

文章编号：0258-0926(2020)03-0008-06; doi:10.13832/j.jnpe.2020.03.0008

NECP-Atlas 不可辨共振能区概率表模块的开发和验证

毕沪超, 祖铁军*, 徐嘉隆, 曹良志, 吴宏春

西安交通大学核科学与技术学院, 西安, 710049

摘要：核数据处理是连接评价核数据库和中子输运程序的重要接口，其中对不可辨共振能区的处理是核数据处理的关键技术点之一。不可辨共振能区的共振峰极为密集，在物理计算中必须考虑其共振自屏蔽效应，概率表方法是获得不可分辨能区自屏蔽截面的常用方法。Ladder Sampling 方法是目前使用最广泛的概率表产生方法，该方法通过构造随机共振序列等效真实共振结构来统计概率表。基于 Ladder Sampling 方法在 NECP-Atlas 程序中开发了概率表计算模块，对计算过程中的复误差函数计算、卡方随机数产生、概率表划分、共振公式选取、Ladder 数目以及排序算法进行了敏感性分析，最终确定了最优的计算方法，实现了概率表的精确、高效效率。

关键词：Ladder Sampling；不可辨共振能区；概率表方法；核数据处理

中图分类号：TL32 **文献标志码：**A

Development and Validation of Probability Table Module for Unresolved Resonance Region in NECP-Atlas

Bi Huchao, Zu Tiejun*, Xu Jialong, Cao Liangzhi, Wu Hongchun

School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049, China

Abstract: Nuclear data processing is an important interface connecting nuclear data and neutronics transport codes. The calculation of the unresolved resonance region is one of the key technical points of nuclear data processing. The resonance self-shielding effect in the unresolved resonance region with dense resonance distribution shall be considered in neutronics calculation. The probability table method is a common method to obtain the self-shielding cross section of the unresolved resonance region. The Ladder Sampling method is the most widely used probability table generation method at present. It constructs pseudo resonance sequences to be equivalent to the actual resonance structure to calculate the probability tables. The probability table calculation module based on Ladder Sampling method is developed in NECP-Atlas. The sensitivity analysis of complex error function calculation, chi-square random number generation, probability table partition, resonance formulas selection, sort algorithm and ladder number is carried out, and the optimal calculation conditions are determined to obtain the accurate probability tables efficiently.

Key words: Ladder sampling, Unresolved resonance region, Probability table method, Nuclear data processing

0 引言

由于实验测量分辨率的限制，对于有密集共

振峰分布的不可辨共振能区，评价核数据库无法准确地给出各个共振峰的共振参数，只能给出某

收稿日期：2019-04-15；修回日期：2019-11-15

基金项目：国家自然科学基金资助项目(11605128, 11790323)

作者简介：毕沪超（1995—），男，硕士研究生，现从事反应堆计算物理研究，E-mail：bihuchao@qq.com

*通讯作者：祖铁军，E-mail：tiejun@mail.xjtu.edu.cn

个能量附近的平均共振参数及其分布函数^[1]。在物理计算中，如果直接使用平均共振参数计算得到的无限稀释截面，不考虑不可分辨能区的自屏效应，对于快谱反应堆的有效增殖因子的误差可达千分之五^[2]。

目前国际上广泛采用概率表方法^[3]来考虑不可分辨能区的自屏效应，该方法在各能点下使用了截面的概率分布函数而不是具体的截面值。概率表的产生方法有三种：Ladder Sampling 方法^[4-5]、Monte Carlo 方法^[6]和多邦方法^[2]。Ladder Sampling 方法是国际上使用最广泛的概率表制作方法，其本质是通过某个能量下的平均共振参数及其分布函数随机抽样得到的共振序列来表示该能量下的实际共振结构，以此计算点截面来统计概率表。Monte Carlo 方法是美国的 AMPX 程序中使用的概率表计算方法，该方法的基本思想和 Ladder Sampling 方法一致，仅在共振序列的构造方法上有差别，二者的计算精度是相当的。多邦方法是 PREPRO 程序使用的概率表产生方法，其通过构造自屏因子等效方程来解析求解概率表，需要预先得到自屏因子，可能会出现不自洽，存在一定的误差。

