} c_j (s_{ij}\xi)^2 N_j^{-1}(s_{ij}\xi) [\Delta_j(s_{ij}\xi) \\ &+ \frac{\sigma_j}{s_{ij}\sigma_{jj}} \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} \frac{d}{d\xi} J_{ik}(\xi)] - \frac{\sigma_j}{\sigma_{jj}} \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} J_{ik}(\xi) \end{aligned} \quad (4.47b)$$

Here

$$\begin{aligned} \Gamma_j(\xi) &= \frac{d}{d\xi} I_j(\xi) + \sum_{\alpha=0}^N a_{j,\alpha} F_\alpha(-\xi) \\ &+ \exp(-\Delta_j/\xi) \sum_{\alpha=0}^N b_{j,\alpha} [F_\alpha(\xi) - \frac{\Delta_j}{\xi^2} A_\alpha(\xi)] \end{aligned} \quad (4.48a)$$

and

$$\begin{aligned} \Delta_j(\xi) &= \frac{d}{d\xi} J_j(\xi) + \sum_{\alpha=0}^N b_{j,\alpha} F_\alpha(-\xi) \\ &+ \exp(-\Delta_j/\xi) \sum_{\alpha=0}^N a_{j,\alpha} [F_\alpha(\xi) - \frac{\Delta_j}{\xi^2} A_\alpha(\xi)] \end{aligned} \quad (4.48b)$$

We have found that the functions $F_\alpha(\xi) = -\frac{d}{d\xi} A_\alpha(\xi)$ appearing in equations (4.48) can be expressed as

$$\begin{aligned} F_\alpha(\xi) &= \frac{1}{2\xi(\xi+1)} \{-[2(\xi+1) + \alpha(2\xi+1)]A_\alpha(\xi) - \alpha A_{\alpha-1}(\xi) \\ &+ 2\delta_{\alpha,0} + \delta_{\alpha,1}\} \end{aligned} \quad (4.49)$$

and thus no additional recursive relations are required to deduce $F_\alpha(\xi)$.

We note that equations (4.47) require, for $j > 1$, the derivatives of $I_{ik}(\xi)$ and $J_{ik}(\xi)$ for all $k < j$.

Clearly there exist possibilities for higher-order degeneracies; however, from a practical point of view the possibility of even a first-order degeneracy is slight. Nevertheless, a given data set should be reviewed with regard to this matter before an F_M calculation is initiated.

If the constants $\{a_{j,\alpha}\}$ and $\{b_{j,\alpha}\}$ have been established for all $j < i$, then clearly the right-hand sides of equations (4.37) are known. Thus on considering equations (4.37) at $(N + 1)$ values of $\xi \in P_i$, say $\xi_{i,\beta}$, we generate $2(N + 1)$ linear algebraic equations to be solved for the $2(N + 1)$ unknowns $a_{i,\alpha}$ and $b_{i,\alpha}$, $\alpha = 0, 1, 2, \dots, N$.

4.4 Computational Aspects and Numerical Results

In order to establish the constants $\{a_{i,\alpha}\}$ and $\{b_{i,\alpha}\}$ required in equations (4.36) we first must define a strategy for selecting the collocation points $\xi_{i,\beta}$. We then must compute the known matrix elements and inhomogeneous terms in the system of linear algebraic equations

$$\sum_{\alpha=0}^N (a_{i,\alpha} B_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta}) + c_i \exp(-\Delta_i/\xi_{i,\beta}) b_{i,\alpha} A_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta})) = c_i I_i(\xi_{i,\beta}) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} I_{ij}(\xi_{i,\beta}) \quad (4.50a)$$

and

$$\sum_{\alpha=0}^N (b_{i,\alpha} B_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta}) + c_i \exp(-\Delta_i/\xi_{i,\beta}) a_{i,\alpha} A_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta})) = c_i J_i(\xi_{i,\beta}) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} J_{ij}(\xi_{i,\beta}) \quad (4.50b)$$

In this work we have used, for various orders of the F_N approximation, the collocation scheme given by

$$\xi_{i,0} = \nu_i, \text{ all } N, \quad (4.51a)$$

and

$$\xi_{i,\beta} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left(\frac{2\beta-1}{2N} \pi \right), \beta = 1, 2, \dots, N, N \neq 0. \quad (4.51b)$$

The points given by equation (4.51b) are the zeros of the Chebyshev polynomial of the first kind $T_N(2x - 1)$. The use of these points to define a collocation strategy was suggested by the work of Sloan and Burn (1979). We now discuss the methods we have used to compute the functions $A_\alpha(\xi)$, $B_{i,\alpha}(\xi)$ and $G_\alpha(\xi)$ required to define equations (4.50). The functions $A_\alpha(\xi)$ and $B_{i,\alpha}(\xi)$ are defined by

$$A_\alpha(\xi) = \frac{2}{c_i \xi} \int_0^1 \mu P_\alpha(2\mu - 1) \phi_i(-\xi, \mu) d\mu \quad (4.52a)$$

and

$$B_{i,\alpha}(\xi) = \frac{2}{\xi} \int_0^1 \mu P_\alpha(2\mu - 1) \phi_i(\xi, \mu) d\mu. \quad (4.52b)$$

We note from the previous section that the functions $A_\alpha(\xi)$ are required for all $\xi \in [-1, 0)$ and $B_{i,\alpha}(\xi)$ only for $\xi \in P_i$. Equations (4.38) and (4.39) clearly are recursive relations that are easier to use, from a computational standpoint, than the definitions given by equations (4.52). However, some care must be taken to avoid a loss of accuracy when using the recursive equations (4.38) and (4.39). Here we note the strategy

used to compute (working in double precision with an IBM 370/165 machine) the required functions accurate to at least thirteen significant figures for α up to 40. For the functions $A_\alpha(\xi)$ we have found that forward recursion is stable only for $\xi \in (-1, 0]$ and that backward recursion is stable for all $\xi \in [-1, 0]$. For the functions $B_{\gamma, \alpha}(\xi)$ forward recursion is stable for $\xi \in [0, 1]$, and thus backward recursion must be used when $\xi = \nu_j$. In practice the use of backward recursion, in the manner of Miller (1952), can be very time-consuming for ξ close to the transition points, i.e., points that define the regions of forward and backward stability. For this reason we do not always use the defined regions of stability; e.g., in computing $A_\alpha(\xi)$ we have actually used forward recursion for $\xi \in [0, 0.001]$ without losing too many significant figures.

The polynomials $G_\alpha(\xi)$ introduced in equation (4.46) and required for $\xi \in [0, 1]$ are defined by

$$G_\alpha(\xi) = \int_0^1 \nu [P_\alpha(2\nu-1) - P_\alpha(2\xi-1)] \frac{d\nu}{\nu-\xi} \quad (4.53)$$

These polynomials satisfy the same recursive relation as the Legendre polynomials and we can use forward recursion to obtain accurate results.

In order to demonstrate the computational merit of the foregoing solution we now consider a special 16-group albedo problem. A slab of 1 cm thickness has an isotropic incident distribution of neutrons only in the first group and only on the surface at $z = L$, i.e., for $\mu > 0$

$$L_j(\mu) = \delta_{j,1} \quad (4.54a)$$

and

$$R_i(\mu) = 0 \quad (4.54b)$$

The macroscopic total cross-sections (cm^{-1}) are given by $\sigma_1 = 11$, $\sigma_i = 10 + i/14$, $i = 2, 3, \dots, 14$, $\sigma_{15} = 10^4$ and $\sigma_{16} = 20$. In addition, the macroscopic transfer cross-sections are given by $\sigma_{i+k,i} = 3/(k+1)$, $i = 1, 2, \dots, 14$ and $k = 0, 1, \dots, (16-i)$; $\sigma_{15,15} = 0$, $\sigma_{16,15} = 10^{-4}$ and $\sigma_{16,16} = 5$. This sample problem was designed to be a severe test of the established solution. Note, for example, the very strong absorption in group 15; in fact, the in-group scattering is zero for this group. For this data set we also have a degenerate case, in other words, $\sigma_{14,1} = \sigma_{1,14}$, so that we must use the alternatives to equations (4.43) given by equations (4.47). We seek the exit distributions $\psi_i(L, -\mu)$ and $\psi_i(R, \mu)$, $\mu > 0$, the group albedos

$$A_i^* = 2 \int_0^1 \mu \psi_i(L, -\mu) d\mu \quad (4.55a)$$

and the group transmission factors

$$B_i^* = 2 \int_0^1 \mu \psi_i(R, \mu) d\mu \quad (4.55b)$$

If we use the solutions given by equations (4.36) in equations (4.55) we find

$$A_i^* = a_{i,0} + \frac{1}{3} a_{i,1} \quad (4.56a)$$

and

$$B_j^* = 2\delta_{j,1}E_3(4j) + b_{j,0} + \frac{1}{3}b_{j,1} \quad (4.56b)$$

where $E_3(x)$ denotes one of the exponential integral functions. In Tables 4.1 to 4.4 we list converged results for the exit distributions. In Table 4.5 we list final results for the group albedos and transmission factors. Also, in Table 4.5 we compare our F_N results to a calculation of Renken (1981) who used DTF69, a discrete ordinates code (Renken and Adams, 1969), with 100 space points and 8 directions for each of the half ranges of μ . The F_N results given in Tables 4.1 to 4.5 are correct to within ± 1 in the fifth significant figure. We note that, in general, the albedos computed by Renken agree to four or five significant figures with our results. The transmission factors, however, agree only to two or three significant figures. An exception is found in group 15 where the DTF69 results clearly show a loss of accuracy. Finally, we note that the collocation strategy defined by equations (4.51) yielded results that represented a significant improvement over the ones initially deduced from either of the equally-spaced schemes used previously (Grandjean and Siewert, 1979; Siewert, Maiorino, and Özişik, 1980).

We now consider a second problem suggested and solved by Renken (1981). Here an iron ($N = 8.466 \times 10^{22}$ atoms/cm³) slab, of 10 cm thickness, has an isotropic source of gamma rays incident at $z = L$ in the first of 19 groups that span the energy interval 50 keV to 1 MeV. The cross-section reported by Garcia and Siewert (1981b) was generated by Renken (1981), based on the photoelectric effect and the P_0 component of

Table 4.1 The exit angular fluxes $\psi_i(L, -\mu)$ for $i = 1$ to 8

μ	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 5$	$i = 6$	$i = 7$	$i = 8$
0.05	1.2813(-1) ^a	7.7362(-2)	5.6765(-2)	4.5317(-2)	3.8517(-2)	3.3837(-2)	3.0396(-2)	2.7746(-2)
0.1	1.1660(-1)	7.1154(-2)	5.2400(-2)	4.2624(-2)	3.6527(-2)	3.2315(-2)	2.9207(-2)	2.6806(-2)
0.2	1.0041(-1)	6.2123(-2)	4.6539(-2)	3.8381(-2)	3.3271(-2)	2.9729(-2)	2.7105(-2)	2.5072(-2)
0.3	8.8866(-2)	5.5490(-2)	4.2071(-2)	3.5035(-2)	3.0621(-2)	2.7556(-2)	2.5284(-2)	2.3521(-2)
0.4	7.9986(-2)	5.0281(-2)	3.8471(-2)	3.2276(-2)	2.8389(-2)	2.5689(-2)	2.3687(-2)	2.2134(-2)
0.5	7.2858(-2)	4.6037(-2)	3.5481(-2)	2.9946(-2)	2.6473(-2)	2.4062(-2)	2.2276(-2)	2.0891(-2)
0.6	6.6973(-2)	4.2493(-2)	3.2946(-2)	2.7943(-2)	2.4806(-2)	2.2631(-2)	2.1021(-2)	1.9773(-2)
0.7	6.2013(-2)	3.9480(-2)	3.0763(-2)	2.6199(-2)	2.3341(-2)	2.1361(-2)	1.9897(-2)	1.8764(-2)
0.8	5.7767(-2)	3.6881(-2)	2.8861(-2)	2.4666(-2)	2.2042(-2)	2.0226(-2)	1.8886(-2)	1.7850(-2)
0.9	5.4084(-2)	3.4613(-2)	2.7186(-2)	2.3306(-2)	2.0881(-2)	1.9206(-2)	1.7971(-2)	1.7019(-2)
1	5.0857(-2)	3.2615(-2)	2.5699(-2)	2.2090(-2)	1.9838(-2)	1.8284(-2)	1.7140(-2)	1.6260(-2)

^a Read as 1.2813×10^{-1} .

Table 4.2 The exit angular fluxes $\psi_i(L, -\mu)$ for $i = 9$ to 16

μ	$i = 9$	$i = 10$	$i = 11$	$i = 12$	$i = 13$	$i = 14$	$i = 15$	$i = 16$
0.05	2.5634(-2)	2.3904(-2)	2.2458(-2)	2.1228(-2)	2.0166(-2)	1.9238(-2)	1.7897(-5)	9.1192(-3)
0.1	2.4886(-2)	2.3310(-2)	2.1988(-2)	2.0861(-2)	1.9885(-2)	1.9031(-2)	1.7897(-5)	9.1021(-3)
0.2	2.3442(-2)	2.2099(-2)	2.0970(-2)	2.0004(-2)	1.9166(-2)	1.8430(-2)	1.7897(-5)	8.9941(-3)
0.3	2.2106(-2)	2.0939(-2)	1.9957(-2)	1.9116(-2)	1.8385(-2)	1.7743(-2)	1.7896(-5)	8.8398(-3)
0.4	2.0887(-2)	1.9859(-2)	1.8994(-2)	1.8253(-2)	1.7609(-2)	1.7042(-2)	1.7896(-5)	8.6638(-3)
0.5	1.9779(-2)	1.8864(-2)	1.8094(-2)	1.7435(-2)	1.6862(-2)	1.6359(-2)	1.7895(-5)	8.4777(-3)
0.6	1.8773(-2)	1.7951(-2)	1.7260(-2)	1.6669(-2)	1.6156(-2)	1.5705(-2)	1.7895(-5)	8.2880(-3)
0.7	1.7858(-2)	1.7113(-2)	1.6488(-2)	1.5954(-2)	1.5492(-2)	1.5086(-2)	1.7895(-5)	8.0982(-3)
0.8	1.7023(-2)	1.6344(-2)	1.5775(-2)	1.5290(-2)	1.4871(-2)	1.4503(-2)	1.7894(-5)	7.9110(-3)
0.9	1.6259(-2)	1.5637(-2)	1.5116(-2)	1.4673(-2)	1.4291(-2)	1.3956(-2)	1.7894(-5)	7.7276(-3)
1	1.5558(-2)	1.4985(-2)	1.4506(-2)	1.4100(-2)	1.3749(-2)	1.3442(-2)	1.7893(-5)	7.5490(-3)

INSTITUTO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM ENERGIAS NUCLEARES
 IEN-UNICAMP

Table 4.3 The exit angular fluxes $\psi_i(R, \mu)$ for $i = 1$ to 8

μ	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 5$	$i = 6$	$i = 7$	$i = 8$
0.05	4.5701(-7)	7.3831(-7)	9.6077(-7)	1.1809(-6)	1.4023(-6)	1.6263(-6)	1.8529(-6)	2.0822(-6)
0.1	4.8998(-7)	7.9750(-7)	1.0392(-6)	1.2788(-6)	1.5200(-6)	1.7641(-6)	2.0112(-6)	2.2612(-6)
0.2	5.6471(-7)	9.2983(-7)	1.2115(-6)	1.4910(-6)	1.7726(-6)	2.0575(-6)	2.3460(-6)	2.6377(-6)
0.3	6.5894(-7)	1.0958(-6)	1.4230(-6)	1.7477(-6)	2.0744(-6)	2.4046(-6)	2.7385(-6)	3.0759(-6)
0.4	7.8516(-7)	1.3185(-6)	1.7003(-6)	2.0786(-6)	2.4585(-6)	2.8416(-6)	3.2281(-6)	3.6177(-6)
0.5	9.6666(-7)	1.6409(-6)	2.0893(-6)	2.5330(-6)	2.9771(-6)	3.4235(-6)	3.8724(-6)	4.3236(-6)
0.6	1.2644(-6)	2.1567(-6)	2.6827(-6)	3.2046(-6)	3.7257(-6)	4.2475(-6)	4.7704(-6)	5.2938(-6)
0.7	1.9188(-6)	3.0745(-6)	3.6719(-6)	4.2769(-6)	4.8834(-6)	5.4902(-6)	6.0955(-6)	6.7014(-6)
0.8	3.8488(-6)	4.7969(-6)	5.4072(-6)	6.0732(-6)	6.7563(-6)	7.4451(-6)	8.1350(-6)	8.8230(-6)
0.9	9.6935(-6)	7.9539(-6)	8.4198(-6)	9.0719(-6)	9.7887(-6)	1.0532(-5)	1.1287(-5)	1.2045(-5)
1	2.5162(-5)	1.3354(-5)	1.3377(-5)	1.3866(-5)	1.4525(-5)	1.5262(-5)	1.6036(-5)	1.6828(-5)

Table 4.4 The exit angular fluxes $\psi_i(R, \mu)$ for $i = 9$ to 16

μ	$i = 9$	$i = 10$	$i = 11$	$i = 12$	$i = 13$	$i = 14$	$i = 15$	$i = 16$
0.05	2.3135(-6)	2.5465(-6)	2.7806(-6)	3.0152(-6)	3.2497(-6)	3.4835(-6)	2.3397(-9)	1.2655(-6)
0.1	2.5137(-6)	2.7679(-6)	3.0234(-6)	3.2794(-6)	3.5354(-6)	3.7908(-6)	2.3401(-9)	1.3423(-6)
0.2	2.9322(-6)	3.2287(-6)	3.5265(-6)	3.8250(-6)	4.1232(-6)	4.4206(-6)	2.3409(-9)	1.4865(-6)
0.3	3.4160(-6)	3.7581(-6)	4.1013(-6)	4.4449(-6)	4.7880(-6)	5.1297(-6)	2.3417(-9)	1.6302(-6)
0.4	4.0098(-6)	4.4034(-6)	4.7976(-6)	5.1916(-6)	5.5843(-6)	5.9749(-6)	2.3425(-9)	1.7799(-6)
0.5	4.7762(-6)	5.2293(-6)	5.6820(-6)	6.1333(-6)	6.5821(-6)	7.0275(-6)	2.3433(-9)	1.9399(-6)
0.6	5.8170(-6)	6.3390(-6)	6.8589(-6)	7.3754(-6)	7.8876(-6)	8.3944(-6)	2.3441(-9)	2.1142(-6)
0.7	7.3039(-6)	7.9030(-6)	8.4974(-6)	9.0859(-6)	9.6676(-6)	1.0241(-5)	2.3449(-9)	2.3070(-6)
0.8	9.5070(-6)	1.0185(-5)	1.0857(-5)	1.1519(-5)	1.2172(-5)	1.2813(-5)	2.3457(-9)	2.5235(-6)
0.9	1.2799(-5)	1.3548(-5)	1.4288(-5)	1.5018(-5)	1.5734(-5)	1.6437(-5)	2.3465(-9)	2.7700(-6)
1	1.7625(-5)	1.8421(-5)	1.9209(-5)	1.9985(-5)	2.0749(-5)	2.1495(-5)	2.3473(-9)	3.0545(-6)

Table 4.5 A_i^* and B_i^* for the 16-group problem

i	Present Work		DTF69	
	A_i^*	B_i^*	A_i^*	B_i^*
1	6.6351(-2)	5.1058(-6)	6.6339(-2)	5.0413(-6)
2	4.2002(-2)	4.4781(-6)	4.1996(-2)	4.4362(-6)
3	3.2483(-2)	4.9308(-6)	3.2480(-2)	4.8877(-6)
4	2.7501(-2)	5.4649(-6)	2.7499(-2)	5.4197(-6)
5	2.4382(-2)	6.0283(-6)	2.4380(-2)	5.9806(-6)
6	2.2221(-2)	6.6050(-6)	2.2220(-2)	6.5547(-6)
7	2.0624(-2)	7.1879(-6)	2.0623(-2)	7.1349(-6)
8	1.9388(-2)	7.7730(-6)	1.9387(-2)	7.7175(-6)
9	1.8399(-2)	8.3577(-6)	1.8398(-2)	8.2996(-6)
10	1.7586(-2)	8.9399(-6)	1.7586(-2)	8.8792(-6)
11	1.6904(-2)	9.5178(-6)	1.6903(-2)	9.4547(-6)
12	1.6321(-2)	1.0090(-5)	1.6321(-2)	1.0025(-5)
13	1.5816(-2)	1.0655(-5)	1.5816(-2)	1.0587(-5)
14	1.5373(-2)	1.1212(-5)	1.5373(-2)	1.1140(-5)
15	1.7895(-5)	2.3446(-9)	1.7702(-5)	0.0
16	8.1585(-3)	2.2968(-6)	8.1578(-3)	2.2805(-6)

the Klein-Nishina differential scattering cross-section for photons (Klein and Nishina, 1929). In Table 4.6 we report our final results for A_i^* and B_i^* along with those found by Renken with DTF69 (again with 100 space points and 8 discrete directions for each half range of μ). Here our F_N results are also correct to within ± 1 in the fifth significant figure. Further, the degree of agreement with the results of Renken is essentially the same as for the 16-group problem. Finally, we note what we believe to be a slight deterioration in the DTF69 results when there is strong absorption.

Table 4.6 A_i^* and B_i^* for the 19-group problem

i	Present Work		DTF69	
	A_i^*	B_i^*	A_i^*	B_i^*
1	1.3060(-2)	2.4188(-3)	1.3059(-2)	2.4154(-3)
2	2.6476(-2)	3.9163(-4)	2.6475(-2)	3.9124(-4)
3	2.0013(-2)	2.9446(-4)	2.0013(-2)	2.9415(-4)
4	2.0420(-2)	3.0057(-4)	2.0420(-2)	3.0026(-4)
5	2.1216(-2)	3.1339(-4)	2.1216(-2)	3.1306(-4)
6	2.2650(-2)	3.3596(-4)	2.2650(-2)	3.3560(-4)
7	1.6399(-2)	2.4287(-4)	1.6398(-2)	2.4260(-4)
8	1.8059(-2)	2.6601(-4)	1.8059(-2)	2.6572(-4)
9	2.0613(-2)	2.9930(-4)	2.0612(-2)	2.9896(-4)
10	2.4717(-2)	3.4873(-4)	2.4717(-2)	3.4834(-4)
11	3.1745(-2)	4.2569(-4)	3.1744(-2)	4.2519(-4)
12	4.4141(-2)	5.5031(-4)	4.4140(-2)	5.4965(-4)
13	1.8729(-2)	3.1938(-4)	1.8729(-2)	3.1901(-4)
14	1.7023(-2)	2.8604(-4)	1.7024(-2)	2.8570(-4)
15	1.2201(-2)	1.9924(-4)	1.2201(-2)	1.9901(-4)
16	3.5378(-3)	5.9937(-5)	3.5379(-3)	5.9867(-5)
17	9.0059(-4)	1.4905(-5)	9.0062(-4)	1.4888(-5)
18	6.2046(-5)	1.0301(-6)	6.2049(-5)	1.0289(-6)
19	9.1048(-6)	1.5020(-7)	9.1123(-6)	1.5013(-7)

5. A SINGLE SLAB WITH L-TH ORDER ANISOTROPIC SCATTERING²

5.1 Introduction

In Chapter 4 a solution for the case of isotropic scattering and a triangular transfer matrix was developed, and numerical results were reported. Here we extend the previous analysis to include the important effects of anisotropic scattering. We thus consider, for $i = 1, 2, \dots, M$,

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_i(z, \mu) + \sigma_i \psi_i(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^i \sum_{\ell=0}^L \sigma_{ij}(\ell) P_\ell(\mu) \phi_{j,\ell}(z) \quad (5.1)$$

where σ_i is the total cross section for group i and $\sigma_{ij}(\ell) = \sigma_{ij} \beta_{ij}(\ell)$, with $\beta_{ij}(0) = 1$, denote coefficients in Legendre expansions of the transfer cross sections. In addition, $\psi_i(z, \mu)$ represents the angular flux in the i^{th} group and

$$\phi_{j,\ell}(z) = \int_{-1}^1 \psi_j(z, \mu) P_\ell(\mu) d\mu \quad (5.2)$$

We are concerned here with a non-multiplying homogeneous finite slab, $z \in [L, R]$, and thus we seek solutions to equation (5.1) subject to the boundary conditions

² This chapter is based on a paper accepted for publication in Journal of Computational Physics (Garcia and Siewert, 1982c).

$$\psi_j(L, \mu) = L_j(\mu) \quad , \quad \mu > 0 \quad , \quad (5.3a)$$

and

$$\psi_j(R, -\mu) = R_j(\mu) \quad , \quad \mu > 0 \quad , \quad (5.3b)$$

where $L_j(\mu)$ and $R_j(\mu)$ are considered specified.

