

V FR 2902H99

INDC(FR)-035
NEANDC(E)-205/L
CEA-N-2088

- Note CEA-N-2088 -

Centre d'Etudes de Bruyères-le-Châtel

PROGRAMME DE MODELE OPTIQUE SPHERIQUE "SOMC2"

par

Christian LAGRANGE, Roger PERRIER

- Novembre 1979 -

Note CEA-N-2038

DESCRIPTION-MATIERE (mots clefs extraits du thesaurus SIDON/INIS)

en français

MODELES OPTIQUES
DIFFUSION POTENTIELLE
CODES S
SECTIONS EFFICACES TOTALES
TRANSMISSION
DISTRIBUTION ANGULAIRE

en anglais

OPTICAL MODELS
POTENTIAL SCATTERING
S CODES
TOTAL CROSS SECTIONS
TRANSMISSION
ANGULAR DISTRIBUTION

- Note CEA-N-2088 -

Centre d'Etudes de Bruyères-le-Châtel

PROGRAMME DE MODELE OPTIQUE SPHERIQUE "SOMC2"

par

Christian LAGRANGE, Roger PERRIER

- Novembre 1979 -

CEA-N-2088 - Christian LAGRANGE, Roger PERRIER
PROGRAMME DE MODELE OPTIQUE SPHERIQUE "SOMC2"

Sommaire. - Nous présentons le mode d'utilisation du programme "SOMC2" qui permet de faire des calculs en modèle optique sphérique pour la diffusion de neutrons, protons, ou particules α . Dans une première partie nous rappelons brièvement le formalisme. Dans une deuxième partie nous donnons la structure générale du programme. Une méthode de moindres carrés généralisée est ensuite présentée qui permet non seulement de déterminer les meilleurs paramètres mais aussi les incertitudes induites sur ces paramètres par les erreurs expérimentales. Finalement dans une troisième partie nous donnons une description des données d'entrée et de sortie, ainsi que les diverses limitations du code.

1975

40 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

CEA-N-2088 - Christian LAGRANGE, Roger PERRIER
COMPUTER PROGRAM "SOMC2" FOR SPHERICAL OPTICAL MODEL CALCULATIONS

Summary. - This report is a description of the computer program "SOMC2". It is a program for spherical optical model calculations of the nuclear scattering cross sections of neutron, proton and α particles. In the first section, the formalism and the non-linear least square algorithm are presented. Section II is devoted to the detailed explanations of all the routines of the present program. A brief explanation of the methods used to obtain not only the fitting parameters, but also their uncertainties and their correlations is given. In section III detailed explanations of the input-data cards and of the various out-puts are given. Finally some examples of calculations are presented.

1979

40 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

P L A N

	pages
I - PRESENTATION DU FORMALISME UTILISE	5
I.1 - Présentation du modèle optique sphérique	5
1a - Paramètres du modèle	5
1b - Grandeurs physiques calculées	6
1c - Méthode numérique	7
I.2 - Recherche automatique de paramètres	7
2a - Position du problème ; notations	7
2b - La Méthode de LEVENBERG - MARQUARDT	10
2c - La Modification de FLETCHER	12
2d - Estimation des erreurs sur les paramètres	12
II - STRUCTURE GENERALE DU CODE, PROCEDURE DE RECHERCHE AUTOMATIQUE DES PARAMETRES	15
II.1 - Structure globale du programme SOMC2	15
1a - Les sous-programmes superviseurs	16
1b - Les sous-programmes employés pour la recherche automatique des paramètres	17
1c - Les sous-programmes constituant la partie principale du modèle optique	17
II.2 - Procédure de recherche automatique des paramètres	18
III - DESCRIPTION DES DONNEES D'ENTREE ET DE SORTIE	21
III.1 - Données d'entrée	21
III.2 - Données de sortie	27
III.3 - Exemples d'utilisation du code	29
IV - ANNEXE : RESULTATS DE CALCULS POUR L'INTERACTION NEUTRON - ⁸⁹ Y	34

I - PRESENTATION DU FORMALISME UTILISE

I. - Présentation du modèle optique sphérique

Les lecteurs pourront se référer au livre de P.E. HODGSON "The Optical Model of Elastic Scattering" [1] pour le contenu physique du modèle, et à l'article de M.A. MELKANOFF, T. SAWADA et J. RAYNAL, "Nuclear Optical Model Calculations" [2] pour de plus amples développements concernant la méthode numérique utilisée pour la résolution de l'équation de Schrödinger décrivant la diffusion particule-noyau par l'intermédiaire d'un potentiel.

I.1a - Paramètres du modèle

Le potentiel de diffusion particule-noyau utilisé a la forme usuelle suivante :

$$V(r) = -Vf(r, a, R) + i \left[-W_V f(r, a_V, R_V) + 4W_D a_D \frac{d}{dr} f(r, a_D, R_D) \right] + \left(\frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 \frac{1}{r} V_S \vec{\ell} \cdot \vec{\sigma} \frac{d}{dr} f(r, a_S, R_S) \quad (1)$$

avec les rayons $R_i = r_i A^{1/3}$ (A étant le nombre de masse du noyau cible) et le facteur de forme de Saxon-Woods :

$$f(r, a, R) = \left[1 + \exp \left[(r-R)/a \right] \right]^{-1} \quad (1a)$$

Notons que le potentiel imaginaire de surface, à paramètres indicés D, peut aussi avoir la forme suivante :

$$- 4W_D \exp \left[- \left(\frac{r - R_D}{a_D} \right)^2 \right] \quad (1b)$$

qui décrit une "absorption de surface gaussienne".

Dans ce qui suit, les intensités des différents potentiels (V, W_V, W_D, V_S) seront exprimées en MeV, les diffusivités (a, a_V, a_D, a_S) et les rayons réduits (r, r_V, r_D, r_S) en fermi.

I.1b - Grandeurs physiques calculées

Le modèle présent permet le calcul des grandeurs physiques suivantes :

- Les sections efficaces élastique totale "de forme", de réaction, et la section efficace totale qui est la somme des deux précédentes,
- La section efficace différentielle angulaire de diffusion élastique ainsi que la distribution angulaire de polarisation,
- Les pénétrabilités ou coefficients de transmission T_1^j qui, pour chaque onde partielle " ℓ, j ", décrivent la probabilité d'absorption de l'onde incidente à l'intérieur du noyau cible,
- Les fonctions densités d'ondes $s(\ell=0)$ et $p(\ell=1)$:

Celles-ci sont calculées aux basses énergies (généralement à 10 keV), et sont définies, pour une particule incidente de spin $s=\frac{1}{2}$, par la relation :

$$s_{\ell} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{E_0}{E} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{P_{\ell}} \frac{(\ell+1) T_{\ell}^+ + \ell T_{\ell}^-}{2\ell + 1} \quad (2)$$

pour $\ell = 0, 1$, $E_0 = 10^{-3}$ keV, T_{ℓ}^{\pm} indiquant que $j = \ell \pm \frac{1}{2}$,
et les valeurs :

$$P_0 = 1$$

$$P_1 = \frac{(k R)^2}{1 + (k R)^2} \quad \begin{array}{l} (R = \text{rayon du potentiel réel} \\ k = \text{nombre d'ondes}) \end{array} \quad (2a)$$

- La longueur de diffusion R' , telle que :

$$(R')^2 = \frac{\sigma_e}{4\pi} \quad (2b)$$

σ_e étant la section efficace totale élastique "de forme".

Remarque

Dans le cas où le projectile est une particule chargée, du fait de l'interaction Coulombienne de portée infinie, les calculs de σ_e et de la section efficace totale, qui sont effectués par le programme en ne tenant pas compte des déphasages coulombiens, n'ont donc pas de signification physique.

I.1c - Méthode numérique

La méthode numérique utilisée dans la résolution de l'équation de Schrödinger pour chaque onde partielle " l_j " est la méthode de Numerov modifiée. Cette méthode est décrite en détail dans la référence [2]. De plus, nous avons utilisé la forme sommée de l'algorithme (cf [2] eq. 3 - 47 a, b, c) en vue de réduire les erreurs d'arrondis.

I.2 - Procédure de recherche automatique des paramètres

I.2a - Position du problème ; notations

Nous désignons par :

- m le nombre d'observations expérimentales,
- n le nombre de paramètres à optimiser,

(y_i, θ_i) les observations expérimentales y_i correspondant aux angles θ_i
pour i variant de 1 à m ,
 x_j ($j = 1, \dots, n$) les paramètres à ajuster, composantes du vecteur \vec{x} ,
 σ_i^2 ($i = 1, \dots, m$) les variances associées à chaque valeur expérimentale y_i ,
 Y_i ($i = 1, \dots, m$) les valeurs exactes, non connues, des grandeurs physiques.

