

基于GNDS格式热散射律评价库的热中子散射截面计算方法研究

刘朝洋, 马续波*, 义文明, 王福星, 傅联涛

华北电力大学核科学与工程学院, 北京

收稿日期: 2026年4月14日; 录用日期: 2026年4月30日; 发布日期: 2026年7月24日

摘要

针对目前广泛采用的ENDF评价核数据库格式扩展困难、协方差数据关联弱、可读性较差等问题, 国际上提出了GNDS格式评价核数据库格式, 该格式旨在解决传统评价核数据库格式(如ENDF)的历史遗留问题, 采用“结构化、现代化、面向应用和长期可持续”的思想, 把评价核数据库变成一个完整、自描述、机器可读的核数据知识库。开发能处理GNDS格式的计算程序, 对于推动反应堆物理计算的自主化发展具有重要意义。本文首先开发了GNDS格式热散射律评价核数据库处理程序GTES, 然后采用自主化先进核截面处理程序AXSP进行了截面计算, 最后采用国际临界基准题验证了截面处理精度。针对GNDS格式ENDF/B-VIII.1评价库中一声子模型石墨热散射律数据, 采用AXSP计算得到的热散射截面, 在0.001 eV以下能区, 优于晶体石墨的计算结果且与更吻合实验值, 精度提高约26%。针对金属氢化物, 采用自适应网格, 对比NJOY的固定网格, 在高能区可以更好地描述振荡情况。针对同时含有相干弹性散射和非相干弹性散截面核素, 创新性提出了散射角分布合并方法, 与仅采用干弹性散射截面, 最大偏差为17%; 与仅采用非相干散射截面相比, 最大偏差为32.564%。

关键词

GNDS格式, ENDF-6格式, AXSP, GTES

Research on Calculation Methods for Thermal Neutron Scattering Cross Sections Based on GNDS-Format Thermal Scattering Law Evaluated Libraries

Zhaoyang Liu, Xubo Ma*, Wenming Yi, Fuxing Wang, Liantao Fu

School of Nuclear Science and Engineering, North China Electric Power University, Beijing

*通讯作者。

文章引用: 刘朝洋, 马续波, 义文明, 王福星, 傅联涛. 基于 GNDS 格式热散射律评价库的热中子散射截面计算方法研究[J]. 核科学与技术, 2026, 14(3): 169-179. DOI: 10.12677/nst.2026.143015

Abstract

In response to the challenges of expanding the widely adopted ENDF evaluated nuclear database format, weak correlation of covariance data, and poor readability, the GNDS format for evaluated nuclear databases has been proposed internationally. This format aims to address the legacy issues of traditional evaluated nuclear database formats (such as ENDF). By adopting a “structured, modernized, application-oriented, and long-term sustainable” approach, it transforms evaluated nuclear databases into a comprehensive, self-describing, and machine-readable repository of nuclear data knowledge. Developing computational programs capable of processing GNDS-format data holds significant importance for subsequent reactor physics calculations. This paper first develops GTES, a processing program for GNDS-format thermal scattering law evaluated nuclear databases. Subsequently, the independently developed advanced nuclear cross-section processing program AXSP is employed for cross-section calculations. Finally, the accuracy of the cross-section processing is validated using international critical benchmark problems. For the one-phonon model graphite thermal scattering law data in the GNDS-format ENDF/B-VIII.1 evaluated library, the thermal scattering cross section calculated by AXSP is superior to that of crystalline graphite in the energy region below 0.001 eV, shows better agreement with experimental data, and achieves an accuracy improvement of approximately 26%. For metallic hydrides, the use of an adaptive mesh better captures oscillations in the high-energy region compared to the fixed-grid approach of NJOY. Furthermore, for nuclides containing both coherent and incoherent elastic scattering cross-sections, an innovative method for merging angular scattering distributions has been proposed. Compared to using only one type of scattering cross-section, this method achieves a remarkable improvement of up to 32.564%.

