



POLYTECHNIQUE
MONTRÉAL

Production de sections efficaces électroatomiques multigroupes

A. Hébert

2021/07/15

Table des matières

Les interactions électroatomiques
Les interactions douces (soft)
La discrétisation multigroupe
Les collisions inélastiques
Les interactions bremsstrahlung
Les collisions élastiques
Les évaluations nucléaires
Le code de sections efficaces NJOY-2012
Les données EPICS2017
Revision de source UPD
Le système PyNjoy
Le code DRAGON5

Les interactions électroatomiques
Les interactions douces (soft)
La discrétisation multigroupe
Les collisions inélastiques
Les interactions bremsstrahlung
Les collisions élastiques
Les évaluations nucléaires
Le code de sections efficaces NJOY-2012
Les données EPICS2017
Revision de source UPD
Le système PyNjoy
Le code DRAGON5

Les interactions électroatomiques

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)
La discrétisation multigroupe
Les collisions inélastiques
Les interactions bremsstrahlung
Les collisions élastiques
Les évaluations nucléaires
Le code de sections efficaces NJOY-2012
Les données EPICS2017
Revision de source UPD
Le système PyNjoy
Le code DRAGON5

- Site Moodle
- Le but du projet de R&D en radiothérapie est de développer une **technique de calcul de dose** (RTP) en utilisant un solveur **Boltzmann-Fokker-Planck** (BFP) basé sur la méthode des ordonnées discrètes avec schéma diamant (DD) ou Galarkin discontinu (DG).
- La solution de l'équation BFP demande la connaissance de sections efficaces et de pouvoirs d'arrêt (stopping powers) macroscopiques **multigroupes**.
- Les applications en radiothérapie demandent des calculs couplés photon-électron. Nous limiterons cette présentations aux interactions **électroatomiques**.
- Nous considérons deux parours pour obtenir les sections efficaces et les pouvoirs d'arrêt macroscopiques:
 - ◆ le code CEPXS (1989), voie traditionnelle
 - ◆ le module `electr` du code NJOY (2021), voie proposée pour le futur
- Un calcul BFP multigroupe doit être **validé** par rapport à un calcul Monte Carlo (tel que MCNP5) utilisant les mêmes évaluations de sections efficaces et de pouvoirs d'arrêt.
- La même stratégie d'élaboration de **shémas de calculs** est proposée pour traiter les interactions électroatomiques que celle déjà utilisée pour les interactions nucléaires:
 - ◆ utilisation d'évaluations au format ENDF-102
 - ◆ traitement des évaluations par le code NJOY
 - ◆ solution de l'équation BFP multigroupe dans DRAGON5

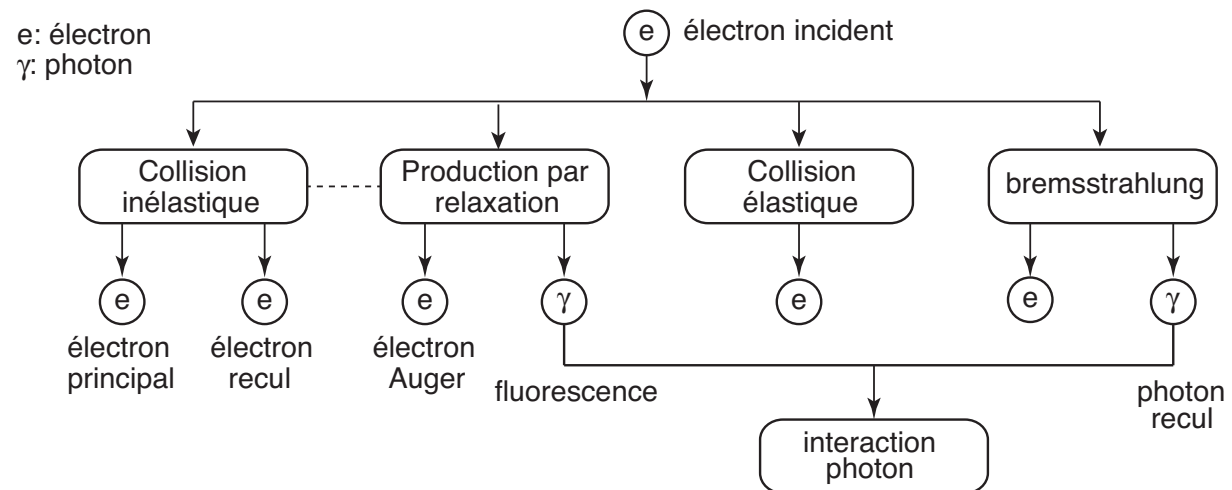
Les interactions électroatomiques

- Les interactions électroatomiques sont représentés dans le tableau suivant:

indice MT	Classe de données
525	collision élastique ($\mu < 0.999999$)
527	bremsstrahlung
534–572	collision inélastique et production par relaxation

- Si la particule incidente est un positron, il faut ajouter la réaction d'annihilation qui produit deux photons.
- L'interaction par excitation (MT=228) est une perte d'énergie sans déviation de l'électron). Elle n'est pas représentée car elle sera incluse dans le pouvoir d'arrêt (interaction douce).

Diagramme des interactions électroatomiques



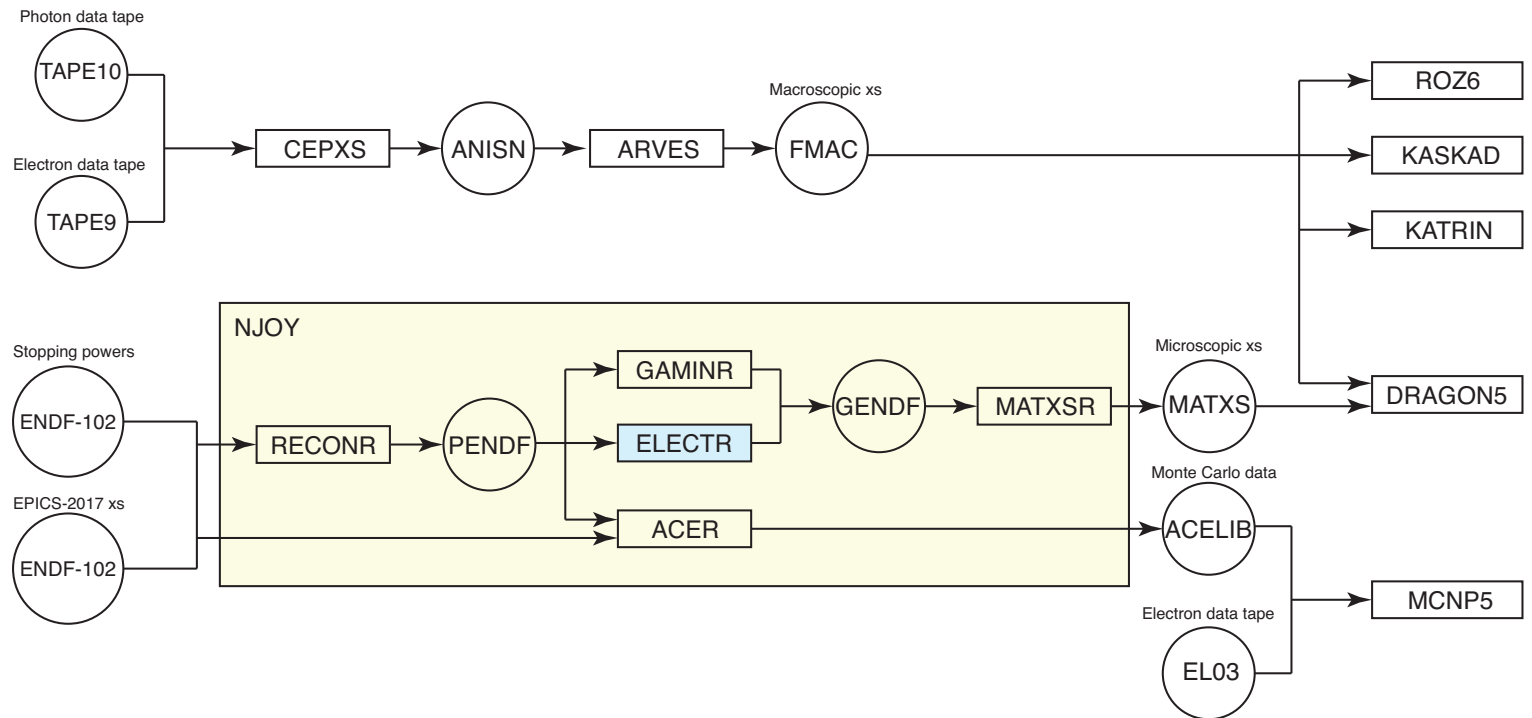
Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)
La discrétisation multigroupe
Les collisions inélastiques
Les interactions bremsstrahlung
Les collisions élastiques
Les évaluations nucléaires
Le code de sections efficaces NJOY-2012
Les données EPICS2017
Revision de source UPD
Le système PyNjoy
Le code DRAGON5

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)
 La discrétisation multigroupe
 Les collisions inélastiques
 Les interactions bremsstrahlung
 Les collisions élastiques
 Les évaluations nucléaires
 Le code de sections efficaces NJOY-2012
 Les données EPICS2017
 Revision de source UPD
 Le système PyNjoy
 Le code DRAGON5

Flot de données



- Le module ELECTR est un nouveau module développé dans l'environnement NJOY-2012 par Polytechnique Montréal

Les interactions douces (soft)

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- Les électrons perdent une petite quantité de leur énergie lors de chaque choc
 - ◆ Pour ralentir de 500 à 250 keV, un électron subira 4000 diffusions élastiques dans une feuille d'aluminium ($Z = 13$), contre 7000 dans une feuille d'or ($Z = 79$).
 - ◆ On utilise le modèle de ralentissement continu (CSDA) pour décrire un ralentissement de toutes les interactions dites **douces** (*soft* en anglais) impliquant des électrons secondaires d'énergie en dessous d'un seuil E_s .
- le modèle CSDA est basé sur la définition du *pouvoir d'arrêt* (*stopping power* en anglais).

pouvoir d'arrêt microscopique (MeV-barn)

$$s_i(E) = \int_{E_{\text{cut}}}^E dE' (E - E') \sigma_i(E \rightarrow E') \quad (1)$$

où $\sigma_i(E \rightarrow E')$ est la section efficace microscopique de scattering pour l'atome i et E_{cut} est un seuil d'intégration choisi de façon à éviter la divergence de l'intégrale.

pouvoir d'arrêt macroscopique (MeV/cm)

$$-\frac{dE}{dx} = S(E) = \left(\sum_i N_i s_i(E) \right) - \delta(E) \quad (2)$$

où N_i est la concentration atomique de l'atome i et $\delta(E)$ est une correction de densité macroscopique.