On supposera d'autre part que les quantités expérimentales y_i suivent une loi de probabilité donnée par la distribution normale de GAUSS autour des valeurs Y_i avec la variance σ_i^2 . Ainsi la probabilité, pour un y_i fixé, pour que Y_i soit entre Y_i et $Y_i + dY_i$ est donnée par :

$$P(Y_i) dY_i = \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(Y_i - y_i)^2}{2 \sigma_i^2} \right] dY_i$$

Le meilleur choix des Y_i ($i = 1$ à m) est obtenu quand :

$$P \equiv \prod_{i=1}^m P(Y_i) = \prod_{i=1}^m \left[\frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(Y_i - y_i)^2}{2 \sigma_i^2} \right] \right] = \prod_{i=1}^m \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\sum_{j=1}^m \frac{(Y_j - y_j)^2}{2 \sigma_j^2} \right]$$

est maximum, ce qui revient à rechercher les valeurs des paramètres x_j minimisant la fonction χ^2 définie par :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^m \frac{(y_i - Y_i)^2}{2 \sigma_i^2} \quad (3)$$

Dans cette relation les Y_i , quantités inconnues, doivent être remplacées par leurs estimations $y_i(\vec{x})$ obtenues à partir du modèle théorique.

En posant :

$$F_i(\vec{x}) = \frac{y_i - y_i(\vec{x})}{\sigma_i} \quad (i = 1, \dots, m)$$

(3) peut se mettre sous la forme :

$$\phi(\vec{x}) = \frac{1}{2} \|\vec{F}(\vec{x})\|^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m [F_i(\vec{x})]^2 \quad (4)$$

où :

$$\vec{x} \in \mathbb{R}^n, \vec{F} \in \mathbb{R}^m \text{ et } m \geq n$$

Nous sommes donc amenés à rechercher le minimum en $\vec{x}^* \in \mathbb{R}^n$ d'une somme de carrés de plusieurs fonctions non linéaires $F_i(\vec{x})$ des variables indépendantes x_j ($j = 1, \dots, n$).

Pour minimiser (4) nous utilisons dans ce travail la méthode de Levenberg-Marquardt [4] particulièrement bien adaptée à ce genre de problème, et nous indiquerons une modification due à Fletcher [3] apportée à l'algorithme correspondant.

Pour cela nous supposons que la fonction $\phi(\vec{x})$ est deux fois continuellement différentiable par rapport aux variables x_j . En différenciant deux fois (4) nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(\vec{x})}{\partial x_j} &= \sum_{i=1}^m F_i(\vec{x}) \frac{\partial F_i(\vec{x})}{\partial x_j} \quad (j = 1, \dots, n) \\ \text{puis :} \\ \frac{\partial^2 \phi(\vec{x})}{\partial x_j \partial x_k} &= \sum_{i=1}^m \left[\frac{\partial F_i(\vec{x})}{\partial x_j} \frac{\partial F_i(\vec{x})}{\partial x_k} + F_i(\vec{x}) \frac{\partial^2 F_i(\vec{x})}{\partial x_j \partial x_k} \right] \end{aligned} \quad (5)$$

($j, k = 1, \dots, n$)

I.2b - Méthode de LEVENBERG-MARQUARDT

Effectuons un développement limité en série de Taylor au premier ordre de la fonction $F(\vec{x})$ en \vec{x}_0 . Nous obtenons :

$$F_i(\vec{x}_0 + \delta \vec{x}) = F_i(\vec{x}_0) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial F_i(\vec{x}_0)}{\partial x_j} \delta x_j \text{ avec } F_i(\vec{x}_0) = \frac{y_i - y_0}{\sigma_i} \text{ et } y_0 = y(\vec{x}_0)$$

$$(i = 1, \dots, m)$$

La fonction $\phi(\vec{x})$ devient :

$$\phi(\vec{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \frac{1}{\sigma_i^2} \left\{ y_i - y_0 - \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial y_0}{\partial x_j} \delta x_j \right) \right\}^2 \quad (6)$$

Dans ces expressions, $\delta \vec{x}$, qui représente une petite variation de \vec{x} au voisinage du point \vec{x}_0 , peut être considérée comme la correction possible des paramètres \vec{x} d'une itération à l'autre, correction qu'on estimera par la méthode des moindres carrés. On recherchera donc le vecteur :

$\vec{\delta} = \delta \vec{x}$ qui minimise (6) en résolvant le système d'équations linéaires suivant :

$$\frac{\partial \phi}{\partial (\delta x_k)} = - \sum_{i=1}^m \frac{1}{\sigma_i^2} \left[(y_i - y_0) - \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial y_0}{\partial x_j} \delta x_j \right) \right] \frac{\partial y_0}{\partial x_k} = 0$$

$$(k = 1, \dots, n)$$

qu'on peut encore écrire sous la forme :

$$\sum_{j=1}^n \delta x_j \sum_{i=1}^m \frac{1}{\sigma_i^2} \frac{\partial y_o}{\partial x_j} \frac{\partial y_o}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^m \frac{1}{\sigma_i^2} (y_i - y_o) \frac{\partial y_o}{\partial x_k}$$

$$(k = 1, \dots, n)$$

Compte tenu des notations du paragraphe [I.2a] et désignant par J la matrice de Jacobi de dimension (m,n) définie par les éléments

$J_{ij} = \partial F_i(\vec{x}) / \partial x_j$, $\vec{\delta}$ est finalement solution de l'équation :

$$A \vec{\delta} = - \vec{v} \quad (6a)$$

où $\vec{v} \equiv \vec{\nabla} \phi(\vec{x}) = [J(\vec{x})]^T F(\vec{x})$, J^T désignant la matrice transposée de J, et $A \equiv J^T J$ est une matrice carrée d'ordre n. D'où le processus itératif suivant correspondant à la méthode de Levenberg-Marquardt :

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n + \vec{\delta}_n \quad (7)$$

Pour éviter les singularités possibles de la matrice A, le vecteur $\vec{\delta}$ est en fait déterminé comme étant la solution du système d'équations linéaires généralisé :

$$(A + \mu I) \vec{\delta} = - \vec{v} \quad (7a)$$

où A et \vec{v} sont évalués en \vec{x}_n , μ est une constante réelle positive et I la matrice unité d'ordre n. Ce schéma peut encore s'écrire de la façon suivante :

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - \left[\mu_n I + \left(J(\vec{x}_n) \right)^T J(\vec{x}_n) \right]^{-1} \left(J(\vec{x}_n) \right)^T F(\vec{x}_n) \quad (8)$$

où μ_n est une suite de constantes réelles positives à déterminer, dont le choix est précisé dans [7]

I.2c- La modification de Fletcher

Cette modification porte essentiellement sur un choix particulier de la valeur du paramètre μ au départ de chaque itération. On décrira seulement les grandes lignes concernant cette modification. Pour toutes les démonstrations nécessaires, ou des renseignements complémentaires, se reporter à la référence [3].

En examinant la Fig. 1 on voit qu'après la résolution de l'équation (7a) et la détermination de :

$\phi' = \phi(\vec{x} + \vec{\delta})$, on fait un nouveau choix de μ basé sur un facteur R de "Réduction /Prédiction" calculé à partir de la relation suivante :

$$R = \phi(\vec{x}) - \phi(\vec{x} + \vec{\delta}) = - 2 \vec{\delta}^T \vec{v} - \vec{\delta}^T A \vec{\delta} \quad (9)$$

Deux cas sont possibles :

- a) si R est voisin de 1 on diminue μ ,
- b) si R est près de 0 ou plus petit que 0 on augmente μ .

En fait, il existe certaines valeurs intermédiaires de R pour lesquelles il est préférable de ne pas changer le paramètre μ . Fletcher a proposé de choisir deux constantes arbitraires ρ et σ telles que :

$0 < \rho < \sigma < 1$, et de diminuer μ si $R > \sigma$ ou d'augmenter μ si $R < \rho$. Après plusieurs essais faits avec $0,01 \leq \rho \leq 0,25$ et $0,5 \leq \sigma \leq 0,9$ les valeurs suivantes de ρ et σ ont été retenues.

$$\rho = 0,25 \text{ et } \sigma = 0,75$$

Les variations du paramètre μ sont expliquées en détail dans la référence [7]

I.2d - Estimation des erreurs sur les paramètres

Notons que le calcul exact de ces erreurs ne peut se faire que dans le cas de fonctions linéaires connues analytiquement, mais il est possible d'en obtenir une bonne estimation en linéarisant F comme nous l'avons fait dans la relation (6).