本文在核数据处理程序 NECP-Atlas^[7]中基于 Ladder Sampling 方法开发了概率表计算模块。在 Ladder Sampling 方法中有很多影响计算精度和效率的因素，例如：复误差函数计算、卡方随机数产生、概率表划分、共振公式选取、Ladder 数目以及排序算法，本文针对以上因素进行了详细的敏感性分析，确定出最优的计算方法来高效地产生准确的概率表，最后结合 ENDF/B-VII.1 使用 ICSBEP 基准题对该模块进行验证。

1 理论模型和程序开发

1.1 理论模型

Ladder Sampling 方法采用了 2 个假设：共振峰很密，因此中子会随机进入任意共振峰；

共振峰很窄，因此共振峰影响的能量范围很小。在这 2 个假设下，不可分辨能区中某个能量点下的实际共振结构就可以用该能量点的平均共振参数构造的随机共振序列来表示。Ladder Sampling 方法的基本过程如下：

(1) 根据平均共振参数逐个抽样共振峰来构造共振序列。其中，能级间距通过抽样 Wigner

分布随机数得到；共振峰宽度通过抽样卡方分布随机数得到。共振序列内各共振峰能级 $E_{r,i}$ 、宽度 $\Gamma_{r,i}$ 的计算如下：

$$E_i = \begin{cases} E_{\text{low}} + R_w \bar{D} & i=1 \\ E_{i-1} + R_w \bar{D} & i=2,3,\dots,n_r \end{cases} \quad (1)$$

$$\Gamma_{r,i} = \frac{R_{\chi^2}(k)}{k} \bar{\Gamma}_r \quad (2)$$

式中， \bar{D} 为平均能级宽度； $\bar{\Gamma}_r$ 为共振峰 r 的平均宽度； k 为自由度； R_w 、 R_{χ^2} 分别为 Wigner 和卡方分布随机数； n_r 为共振峰个数； E_{low} 为不可分辨区能量下限。

为了精确地反映实际的共振结构，必须产生准确的 Wigner 分布和卡方分布随机数。Wigner 分布的逆累计概率分布函数形式简单，因此很容易计算 Wigner 分布随机数。而卡方分布则较为复杂，一般通过枚举逆累计概率分布函数上的离散点，因此只能产生离散的卡方随机数。为了得到连续的卡方随机数，也可以使用 Gamma 随机数得到，公式如下：

$$R_{\chi^2}(k) = \begin{cases} R_r\left(\frac{k}{2}, 2\right) & k > 1 \\ R_u^2 R_r\left(\frac{3}{2}, 2\right) & k = 1 \end{cases} \quad (3)$$

式中， $R_r(\alpha, \beta)$ 为 Gamma 随机数； α 和 β 分别为形状因子和缩放因子； R_u 为均匀分布随机数。

(2) 通过单能级 Breit-Wigner (SLBW) 共振公式计算共振序列上各抽样点的点截面，使用 ψ - χ 多普勒展宽公式将 0 K 下的截面展宽到所需的温度，该公式的弹性散射截面 σ_n 的计算如下：

$$\sigma_n = \sum_{\ell} \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \sin^2 \theta_{\ell} + \sum_{\ell} \sum_r \sigma_{mr} \left\{ \left[\cos 2\phi_{\ell} - \left(1 - \frac{\Gamma_{nr}}{\Gamma_r} \right) \right] \psi(\theta, x) + \sin 2\phi_{\ell} \chi(\theta, x) \right\} \quad (4)$$

式中， ℓ 为轨道角动量； ϕ_{ℓ} 为相移因子； θ 、 x 分别为共振宽度和能量相关的参数； σ_{mr} 、 Γ_{nr} 和 Γ_r 分别为某个共振峰的峰值截面、弹性散射宽度和总反应宽度； ψ 和 χ 分别为复误差函数的实部函数和虚部函数。