Les interactions douces (soft)

Les interactions
électroatomiques

Les interactions
douces (soft)

La discrétisation
multigroupe

Les collisions
inélastiques

Les interactions
bremsstrahlung

Les collisions
élastiques

Les évaluations
nucléaires

Le code de sections
efficaces NJOY-2012

Les données
EPICS2017

Revision de source
UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- Le modèle CSDA introduit deux quantités supplémentaires:

parcours moyen (cm)

Le parcours moyen (*range* en anglais) est la distance moyenne parcourue par l'électron dans un milieu matériel

$$\lambda(E) = \int_{E_{\text{cut}}}^E \frac{dE}{S(E)} \quad (3)$$

rendement moyen (sans unité)

Le rendement moyen (*yield* en anglais) est le nombre moyen de particules secondaires de type x émises

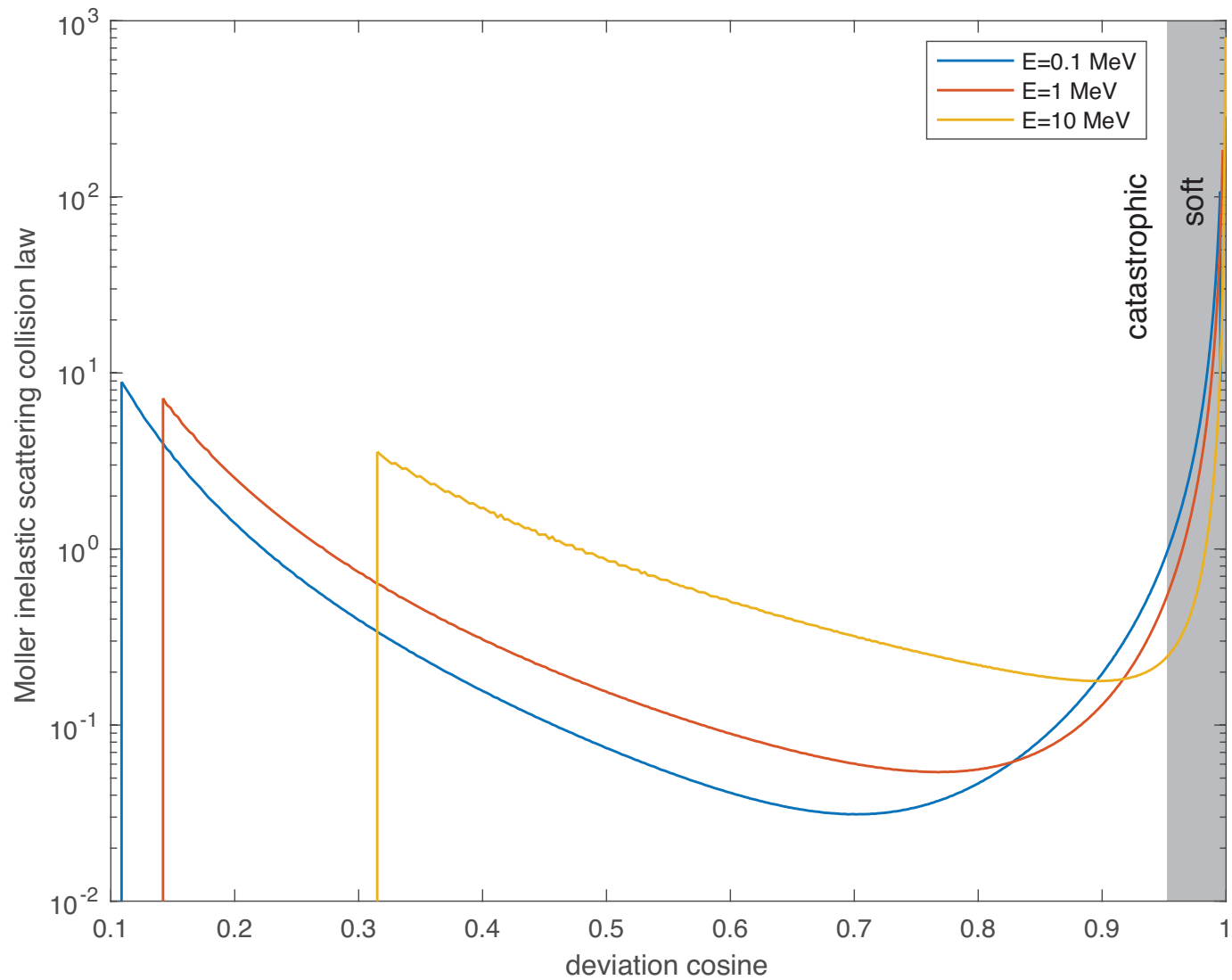
$$Y_x(E) = \int_{E_{\text{cut}}}^E dE \frac{\Sigma_x(E)}{S(E)} \quad (4)$$

où $\Sigma_x(E)$ est la section efficace macroscopique de production pour les particules x .

- Les quantités CSDA sont requis pour différents contextes de calcul électroatomiques:
 - ◆ Le pouvoir d'arrêt macroscopique est utilisé pour la résolution de l'équation BFP (évalué sur les frontières de groupes d'énergie)
 - ◆ Le parcours moyen est utilisé par la méthode de Monte Carlo
 - ◆ Le rendement moyen est utilisé par l'approximation **thick target bremsstrahlung** (TTB) pour remplacer le calcul de transport électroatomique lors des calculs de physique des réacteurs.

Les interactions douces (soft)

Loi de choc pour la collision inélastique (loi de Møller)



- Les interactions électroatomiques
- Les interactions douces (soft)
- La discrétisation multigroupe
- Les collisions inélastiques
- Les interactions bremsstrahlung
- Les collisions élastiques
- Les évaluations nucléaires
- Le code de sections efficaces NJOY-2012
- Les données EPICS2017
- Revision de source UPD
- Le système PyNjoy
- Le code DRAGON5

La discrétisation multigroupe

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

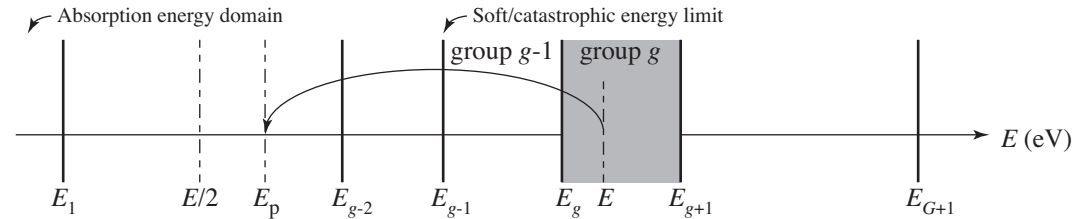
Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- Une discrétisation du groupe G est définie en énergie, comme illustré dans la figure. Chaque groupe g est défini avec des limites entre E_g et E_{g+1} .



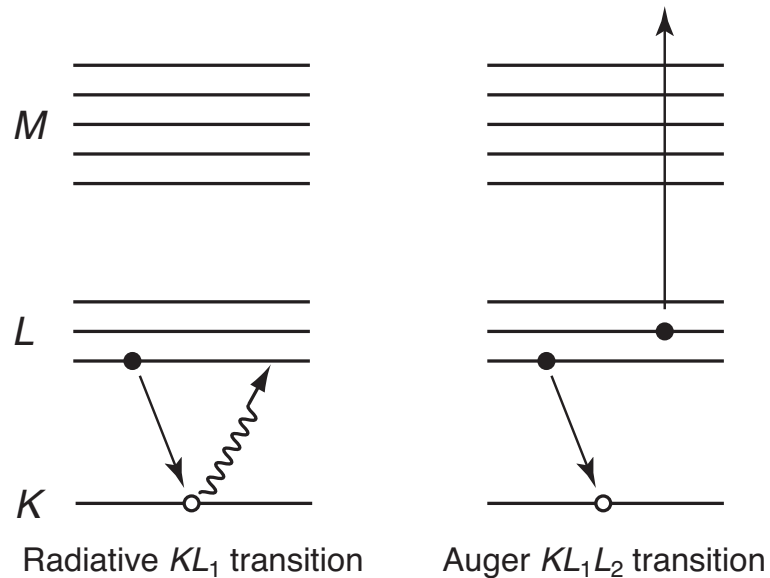
- Les énergies $E < E_1$ correspondent au domaine d'absorption.
- **L'énergie E_{g-1} correspond à la limite entre les domaines doux et catastrophique.**
- L'énergie médiane \bar{E}_g de chaque groupe est définie comme

$$\bar{E}_g = \begin{cases} \exp\left(\frac{1}{2}(\log(E_g) + \log(E_{g+1}))\right) & \text{si } i_{ge} = -2 \\ \frac{1}{2}(E_g + E_{g+1}) & \text{sinon} \end{cases} \quad (5)$$

où $i_{ge} = -2$ correspond à un maillage semi-logarithmique.

Les collisions inélastiques

- La **collision inélastique** ou **électroionisation par impact** est un processus corrélé comprenant la section efficace différentielle collisionnel inélastique ($e,2e$) et la production de rayonnement par relaxation.
- Les électrons se dispersent de manière inélastique à partir des électrons atomiques éjectés eux à partir de la i -ème couche atomique avec une énergie cinétique considérable.
- Si $i \leq 5$ (couches K , L ou M), et si l'atome est lourd, il y a une production de rayonnement de relaxation supplémentaire sous forme d'**électrons Auger** et de **photons de fluorescence**.



Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)
La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

Les collisions inélastiques

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- La section efficace différentielle collisionnel inélastique pour les électrons principal et de recul est donnée par la formule :

$$\sigma_{\text{col}}(E \rightarrow E', \mu) = \begin{cases} \sum_i \sigma_{\text{col},i}(E) P_{\text{col},i}(E \rightarrow E - E_i - E_p) \delta(\mu - \mu_p) & \text{if } E' \equiv E_p \geq (E - E_i)/2 \\ \sum_i \sigma_{\text{col},i}(E) P_{\text{col},i}(E \rightarrow E_r) \delta(\mu - \mu_r) & \text{if } E' \equiv E_r < (E - E_i)/2 \end{cases} \quad (6)$$

où

E = énergie de l'électron incident

i = index de la couche ionisée ($i = 1: K; i = 2: L_1; i = 3: L_2; i = 4: L_3; i = 5: M$, etc.).

Les sections efficaces des couches 1 à 39 ont des numéros MT dans l'intervalle 534–572.

E_i = énergie de liaison de la couche i

E_r = énergie de l'électron de recul

E_p = énergie de l'électron principal après le choc ($E_p = E - E_i - E_p$)

μ = cosinus de déviation

$\sigma_{\text{col},i}(E)$ = section efficace microscopique

$P_{\text{col},i}(E \rightarrow E_r)$ = section efficace différentielle microscopique en énergie pour l'électron de recul tel que récupéré du File 26

μ_p = cosinus de déviation de l'électron principal

μ_r = cosinus de déviation de l'électron de recul.

Les collisions inélastiques

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)
La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- Le cosinus de déviation de l'électron diffusé principal est donnée par la formule suivante:

$$\mu_p = \left[\frac{E_p(E - E_i + 2E_0)}{(E - E_i)(E_p + 2E_0)} \right]^{1/2}. \quad (7)$$

- Le cosinus de déviation de l'électron de recul est donnée par la formule suivante:

$$\mu_r = \left[\frac{E_r(E - E_i + 2E_0)}{(E - E_i)(E_r + 2E_0)} \right]^{1/2}. \quad (8)$$

- La résolution de l'équation BFP nécessite la connaissance du **pouvoir d'arrêt collisionnel** à l'énergie E . Le pouvoirs d'arrêt collisionnel total (en unités de MeV-barn) $s^{\text{col}}(E)$ est récupéré d'une évaluation ENDF basé sur la théorie de Bethe et compilée par Berger.
- La composante catastrophique du pouvoir d'arrêt collisionnel est soustraite de la valeurs totale pour obtenir le pouvoir d'arrêt collisionnel restreint $r_g^{\text{col}}(E)$ (correspondant à la composante douce du pouvoir d'arrêt):

$$r_g^{\text{col}}(E) = s^{\text{col}}(E) - \mathcal{M}_g^{\text{col}}(E) \quad (9)$$

où $E_g < E \leq E_{g+1}$ et $\mathcal{M}_g^{\text{col}}(E)$ est la composante catastrophique du pouvoir d'arrêt définie par l'équation

$$\mathcal{M}_g^{\text{col}}(E) = \int_{E/2}^{E_{g+1}} dE_p (E - E_p) \sigma_{\text{col}}(E \rightarrow E_p). \quad (10)$$

Les collisions inélastiques

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- Dans `electr`, on utilise une approximation de la composante catastrophique du pouvoir d'arrêt $\mathcal{M}_g^{\text{col}}(E)$ basée sur la loi de Møller.

$$\mathcal{M}_g^{\text{col}}(E) = \frac{3Z\sigma_T}{4\beta^2} E_0 \left[D_1 + \frac{D_2}{(k+1)^2} + D_3 \frac{2k+1}{(k+1)^2} \right] \quad (11)$$

avec

$$D_1 = 2 - \frac{E}{E_{g-1}} + \ln \left[\frac{E^2}{4E_{g-1}(E - E_{g-1})} \right] \quad (12)$$

$$D_2 = \frac{1}{2E_0^2} \left[E_{g-1}(2E - E_{g-1}) - \frac{3E^2}{4} \right] \quad (13)$$

$$D_3 = \ln \left(\frac{E}{2E_{g-1}} \right) \quad (14)$$

où

Z = numéro atomique de l'atome

σ_T = section efficace classique de Thomson (0.66524486 b)

E_0 = énergie de masse au repos de l'électron (511003.4 eV)

k = énergie de l'électron incident en unité de masse au repos ($k = E/E_0$)

β = fraction de la vitesse de l'électron sur la vitesse de la lumière,

défini par

$$\beta^2 = 1 - \frac{1}{(1+k)^2}. \quad (15)$$

Les collisions inélastiques

Les interactions
électroatomiques

Les interactions
douces (soft)

La discrétisation
multigroupe

Les collisions
inélastiques

Les interactions
bremsstrahlung

Les collisions
élastiques

Les évaluations
nucléaires

Le code de sections
efficaces NJOY-2012

Les données
EPICS2017

Revision de source
UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- La section efficace totale restreinte $\mathcal{T}_g^{\text{col}}(E)$ est définie par la relation

$$\mathcal{T}_g^{\text{col}}(E) = \int_{E/2}^{E_{g-1}} dE' \sigma_{\text{br}}(E \rightarrow E') \quad (16)$$

- La fonction de scattering $\mathcal{F}_{\ell g'}^{\text{col},n}(E)$ représente les diffusions vers le groupe g' causées par un électron incident d'énergie E , avec prise en compte de pondérations angulaire (Legendre) et énergétique:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\ell g'}^{\text{col},n}(E) &= \int_{-1}^1 d\mu P_{\ell}(\mu) \int_{g'} dE' \sigma_{\text{col}}(E \rightarrow E', \mu) (E')^n \\ &= \int_{-1}^1 d\mu P_{\ell}(\mu) \left[\int_{\max(E_{g'}, E/2)}^{\min(E_{g'+1}, E - E_{\text{cut}})} dE' \sigma_{\text{col}}(E \rightarrow E', \mu) (E')^n \right. \\ &\quad \left. + \int_{\max(E_{g'}, E_{\text{cut}})}^{\min(E_{g'+1}, E/2)} dE' \sigma_{\text{col}}(E \rightarrow E', \mu) (E')^n \right] \quad (17) \end{aligned}$$

où E_{cut} est une limite arbitraire d'intégration choisie pour éviter la divergence de l'équation.

Les collisions inélastiques

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- Les sections efficaces de dépôt d'énergie sont associées à chaque type d'interaction. Ces valeurs sont définies comme l'énergie nette déposée dans le milieu en raison des interactions de particules dans un groupe en unités de MeV-barn. La fonction de dépôt d'énergie $\mathcal{E}_g^{\text{col}}(E)$ pour l'interaction inélastique est la somme des composantes catastrophiques et douces:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_g^{\text{col,cata}}(E) &= 1 \times 10^{-6} \left[\mathcal{T}_g^{\text{col}}(E) E - \sum_{h=1}^{g-2} \mathcal{F}_{0h}^{\text{col},1}(E) \right] \\ \mathcal{E}_g^{\text{col,soft}}(E) &= 1 \times 10^{-6} \left[s^{\text{col}}(\bar{E}_g) - \mathcal{M}_g^{\text{col}}(\bar{E}_g) \right]\end{aligned}\quad (18)$$

où \bar{E}_g est l'énergie médiane du groupe g .

Les collisions inélastiques

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- La fonction $\mathcal{F}_{i,\ell g}^I(E)$ représente la source d'électrons Auger dans le groupe g causée par des électrons incidents d'énergie E . Elle s'écrit

$$\mathcal{F}_{i,\ell g}^I(E) = \begin{cases} \sigma_i^I(E) \sum_{j=1}^{N_{tr}} \eta_{i,j}^e \delta_{g,g_j} & \text{si } \ell = 0 \\ 0 & \text{si } \ell > 0 \end{cases} \quad (19)$$

où

$E =$ énergie de l'électron incident

$N_{tr} =$ nombre de transitions

$i =$ index de la couche ionisée ($i = 1: K; i = 2: L_1; i = 3: L_2; i = 4: L_3; i = 5: M$, etc.).

$j =$ index de la transition

$\eta_{i,j}^e =$ efficacité de la $j^{\text{ième}}$ transition pour produire des électrons Auger suite à l'ionisation de la couche i .

$g_j =$ groupe d'énergie qui contient l'électron Auger de la $j^{\text{ième}}$ transition.

- Le dépôt d'énergie correspondant $\mathcal{E}_i^I(E)$ s'écrit

$$\mathcal{E}_{i,g}^I(E) = -\sigma_i^I(E) \sum_{j=1}^{N_{tr}} \eta_{i,j}^e e_{i,j}^e \delta_{g,g_j} \quad (20)$$

où $e_{i,j}^e$ est l'énergie de l'électron Auger.

Les collisions inélastiques

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- La fonction $\mathcal{G}_{i,\ell,f}^I(E)$ représente la source de photons de fluorescence dans le groupe g causée par des électrons incidents d'énergie E . Elle s'écrit

$$\mathcal{G}_{i,\ell,f}^I(E) = \begin{cases} \sigma_i^I(E) \sum_{j=1}^{N_{tr}} \eta_{i,j}^f \delta_{f,f_j} & \text{si } \ell = 0 \\ 0 & \text{si } \ell > 0 \end{cases} \quad (21)$$

où

$E =$ énergie de l'électron incident

$N_{tr} =$ nombre de transitions

$i =$ index de la couche ionisée ($i = 1: K; i = 2: L_1; i = 3: L_2; i = 4: L_3; i = 5: M$, etc.).

$j =$ index de la transition

$\eta_{i,j}^f =$ efficacité de la $j^{\text{ième}}$ transition pour produire des photons de fluorescence suite à l'ionisation de la couche i .

$f_j =$ groupe d'énergie qui contient le photon de fluorescence de la $j^{\text{ième}}$ transition.

- Le dépôt d'énergie correspondant $\mathcal{E}_{i,f}^{I\gamma}(E)$ s'écrit

$$\mathcal{E}_{i,f}^{I\gamma}(E) = -\sigma_i^I(E) \sum_{j=1}^{N_{tr}} \eta_{i,j}^f e_{i,j}^f \delta_{f,f_j} \quad (22)$$

où $e_{i,j}^f$ est l'énergie du photon de fluorescence.