L'équation (6a) nous permet d'écrire :

$$\vec{\delta} = -A^{-1} \vec{v} \quad (10)$$

Nous désignerons par a_{ij}^{-1} les éléments de la matrice A^{-1} inverse de A .
Posons :

$$y_i(\vec{x}) = y_i - y_i(\vec{x}) \quad \text{et} \quad x_{ik} = \frac{\partial y_i(\vec{x})}{\partial x_k}$$

$$(i = 1, \dots, m)$$

$$(k = 1, \dots, n)$$

A partir de ces notations, les éléments a_{jk} de la matrice A sont :

$$a_{jk} = \sum_{i=1}^m \frac{1}{\sigma_i^2} x_{ji} x_{ik} \quad (j, k = 1, \dots, n)$$

En explicitant (10), nous obtenons :

$$\delta_j = - \sum_{k=1}^n a_{jk}^{-1} v_k = - \sum_{k=1}^n \left[a_{jk}^{-1} \sum_{i=1}^m \frac{1}{\sigma_i^2} x_{ki} y_i \right] \quad (11)$$

$$(j = 1, \dots, n)$$

avec :
$$v_k = \sum_{i=1}^m \frac{1}{\sigma_i^2} x_{ki} y_i \quad (k = 1, \dots, n)$$

La variance sur δ_j peut être estimée à partir de la relation :

$$\sigma^2(\delta_j) = \sum_{i=1}^m \left[\sigma_i^2 \left(\frac{\partial (\delta_j)}{\partial y_i} \right)^2 \right] \quad (j = 1, \dots, n) \quad (12)$$

En dérivant (11), on obtient :

$$\frac{\partial(\delta_j)}{\partial Y_i} = - \sum_{k=1}^n a_{jk}^{-1} \frac{x_{ki}}{\sigma_i^2} \quad \begin{matrix} (i = 1, \dots, m) \\ (j = 1, \dots, n) \end{matrix}$$

En reportant dans (12), on trouve finalement :

$$\sigma^2(\delta_j) = \sigma^2(x_j) = \sum_{k,\ell=1}^n \sum_{i=1}^m \left[a_{jk}^{-1} a_{j\ell}^{-1} \left(\frac{1}{\sigma_i^2} x_{ki} x_{i\ell} \right) \right] = \sum_{k=1}^n \sum_{\ell=1}^n (a_{jk}^{-1} a_{j\ell}^{-1} a_{k\ell})$$

$$\text{d'où : } \sigma^2(x_j) \approx a_{jj}^{-1} \quad (13)$$

Ainsi, l'incertitude sur les paramètres optimisés nous est donnée par la racine carrée des éléments diagonaux de l'inverse de la matrice A, matrice approximant le hessien H de la fonction de coût au voisinage du minimum.

II - STRUCTURE GENERALE DU CODE, PROCEDURE DE RECHERCHE AUTOMATIQUE DES PARAMETRES

Ce code a été construit en deux étapes :

- a) Une première étape a consisté à obtenir un code de calcul peu sophistiqué, mais rapide, et d'utilisation aisée pour le calcul de données neutroniques. Par souci d'homogénéité avec la version du code d'équations couplées "Jupitor -1" de T. TAMURA [5] que nous avons précédemment adaptée [6], nous avons conservé le maximum d'expressions et de notations employées dans le code "Jupitor-1" [5].
- b) Dans une seconde étape [7], l'un de nous (R. PERRIER) a introduit une procédure d'optimisation des paramètres. Cette procédure peut en particulier être utilisée pour la détermination d'un jeu physiquement cohérent de paramètres, permettant de décrire l'interaction neutron-noyau dans un grand domaine d'énergie (10 keV - 20 MeV). Les diverses grandeurs physiques mesurées utilisées en vue de l'ajustement des paramètres peuvent être celles préconisées par la méthode "SPRT" [8], c'est à dire éventuellement les fonctions force d'ondes s et p, le rayon de diffusion à basse énergie, et la section efficace totale à diverses énergies.

II.1 - Structure globale du programme "SOMC2"

On peut distinguer trois grandes parties :

- Un ensemble de sous-programmes superviseurs qui assurent les entrées, calculent les quantités indépendantes des paramètres, effectuent les sorties.
- Une procédure de recherche automatique de paramètres qui opère à partir d'un ensemble de valeurs initiales de ces derniers.
- Un ensemble de sous-programmes rattachés à la procédure d'optimisation qui déterminent les potentiels, effectuent l'intégration numérique, calculent les grandeurs physiques d'intérêt.

II.1a - Les sous programmes superviseurs (RAZ, RDATA, CNTRL, APLY)

- "RAZ" effectue un certain nombre de remises à zéro de zones de mémoires indispensables au bon fonctionnement du programme,
- "RDATA". Ce sous-programme :
 - . lit plusieurs ensembles de "clés" permettant de commander les entrées et les sorties du programme ainsi que le choix des paramètres à optimiser,
 - . permet d'introduire suivant l'option choisie les valeurs expérimentales des grandeurs physiques servant à l'optimisation avec leurs incertitudes (sections efficaces différentielles de diffusion élastique, sections efficaces totales, fonctions densités S_0 et S_1 et longueur de diffusion R'),
 - . assure l'impression des données d'entrée,
 - . permet de fixer toutes les valeurs des paramètres du modèle optique.
- "CNTRL". Ce module calcule un certain nombre de quantités indépendantes des paramètres, en particulier :
 - . le nombre maximum d'ondes partielles (l_{\max}),
 - . la valeur du rayon de raccordement (R_{\max}),
 - . les fonctions de Coulomb. Les sous-programmes correspondant nous ont été fournis par les auteurs de la référence [9]. Le programme de calcul des déphasages coulombiens est celui écrit par les auteurs de la référence [10]

"APLY" détermine les polynômes de Legendre. Il calcule pour les particules chargées l'amplitude de la diffusion Coulombienne.

Les quatre modules précédents doivent être appelés avant la procédure d'optimisation, après quoi on peut définir l'ensemble des variables nécessaires au bon fonctionnement de "EVOPT".

II.1b - Recherche automatique des paramètres

Elle est assurée par le sous-programme "EVOPT" faisant appel aux modules : FUNCT, MINV, LINEAR dont on analysera les fonctions au prochain paragraphe.

Notons que c'est le sous-programme "FUNCT" qui appelle les principaux sous-programmes de calcul de modèle optique (PUITS, AINT, ASOLV, XSEC).

II.1c - Sous-programmes constituant la partie principale du Modèle Optique :

"PUITS" permet le calcul des potentiels,

"AINT" et "ASOLV" servent à définir les conditions initiales pour l'intégration numérique, puis effectuent la résolution des équations radiales pour toutes les ondes partielles et calculent les coefficients C_l^j ainsi que les coefficients de transmission.

"XSEC" Ce sous programme calcule :

- . la section efficace totale σ_T , la section efficace de réaction σ_R , les fonctions densités (S_0 , S_1) et la longueur de diffusion F' , la section efficace différentielle de diffusion élastique $\frac{d\sigma}{d\Omega}$, et la distribution angulaire de polarisation.

Remarque :

La section efficace différentielle élastique $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ peut être obtenue sous la forme suivante :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_L B_L P_L (\cos \theta)$$

où les $P_L (\cos \theta)$ sont les polynômes de Legendre. Les coefficients B_L sont calculés par l'approximation suivante : N étant le nombre de coefficients (N est calculé dans le sous-programme "CNTRL"), on calcule en N points équidistants entre 0 et 180 degrés la section efficace différentielle, puis l'on résout le système d'équations linéaires ainsi constitué (sous-programmes ABLC et DLSB, le sous-programme DLSB n'étant pas fourni dans la liste).

La Fig. 2 donne l'organigramme général du programme "SOMC2".

II.2 - Procédure de recherche automatique des paramètres

En résumé, cette procédure permet de trouver une estimation des paramètres \vec{x} qui minimisent, au sens des moindres carrés, $||F(\vec{x})||^2$. Pour cela on a linéarisé le modèle en développant la fonction $F(\vec{x})$ en série de Taylor jusqu'au premier ordre, la correction $\vec{\delta}$ à apporter aux paramètres à chaque itération étant déterminée par le système d'équations linéaires (7a) dont la matrice est symétrique et définie positive. Notons que dans l'algorithme de Marquardt, la direction optimale de recherche se trouve entre la direction $\vec{\delta}$ de Taylor et celle de "STEEPEST DESCENT" (gradient négatif : $-\vec{v}$), elle est solution de (7a). Dans la correction de Fletcher on choisit une valeur optimale du paramètre μ à chaque itération, ce qui permet dans certains cas d'améliorer la convergence.

