



Calcul de Sensibilités et prise en compte des Incertitudes sur les données dans les calculs d'Activation

Julien CARTIER

CEA/DIF

Jeudi 4 Octobre 2007

Plan de l'exposé



Introduction

1. Problème modèle
2. Calcul des sensibilités
 - (a) La méthode **directe**.
 - (b) La méthode **adjointe**.
3. Traitement des incertitudes dans les calculs d'Activation
 - (a) Les matrices de **covariance**.
 - (b) Calcul des **incertitudes**.
4. Tests numériques.

Conclusion et Perspectives

Introduction et motivations



- De plus en plus de données de **covariances** accompagnent les évaluations sur les sections efficaces,
- des méthodes de calcul **efficaces** existent pour traiter les sensibilités,
 - implanter le calcul des **sensibilités** dans un code d'activation en utilisant une méthode adjointe,
 - comparer les résultats obtenus avec ceux du code d'activation **FISPACT**,
- pouvoir connaître l'**influence** sur la solution de chacun des paramètres d'un problème,
- répercuter les incertitudes des données sur la solution (**barre d'erreur** sur la solution déduite des incertitudes sur les données).

Problème modèle : équations d'évolution



- On s'intéresse au système d'équations d'évolution suivant :

$$\frac{dN}{dt} = AN = (\Lambda + M) N,$$

- N est le vecteur des nombres d'atomes et $N(t = 0) = N_0$,
- $\Lambda_{ij} = \lambda_{j \rightarrow i} - \delta_{i,j} \lambda_i$ où $\lambda_i = \sum_{i \neq j} \lambda_{i \rightarrow j} = \log(2) T_{i, \frac{1}{2}}^{-1}$,
- $T_{i, \frac{1}{2}}$ est le temps de demi vie de l'espèce i et $\lambda_{j \rightarrow i}$ est la constante de décroissance partielle de l'espèce j vers l'espèce i ,
- $M_{ij} = \sum_p \Phi^{(p)} \left(\tilde{\sigma}_{j \rightarrow i}^{(p)} - \delta_{i,j} \sum_k \tilde{\sigma}_{i \rightarrow k}^{(p)} \right)$,
- $\Phi^{(p)}$ représente la fluence totale et $\tilde{\sigma}_{j \rightarrow i}^{(p)}$ représente les sections efficaces effectives :

$$\tilde{\sigma}_{j \rightarrow i}^{(p)} = \int_0^{+\infty} s^{(p)}(E) \sigma_{j \rightarrow i}^{(p)}(E) dE.$$

Les observables et les sensibilités



- Un observable R peut être soit un **nombre d'atomes**, une **activité** (λN), ou plus généralement toute fonction dépendant du nombre d'atomes,
- la **sensibilité** d'un observable à un paramètre x_j du problème est définie par :

$$S(R; x_j) = \frac{\partial R}{\partial x_j} \frac{x_j}{R},$$

- il existe plusieurs méthodes de calcul des sensibilités : les méthodes déterministes et stochastiques. On s'intéresse ici aux méthodes déterministes :
 - la méthode directe,
 - la méthode adjointe.

La méthode directe



Cette méthode a été proposée et présentée notamment par [A.Khursheed](#) et est utilisée dans les codes (UKAEA Fusion). Cette méthode consiste à calculer le gradient du nombre d'atomes N par rapport aux paramètres x_j en résolvant d'abord le problème d'évolution standard :

$$\frac{dN}{dt} = AN, \quad N(0) = N_0,$$

puis en calculant $\frac{\partial N}{\partial x_j}$ à l'aide du problème suivant :

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{dN}{dt} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} (AN), \quad \text{soit} \quad \frac{dU}{dt} = AU + \frac{\partial A}{\partial x_j} N,$$

où $U = \frac{\partial N}{\partial x_j}$ et en supposant que $\frac{\partial N}{\partial x_j}(0) = 0$. On calcule ensuite $\frac{\partial R}{\partial x_j}$ à partir de $\frac{\partial N}{\partial x_j}$. On est donc amené à résoudre autant de problèmes d'évolution qu'il y a de paramètres x_j . Le même solveur numérique peut être utilisé pour résoudre tous ces problèmes.

