Elargissement Doppler au vol des sections efficaces nucléaires : la méthode multipole

sous la direction de A. ZOIA et la supervision de FX. HUGOT

Thomas FREIMAN

CEA/DEN SERMA

MaNu 30/11/2017

Sommaire

1. Contexte
2. Représentation multipole : résonances non-interférentes
3. Représentation multipole : formalisme complet

I. Contexte - Équation du transport neutronique

Équation du transport neutronique stationnaire :

$$\left(\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \Sigma_t\left(\mathbf{r}, E\right)\right) \phi\left(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E\right) =$$

$$\int_0^\infty dE' \int_{\mathcal{S}} d\boldsymbol{\Omega}' \Sigma_s\left(\mathbf{r}, E'\right) f\left(\boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E\right) \phi\left(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E'\right)$$

$$+\frac{\chi(E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \int_{\mathcal{S}} d\boldsymbol{\Omega}' \nu(E') \Sigma_f\left(\mathbf{r}, E'\right) \phi\left(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E'\right) + Q\left(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E\right)$$

I. Contexte - Équation du transport neutronique

Équation du transport neutronique stationnaire :

$$
\begin{aligned}
&(\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \Sigma_t(\mathbf{r}, E))\, \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) = \\
&\int_0^{\infty} dE' \int_{\mathcal{S}} d\boldsymbol{\Omega}' \Sigma_s(\mathbf{r}, E') f(\boldsymbol{\Omega}' \to \boldsymbol{\Omega}, E' \to E)\, \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E') \\
&+ \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_0^{\infty} dE' \int_{\mathcal{S}} d\boldsymbol{\Omega}' \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E') \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E') + Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E)
\end{aligned}
$$

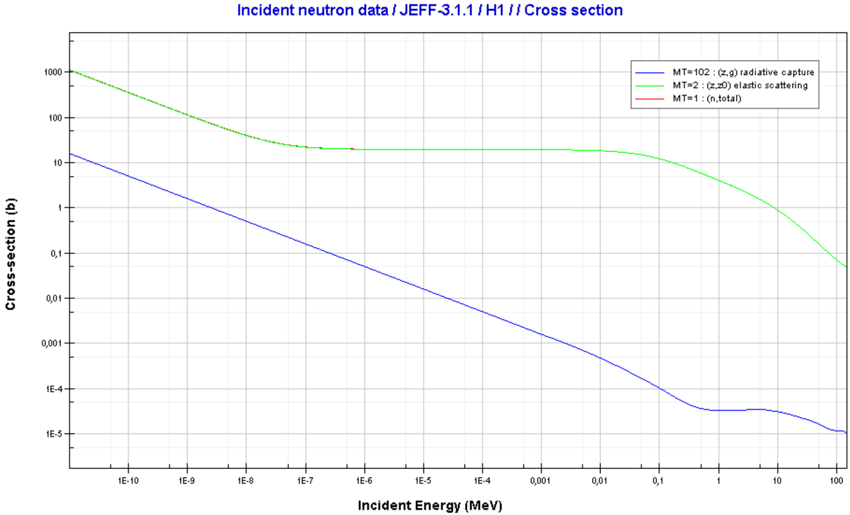
I. Contexte - Sections efficaces nucléaires