L'organigramme de la Fig. 1 donne une idée générale de cette méthode et la procédure "EVOPT" ne fait que la mettre en oeuvre. Cette dernière comporte quatre modules et permet de faire une recherche sur vingt paramètres au maximum, le nombre de données expérimentales pour $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ étant limité à 90. Nous allons voir le rôle de ces modules :

a) - "EVOPT" constitue le corps de la procédure et fait appel aux sous-programmes : FUNCT, LINEAR, MINV. Ce module doit être appelé par "SOMC2" à l'aide de l'instruction :

```
CALL EVOPT (CORX, VARX, X, DX, EXP, WGT, VF, M, N, MAXF, IPRINT, MODE)
```

dans laquelle on trouve :

CORX : tableau à deux dimensions [CORX (20,20)] contenant après exécution la matrice de corrélation des paramètres ;

VARX : bloc unidimensionnel [VARX (20)] fournissant les estimations des variances sur les paramètres ajustés ;

X : bloc unidimensionnel [X (20)] contenant au départ les valeurs initiales des paramètres (\vec{x}) et au retour les composantes du vecteur correspondant au minimum local ;

DX : tableau de dimension 20 servant à fixer le pourcentage de variation à donner aux paramètres (\vec{x}) pour le calcul du Jacobien par différences finies ;

EXP : bloc unidimensionnel [EXP (90)] dans lequel sont placées au départ les valeurs expérimentales y_i ($i = 1, \dots, m$) ;

WGT : contient en entrée les poids $1/\sigma_i^2$ associés à chaque observation, tableau de dimension 90 ;

VF : variable réelle spécifiant en fin de calcul la valeur du χ^2 réduit ;

M : nombre d'observations ($M \leq 90$) ;

N : nombre de paramètres à optimiser ($N < 20$) ;

MAXFN : nombre d'appels maximum à la fonction, fixé par l'utilisateur ;

IPRINT : deux possibilités :

IPRINT = 1 : on imprime à chaque itération le nombre d'appels à la fonction, la valeur du χ^2 , les valeurs des anciens et des nouveaux paramètres avec les variations correspondantes, et les composantes du vecteur gradient,

IPRINT = 0 : aucune impression ;

MODE : si MODE = 1 on utilise la méthode de Marquardt et si MODE = 0 on fait appel à la modification de Fletcher.

b) "LINEAR". Sous-programme permettant de calculer :

- le Jacobien J de $F(\vec{x})$ par différence finie,
- les éléments de la matrice $A = J^T J$,
- le gradient $\vec{v} = J^T F$

c) "MINV". Assure l'inversion de la matrice $(A + \mu_n I)$, équation (5a) par la méthode de Choleski.

d) "FUNCT". Permet de calculer $\phi(\vec{x})$ suivant trois possibilités indépendantes :

- ajustement sur S_0 , S_1 et R' ;
- ajustement sur les sections efficaces totales en fonction de l'énergie ;
- ajustement sur les sections efficaces différentielles de diffusion élastique ;

Ces ajustements font appel bien entendu chaque fois aux erreurs expérimentales associées.

III - DESCRIPTION DES DONNEES D'ENTREE ET DE SORTIE

III.1 - Données d'entrée

1ère carte KTRL(N) N = 1,20 format 20 I 4

N	Valeur	Signification
1	2 s	s est le spin du projectile ; $s = 0, 1/2$
2	0	la valeur de l'onde partielle maximale (l_{max}) est déterminée par le code
	I	$I = l_{\text{max}} + 1$ $I \leq 69$
3	0	le nombre de pas d'intégration numérique (N) est déterminé par le code
	I	$I = N$ $N \leq 198$
4	0	absorption de surface de type "dérivée de Woods-Saxon"
	1	absorption de surface de type "gaussienne"
5	I	Nombre d'angles auxquels on calcule la distribution angulaire $2 < I < 90$
6	0	On ne calcule pas la distribution angulaire
	1	On calcule la distribution angulaire
	2	On calcule la distribution angulaire et on obtient les résultats sous forme de cartes perforées
7	I	$I = 0, 1, 2$; même signification que KTRL (6) mais pour les coefficients définis par : $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_L B_L P_L (\cos \theta)$
8	I	$I = 0, 1, 2$, même signification que KTRL (7) mais pour les coefficients de transmission $T(l, j)$
9	I	I degré le plus élevé du polynôme de Legendre pour le calcul de la distribution angulaire
10	I	$V = V_0 - \frac{I}{1000} E$ - E étant l'énergie du projectile (dans le laboratoire) exprimée en MeV.
11	K	$W_V = W_{V0} + \frac{K}{1000} E$

KTRLN (N) (suite)

N	Valeur	Signification
12	J	$W_D = W_{D0} + \frac{J}{1000} E \quad \text{si KTLOUT (11) = 0}$ $W_D = W_{D0} + \frac{J}{100} \sqrt{E} \quad \text{si KTLOUT (11) = 1}$
14	0 1 2	<p>Fin normale du calcul</p> <p>Nouveau calcul : en changeant l'énergie du projectile ou les intensités des potentiels : carte suite</p> <p>Nouveau calcul avec un jeu de données commençant à la carte 1</p>
15	0 1 - 1	<p>On n'introduit pas de valeurs expérimentales de $\frac{d\sigma}{d\Omega}$</p> <p>On introduit des valeurs expérimentales de $\frac{d\sigma}{d\Omega}$</p> <p>Les valeurs expérimentales de $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ sont celles de l'étape précédente</p>
16	0 1	<p>Calcul seul.</p> <p>Calcul du χ^2, avec $\chi^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \left[\frac{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \text{ exp} - \frac{d\sigma}{d\Omega} \text{ th} \right)}{\Delta \text{ exp}} \right]^2$</p> <p>Recherche des paramètres (N = KTRL(15))</p>
17	0, 1, -1	Même signification que pour KTLOUT (15) mais pour R', S ₀ , S ₁
18	0, 1	Même signification que pour KTLOUT (16) mais pour R', S ₀ , S ₁
19	0, N, -N	Même signification que pour KTLOUT (15), mais ici pour N valeurs de la section efficace totale.
20	0, 1	Même signification que pour KTLOUT (16) mais en ce qui concerne les sections efficaces totales.

2ème carte KTLOUT (N) N = 1,20 format 20 I 4

La valeur 1 correspond généralement à une sortie sur listing de :

- quantités calculées ; c'est le cas pour les valeurs suivantes de N,

1) - les fonctions de coulomb modifiées en $R - H$ et $R + H$, R étant le rayon de raccordement, et H le pas d'intégration numérique.

2) - les déphasages coulombiens $e^{i\sigma_l}$.

3) - les différents potentiels (réel, imaginaire, spin-orbite, coulombien).

4) - les coefficients C_l^j .

5) - les coefficients de transmission $T(l, j)$.

6) - la distribution angulaire de diffusion élastique et la polarisation

10) - les fonctions densité S_0 , S_1 , et le rayon de diffusion R' .

- ou de valeurs expérimentales introduites comme données ; c'est le cas pour les valeurs suivantes de N :

15) - distribution angulaire expérimentale de diffusion élastique

16) - valeurs expérimentales des fonctions densité et rayon de diffusion

17) - valeurs expérimentales des sections efficaces totales

- Quelques valeurs particulières de KTLOUT(N) sont utilisées ainsi pour les valeurs suivantes de N :

- KTLOUT (8) = 1 permet de contrôler le calcul des B_L dans

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_L B_L P_L (\cos \theta). \text{ La distribution angulaire est reconstruite à}$$

partir des coefficients B_L .

- KTLOUT (11) = 1 permet de choisir une loi de variation de l'absorption de surface en \sqrt{E} . Ne peut être utilisé dans la procédure de recherche de paramètres.
- KTLOUT (14) = N N étant un nombre quelconque permettant de différencier les différentes sorties sous forme de cartes perforées (par exemple N = Z, Z étant le nombre atomique du noyau cible)

3ème carte IOPT(N) N = 1,20 format 20 I 4

Cette carte permet de définir les paramètres pour lesquels on fait une recherche. On ne doit l'introduire que si l'option recherche de paramètres est introduite en première carte : KTRL (16, 18 ou 20) différent de zéro. Les paramètres sont indicés dans l'ordre suivant (équation 1)

1 V , 2 W_V , 3 W_D , 4 V_S

5 a , 6 a_V , 7 a_D , 8 a_S

9 r , 10 a_V , 11 r_D , 12 r_S , 13 r_C

14 KTRL (10), 15 KTRL (11), 16 KTRL (12)

On rappelle que r_C est le rayon réduit du potentiel Coulombien, KTRL (10), KTRL (11), KTRL (12), les coefficients de variation avec l'énergie incidente du projectile de l'intensité des différents potentiels. La recherche sur le paramètre N se fait en donnant à IOPT (N) la valeur 1. La valeur 0 indique au contraire qu'aucune recherche n'est faite sur ce paramètre.