Keywords

GNDS Format, ENDF-6 Format, AXSP, GTES

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 简介

评价核数据库在反应堆物理模拟、计算以及核工程领域扮演着重要角色。通用核数据的格式促进了研究人员之间的交流，以及核数据的检查和评价。评价核数据库(ENDF)是目前评价核数据结构的主要格式。评价核数据库格式最初设计于 1960 年代，用于储存中子数据，在反应堆物理模拟、屏蔽设计中发挥了重要作用。多年来，核数据的储存格式的范围已经扩大到容纳带电粒子、光核、衰变数据、热中子散射律数据等。自 1990 年美国 ENDF/B VI 库及其相关的 ENDF-6 格式发布以来，ENDF-6 格式已事实上成为全球标准。目前 ENDF 最新规范格式为第六版(ENDF-6) [1]。ENDF-6 格式已被用作世界各地机构之间共享核数据的标准格式，并被所有现代评价核数据库所采用，包括 ENDF/B-VIII.1 数据库、JEFF-3.3 数据库[2]、GENDL-3.2 数据库[3]，JENDL-5 数据库[4]和 TENDL2019 数据库[5]。尽管 ENDF-6 格式已经是一种极为成功的核数据格式，但近年来随着核数据领域的发展，其缺点也日益明显。一方面，ENDF-6 格式是基于旧式计算机的打孔卡格式开发的[6]，这对储存格式施加了许多限制，使得现代核数据难以适应；

另一方面, ENDF-6 的格式相对过时且复杂, 对于用户的阅读和使用非常不友好, 导致学习 ENDF-6 的成本大幅增加[7]。

为了解决 ENDF-6 面临的问题, Working Party on International Nuclear Data Evaluation Cooperation (WPEC)第 38 分组(SG38)[8]于 2012 年 11 月正式成立, 以促进 ENDF-6 格式的现代化[9], 并提出了一种新的用于存储核数据的通用核数据库结构(GNDS)以取代传统的 ENDF-6 格式。GNDS 格式最早是由 Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL)提出的, 并作为其内部数据格式使用的[10]。经过多个内部版本的迭代, 并与 WPEC 合作后, Generalized Nuclear Data (GND)正式更名为 General Nuclear Database Structure (GNDS), 并于 2019 年获得 Nuclear Energy Agency (NEA)的批准。在经历了多个版本的迭代后, GNDS 第一个正式版本——GNDS1.9, 由 SG28 于 2020 年发布。目前, GNDS 第二个公开版本 2.0 规范也已于 2023 年发布[11]。在 2024 年, 在 ENDF-VIII.1 库发布的同时, GNDS 最新版本也随之公布, 其中热中子散射律子库(TSL)的 GNDS 文件被单独标记为 GNDS2.1, GNDS2.1 更新包括对存储生成 TSL 评价时使用的同位素丰度的支持。在最新的规范中, GNDS 格式的示例是以可扩展标记语言 XML 给出的。目前用于描述 GNDS-2.0 的主流语言就是 XML, 它使用按照一定规则写成的字符标签和属性来描述核数据, 同时具有较高的人类可读性与机器可读性, 并且其储存的数据是可扩展的, 能够储存 ENDF-6 无法储存的数据, 例如, GNDS 格式存储 ENDF-6 等具有背景截面的共振参数。值得注意的是, GNDS 可以使用任何元语言进行描述[12], 不仅限于 XML, 也可以使用 HDF5、JSON 等其他格式。采用“结构化、现代化、面向应用和长期可持续”的思想, 把评价核数据库变成一个完整、自描述、机器可读的核数据知识库。

在国际上, ENDF-VIII.0 数据库及其后续版本, 都提供了相应的 GNDS 格式数据; TENGL-2019 数据库及其后续版本, 提供了一部分 GNDS 格式的数据库; 在国内, 中国评价核数据库(CENDL)发布格式仍然是 ENDF-6 格式, 并未提供相应的 GNDS 格式数据库。

为了处理 GNDS 格式评价核数据库, 国际上做了大量研究, 比如: 美国劳伦斯利弗莫尔国家实验室开发了 FUDGE 程序和 GIDI+程序[13][14]、橡树岭国家实验室开发了 AMPX 程序[15]对 GNDS 进行处理, 日本原子能机构开发了 FRENDY [16], 西安交通大学开发了 NECP-Atlas 程序[17]、华北电力大学开发了 GTES 和 AXSP 程序[18]。华北电力大学之前的 GTES 程序虽然能处理快中子 GNDS 格式评价核数据库, 但无法处理热中子 GNDS 格式评价核数据库, 本文进一步完善了 GTES 程序处理热中子散射律 GNDS 格式评价核数据功能, 同时针对热中子散射截面计算过程中的新问题, 提出了创新的处理方法, 使得给后续蒙特卡罗程序使用的 ACE 热中子散射截面数据库的截面精度有了提高。