La méthode adjointe

Cette méthode est présentée par [Cacuci et al.](#) et a été proposée pour notre problème par [R.Sentis](#). On résout successivement sur $[0, T]$:



$$\frac{dN}{dt} = AN, \quad N(0) = N_0, \quad \text{et} \quad \frac{d\Psi}{dt} = -A^* \Psi,$$

où $\Psi(T)$ est à choisir en **fonction de la nature de l'observable $R(T)$** de sorte à pouvoir calculer simplement pour chaque paramètre x_j :

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial x_j}(T) &= \left\langle \Psi(T), \frac{\partial N}{\partial x_j}(T) \right\rangle = \int_0^T \frac{d}{dt} \left\langle \Psi(t), \frac{\partial N}{\partial x_j}(t) \right\rangle dt \\ &= \int_0^T \left(\left\langle \frac{d}{dt} \Psi(t), \frac{\partial N}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \Psi(t), \frac{d}{dt} \frac{\partial N}{\partial x_j} \right\rangle \right) dt \\ &= \int_0^T \left(\left\langle -A^* \Psi(t), \frac{\partial N}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \Psi(t), A \frac{\partial N}{\partial x_j} \right\rangle + \left\langle \Psi(t), \frac{\partial A}{\partial x_j} N \right\rangle \right) dt \\ &= \int_0^T \left\langle \Psi(t), \frac{\partial A}{\partial x_j} N(t) \right\rangle dt. \end{aligned}$$

Contrairement à la méthode directe, nous n'avons que deux problèmes d'évolution à résoudre avec la méthode adjointe !

Un mot sur le code TRACT

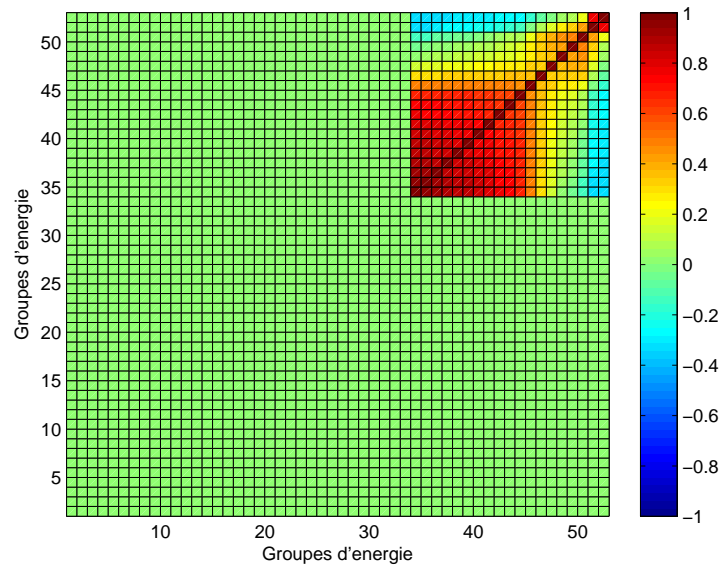


- C'est dans le code **TRACT** qu'on a implanté la méthode adjointe du calcul des sensibilités,
- Le code **TRACT** permet :
 - de résoudre les équations d'**activation**, de calculer l'évolution du nombre d'atomes en fonction de la fluence neutronique moyenne du milieu,
 - de calculer des **sensibilités** aux sections efficaces et aux constantes de désintégration en utilisant une méthode adjointe,
 - de prendre en compte des **incertitudes** sur les sections efficaces via des matrices de covariances.

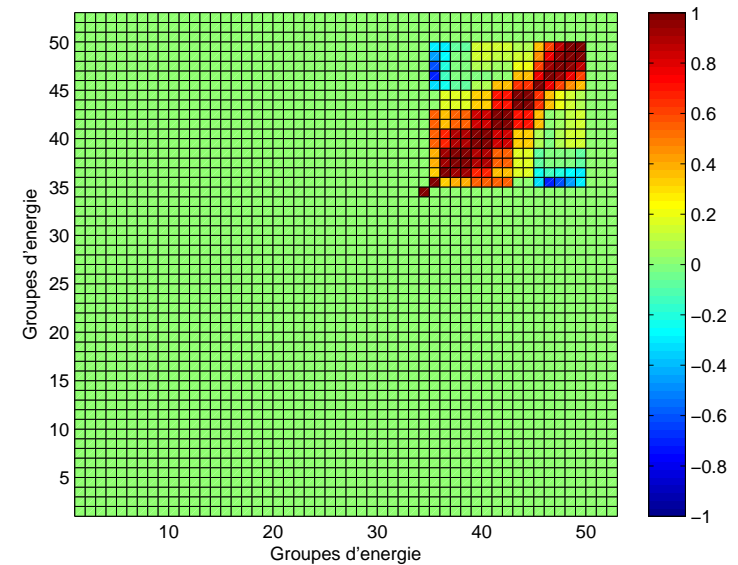
Les matrices de covariance



- Les matrices de covariance contiennent toutes l'information sur les incertitudes aux données (relecture avec les codes NJOY, ZADIG, ERRORJ, etc...),
- Un exemple : comparaison des matrices de corrélation de BRC6 (E.Bauge, P.Dos Santos-Uzarralde, S.Hillaire CEA/DIF/DPTA) et ENDF-B7 (Chadwick et al.) de la réaction $(n, 2n)$ sur ^{89}Y :