5.2 Analysis

In Chapter 4, full-range orthogonality properties of appropriate elementary solutions and Green's functions were used to deduce a system of singular integral equations and constraints for the boundary fluxes. Here we develop the equivalent expressions, generalized to include the effects of anisotropic scattering, in a more direct manner. We first change μ to $-\mu$ in equation (5.1), multiply the resulting equation by $\exp(-\sigma_1 z/s)$ and integrate over all z to obtain

$$\begin{aligned} s\mu B_j(\mu, s) - \sigma_1(\mu - s) \int_L^R \psi_j(z, -\mu) \exp(-\sigma_1 z/s) dz \\ = \frac{s}{2} \sum_{j=1}^1 \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \sigma_{1j}(\ell) P_\ell(\mu) \Phi_{j,\ell}(s/\sigma_1) \end{aligned} \quad (5.4)$$

where

$$B_j(\mu, s) = \psi_j(L, -\mu) \exp(-\sigma_1 L/s) - \psi_j(R, -\mu) \exp(-\sigma_1 R/s) \quad (5.5)$$

and

$$\Phi_{j,\ell}(s/\sigma_1) = \int_L^R \Phi_{j,\ell}(z) \exp(-\sigma_1 z/s) dz \quad . \quad (5.6)$$

We can now multiply equation (5.4) by $(\mu - s)^{-1} P_n(\mu)$, $s \in [-1, 1]$, and integrate over all μ to find

$$\begin{aligned}
& (-1)^n \sigma_i \phi_{i,n}(s/\sigma_i) \\
& + \frac{s}{2} \sum_{j=1}^i \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \sigma_{ij}(\ell) \phi_{j,\ell}(s/\sigma_i) \int_{-1}^1 P_n(\mu) P_\ell(\mu) \frac{d\mu}{\mu-s} \\
& = s \int_{-1}^1 \mu P_n(\mu) B_i(\mu, s) \frac{d\mu}{\mu-s} \quad (5.7)
\end{aligned}$$

We let $g_{i,n}(\xi)$ denote for the i^{th} group the polynomials introduced for one-group theory by Chandrasekhar (1950), i.e.,

$$h_{i,n} \xi g_{i,n}(\xi) = (n+1)g_{i,n+1}(\xi) + n g_{i,n-1}(\xi) \quad (5.8)$$

with $g_{i,0}(\xi) = 1$ and

$$h_{i,n} = 2n+1 - c_i \beta_{ii}(n) \quad (5.9)$$

where $c_i = \sigma_{ij}/\sigma_i$. On multiplying equation (5.7) by $\beta_{ii}(n)g_{i,n}(s)$ and summing over n from 0 to L , we find

$$\begin{aligned}
& \sigma_i \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \beta_{ii}(\ell) \phi_{i,\ell}(s/\sigma_i) F_{i,\ell}(s) \\
& + \frac{1}{c_i} \sum_{j=1}^{i-1} \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \sigma_{ij}(\ell) \phi_{j,\ell}(s/\sigma_i) \\
& \times [F_{i,\ell}(s) - g_{i,\ell}(s)] = s \int_{-1}^1 \mu G_i(s, \mu) B_i(\mu, s) \frac{d\mu}{\mu-s} \quad (5.10)
\end{aligned}$$

where

$$F_{i,\ell}(s) = g_{i,\ell}(s) + \frac{s}{2} c_i \sum_{n=0}^L \beta_{ij}(n) g_{i,n}(s) \int_{-1}^1 P_n(\mu) P_\ell(\mu) \frac{d\mu}{\mu-s} \quad (5.11)$$

and

$$G_i(s, \mu) = \sum_{\ell=0}^L \beta_{ij}(\ell) g_{i,\ell}(s) P_\ell(\mu) \quad (5.12)$$

It is not difficult to show that

$$F_{i,\ell}(s) = A_i(s) P_\ell(s) \quad (5.13)$$

where

$$A_i(s) = 1 + s \int_{-1}^1 \psi_i(\mu) \frac{d\mu}{\mu-s} \quad (5.14)$$

with

$$\psi_i(\mu) = \frac{1}{2} c_i G_i(\mu, \mu) \quad (5.15)$$

is the one-group dispersion function (Mika, 1961). We find we can write equation (5.10) as

$$A_i(s) X_{ij}(s) = \frac{s}{\sigma_i} \int_{-1}^1 \mu G_i(s, \mu) B_j(\mu, s) \frac{d\mu}{\mu-s} + \frac{1}{\sigma_i} \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} [Y_{ij}(s) - \Delta_i(s) X_{ij}(s)] \quad (5.16)$$

where

$$X_{ij}(s) = \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \beta_{ij}(\ell) \phi_{j,\ell}(s/\sigma_i) P_\ell(s) \quad (5.17)$$

$$Y_{ij}(s) = \sum_{\ell=1}^L (-1)^\ell \beta_{ij}(\ell) \phi_{j,\ell}(s/\sigma_i) E_{i,\ell}(s) \quad (5.18)$$

and

$$\Delta_i(s) = \frac{s}{2} \int_{-1}^1 G_i(\mu, \mu) \frac{d\mu}{\mu-s} \quad (5.19)$$

Here the polynomials $E_{i,\ell}(s)$ are defined by

$$E_{i,\ell}(s) = \frac{1}{c_i} [g_{i,\ell}(s) - P_\ell(s)] \quad (5.20)$$

and with $E_{i,0}(s) = 0$, they can be readily computed from

$$(2\ell+1)sE_{i,\ell}(s) = s\beta_{ii}(\ell)g_{i,\ell}(s) + (\ell+1)E_{i,\ell+1}(s) + \ell E_{i,\ell-1}(s) \quad (5.21)$$

We note that the functions $\phi_{j,\ell}(s/\sigma_i)$ can have essential singularities at the origin, but otherwise they are analytic in the complex s -plane. The functions $X_{ij}(s)$ and $Y_{ij}(s)$ therefore are, with the exception of the origin, also analytic in the complex s -plane. Thus on investigating equation (5.16) for the first group, $i = 1$, and assuming that $c_1 \neq 0$, we see that

$$\int_{-1}^1 \mu G_1(\zeta_{1,m}, \mu) B_1(\mu, \zeta_{1,m}) \frac{d\mu}{\mu - \zeta_{1,m}} = 0 \quad (5.22)$$

where, in general, $\zeta_{j,m}$, $m = 0, 1, 2, \dots, 2k_j - 1$ are the zeros of $\Lambda_j(s)$. The left- and right-hand sides of equation (5.16) are analytic in the complex s -plane cut from -1 to 1 along the real axis. Thus on letting s approach the branch cut and using the Plemelj formulas (Muskhelishvili, 1953), we find that equation (5.16) yields, for $v \in [-1, 1]$,

$$\begin{aligned} \sigma_1[\lambda_1(v) \pm \pi i v \psi_1(v)]X_{11}(v) &= \\ &= v\rho \int_{-1}^1 \mu G_1(v, \mu) B_1(\mu, v) \frac{d\mu}{\mu - v} \pm \pi i v^2 G_1(v, v) B_1(v, v) \end{aligned} \quad (5.23)$$

where, in general,

$$\lambda_j(v) = 1 + v\rho \int_{-1}^1 \psi_j(\mu) \frac{d\mu}{\mu - v} \quad (5.24)$$

Thus, for $v \in [-1, 1]$, it follows that

$$\sigma_1 c_1 X_{11}(v) = 2v B_1(v, v) \quad (5.25)$$

and

$$\lambda_1(v) v B_1(v, v) - \frac{1}{2} c_1 v \rho \int_{-1}^1 \mu G_1(v, \mu) B_1(\mu, v) \frac{d\mu}{\mu - v} = 0 \quad (5.26)$$

Equations (5.22) and (5.26) can be seen to be the system of singular integral equations and constraints (Bowden, McCrosson, and Rhodes, 1968; Siewert, 1978) that define the exit fluxes for the first group $\psi_1(L, -\mu)$ and $\psi_1(R, \mu)$, $\mu > 0$, in terms of the incident distributions $L_1(\mu)$ and $R_1(\mu)$. Thus, equations (5.22) and (5.26) can be solved numerically or,

for example by the F_N method, to establish $B_1(u,s)$. In the event that $c_1 = 0$, equation (5.25) yields $B_1(u,\mu) = 0$, $|\mu| \in (0,1]$.

Considering now that $B_1(u,s)$ is known, we note that equation (5.16) yields, for $i = 2$,

$$\begin{aligned} \Delta_2(s)X_{22}(s) &= \frac{s}{\sigma_2} \int_{-1}^1 \mu G_2(s,\mu) B_2(\mu,s) \frac{d\mu}{\mu-s} \\ &\quad + \frac{1}{\sigma_2} \sigma_{21} [\gamma_{21}(s) - \Delta_2(s)X_{21}(s)] \end{aligned} \quad (5.27)$$

or, for $v \in [-1,1]$,

$$\begin{aligned} \lambda_2(v)vB_2(v,v) &- \frac{1}{2} c_2 v P \int_{-1}^1 \mu G_2(v,\mu) B_2(\mu,v) \frac{d\mu}{\mu-v} \\ &= \frac{1}{2} \sigma_{21} [c_2 \gamma_{21}(v) + X_{21}(v)] \end{aligned} \quad (5.28)$$

and

$$\sigma_2 c_2 X_{22}(v) = 2vB_2(v,v) - \sigma_{21} X_{21}(v) \quad (5.29)$$

For $c_2 \neq 0$ equation (5.27) yields

$$\begin{aligned} c_2 \zeta_{2,m} \int_{-1}^1 \mu G_2(\zeta_{2,m},\mu) B_2(\mu,\zeta_{2,m}) \frac{d\mu}{\mu-\zeta_{2,m}} \\ = -\sigma_{21} [c_2 \gamma_{21}(\zeta_{2,m}) + X_{21}(\zeta_{2,m})] \end{aligned} \quad (5.30)$$

For $c_2 = 0$ equation (5.29) yields, for $|\mu| \in (0,1]$,

$$B_2(\mu, \mu) = \frac{1}{2\mu} \sigma_{21} \chi_{21}(\mu) \quad , \quad c_2 = 0 \quad , \quad (5.31)$$

whereas for $c_2 \neq 0$ we can solve equations (5.28) and (5.30) to find $B_2(\mu, s)$; of course for either case we must first compute

$$W_{21}(s) = c_2 Y_{21}(s) + \chi_{21}(s) \quad (5.32)$$

which can also be written by using equations (5.17) and (5.18) as

$$W_{21}(s) = \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \beta_{21}(\ell) \phi_{1,\ell}(s/\sigma_2) g_{2,\ell}(s) \quad . \quad (5.33)$$

If we now multiply equation (5.4) by $P_n(\mu)$ and integrate over all μ there results, for $i = 1$,

$$\begin{aligned} s h_{1,n} \phi_{1,n}(s/\sigma_1) + (n+1) \phi_{1,n+1}(s/\sigma_1) + n \phi_{1,n-1}(s/\sigma_1) \\ = -(-1)^n (2n+1) \frac{s}{\sigma_1} \int_{-1}^1 \mu P_n(\mu) B_1(\mu, s) d\mu \quad , \quad (5.34) \end{aligned}$$

which yields

$$\phi_{1,n}(s/\sigma_1) = (-1)^n g_{1,n}(s) \phi_{1,0}(s/\sigma_1) - (-1)^n D_{1,n}(s) \quad (5.35)$$

where $D_{1,0}(s) = 0$ and

$$\begin{aligned} s h_{1,n} D_{1,n}(s) = (n+1) D_{1,n+1}(s) + n D_{1,n-1}(s) \\ + (2n+1) \frac{s}{\sigma_1} \int_{-1}^1 \mu P_n(\mu) B_1(\mu, s) d\mu \quad . \quad (5.36) \end{aligned}$$

Substituting equation (5.35) into equation (5.17), with $i = j = 1$, we find

$$\begin{aligned} \phi_{1,0}(s/\sigma_1) &= G_1^{-1}(s,s) [X_{11}(s) + \sum_{k=1}^L B_{11}(k) D_{1,k}(s) P_k(s)] . \quad (5.37) \end{aligned}$$

An expression alternative to equation (5.37) that allows the calculation of $\phi_{1,0}(s/\sigma_1)$ in the event that $G_1(s,s) = 0$ will be provided later. We see from equations (5.25) and (5.26) that, for $v \in [-1,1]$,

$$\begin{aligned} X_{11}(v) &= \frac{1}{\sigma_1} \{ 2vB_1(v,v) \\ &\quad + v \int_{-1}^1 \mu G_1(v,\mu) [B_1(\mu,v) - B_1(v,\mu)] \frac{d\mu}{\mu-v} \} \quad (5.38) \end{aligned}$$

and from equation (5.16) that, for $s \in [-1,1]$,

$$X_{11}(s) = \frac{s}{\sigma_1} \Lambda_1^{-1}(s) \int_{-1}^1 \mu G_1(s,\mu) B_1(\mu,s) \frac{d\mu}{\mu-s} . \quad (5.39)$$

It is apparent from equations (5.22) and (5.39) that a limiting procedure must be used if $X_{11}(c_1, m)$ is required. For the case $c_1 = 0$ we note, since $B_1(v,v) = 0$, $|v| \in (0,1]$, that equations (5.38) and (5.39) reduce to the following equation for all s :

$$X_{11}(s) = \frac{s}{\sigma_1} \int_{-1}^1 \mu G_1(s,\mu) B_1(\mu,s) \frac{d\mu}{\mu-s} , \quad c_1 = 0 . \quad (5.40)$$

Finally, we use equation (5.35) to conclude that

$$W_{21}(s) = \phi_{1,0}(s/\sigma_2) \sum_{k=0}^L \beta_{21}(k) g_{1,k}(s_2 | s) g_{2,k}(s) - \sum_{k=1}^L \beta_{21}(k) D_{1,k}(s_2 | s) g_{2,k}(s) \quad (5.41)$$

where $\phi_{1,0}(s/\sigma_2)$ is available from equation (5.37) and, in general, $s_{ij} = \sigma_j/\sigma_i$. Equations (5.28) and (5.30) can now be solved to yield the exit distributions for the second group $\psi_2(L, -\mu)$ and $\psi_2(R, \mu)$, $\mu > 0$, in terms of the incident distributions $L_2(\mu)$ and $R_2(\mu)$ and the previously established $B_1(\mu, s)$. Note that in this way we are able to deduce the exit fluxes for the second group directly from the incident distributions for that group and the boundary fluxes of the first group.

We now wish to generalize the foregoing and consider the i^{th} group. We assume that the $B_j(\mu, s)$, $j = 1, 2, \dots, i-1$, have been established, and we deduce from equation (5.16) that, for $v \in [-1, 1]$,

$$\lambda_i(v) v B_i(v, v) - \frac{1}{2} c_i v p \int_{-1}^1 \mu G_i(v, \mu) B_i(\mu, v) \frac{d\mu}{\mu - v} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} W_{ij}(v) \quad (5.42)$$

and

$$\sigma_i c_i \chi_i(v) = 2v B_i(v, v) - \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} \chi_{ij}(v) \quad (5.43)$$

and, for $c_i \neq 0$,

$$c_i \zeta_{i,m} \int_{-1}^1 \mu G_i(\zeta_{i,m}, \mu) B_i(\mu, \zeta_{i,m}) \frac{d\mu}{\mu - \zeta_{i,m}} = - \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} W_{ij}(\zeta_{i,m}) \quad (5.44)$$

where

$$W_{ij}(s) = \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \beta_{ij}(\ell) \phi_{j,\ell}(s/\sigma_j) g_{i,\ell}(s) \quad (5.45)$$

For the special case $c_i = 0$, we see from equation (5.43) that, for $|\mu| \in (0, 1]$,

$$B_i(\mu, \mu) = \frac{1}{2\mu} \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} X_{ij}(\mu) \quad , \quad c_i = 0 \quad (5.46)$$

whereas for $c_i \neq 0$, the functions $W_{ij}(s)$ rather than just $X_{ij}(\mu)$, $|\mu| \in (0, 1]$, clearly are required before we can solve equations (5.42) and (5.44) to find $B_i(\mu, s)$. In analogy with equations (5.34), (5.35) and (5.36) we now find, for $j = 1, 2, \dots, i-1$,

$$sh_{j,n} \phi_{j,n}(s/\sigma_j) + (n+1) \phi_{j,n+1}(s/\sigma_j) + n \phi_{j,n-1}(s/\sigma_j) = - (-1)^n M_{j,n}(s) \quad (5.47)$$

where

$$M_{j,n}(s) = (2n+1) \frac{s}{\sigma_j} \int_{-1}^1 \mu P_n(\mu) B_j(\mu, s) d\mu - (-1)^n \frac{s}{\sigma_j} \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk}(n) \phi_{k,n}(s/\sigma_j) \quad (5.48)$$

It is clear that we can write

$$\phi_{j,n}(s/\sigma_j) = (-1)^n g_{j,n}(s) \phi_{j,0}(s/\sigma_j) \sim (-1)^n D_{j,n}(s) \quad (5.49)$$

where $D_{j,0}(s) = 0$ and

$$sh_{j,n} D_{j,n}(s) = (n+1) D_{j,n+1}(s) + n D_{j,n-1}(s) + M_{j,n}(s) \quad (5.50)$$

On substituting equation (5.49) into equation (5.17), with $i = j$, we find

$$\phi_{j,0}(s/\sigma_j) = G_j^{-1}(s,s) [X_{jj}(s) + \sum_{k=1}^L \beta_{jj}(k) D_{j,k}(s) P_k(s)] \quad (5.51)$$

Further, we can deduce from equation (5.16) that for $v \in [-1, 1]$

$$X_{jj}(v) = \frac{1}{\sigma_j} (2v B_j(v,v) + v \int_{-1}^1 \mu G_j(v,\mu) [B_j(\mu,v) - B_j(v,\mu)] \frac{d\mu}{\mu-v} + \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} Y_{jk}(v)) \quad (5.52)$$

and for $s \in [-1, 1]$

$$X_{jj}(s) = \frac{1}{\sigma_j} \Lambda_j^{-1}(s) \left\{ s \int_{-1}^1 \mu G_j(s,\mu) B_j(\mu,s) \frac{d\mu}{\mu-s} + \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk} [Y_{jk}(s) - \Delta_j(s) X_{jk}(s)] \right\} \quad (5.53)$$

Again it is apparent that a limiting procedure must be used in the event that $X_{jj}(c_{j,m})$ is required. Finally, if we use equation (5.49) in equation (5.45), we conclude that

$$W_{ij}(s) = \phi_{j,0}(s/\sigma_j) \sum_{\ell=0}^L \beta_{ij}(\ell) g_{j,\ell}(s/\sigma_j) g_{i,\ell}(s) - \sum_{\ell=1}^L \beta_{ij}(\ell) D_{j,\ell}(s/\sigma_j) g_{i,\ell}(s) \quad (5.54)$$

where $\phi_{j,0}(s/\sigma_j)$ is available from equation (5.51). We recall that $W_{ij}(\mu) = X_{ij}(\mu)$ for $c_j = 0$, and thus for this case equation (5.54) can be used in equation (5.46) to establish the desired result.

We have mentioned before that an alternative expression to equation (5.37) is needed to compute $\phi_{1,0}(s/\sigma_1)$ in the event that $G_1(s,s) = 0$ for some s . The same is true, in general, for the $\phi_{j,0}(s/\sigma_j)$ given by equation (5.51) when $G_j(s,s) = 0$. It is clear that equation (5.37) is only a special case of equation (5.51), and thus we now proceed to derive an alternative expression to the latter. If we set $n = 0$ in equation (5.7) and use equation (5.49) we obtain, for $s \notin [-1,1]$,

$$\sigma_j \Lambda_j(s) \phi_{j,0}(s/\sigma_j) = s \int_{-1}^1 u B_j(u,s) \frac{du}{u-s} - s \sum_{\ell=0}^L \sigma_{jj}(\ell) D_{j,\ell}(s) Q_\ell(s) + s \sum_{k=1}^{j-1} \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \sigma_{jk}(\ell) \phi_{k,\ell}(s/\sigma_j) Q_\ell(s) \quad (5.55)$$

where $Q_\ell(s)$ denote the Legendre functions of second kind (Abramowitz and Stegun, 1964), i.e.,

$$(2\ell+1)sQ_\ell(s) = (\ell+1)Q_{\ell+1}(s) + \ell Q_{\ell-1}(s) + \delta_{\ell,0} \quad (5.56)$$

with

$$Q_0(s) = \frac{1}{2} \log \left(\frac{s+1}{s-1} \right), \quad s \notin [-1,1], \quad (5.57)$$

or

$$Q_0(v) = \frac{1}{2} \log \left(\frac{1+v}{1-v} \right), \quad v \in [-1,1]. \quad (5.58)$$

If we demonstrate that $\Lambda_j(s)$ and $G_j(s,s)$ do not have common zeros for $s \notin [-1,1]$, it is clear that we can divide equation (5.55) by $\Lambda_j(s)$ to obtain the desired alternative formula for $\phi_{j,0}(s/\sigma_j)$, $s \notin [-1,1]$, in the event that $G_j(s,s) = 0$. First we use the summation formulas given by Inönü (1970) to write $\Lambda_j(s)$ and $G_j(s,s)$ in the convenient forms

$$\Lambda_j(s) = (L+1)[Q_L(s)g_{j,L+1}(s) - Q_{L+1}(s)g_{j,L}(s)] \quad (5.59)$$

and

$$G_j(s,s) = \left(\frac{L+1}{c_j s} \right) [P_{L+1}(s)g_{j,L}(s) - P_L(s)g_{j,L+1}(s)]. \quad (5.60)$$

It is easy to show that the following identity holds:

$$(L+1)[P_{L+1}(s)Q_L(s) - P_L(s)Q_{L+1}(s)] = 1. \quad (5.61)$$

We now multiply equation (5.59) by $P_{L+1}(s)$ and use equations (5.60) and (5.61) to obtain

$$P_{L+1}(s)\Lambda_j(s) = g_{j,L+1}(s) - c_j s Q_{L+1}(s)G_j(s,s). \quad (5.62)$$

By contradiction, if we suppose that there exists some $s^* \in [-1, 1]$ such that $\Lambda_j(s^*) = G_j(s^*, s^*) = 0$, we conclude immediately from equation (5.62) that $g_{j, L+1}(s^*) = 0$. However from equation (5.60), we see that this would require $g_{j, L}(s^*) = 0$. Clearly this is not possible, otherwise from equation (5.8) we would have $g_{j, \ell}(s^*) = 0$ for all ℓ . We must then conclude that there is no such s^* .

