



AXSP程序中不可分辨能区共振自屏蔽截面计算模块开发和验证

周峰 马续波 张辰 杨永伟

Development and Validation of Resonance Self-shielding Cross Section Calculation Module of the Unresolved Energy Region in AXSP Program

ZHOU Feng, MA Xubo, ZHANG Chen, YANG Yongwei

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.40.2022126>

引用格式:

周峰, 马续波, 张辰, 杨永伟. AXSP程序中不可分辨能区共振自屏蔽截面计算模块开发和验证[J]. 原子核物理评论, 2023, 40(4):676–683. doi: 10.11804/NuclPhysRev.40.2022126

ZHOU Feng, MA Xubo, ZHANG Chen, YANG Yongwei. Development and Validation of Resonance Self-shielding Cross Section Calculation Module of the Unresolved Energy Region in AXSP Program[J]. Nuclear Physics Review, 2023, 40(4):676–683. doi: 10.11804/NuclPhysRev.40.2022126

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

双平面多圈注入模拟优化程序TPIS的初步开发与验证

Development and Validation of TPIS Program for Two-plane Multiturn Injection and Optimization

原子核物理评论. 2019, 36(3): 322–328 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.36.03.322>

高 Q^2 电子原子核单举准弹性散射截面的计算方法

A Calculation Method of Inclusive Electron Nucleus Quasi-elastic Scattering Cross Section at High Q^2

原子核物理评论. 2017, 34(4): 718–723 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.34.04.718>

中低能速度能区离子与H, He原子碰撞中的经典电子俘获截面

Classical Electron Capture in Collisions of Ions with H, He Atoms at Low and Intermediate Velocities

原子核物理评论. 2021, 38(2): 210–214 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.38.2021007>

$^{12}\text{C}+^{13}\text{C}$ 在库仑位垒以下能区的熔合截面测量

Measurement of $^{12}\text{C}+^{13}\text{C}$ Fusion Cross Sections Below Coulomb Barrier Energies

原子核物理评论. 2017, 34(4): 705–709 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.34.04.705>

原子核第一激发能的统计规律

Statistical Features of the First Excitation Energy of Nuclei

原子核物理评论. 2019, 36(4): 408–413 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.36.04.408>

哪些核适合被液滴模型描述: 基于不确定度分解方法的统计研究 (英文)

Which Nuclei are Well Described by Liquid Drop Model: A Statistical Study Based on Uncertainty Decomposition Method

原子核物理评论. 2017, 34(1): 110–115 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.34.01.110>

文章编号: 1007-4627(2023)04-0676-08

AXSP程序中不可分辨能区共振自屏截面计算模块开发和验证

周峰^{1,2}, 马续波^{2,†}, 张辰², 杨永伟^{1,3,†}

1. 先进能源科学与技术广东省实验室, 广东 惠州 516000;
2. 华北电力大学核科学与工程学院, 北京 102206;
3. 中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000)

摘要: 在不可分辨能区, 由于共振峰非常密集, 受核测量仪器分辨率的限制, 不能测得对应能量点下精确的共振参数数据。对该能区, 评价核数据库只给出共振参数的平均值和分布函数。为了考虑不可分辨共振能区的共振自屏效应, 需要根据这些具有概率分布性质的参数计算有效自屏截面。针对不可分辨共振能区的共振自屏效应的处理, 采用“Ladder Sampling”和积分统计原理方法, 在先进核截面处理程序 AXSP 中开发了概率表模块 PUnresXS 和有效自屏截面计算模块 UnresXS, 并对概率表计算模块中的算法进行了改进。以 NJOY2016 的计算结果作为参考解, 分别对 PUnresXS 和 UnresXS 模块进行了验证, 结果表明: 概率表模块计算效率提高了 60% 以上, 基准题 k_{eff} 与中子能谱结果与参考解符合良好, 开发的共振自屏截面计算模块计算精度与 NJOY2016 相当, 表明了这两个模块在 AXSP 程序中开发的正确性。

关键词: 不可分辨能区; 共振自屏截面; Ladder Sampling 方法; 积分统计原理近似法
中图分类号: TL328 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.40.2022126

0 引言

部分核素存在一段特殊的能量区间, 在该能量区间内共振峰非常狭窄, 由于使用的核测量仪器分辨率的限制以及物理现象本身的随机性, 使得该能区内的共振参数数据无法直接测量得到, 把这部分能量区间称为不可分辨共振能区^[1]。在截面库的制作过程中, 对不可分辨能区共振自屏效应的处理至关重要。为了给先进反应堆提供更精确的多群和连续点截面, 打造拥有自主知识产权的截面制作程序, 华北电力大学开发了先进快堆核截面处理程序 AXSP^[2], 旨在实现国产高精度截面制作程序的自动化和创新性。通过计算不可分辨能区共振自屏截面去考虑共振自屏效应, 主要有两种计算方法, 分别是概率表方法^[3]和积分统计原理方法。概率表方法包括两种: 第一种是“Ladder Sampling”方法, 第二种是“Monte Carlo”方法^[4]。“Ladder Sampling”方法最早由 Levitt 提出, 在 NJOY^[5] 中 PURR 模块、清华大学 RXSP^[6] 中的 PURC 模块^[7]以及西安交通大学的 NECP-Atlas^[8] 中概率表模块^[9]均采用了这种方法。“Monte Carlo”方法是由 Dunn 等提出, 并在核数据处理程序 AMPX^[10] 的概率表模块 PURM^[4]中实现。对于积分统计原理方

法, 这是一种数值积分求解方法, 在 NJOY^[5] 和快堆 MC²^[11] 中使用, 国内西安交通大学开发的核数据处理程序 NECP-Atlas 中也采用了这种方法并且对于近似项进行了精确计算, 提高了计算精度。本工作主要针对不可分辨能区共振自屏效应的处理, 分别使用“Ladder Sampling”方法和有效自屏截面近似方法在 AXSP 中开发两个模块, 同时对概率表模块的计算效率进行改进, 并通过基准题进行验证。