SLBW 共振公式忽略了共振能级间的干涉效应，因此可能会计算得到负的弹性散射截面。目

前国际上也有研究使用其他共振公式，例如多能级 Breit-Wigner (MLBW) 共振公式。使用 ψ - χ 多普勒展宽公式计算点截面时，需要多次计算复误差函数，该函数的计算效率会直接影响整个模块的计算效率，一般使用插值加有理近似来计算。

(3) 根据点截面来统计概率表，按照概率值或截面值划分各个邦，统计每个邦内的点截面，计算得到各个邦对应的概率、平均总截面和其余反应道截面。

常见的划分方法有 3 种：等概率：各邦概率值相等；钟型概率：对两边截面变化较快的邦设定小概率值，中间的截面平稳变化的邦设定大概率值；等比截面：各邦边界截面值依次成等比数列。划分概率表之前需要对大量点截面按照总截面进行排序，由于每个共振序列内能量点的数目很大 (10^4 量级)，同时计算共振序列数目也比较多，因此排序过程显著影响程序的计算效率。

由于统计误差的存在，需要对多个共振序列进行计算，取平均值得到最终结果。共振序列平均值 $\bar{\sigma}$ 计算公式为：

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{\sigma}_i \quad (5)$$

式中， $\bar{\sigma}_i$ 为各共振序列的计算结果； N 为 Ladder 数目， N 必须足够大才能得到收敛的结果。

1.2 程序开发

Ladder Sampling 方法中有很多影响计算精度和效率的因素，各核数据处理程序处理这些因素所采取的计算方法见表 1，可以看出大都采用了近似或者经验值。本文通过对 ICSBEP 基准题计算，对这些因素进行详细的敏感性分析，确定最优的计算方法，之后使用最优的计算方法对程序进行集成验证。

2 程序验证与敏感性分析

本文通过国际临界安全基准题 (ICSBEP) 中

的 32 个基准题对概率表模块进行验证，这些基准题在不可辨能区的研究中广泛使用^[2,8]。本文使用 MCNP 程序计算 ICSBEP 基准题，每代粒子数取 50000，共模拟了 2000 代，统计偏差均控制在 8×10^{-5} 以内。

2.1 复误差函数计算

在 ψ - χ 多普勒展宽方法中，需要多次计算复误差函数。国际主流的核数据处理程序采用 MC2 方法中的插值加有理近似的方法来计算复误差函数^[9]，为了检验该方法的精度，本文选取可以精确计算复误差函数的 MIT-Faddeeva 软件包作为参考，对 MC2 方法的计算精度进行分析。

在 $x \in [-5, 5]$ 、 $y \in [0, 5]$ 内计算复误差函数，MC2 方法大约比 MIT-Faddeeva 软件包快 6 倍，MC2 方法计算的实部和虚部分别有最大约 1.2×10^{-3} 和 4.5×10^{-3} 的误差。使用 MC2 方法和 MIT-Faddeeva 软件计算复误差函数来生成概率表，其余计算方法均保持与 NJOY 一致，ICSBEP 基准题的计算结果见图 1。

可以看出，MC2 方法和 MIT-Faddeeva 软件包之间的最大偏差约 2.7×10^{-4} ，表明 MC2 方法的计算精度对点截面计算是足够的，使用 MC2 方法

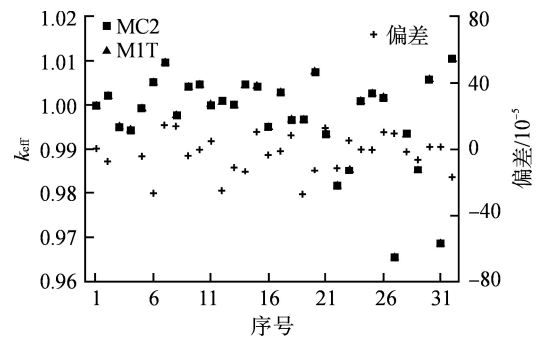


图 1 不同复误差函数计算方法得到的 ICSBEP 基准题结果
Fig. 1 ICEBEP Benchmark Results Obtained by Different Complex Error Function Calculation Methods
 K_{eff} —有效增殖因子