In order to obtain an alternative formula for $\phi_{j, 0}(v/\sigma_j)$, $v \in [-1, 1]$, we let s approach the branch cut to find that equation (5.55) yields, for $v \in [-1, 1]$,

$$\begin{aligned} \sigma_j c_j G_j(v, v) \phi_{j, 0}(v/\sigma_j) &= 2v B_j(v, v) + \sum_{\ell=0}^L \sigma_{jj}(\ell) D_{j, \ell}(v) P_\ell(v) \\ &- \sum_{k=1}^{j-1} \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \sigma_{jk}(\ell) \phi_{k, \ell}(v/\sigma_j) P_\ell(v) \quad (5.63) \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} \sigma_j \lambda_j(v) \phi_{j, 0}(v/\sigma_j) &= v P \int_{-1}^1 u B_j(u, v) \frac{du}{u-v} - v \sum_{\ell=0}^L \sigma_{jj}(\ell) D_{j, \ell}(v) Q_\ell(v) \\ &+ v \sum_{k=1}^{j-1} \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \sigma_{jk}(\ell) \phi_{k, \ell}(v/\sigma_j) Q_\ell(v) \quad (5.64) \end{aligned}$$

We can use equations (5.63) and (5.64) to show that, for $v \in [-1, 1]$ and $G_j(v, v) = 0$,

$$\begin{aligned}
\sigma_j \lambda_j(v) \phi_{j,0}(v/\sigma_j) &= 2v B_j(v,v) + v \int_{-1}^1 \mu \left[\frac{B_j(\mu,v) - B_j(v,v)}{\mu - v} \right] d\mu \\
&\quad + v \sum_{\ell=1}^L \sigma_{jj}(\ell) D_{j,\ell}(v) \Gamma_\ell(v) \\
&\quad - v \sum_{k=1}^{j-1} \sum_{\ell=1}^L (-1)^\ell \sigma_{jk}(\ell) \Phi_{k,\ell}(v/\sigma_j) \Gamma_\ell(v) \quad , \quad (5.65)
\end{aligned}$$

where the polynomials $\Gamma_\ell(v)$ can be generated with the recursion formula (Siewert, 1980) for $\ell > 0$:

$$(2\ell+1)v\Gamma_\ell(v) = -\delta_{\ell,0} + (\ell+1)\Gamma_{\ell+1}(v) + \ell\Gamma_{\ell-1}(v) \quad (5.66)$$

where

$$\Gamma_0(v) = 0 \quad . \quad (5.67)$$

Again, if we demonstrate that $\lambda_j(v)$ and $G_j(v,v)$ do not have common zeros for $v \in [-1,1]$ we can divide equation (5.65) by $\lambda_j(v)$ to obtain the desired alternative formula for $\phi_{j,0}(v/\sigma_j)$, $v \in [-1,1]$, when $G_j(v,v) = 0$. We let s approach the branch cut to obtain from equation (5.59)

$$\lambda_j(v) = (L+1)[Q_L(v)g_{j,L+1}(v) - Q_{L+1}(v)g_{j,L}(v)] \quad (5.68)$$

and

$$G_j(v,v) = \left(\frac{L+1}{c_j v} \right) [P_{L+1}(v)g_{j,L}(v) - P_L(v)g_{j,L+1}(v)] \quad . \quad (5.69)$$

Of course equation (5.61) is still valid for $v \in [-1,1]$:

$$(L+1)[P_{L+1}(v)Q_L(v) - P_L(v)Q_{L+1}(v)] = 1 \quad (5.70)$$

and equation (5.62) yields

$$P_{L+1}(v)\lambda_j(v) = g_{j,L+1}(v) - c_j v Q_{L+1}(v) G_j(v, v) \quad (5.71)$$

By contradiction, if we suppose that there exists some $v^* \in [-1, 1]$ such that $\lambda_j(v^*) = G_j(v^*, v^*) = 0$ we see from equation (5.71) that we must have $g_{j,L+1}(v^*) = 0$. As before, the possibility that $g_{j,L}(v^*) = 0$ has to be ruled out and thus $G_j(v^*, v^*) = 0$ would require $P_{L+1}(v^*) = 0$ in equation (5.69). At the same time $\lambda_j(v^*) = 0$ would require $Q_{L+1}(v^*) = 0$ in equation (5.68). But $P_{L+1}(v^*)$ and $Q_{L+1}(v^*)$ cannot be zero simultaneously otherwise equation (5.70) would be violated. We must then conclude that there is no such v^* . We note that this result also implies that there are no discrete eigenvalues embedded in the continuum.

5.3 The F_N Method

Rather than pursue exact analysis to solve the developed singular integral equations and constraints for the exit distributions $\psi_i(L, -\mu)$ and $\psi_i(R, \mu)$, $\mu > 0$, we prefer to use the F_N method (Siewert and Benoist, 1979) to construct a concise approximate solution. We thus let $\Delta = R - L$, $\Delta_i = \sigma_i \Delta$ and write, for the i th group and $\mu > 0$,

$$\psi_i(L, -\mu) = R_i(\mu) \exp(-\Delta_i/\mu) + \sum_{\alpha=0}^N a_{i,\alpha} P_\alpha(2\mu-1) \quad (5.72a)$$

and

$$\psi_i(R, \mu) = L_i(\mu) \exp(-\Delta_i/\mu) + \sum_{\alpha=0}^N b_{i,\alpha} P_\alpha(2\mu-1) \quad (5.72b)$$

If we now use equations (5.3) and (5.72) in (5.5), we can deduce from equations (5.42) and (5.44) that

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^N [a_{i,\alpha} B_{i,\alpha}(\xi) + c_i \exp(-\Delta_i/\xi) b_{i,\alpha} A_{i,\alpha}(\xi)] \\ = c_i I_i(\xi) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} I_{ij}(\xi) \end{aligned} \quad (5.73a)$$

and

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^N [b_{i,\alpha} B_{i,\alpha}(\xi) + c_i \exp(-\Delta_i/\xi) a_{i,\alpha} A_{i,\alpha}(\xi)] \\ = c_i J_i(\xi) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} J_{ij}(\xi) \end{aligned} \quad (5.73b)$$

for all $\xi \in P_i = \{v_{i,m}\} \cup [0,1]$. Here $v_{i,m}$, $m = 0, 1, 2, \dots, \kappa_i - 1$, denote the positive discrete eigenvalues relevant to group i ,

$$\begin{aligned} I_i(\xi) = \int_0^1 \mu [L_i(\mu) G_i(-\xi, \mu) S_i(\Delta, \mu, \xi) \\ + R_i(\mu) G_i(\xi, \mu) C_i(\Delta, \mu, \xi)] d\mu \end{aligned} \quad (5.74a)$$

and

$$\begin{aligned} J_i(\xi) = \int_0^1 \mu [L_i(\mu) G_i(\xi, \mu) C_i(\Delta, \mu, \xi) \\ + R_i(\mu) G_i(-\xi, \mu) S_i(\Delta, \mu, \xi)] d\mu \end{aligned} \quad (5.74b)$$

where

$$S_i(\Delta, \mu, \xi) = \frac{1 - \exp(-\sigma_i \Delta / \mu) \exp(-\sigma_i \Delta / \xi)}{\mu + \xi} \quad (5.75a)$$

and

$$C_i(\Delta, \mu, \xi) = \frac{\exp(-\sigma_i \Delta / \mu) - \exp(-\sigma_i \Delta / \xi)}{\mu - \xi} \quad (5.75b)$$

We have also introduced

$$\xi I_{ij}(\xi) = e^{\sigma_i L / \xi} W_{ij}(\xi) \quad (5.76a)$$

and

$$\xi J_{ij}(\xi) = e^{-\sigma_i R / \xi} W_{ij}(-\xi) \quad (5.76b)$$

Finally, the functions $A_{i,\alpha}(\xi)$ and $B_{i,\alpha}(\xi)$ required in equations (5.73) are defined in the following way:

$$A_{i,\alpha}(\xi) = \int_0^1 \mu P_\alpha(2\mu-1) G_i(-\xi, \mu) \frac{d\mu}{\mu+\xi}, \quad \xi \in [-1, 0], \quad (5.77)$$

$$B_{i,\alpha}(\xi) = -c_i \int_0^1 \mu P_\alpha(2\mu-1) G_i(\xi, \mu) \frac{d\mu}{\mu-\xi}, \quad \xi \in (v_i, m] \quad (5.78a)$$

and

$$B_{i,\alpha}(\xi) = 2\lambda_i(\xi) P_\alpha(2\xi-1) - c_i P \int_0^1 \mu P_\alpha(2\mu-1) G_i(\xi, \mu) \frac{d\mu}{\mu-\xi}, \quad \xi \in [0, 1] \quad (5.78b)$$

In Section 5.5, we report some recursion relations that establish an accurate and convenient method for evaluating the basic functions $A_{i,\alpha}(\xi)$ and $B_{i,\alpha}(\xi)$.

Considering the right-hand sides of equations (5.73), we note from equations (5.74) that the functions $I_i(\xi)$ and $J_i(\xi)$ are immediately

available directly from the boundary data for the i^{th} group. The additional terms $I_{ij}(\xi)$ and $J_{ij}(\xi)$ clearly represent down-scattering contributions to the i^{th} group. We assume now that the constants $\{a_{j,\alpha}\}$ and $\{b_{j,\alpha}\}$, $j = 1, 2, \dots, i-1$, have been found so that the approximate results, for $\mu > 0$,

$$B_j(\mu, s) = \exp(-\sigma_j L/s) \{R_j(\mu)[\exp(-\Delta_j/\mu) - \exp(-\Delta_j/s)] + \sum_{\alpha=0}^N a_{j,\alpha} P_{\alpha}(2\mu-1)\} \quad (5.79a)$$

and

$$B_j(-\mu, s) = \exp(-\sigma_j L/s) \{L_j(\mu)[1 - \exp(-\Delta_j/\mu)\exp(-\Delta_j/s)] - \exp(-\Delta_j/s) \sum_{\alpha=0}^N b_{j,\alpha} P_{\alpha}(2\mu-1)\} \quad (5.79b)$$

are available for $j = 1, 2, \dots, i-1$. Thus, on considering equations (5.73) at $N+1$ values of $\xi \in P_i$, say $\xi_{i,\beta}$, we can solve the system of linear algebraic equations

$$\sum_{\alpha=0}^N [a_{i,\alpha} B_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta}) + c_i \exp(-\Delta_i/\xi_{i,\beta}) b_{i,\alpha} A_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta})] = c_i I_i(\xi_{i,\beta}) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} I_{ij}(\xi_{i,\beta}) \quad (5.80a)$$

and

$$\sum_{\alpha=0}^N [b_{i,\alpha} B_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta}) + c_i \exp(-\Delta_i/\xi_{i,\beta}) a_{i,\alpha} A_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta})] = c_i J_i(\xi_{i,\beta}) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} J_{ij}(\xi_{i,\beta}) \quad (5.80b)$$

for $\beta = 0, 1, 2, \dots, N$, to find the desired constants for the i th group $\{a_{i,\alpha}\}$ and $\{b_{i,\alpha}\}$ provided we first express $I_{ij}(\xi)$ and $J_{ij}(\xi)$ in terms of known quantities. We therefore proceed to use equations (5.76) and the various results developed in the previous section in order to deduce expressions that can be used in a convenient manner to compute the desired $I_{ij}(\xi)$ and $J_{ij}(\xi)$. To be specific, we note that for $i = 1$ the right-hand sides of equations (5.80) are known since $I_1(\xi)$ and $J_1(\xi)$ are given by equations (5.74). We thus can solve the system of linear algebraic equations to find $\{a_{1,\alpha}\}$ and $\{b_{1,\alpha}\}$. Considering equations (5.80) for $i > 2$, we see that we must compute $I_{ij}(\xi)$ and $J_{ij}(\xi)$ for $j = 1, 2, \dots, i-1$, along with $I_i(\xi)$ and $J_i(\xi)$ as given by equations (5.74), before we can solve the linear system to find $\{a_{i,\alpha}\}$ and $\{b_{i,\alpha}\}$. We find

$$I_{ij}(\xi) = \sum_{\lambda=0}^L (-1)^\lambda \beta_{ij}(\lambda) \phi_{j,\lambda}^+(\xi/\sigma_i) g_{i,\lambda}(\xi) \quad (5.81)$$

where

$$\begin{aligned} \phi_{j,\lambda}^+(\xi/\sigma_i) &= (-1)^\lambda g_{j,\lambda}(s_{ij}\xi) \phi_{j,0}^+(\xi/\sigma_i) \\ &\quad - (-1)^\lambda D_{j,\lambda}^+(s_{ij}\xi) \end{aligned} \quad (5.82)$$

with

$$\begin{aligned} \phi_{j,0}^+(\xi/\sigma_i) &= G_j^{-1}(s_{ij}\xi, s_{ij}\xi) [X_{jj}^+(s_{ij}\xi) \\ &\quad + \sum_{\lambda=1}^L \beta_{jj}(\lambda) D_{j,\lambda}^+(s_{ij}\xi) P_\lambda(s_{ij}\xi)] \end{aligned} \quad (5.83)$$

Here $D_{j,\lambda}^+(s_{ij}\xi)$, with $D_{j,0}^+(s_{ij}\xi) = 0$, are available from

$$s_{ij}\xi h_{j,\ell} D_{j,\ell}^+(s_{ij}\xi) = (\ell+1)D_{j,\ell+1}^+(s_{ij}\xi) + \ell D_{j,\ell-1}^+(s_{ij}\xi) + M_{j,\ell}^+(s_{ij}\xi) \quad (5.84)$$

where

$$M_{j,\ell}^+(s_{ij}\xi) = \frac{2\ell+1}{\sigma_i} \{K_{j,\ell}(s_{ij}\xi) + \sum_{\alpha=0}^{\ell+1} [a_{j,\alpha} + (-1)^\alpha \exp(-\Delta_j/\xi) b_{j,\alpha}] T_{\alpha,\ell} - \frac{\xi}{\sigma_i} U_{j,\ell}(\xi/\sigma_i)\} \quad (5.85)$$

In equation (5.85) we have used the definitions

$$K_{j,\ell}(\xi) = \int_0^1 \mu P_\ell(\mu) \{R_j(\mu) [\exp(-\Delta_j/\mu) - \exp(-\Delta_j/\xi)] - (-1)^\ell L_j(\mu) [1 - \exp(-\Delta_j/\mu) \exp(-\Delta_j/\xi)]\} d\mu \quad (5.86)$$

$$T_{\alpha,\ell} = \int_0^1 \mu P_\alpha(2\nu-1) P_\ell(\nu) d\nu \quad (5.87)$$

and

$$U_{j,\ell}(\xi/\sigma_i) = (-1)^\ell \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk}(\ell) \Phi_{k,\ell}^+(\xi/\sigma_i) \quad (5.88)$$

We note that Devaux, Siewert, and Yuan (1982) have reported a recursion relation that provides an efficient way to compute the numbers $T_{\alpha,\ell}$ (see Section 5.5). Also we point out that $U_{j,\ell}(\xi/\sigma_i)$ is considered known since all $\Phi_{k,\ell}^+(\xi/\sigma_i)$ required in equation (5.88) have, by necessity, been

computed in previous steps. Finally for $s_{ij}\xi \in [0,1]$, $\chi_{jj}^+(s_{ij}\xi)$ is given by

$$\begin{aligned} \chi_{jj}^+(s_{ij}\xi) = & \frac{1}{\sigma_i} \{ I_j(s_{ij}\xi) + [2 - A_{j,0}(s_{ij}\xi)] \sum_{\alpha=0}^N a_{j,\alpha} P_\alpha(2s_{ij}\xi - 1) \\ & + \sum_{\alpha=0}^N [a_{j,\alpha} G_{j,\alpha}(s_{ij}\xi) - \exp(-\Delta_j/\xi) b_{j,\alpha} A_{j,\alpha}(s_{ij}\xi)] \\ & + s_{ji} \sum_{\ell=1}^L U_{j,\ell}(\xi/\sigma_i) E_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \} \quad (5.89) \end{aligned}$$

where

$$G_{j,\alpha}(\xi) = \int_0^1 \mu G_j(\xi, \mu) \left[\frac{P_\alpha(2\mu - 1) - P_\alpha(2\xi - 1)}{\mu - \xi} \right] d\mu \quad (5.90)$$

can be computed effectively from a recursion relation (see Section 5.5).

For $s_{ij}\xi \notin [0,1]$ we find

$$\begin{aligned} \chi_{jj}^+(s_{ij}\xi) = & \frac{1}{\sigma_i} \Lambda_j^{-1}(s_{ij}\xi) \{ \tau_j(s_{ij}\xi) \\ & - s_{ji} \Delta_j(s_{ij}\xi) \sum_{\ell=0}^L U_{j,\ell}(\xi/\sigma_i) P_\ell(s_{ij}\xi) \\ & + s_{ji} \sum_{\ell=1}^L U_{j,\ell}(\xi/\sigma_i) E_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \} \quad (5.91) \end{aligned}$$

where

$$\tau_j(\xi) = I_j(\xi) + \sum_{\alpha=0}^N [a_{j,\alpha} A_{j,\alpha}(-\xi) - \exp(-\Delta_j/\xi) b_{j,\alpha} A_{j,\alpha}(\xi)] \quad (5.92)$$

In a similar way we find

$$J_{ij}(\xi) = \sum_{\ell=0}^L \beta_{ij}(\ell) \bar{\phi}_{j,\ell}(\xi/\sigma_i) g_{i,\ell}(\xi) \quad (5.93)$$

where

$$\bar{\phi}_{j,\ell}(\xi/\sigma_i) = g_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \bar{\phi}_{j,0}(\xi/\sigma_i) - (-1)^\ell \bar{D}_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \quad (5.94)$$

with

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{j,0}(\xi/\sigma_i) = & G_j^{-1}(s_{ij}\xi, s_{ij}\xi) [X_{jj}(s_{ij}\xi) \\ & + \sum_{\ell=1}^L (-1)^\ell \beta_{jj}(\ell) \bar{D}_{j,\ell}(s_{ij}\xi) P_\ell(s_{ij}\xi)] . \end{aligned} \quad (5.95)$$

Here $\bar{D}_{j,\ell}(s_{ij}\xi)$, with $\bar{D}_{j,0}(s_{ij}\xi) = 0$, are available from

$$\begin{aligned} -s_{ij}\xi h_{j,\ell} \bar{D}_{j,\ell}(s_{ij}\xi) = & (\ell+1) \bar{D}_{j,\ell+1}(s_{ij}\xi) \\ & + \ell \bar{D}_{j,\ell-1}(s_{ij}\xi) + \bar{M}_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \end{aligned} \quad (5.96)$$

where

$$\begin{aligned} \bar{M}_{j,\ell}(s_{ij}\xi) = & \frac{2\ell+1}{\sigma_i} \{N_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \\ & - \sum_{\alpha=0}^{\ell+1} [(-1)^\alpha b_{j,\alpha} + \exp(-\Delta_j/\xi) a_{j,\alpha}] T_{\alpha,\ell}\} \\ & + (-1)^\ell \frac{\xi}{\sigma_i} v_{j,\ell}(\xi/\sigma_i) . \end{aligned} \quad (5.97)$$

In equation (5.97) we have used the definitions

$$N_{j,\ell}(\xi) = \int_0^1 \mu P_\ell(\mu) \{ R_j(\mu) [1 - \exp(-\Delta_j/\mu) \exp(-\Delta_j/\xi)] - (-1)^\ell L_j(\mu) [\exp(-\Delta_j/\mu) - \exp(-\Delta_j/\xi)] \} d\mu \quad (5.98)$$

and

$$V_{j,\ell}(\xi/\sigma_i) = \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk}(\ell) \bar{\phi}_{k,\ell}(\xi/\sigma_i) \quad (5.99)$$

which, as discussed before, is available from previous steps. Finally, for $s_{ij}\xi \in [0,1]$, $\bar{X}_{jj}(s_{ij}\xi)$ is given by

$$\begin{aligned} \bar{X}_{jj}(s_{ij}\xi) = & \frac{1}{\sigma_i} \{ J_j(s_{ij}\xi) + [2 - A_{j,0}(s_{ij}\xi)] \sum_{\alpha=0}^N b_{j,\alpha} P_\alpha(2s_{ij}\xi - 1) \\ & + \sum_{\alpha=0}^N [b_{j,\alpha} G_{j,\alpha}(s_{ij}\xi) - \exp(-\Delta_j/\xi) a_{j,\alpha} A_{j,\alpha}(s_{ij}\xi)] \\ & + s_{ji} \sum_{\ell=1}^L V_{j,\ell}(\xi/\sigma_i) E_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \} \quad (5.100) \end{aligned}$$

For $s_{ij}\xi \notin [0,1]$ we find

$$\begin{aligned} \bar{X}_{jj}(s_{ij}\xi) = & \frac{1}{\sigma_i} A_j^{-1}(s_{ij}\xi) \{ \Xi_j(s_{ij}\xi) \\ & - s_{ji} \Delta_j(s_{ij}\xi) \sum_{\ell=0}^L V_{j,\ell}(\xi/\sigma_i) P_\ell(s_{ij}\xi) \\ & + s_{ji} \sum_{\ell=1}^L V_{j,\ell}(\xi/\sigma_i) E_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \} \quad (5.101) \end{aligned}$$

where

$$\Xi_j(\xi) = J_j(\xi) + \sum_{\alpha=0}^N [b_{j,\alpha} A_{j,\alpha}(-\xi) - \exp(-\Delta_j/\xi) a_{j,\alpha} A_{j,\alpha}(\xi)] \quad (5.102)$$

Having developed the F_N method to find the surface fluxes, we now demonstrate how a slight modification of the analysis of Section 5.2 and the F_N method can be used to compute accurately the angular fluxes for all $z \in (L, R)$.

5.4 The Interior Angular Fluxes

If we change μ to $-\mu$ in equation (5.1), multiply the resulting equation by $\exp(-\sigma_j z/s)$ and integrate over z from z_1 to z_2 , with $L < z_1 < z_2 < R$, we obtain an equation similar to equation (5.4), viz.

$$\begin{aligned} s\mu B_i^\dagger(\mu, s) - \sigma_j(\mu - s) \int_{z_1}^{z_2} \psi_i(z, -\mu) \exp(-\sigma_j z/s) dz \\ = \frac{s}{2} \sum_{j=1}^i \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \sigma_{ij}(\ell) P_\ell(\mu) \Phi_{j,\ell}^\dagger(s/\sigma_j) \end{aligned} \quad (5.103)$$

where

$$B_i^\dagger(\mu, s) = \psi_i(z_1, -\mu) \exp(-\sigma_j z_1/s) - \psi_i(z_2, -\mu) \exp(-\sigma_j z_2/s) \quad (5.104)$$

and

$$\Phi_{j,\ell}^\dagger(s/\sigma_j) = \int_{z_1}^{z_2} \phi_{j,\ell}(z) \exp(-\sigma_j z/s) dz \quad (5.105)$$

We can follow the development discussed in Section 5.2 to obtain from equation (5.103) generalizations of equations (5.42), (5.43), and (5.44). Thus for the i th group and for $v \in [-1, 1]$ we find

$$\begin{aligned} \lambda_i(v) v B_i^\dagger(v, v) - \frac{1}{2} c_i v P \int_{-1}^1 \mu G_i(v, \mu) B_i^\dagger(\mu, v) \frac{d\mu}{\mu - v} \\ = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} W_{ij}^\dagger(v) \end{aligned} \quad (5.106)$$

and

$$\sigma_i c_i X_{ii}^\dagger(v) = 2v B_i^\dagger(v, v) - \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} X_{ij}^\dagger(v) \quad (5.107)$$

and, for $c_j \neq 0$,

$$\begin{aligned} c_j \zeta_{j,m} \int_{-1}^1 \mu G_j(\zeta_{j,m}, \mu) B_j^\dagger(\mu, \zeta_{j,m}) \frac{d\mu}{\mu - \zeta_{j,m}} \\ = - \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} W_{ij}^\dagger(\zeta_{j,m}) \end{aligned} \quad (5.108)$$

where

$$W_{ij}^\dagger(s) = \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \beta_{ij}(\ell) \phi_{j,\ell}^\dagger(s/\sigma_j) g_{i,\ell}(s) \quad (5.109)$$

and

$$X_{ij}^\dagger(s) = \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \beta_{ij}(\ell) \phi_{j,\ell}^\dagger(s/\sigma_j) P_\ell(s) \quad (5.110)$$

For the special case $c_j = 0$, we find, for $|\mu| \in (0, 1]$,

$$B_i^\dagger(\mu, \mu) = \frac{1}{2\mu} \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} \chi_{ij}^\dagger(\mu) \quad (5.111)$$

We note that the expressions developed in Section 5.2 for the computation of $\phi_{j,\ell}(s/\sigma_j)$ can be generalized so that $\phi_{j,\ell}^\dagger(s/\sigma_j)$ can be found in a similar manner.