1 理论方法

1.1 Ladder Sampling 方法

对 ENDF/B-VII.1 评价核数据库^[12]中给出的不可分辨共振参数在选定的能量范围内的平均值及其满足的统计分布进行抽样, 为特定的自旋序列构建“Ladder”。

先对共振间距抽样, 共振间距符合 Wigner 公式:

$$f(x) = \frac{\pi}{2} x e^{-\frac{\pi}{4} x^2}, \quad (1)$$

$$x = \frac{D_{ij}}{\langle D_{ij} \rangle}, \quad (2)$$

收稿日期: 2022-12-12; 修改日期: 2023-02-03

作者简介: 周峰(1998-), 男, 江西抚州人, 研究实习员, 硕士, 从事反应堆物理研究; E-mail: zhoufeng@gdlhz.ac.cn

† 通信作者: 马续波, E-mail: maxb917@163.com; 杨永伟, E-mail: yangyongwei@impcas.ac.cn

其中: D_{lj} 为抽样共振间距; $\langle D_{lj} \rangle$ 为平均共振间距; l 表示轨道角动量; j 表示总角动量。

使用随机数发生器, 其能自动产生符合 (0,1) 均匀分布的随机数 R 。并根据下列积分式 (3), 将式 (1) 中 $f(x)$ 的表达式代入积分式 (3) 中得到式 (4), 对式 (4) 变形得到 x 的表达式, 可求得 x , 求出 x 后代回式 (2) 可求出抽样共振间距 D_{lj} :

$$\int_0^x f(x) dx = R, \quad (3)$$

$$\int_0^x \frac{\pi}{2} x e^{-\frac{3}{4}x^2} dx = R, \quad (4)$$

$$x = \sqrt{\frac{4}{\pi} \ln \frac{1}{1-R}}. \quad (5)$$

共振宽度的满足卡方分布函数:

$$p_\nu(y) = \frac{\nu}{2\Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)} \left(\frac{\nu y}{2}\right)^{\frac{\nu}{2}-1} e^{-\frac{\nu y}{2}}, \quad (6)$$

其中: ν 为不同反应道对应的卡方分布的自由度, 其为常数; Γ 函数为数学中伽马函数; y 可以表示为

$$y = \frac{\Gamma_{\lambda r}}{\langle \Gamma_{\lambda r} \rangle}, \quad (7)$$

$\Gamma_{\lambda r}$ 为反应道 r (包括总截面、弹性散射、裂变、辐射俘获反应道) 对应共振 λ 的抽样宽度; $\langle \Gamma_{\lambda r} \rangle$ 为平均共振宽度。求解抽样共振宽度的方法与求解共振间距方法类似。

在得到了共振参数的共振序列后, 使用 SLBW 公式 [5] 计算点截面, 采用了 ψ - χ 方法 [5] 计算多普勒展宽, 给出了弹性散射截面的计算公式:

$$\begin{aligned} \sigma_n = & \sum_l \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \varphi_1 + \\ & \sum_l \sum_r \frac{4\pi}{k^2} \frac{2J+1}{4I+2} \frac{\Gamma_{nr}}{\Gamma_{lr}} \left\{ \cos 2\varphi_1 - \left(1 - \frac{\Gamma_{nr}}{\Gamma_{lr}}\right) \times \right. \\ & \left. \psi(\theta, X) + \sin 2\varphi_1 \chi(\theta, X) \right\}, \quad (8) \end{aligned}$$

其中: l 为轨道角动量; k 表示中子波数; φ_1 为相移因子; r 为给定 l 的共振数; J 为对应共振的自旋; I 为总自旋; Γ_{nr} 和 Γ_{lr} 为共振 r 的弹性散射宽度和总宽度; ψ 和 χ 分别为复数误差函数的实部和虚部函数; 其中 θ 和 X 的表达式如下所示:

$$\theta = \sqrt{\frac{A}{4kTE_0}} \Gamma_{lr}, \quad (9)$$

$$X = \frac{2(E_0 - E'_r)}{\Gamma_{lr}}, \quad (10)$$

A 为原子核质量与中子质量比值; k 为波尔兹曼常数; T 为温度; E_0 为入射中子能; E'_r 为引发共振 r 的能量。

通过上述步骤后得到了能量网格中一系列对应能量点下的各反应道截面, 先对总截面进行排序, 根据算法找出总截面最小值 σ_{\min} 和最大值 σ_{\max} , 以 σ_{\min} 对应的能量值作为第一个概率箱的能量, 再根据式 (11):

$$\sigma_i = \sigma_{\min} \cdot \left(\frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}} \right)^{\frac{k-2}{k-1}}, \quad (11)$$

其中: $k=2, 3, \dots, K$ 得到 $\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$ 直到 σ_n 等截面, 并以这些截面对应的能量值依次作概率箱的能量。同时, 把其他截面也存入对应的概率箱中, 通过每个概率箱中相应的不同反应道的截面值除以该概率箱的能量点数目可以得到不同反应道的截面平均值。并且每个概率箱的概率是通过该概率箱所有能量点数目与总的概率箱数目相除得到。

生成的概率表数据可以给蒙特卡罗程序直接使用, Bondarenko 共振自屏截面可以作为多群截面使用, Bondarenko 共振自屏截面可用概率表数据通过式 (12) 计算:

$$\sigma_x(E) = \frac{\sum_i \frac{P_i(E) \sigma_{xi}(E)}{\sigma_0 + \sigma_{ii}(E)}}{\sum_i \frac{P_i(E)}{\sigma_0 + \sigma_{ii}(E)}}, \quad (12)$$