4ème et 5ème cartes EXTCOM (N) N = 1,20 Format 10 F 8.3

EXTCOM (N)

N	Valeur	Signification
1	H	pas d'intégration numérique en fermi.
2	θ	la distribution angulaire est calculée aux angles,
3	$\Delta \theta$	$\theta_1 = \theta$, $\theta_2 = \theta + \Delta \theta$, $\theta_3 = \theta + 2 \Delta \theta$, ...
4	P M A S	Nombre de masse du projectile
5	T M A S	Nombre de masse du noyau cible
6	Z Z'	Produit des charges du projectile et du noyau cible
7	E L A B	Energie du projectile en MeV (système du laboratoire)
8	V ou V_0	Intensité du potentiel réel en MeV, cf KTRL (10)
9	W_V ou W_{V0}	Intensité du potentiel imaginaire de volume en MeV, cf KTRL (11)
10	W_D ou W_{D0}	Intensité du potentiel imaginaire de surface en MeV, cf KTRL (12)
11	V_s	Intensité du potentiel spin-orbite en MeV
12	a	Diffusivité du potentiel réel en fermi
13	a_V	Diffusivité du potentiel imaginaire de volume en fermi
14	a_D	Diffusivité du potentiel imaginaire de surface en fermi
15	a_s	Diffusivité du potentiel spin-orbite en fermi
16	r	Rayon réduit du potentiel réel en fermi
17	r_V	Rayon réduit du potentiel imaginaire de volume en fermi
18	r_D	Rayon réduit du potentiel imaginaire de surface en fermi
19	r_s	Rayon réduit du potentiel spin-orbite en fermi
20	r_c	Rayon réduit du potentiel coulombien Le potentiel coulombien étant défini comme : $V_c(r) = \begin{cases} \frac{Z Z' e^2}{2 R_c} \left(3 - \frac{r^2}{R_c^2} \right) & r < R_c \\ \frac{Z Z' e^2}{r} & r > R_c \end{cases}$ où r est la coordonnée radiale relative et $R_c = r_c A^{1/3}$

Une carte suite (si KTRL(14) = 1) format (4F8.3, 1214)

Dans l'ordre :

ELAB (MeV), V ou V_0 (MeV), W_V ou W_{V0} (MeV), W_D ou W_{D0} (MeV)

KTRL,N = 2, 14, 16, 16, 20 ; KTLOUT N = 15, 16, 17

Un nouveau calcul est effectué, seules changent les données figurant sur la carte suite.

Données expérimentales de diffusion élastique (si KTRL(15) = 1)

Le nombre de données expérimentales est 3N avec $N = KTRL(5)$.

En premier, la valeur des angles (en degrés) $\theta(i)$ $i = 1, N$.

En second, la valeur de la section efficace (en millibarns) $\sigma(i)$ $i = 1, N$.

En troisième, le pourcentage d'erreur expérimentale $\Delta(i)$ $i = 1, N$.

Données expérimentales de R' , S_0 , S_1 (si KTRL(17) = 1)

Dans l'ordre (format 8 D 10.3) :

R' $\Delta R'$, S_0 ΔS_0 , S_1 ΔS_1

où Δx est l'erreur expérimentale absolue.

Données expérimentales de section efficace totale (si KTRL(19) = N > 0)

Le nombre de données expérimentales est 3N, $N = KTRL(19) > 0$.

En premier lieu, les énergies du neutron incident (laboratoire) en MeV $i=1, N$.

En second lieu, les valeurs expérimentales de la section efficace totale en millibarns $i = 1, N$.

En troisième lieu, les erreurs expérimentales absolues sur les sections efficaces totales en millibarns $i = 1, N$.

Remarques

1) sur la détermination du nombre maximum d'ondes partielles et du rayon de raccordement :

Les deux quantités peuvent être calculées automatiquement par le code de la manière suivante :

- soit k le nombre d'ondes, R_x la plus grande des valeurs $r_i A^{1/3}$, l'onde partielle maximale ℓ_{\max} et définie comme étant égale à $2,4 k R_x + 2$.
- soit R_x la plus grande des valeurs correspondant à $r_i A^{1/3} + 10 a_i$, le nombre de pas d'intégration numérique est pris égal à $(R_x/H) + 1$ (H étant le pas d'intégration numérique)

2) sur les contraintes imposées aux paramètres d potentiel optique

- les intensités des potentiels V , W_V , W_D , V_s sont plus grandes ou égales à zéro
- les différentes diffusivités a_i sont bornées $0,2 \leq a_i \leq 1,4$.
- le rayon réduit du potentiel réel r est borné : $1,0 \leq r \leq 2,0$.
- de plus la condition suivante est imposée :

$$r_s \leq r \leq r_D$$

Les différentes contraintes sont introduites dans le sous programme FUNCT et peuvent être aisément modifiées.

III.2 - Données de sortie

Un certain nombre de résultats du calcul peuvent être obtenus sous forme de cartes perforées. Ce sont :

III.2.a - La distribution angulaire de diffusion élastique (KTRL(6) = 2)

Les sorties se présentent sous la forme suivante :

1ère carte (format 3 E 12.5) L'énergie, KTLOUT(14), A nombre de masse

2ème carte les angles θ_i ($i = 1, \text{KTRL}(5)$) en degrés, format (10 F 8.3)

3ème carte la section efficace σ_i ($i = 1, \text{KTRL}(5)$) en millibarns
format (10 F 8.3)

Ce genre de sortie peut être utilisé pour obtenir ultérieurement des tracés graphiques.

III.2.b - Les diverses sections efficaces et les coefficients B_L (KTRL(7)=2)

1ère carte (format 6 E 12, 5 I 5) dans l'ordre :

L'énergie, KTLOUT(14), A (le nombre de masse), la section efficace totale, la section efficace de réaction, la section efficace élastique de forme, le nombre des coefficients B_L .

2ème carte les coefficients B_L (format 6 E 12,5)

Les énergies sont exprimées en MeV et les sections efficaces en millibarns.

Ce genre de sortie peut être utilisé pour la constitution d'une bande de données neutroniques évaluées.

III.2.c - Les coefficients de transmission $T(\ell, j)$ (si KTRL(8) =2)

1ère carte (format 3 I 2.5, 2 I 5) dans l'ordre :

L'énergie, KTLOUT(14), A (le nombre de masse), le nombre de $T(\ell, j)$, l'onde partielle maximale.

2ème carte et suivantes (format (6 E 12.5) : les coefficients $T(\ell, j)$
dans l'ordre :

ℓ, j : (0, 1/2), (1, 1/2), (1, 3/2) ... - si le spin s vaut 1/2 - ou bien
dans l'ordre $\ell = 0, 1, 2, 3 \dots$ - si le spin s vaut 0.

Ce genre de sorties peut être utilisé comme données dans un calcul par modèle statistique.

III.3 - Exemples d'utilisation du code

Les sorties correspondant à ces exemples sont données en Annexe.

III.3.a - Recherche de V et W_D par ajustement sur les valeurs expérimentales

de R' , S_0 , S_1

Le cas étudié est pour l'interaction neutron ^{89}Y à une énergie de 10 keV. La fonction densité S_1 dépend par le calcul du facteur de pénétration du rayon nucléaire adopté (R). Sur le listing la fonction densité S_1 "standard" correspond à $R = 1,35 A^{1/3}$ (valeur généralement adoptée). Comme le nombre d'ondes partielles ici considérées est 3 ($l_{\text{max}} = 2$) la valeur de la fonction densité S_3 est sans signification physique.

Les valeurs de " μ " correspondent à la suite de constantes réelles positives " μ_n " définies à l'équation (8)

III.3.b - Recherche de V_0 et W_{D0} par ajustement sur les valeurs de la section efficace totale à plusieurs énergies

Le cas considéré ici s'applique toujours à l'interaction neutron - ^{89}Y . Ayant préliminairement déterminé un jeu de paramètres par ajustement sur S_0 , S_1 , R' , on teste la solution obtenue par ajustement sur la section efficace totale à plusieurs énergies, c'est à dire, ici à 2,5, 5,0, 8,0, 10,0 et 15 MeV. On a vu en III.3.a que l'incertitude sur V_0 et W_{D0} était assez grande. La recherche sur V_0 et W_{D0} et de nouveau effectuée en supposant qu'à chaque énergie l'on a :

$$V = V_0 - 0,3 E \quad \text{et} \quad W_D = W_{D0} + 0,4 E$$

On remarquera que la recherche peut aussi se faire en supposant V_0 et W_{D0} fixés. Elle porte alors sur les coefficients de variation linéaire des potentiels avec l'énergie.

III.3.c - Recherche sur V et W_D par ajustement sur une distribution
angulaire de diffusion élastique

Le cas considéré est la diffusion de neutrons de 7,6 MeV par ^{89}Y . Les données expérimentales ont été obtenues par Kinney et Perey [11]. Un tel ajustement permet d'affiner les lois de variation des différents potentiels suivant l'énergie du neutron incident.