We now let $z_1 = z$ and $z_2 = R$ and then use equations (5.3b), (5.72b) and the approximations, for $\mu > 0$,

$$\psi_i(z, -\mu) = R_i(\mu) \exp[-\sigma_i(R-z)/\mu] + \sum_{\alpha=0}^N c_{i,\alpha}(z) P_\alpha(2\mu-1) \quad (5.112a)$$

and

$$\psi_i(z, \mu) = L_i(\mu) \exp[-\sigma_i(z-L)/\mu] + \sum_{\alpha=0}^N d_{i,\alpha}(z) P_\alpha(2\mu-1) \quad (5.112b)$$

in equation (5.104) to deduce from equations (5.106) and (5.108) the first of our F_N equations. Similarly, we can take $z_1 = L$ and $z_2 = z$ and then use equations (5.3a), (5.72a) and (5.112) in equation (5.104) to deduce from equations (5.106) and (5.108) the second of the F_N equations. Thus, for $z \in (L, R)$ and $\xi \in P_i$ we find

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^N [c_{i,\alpha}(z) B_{i,\alpha}(\xi) - c_i d_{i,\alpha}(z) A_{i,\alpha}(\xi)] &= c_i I_i(z, \xi) \\ &+ \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} I_{ij}(z, \xi) - c_i \exp[-\sigma_i(R-z)/\xi] \sum_{\alpha=0}^N b_{i,\alpha} A_{i,\alpha}(\xi) \end{aligned} \quad (5.113a)$$

and

$$\sum_{\alpha=0}^N [d_{i,\alpha}(z)B_{i,\alpha}(\xi) - c_i c_{i,\alpha}(z)A_{i,\alpha}(\xi)] = c_i J_i(z, \xi) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} J_{ij}(z, \xi) - c_i \exp[-\sigma_i(z-L)/\xi] \sum_{\alpha=0}^N a_{i,\alpha} A_{i,\alpha}(\xi) \quad (5.113b)$$

Here

$$I_i(z, \xi) = \int_0^1 \mu \{ L_i(\mu) G_i(-\xi, \mu) \exp[-\sigma_i(z-L)/\mu] S_i(R-z, \mu, \xi) + R_i(\mu) G_i(\xi, \mu) C_i(R-z, \mu, \xi) \} d\mu \quad (5.114a)$$

$$J_i(z, \xi) = \int_0^1 \mu \{ L_i(\mu) G_i(\xi, \mu) C_i(z-L, \mu, \xi) + R_i(\mu) G_i(-\xi, \mu) \exp[-\sigma_i(R-z)/\mu] S_i(z-L, \mu, \xi) \} d\mu \quad (5.114b)$$

$$\xi I_{ij}(z, \xi) = e^{\sigma_j z / \xi} W_{ij}(\xi) \quad , \quad z_1 = z \quad \text{and} \quad z_2 = R \quad (5.115a)$$

and

$$\xi J_{ij}(z, \xi) = e^{-\sigma_j z / \xi} W_{ij}(-\xi) \quad , \quad z_1 = L \quad \text{and} \quad z_2 = z \quad (5.115b)$$

Investigating the right-hand sides of equations (5.113), we note from equations (5.114) that $I_i(z, \xi)$ and $J_i(z, \xi)$ are available, for any $z \in (L, R)$, directly from the boundary data for the i^{th} group. The terms $I_{ij}(z, \xi)$ and $J_{ij}(z, \xi)$ represent, as before, down-scattering contributions to the i^{th} group, and at this point the constants $\{a_{i,\alpha}\}$ and $\{b_{i,\alpha}\}$ have already been established. Thus on considering equations (5.113) at the

same $N+1$ values of $\xi \in P_i$ used in equation (5.80), namely $\xi_{i,\beta}$, we can solve the system of linear algebraic equations

$$\sum_{\alpha=0}^N [c_{i,\alpha}(z)B_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta}) - c_i d_{i,\alpha}(z)A_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta})] = c_i I_i(z, \xi_{i,\beta}) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} I_{ij}(z, \xi_{i,\beta}) - c_i \exp[-\sigma_i(R-z)/\xi_{i,\beta}] \sum_{\alpha=0}^N b_{i,\alpha} A_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta}) \quad (5.116a)$$

and

$$\sum_{\alpha=0}^N [d_{i,\alpha}(z)B_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta}) - c_i c_{i,\alpha}(z)A_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta})] = c_i J_i(z, \xi_{i,\beta}) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} J_{ij}(z, \xi_{i,\beta}) - c_i \exp[-\sigma_i(z-L)/\xi_{i,\beta}] \sum_{\alpha=0}^N a_{i,\alpha} A_{i,\alpha}(\xi_{i,\beta}) \quad (5.116b)$$

for $\beta = 0, 1, 2, \dots, N$, to find $\{c_{i,\alpha}(z)\}$ and $\{d_{i,\alpha}(z)\}$ for selected values of $z \in (L, R)$ provided we first express $I_{ij}(z, \xi)$ and $J_{ij}(z, \xi)$ in terms of known quantities. We observe that the functions $A_{i,\alpha}(\xi)$ and $B_{i,\alpha}(\xi)$ appearing in equations (5.116) are the same as used in equations (5.80), and thus the only new quantities to be evaluated are $I_i(z, \xi)$, $J_i(z, \xi)$, $I_{ij}(z, \xi)$, and $J_{ij}(z, \xi)$. Further we note that the matrix of coefficients in equations (5.116) is independent of z so that the solutions to these equations for many values of z can be accomplished with one matrix

inversion. We now summarize the equations that can be used to compute the desired $I_{ij}(z, \xi)$ and $J_{ij}(z, \xi)$. We find

$$I_{ij}(z, \xi) = \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \beta_{ij}(\ell) \Phi_{j,\ell}^+(z, \xi/\sigma_i) g_{i,\ell}(\xi) \quad (5.117)$$

where

$$\begin{aligned} \Phi_{j,\ell}^+(z, \xi/\sigma_i) &= (-1)^\ell g_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \Phi_{j,0}^+(z, \xi/\sigma_i) \\ &\quad - (-1)^\ell D_{j,\ell}^+(z, s_{ij}\xi) \end{aligned} \quad (5.118)$$

with

$$\begin{aligned} \Phi_{j,0}^+(z, \xi/\sigma_i) &= G_j^{-1}(s_{ij}\xi, s_{ij}\xi) [X_{jj}^+(z, s_{ij}\xi) \\ &\quad + \sum_{\ell=1}^L \beta_{jj}(\ell) D_{j,\ell}^+(z, s_{ij}\xi) P_\ell(s_{ij}\xi)] \end{aligned} \quad (5.119)$$

Here $D_{j,\ell}^+(z, s_{ij}\xi)$, with $D_{j,0}^+(z, s_{ij}\xi)$, are available from

$$\begin{aligned} s_{ij}\xi h_{j,\ell} D_{j,\ell}^+(z, s_{ij}\xi) &= (\ell+1) D_{j,\ell+1}^+(z, s_{ij}\xi) \\ &\quad + \ell D_{j,\ell-1}^+(z, s_{ij}\xi) + M_{j,\ell}^+(z, s_{ij}\xi) \end{aligned} \quad (5.120)$$

where

$$\begin{aligned} M_{j,\ell}^+(z, s_{ij}\xi) &= \frac{2\ell+1}{\sigma_i} (K_{j,\ell}(z, s_{ij}\xi) + \sum_{\alpha=0}^{\ell+1} [c_{j,\alpha}(z) - (-1)^\ell d_{j,\alpha}(z)] \\ &\quad + (-1)^\ell \exp[-\sigma_i(R-z)/\xi] b_{j,\alpha} T_{\alpha,\ell}) - \frac{\xi}{\sigma_i} U_{j,\ell}(z, \xi/\sigma_i) \end{aligned} \quad (5.121)$$

In equation (5.121) we have used the definitions

$$\begin{aligned}
 X_{j,\ell}(z,\xi) = & \int_0^1 \mu P_\ell(\mu) \left[R_j(\mu) \{ \exp[-\sigma_j(R-z)/\mu] - \exp[-\sigma_j(R-z)/\xi] \} \right. \\
 & \left. - (-1)^\ell L_j(\mu) \exp[-\sigma_j(z-L)/\mu] \right. \\
 & \left. \times (1 - \exp[-\sigma_j(R-z)/\mu] \exp[-\sigma_j(R-z)/\xi]) \right] d\mu \quad (5.122)
 \end{aligned}$$

and

$$U_{j,\ell}(z,\xi/\sigma_i) = (-1)^\ell \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk}(\ell) \Phi_{k,\ell}^+(z,\xi/\sigma_i) \quad (5.123)$$

Finally for $s_{ij}\xi \in [0,1]$, $X_{jj}^+(z,s_{ij}\xi)$ is given by

$$\begin{aligned}
 X_{jj}^+(z,s_{ij}\xi) = & \frac{1}{\sigma_j} \left\{ I_j(z,s_{ij}\xi) + [2 - A_{j,0}(s_{ij}\xi)] \sum_{\alpha=0}^N c_{j,\alpha}(z) P_\alpha(2s_{ij}\xi - 1) \right. \\
 & + \sum_{\alpha=0}^N \left[c_{j,\alpha}(z) G_{j,\alpha}(s_{ij}\xi) + \{ d_{j,\alpha}(z) - \exp[-\sigma_j(R-z)/\xi] b_{j,\alpha} \} A_{j,\alpha}(s_{ij}\xi) \right] \\
 & \left. + s_{ji} \sum_{\ell=1}^L U_{j,\ell}(z,\xi/\sigma_i) E_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \right\} \quad (5.124)
 \end{aligned}$$

For $s_{ij}\xi \notin [0,1]$ we find

$$\begin{aligned}
 X_{jj}^+(z,s_{ij}\xi) = & \frac{1}{\sigma_j} A_j^{-1}(s_{ij}\xi) \left\{ T_j(z,s_{ij}\xi) \right. \\
 & \left. - s_{ji} \Delta_j(s_{ij}\xi) \sum_{\ell=0}^L U_{j,\ell}(z,\xi/\sigma_i) P_\ell(s_{ij}\xi) \right. \\
 & \left. + s_{ji} \sum_{\ell=1}^L U_{j,\ell}(z,\xi/\sigma_i) E_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \right\} \quad (5.125)
 \end{aligned}$$

where

$$T_j(z, \xi) = I_j(z, \xi) + \sum_{\alpha=0}^N [c_{j,\alpha}(z)A_{j,\alpha}(-\xi) + \{d_{j,\alpha}(z) - \exp[-\sigma_j(R-z)/\xi]b_{j,\alpha}\}A_{j,\alpha}(\xi)] \quad (5.126)$$

In a similar way we find

$$J_{ij}(z, \xi) = \sum_{\ell=0}^L \beta_{ij}(\ell) \bar{\phi}_{j,\ell}(z, \xi/\sigma_i) g_{i,\ell}(\xi) \quad (5.127)$$

where

$$\bar{\phi}_{j,\ell}(z, \xi/\sigma_i) = g_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \bar{\phi}_{j,0}(z, \xi/\sigma_i) - (-1)^\ell D_{j,\ell}(z, s_{ij}\xi) \quad (5.128)$$

with

$$\bar{\phi}_{j,0}(z, \xi/\sigma_i) = G_j^{-1}(s_{ij}\xi, s_{ij}\xi) [X_{jj}(z, s_{ij}\xi) + \sum_{\ell=1}^L (-1)^\ell \beta_{jj}(\ell) D_{j,\ell}(z, s_{ij}\xi) P_\ell(s_{ij}\xi)] \quad (5.129)$$

Here $\bar{D}_{j,\ell}(z, s_{ij}\xi)$, with $\bar{D}_{j,0}(z, s_{ij}\xi) = C$, are available from

$$-s_{ij}\xi h_{j,\ell} \bar{D}_{j,\ell}(z, s_{ij}\xi) = (\ell+1) \bar{D}_{j,\ell+1}(z, s_{ij}\xi) + \ell \bar{D}_{j,\ell-1}(z, s_{ij}\xi) + M_{j,\ell}(z, s_{ij}\xi) \quad (5.130)$$

where

$$\begin{aligned} \bar{M}_{j,\ell}(z, s_{ij}\xi) &= \frac{2\ell+1}{\sigma_j} \left[N_{j,\ell}(z, s_{ij}\xi) + \sum_{\alpha=0}^{\ell+1} (c_{j,\alpha}(z) - (-1)^\ell d_{j,\alpha}(z)) \right. \\ &\quad \left. - \exp[-\sigma_j(z-L)/\xi] a_{j,\alpha} T_{\alpha,\ell} \right] + (-1)^\ell \frac{\xi}{\sigma_j} v_{j,\ell}(z, \xi/\sigma_j) . \quad (5.131) \end{aligned}$$

In equation (5.131) we have used the definitions

$$\begin{aligned} N_{j,\ell}(z, \xi) &= \int_0^1 \mu P_\ell(\mu) \left[R_j(\mu) \exp[-\sigma_j(R-z)/\mu] \{1 - \exp[-\sigma_j(z-L)/\mu] \exp[-\sigma_j(z-L)/\xi]\} \right. \\ &\quad \left. - (-1)^\ell L_j(\mu) \{ \exp[-\sigma_j(z-L)/\mu] - \exp[-\sigma_j(z-L)/\xi] \} \right] d\mu \quad (5.132) \end{aligned}$$

and

$$v_{j,\ell}(z, \xi/\sigma_j) = \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_{jk}(\ell) \bar{\phi}_{k,\ell}(z, \xi/\sigma_j) . \quad (5.133)$$

Finally, for $s_{ij}\xi \in [0, 1]$, $\bar{X}_{jj}(z, s_{ij}\xi)$ is given by

$$\begin{aligned} \bar{X}_{jj}(z, s_{ij}\xi) &= \frac{1}{\sigma_j} \left[J_j(z, s_{ij}\xi) + [2 - A_{j,0}(s_{ij}\xi)] \sum_{\alpha=0}^N d_{j,\alpha}(z) P_\alpha(2s_{ij}\xi - 1) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\alpha=0}^N [d_{j,\alpha}(z) G_{j,\alpha}(s_{ij}\xi) + (c_{j,\alpha}(z) - \exp[-\sigma_j(z-L)/\xi] a_{j,\alpha}) A_{j,\alpha}(s_{ij}\xi)] \right. \\ &\quad \left. + s_{ij} \sum_{\ell=1}^L v_{j,\ell}(z, \xi/\sigma_j) E_{j,\ell}(s_{ij}\xi) \right] . \quad (5.134) \end{aligned}$$

For $s_{ij}\xi \notin [0, 1]$ we find

$$\begin{aligned}
 \bar{\chi}_{jj}(z, s_{ij}\xi) &= \frac{1}{\sigma_j} \Lambda_j^{-1}(s_{ij}\xi) (\Xi_j(z, s_{ij}\xi) \\
 &\quad - s_{ji} \Delta_j(s_{ij}\xi) \sum_{\ell=0}^L V_{j,\ell}(z, \xi/\sigma_j) P_\ell(s_{ij}\xi) \\
 &\quad + s_{ji} \sum_{\ell=1}^L V_{j,\ell}(z, \xi/\sigma_j) E_{j,\ell}(s_{ij}\xi)) \quad (5.135)
 \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned}
 \Xi_j(z, \xi) &= J_j(z, \xi) + \sum_{\alpha=0}^N \left[d_{j,\alpha}(z) A_{j,\alpha}(-\xi) + (c_{j,\alpha}(z) \right. \\
 &\quad \left. - \exp[-\sigma_j(z-1)/\xi] a_{j,\alpha}) A_{j,\alpha}(\xi) \right] \quad (5.136)
 \end{aligned}$$

5.5 Computational Aspects and Numerical Results

Initially we would like to show how several of the basic functions introduced in Section 5.3 can be computed efficiently by recursive relations.

The functions $A_{j,\alpha}(\xi)$ defined by equation (5.77) can be shown to satisfy, for $\alpha > 0$, the recursive relation

$$\begin{aligned}
 \alpha A_{j,\alpha-1}(\xi) + (2\alpha+1)(2\xi+1)A_{j,\alpha}(\xi) + (\alpha+1)A_{j,\alpha+1}(\xi) \\
 = 2(2\alpha+1) \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \beta_{jj}(\ell) g_{j,\ell}(\xi) T_{\alpha,\ell} \quad (5.137)
 \end{aligned}$$

where for forward recursion the required initial value can be computed from

$$A_{j,0}(\xi) = \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \beta_{ji}(\ell) g_{j,\ell}(\xi) C_\ell(\xi) \quad (5.138)$$

Here the functions $C_\ell(\xi)$ can be found from

$$\ell C_{\ell-1}(\xi) + (2\ell+1)\xi C_\ell(\xi) + (\ell+1)C_{\ell+1}(\xi) = (2\ell+1)T_{0,\ell} \quad (5.139)$$

with

$$C_0(\xi) = 1 - \xi \log(1+1/\xi) \quad (5.140)$$

We recall from Sections 5.3 and 5.4 that the functions $A_{j,\alpha}(\xi)$ are required for real $\xi \in [-1,0)$. We have found that the use of equation (5.137) in the forward direction is stable only for $\xi \in (-1,0]$, and thus an alternative procedure is desired. Using the Christoffel-Darboux formula (Abramowitz and Stegun, 1964) for the Legendre polynomials, we have deduced the alternative recursion relation

$$\begin{aligned} P_{\alpha+1}(2\xi+1)A_{j,\alpha}(\xi) + P_\alpha(2\xi+1)A_{j,\alpha+1}(\xi) \\ = (-1)^\alpha \left(\frac{2}{\alpha+1} \right) \Gamma_{j,\alpha}(\xi) \end{aligned} \quad (5.141)$$

where

$$\Gamma_{j,0}(\xi) = \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \beta_{ji}(\ell) g_{j,\ell}(\xi) T_{0,\ell} \quad (5.142)$$

and, for $1 < \alpha < L+1$,

$$\begin{aligned} \Gamma_{j,\alpha}(\xi) = \Gamma_{j,\alpha-1}(\xi) \\ + (-1)^\alpha (2\alpha+1) P_\alpha(2\xi+1) \sum_{\ell=0}^L (-1)^\ell \beta_{ji}(\ell) g_{j,\ell}(\xi) T_{\alpha,\ell} \end{aligned} \quad (5.143)$$

Since $T_{\alpha, \ell} = 0$ for $\alpha > \ell+1$, we see that equation (5.143) yields

$$\Gamma_{i, \alpha}(\xi) = \Gamma_{i, L+1}(\xi) \quad , \quad \alpha > L+1 \quad . \quad (5.144)$$

We have found that backward recursion of equation (5.141) in the manner suggested by Miller (1952) is stable for real $\xi \notin [-1, 0]$. However, as discussed before (Garcia and Siewert, 1981b), such a scheme can be time-consuming for ξ close to the transition points -1 and 0 , and for this reason we have actually used forward recursion of equation (5.137) for $\xi \in [-1.001, -1) \cup [0, 0.001]$ without losing too many significant figures. For other ξ we used backward recursion of equation (5.141). The functions $B_{i, \alpha}(\xi)$ defined by equations (5.78) and required for $\xi \in P_i$ can be deduced from the recursive relation

$$\begin{aligned} -\alpha B_{i, \alpha-1}(\xi) + (2\alpha+1)(2\xi-1)B_{i, \alpha}(\xi) - (\alpha+1)B_{i, \alpha+1}(\xi) \\ = 2(2\alpha+1)c_i \sum_{\ell=0}^L B_{ij}(\ell)g_{i, \ell}(\xi)T_{\alpha, \ell} \quad , \quad (5.145) \end{aligned}$$

with

$$B_{i, 0}(\xi) = 2(1-c_i) + c_i A_{i, 0}(\xi) \quad . \quad (5.146)$$

Forward recursion of equation (5.145) can be used efficiently to generate $B_{i, \alpha}(\xi)$ for $\xi \in [0, 1]$. For $\xi = v_{i, m}$ it is not difficult to see that $B_{i, \alpha}(v_{i, m}) = -c_i A_{i, \alpha}(-v_{i, m})$, and thus the recursion relations developed for $A_{i, \alpha}(\xi)$ can be readily used to establish $B_{i, \alpha}(v_{i, m})$. We note that the strategy adopted here yielded $A_{i, \alpha}(\xi)$ and $B_{i, \alpha}(\xi)$ accurate to at least 13 significant figures for α up to 40 (working in double precision with an IBM 370/165 machine).

We now turn our attention to the constants $T_{\alpha, \ell}$ defined by equation (5.87). We note that the $T_{\alpha, \ell}$ are a special case ($m = 0$) of the more general $T_{\alpha, \ell}^m$ considered by Devaux, Siewert, and Yuan (1982) and thus we write for $\alpha > 0$ and $\ell > 0$:

$$T_{\alpha, \ell+1} = \left(\frac{2\ell+1}{2(\ell+1)} \right) \left[\left(\frac{\alpha}{2\alpha+1} \right) T_{\alpha-1, \ell} + T_{\alpha, \ell} + \left(\frac{\alpha+1}{2\alpha+1} \right) T_{\alpha+1, \ell} \right] - \left(\frac{\ell}{\ell+1} \right) T_{\alpha, \ell-1} \quad (5.147)$$

In this equation α runs from $\alpha=0$ to $\ell+2$ (note that $T_{\beta, n} = 0$ for $\beta > n+1$) for each ℓ , from $\ell=0$ to $L-1$. To initiate our calculation we use

$$T_{0,0} = \frac{1}{2} \quad (5.148)$$

and

$$T_{1,0} = \frac{1}{6} \quad (5.149)$$

Finally, the polynomials $G_{j, \alpha}(\xi)$ defined by equation (5.90) and required for $\xi \in [0, 1]$ can be computed efficiently by forward recursion from

$$\begin{aligned} \alpha G_{j, \alpha-1}(\xi) - (2\alpha+1)(2\xi-1)G_{j, \alpha}(\xi) + (\alpha+1)G_{j, \alpha+1}(\xi) \\ = 2(2\alpha+1) \sum_{\ell=0}^L \beta_{j\ell}(\xi) g_{j, \ell}(\xi) T_{\alpha, \ell} \quad (5.150) \end{aligned}$$

with

$$G_{i,0}(\xi) = 0 \quad (5.151)$$

In order to demonstrate the computational merit of our solution we now consider a 20-group albedo problem with a 10th order Legendre expansion of the scattering law. A 20-cm thick slab has an isotropically incident distribution of radiation only in the first group and only on the surface at $z = L$, i.e., for $\mu > 0$

$$L_i(\mu) = \delta_{i,1} \quad (5.152a)$$

and

$$R_i(\mu) = 0 \quad (5.152b)$$

To facilitate the data handling we use a fictitious cross-section set (in units of cm^{-1}) defined, for $i = 1, 2, \dots, 20$, by

$$\sigma_i = \left(\frac{i}{10}\right) - 0.15 \delta_{i,5} - 0.15 \delta_{i,10} \quad (5.153a)$$

and

$$\sigma_{ij}(k) = (2k+1) \left[\frac{j}{100(i-j+1)} \right] (g_{ij})^k, \quad j = 1, 2, \dots, i, \\ k = 0, 1, \dots, 10, \quad (5.153b)$$

where

$$g_{ij} = 0.7 - \left(\frac{i+j}{200}\right) \quad (5.153c)$$

The scattering law defined by equations (5.153b) and (5.153c) corresponds to a truncated ($L = 10$) Henyey-Greenstein phase function introduced in

the field of radiative transfer (Henyey and Greenstein, 1941). The Henyey-Greenstein phase function is characterized by one parameter g which is a measure of the degree of anisotropy, i.e., $g + 1$ implies forward scattering while $g - 1$ implies backward scattering. For a monoenergetic problem, g corresponds to the average cosine of the scattering angle. In our problem the values of g given by equation (5.153c) correspond to moderate forward scattering and were chosen in order to avoid negative values in the scattering law (with $L = 10$).

In solving the systems of linear algebraic equations given by equations (5.80) and (5.116) we have used, for various orders of the F_N approximation, the collocation scheme

$$\xi_{i,\beta} = \nu_{i,\beta} \quad , \quad \beta = 0, 1, 2, \dots, \kappa_j - 1 \quad , \quad (5.154a)$$

and

$$\xi_{i,\beta} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left[\frac{2\beta - 2\kappa_j + 1}{2(N+1-\kappa_j)} \pi \right] \quad , \quad \beta = \kappa_j, \kappa_j + 1, \dots, N \quad . \quad (5.154b)$$

The points given by equation (5.154b) are the zeros of the Chebyshev polynomial of the first kind $T_{N+1-\kappa_j}(2x-1)$. Based on the results of our computations which followed closely the technique discussed by Siewert (1980), we have concluded that there is only one pair of discrete eigenvalues relevant to each group of the considered problem and thus we list in Table 5.1 the positive eigenvalue for each group.