Pour une réaction x donnée,

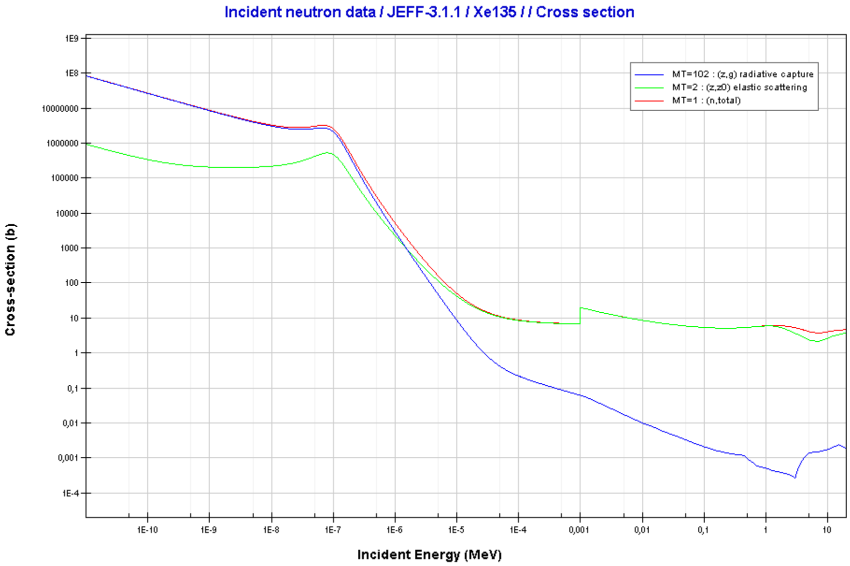
$$\Sigma_x(\mathbf{r}, E) = \sum_k N_k(\mathbf{r})\sigma_x^k(E),$$

E l'énergie du neutron incident
N_k concentration volumique du nucléide indicé k
σ_x^k la section efficace microscopique du nucléide k pour la réaction x

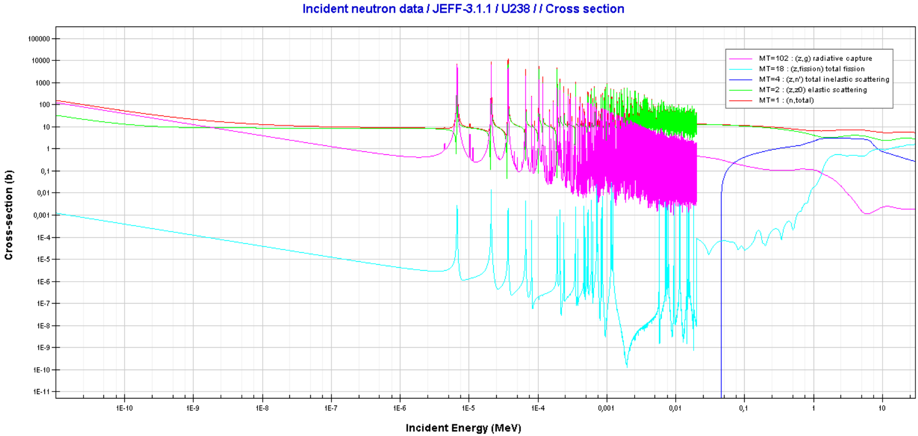
I. Contexte - Sections efficaces nucléaires



I. Contexte - Sections efficaces nucléaires



I. Contexte - Sections efficaces nucléaires



I. Contexte - Sections efficaces nucléaires

Pour une réaction x donnée ayant lieu à $\mathbf{r}$,

$$\Sigma_x(\mathbf{r}, E) = \sum_k N_k(\mathbf{r})\sigma_x^k(E)$$

En réalité, dépendance en température des sections efficaces,

$$\sigma_x^k(E, T) = \int_0^{+\infty} \sigma_x^k(E', 0\mathrm{K}) \cdot S(E, E', T)dE'$$

$S(E', E, T) \propto \sqrt{E'} \left(\exp\left(\frac{(\sqrt{E'}-\sqrt{E})^2}{kT}\right) + \exp\left(\frac{(\sqrt{E'}+\sqrt{E})^2}{kT}\right)\right)$
est appelé Solbrig Kernel

I. Contexte - Sections efficaces nucléaires

ODG calcul couplage neutronique - thermo-hydraulique :

  300 isotopes

$\times$ 10^4 points en énergie

$\times$ 100 températures

$\times$ 4 bytes/float

$=$ 1.2 Go de mémoire vive juste pour les sections partielles principales.