2. 计算方法

2.1. GNDS 格式数据库处理方法

基于面向对象编程语言 C#中内置的 XML 处理类方法, 在 GTES1.0 的基础上, 自主开发了热中子散射律数据的转换, 该程序分为三大模块, 分别实现搜寻(Find)、转化(Transform)、生成(Generate)功能。GTES 程序处理 GNDS 格式热散射律数据并生成热中子散射截面产生流程, 见图 1 所示。

程序首先遍历 GNDS 热散射库的标签寻找目标数据, 再用转化函数将 GNDS 数据转化成 ENDF-6 数据, 最后按照 ENDF-6 的规范重新生成评价核数据库文件, 最终实现 GNDS 向 ENDF-6 格式的转化。在 AXSP 处理 TSL 文件时, 对金属氢化物的截面改进, 使其更符合真实物理震荡行为。利用 AXSP 分别将 GTES 转化得到的 ENDF-6 格式热中子散射律数据文件与官方 ENDF-6 格式的 ENDF/B-VIII.1 热中子散射律数据文件处理成蒙特卡罗程序所需的 ACE 文件, 再对一些核素使用 OpenMC 进行临界计算, 对比的计算结果, 验证 GTES 的正确性。

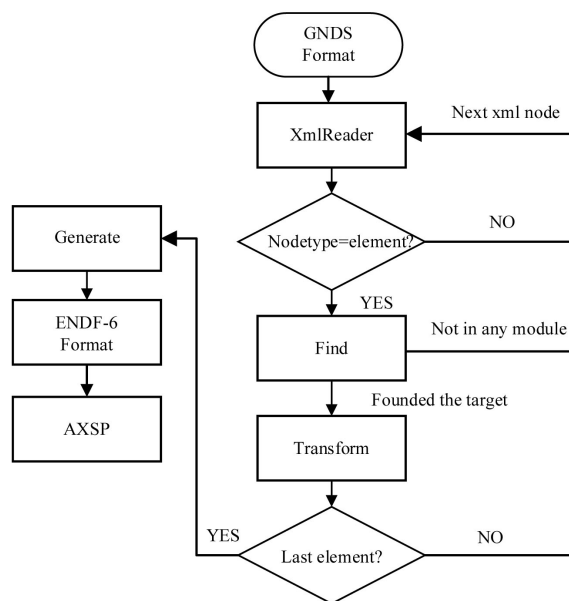


Figure 1. Processing of GNDS-format thermal scattering law data and workflow for generating thermal neutron scattering cross sections using the GTES code

图 1. GTES 程序处理 GNDS 格式热散射律数据及热中子散射截面产生流程

GTES 采用 C# 的流模型方法来处理 XML 文档。流模型(Stream-based Model)是一种高效处理大型或流式 XML 数据的方式。流模型采用逐节点读取或写入的方式,无需在内存中保留完整的文档结构,因此能显著降低内存占用。C# 提供了一个类方法 XmlReader,它实现了用于读取 XML 的流模型,并且结合 C# 中的 LINQ to XML 技术,可以高效简洁的处理 XML 文档。

GTES 处理 GNDS 评价核数据库的主体思路是将 GNDS 格式转化成 AXSP 程序能够处理的 ENDF-6 格式。在 GTES 中,主要由三个的函数实现,分别是搜寻函数、转化函数和写入函数,即 Find、Transform 和 Generate。搜寻函数是这三个函数中实现难度最大的一个,因为 GNDS 格式文件中的节点和节点参数都比较多,并且评价核数据库存储的数据量也比较大,给搜寻带来了较大困难。为了解决这个问题,本文采用了 C# 程序中专门处理 XML 文件的类,从而实现了快速搜索节点关键词和参数。搜寻函数逐节点关键词和参数搜寻示意图,见图 2 所示。