其中: x 表示不同的反应道 (为 t, n, f, γ 时分别表示总截面、弹性散射、裂变和辐射俘获); $P_i(E)$ 表示对应能量点 E 下概率表中第 i 个概率值 (其中 i 为 1 到概率箱数目最大值); $\sigma_{xi}(E)$ 表示对应能量点 E 下概率表中 x 反应道的第 i 个对应截面值; σ_0 为本底截面。针对式 (12) 中 $\sigma_x(E)$ 的计算, 分子将对应的概率表中第 i 个概率数值 $P_i(E)$ 乘以对应 x 反应道的第 i 个截面值再与概率表中总截面值 $\sigma_{ii}(E)$ 加本底截面之和作商再依次求和, 分母同理, 得到分子分母的数值即可求出 $\sigma_x(E)$ 。

1.2 有效自屏截面近似方法

对于某一能量点 E^* 处的有效自屏截面, 可以看成求解在该能量点附近能量区间的平均截面。各个反应道的 0 阶有效自屏截面可表示为

$$\bar{\sigma}_{0x}(E^*) = \frac{\int_{E_1}^{E_2} \sigma_x(E) \phi_0(E) dE}{\int_{E_1}^{E_2} \phi_0(E) dE}, \quad (13)$$

式中 E^* 是能量范围 $[E_1, E_2]$ 内的有效能量; $\sigma_x(E)$ 为 x 反

应道截面值； $\phi_0(E)$ 为0阶权重能谱。为了计算运输截面的有效值，还需计算中子通量的1阶分量 $\phi_1(E)$ 加权的1阶有效自屏总截面：

$$\bar{\sigma}_{1r}(E^*) = \frac{\int_{E_1}^{E_2} \sigma_x(E) \phi_1(E) dE}{\int_{E_1}^{E_2} \phi_1(E) dE}, \quad (14)$$

式中 $\phi_1(E)$ 为1阶权重能谱。

基于窄共振和 B_0 近似，式(13)和(14)变形得到：

$$\bar{\sigma}_{0x}(E^*) = b_x + \frac{\int_{E_1}^{E_2} \frac{\sigma_{Rx}(E)}{\bar{\sigma} + \sigma_{Rr}(E)} C(E) dE}{\int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{\bar{\sigma} + \sigma_{Rr}(E)} C(E) dE}, \quad (15)$$

$$\bar{\sigma}_{1r}(E^*) = \frac{\int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{\bar{\sigma} + \sigma_{Rr}(E)} C(E) dE}{\int_{E_1}^{E_2} \frac{1}{[\bar{\sigma} + \sigma_{Rr}(E)]^2} C(E) dE} - \sigma_0, \quad (16)$$

其中： b_x 是ENDF/B-VII.1评价核数据库^[12]中给出的平滑基底截面； $\bar{\sigma}$ 为平均截面； σ_0 为稀释截面； $C(E)$ 被假定为 E 的一个缓慢变化的函数，近似认为其为常数，即 $C(E)=1$ ； $\sigma_{Rx}(E)$ 的表达式为

$$\sigma_{Rx}(E) = \sum_s \sum_r \sigma_{xsr}(E - E_{sr}), \quad (17)$$

其中： σ_{xsr} 表示 x 反应道下自旋 s 中共振 r 对应的截面； E_{sr} 是该共振的中心能量。

式(15)和(16)可以写成：

$$\bar{\sigma}_{0x} = b_x + \frac{\bar{\sigma} I_{0x}}{1 - I_{0r}}, \quad (18)$$

$$\bar{\sigma}_{1r} = b_r + \frac{\bar{\sigma} I_{1r}}{1 - I_{0r} - I_{1r}}. \quad (19)$$

0阶波动积分 I_{0x} 和1阶波动积分 I_{1r} 表达式如下：

$$I_{0x} = \frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \frac{\sum_{sr} \sigma_{xsr}(E - E_{sr})}{\bar{\sigma} + \sum_{sr} \sigma_{tsr}(E - E_{sr})} dE, \quad (20)$$

$$I_{1r} = \frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \frac{\bar{\sigma} \sum_{sr} \sigma_{xsr}(E - E_{sr})}{[\bar{\sigma} + \sum_{sr} \sigma_{tsr}(E - E_{sr})]^2} dE. \quad (21)$$

对波动积分做分解，得到三种不同的积分，其中孤立项 B_{xs} 和 D_{ts} 的表达式如下：

$$B_{xs} = \frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \sum_r \frac{\sigma_{xsr}}{\bar{\sigma} + \sigma_{tsr}} dE$$

$$= \frac{1}{D_s} \int P(\alpha) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sigma_{xsr}(\xi)}{\bar{\sigma} + \sigma_{tsr}(\xi)} d\xi d\alpha, \quad (22)$$

$$D_{ts} = \frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \sum_r \frac{\bar{\sigma} \sigma_{tsr}}{[\bar{\sigma} + \sigma_{tsr}]^2} dE$$

$$= \frac{1}{D_s} \int P(\alpha) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\bar{\sigma} \sigma_{tsr}(\xi)}{[\bar{\sigma} + \sigma_{tsr}(\xi)]^2} d\xi d\alpha, \quad (23)$$

式中 D_s 为平均能级间距； $P(\alpha)$ 为共振参数 α 服从的概率分布； $\xi = E - E_{sr}$ ；第三种积分是序列内重叠积分：

$$V_{0xs} = \frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \sum_r \sum_{r' \neq r} \frac{\sigma_{xsr}}{\bar{\sigma} + \sigma_{tsr}} \frac{\sigma_{xsr'}}{\bar{\sigma} + \sigma_{tsr'} + \sigma_{tsr}} dE. \quad (24)$$