表 1 各核数据处理程序在不可分辨能区的计算方法

Tab. 1 Calculation Conditions of Nuclear Data Processing Codes in the Unresolved Resonance Region

影响因素	NJOY2016	AMPX 程序	Frendy 程序	RXSP 程序	MIT 程序
复误差函数	插值加有理近似	wwerf	四极点帕德近似	—	插值加有理近似
卡方随机数产生	离散-20	离散-100	连续	—	离散-100
概率表划分	钟型概率	等概率指定概率等比截面	—	等比截面	—
共振公式选取	SLBW	SLBW	SLBW	SLBW	SLBW、MLBW、RM
Ladder 数目	固定值	—	固定值-100	固定值	—
排序算法	冒泡排序	冒泡排序	冒泡排序	快速排序	—

表 2 不同卡方随机数产生器得到的平均值、方差和绝对值的结果
Tab. 2 Results of Mean Variance and Median Obtained by Different Chi-Square Random Number Generators

自由度	参数	参考值	计算绝对值			计算相对偏差/%		
			离散-20	离散-100	Gamma 随机数	离散-20	离散-100	Gamma 随机数
1	平均值	1.000	1.000	0.999	1.000	-0.04	-0.06	-0.04
	方差	2.000	1.830	1.960	2.001	-8.50	-1.99	0.03
	中位数	0.471	0.405	0.444	0.475	-14.07	-5.64	0.80
2	平均值	2.000	2.000	2.000	2.000	-0.02	-0.02	-0.02
	方差	4.000	3.783	3.955	4.006	-5.42	-1.13	0.14
	中位数	1.405	1.289	1.366	1.387	-8.22	-2.75	-1.27
3	平均值	3.000	3.000	3.001	3.001	0.01	0.02	0.02
	方差	6.000	5.746	5.955	6.001	-4.24	-0.74	0.02
	中位数	2.381	2.236	2.340	2.368	-6.08	-1.74	-0.55
4	平均值	4.000	4.000	4.000	4.000	0	0	0
	方差	8.000	7.711	7.946	8.027	-3.62	-0.68	0.34
	中位数	3.370	3.200	3.325	3.359	-5.04	-1.34	-0.31

计算复误差函数可以大大提高计算效率，因此，在 NECP-Atlas 中，采用 MC2 方法来高效地计算复误差函数。

2.2 卡方随机数产生

使用离散-20、离散-100 以及 Gamma 随机数方法产生 10^6 个卡方分布随机数，分别计算得到其平均值、方差以及中位数见表 2。

可以看出 Gamma 随机数方法产生的随机数的平均值、方差以及中位数与参考值吻合地很好，能够产生符合实际分布的随机数；离散-20 方法的结果与参考值有很大偏差，离散-100 方法的结果虽然有所改善，但仍具有较大偏差。使用离散-20 方法和 Gamma 随机数方法产生卡方随机数来生成概率表，其余计算方法均保持与 NJOY 一致，计算的 ICSBEP 基准题的结果见图 2。

可以看出，离散方法和 Gamma 随机数产生法的最大偏差约 2.5×10^{-4} ，表明 Gamma 随机数产生法对 ICSBEP 基准题并无显著影响，但相比离散点法在同等效率下能产生更加真实的卡方随机数，在 NECP-Atlas 中采用 Gamma 随机数方法来产生连续的卡方随机数。

2.3 概率表划分

在统计概率表时首先需要对截面值进行离散划分概率箱。研究了 3 种概率箱划分方法：等概率、钟型概率、等比截面。在邦数为 20 和 100 下使用 3 种划分方法生成概率表，其余计算方法均保持与 NJOY 一致，计算的 ICSBEP 基准题的结果见图 3，采用 100 个邦下钟型概率划分方法的结果作为参考值。