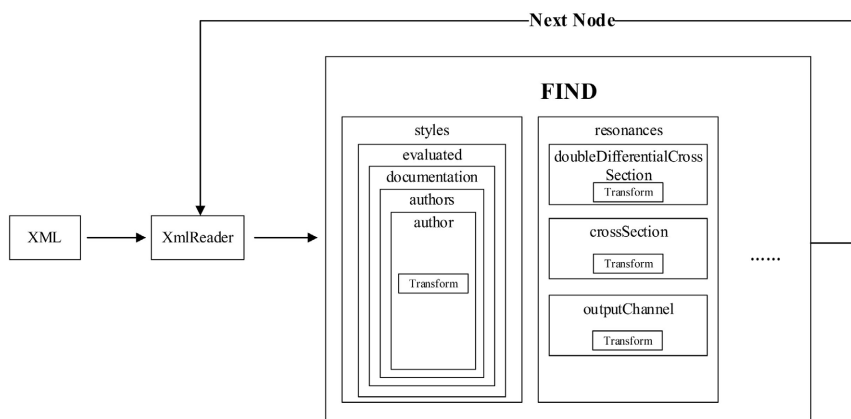


Figure 2. Schematic of the search function's node-by-node keyword and parameter search

图 2. 搜寻函数逐节点关键词和参数搜寻示意图

2.2. 相干弹性散射与非相干弹性散射合并方法

热中子散射包括相干弹性散射、非相干弹性散射、相干非弹性散射、非相干非弹性散射 4 种机制。相干弹性散射是入射波同时与原子核内所有的核子发生相互作用。由于核子之间的距离远小于入射波的波长, 每个核子对散射波的贡献相位基本相同。当这些散射波在远处叠加时, 它们会发生干涉现象。非相干弹性散射是入射粒子不是与整个原子核作用, 而是与单个核子作用。由于核子在原子核内并非静止, 而是在不断运动(费米运动), 并且核子本身具有自旋等内部自由度, 导致每次碰撞的细节都略有不同。这使得散射波的相位是随机的。当这些随机相位的波叠加时, 它们大部分相互抵消(破坏性干涉), 无特征的背景信号。非弹性散射是导致靶的激发(退激发)而损失(获取)能量, 对于非弹性散射, 相干部分包含了不同粒子和方向的散射波的相干效应。对于固体, 当慢化剂材料为强相干散射体时, 即材料的束缚核散射相干截面远大于非相干截面。例如, 金属 ^9Be 、石墨, 非弹性散射中的相干效应不能忽略, 只采用不相干近似会导致非弹数据计算结果有明显偏差, 该偏差可以通过一声子模型进行修正。

在处理热中子散射截面时, 在 ENDF/B-VIII.0 评价核数据库之前, 对于给定材料, 通常只给相干弹性散射截面或者非相干弹性散射截面。如果对于该材料弹性散射截面远大于非弹性散射截面或者弹性散射截面远小于非相干弹性散射截面, 这种近似引入的误差较小, 但如果对于弹性散射和非弹性散射截面相当的时候, 舍掉任意一种截面, 这将会导致反应堆物理计算导致较大差别。在 ENDF/B-VIII.0 评价核数据库之后, 中子热化数据库中新增一种情况, 就是可以同时给出相干弹性散射截面和非相干弹性散射截面。NJOY2016.77 程序在处理这种情况生成 ACE 数据库时, 可以把两种散射的截面和角分布都进行输出。但目前的蒙特卡罗程序中, 一般只能读取一种散射截面进行输运模拟, 因此需要把两种弹性散射反应进行合并, 就可以利用目前的蒙特卡罗程序进行精确计算。

假定 E 为入射中子能量, E' 为出射中子能量, 相干弹性散射的截面为 $\sigma_1(E)$, 归一化角分布为 $f_1(E, E', \vec{\Omega})$, 非相干弹性散射截面为 $\sigma_2(E)$, 归一化角分布为 $f_2(E, E', \vec{\Omega})$, 则合并后的总截面为

$$\sigma(E) = \sigma_1(E) + \sigma_2(E) \quad (1)$$

合并后的归一化角分布为

$$f(E, E', \vec{\Omega}) = \frac{\sigma_1(E)}{\sigma(E)} f_1(E, E', \vec{\Omega}) + \frac{\sigma_2(E)}{\sigma(E)} f_2(E, E', \vec{\Omega}) \quad (2)$$