I. Contexte - Sections efficaces nucléaires

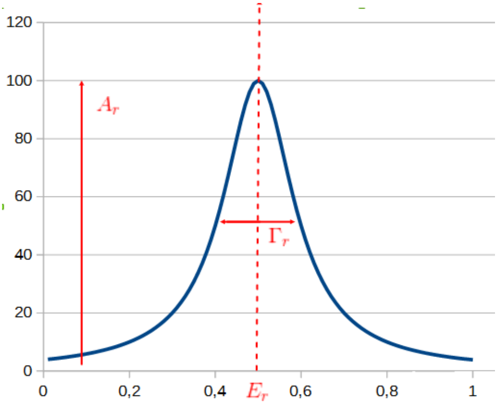
ODG calcul couplage neutronique - thermo-hydraulique :
300 isotopes
$\times$ 10^4 points en énergie
$\times$ 100 températures
$\times$ 4 bytes/float
$=$ 1.2 Go de mémoire vive juste pour les sections partielles principales.

La mémoire vive est un facteur critique dans les simulations Monte-Carlo sur des architectures de calcul parallèle.

I. Contexte - Méthode multipole

Une approximation usuelle des sections efficaces consiste à représenter une section comme somme de Lorentzienne pour chaque résonance,

$$\sigma_x(E, 0\text{K}) \propto \frac{1}{\sqrt{E}} \sum_r \frac{A_r (\Gamma_r/2)^2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma_r/2)^2}$$



II. Représentation multipole : résonances non-interférentes - Formules

L'approximation usuelle des sections efficaces présentée avant donne :

$$\sigma_x(E, 0\text{K}) \propto \frac{1}{\sqrt{E}} \sum_r \frac{A_r(\Gamma_r/2)^2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma_r/2)^2}$$

On pose $u = \sqrt{E}$.

II. Représentation multipole : résonances non-interférentes - Formules

L'approximation usuelle des sections efficaces présentée avant donne :

$$\sigma_x(E, 0\mathrm{K}) \propto \frac{1}{\sqrt{E}} \sum_r \frac{A_r(\Gamma_r/2)^2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma_r/2)^2}$$

On pose $u = \sqrt{E}$.
Formule moins approximée utilisée dans les expérimentations : :

$$\sigma_x(u, 0\mathrm{K}) \propto \frac{1}{u} \Re \left[\sum_r \frac{n_r(u)}{u^2 - u_r^2 + \frac{p_r(u)}{q_r(u)}} \right]$$

avec n_r, p_r et q_r des polynômes en u (de faible degré)

II. Représentation multipole : résonances non-interférentes - Formules

$$\sigma_x(u, 0\mathrm{K}) \propto \frac{1}{u}\Re\left[\sum_r \frac{n_r(u)}{u^2 - u_r^2 + \frac{p_r(u)}{q_r(u)}}\right]$$

II. Représentation multipole : résonances non-interférentes - Formules

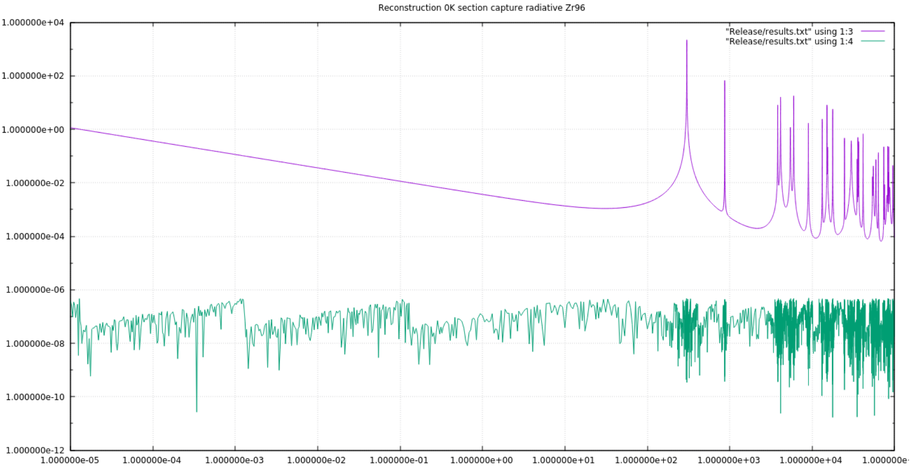
$$\sigma_x(u, 0\mathrm{K}) \propto \frac{1}{u}\Re\left[\sum_r \frac{n_r(u)}{u^2 - u_r^2 + \frac{p_r(u)}{q_r(u)}}\right]$$