Les interactions bremsstrahlung

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- La section efficace différentielle de bremsstrahlung pour l'électron diffusé et pour le photon émis sont représentés par les expressions suivantes:

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{br}}(E \rightarrow E', \mu) &= \sigma_{\text{brp}}(E \rightarrow E - E') \delta(\mu - 1) \text{ pour l'électron diffusé} \\ \sigma_{\text{brp}}(E \rightarrow E_p, \mu) &= \sigma_{\text{brp}}(E \rightarrow E_p) D_{\text{br}}(\mu_p) \text{ pour le photon émis}\end{aligned}\quad (23)$$

où

E = énergie de l'électron incident

E' = énergie de l'électron diffusé

E_p = énergie du photon émis ($E_p = E - E'$). L'énergie maximale du photon émis est arbitrairement supposée être de 1 keV inférieure à l'énergie de l'électron incident.

μ = cosinus de déviation

$\sigma_{\text{brp}}(E \rightarrow E_p)$ = section efficace différentielle microscopique de bremsstrahlung électron-photon tel que récupéré à partir du File 26

μ_p = cosinus de déviation pour le photon émis.

- Le cosinus de déviation du photon émis par rapport à la direction de l'électron incident est donnée par la distribution angulaire de Sommerfeld:

$$D_{\text{br}}(\mu_p) = \frac{1 - \beta^2}{2(1 - \beta\mu_p)^2}.\quad (24)$$

Les interactions bremsstrahlung

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- La résolution de l'équation BFP nécessite la connaissance du **pouvoir d'arrêt radiatif** à l'énergie E . Le pouvoirs d'arrêt radiatif total (en unités de MeV-barn) $s^{\text{br}}(E)$ est récupéré d'une évaluation ENDF compilée par Berger.
- La composante catastrophique du pouvoir d'arrêt radiatif est soustraite de la valeurs totale pour obtenir le pouvoir d'arrêt radiatif restreint $r_g^{\text{br}}(E)$ (correspondant à la composante douce du pouvoir d'arrêt):

$$\begin{aligned} r_g^{\text{br}}(E) &= s^{\text{br}}(E) - \int_{E_{\min}}^{E_{g-1}} dE' (E - E') \sigma_{\text{br}}(E \rightarrow E') \\ &= s^{\text{br}}(E) - s^{\text{br}}(E_{g-1}) \end{aligned} \quad (25)$$

où $E_g < E \leq E_{g+1}$.

- La section efficace totale restreinte $\mathcal{T}_g^{\text{br}}(E)$ est définie par la relation

$$\mathcal{T}_g^{\text{br}}(E) = \int_{E_{\min}}^{E_{g-1}} dE' \sigma_{\text{br}}(E \rightarrow E') \quad (26)$$

où les contributions avec $E' < E_1$ doivent être incluses.

Les interactions bremsstrahlung

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- La fonction de scattering $\mathcal{F}_{\ell g'}^{\text{br},n}(E)$ représente les diffusions des électrons vers le groupe g' causées par un électron incident d'énergie E , avec prise en compte de pondérations angulaire (Legendre) et énergétique:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{\ell g'}^{\text{br},n}(E) &= \int_{-1}^1 d\mu P_{\ell}(\mu) \int_{g'} dE' \sigma_{\text{br}}(E \rightarrow E', \mu) (E')^n \\ &= \int_{\max(E_{g'}, E_{\min})}^{\min(E_{g'+1}, E - E_{\text{cut}})} dE' \sigma_{\text{brp}}(E \rightarrow E - E') (E')^n\end{aligned}\quad (27)$$

où E_{\min} est arbitrairement fixé à 1 keV.

- La fonction de scattering $\mathcal{G}_{\ell g'}^{\text{br},n}(E)$ représente les diffusions des photons vers le groupe g' causées par un électron incident d'énergie E , avec prise en compte de pondérations angulaire (Legendre) et énergétique:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{\ell g'}^{\text{br},n}(E) &= \int_{-1}^1 d\mu_p P_{\ell}(\mu_p) \int_{g'} dE' \sigma_{\text{brp}}(E \rightarrow E', \mu_p) (E')^n \\ &= \int_{-1}^1 d\mu_p D_{\text{br}}(\mu_p) P_{\ell}(\mu_p) \int_{\max(E_{g'}, E_{\min})}^{\min(E_{g'+1}, E - E_{\text{cut}})} dE_p \sigma_{\text{brp}}(E \rightarrow E_p) (E')^n.\end{aligned}\quad (28)$$

Les interactions bremsstrahlung

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- La fonction de dépôt d'énergie $\mathcal{E}_g^{\text{br}}(E)$ pour les électrons diffusés est la somme des composantes catastrophiques et douces:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_g^{\text{br,cata}}(E) &= 1 \times 10^{-6} \left[\mathcal{T}_g^{\text{br}}(E) E - \sum_{h=1}^{g-2} \mathcal{F}_{0h}^{\text{br},1}(E) \right] \\ \mathcal{E}_g^{\text{br,soft}}(E) &= 1 \times 10^{-6} \left[s^{\text{br}}(\bar{E}_g) - s^{\text{br}}(E_{g-1}) \right]\end{aligned}\quad (29)$$

where \bar{E}_g est l'énergie médiane du groupe g pour les électrons.

- La fonction de dépôt d'énergie $\mathcal{E}_g^{\text{br}\gamma}(E)$ pour les photon émis s'écrit

$$\mathcal{E}_g^{\text{br}\gamma}(E) = -1 \times 10^{-6} \left[\sum_{h=1}^g \mathcal{G}_{0h}^{\text{br},1}(E) \right]\quad (30)$$

où \bar{E}_g^γ est l'énergie médiane du groupe g pour les photons.

Les collisions élastiques

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

- La section efficace de collision élastique de Rutherford est représenté par l'expression suivante:

$$\sigma_e(E \rightarrow E', \mu) = \sigma_e(E) \delta(E - E') D_e(\mu) \quad (31)$$

où l'électron diffusé est dévié sans changement d'énergie avec une distribution angulaire $D_e(\mu)$ dirigée vers l'avant.

- ◆ La distribution $D_e(\mu)$ est récupérée du File 26.
- ◆ Une correction de transport est appliquée pour réduire la nécessité d'un ordre de Legendre élevé.

- La fonction de scattering \mathcal{F}^e is la contribution des électrons d'énergie E dans le groupe g conrenant E :

$$\mathcal{F}_{\ell g}^e(E) = \int_{-1}^1 d\mu \int_g dE' \sigma_e(E \rightarrow E', \mu) P_\ell(\mu). \quad (32)$$

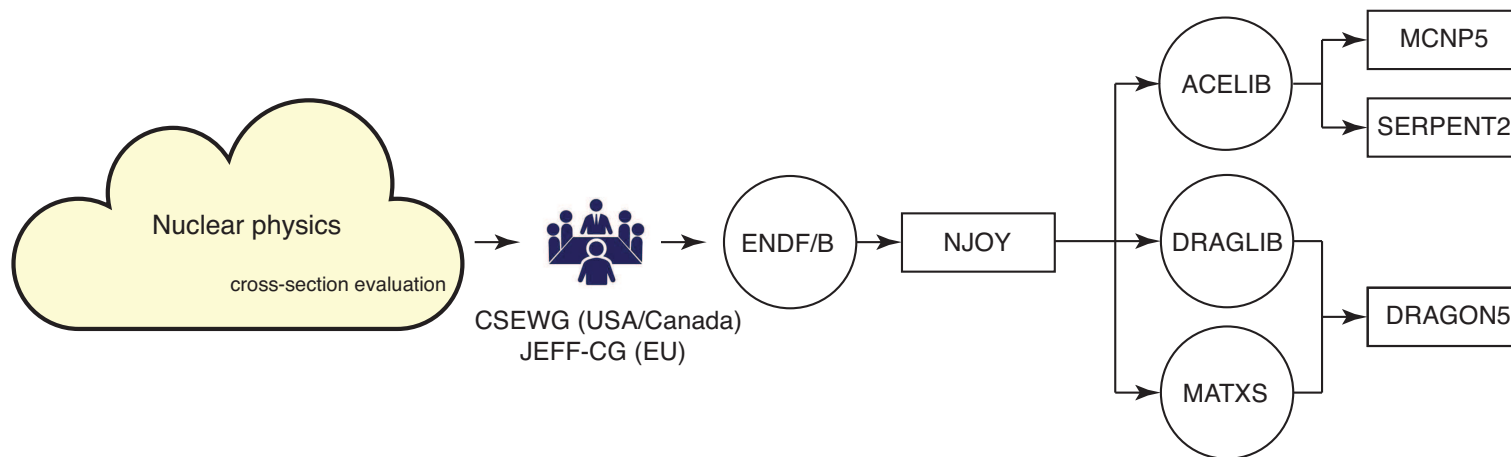
- La fonction de scattering avec correction de transport s'écrit

$$\bar{\mathcal{F}}_{\ell g}^e(E) = \mathcal{F}_{\ell g}^e(E) - \mathcal{F}_{Lg}^e(E) \quad (33)$$

où L est l'ordre de Legendre maximum.

Les évaluations nucléaires

- Les évaluations nucléaires sont assemblées par le comité CSEWG (USA/Canada) ou JEFF-CG (Union Européenne) à partir d'évaluations fournies par des physiciens nucléaires.
- Les évaluations traitées par ces comités sont actuellement en format **ENDF-102**
- Un projet à moyen terme est de remplacer le format ENDF-102 par le format **Generalized Nuclear Data Structure (GNDS)**.
- **Toute donnée nucléaire ou atomiques utilisée par les codes MCNP5, SERPENT2 et DRAGON5 doit avoir été approuvé par un des comités CSEWG ou JEFF-CG**
- Les données relatives aux interactions photon-électrons doivent provenir de la base de données EPICS2017, intégrée à l'évaluation ENDF/B-VIII.