勒让德系数转换为概率表计算公式为:

$$\int_{-1}^{\mu_i} \left[\sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} f_l P_l(\mu) \right] d\mu = \frac{i}{N} \quad (i=1, 2, 3 \dots N) \quad (3)$$

其中, f_l 为勒让德系数, μ_i 为概率表, N 为区间数。

如果 $f_1(E, E', \vec{\Omega})$ 和 $f_2(E, E', \vec{\Omega})$ 都是采用勒让德系数表示的角分布, 可以直接按照相应概率合并勒让德系数。如果 $f_1(E, E', \vec{\Omega})$ 和 $f_2(E, E', \vec{\Omega})$ 都是采用概率表的形式给出, 这首先需要统一出射能量的能量网格, 统一能量网格需选定相同的能量网格, 在使用插值法计算截面及能量角度分布, 然后再利用公式(2)对概率表进行合并。如果一个是勒让德系数, 一个是概率表, 则首先需要把其中勒让德系数化成概率表形式如公式(3), 然后再利用公式(2)进行合并。把勒让德系数转化成概率表的原因是蒙特卡罗程序使用的中子热化数据库, 通常需要概率表形式的分布。

3. 计算结果分析

3.1. 基于 GNDS 格式评价库处理及临界基准验证

为验证 GTES 处理 GNDS 格式的 ENDF/B-VIII.1 的热中子评价核数据的正确性, 首先使用 GTES 程

序把 GNDS 格式热中子散射律评价核数据库转化成 ENDF-6 格式, 分别使用 NJOY2016 程序和 AXSP 程序转化为热中子 ACE 库。同时使用美国布鲁克海文国家试验官方发布的 ENDF-6 格式的 ENDF/B-VIII.1 数据库, 分别使用 AXSP 和 NJOY2016 生成了热中子的 ACE 数据库。ACE 格式数据库是蒙特卡罗程序 (如 MCNP, RMC) 进行临界计算所采用的数据库格式。按照入射粒子的能量范围划分可分为快中子 ACE 格式和热中子 ACE 格式。临界计算采用 MCNP 程序, 模拟 1100 代, 舍掉前 100 代, 每代 10,000 个粒子, 从而保证 K_{eff} 的统计误差都在 50 pcm 以内。

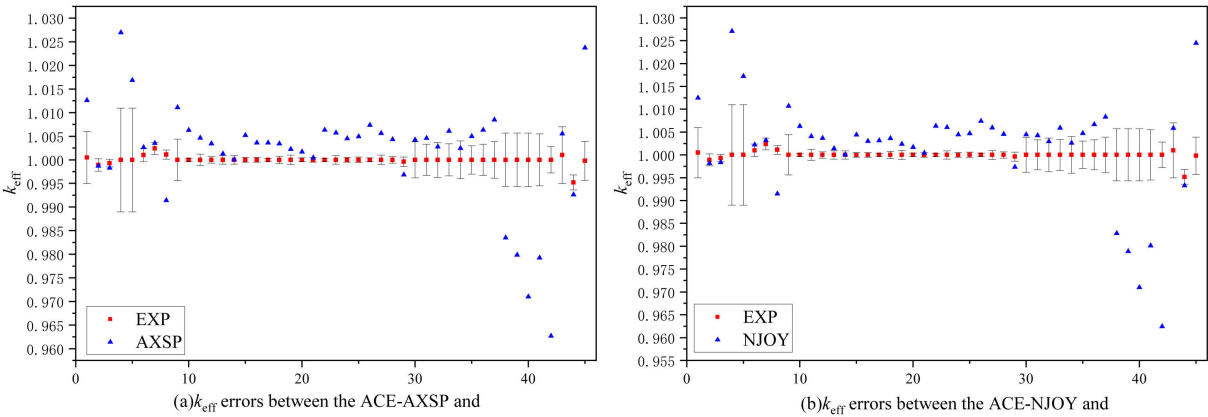
本文从 ICSBEP 手册[19]选取了 46 个基准, 涉及热化核素, 例如石墨、H in H₂O 和 Be-metal 等核素进行了临界计算。由于计算涉及的数据库种类和计算程序较多, 为了更方便的说明计算流程, 不同计算路径所对应的标识, 见表 1。基于不同标识计算的 k_{eff} 结果见图 3 所示。图 3 中横坐标编号代表是不同的临界基准题, 编号与临界基准题的对应关系, 如表 2 所示。由图 3(a)、图 3(b) 可见, 在编号 40 附近, 有几个计算结果与基准实验偏差较大, 偏差较大的原因可能与 ²³³U 的评价截面有关。基于相同的 ENDF/B-VIII.1 评价核数据库, AXSP 制作的 ACE 截面数据库与 NJOY2016 的 ACE 数据库的计算结果偏差都在 100 pcm 以内, 见图 3(c), 说明 AXSP 制作的连续点截面数据库具有较高精度。图 3(d) 给出了都采用 AXSP 处理程序, 分别采用 GNDS 格式数据库和美国发布的原始 ENDF-6 格式核数据的计算结果对比, 由图 3(d) 可见, 基于不同格式的热中子评价核数据库计算得到的有效增殖因子的偏差为零, 说明两点, 第一, GNDS 格式数据库与 ENDF-6 格式的数据库的数据参数是一样的, 美国没有针对 GNDS 格式的数据内容做进一步的改进; 第二, 说明了自主开发的 GNDS 热中子评价库转化程序计算结果是正确的。