有效截面近似方法忽略了序列内重叠效应，因此波动积分(20)和(21)可以写成下式：

$$I_{0x} = \sum_s B_{xs} \left(1 - \sum_{s' \neq s} B_{ts'} \right), \quad (25)$$

$$I_{1r} = \sum_s D_{ts} \left(1 - \sum_{s' \neq s} B_{ts'} \right)^2. \quad (26)$$

由式(25)和(26)，0阶有效自屏截面与1阶有效自屏截面近似方法的计算公式可以写成：

$$\bar{\sigma}_{0x} = b_x + \frac{\bar{\sigma} \sum_s B_{xs} \left(1 - \sum_{s' \neq s} B_{ts'} \right)}{1 - \sum_s B_{ts} \left(1 - \sum_{s' \neq s} B_{ts'} \right)}, \quad (27)$$

$$\bar{\sigma}_{1r} = b_r + \frac{\bar{\sigma} \sum_s D_{ts} \left(1 - \sum_{s' \neq s} B_{ts'} \right)^2}{1 - \sum_s B_{ts} \left(1 - \sum_{s' \neq s} B_{ts'} \right) - \sum_s D_{ts} \left(1 - \sum_{s' \neq s} B_{ts'} \right)^2}, \quad (28)$$

其中 B_{xs} ， B_{ts} 和 D_{ts} 的计算公式为

$$B_{xs} = \frac{1}{D_s} \int P(\alpha) \frac{\Gamma_x}{2 \cos 2\varphi_1} J(\beta, \theta, \tan 2\varphi_1, 0) d\alpha, \quad (29)$$

$$B_{ts} = \frac{1}{D_s} \int P(\alpha) \Gamma J(\beta, \theta, \tan 2\varphi_1, \tan 2\varphi_1) d\alpha, \quad (30)$$

$$D_{ts} = \frac{1}{D_s} \int P(\alpha) \Gamma K(\beta, \theta, \tan 2\varphi_1, \tan 2\varphi_1) d\alpha, \quad (31)$$

式中 ϕ_1 为相移因子； Γ_x 和 Γ 为 x 反应道对应共振宽度和总宽度； θ 表达式见式(10)；其中， J ， K 积分^[5]和 β 表示为

$$J(\beta, \theta, a, b) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\psi(\theta, X) + b\chi(\theta, X)}{\beta + \psi(\theta, X) + a\chi(\theta, X)} dX, \quad (32)$$

$$K(\beta, \theta, a, b) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\beta[\psi(\theta, X) + b\chi(\theta, X)]}{[\beta + \psi(\theta, X) + a\chi(\theta, X)]^2} dX, \quad (33)$$

$$\beta = \frac{\bar{\sigma}}{\sigma_m \cos 2\varphi_1}, \quad (34)$$

$$\sigma_m = \frac{4\pi g_J \Gamma_n}{k^2 \Gamma}, \quad (35)$$

$$g_J = \frac{2J+1}{2(2I+1)}, \quad (36)$$

式中 ψ 和 χ 分别为复数误差函数的实部和虚部函数； k 表示中子波数； J 为对应共振的自旋； I 为总自旋。相移因子 φ_1 取 0，对于式 (29)、(30) 和 (31) 中 $J(\beta, \theta, 0, 0)$ ， $K(\beta, \theta, 0, 0)$ 积分的求解，采用 Gauss-Jacobi 求积方法，再对共振宽度的概率分布进行 n 次积分，对于具有 1 到 4 个自由度的 χ^2 概率分布，采用了一组 10 个正交点和权重，将 n 次积分转化为 n 次求和。

2 程序开发和算法改进

基于上述理论方法，使用 FORTRAN2003 语言在 AXSP 中开发了 PUnresXS 模块和 UnresXS 模块。通过输入卡文件可以选择自己需要计算的模块，输入本底截面和温度的数量及数值，同时程序也实现多个核素一起计算的功能，只需填入核素名称即可根据评价库的路径依次进行读取和处理，方便用户使用。对于不同模块处理后的 PENDF 格式输出，存放在对应的文件夹下，易于查看，AXSP 程序的计算流程如图 1 所示。

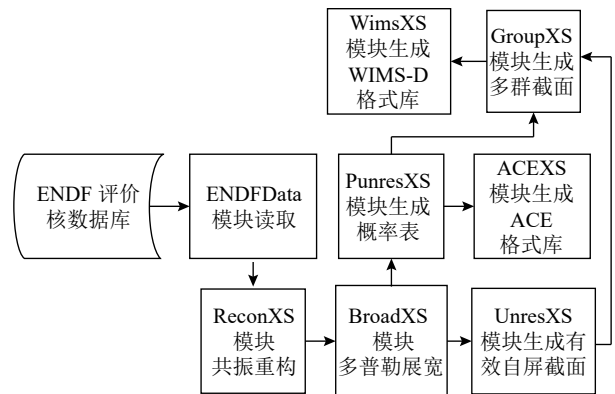


图 1 AXSP 的计算流程

2.1 排序算法的改进

概率表模块 PUnresXS 开发完成后，发现其生成概率表的耗时较长，这使得整个程序的计算效率较低。在生成概率表的过程中，通过大量抽样共振参数计算得到了数量庞大的截面值，并且需要对截面值进行排序，其中使用的冒泡排序法效率较低。选取了五种排序方式与冒泡排序法生成概率表的时间做了对比，在同一台电脑上计算，处理器与占用内存均一样，测试了六个核素。

根据表 1 给出的六种排序算法生成概率表的时间对比可以看到，希尔排序与堆排序计算效率相当，计算效率高于其它排序算法，希尔排序平均时间复杂度为 $O(n^{1.25})$ ，堆排序时间复杂度为 $O(n \cdot \log n)$ ，对于数据量非常大的情况，堆排序较希尔排序法更有优势。考虑到抽样产生了较大数据量的截面，所以在 PUnresXS 模块中采用了堆排序对算法做了改进。根据表 2 给出的计算效率对比可以看到，相较于之前的冒泡排序，堆排序使得概率表的计算效率提高了 60% 以上。