devient,

$$\sigma_x(u, 0) \propto \frac{1}{u}\Re\left[\sum_r \frac{n_r(u)q_r(u)}{q_r(u)(u^2 - u_r^2) + p_r(u)}\right]$$

$\rightarrow$ Attention, p_r et q_r ne sont pas nécessairement premiers entre eux. Malgré tout, décomposition en éléments simples assez directe.

II. Représentation multipole : résonances non-interférentes - Résultat



III. Représentation multipole : formalisme complet - Cas simple d'un matériau non fissile

Sans interférences,

$$\sigma_x(u, 0\mathrm{K}) = \frac{1}{u}\Re\left[\sum_k \frac{c_k}{u - x_k}\right]$$

Avec interférences mais pas de fission,

$$\sigma_x(u, 0\mathrm{K}) = \frac{1}{u}\Re\left[1 - \frac{1 + \sum_k \frac{a_k}{u - x_k}}{1 + \sum_k \frac{b_k}{u - x_k}}\right]$$

III. Représentation multipole : formalisme complet - Cas simple d'un matériau non fissile

$$\sigma_x(u, 0\mathrm{K}) = \frac{1}{u}\Re\left[1 - \frac{1 + \sum_k \frac{a_k}{u - x_k}}{1 + \sum_k \frac{b_k}{u - x_k}}\right]$$

On pose $Q = \prod_k (u - x_k)$ et $Q_k = \prod_{l \neq k} (u - x_l)$

III. Représentation multipole : formalisme complet - Cas simple d'un matériau non fissile

$$\sigma_x(u, 0\mathrm{K}) = \frac{1}{u}\Re\left[1 - \frac{1+\sum_k \frac{a_k}{u-x_k}}{1+\sum_k \frac{b_k}{u-x_k}}\right]$$

On pose $Q = \prod_k (u - x_k)$ et $Q_k = \prod_{l \neq k}(u - x_l)$

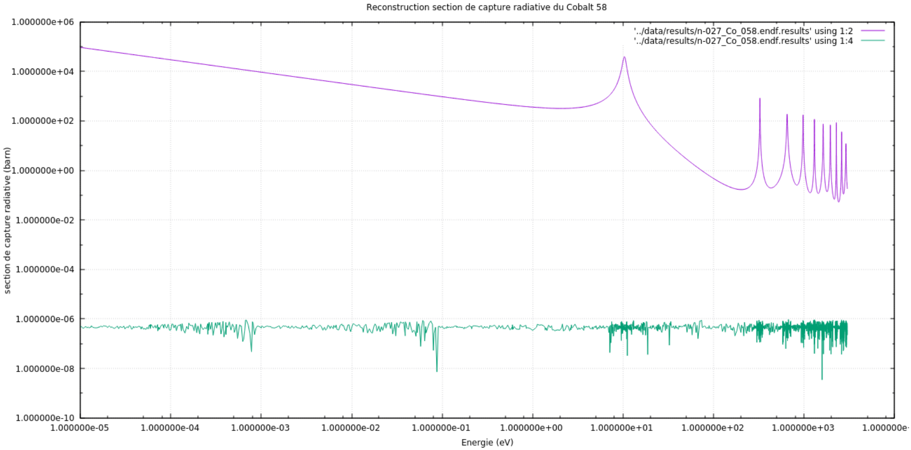
$$1 - \frac{1+\sum_k \frac{a_k}{u-x_k}}{1+\sum_k \frac{b_k}{u-x_k}} = 1 - \frac{Q + \sum_k a_k Q_k}{Q + \sum_k b_k Q_k} = \frac{\sum_k (a_k - b_k) Q_k}{Q + \sum_k b_k Q_k}$$