REFERENCES

- [1] P.E. Hodgson, "The Optical Model of Elastic Scattering" - Clarendon Press - OXFORD (1963)
- [2] M.A. Melkanoff, T. Sawada, J. Raynal, dans "Methods in Computational Physics" Vol. 6 - Academic Press - NEW YORK and LONDON (1966)
- [3] R. Fletcher, "A Modified Marquardt Subroutine for Nonlinear Least Squares" Atomic Energy Research Establishment, HARWELL (1971)
- [4] Hakan Ramsin, Per-Ake Wedin, "A Comparison of Some Algorithms for the Nonlinear Least Squares Problem" - BIT, 17 (1977) p. 72 - 92
- [5] T. Tamura, "Computer program JUPITOR 1 for Coupled-Channel Calculation" O.R.N.L. 4152 (1967)
- [6] Ch. Lagrange, N. Mondon, Rapport interne, Centre d'Etudes de Limeil - (1973) - non publié
- [7] R. Perrier, "Mémoire Présenté en Vue d'Obtenir le Diplôme d'Ingénieur C.N.A.M." - PARIS - Octobre 1978 - non publié
- [8] J.P. Delaroche, Ch. Lagrange, J. Salvy, "The Optical Model with Particular Consideration of the Coupled-Channel Optical Model" - IAEA - 190 - vol 1 p. 251 (1975)
- [9] Ch. Salez, M. Bonnet, Rapport Interne, Centre d'Etudes de Limeil, (1967) non publié - et communications privées
- [10] H. Rebel, G.W. Schweimer - K.F.K. 1333 (1971)
- [11] F.G. Perey, W.E. Kinney, "Neutron Elastic and Inelastic Scattering Cross Sections for Yttrium in the Energy Range 4.9 to 8.56 MeV" O.R.N.L. - 4552 (1970)

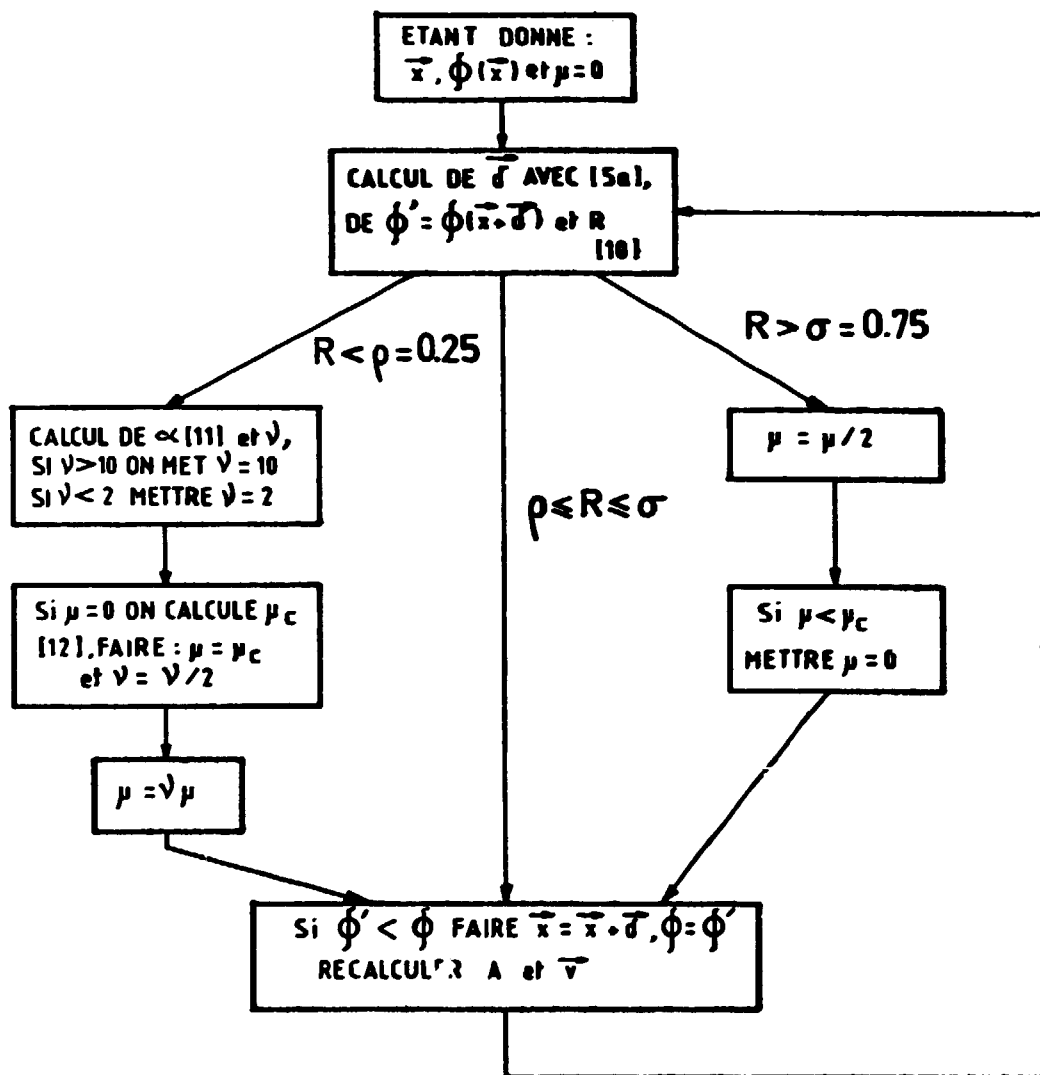


Figure 1

Organigramme décrivant la modification de Fletcher [ref. 3]

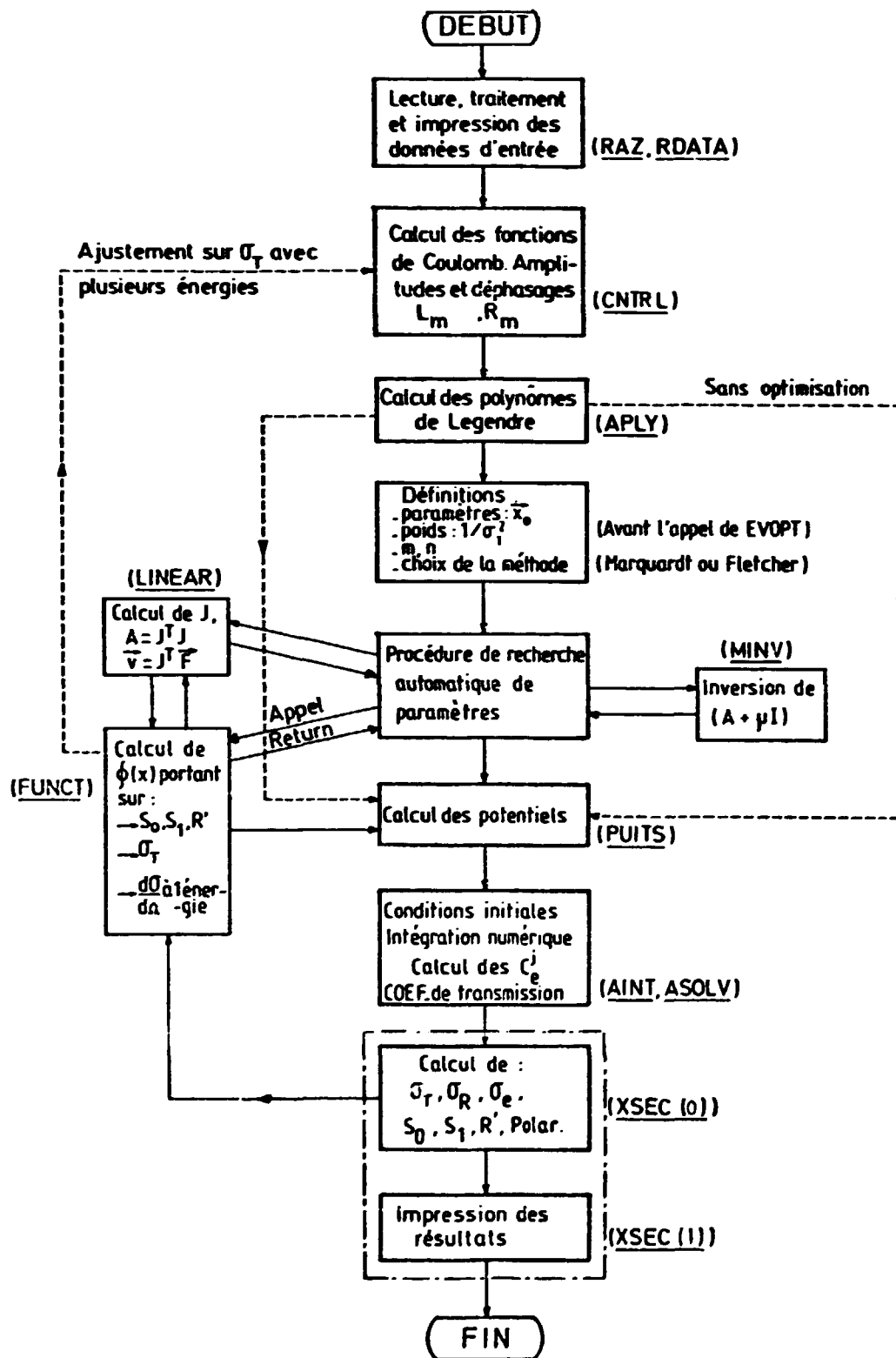


Figure 2

Structure générale du programme "SOMC2" sous forme de module

ANNEXE

Résultats de calculs pour l'interaction neutron ^{89}Y
(calculs effectués sur l'IBM 360-91 du Centre de Calcul de Saclay -
temps de calcul global : 9,27 secondes)