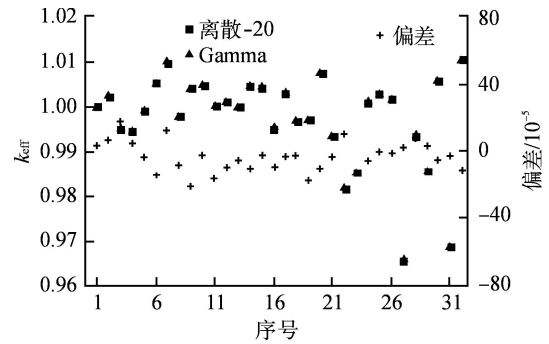


图 2 不同卡方随机数产生器得到的 ICEBEP 基准题结果

Fig. 2 ICEBEP Benchmark Results Obtained by Different Chi-Square Random Number Generators

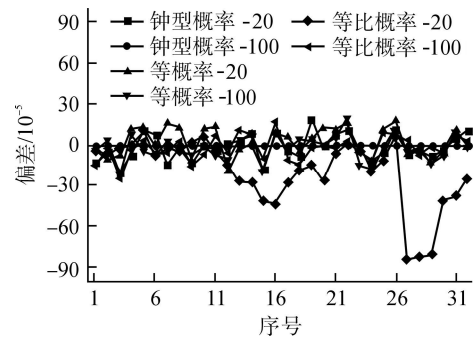


图 3 使用不同概率表划分方法的 ICSBEP 基准题的 k_{eff} 偏差

Fig. 3 ICSBEP k_{eff} Differences Using Different Partition Methods

可以看出：100 个邦下 3 种概率划分方法均能得到一致的结果，之间的最大偏差为 2.5×10^{-4} ；20 个邦下钟型概率和等概率方法均能得到 100 个邦下的结果，之间的最大偏差为 2.1×10^{-4} ；但是 20 个邦下等比截面划分方法的计算结果与其余

结果存在较大偏差,最大偏差为 8.5×10^{-4} 。表明等比截面划分方法有缺陷,在邦数较小时误差较大。在 NECP-Atlas 中采用钟型分布来划分概率表。

2.4 共振公式选取

Ladder Sampling 方法通常采用 SLBW 公式来计算点截面,国际上也有研究使用其他共振公式来计算^[10],例如使用 MLBW 公式。本文分别使用 SLBW 和 MLBW 共振公式来计算点截面,后者相对前者考虑了能级之间的干涉效应,但是前者的计算效率更高。采用 2 种共振公式计算得到的 ICSBEP 基准题的结果如图 4 所示。

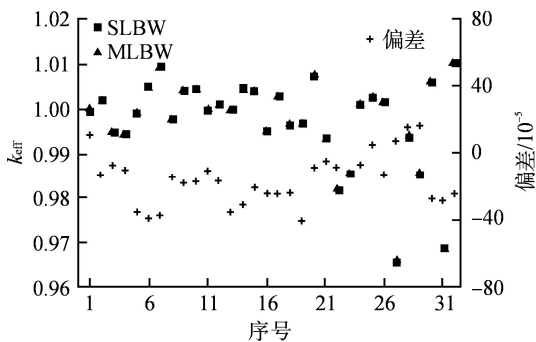


图 4 不同共振公式得到的 ICEBEP 基准题结果
Fig. 4 ICEBEP Benchmark Results Obtained by Different Resonance Formalisms

可以看出:对于大部分基准题,MLBW 公式的 k_{eff} 结果相比 SLBW 公式的结果要偏低,这是因为 MLBW 公式计算的散射截面相比 SLBW 公式偏大;2 个共振公式计算结果之间的最大偏差为 4.1×10^{-4} 。考虑计算效率,在 NECP-Atlas 中默认采用 SLBW 公式来计算点截面,用户可以选用 MLBW 进行计算。

2.5 Ladder 数目

Ladder Sampling 方法需要抽样多个共振序列来得到最终结果。为了尽可能减少概率表计算时间,同时保证中子学计算精度,必须对合适的 Ladder 数目进行研究。NJOY 等核数据处理程序通过用户输入在不同能量点下设定了相同的 Ladder 数目,一般将其设定为经验值 100。本文在各计算能量点下选取平均无限稀释截面的相对偏差 E_r 作为收敛限自适应地判断合适的 Ladder 数目,计算公式为:

$$E_r = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N (\sigma_i - \bar{\sigma})^2} / \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \right) \quad (6)$$