表 1 使用六种排序算法生成六个核素的概率表计算时间

单位：s

排序类型	²³⁵ U	²³⁸ U	²⁴¹ Pu	²⁴¹ Am	²³² Th	⁷⁴ As
冒泡排序	317.52	946.18	489.01	545.72	869.65	647.48
快速排序	187.96	384.67	229.23	288.69	361.28	277.63
直接插入排序	241.46	587.33	328.97	386.16	547.51	417.06
希尔排序	121.83	100.34	100.50	156.23	97.11	77.29
选择排序	313.36	899.60	475.70	536.03	821.42	612.96
堆排序	122.19	104.09	100.48	154.85	101.90	79.99

表 2 堆排序法较冒泡排序提高的计算效率

排序类型	²³⁵ U	²³⁸ U	²⁴¹ Pu	²⁴¹ Am	²³² Th	⁷⁴ As
冒泡排序/s	317.52	946.18	489.01	545.72	869.65	647.48
堆排序/s	122.19	104.09	100.48	154.85	101.90	79.99
提高效率/%	61.52	89.00	79.45	71.62	88.28	87.65

3 数值验证

为了验证开发完成的不可分辨共振处理模块的正确性，基于 ENDF/B-VII.1 评价核数据库 [12]，以 NJOY2016 [5] 的结果为参考解，分别对 PUnresXS 模块与 UnresXS 模块进行了验证。

3.1 PUnresXS 模块验证

同时选取了高浓缩铀裸球 GODIVA 基准题 [13] 与钠冷快堆 ZPR-6/7 基准题 [14] 对其进行基准题验证。

GODIVA 基准题模型由一个裸铀(富集度为 93.71% 的 ^{235}U) 球体组成，直径为 6.883 in (1 in = 2.54 cm)，质量为 52.42 kg，其中包括 0.02 kg 的 ^{236}U 和极少量的杂质 (C, Si 和 Fe)。

ZPR-6/7 基准题采用分体式方形组件设计，装载 Pu-U-Zr 燃料组件，反射层材料为贫化铀和不锈钢，外部为真空边界，临界测量温度为 20 °C。ZPR-6/7 按照区域组分和体积构建的均匀 R-Z 模型 [15]，如图 2 所示。

基于 ENDF/B-VII.1 评价库，用 NJOY 制作了两套 ACE 格式截面库。一套截面库用 PUnresXS 模块替换 NJOY 中概率表模块 PURR 制作，另一套直接全部使用 NJOY 中各模块制作，制作好的截面库提供给蒙特卡罗程序计算。

同时还计算了没有概率表的 k_{eff} 结果与带有概率表的 k_{eff} 计算结果并对它们进行了对比，分别给出了两道基准题的 k_{eff} 结果对比如表 3 和表 4 所列。可以看到，有概率表时两个程序计算的 GODIVA 基准题 k_{eff} 结果偏差为 $+62 \times 10^{-5}$ ，ZPR-6/7 基准题 k_{eff} 结果偏差为 $+30 \times 10^{-5}$ 。没有概率表时计算的 k_{eff} 相较有概率表的情况偏小，且相较有概率表时两者 k_{eff} 绝对偏差大于 400×10^{-5} ，这证

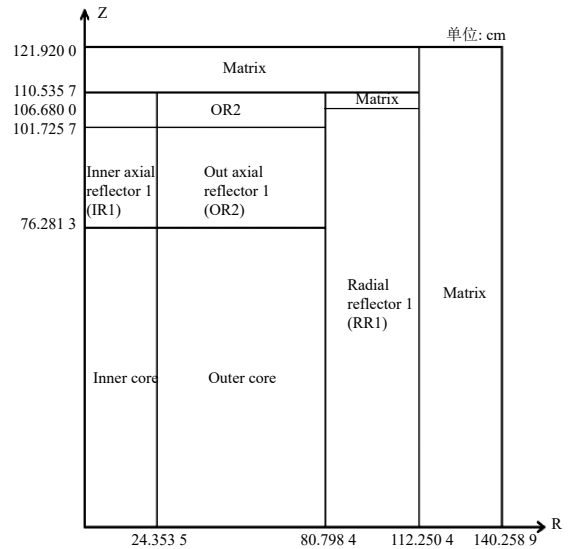


图 2 ZPR-6/7 堆芯 RZ 模型

表 3 GODIVA 基准题 k_{eff} 计算结果

程序	有概率表	无概率表	偏差/ 10^{-5}
AXSP	1.000 85 +/- 0.000 32	0.996 39 +/- 0.000 34	+446
NJOY	1.000 23 +/- 0.000 59	0.995 99 +/- 0.000 54	+424

表 4 ZPR-6/7 基准题 k_{eff} 计算结果

程序	有概率表	无概率表	偏差/ 10^{-5}
AXSP	0.992 71 +/- 0.000 32	0.988 44 +/- 0.000 32	+427
NJOY	0.992 41 +/- 0.000 33	0.988 28 +/- 0.000 35	+413