***** CALCUL MODELE OPTIQUE *****

ELAB= 0.010, CHARGE= 0.0, THAS= 89.000, PHAS= 1.000

VSX,MSX,MSF,VSO = 48.800 0.0 4.000 6.200
 OFN,OFNM,OFNS,OFNSP = 0.650 0.650 0.470 0.470
 RZERO,RZEROM,RZEROS,RZROSP,RZEROC= 1.250 1.250 1.250 1.120 1.250
 KTRL 1 0 0 0 22 0 0 1 0 0 0 0 2 0 0 1 1 0 0
 KTLOUT 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0
 XIES1 0.10000

***** DONNEES EXPERIMENTALES *****

ROIF-EXP= 0.670000 01 ROIF-ERR= 0.100000 00 SO-EXP= 0.320000-01 SO-ERR= 0.110000-04 SI-EXP= 0.440000-03 SI-ERR= 0.160000-03

***** OPT. DES PARAM.(1=OUI,0=NON) *****

VSX=1 MSX=0 MSF=1 VSO=0 OFN=0 OFNM=0 OFNS=0 OFNSP=0 RZERO=0 RZEROM=0 RZEROS=0 RZROSP=0 RZEROC=0 A=0 B1=0 B2=0
 ENTREE DANS EVOPT

1 PARAM(I) QUIZ= 4.67650 00
 1 4.00000 01
 2 4.00000 00
 VALEUR DES PARAMETRES AU 1IEME. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 4 QUIZ= 0.4660 01
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.9520 00
 1 4.00000 01 8.90050-01 4.96900 01 1.56790 00
 2 4.00000 00 -1.16560 00 2.83440 00 -1.05440 00
 VALEUR DES PARAMETRES AU 2IEME. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 7 QUIZ= 0.5210 00
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.2040 01
 1 4.96900 01 1.06750-02 4.97010 01 5.04070-02
 2 2.83440 00 1.53990-02 2.84980 00 4.26220-02
 VALEUR DES PARAMETRES AU 3IEME. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 10 QUIZ= 0.5180 00
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.0430 01
 1 4.97010 01 2.89200-03 4.97040 01 2.51900-02
 2 2.84980 00 3.37100-03 2.85310 00 1.72380-02
 VALEUR DES PARAMETRES AU 4IEME. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 13 QUIZ= 0.5100 00
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.2540 02
 1 4.97040 01 8.94520-04 4.97050 01 1.85870-02
 2 2.85310 00 9.50390-04 2.85410 00 1.13140-02

***** RESULTATS DE L OPTIMISATION *****

1 PARAM(I) ERR. SUR P ERR.REL. VARIANCE ERR.(X)
 1 4.97050 01 4.730-01 0.010 2.240-01 0.952X
 2 2.85410 00 8.620-01 0.302 7.430-01 30.200X
 MATRICE DE CORRELATION DES PARAMETRES
 1 1.0000 00 2.8710-01
 2 2.8710-01 1.0000 00

***** QUELQUES CARACTERISTIQUES *****

METHODE D'INTEGRATION NUMERIQUE :NUMEROV MODIFIEE (ORDRE : 4)

NOMBRE DE PAS POUR L INTEGRATION NUMERIQUE 121

NOMBRE MAXIMUM D ONDES PARTIELLES 3

SECTION EFFICACE TOTALE = 0.774590 04 (MILLIBARNS)

SECTION EFFICACE DE REACTION = 0.216760 04 (MILLIBARNS)

SECTION EFFICACE ELASTIQUE = 0.557830 04 (MILLIBARNS)

LONGUEUR DE DIFFUSION (POUR L=0)= 0.666260 01 (FERMIS)

FONCTION DENSITE S0 = 0.342430-04 FONCTION DENSITE S1 = 0.403960-03 FONCTION DENSITE S1 STANDART = 0.347180-03

FONCTION DENSITE S2 = 0.618310-04 FONCTION DENSITE S3 = -0.579780 07

***** COEFFICIENTS DE TRANSMISSION *****

L	J	T(L,J)	L	J	T(L,J)	L	J	T(L,J)	L	J	T(L,J)
0	1/2	0.213959720-01	1	1/2	0.227769860-02	1	3/2	0.429809480-02	2	3/2	0.122421870-05
2	5/2	0.695034680-06									

***** CALCUL MODELE OPTIQUE *****

ELAB= 15.000, CHARGE= 0.0, THAS= 89.000, PHAS= 1.000

VSX,WSX,WSF,VSO = 45.400 0.0 8.907 6.200
 DFN,DFIM,DFNS,DFNSP = 0.673 0.470 0.470 0.470
 RZERO,RZEROW,RZEROS,RZEROC= 1.250 1.262 1.262 1.120 1.240
 KTRL 1 0 0 0 35 0 0 1 0 300 0 400 0 2 0 0 0 0 5 1
 KTLOUT 0 0 0 0 1 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0
 XMES1 0.10000

***** DONNEES EXPERIMENTALES *****

E(MEV)	SIGT-EXP	ERR.	E(MEV)	SIGT-EXP	ERR.	E(MEV)	SIGT-EXP	ERR.
2.50000	0.414000	04 165.60000	6.00000	0.430000	04 170.00000	15.00000	0.370000	04 151.20000
5.00000	0.374000	04 149.60000	10.00000	0.424000	04 179.60000	0.28076	0.0	0.00000

***** OPT. DES PARAM.(1=CUI,0=NON) *****

VSX=1 WSX=0 WSF=1 VSO=0 DFN=0 DFM=0 DFNS=0 DFNSP=0 RZERO=0 RZEROW=0 RZEROS=0 RZEROC=0 A=0 B1=0 B2=0
 ENTREE DANS EVOPT
 I PARAM(I) QUIZ= 2.57540 00
 1 4.99000 01
 2 2.90700 00
 VALEUR DES PARAMETRES AU 1IERE. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 4 QUIZ= 0.2500 01
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.6110 00
 1 4.99000 01 -9.90120-01 4.89100 01 -2.33200 00
 2 2.90700 00 9.00370-02 2.99700 00 2.24210 00
 VALEUR DES PARAMETRES AU 2IERE. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 7 QUIZ= 0.7910 00
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.1320 01
 1 4.89100 01 -1.59520-01 4.87500 01 -6.47100-01
 2 2.99700 00 1.11740 00 4.11440 00 1.32680 00
 VALEUR DES PARAMETRES AU 3IERE. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 10 QUIZ= 0.2810 00
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.2840 01
 1 4.87500 01 -5.77440-02 4.86930 01 -2.58010-01
 2 4.11440 00 3.72390-01 4.48680 00 4.96100-01
 VALEUR DES PARAMETRES AU 4IERE. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 13 QUIZ= 0.2200 00
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.6150 01
 1 4.86930 01 -2.01290-02 4.86570 01 -1.31270-01
 2 4.48680 00 1.25500-01 4.61240 00 2.50810-01
 VALEUR DES PARAMETRES AU 5IERE. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 16 QUIZ= 0.2090 00
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.1340 02
 1 4.86570 01 -7.81240-03 4.86650 01 -0.95010-02
 2 4.61240 00 4.80890-02 4.66050 00 1.72040-01
 VALEUR DES PARAMETRES AU 6IERE. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 19 QUIZ= 0.2060 00
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.2920 02
 1 4.86650 01 -3.28090-03 4.86610 01 -7.36650-02
 2 4.66050 00 2.01330-02 4.68060 00 1.42490-01
 VALEUR DES PARAMETRES AU 7IERE. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 22 QUIZ= 0.2050 00
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.6390 02
 1 4.86610 01 -1.44480-03 4.86600 01 -6.70300-02
 2 4.68060 00 8.81340-03 4.68940 00 1.30020-01
 VALEUR DES PARAMETRES AU 8IERE. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 25 QUIZ= 0.2040 00
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.1400 03
 1 4.86600 01 -6.47880-04 4.86590 01 -6.41280-02
 2 4.68940 00 3.95110-03 4.69340 00 1.24720-01

***** RESULTATS DE L OPTIMISATION *****

I	PARAM(I)	ERR. SUR P	ERR.REL.	VARIANCE	ERR.(%)
1	4.06590 01	6.640-01	0.014	4.410-01	1.365X
2	4.69340 00	2.080 00	0.443	4.310 00	44.254X

MATRICE DE CORRELATION DES PARAMETRES

1	1.0000 00-1.5420-01
2	-1.5420-01 1.0000 00

***** QUELQUES CARACTERISTIQUES *****

METHODE D'INTEGRATION NUMERIQUE : HUNTEROV MODIFIEE (ORDRE : 4)