当收敛限设为 5×10^{-4} 时, ^{235}U 和 ^{238}U 的不同

能量点下计算的 Ladder 数目见图 5。

可以看出所需 Ladder 数目随能量的增大而逐渐减小,这是因为不可分辨能区内的平均能级宽度随能量增加而逐渐减小,因此在较低能量点需要计算更多的共振序列才能达到收敛。使用收敛限为 5×10^{-4} 和 Ladder 数目固定为 100 产生的概率表来计算 ICSBEP 的结果见图 6。

可以看出,收敛限为 5×10^{-4} 和 Ladder 数目为 100 能够得到一致的结果,二者之间的最大偏差约 2.5×10^{-4} 。以收敛限为判据确定 Ladder 数目,在不同能量下使用不同 Ladder 数目,在相同计算

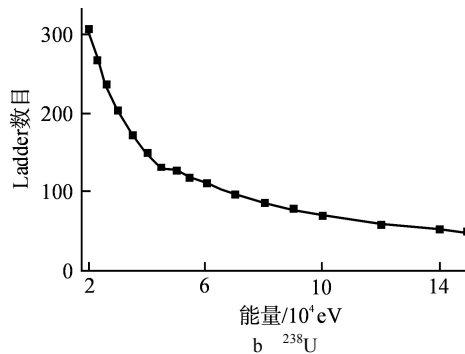
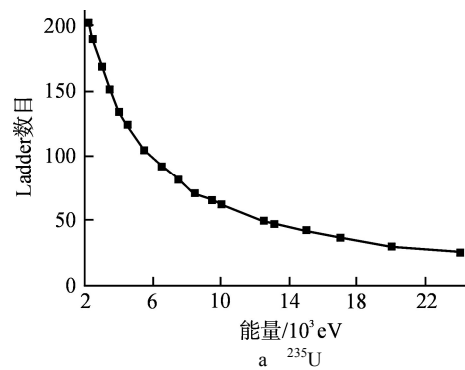


图 5 ^{235}U 和 ^{238}U 不同能量点下计算的 Ladder 数目
Fig. 5 Ladder Num Calculated at Different Energy Points of ^{235}U and ^{238}U

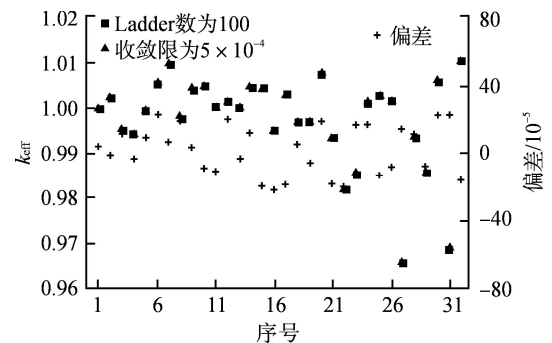


图 6 不同 Ladder 数目得到的 ICEBEP 基准题结果
Fig. 6 ICEBEP Benchmark Results Obtained by Different Ladder Numbers

精度的条件下提高了计算效率。在 NECP-Atlas 中采用收敛限判据来产生合适的 Ladder 进行计算。

2.6 排序算法

统计概率表时需要大量点截面进行排序，使用快速排序代替冒泡排序可以显著提高程序的计算效率。NECP-Atlas 中采用了快速排序法，相对于 NJOY 等程序使用的冒泡排序计算效率得到显著的提高，表 3 中给出了一些典型核素概率表模块计算的总时间和排序时间占比。可以看出，不同的核素由于各自的能区位置和宽度、序列个数不同带来的加速比也不同，总体上快速排序法有效地降低了排序算法的时间占比，极大地改善了程序的计算效率。

表 3 一些典型核素概率表模块计算的总时间和排序时间占比

Tab. 3 Total Time and Sort Time Ratio of Probability Table Module Calculation for Some Typical Nuclides