Matrice BRC6



Matrice ENDF-B7

Prise en compte des incertitudes



- Pour répercuter les incertitudes issues des matrices de covariance sur un observable R , on cherche à calculer la variance $V(R)$:

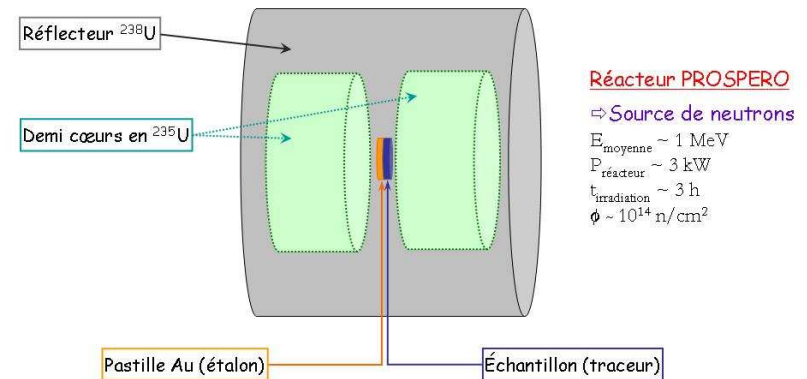
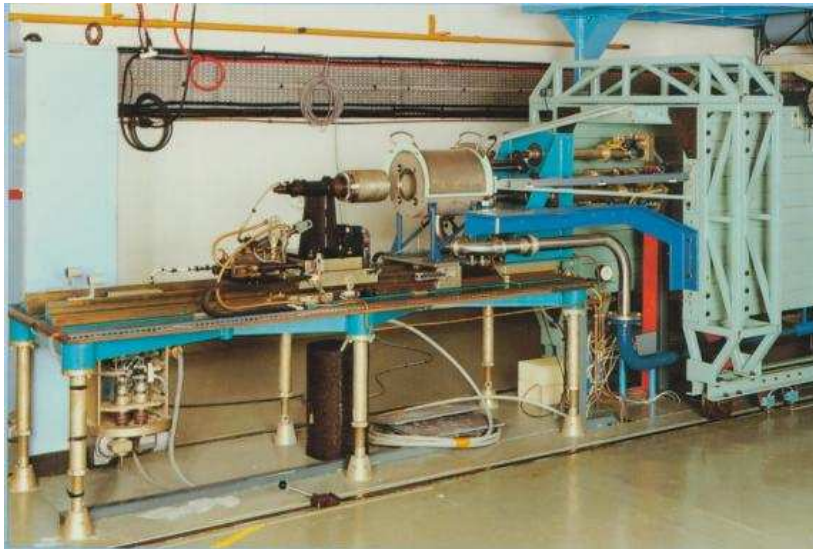
$$V(R) = \sum_{i,j} \frac{\partial R}{\partial x_i} \frac{\partial R}{\partial x_j} \text{cov}(x_i, x_j),$$

- le terme $\frac{\partial R}{\partial x_i}$ est un terme de sensibilité, le terme $\text{cov}(x_i, x_j)$ représente la covariance de x_i et x_j .

Application : irradiations PROSPERO



- PROSPERO est un petit réacteur d'étude du CEA Valduc,
- Irradiation pendant 3h de pastilles d'Yttrium et d'Or à l'aide du réacteur,
- Mesures d'activités par spectrométrie gamma.



Comparaisons avec le code FISPACT



- Simulation numérique de l'irradiation de l'Yttrium avec les codes TRACT et FISPACT, fluence neutronique du réacteur calculée au préalable avec le code de transport **PANDA** (P.Humbert),
- Calcul des sensibilités aux sections efficaces pour les observables ^{88}Y , $^{89\text{M}}\text{Y}$ et ^{90}Y , comparaisons entre TRACT et FISPACT :