Trouvons les racines avec un algorithme de Newton-Rhapson,

$$\frac{Q+\sum_k b_k Q_k}{(Q+\sum_k b_k Q_k)'} = \frac{Q\left(1+\sum_k \frac{b_k}{u-x_k}\right)}{Q'\left(1+\sum_k \frac{b_k}{u-x_k}\right) - Q\sum_k \frac{b_k}{(u-x_k)^2}}$$

$$= \frac{1}{\frac{Q'}{Q} - \sum_k \frac{b_k}{(u-x_k)^2} / \left(1+\sum_k \frac{b_k}{u-x_k}\right)}$$

Représentation multipole : formalisme complet - Cas simple d'un matériau non fissile



III. Représentation multipole : formalisme complet - Cas complexe d'un matériau fissile

Cas simple d'un matériau non fissile,

$$\sigma_x(u, 0\mathrm{K}) = \frac{1}{u}\Re\left[1 - \frac{1 + \sum_k \frac{a_k}{u - x_k}}{1 + \sum_k \frac{b_k}{u - x_k}}\right]$$

Cas complexe d'un matériau fissile,

$$\underline{\underline{\sigma}}(u, 0\mathrm{K}) = \frac{1}{u}\Re\left[\underline{\underline{Id}} - \left(\underline{\underline{Id}} + \underline{\underline{M}}(u)\right)^{-1}\right]$$

III. Représentation multipole : formalisme complet - Cas complexe d'un matériau fissile

Cas complexe d'un matériau fissile,

$$\underline{\underline{\sigma}}(u,0) = \frac{1}{u}\Re\left[\underline{\underline{Id}} - \left(\underline{\underline{Id}} + \underline{\underline{M}}(u)\right)^{-1}\right]$$

$$M(u) = \begin{pmatrix} \sum_k \frac{a_k a_k}{u - x_k} & \sum_k \frac{a_k b_k}{u - x_k} & \sum_k \frac{a_k c_k}{u - x_k} \\ \sum_k \frac{b_k a_k}{u - x_k} & \sum_k \frac{b_k b_k}{u - x_k} & \sum_k \frac{b_k c_k}{u - x_k} \\ \sum_k \frac{c_k a_k}{u - x_k} & \sum_k \frac{c_k b_k}{u - x_k} & \sum_k \frac{c_k c_k}{u - x_k} \end{pmatrix}$$

III. Représentation multipole : formalisme complet - Cas complexe d'un matériau fissile

...

III. Représentation multipole : formalisme complet - Cas complexe d'un matériau fissile

...

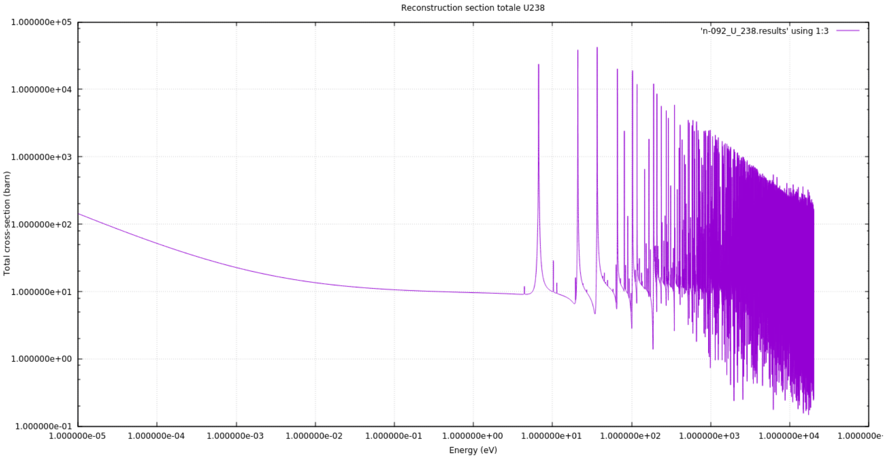
$$\sigma_{11}(u,0\mathrm{K}) = \frac{1}{u}\Re\left[1 - \frac{\begin{vmatrix} 1+\sum_k \frac{b_k b_k}{u-x_k} & \sum_k \frac{b_k c_k}{u-x_k} \\ \sum_k \frac{c_k b_k}{u-x_k} & 1+\sum_k \frac{c_k c_k}{u-x_k} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1+\sum_k \frac{a_k a_k}{u-x_k} & \sum_k \frac{a_k b_k}{u-x_k} & \sum_k \frac{a_k c_k}{u-x_k} \\ \sum_k \frac{b_k a_k}{u-x_k} & 1+\sum_k \frac{b_k b_k}{u-x_k} & \sum_k \frac{b_k c_k}{u-x_k} \\ \sum_k \frac{c_k a_k}{u-x_k} & \sum_k \frac{c_k b_k}{u-x_k} & 1+\sum_k \frac{c_k c_k}{u-x_k} \end{vmatrix}}\right]$$