明了概率表模块开发的必要性。有概率表时计算的 k_{eff} 结果表明在统计误差范围内，使用两个程序的计算结果是一致的。

同时，给出了有概率表时计算的 ZPR-6/7 基准题内堆芯和外堆芯两个代表性区域的中子能谱的计算结果，如图 3 所示。

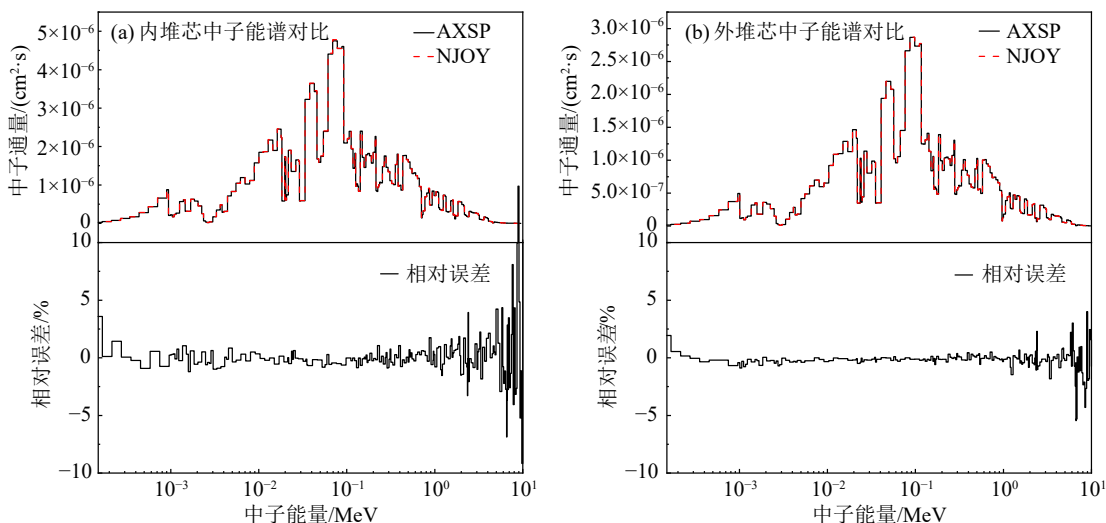


图 3 ZPR-6/7 基准题内堆芯与外堆芯中子能谱对比(在线彩图)

可以看到, 内堆芯和外堆芯中子通量密度的相对误差在绝大多数能量点小于 2.5%; 内外堆芯在中子能量大于 5 MeV 时其误差较大, 是由于在此区间内中子通量极小, 数量级为 10^{-10} , 当投入粒子数量和计算代数不足时容易引入较大的误差, 除能量较高的区域外, 中子能谱都在三倍统计区域内, 因此中子通量密度计算结果也是一致的。

3.2 UnresXS 模块验证

基于 ENDF/B-VII.1 评价核数据库对有效自屏截面

计算模块 UnresXS 做了核素截面对比与基准题验证, 并对结果进行了分析。

设置相同的本底截面与温度, 将 UnresXS 模块计算的有效自屏截面结果与 NJOY2016 中 UNRESR 模块计算结果进行了对比与误差分析。图 4 和图 5 给出了 ^{235}U , ^{238}Pu , ^{232}Th , ^{241}Am 四个锕系核素的有效截面对比与误差曲线。由图可见, UnresXS 模块计算的四个锕系核素的截面结果与 NJOY2016 的结果符合良好, 精度相当, 且相对误差均在 0.1% 以内。

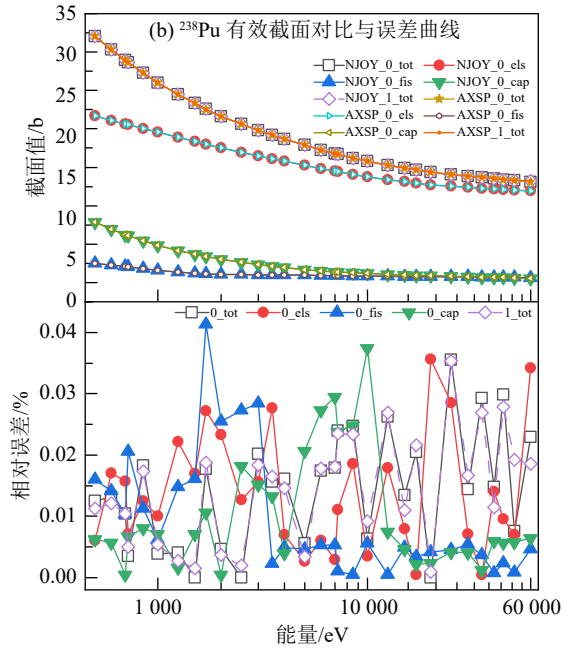
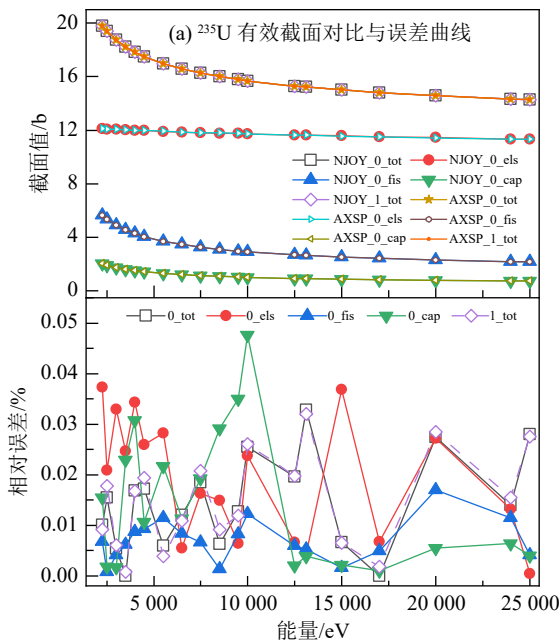


图 4 ^{235}U 和 ^{238}Pu 有效截面对比与误差曲线 (在线彩图)