Table 5.1 The positive discrete eigenvalues $\nu_{i,0}$

i	$\nu_{i,0}$	i	$\nu_{i,0}$	i	$\nu_{i,0}$	i	$\nu_{i,0}$
1	1.014675230187	6	1.010101983620	11	1.006629121797	16	1.004095374943
2	1.013664030621	7	1.009324801731	12	1.006052161369	17	1.003687842667
3	1.012702645157	8	1.008590208601	13	1.005511523631	18	1.003310515972
4	1.011789497866	9	1.007896906406	14	1.005005991723	19	1.002962148042
5	1.024569285561	10	1.011201112487	15	1.004534348940	20	1.002641480584

We list our converged results for the exit angular fluxes in Tables 5.2 to 5.9. Further converged results for the angular fluxes at various positions inside the slab are reported in Tables 5.10 to 5.21. We note that to compute the angular fluxes accurately for all μ we used a recently proposed technique (Garcia and Siewert, 1982b). First the functions $B_{i,\alpha}(\xi)$ defined by equation (5.78) are expressed as

$$B_{i,\alpha}(\xi) = 2P_{\alpha}(2\xi-1) - c_i \{ [2-A_{i,0}(\xi)] P_{\alpha}(2\xi-1) + G_{i,\alpha}(\xi) \} \quad (5.155)$$

and this relation can be used in equations (5.73) for $\xi = \mu \in [0,1]$ to find the following alternative expressions for the emerging fluxes:

$$\begin{aligned} \psi_i(L, -\mu) = & R_i(\mu) \exp(-\Delta_i/\mu) + \frac{1}{2} c_i \{ I_i(\mu) + [2-A_{i,0}(\mu)] \sum_{\alpha=0}^N a_{i,\alpha} P_{\alpha}(2\mu-1) \\ & + \sum_{\alpha=0}^N [a_{i,\alpha} G_{i,\alpha}(\mu) - \exp(-\Delta_i/\mu) b_{i,\alpha} A_{i,\alpha}(\mu)] \} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} I_j(\mu) \quad (5.156a) \end{aligned}$$

Table 5.2 The exit angular fluxes $\psi_i(L, -\mu)$ for $i = 1$ to 5

μ	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 5$
0	5.0885(-2)	1.2999(-2)	5.8860(-3)	3.3641(-3)	3.1535(-3)
0.1	2.8195(-2)	8.6681(-3)	4.2785(-3)	2.5789(-3)	2.4685(-3)
0.2	1.8568(-2)	6.2371(-3)	3.2310(-3)	2.0122(-3)	1.9565(-3)
0.3	1.3061(-2)	4.6596(-3)	2.4996(-3)	1.5956(-3)	1.5724(-3)
0.4	9.6343(-3)	3.5983(-3)	1.9835(-3)	1.2912(-3)	1.2862(-3)
0.5	7.3536(-3)	2.8516(-3)	1.6080(-3)	1.0640(-3)	1.0690(-3)
0.6	5.7554(-3)	2.3033(-3)	1.3241(-3)	8.8871(-4)	8.9923(-4)
0.7	4.6063(-3)	1.8921(-3)	1.1055(-3)	7.5096(-4)	7.6454(-4)
0.8	3.7653(-3)	1.5814(-3)	9.3667(-4)	6.4282(-4)	6.5749(-4)
0.9	3.1192(-3)	1.3378(-3)	8.0287(-4)	5.5637(-4)	5.7091(-4)
1	2.6287(-3)	1.1453(-3)	6.9424(-4)	4.8472(-4)	4.9900(-4)

Table 5.3 The exit angular fluxes $\psi_i(L, -\mu)$ for $i = 6$ to 10

μ	$i = 6$	$i = 7$	$i = 8$	$i = 9$	$i = 10$
0	1.5457(-3)	1.1467(-3)	8.8628(-4)	7.0652(-4)	6.8284(-4)
0.1	1.2701(-3)	9.6248(-4)	7.5717(-4)	6.1275(-4)	6.0047(-4)
0.2	1.0397(-3)	7.9986(-4)	6.3758(-4)	5.2196(-4)	5.1654(-4)
0.3	8.5661(-4)	6.6715(-4)	5.3764(-4)	4.4447(-4)	4.4359(-4)
0.4	7.1511(-4)	5.6261(-4)	4.5755(-4)	3.8138(-4)	3.8335(-4)
0.5	6.0504(-4)	4.8015(-4)	3.9355(-4)	3.3036(-4)	3.3407(-4)
0.6	5.1717(-4)	4.1361(-4)	3.4138(-4)	2.8839(-4)	2.9317(-4)
0.7	4.4586(-4)	3.5904(-4)	2.9821(-4)	2.5337(-4)	2.5882(-4)
0.8	3.8823(-4)	3.1451(-4)	2.6267(-4)	2.2431(-4)	2.3009(-4)
0.9	3.4135(-4)	2.7806(-4)	2.3339(-4)	2.0022(-4)	2.0608(-4)
1	3.0128(-4)	2.4661(-4)	2.0793(-4)	1.7914(-4)	1.8504(-4)

Table 5.4 The exit angular fluxes $\psi_i(L, -\mu)$ for $i = 11$ to 15

μ	$i = 11$	$i = 12$	$i = 13$	$i = 14$	$i = 15$
0	4.8231(-4)	4.0797(-4)	3.4993(-4)	3.0368(-4)	2.6619(-4)
0.1	4.2927(-4)	3.6660(-4)	3.1721(-4)	2.7747(-4)	2.4499(-4)
0.2	3.7343(-4)	3.2144(-4)	2.8019(-4)	2.4677(-4)	2.1926(-4)
0.3	3.2384(-4)	2.8070(-4)	2.4627(-4)	2.1823(-4)	1.9501(-4)
0.4	2.8225(-4)	2.4611(-4)	2.1715(-4)	1.9345(-4)	1.7374(-4)
0.5	2.4783(-4)	2.1722(-4)	1.9262(-4)	1.7240(-4)	1.5552(-4)
0.6	2.1900(-4)	1.9286(-4)	1.7179(-4)	1.5442(-4)	1.3987(-4)
0.7	1.9457(-4)	1.7210(-4)	1.5394(-4)	1.3892(-4)	1.2630(-4)
0.8	1.7397(-4)	1.5448(-4)	1.3870(-4)	1.2563(-4)	1.1461(-4)
0.9	1.5668(-4)	1.3962(-4)	1.2578(-4)	1.1429(-4)	1.0459(-4)
1	1.4137(-4)	1.2641(-4)	1.1426(-4)	1.0416(-4)	9.5611(-5)

Table 5.5 The exit angular fluxes $\psi_i(L, -\mu)$ for $i = 16$ to 20

μ	$i = 16$	$i = 17$	$i = 18$	$i = 19$	$i = 20$
0	2.3537(-4)	2.0970(-4)	1.8810(-4)	1.6974(-4)	1.5400(-4)
0.1	2.1806(-4)	1.9547(-4)	1.7632(-4)	1.5994(-4)	1.4582(-4)
0.2	1.9631(-4)	1.7694(-4)	1.6043(-4)	1.4623(-4)	1.3393(-4)
0.3	1.7554(-4)	1.5902(-4)	1.4487(-4)	1.3264(-4)	1.2199(-4)
0.4	1.5714(-4)	1.4299(-4)	1.3082(-4)	1.2026(-4)	1.1103(-4)
0.5	1.4125(-4)	1.2905(-4)	1.1851(-4)	1.0934(-4)	1.0129(-4)
0.6	1.2752(-4)	1.1692(-4)	1.0775(-4)	9.9742(-5)	9.2697(-5)
0.7	1.1557(-4)	1.0633(-4)	9.8307(-5)	9.1283(-5)	8.5089(-5)
0.8	1.0521(-4)	9.7107(-5)	9.0051(-5)	8.3859(-5)	7.8385(-5)
0.9	9.6301(-5)	8.9134(-5)	8.2882(-5)	7.7384(-5)	7.2514(-5)
1	8.8290(-5)	8.1949(-5)	7.6408(-5)	7.1525(-5)	6.7193(-5)

Table 5.6 The exit angular fluxes $\psi_i(R, \mu)$ for $i = 1$ to 5

μ	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 5$
0	1.1146(-3)	3.4317(-4)	1.7392(-4)	1.0772(-4)	1.1525(-4)
0.1	1.5864(-3)	4.5301(-4)	2.2419(-4)	1.3714(-4)	1.4787(-4)
0.2	2.4017(-3)	5.9970(-4)	2.8704(-4)	1.7251(-4)	1.8566(-4)
0.3	4.9489(-3)	8.0657(-4)	3.7054(-4)	2.1806(-4)	2.3364(-4)
0.4	1.2386(-2)	1.0994(-3)	4.8210(-4)	2.7724(-4)	2.9545(-4)
0.5	2.6436(-2)	1.5012(-3)	6.2888(-4)	3.5321(-4)	3.7446(-4)
0.6	4.6527(-2)	2.0197(-3)	8.1612(-4)	4.4840(-4)	4.7327(-4)
0.7	7.1061(-2)	2.6424(-3)	1.0452(-3)	5.6385(-4)	5.9301(-4)
0.8	9.8380(-2)	3.3420(-3)	1.3129(-3)	6.9894(-4)	7.3295(-4)
0.9	1.2713(-1)	4.0868(-3)	1.6124(-3)	8.5165(-4)	8.9074(-4)
1	1.5630(-1)	4.8463(-3)	1.9351(-3)	1.0191(-3)	1.0630(-3)

Table 5.7 The exit angular fluxes $\psi_i(R, \mu)$ for $i = 6$ to 10

μ	$i = 6$	$i = 7$	$i = 8$	$i = 9$	$i = 10$
0	5.8073(-5)	4.4676(-5)	3.5756(-5)	2.9444(-5)	2.9886(-5)
0.1	7.2858(-5)	5.5763(-5)	4.4432(-5)	3.6442(-5)	3.7031(-5)
0.2	8.9704(-5)	6.8195(-5)	5.4026(-5)	4.4088(-5)	4.4666(-5)
0.3	1.1050(-4)	8.3362(-5)	6.5611(-5)	5.3236(-5)	5.3710(-5)
0.4	1.3656(-4)	1.0217(-4)	7.9848(-5)	6.4390(-5)	6.4659(-5)
0.5	1.6903(-4)	1.2541(-4)	9.7307(-5)	7.7979(-5)	7.7929(-5)
0.6	2.0877(-4)	1.5366(-4)	1.1842(-4)	9.4325(-5)	9.3832(-5)
0.7	2.5621(-4)	1.8722(-4)	1.4338(-4)	1.1359(-4)	1.1253(-4)
0.8	3.1124(-4)	2.2603(-4)	1.7218(-4)	1.3576(-4)	1.3403(-4)
0.9	3.7331(-4)	2.6973(-4)	2.0456(-4)	1.6065(-4)	1.5817(-4)
1	4.4168(-4)	3.1785(-4)	2.4019(-4)	1.8803(-4)	1.8473(-4)

Table 5.8 The exit angular fluxes $\psi_i(R, \mu)$ for $i = 11$ to 15

μ	$i = 11$	$i = 12$	$i = 13$	$i = 14$	$i = 15$
0	2.1534(-5)	1.8639(-5)	1.6352(-5)	1.4499(-5)	1.2971(-5)
0.1	2.6462(-5)	2.2831(-5)	1.9968(-5)	1.7653(-5)	1.5748(-5)
0.2	3.1729(-5)	2.7274(-5)	2.3770(-5)	2.0946(-5)	1.8627(-5)
0.3	3.7922(-5)	3.2465(-5)	2.8187(-5)	2.4748(-5)	2.1934(-5)
0.4	4.5360(-5)	3.8664(-5)	3.3432(-5)	2.9242(-5)	2.5823(-5)
0.5	5.4309(-5)	4.6087(-5)	3.9685(-5)	3.4574(-5)	3.0419(-5)
0.6	6.4972(-5)	5.4898(-5)	4.7079(-5)	4.0858(-5)	3.5817(-5)
0.7	7.7453(-5)	6.5183(-5)	5.5688(-5)	4.8158(-5)	4.2073(-5)
0.8	9.1751(-5)	7.6946(-5)	6.5518(-5)	5.6478(-5)	4.9192(-5)
0.9	1.0777(-4)	9.0113(-5)	7.6512(-5)	6.5776(-5)	5.7142(-5)
1	1.2538(-4)	1.0458(-4)	8.8584(-5)	7.5982(-5)	6.5865(-5)

Table 5.9 The exit angular fluxes $\psi_i(R, \mu)$ for $i = 16$ to 20

μ	$i = 16$	$i = 17$	$i = 18$	$i = 19$	$i = 20$
0	1.1692(-5)	1.0610(-5)	9.6829(-6)	8.8825(-6)	8.1854(-6)
0.1	1.4157(-5)	1.2812(-5)	1.1662(-5)	1.0671(-5)	9.8099(-6)
0.2	1.6695(-5)	1.5066(-5)	1.3677(-5)	1.2482(-5)	1.1446(-5)
0.3	1.9596(-5)	1.7630(-5)	1.5958(-5)	1.4523(-5)	1.3282(-5)
0.4	2.2992(-5)	2.0618(-5)	1.8605(-5)	1.6882(-5)	1.5395(-5)
0.5	2.6989(-5)	2.4122(-5)	2.1698(-5)	1.9629(-5)	1.7847(-5)
0.6	3.1670(-5)	2.8212(-5)	2.5298(-5)	2.2817(-5)	2.0686(-5)
0.7	3.7080(-5)	3.2930(-5)	2.9441(-5)	2.6477(-5)	2.3939(-5)
0.8	4.3229(-5)	3.8284(-5)	3.4135(-5)	3.0620(-5)	2.7615(-5)
0.9	5.0089(-5)	4.4252(-5)	3.9365(-5)	3.5232(-5)	3.1704(-5)
1	5.7615(-5)	5.0797(-5)	4.5098(-5)	4.0285(-5)	3.6183(-5)

Table 5.10 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/4$ and $i = 1$ to 5

μ	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 5$
-1	1.0471(-3)	4.7532(-4)	2.9442(-4)	2.0836(-4)	2.2548(-4)
-0.8	1.4632(-3)	6.3596(-4)	3.8406(-4)	2.6721(-4)	2.8916(-4)
-0.6	2.1471(-3)	8.8218(-4)	5.1690(-4)	3.5252(-4)	3.8060(-4)
-0.4	3.3761(-3)	1.2884(-3)	7.2703(-4)	4.8356(-4)	5.1900(-4)
-0.2	5.7980(-3)	1.9994(-3)	1.0739(-3)	6.9193(-4)	7.3619(-4)
0	1.1621(-2)	3.3843(-3)	1.6919(-3)	1.0444(-3)	1.0971(-3)
0.2	1.0604(-1)	6.1309(-3)	2.7893(-3)	1.6302(-3)	1.6888(-3)
0.4	3.1493(-1)	8.9005(-3)	4.1886(-3)	2.4158(-3)	2.4442(-3)
0.6	4.6327(-1)	1.0270(-2)	5.2044(-3)	3.1081(-3)	3.0428(-3)
0.8	5.6269(-1)	1.0647(-2)	6.7110(-3)	3.5443(-3)	3.3742(-3)
1	6.3224(-1)	1.0504(-2)	5.8661(-3)	3.7561(-3)	3.4995(-3)

Table 5.11 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/4$ and $i = 6$ to 10

μ	$i = 6$	$i = 7$	$i = 8$	$i = 9$	$i = 10$
-1	1.3465(-4)	1.1058(-4)	9.3621(-5)	8.1008(-5)	8.4882(-5)
-0.8	1.6854(-4)	1.3719(-4)	1.1526(-4)	9.9037(-5)	1.0339(-4)
-0.6	2.1598(-4)	1.7403(-4)	1.4490(-4)	1.2351(-4)	1.2833(-4)
-0.4	2.8558(-4)	2.2731(-4)	1.8724(-4)	1.5808(-4)	1.6323(-4)
-0.2	3.9049(-4)	3.0636(-4)	2.4921(-4)	2.0807(-4)	2.1325(-4)
0	5.5598(-4)	4.2861(-4)	3.4339(-4)	2.8291(-4)	2.8730(-4)
0.2	8.1014(-4)	6.1246(-4)	4.8257(-4)	3.9185(-4)	3.9406(-4)
0.4	1.1457(-3)	8.5297(-4)	6.6300(-4)	5.3192(-4)	5.3084(-4)
0.6	1.4886(-3)	1.1061(-3)	8.5588(-4)	6.8292(-4)	6.7815(-4)
0.8	1.7593(-3)	1.3194(-3)	1.0257(-3)	8.1998(-4)	8.1111(-4)
1	1.9369(-3)	1.4720(-3)	1.1550(-3)	9.2922(-4)	9.1575(-4)

Table 5.12 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/4$ and $i = 11$ to 15

μ	$i = 11$	$i = 12$	$i = 13$	$i = 14$	$i = 15$
-1	6.4895(-5)	5.8213(-5)	5.2815(-5)	4.8333(-5)	4.4547(-5)
-0.8	7.8313(-5)	6.9873(-5)	6.3073(-5)	5.7443(-5)	5.2700(-5)
-0.6	9.6221(-5)	8.5334(-5)	7.6589(-5)	6.9376(-5)	6.3321(-5)
-0.4	1.2098(-4)	1.0654(-4)	9.4989(-5)	8.5506(-5)	7.7585(-5)
-0.2	1.5600(-4)	1.3629(-4)	1.2060(-4)	1.0779(-4)	9.7152(-5)
0	2.0702(-4)	1.7916(-4)	1.5715(-4)	1.3931(-4)	1.2459(-4)
0.2	2.7932(-4)	2.3930(-4)	2.0792(-4)	1.8270(-4)	1.6205(-4)
0.4	3.7090(-4)	3.1505(-4)	2.7154(-4)	2.3679(-4)	2.0854(-4)
0.6	4.7031(-4)	3.9743(-4)	3.4080(-4)	2.9574(-4)	2.5922(-4)
0.8	5.6385(-4)	4.7583(-4)	4.0729(-4)	3.5271(-4)	3.0848(-4)
1	6.4306(-4)	5.4362(-4)	4.6572(-4)	4.0342(-4)	3.5278(-4)

Table 5.13 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/4$ and $i = 16$ to 20

μ	$i = 16$	$i = 17$	$i = 18$	$i = 19$	$i = 20$
-1	4.1304(-5)	3.8496(-5)	3.6043(-5)	3.3881(-5)	3.1962(-5)
-0.8	4.8650(-5)	4.5153(-5)	4.2105(-5)	3.9427(-5)	3.7055(-5)
-0.6	5.8170(-5)	5.3738(-5)	4.9888(-5)	4.6514(-5)	4.3537(-5)
-0.4	7.0875(-5)	6.5128(-5)	6.0156(-5)	5.5817(-5)	5.2003(-5)
-0.2	8.8191(-5)	8.0555(-5)	7.3982(-5)	6.8274(-5)	6.3278(-5)
0	1.1228(-4)	1.0185(-4)	9.2930(-5)	8.5228(-5)	7.8524(-5)
0.2	1.4491(-4)	1.3049(-4)	1.1823(-4)	1.0772(-4)	9.8623(-5)
0.4	1.8522(-4)	1.6572(-4)	1.4924(-4)	1.3518(-4)	1.2307(-4)
0.6	2.2918(-4)	2.0416(-4)	1.8308(-4)	1.6515(-4)	1.4977(-4)
0.8	2.7212(-4)	2.4185(-4)	2.1638(-4)	1.9474(-4)	1.7619(-4)
1	3.1106(-4)	2.7628(-4)	2.4699(-4)	2.2208(-4)	2.0073(-4)

Table 5.14 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/2$ and $i = 1$ to 5

μ	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 5$
-1	4.6637(-4)	2.2300(-4)	1.4098(-4)	1.0055(-4)	1.0980(-4)
-0.8	6.5719(-4)	3.0006(-4)	1.8405(-4)	1.2860(-4)	1.4081(-4)
-0.6	9.7087(-4)	4.1608(-4)	2.4616(-4)	1.6813(-4)	1.8419(-4)
-0.4	1.5206(-3)	5.9792(-4)	3.3951(-4)	2.2623(-4)	2.4721(-4)
-0.2	2.5630(-3)	9.0213(-4)	4.8879(-4)	3.1638(-4)	3.4365(-4)
0	4.7967(-3)	1.4586(-3)	7.4368(-4)	4.6406(-4)	4.9928(-4)
0.2	1.7611(-2)	2.5687(-3)	1.2010(-3)	7.1509(-4)	7.5999(-4)
0.4	1.0153(-1)	4.5595(-3)	1.9722(-3)	1.1178(-3)	1.1749(-3)
0.6	2.1428(-1)	6.8622(-3)	2.9949(-3)	1.6625(-3)	1.7253(-3)
0.8	3.1513(-1)	8.7448(-3)	4.0077(-3)	2.2513(-3)	2.2971(-3)
1	3.9787(-1)	1.0026(-2)	4.8357(-3)	2.7862(-3)	2.7919(-3)

Table 5.15 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/2$ and $i = 6$ to 10

μ	$i = 6$	$i = 7$	$i = 8$	$i = 9$	$i = 10$
-1	6.5688(-5)	5.3896(-5)	4.5600(-5)	3.9433(-5)	4.1400(-5)
-0.8	8.1781(-5)	6.6465(-5)	5.5781(-5)	4.7897(-5)	5.0105(-5)
-0.6	1.0381(-4)	8.3510(-5)	6.9474(-5)	5.9192(-5)	6.1650(-5)
-0.4	1.3507(-4)	1.0743(-4)	8.8500(-5)	7.4746(-5)	7.7431(-5)
-0.2	1.8139(-4)	1.4239(-4)	1.1596(-4)	9.6954(-5)	9.9770(-5)
0	2.5304(-4)	1.9558(-4)	1.5716(-4)	1.2986(-4)	1.3254(-4)
0.2	3.6685(-4)	2.7848(-4)	2.2033(-4)	1.7961(-4)	1.8155(-4)
0.4	5.3863(-4)	4.0154(-4)	3.1281(-4)	2.5157(-4)	2.5190(-4)
0.6	7.6632(-4)	5.6338(-4)	4.3358(-4)	3.4496(-4)	3.4299(-4)
0.8	1.0242(-3)	7.4781(-4)	5.7151(-4)	4.5170(-4)	4.4733(-4)
1	1.2807(-3)	9.3504(-4)	7.1320(-4)	5.6215(-4)	5.5567(-4)

Table 5.16 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/2$ and $i = 11$ to 15

μ	$i = 11$	$i = 12$	$i = 13$	$i = 14$	$i = 15$
-1	3.1587(-5)	2.8323(-5)	2.5691(-5)	2.3508(-5)	2.1664(-5)
-0.8	3.7875(-5)	3.3784(-5)	3.0493(-5)	2.7771(-5)	2.5480(-5)
-0.6	4.6145(-5)	4.0923(-5)	3.6736(-5)	3.3286(-5)	3.0392(-5)
-0.4	5.7338(-5)	5.0525(-5)	4.5082(-5)	4.0615(-5)	3.6885(-5)
-0.2	7.3005(-5)	6.3863(-5)	5.6592(-5)	5.0657(-5)	4.5725(-5)
0	9.5688(-5)	8.3007(-5)	7.2978(-5)	6.4843(-5)	5.8122(-5)
0.2	1.2911(-4)	1.1094(-4)	9.6668(-5)	8.5174(-5)	7.5748(-5)
0.4	1.7643(-4)	1.5016(-4)	1.2967(-4)	1.1329(-4)	9.9953(-5)
0.6	2.3717(-4)	2.0027(-4)	1.7167(-4)	1.4894(-4)	1.3053(-4)
0.8	3.0662(-4)	2.5757(-4)	2.1968(-4)	1.8968(-4)	1.6548(-4)
1	3.7912(-4)	3.1754(-4)	2.7005(-4)	2.3251(-4)	2.0228(-4)

Table 5.17 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + \Delta/2$ and $i = 16$ to 20

μ	$i = 16$	$i = 17$	$i = 18$	$i = 19$	$i = 20$
-1	2.0087(-5)	1.8722(-5)	1.7530(-5)	1.6480(-5)	1.5549(-5)
-0.8	2.3525(-5)	2.1839(-5)	2.0369(-5)	1.9079(-5)	1.7937(-5)
-0.6	2.7931(-5)	2.5815(-5)	2.3977(-5)	2.2368(-5)	2.0947(-5)
-0.4	3.3725(-5)	3.1018(-5)	2.8677(-5)	2.6633(-5)	2.4835(-5)
-0.2	4.1568(-5)	3.8023(-5)	3.4969(-5)	3.2315(-5)	2.9990(-5)
0	5.2492(-5)	4.7716(-5)	4.3624(-5)	4.0085(-5)	3.7000(-5)
0.2	6.7903(-5)	6.1293(-5)	5.5663(-5)	5.0823(-5)	4.6628(-5)
0.4	8.8931(-5)	7.9705(-5)	7.1895(-5)	6.5220(-5)	5.9467(-5)
0.6	1.1541(-4)	1.0281(-4)	9.2203(-5)	8.3179(-5)	7.5437(-5)
0.8	1.4566(-4)	1.2921(-4)	1.1540(-4)	1.0369(-4)	9.3668(-5)
1	1.7757(-4)	1.5710(-4)	1.3994(-4)	1.2542(-4)	1.1302(-4)