Table 1. Computational procedure for the criticality results

表 1. 临界计算结果对应的计算流程

FIG.	Pathway 1	Pathway 2
(a)	GNDS→GTES→ENDF→AXSP→ACE	Experimental results
(b)	GNDS→GTES→ENDF→NJOY→ACE	Experimental results
(c)	GNDS→GTES→ENDF→AXSP→ACE	GNDS→GTES→ENDF→NJOY→ACE
(d)	GNDS→GTES→ENDF→AXSP→ACE	ENDF→AXSP→ACE

从图 3 来看, GTES 处理得到的热中子散射律数据与官方 ENDF-6 库匹配良好, 所有的基准题的有效增值因数的偏差均为 0 pcm。这表明了 GTES 在处理的 ENDF-6 格式的文件是完整且正确的。



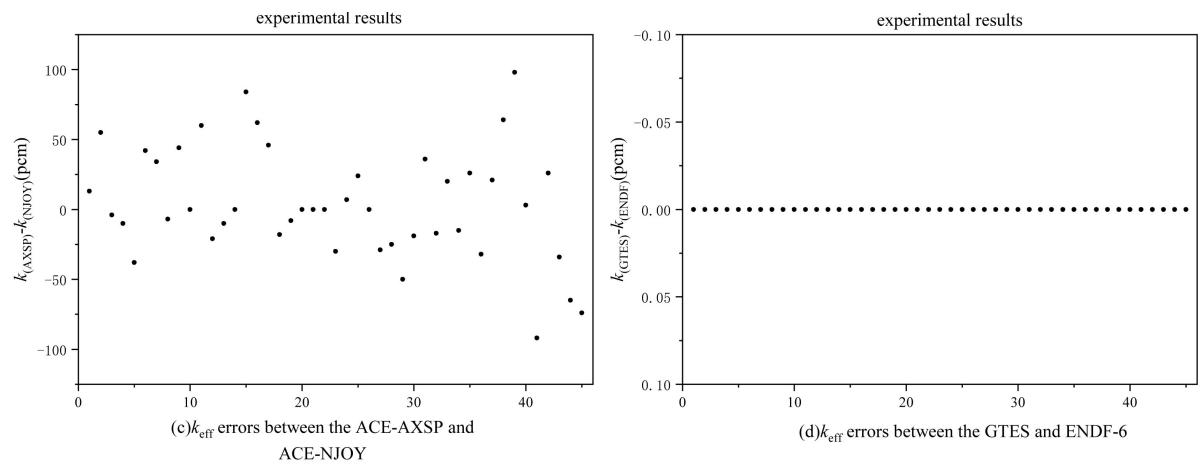


Figure 3. Comparison of calculation results from processing evaluated nuclear data libraries in GNDS format and ENDF-6 format using AXSP and NJOY2016 codes, respectively