CSEWG : Cross Section Evaluation Working Group
JEFF-CG : Joint Evaluated Fission and Fusion – Coordination Group

Les interactions
électroatomiques

Les interactions
douces (soft)

La discrétisation
multigroupe

Les collisions
inélastiques

Les interactions
bremsstrahlung

Les collisions
élastiques

Les évaluations
nucléaires

Le code de sections
efficaces NJOY-2012

Les données
EPICS2017

Revision de source
UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

Les évaluations nucléaires

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

Une évaluation au format ENDB-102 possède une organisation hiérarchique:

tape Un **tape** ENDF est un fichier qui contient un ou plusieurs matériaux ENDF. Par exemple, **tape 511** de ENDF/B-V contient les données neutronique pour ^1H , ^3H , ^4He et ^{11}Be . Dans les évaluations modernes, on place un isotope par **tape** (fichier).

MAT Identificateur de matériel formé à partir des valeurs de Z et A de chaque isotope, ainsi que de son niveau d'excitation isomérique. Par exemple, 125 est ^1H , 128 est ^2H , 2625 est ^{54}Fe , 6153 est $^{148}\text{Pm}^m$, et 9237 est ^{238}U . Pour les réactions atomiques, l'identificateur est seulement donné par $100 \times Z$. Par exemple, 7400 est W (tungstène) et 9200 est U (uranium).

MF Identificateur de type de données

MF code	type
1	descriptive and miscellaneous data
3	neutron reaction cross sections vs energy
6	neutron energy-angle distributions
12-15	photon production data from incident neutron
23	photoatimic and electroatomic reaction cross sections vs energy
26	electroatomic collision laws
27	photoatomic scattering form factors and incoherent functions
28	atomic relaxation data

MT Identificateur de section, permettant d'identifier différentes réactions électroatomiques.

MT code	reaction
1	section efficace totale
525	collision élastique ($\mu < 0.999999$)
527	bremsstrahlung
528	excitation
534-572	collision inélastique et production par relaxation

Les évaluations nucléaires

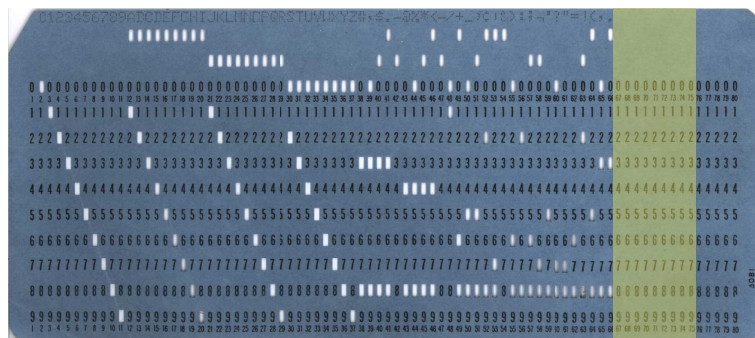
Documentation en ligne du format ENDF-102

Introduction to the ENDF Formats

Historique des sorties d'évaluations ENDF/B

1966 Spécification ENDF-102 (numéro du rapport)

- Spécification compatible avec les cartes perforées de 80 colonnes
- Les identificateurs MAT, MF et MT sont stockés sur les colonnes 67 à 75 de chaque carte (format I4/I2/I3)



- Les évaluations devaient être distribuées sur bande magnétique 9 pistes

1968 Sortie de ENDF/B-I

1974 Sortie de ENDF/B-IV (encore utilisée en production)

1978 Sortie de ENDF/B-V

1990 Sortie de ENDF/B-VI

2006 Sortie de ENDF/B-VII

2018 Sortie de ENDF/B-VIII

Les interactions
électroatomiques

Les interactions
douce (soft)

La discrétisation
multigroupe

Les collisions
inélastiques

Les interactions
bremsstrahlung

Les collisions
élastiques

Les évaluations
nucléaires

Le code de sections
efficaces NJOY-2012

Les données
EPICS2017

Revision de source
UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

Les évaluations nucléaires

L'évaluation ENDF/B-VIII (EEDL-2017) du tungstène ($Z=74$)

- Les interactions électroatomiques
- Les interactions douces (soft)
- La discrétisation multigroupe
- Les collisions inélastiques
- Les interactions bremsstrahlung
- Les collisions élastiques
- Les évaluations nucléaires**
- Le code de sections efficaces NJOY-2012
- Les données EPICS2017
- Revision de source UPD
- Le système PyNjoy
- Le code DRAGON5

```

$Rev:: 1453      $ $Date:: 2018-01-21#$                1 0 0
74000.0000 182.270589      -1      0      0      17400 1451
0.0      0.0      0      0      0      67400 1451
5.438673D-4 1.0000D+11      0      0      113      87400 1451
0.0      0.0      0      0      172      547400 1451
74-W - 0 NDS,IAEA Eval-Dec17 D.E.Cullen      7400 1451
NDS-IAEA-226      DIST-FEB18      7400 1451
----ENDF/B-VIII.0      MATERIAL 100      7400 1451
-----ELECTRO-ATOMIC DATA      7400 1451
-----ENDF-6 FORMAT      7400 1451
=====7400 1451
The Livermore Evaluated Electron Data Library (EEDL) in the      7400 1451
ENDF-6 Format. Translated from the Livermore ENDL format      7400 1451
to the ENDF-6 Format.      7400 1451
=====7400 1451
Contents      7400 1451
=====7400 1451
MF/MT      Description      7400 1451
=====7400 1451
23/501      Total Electron Cross Sections      7400 1451
23/522      Ionization (sum of subshells)      7400 1451
23/525      Large Angle Elastic Scattering Cross Section      7400 1451
23/526      Elastic Scatter (Total) Cross Sections      7400 1451
23/527      Bremsstrahlung Cross Sections      7400 1451
23/528      Excitation Cross Sections      7400 1451
23/534      K (1S1/2)      Electroionization Subshell Cross Sections      7400 1451
23/535      L1 (2s1/2)      Electroionization Subshell Cross Sections      7400 1451
23/536      L2 (2p1/2)      Electroionization Subshell Cross Sections      7400 1451
23/537      L3 (2p3/2)      Electroionization Subshell Cross Sections      7400 1451
...
=====7400 1451
26/525      Large Angle Elastic Angular Distributions      7400 1451
26/527      Bremsstrahlung Photon Energy Spectra and      7400 1451
Electron Average Energy Loss      7400 1451
26/528      Excitation Electron Average Energy Loss      7400 1451
26/534      K (1S1/2)      Electroionization Subshell Energy Spectra      7400 1451
26/535      L1 (2s1/2)      Electroionization Subshell Energy Spectra      7400 1451
26/536      L2 (2p1/2)      Electroionization Subshell Energy Spectra      7400 1451
26/537      L3 (2p3/2)      Electroionization Subshell Energy Spectra      7400 1451
...

```

Les évaluations nucléaires

L'évaluation ENDF/B-VIII (EEDL-2017) du tungstène ($Z=74$)

Les interactions
électroatomiques

Les interactions
douces (soft)

La discrétisation
multigroupe

Les collisions
inélastiques

Les interactions
bremsstrahlung

Les collisions
élastiques

Les évaluations
nucléaires

Le code de sections
efficaces NJOY-2012

Les données

EPICS2017

Revision de source

UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

74000.0000	182.270589	0	0	0	0740023534
69529.0000	0.0	0	0	1	20740023534
20	2				740023534
69529.0000	0.0	71423.8833	.315685000	74976.8894	.870630000740023534
81194.5751	1.74221000	90521.1538	2.85658000	99847.7324	3.79052000740023534
112797.035	4.86170000	125747.338	5.73488000	199399.122	8.67649000740023534
316130.893	10.71560000	630940.180	13.0678000	1258930.00	15.4248000740023534
3162280.00	19.03900000	6309570.00	22.0349000	15848900.0	26.2070000740023534
39810700.0	30.4575000	100000000.	34.7313000	251189000.	38.9798000740023534
630957000.	42.7605000	1.0000E+11	45.7665000		740023534
					740023 0
74000.0000	182.270589	0	0	0	0740023535
12103.0000	0.0	0	0	1	17740023535
17	2				740023535
12103.0000	0.0	12615.1775	4.93511000	14244.5876	19.5259000740023535
15873.9977	32.6124000	17925.4069	47.1370000	19976.7161	59.6652000740023535
31644.1245	102.901000	50135.6002	124.197000	63109.4960	127.188000740023535
251189.000	105.065000	501187.000	96.8143000	1584890.00	101.292000740023535
5011870.00	120.682000	12589300.0	140.490000	63095700.0	177.280000740023535
158489000.	194.161000	1.0000E+11	205.312000		740023535
					740023 0
74000.0000	182.270589	0	0	0	0740023536
11546.0000	0.0	0	0	1	16740023536
16	2				740023536
11546.0000	0.0	12562.5634	16.8929000	14192.7859	41.0708000740023536
15823.0084	61.7571000	17875.4403	83.4466000	19927.7722	101.027000740023536
31600.9974	154.022000	63082.0559	174.707000	199526.000	145.036000740023536
398107.000	130.616000	630957.000	127.535000	5011870.00	163.780000740023536
12589300.0	192.071000	63095700.0	244.283000	158489000.	266.800000740023536
1.0000E+11	279.117000				740023536
					740023 0
74000.0000	182.270589	0	0	0	0740023537
10209.0000	0.0	0	0	1	18740023537
18	2				740023537
10209.0000	0.0	10804.7805	27.2145000	11698.4514	65.5071000740023537
12592.2222	100.728000	14221.9689	157.218000	15851.7157	204.526000740023537
25121.4129	356.066000	39812.7331	420.886000	63096.9726	420.069000740023537
158489.000	347.627000	251189.000	313.614000	501187.000	285.454000740023537
1258930.00	290.586000	5011870.00	356.407000	12589300.0	416.281000740023537
63095700.0	525.245000	158489000.	568.810000	1.0000E+11	589.885000740023537
					740023 0
...					

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les interactions électroatomiques

Les interactions douces (soft)

La discrétisation multigroupe

Les collisions inélastiques

Les interactions bremsstrahlung

Les collisions élastiques

Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017

Revision de source UPD

Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

Le code NJOY, développé par [Los Alamos National Laboratory](#) (LANL) permet le traiter les évaluations de données nucléaires au format ENDF-102 (et bientôt au format GNDS), et de générer des bibliothèques de sections efficaces

- à énergie continue pour les codes Monte Carlo
- multigroupes pour les solveurs de l'équation de Boltzmann par approche numérique.