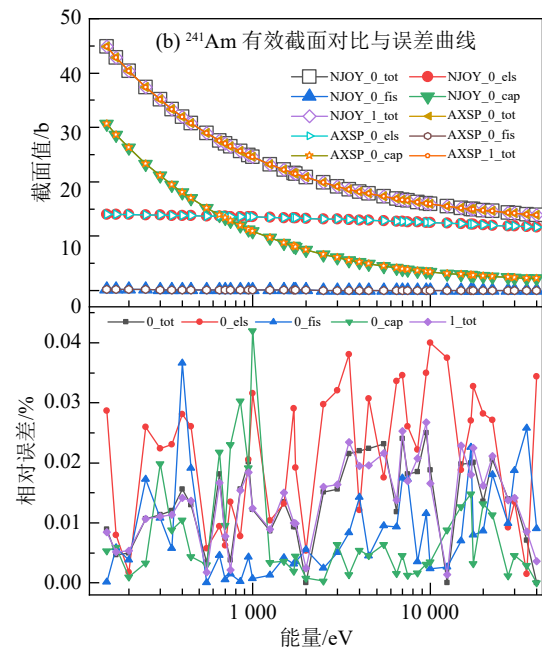
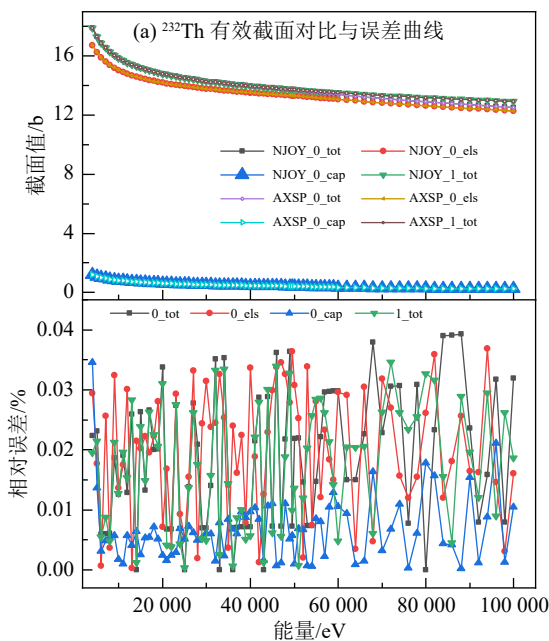


图 5 ^{232}Th 和 ^{241}Am 有效截面对比与误差曲线 (在线彩图)

选取了 ICSBEP 手册^[16]中的 17 道临界基准题对有效自屏截面计算模块 UnresXS 做进一步的验证, 17 道临界基准题包含主要的裂变核素(如 ^{232}Th , ^{233}U , ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{241}Pu 等), 均为快中子谱基准题, 材料温度均设置为 300 K, 对于 ^{235}U 还分为高富集铀 (HEU)、中等富集铀 (IEU) 和低富集铀 (LEU) 三种情况。基于 ENDF/B-VII.1 核评价库, 用 NJOY 制作 MATXS 格式库, 能群用快堆 199 群, 两套库的制作流程与 PUnresXS 模块类似。使用课题组开发的快堆多群截面程序 MG-GC^[17]对两套库进行处理, 产生问题相关的截面数据, 再利用 ANISN^[18]程序去计算临界基准题。

临界计算结果如表 5 所列, 由表 5 可见, AXSP 和 NJOY 的计算结果绝对偏差均小于 0.1×10^{-5} , 偏差很小。结果表明有效自屏截面计算模块 UnresXS 实现了与 NJOY 中有效自屏截面计算模块 UNRESR 相当的功能, 并且计算结果准确可靠。

表 5 临界基准题计算结果对比

基准题	AXSP k_{eff}	NJOY k_{eff}	偏差/ 10^{-5}
Hmf1	1.000 100	1.000 100	0.00
Hmf2	1.002 140	1.002 140	0.00
Hmf41	1.004 480	1.004 480	0.00
Imf3	1.003 120	1.003 120	0.00
Imf4	1.007 390	1.007 390	0.00
Imf6	1.001 510	1.001 510	0.00
Pmf2	0.994 305	0.994 305	0.00
Pmf5	0.999 369	0.999 369	0.00
Pmf6	0.996 848	0.996 848	0.00
Pmf8	0.994 619	0.994 619	0.00
Pmf9	1.005 260	1.005 260	0.00
Pmf10	0.996 228	0.996 228	0.00
Pmf23	0.996 351	0.996 351	0.00
Pmf25	0.999 246	0.999 246	0.00
Umf1	0.999 957	0.999 957	0.00
Umf2	0.999 235	0.999 236	-0.10
Umf4	0.999 814	0.999 814	0.00

4 结论与展望

本工作通过对不可分辨能区共振自屏截面处理方法的研究, 在先进核截面处理程序 AXSP 中开发了概率表模块 PUnresXS 和有效自屏截面计算模块 UnresXS, 通过改进的排序算法显著提高了概率表模块的计算效率。以 NJOY2016 的计算结果为参考解, 概率表模块 PUnresXS 针对两道基准题的 k_{eff} 结果与参考解的绝对偏差

均在 100×10^{-5} 以内并且中子能谱符合良好, 有效自屏截面计算模块 ^{235}U , ^{238}Pu 截面值与参考解对比显示误差均在 0.1% 以内, UnresXS 针对 17 道临界基准题的 k_{eff} 结果与参考解对比绝对偏差在 10×10^{-5} 以内。计算结果表明, 两个模块的计算结果可靠, 精度与 NJOY2016 相当, 可以实现在 AXSP 程序所需承担的功能, 能够为后续的计算提供可靠的截面结果。

在程序功能实现后, 也将进一步进行完善和创新, 包括对有效自屏截面近似计算方法的完善, 考虑同一自旋序列中共振重叠的影响以及弹性散射截面和总截面中干涉的影响, 让有效自屏截面计算模块的计算结果在低本底截面下给出更加精确合理的结果。

参考文献:

- [1] ZHOU Feng. Research on Processing Method of Resonance Self-shield Cross Section in Unresolved Resonance Energy Region[D]. Beijing: North China Electric Power University, 2022. (in Chinese) (周峰. 不可分辨能区共振自屏截面处理方法研究[D]. 北京: 华北电力大学, 2022)
- [2] CULLEN D E. A Short History of ENDF/B Unresolved Resonance Parameters[R]. California: Lawrence Livermore National Laboratory, 2010.
- [3] LEVITT L B. *Nuclear Science and Engineering*, 1972, 49(4): 450.
- [4] DUNN M E, LEAL L C. *Nuclear Science and Engineering*, 2004, 148(1): 30.
- [5] MACFARLANE R, MUIR D W, BOICOURT R M, et al. The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2016[R]. New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 2018.
- [6] YU Jiankai. Research on the Key Methods of Evaluation, Processing and Application of Important Nuclear Data for Reactor and Code Development[D]. Beijing: Tsinghua University, 2015. (in Chinese) (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开发[D]. 北京: 清华大学, 2015.)
- [7] YU J, HUO H, LI W, et al. Validation of a New PURC Module for Calculating Probability Table in Unresolved Resonance Region in RXSP Code[C]//22nd International Conference on Nuclear Engineering. Volume 5: Innovative Nuclear Power Plant Design and New Technology Application; Student Paper Competition. Prague: ASME. 2014: V005T17A034.
- [8] ZU Tiejun, XU Jialong, TANG Yongqiang, et al. *Annals of Nuclear Energy*, 2019, 123: 153.
- [9] BI Huchao, ZU Tiejun, XU Jialong, et al. *Nuclear Power Engineering*, 2020, 41(3): 8. (in Chinese) (毕沪超, 祖铁军, 徐嘉隆, 等. *核动力工程*, 2020, 41(3): 8.)
- [10] WIARDA D, DUNN M E, GREENE N M, et al. AMPX-6: A Modular Code System for Processing ENDF/B: ORNL/TM-2016/43[R]. Tennessee: Oak Ridge National Laboratory, 2016.
- [11] GREEN D M, PITTERLE T A. ETOE: A Program for ENDF/B to MC 2 Data Conversion[R]. Washington D C: United States Atomic Energy Commission, 1968.
- [12] CHADWICK M B, HERMAN M, OBLOŽINSKÝ P, et al. *Nucle-*

- ar Data Sheets, 2011, 112(12): 2887.
- [13] LABAUVE R J. Bare, Highly Enriched Uranium Sphere (GODIVA), NEA/NSC/DOC (95)03, Volume II, HEU-MET-FAST-001[R]. New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 2002.
- [14] SIMTH M A, LELL R M, Moneo P. ZPR-6 ASSEMBLY 7: A Cylindrical Assembly with Mixed (Pu-U)-Oxide Fuel and Sodium with a Thick Depleted-Uranium Reflector: NEA/NSC/DOC(95)03/VI[R]. Chicago: Argonne National Laboratory, 2003.
- [15] Methods and Issues for the Combined Use of Integral Experiments and Covariance Data: NEA/NSC/WPEC/DOC(2013)445[R]. Paris: OECD-Nuclear Energy Agency, 2013.
- [16] BESS J D. International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project[R]. Paris: OECD-Nuclear Energy Agency, 2006.
- [17] HUANG Zifeng. Research on Reconstruction and Linearization of Resonance Cross Section and Fabrication Method of Ultrafine Energy Group Cross Section of Fast Reactor[D]. Beijing: North China Electric Power University, 2021. (in Chinese)
(黄自锋. 共振峰重构与快堆超精细能群截面制作方法研究[D]. 北京: 华北电力大学, 2021.)
- [18] ENGLE J R. A User's Manual for ANISN, A One-Dimensional Discrete Ordinates Transport Code with Anisotropic Scattering[M]. Tennessee: Oak Ridge National Laboratory, 1967.

Development and Validation of Resonance Self-shielding Cross Section Calculation Module of the Unresolved Energy Region in AXSP Program

ZHOU Feng^{1,2}, MA Xubo^{2,†}, ZHANG Chen², YANG Yongwei^{1,3,†}

(1. Advanced Energy Science and Technology Guangdong Laboratory, Huizhou 516000, Guangdong, China;

2. School of Nuclear Science and Engineering, North China Electric Power University, Beijing 102206, China;

3. Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China)

Abstract: In the unresolved energy region, due to the dense distribution of resonance peaks, the precise resonance parameter data cannot be obtained due to the resolution limitation of the nuclear measuring instrument. For this energy region, the Evaluation Nuclear Data Files only provides the average values and distribution functions of the resonance parameters. In order to consider the resonance self-shielding effect in the unresolved resonance energy region, it is necessary to calculate the effective self-shielding cross-section based on these parameters with probability distribution properties. For the treatment of resonance self-shielding effect in the unresolved resonance energy region, a probability table module PUnresXS and an effective self-shielding cross-section calculation module UnresXS were developed in the advanced nuclear cross-section processing program AXSP based on the "Ladder Sampling" and integral statistics principle method. The algorithms in the probability table calculation module were also improved. By comparing with the reference solution obtained from NJOY2016 calculations, the PUnresXS and UnresXS modules were independently validated. The results showed that the efficiency of the probability table module was improved by more than 60%, the k_{eff} and neutron spectrum were in good agreement with the reference solution. The developed resonance self-shielding cross-section calculation module exhibited similar accuracy to NJOY2016, demonstrating the correctness of these two modules developed in the AXSP program.

Key words: unresolved energy region; resonance self-shielding section; Ladder Sampling method; approximate method of integral statistical principle

Received date: 12 Dec. 2022; Revised date: 03 Feb. 2023

† Corresponding author: MA Xubo, E-mail: maxb917@163.com; YANG Yongwei, E-mail: yangyongwei@impcas.ac.cn