NOMBRE DE PAS POUR L INTEGRATION NUMERIQUE 124

NOMBRE MAXIMUM D ONDES PARTIELLES 14

SECTION EFFICACE TOTALE = 0.373190 04 (MILLIBARNS)

SECTION EFFICACE DE REACTION = 0.174170 04 (MILLIBARNS)

SECTION EFFICACE ELASTIQUE = 0.199030 04 (MILLIBARNS)

LONGUEUR DE DIFFUSION (POUR L=0) = 0.397970 01 (FERMI)

FONCTION DENSITE S0 = 0.209630-04 FONCTION DENSITE S1 = 0.357570-04 FONCTION DENSITE S1 STANDARD = 0.355340-04

FONCTION DENSITE S2 = 0.354330-04 FONCTION DENSITE S3 = 0.451750-04

***** COEFFICIENTS DE TRANSMISSION *****

L	J	T(L,J)	L	J	T(L,J)	L	J	T(L,J)	L	J	T(L,J)
0	1/2	0.706877970 00	1	1/2	0.841007360 00	1	3/2	0.820646670 00	2	3/2	0.724312020 00
2	5/2	0.753214300 00	3	5/2	0.843000220 00	3	7/2	0.743150590 00	4	7/2	0.679716010 00
4	9/2	0.953760540 00	5	9/2	0.699160070 00	5	11/2	0.592445160 00	6	11/2	0.715102330 00
6	13/2	0.302909960 00	7	13/2	0.135762000 00	7	15/2	0.251753430 00	8	15/2	0.160216260-01
8	17/2	0.227999530-01	9	17/2	0.208867940-02	9	19/2	0.236096140-02	10	19/2	0.259173500-03
10	21/2	0.272202420-03	11	21/2	0.316170070-04	11	23/2	0.322326230-04	12	23/2	0.373962620-05
12	25/2	0.376746370-05	13	25/2	0.422112730-06	13	27/2	0.423314550-06			

***** SECTIONS EFFICACES TOTALES *****

EN	SIGT-EXP	SIGT-TH	EN	SIGT-EXP	SIGT-TH	EN	SIGT-EXP	SIGT-TH
2.50000	0.414000 04	0.422130 04	0.00000	0.430000 04	0.424140 04	15.00000	0.370000 04	0.373190 04
5.00000	0.374000 04	0.379700 04	10.00000	0.424000 04	0.425070 04	0.20076	0.0	0.102700-02

***** CALCUL MODELE OPTIQUE *****

ELAB= 7.600, CHARGE= 0.0, THAS= 89.000, PHAS= 1.000

VSX,MSX,MSF,VSO = 46.720 0.0 7.400 6.200
 OFN,OFNM,OFNS,OFNSP = 0.673 0.470 0.470 0.470
 RZERO,RZERON,RZEROS,RZROSP,RZEROC= 1.250 1.262 1.262 1.120 1.240
 KTRL 1 0 0 0 22 1 0 1 0 300 0 500 0 0 1 1 0 0 0 0
 KTLOUT 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0
 XRES1 0.10000

***** DONNEES EXPERIMENTALES *****

TETA	S-EXP	EPF.	TETA	S-EXP	ERR.	TETA	S-FXP	ERR.
15.17000	0.287440 04	122.1630	55.60000	0.672400 02	6.19404	108.60000	0.967000 01	1.10230
22.76000	0.160710 04	78.74906	60.60000	0.122050 03	8.17735	114.60000	0.202600 02	1.64106
25.30000	0.126290 04	70.56333	66.60000	0.125150 03	8.25990	118.57000	0.218700 02	1.24659
30.30000	0.768630 03	49.19232	72.60000	0.115800 03	7.64280	120.06000	0.333900 02	2.15769
35.40000	0.299500 03	20.36600	80.70000	0.755500 02	5.13740	127.52000	0.379500 02	2.31495
40.40000	0.105200 03	8.20872	90.70000	0.328900 02	2.46675	134.96000	0.376300 02	2.31425
45.10000	0.407200 02	3.94984	96.70000	0.138300 02	1.34151	0.0	0.0	0.0
50.50000	0.587800 02	4.76118	102.70000	0.720000 01	0.98640	0.0	0.0	0.0

***** OPT. DES PARAM.(1=OUI,0=NON) *****

VSV=1 MSX=6 MSF=1 VSO=0 OFN=0 OFNM=0 OFNS=0 OFNSP=0 RZERO=0 RZERON=0 RZEROS=0 RZROSP=0 RZEROC=0 A=0 B1=0 B2=0

ENTREE DANS EVOPT

PARAM(1) QUI2= 3.05170 00

1 4.97100 01

2 4.01300 00

VALEUR DES PARAMETRES AU 11EME. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 4 QUI2= 0.3050 01
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.5710 00

1 4.90000 01 -2.92020-02 4.89710 01 -1.87260 00

2 3.60000 00 4.01490-01 4.00150 00 3.79580 00

VALEUR DES PARAMETRES AU 21EME. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 7 QUI2= 0.2340 01
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.1300 01

1 4.89710 01 -5.72750-04 4.89700 01 -3.94050-02

2 4.00150 00 9.24670-03 4.01070 00 1.24400-01

VALEUR DES PARAMETRES AU 31EME. CYCLE NBRE. D'APPEL A F: 10 QUI2= 0.2340 01
 OLD CHANGE NEW BETA MU= 0.3040 01

1 4.89700 01 4.78320-04 4.89710 01 -1.08770-03

2 4.01070 00 2.31450-03 4.01310 00 4.36870-02

***** RESULTATS DE L OPTIMISATION *****

I	PARAM(I)	ERR. SUR P	ERR.REL.	VARIANCE	ERR.(%)
1	4.89710 01	2.570-01	0.005	2.820-02	0.524%
2	4.01310 00	2.010-01	0.050	1.720-02	4.998%

MATRICE DE CORRELATION DES PARAMETRES

1 1.0000 00-4.2760-01

2 -4.2760-01 1.0000 00

***** QUELQUES CARACTERISTIQUES *****

METHODE D'INTEGRATION NUMERIQUE : NUMEROV MODIFIEE (ORDRE : 4)

NOMBRE DE PAS POUR L INTEGRATION NUMERIQUE 124

NOMBRE MAXIMUM D ONDES PARTIELLES 11

SECTION EFFICACE TOTALE = 0.417670 04 (MILLIBARNS)

SECTION EFFICACE DE REACTION = 0.177500 04 (MILLIBARNS)

SECTION EFFICACE ELASTIQUE = 0.240170 04 (MILLIBARNS)

***** COEFFICIENTS DE TRANSMISSION *****

L	J	T(L,J)	L	J	T(L,J)	L	J	T(L,J)	L	J	T(L,J)
0	1/2	0.574265140 00	1	1/2	0.835880270 00	1	3/2	0.822541940 00	2	3/2	0.553393720 00
2	5/2	0.560119320 00	3	5/2	0.900484880 00	3	7/2	0.726972460 00	4	7/2	0.412145980 00
4	9/2	0.687529160 00	5	9/2	0.421194240 00	5	11/2	0.116570840 00	6	11/2	0.285728470-01
6	13/2	0.766260570-01	7	13/2	0.168137630-02	7	15/2	0.256649920-02	8	15/2	0.115769540-03
8	17/2	0.134603280-03	9	17/2	0.809566690-05	9	19/2	0.856940700-05	10	19/2	0.553257940-06
10	21/2	0.565332320-06									

*****DIFFUSION ELASTIQUE ET POLARISATION *****

ANGLE	SGMTH	POLTH	ANGLE	SGMTH	POLTH	ANGLE	SGMTH	POLTH
15.17000	0.267060 04	-0.01590	55.60000	0.765880 02	0.25785	108.60000	0.957130 01	0.69257
22.76000	0.153680 04	-0.03550	60.60000	0.105020 03	0.22857	114.60000	0.190040 02	0.80891
25.30000	0.119970 04	-0.04616	66.60000	0.119280 03	0.19022	118.57000	0.266560 02	0.72131
30.30000	0.658170 03	-0.07779	72.60000	0.111040 03	0.15221	120.06000	0.293510 02	0.67829
35.40000	0.294310 03	-0.13443	80.70000	0.787230 02	0.08447	127.52000	0.377110 02	0.40225
40.40000	0.106230 03	-0.21912	90.70000	0.342820 02	-0.09385	134.96000	0.341860 02	-0.01643
45.50000	0.399040 02	-0.13663	96.70000	0.158490 02	-0.28865	0.0	0.0	0.0
50.50000	0.450800 02	0.21167	102.70000	0.756430 01	-0.13428	0.0	0.0	0.0

Edité par
le Service de Documentation
Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay
Boîte Postale n° 2
91190 GIF-SUR-YVETTE (France)