Historique des développements NJOY

MINX (1970) Première version, identifiée MINX

NJOY (1975) Première version, identifiée NJOY

NJOY-99 Intégrée à la distribution Version4. Programmée en Fortran-77

NJOY-2012 Associée à la distribution Version5.

- Programmée en Fortran-90
- Utilise le système de revision de source UPD
- Requiert une license LANL
- Maintenu par Jean-Christophe Sublet, IAEA

NJOY-2016 Version Open-Source de NJOY

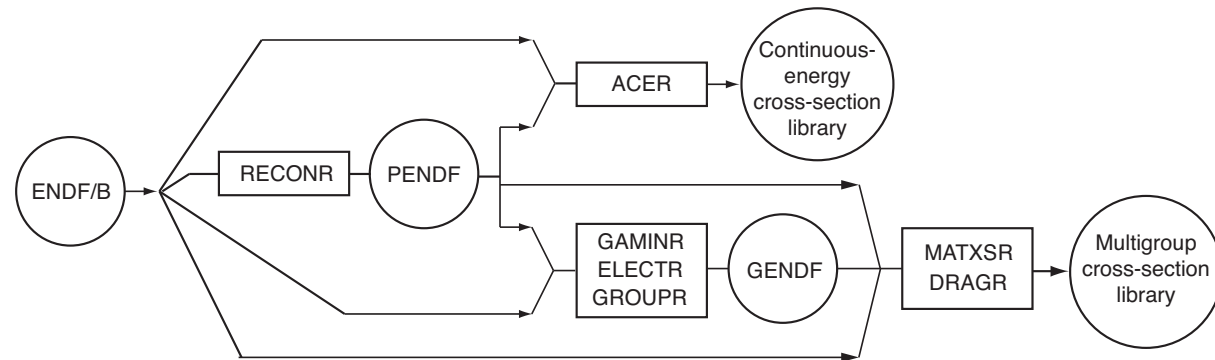
- Programmée en Fortran-90.
- Utilise le système de revision de source GIT sur GitHub
- Les fichiers de données de NJOY-2012 sont compatibles

NJOY-21 Version “moderne” Open-Source de NJOY

- Programmée en C++
- Accepte les évaluations en format ENDF-102 et GNDS
- Utilise le système de revision de source GIT sur GitHub
- Les fichiers de données de NJOY-2012 et NJOY-2016 sont compatibles

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Chaque isotope de l'évaluation est traité par un flot de donnée spécifique du code NJOY, de façon à produire une **bibliothèque de sections efficaces** compatible avec le type de solution de l'équation de transport qui sera utilisée par la suite. Le flot de données NJOY est représenté dans la figure suivante.



RECONR: cross section reconstruction
 GAMINR: multigroup formatting of cross sections for photons
 ELECTR: multigroup formatting of cross sections for electrons
 GROUPR: multigroup formatting of cross sections for neutrons
 DRAGR : creation of a multigroup cross section library in Draglib format
 MATXSR : creation of a multigroup cross section library in MATXS format
 ACER : creation of a continuous-energy cross section library in ACELIB format

Les interactions électroatomiques
 Les interactions douces (soft)
 La discrétisation multigroupe
 Les collisions inélastiques
 Les interactions bremsstrahlung
 Les collisions élastiques
 Les évaluations nucléaires

Le code de sections efficaces NJOY-2012

Les données EPICS2017
 Revision de source UPD
 Le système PyNjoy
 Le code DRAGON5

Les données EPICS2017

Les interactions électroatomiques
Les interactions douces (soft)
La discrétisation multigroupe
Les collisions inélastiques
Les interactions bremsstrahlung
Les collisions élastiques
Les évaluations nucléaires
Le code de sections efficaces NJOY-2012
Les données EPICS2017
Revision de source UPD
Le système PyNjoy
Le code DRAGON5

EPICS2017 est la base de données pour les interactions **électroatomiques** et **photoatomiques** qui contient les données permettant d'effectuer des calculs de transport couplés électron-photon et de produire des résultats macroscopiques précis, comme le calcul de dépôt d'énergie ou le calcul de dose. **Ces données sont valides pour des énergies du photon et de l'électron > 1 keV.** Les données de EPICS2017 sont incluses dans l'évaluation ENDF/B-VIII sous la forme de trois bases de données:

1. la base Evaluated Atomic Data Library (EADL) permet de décrire les émissions d'électrons et de photons causées par la déséxcitation d'un atome ionisé (**atomic_relax** subdirectory)
2. la base Evaluated Photon Data Library (EPDL) permet de décrire les interactions des photons avec la matière (**photoat** subdirectory)
3. la base Evaluated Electron Data Library (EEDL) permet de décrire les interactions des électrons avec la matière (**electrons** subdirectory)

Référence EADL (relaxation atomique):

D. E. Cullen, "A Survey of Atomic Binding Energies for use in EPICS2017," Report IAEA-NDS-224, rev. 1, 2018.

Référence EPDL (interactions photoatomiques):

D. E. Cullen, "A Survey of Photon Cross Section Data for use in EPICS2017," Report IAEA-NDS-225, rev. 1, 2018.

Référence EEDL (interactions électroatomiques):

D. E. Cullen, "A Survey of Electron Cross Section Data for use in EPICS2017," Report IAEA-NDS-226, 2017.

Les données EPICS2017

Les interactions électroatomiques
 Les interactions douces (soft)
 La discrétisation multigroupe
 Les collisions inélastiques
 Les interactions bremsstrahlung
 Les collisions élastiques
 Les évaluations nucléaires
 Le code de sections efficaces NJOY-2012
Les données EPICS2017
 Revision de source UPD
 Le système PyNjoy
 Le code DRAGON5

- Il y a **un** fichier EEDL, **un** fichier EPDL et **un** fichier EADL pour chaque valeur du nombre atomique $1 \leq Z \leq 100$.
- Ces données sont écrites en format ENDF-102.
- Les données d'interactions électroatomiques du fichier EEDL sont disponibles pour
 - ◆ MF = 23 pour les sections tabulées avec variation lente en énergie.
 - ◆ MF = 26 pour les lois de choc $P(E \rightarrow E_r)$ ou $P(\mu)$.
- Les données de transition radiative de la bibliothèque de relaxation EADL sont disponibles avec MF = 28 et MT = 533.
- Les identificateurs MT de la bibliothèque électroatomique EEDL suivants sont disponibles:

MT code	reaction électroatomiques
1	section efficace totale
525	collision élastique ($\mu < 0.999999$)
527	bremsstrahlung
528	excitation
534–572	collision inélastique et production par relaxation

- Les identificateurs MT de la bibliothèque photoatomique EPDL suivants sont disponibles:

MT code	reaction photoatomiques
501	section efficace totale
502	diffusion de Rayleigh (élastique)
504	diffusion de Compton (inélastique – Klein-Nishina)
516	production de paire
522	effet photoélectrique

Les données EPICS2017

Les interactions électroatomiques
Les interactions douces (soft)
La discrétisation multigroupe
Les collisions inélastiques
Les interactions bremsstrahlung
Les collisions élastiques
Les évaluations nucléaires
Le code de sections efficaces NJOY-2012
Les données EPICS2017
Revision de source UPD
Le système PyNjoy
Le code DRAGON5

- Les données photoatomiques de EPDL peuvent être traitées par les modules **RECONR** et **GAMINR** de NJOY. Notez que les formules de Klein-Nishina utilisées par la diffusion Compton sont implémentées directement dans le module **GAMINR**.
 - ◆ La production des **électrons secondaires** Compton, photoélectrique, Auger et création de paire ne sont actuellement **pas implémentées** dans le module **GAMINR**.
 - ◆ Actuellement, seuls les codes de Monte Carlo MCNP5, SERPENT2 et GEANT4 peuvent traiter les données de photons secondaires.
 - ◆ Dans le contexte de ses travaux de R&D, Polytechnique Montréal propose de compléter l'implémentation du traitement des photons secondaires dans le module **GAMINR** en 2022.
- Les données électroatomiques de EEDL peuvent être traitées par les modules **RECONR** et **ELECTR** de NJOY.
 - ◆ Le traitement des **photons secondaires** de fluorescence et bremsstrahlung sont **implémentées** dans le module **ELECTR**.
 - ◆ Les photons d'annihilation electron-positron ne sont actuellement **pas implémentées** dans le module **ELECTR**.
- Une bibliothèque multigroupe de sections efficaces sera produite dans NJOY en traitant le fichier GENDF produit par **GAMINR** ou **ELECTR** à l'aide du module **MATXSR**.
- La bibliothèque produite est une **bibliothèque atomique**, pas une bibliothèque isotopique.
- La bibliothèque **MATXS** est un fichier `ascii` générique, indépendant de **DRAGON5**.

Revision de source UPD

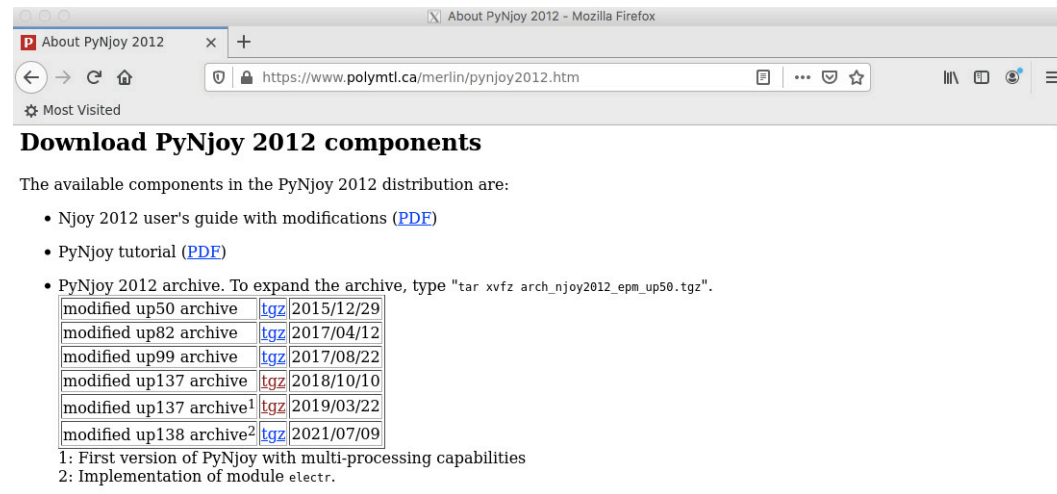
Les interactions électroatomiques
 Les interactions douces (soft)
 La discrétisation multigroupe
 Les collisions inélastiques
 Les interactions bremsstrahlung
 Les collisions élastiques
 Les évaluations nucléaires
 Le code de sections efficaces NJOY-2012
 Les données EPICS2017
Revision de source UPD

Le système PyNjoy
 Le code DRAGON5

NJOY-2012 utilise le système de revision de source UPD, un émulateur du système UPDATE, développé par Control Data Corporation dans les années 1970:

Control Data Corporation, "UPDATE, Version 1, Reference Manual," Report CDC 60449900, 1975.