Table 5.18 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + 3\Delta/4$ and $i = 1$ to 5

μ	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 5$
-1	1.7860(-4)	9.3645(-5)	6.2715(-5)	4.6495(-5)	4.9553(-5)
-0.8	2.5809(-4)	1.3050(-4)	8.4778(-5)	6.1291(-5)	6.5936(-5)
-0.6	3.9570(-4)	1.8906(-4)	1.1763(-4)	8.2318(-5)	8.9400(-5)
-0.4	6.5510(-4)	2.8481(-4)	1.6683(-4)	1.1233(-4)	1.2293(-4)
-0.2	1.1985(-3)	4.4257(-4)	2.4142(-4)	1.5663(-4)	1.7143(-4)
0	2.2618(-3)	7.0354(-4)	3.6161(-4)	2.2667(-4)	2.4631(-4)
0.2	5.4530(-3)	1.2061(-3)	5.7458(-4)	3.4520(-4)	3.7093(-4)
0.4	3.4292(-2)	2.2024(-3)	9.5455(-4)	5.4592(-4)	5.7968(-4)
0.6	9.9505(-2)	3.7912(-3)	1.5582(-3)	8.5481(-4)	8.9957(-4)
0.8	1.7614(-1)	5.6253(-3)	2.3367(-3)	1.2609(-3)	1.3159(-3)
1	2.4965(-1)	7.3271(-3)	3.1650(-3)	1.7184(-3)	1.7754(-3)

Table 5.19 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + 3\Delta/4$ and $i = 6$ to 10

μ	$i = 6$	$i = 7$	$i = 8$	$i = 9$	$i = 10$
-1	3.1722(-5)	2.6391(-5)	2.2549(-5)	1.9639(-5)	2.0604(-5)
-0.8	4.0308(-5)	3.3052(-5)	2.7903(-5)	2.4057(-5)	2.5181(-5)
-0.6	5.1863(-5)	4.1893(-5)	3.4944(-5)	2.9829(-5)	3.1112(-5)
-0.4	6.7677(-5)	5.3904(-5)	4.4458(-5)	3.7591(-5)	3.9017(-5)
-0.2	9.0429(-5)	7.1062(-5)	5.7945(-5)	4.8510(-5)	5.0033(-5)
0	1.2494(-4)	9.6756(-5)	7.7905(-5)	6.4499(-5)	6.6013(-5)
0.2	1.7989(-4)	1.3697(-4)	1.0869(-4)	8.8846(-5)	9.0085(-5)
0.4	2.6734(-4)	1.9988(-4)	1.5615(-4)	1.2590(-4)	1.2636(-4)
0.6	3.9606(-4)	2.9133(-4)	2.2441(-4)	1.7871(-4)	1.7778(-4)
0.8	5.6355(-4)	4.0973(-4)	3.1239(-4)	2.4652(-4)	2.4372(-4)
1	7.5725(-4)	5.4699(-4)	4.1448(-4)	3.2522(-4)	3.2042(-4)

Table 5.20 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + 3\Delta/4$ and $i = 11$ to 15

μ	$i = 11$	$i = 12$	$i = 13$	$i = 14$	$i = 15$
-1	1.5874(-5)	1.4278(-5)	1.2982(-5)	1.1902(-5)	1.0986(-5)
-0.8	1.9123(-5)	1.7087(-5)	1.5444(-5)	1.4082(-5)	1.2934(-5)
-0.6	2.3322(-5)	2.0704(-5)	1.8603(-5)	1.6870(-5)	1.5416(-5)
-0.4	2.8907(-5)	2.5495(-5)	2.2768(-5)	2.0530(-5)	1.8660(-5)
-0.2	3.6635(-5)	3.2082(-5)	2.8460(-5)	2.5502(-5)	2.3043(-5)
0	4.7726(-5)	4.1465(-5)	3.6510(-5)	3.2488(-5)	2.9161(-5)
0.2	6.4217(-5)	5.5291(-5)	4.8272(-5)	4.2612(-5)	3.7962(-5)
0.4	8.8735(-5)	7.5661(-5)	6.5454(-5)	5.7283(-5)	5.0621(-5)
0.6	1.2312(-4)	1.0405(-4)	8.9251(-5)	7.7488(-5)	6.7959(-5)
0.8	1.6695(-4)	1.4013(-4)	1.1943(-4)	1.0304(-4)	8.9839(-5)
1	2.1784(-4)	1.8202(-4)	1.5445(-4)	1.3271(-4)	1.1524(-4)

Table 5.21 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = L + 3\Delta/4$ and $i = 16$ to 20

μ	$i = 16$	$i = 17$	$i = 18$	$i = 19$	$i = 20$
-1	1.0199(-5)	9.5172(-6)	8.9201(-6)	8.3934(-6)	7.9254(-6)
-0.8	1.1952(-5)	1.1105(-5)	1.0365(-5)	9.7154(-6)	9.1398(-6)
-0.6	1.4178(-5)	1.3113(-5)	1.2188(-5)	1.1377(-5)	1.0662(-5)
-0.4	1.7075(-5)	1.5717(-5)	1.4542(-5)	1.3515(-5)	1.2612(-5)
-0.2	2.0969(-5)	1.9199(-5)	1.7674(-5)	1.6347(-5)	1.5184(-5)
0	2.6371(-5)	2.4003(-5)	2.1971(-5)	2.0213(-5)	1.8678(-5)
0.2	3.4087(-5)	3.0817(-5)	2.8029(-5)	2.5628(-5)	2.3544(-5)
0.4	4.5106(-5)	4.0483(-5)	3.6565(-5)	3.3212(-5)	3.0318(-5)
0.6	6.0122(-5)	5.3591(-5)	4.8087(-5)	4.3403(-5)	3.9382(-5)
0.8	7.9028(-5)	7.0060(-5)	6.2534(-5)	5.6156(-5)	5.0702(-5)
1	1.0098(-4)	8.9177(-5)	7.9305(-5)	7.0960(-5)	6.3842(-5)

and

$$\begin{aligned} \psi_i(R, \mu) = & L_i(\mu) \exp(-\Delta_i/\mu) + \frac{1}{2} c_i \{ J_i(\mu) + [2-A_{i,0}(\mu)] \sum_{\alpha=0}^N b_{i,\alpha} P_\alpha(2\mu-1) \\ & + \sum_{\alpha=0}^N [b_{i,\alpha} G_{i,\alpha}(\mu) - \exp(-\Delta_i/\mu) a_{i,\alpha} A_{i,\alpha}(\mu)] \} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} J_{ij}(\mu) . \quad (5.156b) \end{aligned}$$

In a similar way we find for the interior fluxes:

$$\begin{aligned} \psi_i(z, -\mu) = & R_i(\mu) \exp[-\sigma_i(R-z)/\mu] + \frac{1}{2} c_i \{ I_i(z, \mu) \\ & + [2-A_{i,0}(\mu)] \sum_{\alpha=0}^N c_{i,\alpha}(z) P_\alpha(2\mu-1) + \sum_{\alpha=0}^N [c_{i,\alpha}(z) G_{i,\alpha}(\mu) \\ & + \{ d_{i,\alpha}(z) - \exp[-\sigma_i(R-z)/\mu] b_{i,\alpha} \} A_{i,\alpha}(\mu)] \} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} I_{ij}(z, \mu) \quad (5.157a) \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} \psi_i(z, \mu) = & L_i(\mu) \exp[-\sigma_i(z-L)/\mu] + \frac{1}{2} c_i \{ J_i(z, \mu) \\ & + [2-A_{i,0}(\mu)] \sum_{\alpha=0}^N d_{i,\alpha}(z) P_\alpha(2\mu-1) + \sum_{\alpha=0}^N [d_{i,\alpha}(z) G_{i,\alpha}(\mu) \\ & + \{ c_{i,\alpha}(z) - \exp[-\sigma_i(z-L)/\mu] a_{i,\alpha} \} A_{i,\alpha}(\mu)] \} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij} J_{ij}(z, \mu) . \quad (5.157b) \end{aligned}$$

We have found that these expressions are significant improvements, especially as $\mu \rightarrow 0$, over the usual (and simpler) expressions given by equations (5.72) and (5.112).

In addition, we report in Table 5.22 converged results for the group fluxes

$$\phi_i(z) = \int_{-1}^1 \psi_i(z, \mu) d\mu \quad (5.158)$$

which, for $z = L$ and $z = R$, can be expressed by using equations (5.72) and (5.152) as

$$\phi_i(L) = \delta_{i,1} + a_{i,0} \quad (5.159a)$$

and

$$\phi_i(R) = \delta_{i,1} E_2(\Delta_i) + b_{i,0} \quad (5.159b)$$

where, in general, $E_n(x)$ denotes exponential integral functions. For $z \in (L, R)$ we use equations (5.112) and (5.152) in (5.158) to obtain

$$\phi_i(z) = \delta_{i,1} E_2[\sigma_i(z-L)] + c_{i,0}(z) + d_{i,0}(z) \quad (5.159c)$$

In Table 5.23 we show our converged results for the group albedos

$$A_i^* = 2 \int_0^1 \mu \psi_i(L, -\mu) d\mu \quad (5.160a)$$

and the group transmission factors

$$B_i^* = 2 \int_0^1 \mu \psi_i(R, \mu) d\mu \quad (5.160b)$$

Table 5.22 The group fluxes $\phi_i(z)$

i	$z = L$	$z = L+\Delta/4$	$z = L+\Delta/2$	$z = L+3\Delta/4$	$z = R$
1	1.0117	3.5594(-1)	1.7050(-1)	8.7855(-2)	4.6716(-2)
2	3.9657(-3)	9.9306(-3)	6.2916(-3)	3.6317(-3)	1.9091(-3)
3	2.0883(-3)	5.0739(-3)	2.9221(-3)	1.5888(-3)	7.8103(-4)
4	1.3228(-3)	3.1027(-3)	1.6910(-3)	8.9818(-4)	4.2724(-4)
5	1.3007(-3)	3.0869(-3)	1.7578(-3)	9.4748(-4)	4.5042(-4)
6	7.0807(-4)	1.5694(-3)	8.2100(-4)	4.3208(-4)	1.9734(-4)
7	5.5208(-4)	1.1895(-3)	6.1336(-4)	3.2196(-4)	1.4496(-4)
8	4.4579(-4)	9.3681(-4)	4.7874(-4)	2.5096(-4)	1.1154(-4)
9	3.6946(-4)	7.5937(-4)	3.8576(-4)	2.0207(-4)	8.8744(-5)
10	3.6961(-4)	7.6078(-4)	3.8710(-4)	2.0269(-4)	8.8221(-5)
11	2.7104(-4)	5.3840(-4)	2.7184(-4)	1.4228(-4)	6.1011(-5)
12	2.3568(-4)	4.6029(-4)	2.3188(-4)	1.2133(-4)	5.1520(-5)
13	2.0748(-4)	3.9910(-4)	2.0072(-4)	1.0500(-4)	4.4159(-5)
14	1.8450(-4)	3.5000(-4)	1.7580(-4)	9.1954(-5)	3.8308(-5)
15	1.6545(-4)	3.0989(-4)	1.5550(-4)	8.1325(-5)	3.3569(-5)
16	1.4946(-4)	2.7666(-4)	1.3871(-4)	7.2537(-5)	2.9673(-5)
17	1.3588(-4)	2.4877(-4)	1.2465(-4)	6.5175(-5)	2.6427(-5)
18	1.2423(-4)	2.2511(-4)	1.1273(-4)	5.8941(-5)	2.3692(-5)
19	1.1415(-4)	2.0486(-4)	1.0254(-4)	5.3609(-5)	2.1365(-5)
20	1.0536(-4)	1.8737(-4)	9.3748(-5)	4.9008(-5)	1.9367(-5)

Table 5.23 A_i^* and B_i^* for the 20-group problem

i	Present Work		DTF69	
	A_i^*	B_i^*	A_i^*	B_i^*
1	6.4394(-3)	7.3100(-2)	6.4399(-3)	7.2983(-2)
2	2.4468(-3)	2.6667(-3)	2.4467(-3)	2.6646(-3)
3	1.3718(-3)	1.0693(-3)	1.3719(-3)	1.0678(-3)
4	9.0655(-4)	5.7560(-4)	9.0668(-4)	5.7472(-4)
5	9.1002(-4)	6.0465(-4)	9.1011(-4)	6.0380(-4)
6	5.1696(-4)	2.5976(-4)	5.1708(-4)	2.5935(-4)
7	4.1123(-4)	1.8942(-4)	4.1134(-4)	1.8912(-4)
8	3.3795(-4)	1.4482(-4)	3.3805(-4)	1.4458(-4)
9	2.8449(-4)	1.1456(-4)	2.8459(-4)	1.1437(-4)
10	2.8836(-4)	1.1340(-4)	2.8844(-4)	1.1321(-4)
11	2.1483(-4)	7.7912(-5)	2.1492(-4)	7.7785(-4)
12	1.8886(-4)	6.5506(-5)	1.8894(-4)	6.5399(-5)
13	1.6797(-4)	5.5914(-5)	1.6805(-4)	5.5822(-5)
14	1.5080(-4)	4.8312(-5)	1.5088(-4)	4.8233(-5)
15	1.3645(-4)	4.2175(-5)	1.3652(-4)	4.2106(-5)
16	1.2430(-4)	3.7144(-5)	1.2437(-4)	3.7082(-5)
17	1.1390(-4)	3.2964(-5)	1.1397(-4)	3.2909(-5)
18	1.0491(-4)	2.9452(-5)	1.0497(-4)	2.9402(-5)
19	9.7071(-5)	2.6472(-5)	9.7135(-5)	2.6427(-5)
20	9.0188(-5)	2.3920(-5)	9.0250(-5)	2.3879(-5)

If we use equations (5.72) and (5.152) in (5.160), we find

$$A_i^* = a_{i,0} + \frac{1}{3} a_{i,1} \quad (5.161a)$$

and

$$B_i^* = 2\delta_{i,1}E_3(\Delta_1) + b_{i,0} + \frac{1}{3} b_{i,1} \quad (5.161b)$$

All our numerical results are accurate to within ± 1 in the last digit shown. In Table 5.23 we show also the results of a calculation by Renken (1981) who used the code DTF69 (Renken and Adams, 1969), with 40 space points and eight directions for each half-range of μ . We observe here, as in the isotropic scattering case, what we believe to be a slight deterioration in the DTF69 results for increasing absorption (as the group number increases).

Regarding the convergence of our method, we have found that to establish $\psi_j(L, -\mu)$ and $\psi_j(R, \mu)$ accurate to five significant figures for all μ required in this case $N = 20$; for the interior angular fluxes and the integrated quantities $\phi_j(z)$, A_j^* , and B_j^* we have found that $N = 15$ was sufficient to obtain five figures of accuracy.

Finally, we would like to mention that we have also generated numerical results for the 19-group problem considered in Chapter 4, but generalized to include anisotropic scattering effects of the Klein-Nishina differential scattering cross section. A set of P_5 multigroup transfer cross sections was provided by Renken (1981). However due to the truncation of the Legendre expansion of the cross

section the resulting multigroup transfer cross sections turned out to be negative for some values of the scattering angle. Thus, the familiar and challenging question of how to deal with the solution of a strictly non-physical problem was encountered (Brockmann, 1981). From a mathematical point of view, a transport equation based on cross sections that can be negative is a perfectly valid candidate for study and clearly can yield a solution that can be negative. One can (as we did) solve such a problem and accept, at least on a mathematical basis, the solution--be it positive or otherwise. We note that in comparing our results in Table 5.24 for the considered problem with P_5 scattering with those obtained by Renken (1981) with and without the use of the negative flux fix-up option in the DTF69 code we found excellent agreement with Renken's results only when he did not use the negative flux fix-up option. A separate question is what is the relationship of the solution obtained in this way to the physically correct solution that satisfies the transport equation for which the Klein-Nishina cross section has not been truncated.

Table 5.24 A_i^* and B_i^* for the 19-group problem with P_5 scattering

i	Present Work		DTF69 ^a		DTF69 ^b	
	A_i^*	B_i^*	A_i^*	B_i^*	A_i^*	B_i^*
1	1.5570(-4)	3.0755(-3)	1.5608(-4)	3.0718(-3)	6.1672(-4)	3.0717(-3)
2	1.3607(-3)	1.7104(-3)	1.3612(-3)	1.7092(-3)	1.5699(-3)	1.7088(-3)
3	2.2129(-3)	1.3852(-3)	2.2131(-3)	1.3844(-3)	2.4448(-3)	1.3838(-3)
4	3.5136(-3)	1.4811(-3)	3.5137(-3)	1.4802(-3)	3.7808(-3)	1.4795(-3)
5	5.2552(-3)	1.5822(-3)	5.2552(-3)	1.5814(-3)	5.3582(-3)	1.5804(-3)
6	7.8082(-3)	1.6861(-3)	7.8081(-3)	1.6852(-3)	7.8424(-3)	1.6841(-3)
7	7.3321(-3)	1.1797(-3)	7.3320(-3)	1.1791(-3)	7.3781(-3)	1.1782(-3)
8	1.0003(-2)	1.2220(-3)	1.0003(-2)	1.2214(-3)	9.9918(-3)	1.2205(-3)
9	1.4220(-2)	1.2593(-3)	1.4220(-2)	1.2587(-3)	1.4190(-2)	1.2576(-3)
10	2.1450(-2)	1.2876(-3)	2.1450(-2)	1.2870(-3)	2.1408(-2)	1.2859(-3)
11	3.5287(-2)	1.2995(-3)	3.5286(-2)	1.2989(-3)	3.5224(-2)	1.2978(-3)
12	6.5003(-2)	1.2754(-3)	6.5003(-2)	1.2748(-3)	6.4895(-2)	1.2736(-3)
13	2.2359(-2)	7.1754(-4)	2.2359(-2)	7.1716(-4)	2.2306(-2)	7.1656(-4)
14	1.7355(-2)	6.2526(-4)	1.7355(-2)	6.2491(-4)	1.7320(-2)	6.2442(-4)
15	1.0196(-2)	4.3287(-4)	1.0196(-2)	4.3262(-4)	1.0174(-2)	4.3228(-4)
16	3.0154(-3)	1.2458(-4)	3.0153(-3)	1.2451(-4)	3.0094(-3)	1.2441(-4)
17	7.3692(-4)	2.7222(-5)	7.3692(-4)	2.7207(-5)	7.3547(-4)	2.7185(-5)
18	4.8899(-5)	1.8750(-6)	4.8898(-5)	1.8740(-6)	4.8800(-5)	1.8725(-6)
19	6.0834(-6)	2.3489(-7)	6.0847(-6)	2.3478(-7)	6.0725(-6)	2.3459(-7)

^a No negative flux fix-up

^b With negative flux fix-up

6. MULTISLABS WITH L-TH ORDER ANISOTROPIC SCATTERING

6.1 Introduction

In Chapter 5, a method for solving the multigroup transport equation with a triangular transfer matrix including L^{th} order anisotropic scattering was proposed and numerical results were reported for the case of a single slab. The purpose of this chapter is to extend the method to multislabs problems. Because the previously developed analysis can be readily applied in this case, we do not repeat here the derivation reported in Chapter 5. We consider the following multigroup transport equation to be applicable in each of R regions, $z \in [z_{r-1}, z_r]$, $r = 1, 2, \dots, R$, and for each group $i = 1, 2, \dots, M$:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_i(z, \mu) + \sigma_{i,r} \psi_i(z, \mu) \\ = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^i \sum_{\ell=0}^L \sigma_{ij}^r(\ell) P_{\ell}(\mu) \phi_{j,\ell}(z) \quad . \quad (6.1) \end{aligned}$$

Here $\sigma_{i,r}$ is the total cross section for group i and region r and $\sigma_{ij}^r(\ell) = \sigma_{ij}^r \beta_{ij}^r(\ell)$, with $\beta_{ij}^r(0) = 1$, denote coefficients in Legendre expansions of the transfer cross sections. As usual, $\psi_i(z, \mu)$ represents the angular flux in the i^{th} group and

$$\phi_{j,g}(z) = \int_{-1}^1 \psi_j(z,\mu) P_g(\mu) d\mu \quad (6.2)$$

We are concerned in this chapter with non-multiplying multislabs and boundary conditions of the type

$$\psi_j(z_0,\mu) = f_{j,0}(\mu) \quad , \quad \mu > 0 \quad , \quad (6.3a)$$

and

$$\psi_j(z_R,-\mu) = f_{j,R}(\mu) \quad , \quad \mu > 0 \quad , \quad (6.3b)$$

where $f_{j,0}(\mu)$ and $f_{j,R}(\mu)$ are considered specified.

6.2 The F_N Method

We note that a generalization of the technique applied in Section 5.2 could be used here to derive singular integral equations and constraints for each group, involving only the boundary data and boundary and interface angular fluxes established for previous groups. By using the F_N method in a manner similar to that reported previously for one-speed problems (Devaux, Grandjean, Ishiguro, and Siewert, 1979), the problem of finding the unknown boundary and interface angular fluxes could be reduced to the solution of a system of linear algebraic equations for each group. Since the size of each of these M systems would be, in the present case, $2(N+1)R$, it is clear that for large R the solution of very large systems would be required. We thus prefer to attack the problem in an alternative way: we consider one slab at a time, solve, for each group, R systems of $2(N+1)$ linear algebraic

equations and iterate these solutions on adjacent slabs until convergence is achieved.