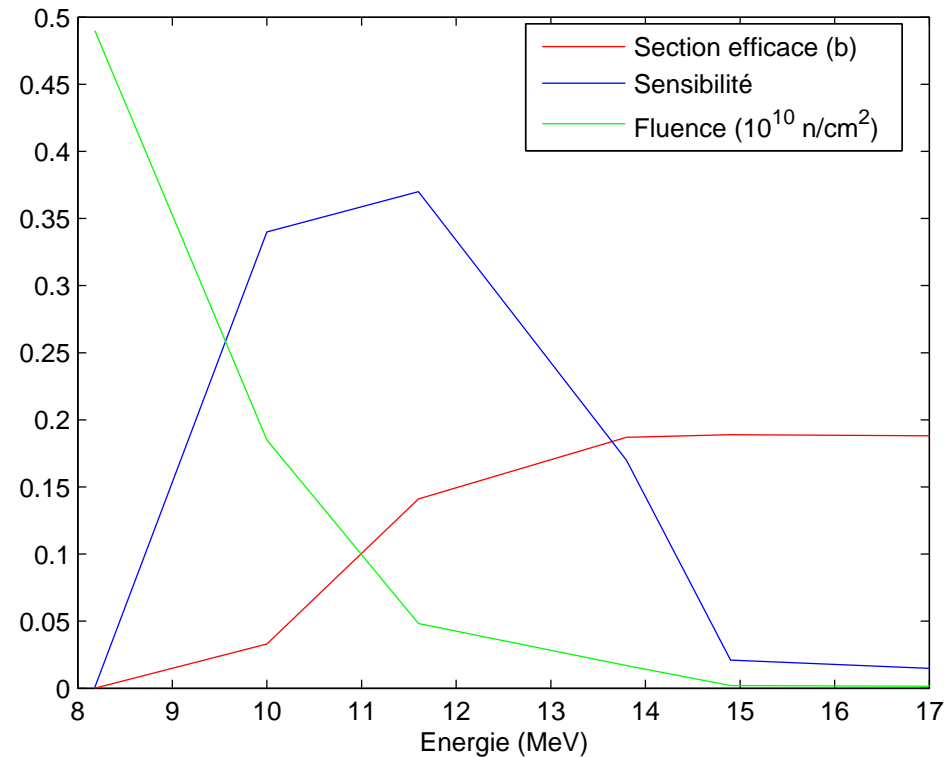
Réaction	Sensibilité TRACT			Sensibilité FISPACT		
	^{88}Y	$^{89\text{M}}\text{Y}$	^{90}Y	^{88}Y	$^{89\text{M}}\text{Y}$	^{90}Y
$(n, 2n)$	1	$\sim 10^{-13}$	$\sim 10^{-13}$	1	$\sim 10^{-13}$	$\sim 10^{-13}$
(n, γ)	$\sim 10^{-11}$	$\sim 10^{-11}$	0,984	$\sim 10^{-11}$	$\sim 10^{-11}$	0,988
(n, n')	$\sim 10^{-10}$	0,41	$\sim 10^{-10}$	$\sim 10^{-10}$	0,41	$\sim 10^{-10}$
(n, p)	$\sim 10^{-13}$	$\sim 10^{-13}$	$\sim 10^{-13}$	$\sim 10^{-13}$	$\sim 10^{-13}$	$\sim 10^{-13}$
(n, α)	$\sim 10^{-15}$	$\sim 10^{-15}$	$\sim 10^{-15}$	$\sim 10^{-14}$	$\sim 10^{-14}$	$\sim 10^{-14}$
$(n, 3n)$	0	0	0	0	0	0

- les résultats sont cohérents.

Sensibilités de l' ^{196G}Au



- On irradie une pastille d'Or pendant 3 heures à l'aide du réacteur PROSPERO,
- Sensibilités de l' ^{196G}Au à la réaction $^{197G}Au(n, 2n)^{196G}Au$ en fonction de l'énergie :



Un calcul d'incertitudes



- Irradiation pendant 3h d'une pastille d' ^{89}Y à l'aide du réacteur PROSPERO, exploitation des données de covariances BRC6 et ENDF-B7,
- Comparaison calcul-expérience (53 groupes d'énergie pour BRC6 et ENDF-B7, 172 pour EAF-2007 dans FISPACT),

Corps	BRC6		ENDF-B7		Mesure	
	activité	incertitude	activité	incertitude	activité	incertitude
$^{88}\text{Y} (Bq)$	453	6, 31%	488	3, 87%	359	3, 6%

Corps	BRC6		ENDF-B7		FISPACT	
	activité	incertitude	activité	incertitude	activité	incertitude
$^{89M}\text{Y} (\times 10^8 Bq)$	7, 75	5, 37%	7, 62	18, 73%	8, 24	15%
$^{90}\text{Y} (\times 10^6 Bq)$	1, 370	36, 10%	0, 896	3, 73%	1, 455	48, 34%

Conclusion et Perspectives



- On a implanté une technique de calcul des sensibilités basée sur la méthode adjointe dans le code d'activation **TRACT**,
- La méthode de calcul des sensibilités par l'état adjoint donne **satisfaction**, elle donne des résultats comparables à la méthode directe (en comparaison avec le code FISPACT) avec une meilleure **efficacité en temps de calcul**,
- on utilise les sensibilités pour pouvoir :
 - **classer** les réactions par ordre d'importance,
 - répercuter les **incertitudes** dues aux sections efficaces sur les solutions de problèmes d'activation,
- on envisage de traiter de futures données de covariances et d'utiliser la méthode dans des calculs plus complexes.