- Récupération du fichier archive:
 Activer firefox. Cliquer sur le lien [tgz](#) de la version up138 dans firefox. Le fichier arch_njoy2012_epm_up138.tgz sera téléchargé dans le répertoire Downloads.



- Décompression du code:

```
-bash-4.1$ cd ~
-bash-4.1$ mv Downloads/arch_njoy2012_epm_up138.tgz .
-bash-4.1$ tar xvfzp arch_njoy2012_epm_up138.tgz
```

Revision de source UPD

- L'archive ne contient pas le code source de Njoy-2012 pour des raisons de license. Celui-ci doit être récupéré du compte `~develop`. Njoy-2012 peut ensuite être compilé.

```
-bash-4.1$ cd Njoy2012_EPM_up138  
-bash-4.1$ cp ~develop/Njoy2012_EPM_up138/src_2012p0 .  
-bash-4.1$ ./install
```

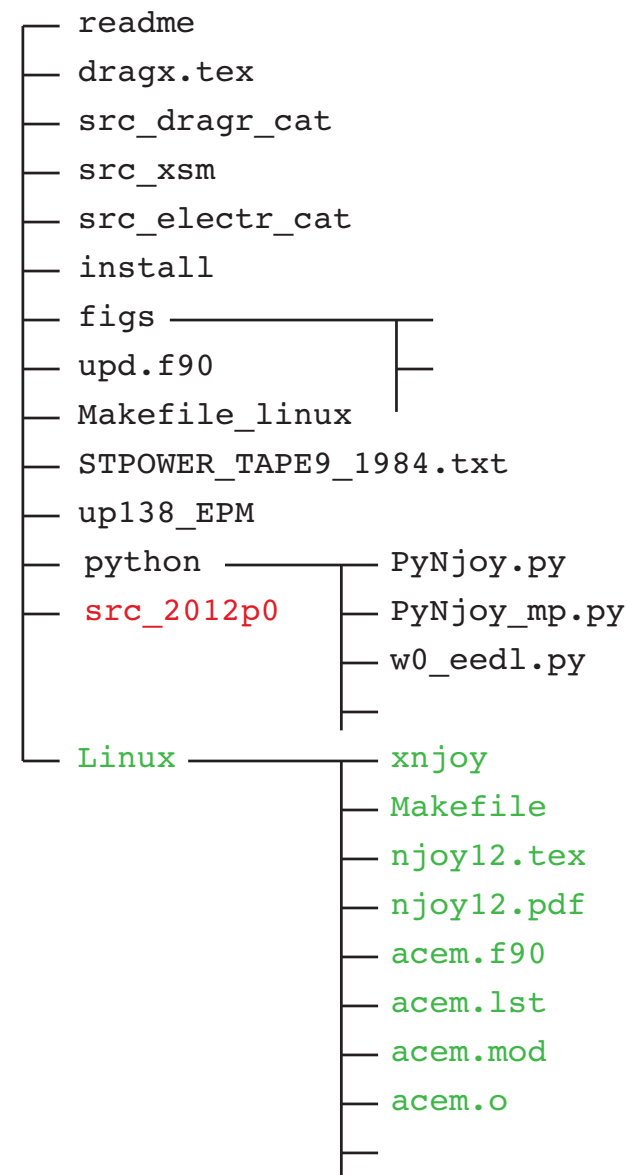
- Njoy a besoin d'accéder les évaluations en format ENDF/B. Celles ci sont disponibles sur le compte `~develop`. Vu leurs dimensions, il est préférable de créer un lien symbolique pour les accéder.

```
-bash-4.1$ cd ~  
-bash-4.1$ ln -s ~develop/evaluations/ .
```

Revision de source UPD

Les interactions électroatomiques
 Les interactions douces (soft)
 La discrétisation multigroupe
 Les collisions inélastiques
 Les interactions bremsstrahlung
 Les collisions élastiques
 Les évaluations nucléaires
 Le code de sections efficaces NJOY-2012
 Les données EPICS2017
Revision de source UPD
 Le système PyNjoy
 Le code DRAGON5

`readme` fichier d'information général
`dragx.tex` fichier \LaTeX de documentation du module `dragr`
`src_dragr_cat` source Fortran du module `dragr`
`src_xsm` source Fortran des utilitaires `xsm` et `kdi`
`src_electr_cat` source Fortran du module `electr`
`install` script d'installation
`Makefile_linux` makefile d'installation
`figs` directory contenant les figures de la documentation
`upd.f90` source Fortran de l'émulateur `upd`
`upd_138_EPM` update officiel avec additions EPM
`STPOWER_TAPE9_1984.txt` Fichier en format ENDF-102 contenant les pouvoirs d'arrêt
`python` directory contenant PyNjoy et les fichiers de données
`src_2012p0` source Fortran de NJOY-2012 up0 (non inclus dans la distribution EPM)
`Linux` directory créé par le script `install`
`xnjoy` exécutable du code NJOY
`acem.lst` fichier ASCII contenant les numéros de lignes utilisés par `upd` pour effectuer les updates du module `acer`



Revision de source UPD

Exemple d'addition d'un nouveau module

- On observe les numéros de ligne du fichier `njoy.lst`:

```

njoy.5   : !      NJOY Nuclear Data Processing System           njoy
njoy.6   : !      Version 2012                                 njoy
njoy.7   : !
...
njoy.76  : !
njoy.77  : ! leapr...generate S(alpha,beta) for thermal moderators. njoy
njoy.78  : !
njoy.79  : ! gaspr...add gas production (MT203-207) to PENDF tape. njoy
njoy.80  : !
...
njoy.139 :      use purm      ! provides purr                   njoy
njoy.140 :      use leapm     ! provides leapr                  njoy
njoy.141 :      use gaspm     ! provides gaspr                  njoy
njoy.142 :
...
njoy.263 :      case('gaspr') ! add gas production (mt203-207) to pendf njoy
njoy.264 :      call gaspr
njoy.265 :
njoy.266 :      case ('--')   ! comment card; nothing to do     njoy
njoy.267 :

```

- On introduit les lignes suivantes dans le fichier `upd_138_EPM`:

```

*ident updr
*/ dragr -- 30jan2016
*i njoy.34
!
! electr...compute multigroup electron interaction cross sections,
! scattering matrices, energy and charge deposition.
*i njoy.124
   use electm ! provides electr
*i njoy.213

       case('electr') ! compute electron interaction cross sections
       call electr
*ident newv
*/ 01may2021
*d njoy.6
!   Version 2012.138

```

Le système PyNjoy

Les interactions
électroatomiques

Les interactions
douces (soft)

La discrétisation
multigroupe

Les collisions
inélastiques

Les interactions
bremsstrahlung

Les collisions
élastiques

Les évaluations
nucléaires

Le code de sections
efficaces NJOY-2012

Les données
EPICS2017

Revision de source
UPD

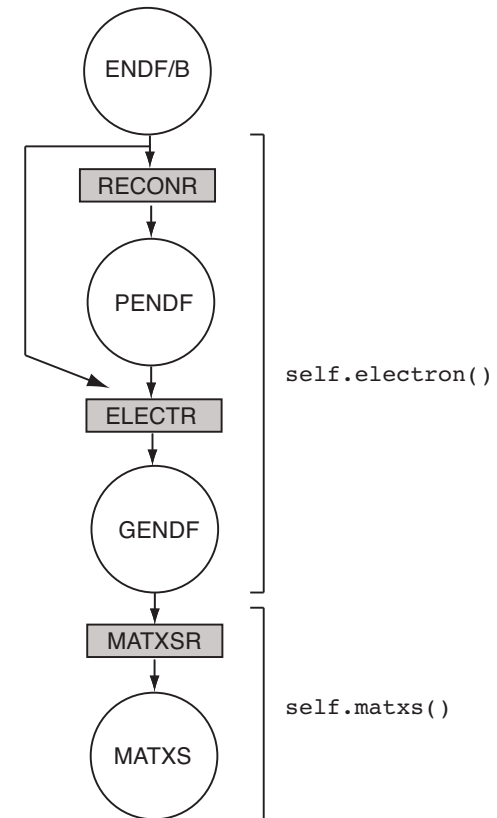
Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

Disponible sur la page [PyNjoy-2012](#).