We consider, for each $r = 1, 2, \dots, R$, the problem defined by equation (6.1) and boundary conditions written formally as

$$\psi_i(z_{r-1}, \mu) = L_{i,r}(\mu) \quad , \quad \mu > 0 \quad , \quad (6.4a)$$

and

$$\psi_i(z_r, -\mu) = R_{i,r}(\mu) \quad , \quad \mu > 0 \quad . \quad (6.4b)$$

Of course, only

$$L_{i,1}(\mu) = f_{i,0}(\mu) \quad , \quad \mu > 0 \quad , \quad (6.5a)$$

and

$$R_{i,R}(\mu) = f_{i,R}(\mu) \quad , \quad \mu > 0 \quad , \quad (6.5b)$$

are presently known. We now follow the analysis of Section 5.2 to derive, for the i^{th} group, the system of singular integral equations and constraints given by equations (5.42) and (5.44) where an index r should be included when defining quantities that depend on the particular region being considered. We let $\Delta_r = z_r - z_{r-1}$, $\Delta_{i,r} = \sigma_{i,r} \Delta_r$ and use the approximations

$$\psi_i(z_{r-1}, -\mu) = R_{i,r}(\mu) \exp(-\Delta_{i,r}/\mu) + \sum_{\alpha=0}^N a_{i,\alpha}^r P_{\alpha}(2\mu-1) \quad (6.6a)$$

and

$$\psi_i(z_r, \mu) = L_{i,r}(\mu) \exp(-\Delta_{i,r}/\mu) + \sum_{\alpha=0}^N b_{i,\alpha}^r P_{\alpha}(2\mu-1) \quad , \quad (6.6b)$$

for $\mu > 0$, to deduce from equations (5.42) and (5.44) that

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^N [a_{i,\alpha}^r b_{i,\alpha}^r(\xi) + c_{i,r} \exp(-\Delta_{i,r}/\xi) b_{i,\alpha}^r A_{i,\alpha}^r(\xi)] \\ = c_{i,r} I_{i,r}(\xi) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij}^r I_{ij}^r(\xi) \end{aligned} \quad (6.7a)$$

and

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^N [b_{i,\alpha}^r B_{i,\alpha}^r(\xi) + c_{i,r} \exp(-\Delta_{i,r}/\xi) a_{i,\alpha}^r A_{i,\alpha}^r(\xi)] \\ = c_{i,r} J_{i,r}(\xi) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij}^r J_{ij}^r(\xi) \end{aligned} \quad (6.7b)$$

for all $\xi \in P_{i,r} = \{v_{i,m}^r\} \cup [0,1]$, where $v_{i,m}^r$, $m = 0, 1, 2, \dots, \kappa_{i,r} - 1$, denote the positive discrete eigenvalues relevant to group i and region r . All quantities in equations (6.7) are defined precisely in the same way as in Chapter 5 (except for the inclusion of an index r as previously noted). If we now consider equations (6.7) at $N+1$ values of $\xi \in P_{i,r}$, say $\xi_{i,\beta}^r$, we obtain a system of linear algebraic equations which can be written in matrix notation as

$$\tilde{C}_{i,r} \tilde{X}_{i,r} = \tilde{K}_{i,r} \quad (6.8)$$

where

$$\tilde{C}_{i,r} = \begin{vmatrix} \tilde{B}_{i,r} & \tilde{A}_{i,r} \\ \tilde{A}_{i,r} & \tilde{B}_{i,r} \end{vmatrix} \quad (6.9)$$

$$\tilde{B}_{i,r} = \begin{vmatrix} B_{i,0}^r(\epsilon_{i,0}^r) & B_{i,1}^r(\epsilon_{i,0}^r) & \dots & B_{i,N}^r(\epsilon_{i,0}^r) \\ B_{i,0}^r(\epsilon_{i,1}^r) & B_{i,1}^r(\epsilon_{i,1}^r) & \dots & B_{i,N}^r(\epsilon_{i,1}^r) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ B_{i,0}^r(\epsilon_{i,N}^r) & B_{i,1}^r(\epsilon_{i,N}^r) & \dots & B_{i,N}^r(\epsilon_{i,N}^r) \end{vmatrix} \quad (6.10a)$$

$$\tilde{A}_{i,r} = \tilde{E}_{i,r} \begin{vmatrix} A_{i,0}^r(\epsilon_{i,0}^r) & A_{i,1}^r(\epsilon_{i,0}^r) & \dots & A_{i,N}^r(\epsilon_{i,0}^r) \\ A_{i,0}^r(\epsilon_{i,1}^r) & A_{i,1}^r(\epsilon_{i,1}^r) & \dots & A_{i,N}^r(\epsilon_{i,1}^r) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{i,0}^r(\epsilon_{i,N}^r) & A_{i,1}^r(\epsilon_{i,N}^r) & \dots & A_{i,N}^r(\epsilon_{i,N}^r) \end{vmatrix} \quad (6.10b)$$

$$\tilde{E}_{i,r} = c_{i,r} \{ \exp(-\Delta_{i,r}/\epsilon_{i,0}^r) \underline{k}_0 + \exp(-\Delta_{i,r}/\epsilon_{i,1}^r) \underline{k}_1 \\ + \dots + \exp(-\Delta_{i,r}/\epsilon_{i,N}^r) \underline{k}_N \} \quad (6.11)$$

\underline{k}_j is, in general, a square matrix of order $N+1$ whose elements are all zero, except for a one in the $(j+1)^{\text{th}}$ diagonal position,

$$\tilde{x}_{i,r} = \begin{pmatrix} a_{i,0}^r \\ a_{i,1}^r \\ \vdots \\ a_{i,N}^r \\ b_{i,0}^r \\ b_{i,1}^r \\ \vdots \\ b_{i,N}^r \end{pmatrix}, \quad (6.12)$$

and

$$\tilde{x}_{i,r} = \begin{pmatrix} c_{i,r} I_{i,r}(\xi_{i,0}^r) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij}^r I_{ij}^r(\xi_{i,0}^r) \\ c_{i,r} I_{i,r}(\xi_{i,1}^r) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij}^r I_{ij}^r(\xi_{i,1}^r) \\ \vdots \\ c_{i,r} I_{i,r}(\xi_{i,N}^r) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij}^r I_{ij}^r(\xi_{i,N}^r) \\ c_{i,r} J_{i,r}(\xi_{i,0}^r) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij}^r J_{ij}^r(\xi_{i,0}^r) \\ c_{i,r} J_{i,r}(\xi_{i,1}^r) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij}^r J_{ij}^r(\xi_{i,1}^r) \\ \vdots \\ c_{i,r} J_{i,r}(\xi_{i,N}^r) + \sum_{j=1}^{i-1} \sigma_{ij}^r J_{ij}^r(\xi_{i,N}^r) \end{pmatrix}. \quad (6.13)$$

If $\tilde{C}_{i,r}^{-1}$ exists, equation (6.8) yields

$$\tilde{X}_{i,r} = \tilde{C}_{i,r}^{-1} \tilde{K}_{i,r}, \quad r = 1, 2, \dots, R, \quad (6.14)$$

where $\tilde{K}_{i,r}$, given by equation (6.13), is not completely known because, as can be seen from equations (5.74), $L_{i,r}(\mu)$ and $R_{i,r}(\mu)$ are required to compute $I_{i,r}(\xi)$ and $J_{i,r}(\xi)$ and, as discussed before, $L_{i,r}(\mu)$ and $R_{i,r}(\mu)$ are only formal representations as yet undetermined, with the exceptions of $L_{i,1}(\mu)$ and $R_{i,R}(\mu)$. Therefore, only the summation terms corresponding to down-scattering contributions from previous groups are supposed known in the right-hand side of equation (6.13). From the discussion above it is clear that an iterative solution is needed to establish $\tilde{X}_{i,r}$ and consequently the emerging angular fluxes given by equations (6.6). In the next section we illustrate such an iterative solution for a specific problem.

6.3 A Test Problem

We now consider a 20-group, 5-region albedo problem with a 10th order Legendre expansion of the scattering law. A 20-cm thick slab has an isotropically incident distribution of radiation only in the first group and only on the surface at $z = z_0$, i.e., for $\mu > 0$

$$L_{i,1}(\mu) = \delta_{i,1} \quad (6.15a)$$

and

$$R_{i,R}(\mu) = 0 \quad (6.15b)$$

In addition, the thickness of each layer is specified by $\Delta_r = (r+1)$ cm, $r = 1, 2, \dots, 5$. By using the fictitious cross-section set that follows, we intend to facilitate the data handling. We define, for $i = 1, 2, \dots, 20$ and $r = 1, 2, \dots, 5$,

$$\sigma_i^r = \left(\frac{r+20}{21}\right)^5 \left[\left(\frac{i}{10}\right) - 0.15 \delta_{i,5} - 0.15 \delta_{i,10} \right] \quad (6.16a)$$

and

$$\sigma_{ij}^r(\ell) = (2\ell+1) \left(\frac{r+20}{21}\right) \left(\frac{j}{100(1-j+1)}\right) (g_{ij})^\ell, \quad (6.16b)$$

$j = 1, 2, \dots, i$ and $\ell = 0, 1, \dots, 10,$

where

$$g_{ij} = 0.7 - \left(\frac{i+j}{200}\right). \quad (6.16c)$$

We note that the cross-section set proposed here is a simple modification of that used in Chapter 5. The same collocation scheme is also used here, i.e.,

$$\xi_{i,\beta}^r = \nu_{i,\beta}^r, \quad \beta = 0, 1, 2, \dots, \kappa_{i,r} - 1, \quad (6.17a)$$

and

$$\xi_{i,\beta}^r = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left[\frac{2\beta - 2\kappa_{i,r} + 1}{2(N+1 - \kappa_{i,r})} \pi \right], \quad (6.17b)$$

$\beta = \kappa_{i,r}, \kappa_{i,r} + 1, \dots, N$

Based on computations which followed closely the technique discussed by Siewert (1980), we have concluded that there is only one pair of discrete eigenvalues relevant to each group in each region of the considered problem; we list in Table 6.1 the positive eigenvalue $\nu_{i,0}^r$ for $i = 1, 2, \dots, 20$ and $r = 1, 2, \dots, 5$.

We now discuss our iterative procedure to determine $\tilde{X}_{i,r}$. Initially, for $r = 1$, we use equation (6.15a) and, as a first guess, we set $R_{i,1}(\nu) = 0$ to compute, from equation (6.13), a crude approximation to $\tilde{K}_{i,1}$ which we denote by $\tilde{K}_{i,1}^{(0)}$. Accordingly, from equation (6.14), we compute $\tilde{X}_{i,1}^{(0)}$, i.e., approximate values for $\{a_{i,\alpha}^1\}$ and $\{b_{i,\alpha}^1\}$. We now note that equations (6.4a) and (6.6b) yield, for $r = 2, 3, \dots, R$,

$$L_{i,r}(\nu) = L_{i,r-1}(\nu) \exp(-\Delta_{i,r-1}/\nu) + \sum_{\alpha=0}^N b_{i,\alpha}^{r-1} P_{\alpha}(2\nu-1) \quad ,$$

$$\nu > 0 \quad , \quad (6.18a)$$

which together with $R_{i,r}(\nu) = 0$ can be used successively to compute approximations $\tilde{K}_{i,r}^{(0)}$ and $\tilde{X}_{i,r}^{(0)}$ for $r = 2, 3, \dots, R$. Likewise, equations (6.4b) and (6.6a) yield, for $r = 1, 2, \dots, R-1$,

$$R_{i,r}(\nu) = R_{i,r+1}(\nu) \exp(-\Delta_{i,r+1}/\nu) + \sum_{\alpha=0}^N a_{i,\alpha}^{r+1} P_{\alpha}(2\nu-1) \quad ,$$

$$\nu > 0 \quad . \quad (6.18b)$$

The approximations for $\{a_{i,\alpha}^r\}$ and $\{b_{i,\alpha}^r\}$, $r = 1, 2, \dots, R$, found in the previous step can now be used in equations (6.18), and equation (6.14)

Table 6.1 The positive discrete eigenvalues $\nu_{i,0}^r$

i	$r = 1$	$r = 2$	$r = 3$	$r = 4$	$r = 5$
1	1.014675230187	1.009627226459	1.006235579588	1.003967210867	1.002466094633
2	1.013664030621	1.008862139834	1.005664560862	1.003548929674	1.002166992837
3	1.012702645157	1.008140817000	1.005131686945	1.003163422111	1.001895462297
4	1.011789497866	1.007461768696	1.004635489487	1.002809198427	1.001649975857
5	1.024569285561	1.016300706575	1.010733319846	1.006980415171	1.004462235734
6	1.010101983620	1.006224775612	1.003747380593	1.002188702349	1.001231062637
7	1.009324801731	1.005664061769	1.003352641311	1.001919496742	1.001054616960
8	1.008590208601	1.005140068079	1.002988911056	1.001675703293	1.000898180681
9	1.007896906406	1.004651465922	1.002654795130	1.001455862714	1.000760271267
10	1.011201112487	1.006780184327	1.004002486528	1.002286943006	1.001254754508
11	1.006629121797	1.003775170108	1.002069829189	1.001082218593	1.000534201606
12	1.006052161369	1.003384852919	1.001816186142	1.000925519124	1.000443194621
13	1.005511523631	1.003024672419	1.001586570418	1.000786988284	1.000365036116
14	1.005005991723	1.002693310408	1.001379580893	1.000665212080	1.000298406573
15	1.004534348940	1.002389442258	1.001193817737	1.000558800707	1.000242042897
16	1.004095374943	1.002111736239	1.001027885874	1.000466395680	1.000194746410
17	1.003687842667	1.001858853819	1.000880399460	1.000386677447	1.000155390132
18	1.003310515972	1.001629450936	1.000749987263	1.000318373189	1.000122925006
19	1.002962148042	1.001422180241	1.000635298816	1.000260264497	1.000096384752
20	1.002641480584	1.001235694282	1.000535011145	1.000211194616	1.000074889135

can be solved successively for $r = R-1, R-2, \dots, 2, 1$ to provide improved approximations for $\{a_{i,\alpha}^r\}$ and $\{b_{i,\alpha}^r\}$. This completes what we call the first sweep of the multislabs system. Second, third, and higher order sweeps can be repeated in a similar way by using the updated approximations for $\{a_{i,\alpha}^r\}$ and $\{b_{i,\alpha}^r\}$ until the relative error in these constants for two successive sweeps is as small as desired. In our problem we have found that, in general, five or six sweeps were sufficient to achieve a relative error smaller than 10^{-10} . Once the converged values of $\{a_{i,\alpha}^r\}$ and $\{b_{i,\alpha}^r\}$ are available, appropriate versions of equations (5.156) can be used to compute the angular fluxes emerging from each region, and interior fluxes can also be computed by the method of Section 5.4. We list our converged results for $\psi_i(z_0, -\mu)$ and $\psi_i(z_5, \mu)$, $\mu > 0$, $i = 1, 2, \dots, 20$, in Tables 6.2 to 6.9. Converged results for the angular flux at the center of region 3, $z = z_2 + \Delta_3/2$, are reported in Tables 6.10 to 6.13 and for the group fluxes

$$\phi_i(z) = \int_{-1}^1 \psi_i(z, \mu) d\mu \quad (6.19)$$

in Table 6.14. Finally, converged results for the group albedos

$$A_i^* = 2 \int_0^1 \mu \psi_i(z_0, -\mu) d\mu \quad (6.20a)$$

and the group transmission factors

$$B_i^* = 2 \int_0^1 \mu \psi_i(z_5, \mu) d\mu \quad (6.20b)$$

are reported in Table 6.15, along with those found by Renken (1981) with the code DTF69 (Renken and Adams, 1969), with 75 space points and eight discrete directions for each half-range of ν . All our numerical results are accurate to within ± 1 in the last digit and the degree of agreement with the DTF69 results is essentially the same as in Chapter 5.

Finally, in regard to the convergence of our method, we have found that $N = 20$ was required to establish the boundary and interface fluxes accurate to five significant figures; for the integrated quantities $\phi_j(z)$, A_j^* and B_j^* and interior angular fluxes $N = 15$ was sufficient to obtain five figures of accuracy.

Table 6.2 The exit angular fluxes $\psi_i(z_0, -\mu)$ for $i = 1$ to 5

μ	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 5$
0	5.0856(-2)	1.2986(-2)	5.8781(-3)	3.3590(-3)	3.1468(-3)
0.1	2.7785(-2)	8.6312(-3)	4.2658(-3)	2.5715(-3)	2.4585(-3)
0.2	1.7783(-2)	6.1190(-3)	3.1971(-3)	1.9979(-3)	1.9352(-3)
0.3	1.2213(-2)	4.4866(-3)	2.4404(-3)	1.5695(-3)	1.5346(-3)
0.4	8.8379(-3)	3.4029(-3)	1.9074(-3)	1.2545(-3)	1.2351(-3)
0.5	6.6435(-3)	2.6534(-3)	1.5233(-3)	1.0202(-3)	1.0094(-3)
0.6	5.1352(-3)	2.1121(-3)	1.2366(-3)	8.4089(-4)	8.3517(-4)
0.7	4.0672(-3)	1.7123(-3)	1.0186(-3)	7.0136(-4)	6.9883(-4)
0.8	3.2968(-3)	1.4145(-3)	8.5238(-4)	5.9298(-4)	5.9203(-4)
0.9	2.7135(-3)	1.1849(-3)	7.2266(-4)	5.0750(-4)	5.0707(-4)
1	2.2726(-3)	1.0048(-3)	6.1816(-4)	4.3720(-4)	4.3734(-4)

Table 6.3 The exit angular fluxes $\psi_i(z_0, -\mu)$ for $i = 6$ to 10

μ	$i = 6$	$i = 7$	$i = 8$	$i = 9$	$i = 10$
0	1.5425(-3)	1.1443(-3)	8.8437(-4)	7.0497(-4)	6.8124(-4)
0.1	1.2658(-3)	9.5926(-4)	7.5467(-4)	6.1074(-4)	5.9839(-4)
0.2	1.0337(-3)	7.9559(-4)	6.3435(-4)	5.1942(-4)	5.1387(-4)
0.3	8.4721(-4)	6.6099(-4)	5.3325(-4)	4.4115(-4)	4.4002(-4)
0.4	7.0147(-4)	5.5382(-4)	4.5146(-4)	3.7693(-4)	3.7844(-4)
0.5	5.8743(-4)	4.6861(-4)	3.8553(-4)	3.2454(-4)	3.2753(-4)
0.6	4.9644(-4)	3.9966(-4)	3.3154(-4)	2.8118(-4)	2.8501(-4)
0.7	4.2292(-4)	3.4321(-4)	2.8682(-4)	2.4490(-4)	2.4920(-4)
0.8	3.6388(-4)	2.9734(-4)	2.5006(-4)	2.1479(-4)	2.1927(-4)
0.9	3.1630(-4)	2.6004(-4)	2.1993(-4)	1.8990(-4)	1.9432(-4)
1	2.7596(-4)	2.2808(-4)	1.9388(-4)	1.6821(-4)	1.7260(-4)

Table 6.4 The exit angular fluxes $\psi_i(z_0, -\mu)$ for $i = 11$ to 15

μ	$i = 11$	$i = 12$	$i = 13$	$i = 14$	$i = 15$
0	4.8119(-4)	4.0701(-4)	3.4911(-4)	3.0296(-4)	2.6556(-4)
0.1	4.2784(-4)	3.6539(-4)	3.1617(-4)	2.7657(-4)	2.4420(-4)
0.2	3.7165(-4)	3.1996(-4)	2.7892(-4)	2.4568(-4)	2.1831(-4)
0.3	3.2164(-4)	2.7888(-4)	2.4475(-4)	2.1692(-4)	1.9388(-4)
0.4	2.7946(-4)	2.4386(-4)	2.1530(-4)	1.9189(-4)	1.7241(-4)
0.5	2.4428(-4)	2.1441(-4)	1.9034(-4)	1.7051(-4)	1.5393(-4)
0.6	2.1461(-4)	1.8941(-4)	1.6901(-4)	1.5213(-4)	1.3795(-4)
0.7	1.8934(-4)	1.6797(-4)	1.5061(-4)	1.3620(-4)	1.2404(-4)
0.8	1.6796(-4)	1.4970(-4)	1.3484(-4)	1.2245(-4)	1.1197(-4)
0.9	1.4999(-4)	1.3426(-4)	1.2141(-4)	1.1069(-4)	1.0159(-4)
1	1.3412(-4)	1.2054(-4)	1.0944(-4)	1.0015(-4)	9.2254(-5)

Table 6.5 The exit angular fluxes $\psi_i(z_0, -\mu)$ for $i = 16$ to 20

μ	$i = 16$	$i = 17$	$i = 18$	$i = 19$	$i = 20$
0	2.3480(-4)	2.0920(-4)	1.8765(-4)	1.6933(-4)	1.5362(-4)
0.1	2.1736(-4)	1.9485(-4)	1.7576(-4)	1.5944(-4)	1.4536(-4)
0.2	1.9547(-4)	1.7620(-4)	1.5977(-4)	1.4564(-4)	1.3339(-4)
0.3	1.7455(-4)	1.5815(-4)	1.4410(-4)	1.3195(-4)	1.2137(-4)
0.4	1.5598(-4)	1.4197(-4)	1.2992(-4)	1.1946(-4)	1.1032(-4)
0.5	1.3988(-4)	1.2786(-4)	1.1747(-4)	1.0842(-4)	1.0048(-4)
0.6	1.2590(-4)	1.1554(-4)	1.0655(-4)	9.8688(-5)	9.1767(-5)
0.7	1.1366(-4)	1.0470(-4)	9.6908(-5)	9.0067(-5)	8.4023(-5)
0.8	1.0299(-4)	9.5223(-5)	8.8435(-5)	8.2461(-5)	7.7165(-5)
0.9	9.3768(-5)	8.6980(-5)	8.1036(-5)	7.5790(-5)	7.1127(-5)
1	8.5449(-5)	7.9528(-5)	7.4329(-5)	6.9729(-5)	6.5630(-5)

Table 6.6 The exit angular fluxes $\psi_i(z_5, \mu)$ for $i = 1$ to 5

μ	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 5$
0	6.3366(-5)	1.7999(-5)	8.6499(-6)	5.1625(-6)	5.1734(-6)
0.1	8.7378(-5)	2.3228(-5)	1.0926(-5)	6.4481(-6)	6.5023(-6)
0.2	1.2533(-4)	3.0390(-5)	1.3902(-5)	8.0858(-6)	8.1596(-6)
0.3	1.9871(-4)	4.0727(-5)	1.8012(-5)	1.0296(-5)	1.0379(-5)
0.4	4.4550(-4)	5.6122(-5)	2.3833(-5)	1.3357(-5)	1.3434(-5)
0.5	1.3050(-3)	7.9503(-5)	3.2169(-5)	1.7639(-5)	1.7691(-5)
0.6	3.4157(-3)	1.1508(-4)	4.4073(-5)	2.3613(-5)	2.3616(-5)
0.7	7.3116(-3)	1.6810(-4)	6.0800(-5)	3.1819(-5)	3.1758(-5)
0.8	1.3259(-2)	2.4387(-4)	8.3692(-5)	4.2820(-5)	4.2697(-5)
0.9	2.1265(-2)	3.4652(-4)	1.1401(-4)	5.7130(-5)	5.6985(-5)
1	3.1162(-2)	4.7836(-4)	1.5281(-4)	7.5179(-5)	7.5100(-5)

Table 6.7 The exit angular fluxes $\psi_i(z_5, \mu)$ for $i = 6$ to 10

μ	$i = 6$	$i = 7$	$i = 8$	$i = 9$	$i = 10$
0	2.5806(-6)	1.9573(-6)	1.5457(-6)	1.2575(-6)	1.2485(-6)
0.1	3.1828(-6)	2.4032(-6)	1.8906(-6)	1.5329(-6)	1.5226(-6)
0.2	3.9235(-6)	2.9460(-6)	2.3067(-6)	1.8626(-6)	1.8463(-6)
0.3	4.8942(-6)	3.6513(-6)	2.8433(-6)	2.2848(-6)	2.2582(-6)
0.4	6.2000(-6)	4.5920(-6)	3.5536(-6)	2.8401(-6)	2.7967(-6)
0.5	7.9782(-6)	5.8625(-6)	4.5060(-6)	3.5797(-6)	3.5104(-6)
0.6	1.0398(-5)	7.5780(-6)	5.7835(-6)	4.5659(-6)	4.4577(-6)
0.7	1.3649(-5)	9.8683(-6)	7.4795(-6)	5.8685(-6)	5.7041(-6)
0.8	1.7926(-5)	1.2865(-5)	9.6887(-6)	7.5584(-6)	7.3170(-6)
0.9	2.3405(-5)	1.6689(-5)	1.2498(-5)	9.7006(-6)	9.3578(-6)
1	3.0229(-5)	2.1436(-5)	1.5976(-5)	1.2348(-5)	1.1878(-5)

Table 6.8 The exit angular fluxes $\psi_i(z_5, \mu)$ for $i = 11$ to 15

μ	$i = 11$	$i = 12$	$i = 13$	$i = 14$	$i = 15$
0	8.9495(-7)	7.6920(-7)	6.7021(-7)	5.9049(-7)	5.2518(-7)
0.1	1.0844(-6)	9.2949(-7)	8.0777(-7)	7.0992(-7)	6.2989(-7)
0.2	1.3080(-6)	1.1176(-6)	9.6841(-7)	8.4872(-7)	7.5102(-7)
0.3	1.5907(-6)	1.3544(-6)	1.1696(-6)	1.0218(-6)	9.0142(-7)
0.4	1.9579(-6)	1.6603(-6)	1.4283(-6)	1.2433(-6)	1.0930(-6)
0.5	2.4410(-6)	2.0608(-6)	1.7654(-6)	1.5305(-6)	1.3404(-6)
0.6	3.0781(-6)	2.5855(-6)	2.2058(-6)	1.9042(-6)	1.6610(-6)
0.7	3.9116(-6)	3.2715(-6)	2.7775(-6)	2.3875(-6)	2.0740(-6)
0.8	4.9849(-6)	4.1508(-6)	3.5091(-6)	3.0042(-6)	2.5995(-6)
0.9	6.3381(-6)	5.2567(-6)	4.4272(-6)	3.7763(-6)	3.2560(-6)
1	8.0043(-6)	6.6163(-6)	5.5541(-6)	4.7226(-6)	4.0596(-6)

Table 6.9 The exit angular fluxes $\psi_i(z_5, \mu)$ for $i = 16$ to 20

μ	$i = 16$	$i = 17$	$i = 18$	$i = 19$	$i = 20$
0	4.7090(-7)	4.2522(-7)	3.8636(-7)	3.5299(-7)	3.2410(-7)
0.1	5.6347(-7)	5.0765(-7)	4.6025(-7)	4.1959(-7)	3.8444(-7)
0.2	6.7009(-7)	6.0222(-7)	5.4467(-7)	4.9540(-7)	4.5285(-7)
0.3	8.0194(-7)	7.1870(-7)	6.4826(-7)	5.8808(-7)	5.3621(-7)
0.4	9.6920(-7)	8.6585(-7)	7.7861(-7)	7.0426(-7)	6.4032(-7)
0.5	1.1843(-6)	1.0543(-6)	9.4486(-7)	8.5185(-7)	7.7208(-7)
0.6	1.4618(-6)	1.2965(-6)	1.1577(-6)	1.0402(-6)	9.3958(-7)
0.7	1.8181(-6)	1.6064(-6)	1.4293(-6)	1.2795(-6)	1.1519(-6)
0.8	2.2701(-6)	1.9985(-6)	1.7718(-6)	1.5808(-6)	1.4183(-6)
0.9	2.8337(-6)	2.4863(-6)	2.1972(-6)	1.9541(-6)	1.7478(-6)
1	3.5226(-6)	3.0818(-6)	2.7157(-6)	2.4085(-6)	2.1483(-6)