核素	NJOY2016.44		NECP-Atlas	
	总时间/s	排序时间占比/%	总时间/s	排序时间占比/%
²³² Th	867.5	84.4	113.0	1.3
²³³ U	578.4	40.3	479.0	0.2
²³⁵ U	259.3	81.8	137.0	1.1
²³⁸ U	202.3	85.0	25.0	2.7
²³⁹ Pu	803.0	79.2	170.0	1.0
²⁴¹ Pu	449.0	83.7	120.0	1.4

2.7 程序集成验证

通过以上的敏感性分析得到了最优的计算方法，使用这些条件对概率表模块进行集成验证。在不可分辨能区分别使用 NJOY2016.44 和 NECP-Atlas 加工 ACE 格式数据库，使用 MCNP 对 ICSBEP 基准题进行计算，计算结果见图 7。

可以看出，对于 32 道基准题，NECP-Atlas 的概率表模块与 NJOY 最大偏差为 2.5×10^{-4} ，二者具有相当的精度，可以使用 NECP-Atlas 加工概率表。

3 总结

本文基于 Ladder Sampling 方法在 NECP-Atlas 中开发了概率表计算模块，对计算过程中的复误差函数计算、卡方随机数产生、概率表划分、共振公式选取、Ladder 数目以及排序算法进行了敏感性分析，确定了最优的计算方法来高效地产生

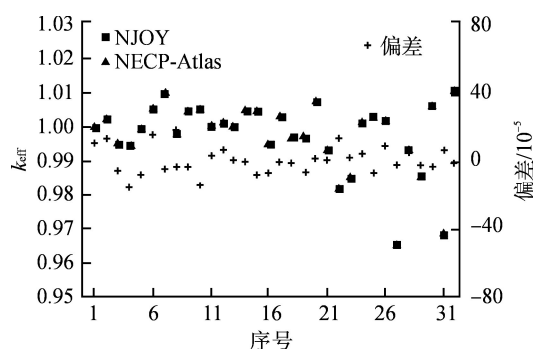


图 7 使用 ENDF/B-VII.1 的 ICSBEP 基准题的计算结果
Fig. 7 Calculation Results of ICSBEP Benchmark Based on ENDF/B-VII.1

生准确的概率表。使用 ENDF/B-VII.1 结合 ICSBEP 基准题对模块进行验证，计算结果表明该模块的计算精度与 NJOY 相当，计算效率相比 NJOY 得到明显改进。

参考文献：

- [1] HERMAN M, TRKOV A. ENDF-6 formats manual[Z]. National Nuclear Data Centre, BNL, Upton, New York, 2005.
- [2] CULLEN D E, TRKOV A. URR-PACK: Calculating self-shielding in the unresolved resonance energy range[R]. International Atomic Energy Agency, 2016.
- [3] LEVITT L B. The probability table method for treating unresolved neutron resonances in Monte Carlo calculations[J]. Nuclear Science and Engineering, 1972, 49(4): 450-457.
- [4] 余健开. 堆用重要核数据评价处理及应用的关键方法与软件研发[D]. 北京：清华大学，2015.
- [5] TADA K, NAGAYA Y, KUNIEDA S, et al. Development and verification of a new nuclear data processing system frendy[J]. Journal of Nuclear Science & Technology, 2017, 54(7): 1-12.
- [6] DUNN M E, LEAL L C. Calculating probability tables for the unresolved-resonance region using Monte Carlo methods[J]. Nuclear science and engineering, 2004, 148(1): 30-42.
- [7] ZU T, XU J, TANG Y, et al. NECP-Atlas: A new nuclear data processing code[J]. Annals of Nuclear Energy, 2019, 123(3): 153-161.
- [8] PING LIU. Methods of self-shielding calculation used by ruler[C]. Technical Meeting on the Nuclear Data Processing, IAEA, Vienna, Dec, 2017: 4-7.
- [9] LEE C, YANG W S. MC2-3: Multigroup cross section generation code for fast reactor analysis[J]. Nuclear Science and Engineering, 2017, 187(3): 268-290.
- [10] WALSH J A. Comparison of unresolved resonance region cross section formalisms in transport simulations [R]. Lawrence Livermore National Lab. (LLNL), Livermore, CA (United States), 2017.

(责任编辑：王中强)