Le système comporte 3 composantes:

- nouveaux modules (Fortran 90) spécifiques
 - ◆ interactions électroatomiques `electm`
 - ◆ post-traitement `dragm`
- script (Python) `PyNjoy.py` pour encapsuler les appels aux modules NJOY
- un fichier de données par évaluation/bibliothèque



Le système PyNjoy

Les interactions
électroatomiques
Les interactions
douces (soft)
La discrétisation
multigroupe
Les collisions
inélastiques
Les interactions
bremsstrahlung
Les collisions
élastiques
Les évaluations
nucléaires
Le code de sections
efficaces NJOY-2012
Les données
EPICS2017
Revision de source
UPD
Le système PyNjoy
Le code DRAGON5

1. Instanciation d'un objet:

```
from PyNjoy import *  
endfb = PyNjoy()
```

2. Définition des variables d'instance:

```
endfb.evaluationName = "/tmp/w0_eed1"  
endfb.stoppingPowerFile = os.getcwd() + "../STPOWER_TAPE9_1984.txt"  
endfb.execDir = "../" + uname()[0]  
endfb.legendrebe = 7  
endfb.estr = 3  
endfb.gstr = 3  
endfb.iwt = 2  
endfb.hmatbe = "w"  
endfb.matbe = 7400  
endfb.evaluationFile = "$HOME/evaluations/ENDF-B-VIII.0/electrons/e-074_W_000.endf"  
endfb.relaxationFile = "$HOME/evaluations/ENDF-B-VIII.0/atomic_relax/atom-074_W_000.endf"
```

3. Activation des méthodes:

```
endfb.electron()  
endfb.matxs()
```

Le système PyNjoy

Jeu de données complet

```
#!/usr/local/bin/python
from PyNjoy import *
from os import uname
from os import getcwd
endfb = PyNjoy()
endfb.evaluationName = "/tmp/w0_eed1"
endfb.stoppingPowerFile = os.getcwd() + "../STPOWER_TAPE9_1984.txt"
endfb.execDir = "../" + uname()[0]
endfb.legendrebe = 7
endfb.estr = 3
endfb.gstr = 3
endfb.iwt = 2

endfb.hmatbe = "w"
endfb.matbe = 7400
endfb.evaluationFile = "$HOME/evaluations/ENDF-B-VIII.0/electrons/e-074_W_000.endf"
endfb.relaxationFile = "$HOME/evaluations/ENDF-B-VIII.0/atomic_relax/atom-074_W_000.endf"
endfb.electron()
endfb.matxs()
```

Exécution d'un cas test

Le fichier draglib produit se retrouve dans l'arborescence /tmp/w0_eed1.

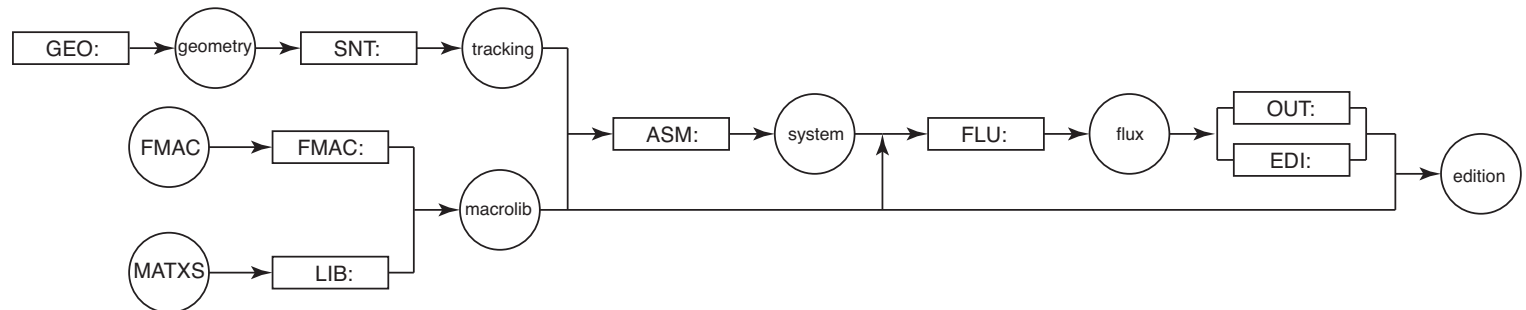
```
-bash-4.1$ cd Njoy2012_EPM_up138/python
-bash-4.1$ python w0_eed1.py
-bash-4.1$ ll -t | head
```

Les interactions
électroatomiques
Les interactions
douces (soft)
La discrétisation
multigroupe
Les collisions
inélastiques
Les interactions
bremsstrahlung
Les collisions
élastiques
Les évaluations
nucléaires
Le code de sections
efficaces NJOY-2012
Les données
EPICS2017
Revision de source
UPD
Le système PyNjoy
Le code DRAGON5

Le code DRAGON5

Les interactions électroatomiques
 Les interactions douces (soft)
 La discrétisation multigroupe
 Les collisions inélastiques
 Les interactions bremsstrahlung
 Les collisions élastiques
 Les évaluations nucléaires
 Le code de sections efficaces NJOY-2012
 Les données EPICS2017
 Revision de source UPD
 Le système PyNjoy
Le code DRAGON5

- Le code DRAGON5 permet la résolution des équations BFP par la méthode des ordonnées discrètes (SN) avec le module **SNT** :
- Il est possible de fournir les sections efficaces et les pouvoirs d'arrêt de deux façons différentes:
 - ◆ un fichier FMAC produit par CEPXS/ARVES peut être transformé en **macrolib** par le module **FMAC** :
 - ◆ un fichier MATXS peut être lu par le module **LIB** : pour produire une **microlib** et une **macrolib**
 - la correction de densité de Sternheimer sur les pouvoirs d'arrêt est effectuée par le module **LIB** : (mot clé { NOGAS | GAS })
 - le fichier MATXS peut être binaire ou ASCII si son nom commence par un caractère “_”.



Le code DRAGON5

Les interactions électroatomiques
 Les interactions douces (soft)
 La discrétisation multigroupe
 Les collisions inélastiques
 Les interactions bremsstrahlung
 Les collisions élastiques
 Les évaluations nucléaires
 Le code de sections efficaces NJOY-2012
 Les données EPICS2017
 Revision de source UPD
 Le système PyNjoy

Le code DRAGON5

Installation de DRAGON5

Depuis la version 5.0.5, les makefiles sont disponibles pour faciliter l'installation:

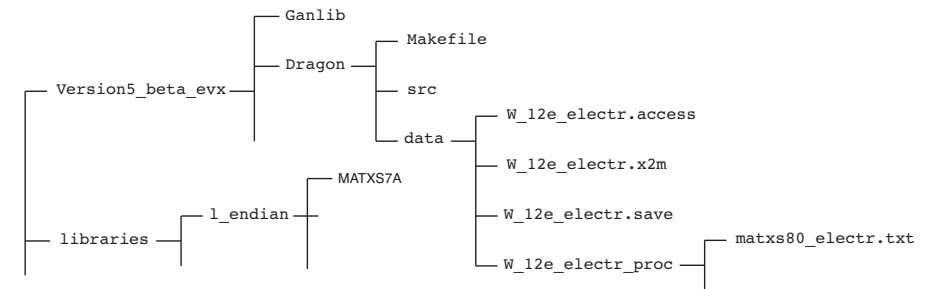
```
tar xvfz version5_v5.0.7.tgz
cd Version5_beta_evx
cd Dragon
make
```

Rendre exécutable les fichiers access et save

```
cd Version5_beta_evx/Dragon/data
chmod 755 W_12e_electr.access
chmod 755 W_12e_electr.save
```

Exécuter le fichier de données

```
cd Version5_beta_evx
cd Dragon
./rdragon W_12e_electr.x2m
```



W_12e_electr.access

```
#!/bin/sh
if [ $# = 0 ]
then
echo "usage: W_12e_electr.access directory" 1>&2
exit 1
fi
ln -s $1/data/W_12e_electr_proc/matxs80_electr.txt _matxs80
ls -l
echo "W_12e_electr access script terminated"
```

W_12e_electr.x2m

```
*-----
* TEST CASE W_12e_electr
*-----
MODULE GEO: LIB: MAC: SNT: ASM: FLU: OUT: DELETE: END: UTL: ;
LINKED LIST MICRO MACRO MACRO2 GEOM TRACK SYSTEM FLUX EEDITS ;
SEQ_ASCII _CEDITS :: FILE '_CEDITS.txt' ;
*-----
* Set and track the geometry
*-----
GEOM := GEO: :: CAR1D 2
        X- VOID X+ VOID
        MIX 1 2
        MESHX 0.0 0.3 4.0
        SPLITX 30 70
        ;
TRACK := SNT: GEOM ::
        TITLE 'HOMOGENIZED W_11Mev_12e_ph_CSD BENCHMARK WITH MATXS DATA'
        EDIT 2 MAXR 1000 NLIVO SN 16 SCAT 8 EPSI 1.E-4 MAXI 300 BFPL ;
*-----
* Compute the electron flux
*-----
MICRO := LIB: ::
        EDIT 1 NMIX 1 ANIS 8
        MIXS LIB: MATXS2 FIL: _matxs80
        MIX 1 300.0 (* K *) 19.3 (* g/cc *) NOGAS
        W0 = w 1.0
        ;
MACRO := MICRO :: STEP UP MACROLIB ;
MACRO2 := MACRO ;
MACRO := MAC: MACRO MACRO2 ::
        MIX 2 1 OLDL
        ;
MACRO2 := DELETE: MACRO2 ;
REAL qsour := 1.E10 2.0 / $Pi_R / ;
MACRO := MAC: MACRO ::
        READ INPUT
        MIX 1 FIXE
        <<qsour>> 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
        ;
SYSTEM := ASM: MACRO TRACK :: EDIT 2 ARM ;
FLUX := FLU: MACRO TRACK SYSTEM :: EDIT 2 TYPE S EXTE 100 ;
EEDITS := OUT: FLUX TRACK MACRO GEOM ::
        EDIT 2 COND SOUR 0.0518134 INTG NONE ! 1/(\ro_{W} g/cm^{3})
        ;
UTL: EEDITS :: STEP UP GROUP STEP AT 1 DIR
        IMPR H-FACTOR * IMPR C-FACTOR * IMPR FLUX-INTG * ;
_CEDITS := EEDITS ;
*
ECHO "test W_12e_electr completed" ;
END: ;
```

Le code DRAGON5

Les interactions
électroatomiques
Les interactions
douces (soft)
La discrétisation
multigroupe
Les collisions
inélastiques
Les interactions
bremsstrahlung
Les collisions
élastiques
Les évaluations
nucléaires
Le code de sections
efficaces NJOY-2012
Les données
EPICS2017
Revision de source
UPD
Le système PyNjoy
Le code DRAGON5

W_12e_electr.save

```
#!/bin/sh
#
if [ $# = 0 ]
then
echo "usage: W_12e_electr.save directory" 1>&2
exit 1
fi
echo "access W_12e_electr.save"
MACH='uname -s'
Sysx="'echo $MACH | cut -b -6'"
if [ $$Sysx = "CYGWIN" ]; then
MACH='uname -o'
elif [ $$Sysx = "AIX" ]; then
MACH='uname -s'
else
MACH='uname -sm | sed 's/[ ]/_/'
fi
ls -l
mv _CEDITS.txt $1/"$MACH"
echo "W_12e_electr.save completed"
```