Table 6.10 The angular fluxes $\phi_i(z, \mu)$ for $z = z_2 + \Delta_3/2$ and $i = 1$ to 5

μ	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 5$
-1	3.6184(-4)	1.5638(-4)	9.3646(-5)	6.4533(-5)	6.6068(-5)
-0.8	5.0171(-4)	2.0930(-4)	1.2277(-4)	8.3348(-5)	8.5646(-5)
-0.6	7.2982(-4)	2.9089(-4)	1.6621(-4)	1.1075(-4)	1.1420(-4)
-0.4	1.1346(-3)	4.2492(-4)	2.3438(-4)	1.5236(-4)	1.5755(-4)
-0.2	1.9474(-3)	6.6092(-4)	3.4641(-4)	2.1809(-4)	2.2566(-4)
0	3.7995(-3)	1.0988(-3)	5.4058(-4)	3.2815(-4)	3.3814(-4)
0.2	2.1021(-2)	2.0301(-3)	9.0271(-4)	5.2139(-4)	5.3497(-4)
0.4	1.2432(-1)	3.8384(-3)	1.5599(-3)	8.4639(-4)	8.7182(-4)
0.6	2.4736(-1)	5.8053(-3)	2.4324(-3)	1.2967(-3)	1.3293(-3)
0.8	3.5123(-1)	7.2855(-3)	3.2564(-3)	1.7745(-3)	1.7904(-3)
1	4.3378(-1)	8.2115(-3)	3.8945(-3)	2.1939(-3)	2.1725(-3)

Table 6.11 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = z_2 + \Delta_3/2$ and $i = 6$ to 10

μ	$i = 6$	$i = 7$	$i = 8$	$i = 9$	$i = 10$
-1	3.9539(-5)	3.1976(-5)	2.6682(-5)	2.2774(-5)	2.3252(-5)
-0.8	4.9959(-5)	4.0050(-5)	3.3160(-5)	2.8108(-5)	2.8655(-5)
-0.6	6.4587(-5)	5.1241(-5)	4.2047(-5)	3.5361(-5)	3.5967(-5)
-0.4	8.5842(-5)	6.7294(-5)	5.4664(-5)	4.5574(-5)	4.6189(-5)
-0.2	1.1797(-4)	9.1278(-5)	7.3334(-5)	6.0556(-5)	6.1062(-5)
0	1.6929(-4)	1.2903(-4)	1.0233(-4)	8.3552(-5)	8.3687(-5)
0.2	2.5349(-4)	1.8976(-4)	1.4822(-4)	1.1942(-4)	1.1866(-4)
0.4	3.8345(-4)	2.8147(-4)	2.1636(-4)	1.7198(-4)	1.6966(-4)
0.6	5.5908(-4)	4.0352(-4)	3.0587(-4)	2.4029(-4)	2.3615(-4)
0.8	7.5900(-4)	5.4334(-4)	4.0840(-4)	3.1833(-4)	3.1261(-4)
1	9.5642(-4)	6.8511(-4)	5.1381(-4)	3.9913(-4)	3.9222(-4)

Table 6.12 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = z_2 + \Delta_3/2$ and $i = 11$ to 15

μ	$i = 11$	$i = 12$	$i = 13$	$i = 14$	$i = 15$
-1	1.7696(-5)	1.5718(-5)	1.4123(-5)	1.2805(-5)	1.1699(-5)
-0.8	2.1572(-5)	1.9061(-5)	1.7044(-5)	1.5385(-5)	1.3996(-5)
-0.6	2.6766(-5)	2.3519(-5)	2.0921(-5)	1.8793(-5)	1.7020(-5)
-0.4	3.3976(-5)	2.9672(-5)	2.6246(-5)	2.3451(-5)	2.1133(-5)
-0.2	4.4376(-5)	3.8491(-5)	3.3828(-5)	3.0044(-5)	2.6920(-5)
0	5.9990(-5)	5.1616(-5)	4.5020(-5)	3.9700(-5)	3.5333(-5)
0.2	8.3727(-5)	7.1365(-5)	6.1701(-5)	5.3963(-5)	4.7657(-5)
0.4	1.1776(-4)	9.9441(-5)	8.5227(-5)	7.3932(-5)	6.4792(-5)
0.6	1.6132(-4)	1.3517(-4)	1.1502(-4)	9.9120(-5)	8.6325(-5)
0.8	2.1080(-4)	1.7565(-4)	1.4871(-4)	1.2754(-4)	1.1060(-4)
1	2.6230(-4)	2.1779(-4)	1.8377(-4)	1.5713(-4)	1.3587(-4)

Table 6.13 The angular fluxes $\psi_i(z, \mu)$ for $z = z_2 + \Delta_3/2$ and $i = 16$ to 20

μ	$i = 16$	$i = 17$	$i = 18$	$i = 19$	$i = 20$
-1	1.0758(-5)	9.9483(-6)	9.2458(-6)	8.6311(-6)	8.0892(-6)
-0.8	1.2819(-5)	1.1810(-5)	1.0937(-5)	1.0175(-5)	9.5048(-6)
-0.6	1.5522(-5)	1.4243(-5)	1.3139(-5)	1.2178(-5)	1.1336(-5)
-0.4	1.9182(-5)	1.7522(-5)	1.6095(-5)	1.4857(-5)	1.3775(-5)
-0.2	2.4303(-5)	2.2086(-5)	2.0188(-5)	1.8547(-5)	1.7119(-5)
0	3.1697(-5)	2.8631(-5)	2.6020(-5)	2.3774(-5)	2.1827(-5)
0.2	4.2440(-5)	3.8070(-5)	3.4370(-5)	3.1206(-5)	2.8477(-5)
0.4	5.7282(-5)	5.1031(-5)	4.5769(-5)	4.1295(-5)	3.7457(-5)
0.6	7.5871(-5)	6.7214(-5)	5.9961(-5)	5.3822(-5)	4.8578(-5)
0.8	9.6807(-5)	8.5428(-5)	7.5928(-5)	6.7913(-5)	6.1087(-5)
1	1.1860(-4)	1.0440(-4)	9.2568(-5)	8.2607(-5)	7.4141(-5)

Table 6.14 The group fluxes $\phi_i(z)$

i	$z = z_0$	$z = z_2 + \Delta_3/2$	$z = z_5$
1	1.0112	1.9270(-1)	6.2131(-3)
2	3.8166(-3)	5.1551(-3)	1.3399(-4)
3	2.0235(-3)	2.3027(-3)	4.7871(-5)
4	1.2877(-3)	1.2863(-3)	2.4981(-5)
5	1.2533(-3)	1.3082(-3)	2.4979(-5)
6	6.9222(-4)	5.8515(-4)	1.0738(-5)
7	5.4114(-4)	4.2893(-4)	7.7753(-6)
8	4.3784(-4)	3.2930(-4)	5.9019(-6)
9	3.6347(-4)	2.6157(-4)	4.6376(-6)
10	3.6290(-4)	2.5884(-4)	4.5126(-6)
11	2.6722(-4)	1.7926(-4)	3.1007(-6)
12	2.3262(-4)	1.5150(-4)	2.5970(-6)
13	2.0497(-4)	1.2999(-4)	2.2080(-6)
14	1.8241(-4)	1.1293(-4)	1.9006(-6)
15	1.6369(-4)	9.9125(-5)	1.6534(-6)
16	1.4796(-4)	8.7789(-5)	1.4514(-6)
17	1.3459(-4)	7.8354(-5)	1.2842(-6)
18	1.2311(-4)	7.0410(-5)	1.1443(-6)
19	1.1317(-4)	6.3655(-5)	1.0259(-6)
20	1.0449(-4)	5.7858(-5)	9.2482(-7)

Table 6.15 The group albedos A_i^* and the transmission factors B_i^*

i	Present Work		DTF69	
	A_i^*	B_i^*	A_i^*	B_i^*
1	5.8809(-3)	1.0453(-2)	5.8821(-3)	1.0439(-2)
2	2.2791(-3)	1.9993(-4)	2.2798(-3)	1.9965(-4)
3	1.2939(-3)	6.9012(-5)	1.2944(-3)	6.8915(-5)
4	8.6280(-4)	3.5393(-5)	8.6319(-4)	3.5345(-5)
5	8.5170(-4)	3.5350(-5)	8.5202(-4)	3.5300(-5)
6	4.9662(-4)	1.4899(-5)	4.9692(-4)	1.4879(-5)
7	3.9706(-4)	1.0716(-5)	3.9733(-4)	1.0702(-5)
8	3.2763(-4)	8.0863(-6)	3.2787(-4)	8.0757(-6)
9	2.7671(-4)	6.3202(-6)	2.7693(-4)	6.3119(-6)
10	2.7956(-4)	6.1271(-6)	2.7977(-4)	6.1191(-6)
11	2.0989(-4)	4.1837(-6)	2.1007(-4)	4.1782(-6)
12	1.8491(-4)	3.4892(-6)	1.8508(-4)	3.4847(-6)
13	1.6476(-4)	2.9545(-6)	1.6491(-4)	2.9506(-6)
14	1.4814(-4)	2.5332(-6)	1.4828(-4)	2.5299(-6)
15	1.3423(-4)	2.1953(-6)	1.3435(-4)	2.1924(-6)
16	1.2242(-4)	1.9200(-6)	1.2253(-4)	1.9174(-6)
17	1.1229(-4)	1.6927(-6)	1.1240(-4)	1.6904(-6)
18	1.0352(-4)	1.5029(-6)	1.0362(-4)	1.5009(-6)
19	9.5859(-5)	1.3428(-6)	9.5952(-5)	1.3409(-6)
20	8.9125(-5)	1.2064(-6)	8.9210(-5)	1.2047(-6)

7. CONCLUSIONS

In this work we have successfully used the F_N method to solve basic multigroup transport problems in plane geometry. We have concluded from our studies that the F_N method is capable of producing accurate results for the considered multigroup model and that the most interesting aspect of the method seems to be the capability of finding the angular fluxes emerging from a slab for a given group by using only the boundary data and established emerging fluxes for preceding groups. This feature of the F_N method is a particularly attractive one for shielding calculations where frequently the interior angular fluxes are not of primary interest. In a few situations where the knowledge of the interior fluxes is important, e.g., gamma-ray heating, these can be readily computed in our method from the previously determined boundary fluxes.

We note that for most cases the results deduced from the method of discrete ordinates are clearly adequate--especially when we consider the magnitude of the uncertainties normally associated with the input data. However, for strong absorption and/or optically thick slabs, increased computer time will be required by strictly numerical methods to achieve a desired degree of accuracy--a characteristic not shared by the F_N method. In fact, we have observed that slabs with strong absorption and/or large optical thickness is precisely the most favorable situation for the F_N method, in the sense that accurate results can be produced with a small N .

The primary objective of our work on the numerical aspects of the F_N method was to extract the maximum obtainable accuracy from the method with a reasonable amount of computation time. Thus, several improvements were incorporated into the numerical framework of the F_N method during the course of this research:

- a. the use of the orthogonal basis $P_\alpha(2\mu-1)$ instead of powers μ^α
- b. the use of a collocation scheme based on the zeros of Chebyshev polynomials in contrast to the previously used equally spaced schemes
- c. introduction of a new technique for computing the angular fluxes accurately for all μ .

It was not our aim to compare the computational efficiency of the F_N method with that of existing methods in this work; clearly this is an important aspect that needs to be studied, and topics such as a study of alternative techniques for computing the required functions, the viability of using single precision throughout the developed computer programs and the task of optimizing the developed computer programs are interesting aspects that deserve consideration. It is our feeling, however, that our method is competitive, especially if only boundary quantities are desired in a calculation.

Additional recommendations for future research include the extension of the method for multiplying media and inclusion of upscattering in the transfer matrix. These should be rather simple extensions but very valuable for applications in reactor analysis. The extension of the

method to spherical and cylindrical geometries and time-dependent problems seems possible, at least for simple problems.

8. LIST OF REFERENCES

- Abramowitz, M., and I. A. Stegun (Eds.). 1964. Handbook of Mathematical Functions. AMS-55. National Bureau of Standards, Washington, D.C.
- Bednarz, R. J., and J. R. Mika. 1963. Energy-dependent Boltzmann equation in plane geometry. J. Math. Phys. (N.Y.) 4(9): 1285-1292.
- Bell, G. I., and S. Glasstone. 1970. Nuclear Reactor Theory. Van Nostrand Reinhold Company, New York.
- Benoist, P., and A. Kavenoky. 1968. A new method of approximation of the Boltzmann equation. Nucl. Sci. Eng. 32(2): 225-232.
- Boltzmann, L. 1872. Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen. Wien. Ber. 66: 275-370.
- Bowden, R. L., and A. G. Bullard. 1969. Numerical solution of the neutron transport equation. J. Nucl. Energy 23(11-12): 655-662.
- Bowden, R. L., and F. J. McCrosson. 1971. On multi-group transport theory. Proc. Conf. Transport Theory, 2nd, January 26-29, CONF-710107. United States Atomic Energy Commission, Washington, D.C.
- Bowden, R. L., F. J. McCrosson, and E. A. Rhodes. 1968. Solution of the transport equation with anisotropic scattering in slab geometry. J. Math. Phys. (N.Y.) 9(5): 753-759.
- Brockmann, H. 1981. Treatment of anisotropic scattering in numerical neutron transport theory. Nucl. Sci. Eng. 77(4): 377-414.
- Burniston, E. E., T. W. Mullikin, and C. E. Siewert. 1972. Steady-state solutions in two-group theory of neutron diffusion. J. Math. Phys. (N.Y.) 13(10): 1461-1465.
- Carlson, B. 1953. Solution of transport equation by S_N approximations. LA-1599. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico.
- Case, K. M. 1960. Elementary solutions of the transport equation and their applications. Ann. Phys. (N.Y.) 9(1): 1-23.
- Case, K. M., and P. F. Zweifel. 1967. Linear Transport Theory. Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts.

- Cerçignani, C. 1969. *Mathematical Methods in Kinetic Theory*. Plenum Press, New York.
- Chandrasekhar, S. 1944. On the radiative equilibrium of a stellar atmosphere. II. *Astrophys. J.* 100(1): 76-86.
- Chandrasekhar, S. 1950. *Radiative Transfer*. Oxford University Press, London.
- Davison, B. 1945. Angular distribution due to an isotropic point source and spherically symmetrical eigensolutions of the transport equation. MT-112. Division of Research, Atomic Energy Project, National Research Council of Canada, Chalk River, Ontario.
- Davison, B. 1957. *Neutron Transport Theory*. Oxford University Press, London.
- Devaux, C., P. Grandjean, Y. Ishiguro, and C. E. Siewert. 1979. On multi-region problems in radiative transfer. *Astrophys. Space Sci.* 62(1): 225-233.
- Devaux, C., and C. E. Siewert. 1980. The F_N method for radiative transfer problems without azimuthal symmetry. *Z. Angew. Math. Phys.* 31(5): 592-604.
- Devaux, C., C. E. Siewert, and Y. Yuan. 1982. The complete solution for radiative transfer problems with reflecting boundaries and internal sources. *Astroph. J.* (in press).
- Garcia, R. D. M., G. C. Pomraning, and C. E. Siewert. 1982. On the transport of neutral hydrogen atoms in a hydrogen plasma. Accepted for publication in *Plasma Phys.*
- Garcia, R. D. M., and C. E. Siewert. 1981a. Radiative transfer in inhomogeneous atmospheres--numerical results. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 25(3): 277-283.
- Garcia, R. D. M., and C. E. Siewert. 1981b. Multigroup transport theory. II. Numerical results. *Nucl. Sci. Eng.* 78(4): 315-323.
- Garcia, R. D. M., and C. E. Siewert. 1982a. Radiative transfer in finite inhomogeneous plane-parallel atmospheres. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 27(2): 141-148.
- Garcia, R. D. M., and C. E. Siewert. 1982b. On angular flux computations in neutron-transport theory. Accepted for publication in *Nucl. Sci. Eng.*

- Garcia, R. D. M., and C. E. Siewert. 1982c. Multigroup transport theory with anisotropic scattering. Accepted for publication in *J. Comput. Phys.*
- Goldstein, H. 1959. *Fundamental Aspects of Reactor Shielding*. Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts.
- Grandjean, P., and C. E. Siewert. 1979. The F_N method in neutron-transport theory. Part II: Applications and numerical results. *Nucl. Sci. Eng.* 69(2): 161-168.
- Heney, L. G., and J. L. Greenstein. 1941. Diffuse radiation in the galaxy. *Astrophys. J.* 93(1): 70-83.
- Inönü, E. 1970. Orthogonality of a set of polynomials encountered in neutron-transport and radiative-transfer theories. *J. Math. Phys. (N.Y.)* 11(2): 568-577.
- Klein, O., and Y. Nishina. 1929. Über die Streuung von Strahlung durch freie Elektronen nach der neuen relativistischen Quantendynamik von Dirac. *Z. Phys.* 52: 853-868.
- Larsen, E. W., and P. F. Zweifel. 1976. Explicit matrix Wiener-Hopf factorizations. *SIAM J. Appl. Math.* 30(4): 732-738.
- Leonard, A., and J. H. Ferziger. 1966a. Energy-dependent neutron transport theory in plane geometry. II. Eigenfunctions and full-range completeness. *Nucl. Sci. Eng.* 26(2): 170-180.
- Leonard, A., and J. H. Ferziger. 1966b. Energy-dependent neutron transport theory in plane geometry. III. Half-range completeness and half-space problems. *Nucl. Sci. Eng.* 26(2): 181-191.
- Leuthäuser, K. -D. 1971. Transport theoretical multigroup slowing-down. *Atomkernenergie* 18(1): 11-19.
- Loyalka, S., C. E. Siewert, and J. R. Thomas, Jr. 1982. An approximate solution concerning strong evaporation into a half-space. *Z. Angew. Math. Phys.* (in press).
- Maiorino, J. R., and C. E. Siewert. 1980. The F_N method for polarization studies--II. Numerical results. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 24(2): 159-165.
- Mandl, M. E. 1953. The spherical harmonics method in plane and spherically symmetric geometry in multi-velocity-group theory, and its application in the two-velocity-group P_3 approximation. AERE T/R 1295. Atomic Energy Research Establishment, Harwell. Ministry of Supply, Harwell, Berks.

- Mark, J. C. 1944. The spherical harmonic method I. MT-92. Montreal Laboratory, Atomic Energy Project, National Research Council of Canada, Ottawa.
- Mark, J. C. 1945. The spherical harmonic method II. MT-97. Montreal Laboratory, Atomic Energy Project, National Research Council of Canada, Ottawa.
- Marshak, R. E. 1947. Note on the spherical harmonic method as applied to the Milne problem for a sphere. *Phys. Rev.* 71(7): 443-446.
- McCormick, N. J., and I. Kuščer. 1973. Singular eigenfunction expansions in neutron transport theory. *Adv. Nucl. Sci. Tech.* 7: 181-282.
- Metcalf, D. R., and P. F. Zweifel. 1968a. Solution of the two-group neutron transport equation-I. *Nucl. Sci. Eng.* 33(3): 307-317.
- Metcalf, D. R., and P. F. Zweifel. 1968b. Solution of the two-group neutron transport equation-II. *Nucl. Sci. Eng.* 33(3): 318-326.
- Mika, J. R. 1961. Neutron transport with anisotropic scattering. *Nucl. Sci. Eng.* 11(4): 415-427.
- Miller, J. C. P. 1952. in British Association for the Advancement of Science, Bessel Functions, Part II. Functions of Integer Order, Mathematical Tables, Vol. X. Cambridge University Press, Cambridge.
- Mullikin, T. W., and C. E. Siewert. 1980. Radiative transfer in inhomogeneous atmospheres. *Ann. Nucl. Energy* 7(4/5): 205-211.
- Muskhelishvili, N. I. 1953. Singular Integral Equations. P. Noordhoff, Groningen, Holland.
- Pahor, S., and J. K. Shultis. 1969a. Half-space general multigroup transport theory. *J. Nucl. Energy* 23(8): 477-493.
- Pahor, S., and J. K. Shultis. 1969b. Half-space multigroup transport theory. *J. Math. Phys. (N.Y.)* 10(12): 2220-2226.
- Reith, R. J., Jr., and C. E. Siewert. 1972. Two-group neutron transport theory with anisotropic scattering. *Nucl. Sci. Eng.* 47(1): 156-162.
- Renken, J. H. 1981. Private communication. Sandia Laboratories, Albuquerque, New Mexico.

- Renken, J. H., and K. G. Adams. 1969. An improved capability for solution of photon transport problems by the method of discrete ordinates. SC-RR-69-739. Sandia Laboratories, Albuquerque, New Mexico. Clearinghouse for Federal Scientific and Technical Information, National Bureau of Standards, U.S. Department of Commerce, Springfield, Virginia.
- Sanchez, R., and N. J. McCormick. 1981. A review of neutron transport numerical methods. Submitted for publication in Nucl. Sci. Eng.
- Shultis, J. K. 1969. Anisotropic multigroup transport theory. Nucl. Sci. Eng. 38(2): 83-93.
- Siewert, C. E. 1975. On particular solutions of the equation of transfer. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 15(9): 851-853.
- Siewert, C. E. 1978. The F_N method for solving radiative-transfer problems in plane geometry. Astrophys. Space Sci. 58(1): 131-137.
- Siewert, C. E. 1979. On using the F_N method for polarization studies in plane-parallel atmospheres. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 21(1): 35-39.
- Siewert, C. E. 1980. On computing eigenvalues in radiative transfer. J. Math. Phys. (N.Y.) 21(9):2468-2470.
- Siewert, C. E., and P. Benoist. 1979. The F_N method in neutron-transport theory. Part I: Theory and applications. Nucl. Sci. Eng. 69(2): 155-160.
- Siewert, C. E., and P. Benoist. 1981. Multigroup transport theory. I. Basic analysis. Nucl. Sci. Eng. 78(4): 311-314.
- Siewert, C. E., E. E. Burniston, and J. T. Kriese. 1972. Two-group neutron-transport theory: existence and uniqueness of the H-matrix. J. Nucl. Energy 26(9): 469-482.
- Siewert, C. E., R. D. M. Garcia, and P. Grandjean. 1980. A concise and accurate solution for Poiseuille flow in a plane channel. J. Math. Phys. (N.Y.) 21(12): 2760-2763.
- Siewert, C. E., and P. Grandjean. 1979. Three basic neutron-transport problems in spherical geometry. Nucl. Sci. Eng. 70(1): 96-98.
- Siewert, C. E., and Y. Ishiguro. 1972. Two-group neutron-transport theory: Half-range orthogonality, normalization integrals, applications and computations. J. Nucl. Energy 26(5): 251-269.

- Siewert, C. E., J. R. Maiorino, and M. N. Özisik. 1980. The use of the F_N method for radiative transfer problems with reflective boundary conditions. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 23(6): 565-573.
- Siewert, C. E., and P. S. Shieh. 1967. Two-group transport theory. *J. Nucl. Energy* 21(5): 383-392.
- Silvennoinen, P., and P. F. Zweifel. 1972. On multigroup transport theory with a degenerate transfer kernel. *J. Math. Phys. (N.Y.)* 13(8): 1114-1117.
- Sloan, I. H., and B. J. Burn. 1979. Collocation with polynomials for integral equations of the second kind: A new approach to the theory. *J. Integral Equations* 1(1): 77-94.
- Wick, G. C. 1943. Über ebene Diffusionsprobleme. *Z. Phys.* 121(11-12): 702-718.
- Williams, M. M. R. 1971. *Mathematical Methods in Particle Transport Theory*. Wiley-Interscience, New York.
- Yoshimura, T., and S. Katsuragi. 1968. Multigroup treatment of neutron transport in plane geometry. *Nucl. Sci. Eng.* 33(3): 297-302.
- Želazny, R., and A. Kuzell. 1961. Two-group approach in neutron transport theory in plane geometry. *Ann. Phys. (N.Y.)* 16(1): 81-85.
- Zumbrunn, K. 1965. Exakte und angenäherte Lösungen der Mehrgruppen-Transportgleichung in ebener Geometrie. EIR-72. Eidg. Institute für Reactorforschung, Würenlingen, Switzerland.