III. Représentation multipole : formalisme complet - Cas complexe

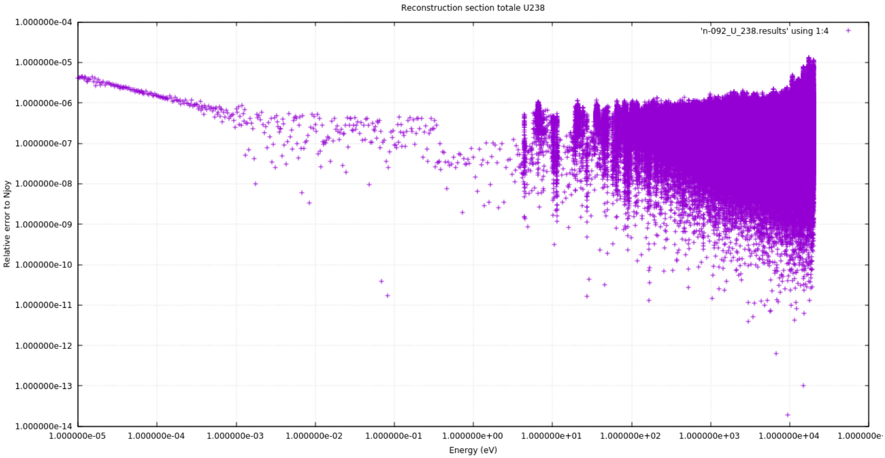
Nous avons montré qu'on peut se ramener au cas simple non fissile,

$$\sigma_x(u, 0\mathrm{K}) = \frac{1}{u}\Re\left[1 - \frac{1 + \sum_k \frac{\alpha_k}{u - x_k}}{1 + \sum_k \frac{\beta_k}{u - x_k}}\right]$$

III. Représentation multipole : formalisme complet - Victoire !



III. Représentation multipole : formalisme complet - Victoire !



Conclusion et perspectives

- L'élargissement Doppler au vol n'est pas si trivial : optimisation par la vectorisation et/ou le parallélisme à étudier en détail.

Conclusion et perspectives

- L'élargissement Doppler au vol n'est pas si trivial : optimisation par la vectorisation et/ou le parallélisme à étudier en détail.
- Nous avons montré que la représentation multipole est possible dans le cas le plus complexe actuellement (formalisme avec résonances interférentes pour un matériau fissile) et peut s'étendre naturellement aux formalismes à venir.

Conclusion et perspectives

- L'élargissement Doppler au vol n'est pas si trivial : optimisation par la vectorisation et/ou le parallélisme à étudier en détail.
- Nous avons montré que la représentation multipole est possible dans le cas le plus complexe actuellement (formalisme avec résonances interférentes pour un matériau fissile) et peut s'étendre naturellement aux formalismes à venir.
- Merci de votre attention !