图 3. 分别采用 AXSP 和 NJOY2016 程序处理 GNDS 格式和 ENDF-6 格式评价核数据库计算结果对比

Table 2. Correspondence table of benchmark identifiers and benchmark titles

表 2. 基准题编号与基准题的对应关系表

编号	基准题	编号	基准题	编号	基准题
1	HEU-MET-FAST-056	16	MIX-MET-FAST-007-08	31	PU-MET-FAST-037-08
2	HEU-MET-FAST-082	17	MIX-MET-FAST-007-09	32	PU-MET-FAST-037-09
3	HEU-MET-FAST-088	18	MIX-MET-FAST-007-10	33	PU-MET-FAST-037-10
4	HEU-COMP-THERM-016-05	19	MIX-MET-FAST-007-11	34	PU-MET-FAST-037-12
5	HEU-COMP-THERM-016-06	20	MIX-MET-FAST-007-12	35	PU-MET-FAST-037-13
6	HEU-MET-FAST-053-02	21	MIX-MET-FAST-007-13	36	PU-MET-FAST-037-15
7	HEU-MET-FAST-053-03	22	MIX-MET-FAST-007-14	37	PU-MET-FAST-037-16
8	HEU-MET-FAST-053-04	23	MIX-MET-FAST-007-15	38	U233-SOL-INTER-001-06
9	HEU-COMP-THERM-003	24	MIX-MET-FAST-007-16	39	U233-SOL-INTER-001-11
10	ZMIX-MET-FAST-007-02	25	MIX-MET-FAST-007-17	40	U233-SOL-INTER-001-21
11	MIX-MET-FAST-007-03	26	MIX-MET-FAST-007-18	41	U233-SOL-THERM-015
12	MIX-MET-FAST-007-04	27	MIX-MET-FAST-007-19	42	U233-SOL-MIXED-001-016
13	MIX-MET-FAST-007-05	28	MIX-MET-FAST-007-20	43	HEU-MET-THERM-001
14	MIX-MET-FAST-007-06	29	HEU-MET-FAST-042	44	HEU-MET-FAST-059
15	MIX-MET-FAST-007-07	30	PU-MET-FAST-037-07	45	HEU-MET-THERM-026-11

3.2. 相干弹性散射和非相干弹性散射合并验证

NJOY 在生成 ACE 库时可同时输出两种弹性截面，但目前的蒙特卡罗程序(如 MCNP)并不支持同时读入两种弹性散射截面。在选定核素在热能范围内同时展现出相干与非相干弹性散射效应时，需更严谨的热散射截面的处理方式。因此，本文提出了一种新的方法，将非相干弹性散射和相干弹性散射的截面以及散射角余弦合并处理输出，称为混合弹性散射。

为了验证混合弹性散射截面处理的正确性，本文假设了一个半径为 50 厘米的球体，中心有一个固定

源, 设置为 293.6 K 下的麦克斯韦分布, 球体内填充的慢化材料均是 LiH。之所以选用 LiH, 是因为该材料在快谱及混合谱反应堆中, 是改变堆芯能谱和控制反应性的重要材料, 同时其弹性散射截面相较于非弹性散射截面较大, 能更好的体现混合弹性散射截面的影响。具体方法为: 采用 AXSP 将 $\text{Hin}^7\text{LiH-mixed}$ 的 TSL 文件, 分别处理成三个热中子 ACE 库。这三个热中子 ACE 库分别为将混合弹性散射的 ACE 库、只包含非相干弹性散射的 ACE 库和只包含相干弹性散射的 ACE 库。三个 ACE 库分别使用 MCNP 进行计算, 每代中子数是 10,000 个, 运行的代数是 1100 代, 忽略前 100 代。图 4 给出了 HinLiH 的相干弹性截面和非相干弹性散射截面随入射中子能量的变化。由图 4 可知, HinLiH 的相干弹性截面远占主导, 因此使用合并处理的 ACE 库计算的中子通量密度应和仅有相干弹性截面的 ACE 库计算出来的中子通量密度更为接近。图 5 给出了 50 cm 的球模型中子通量密度随位置的变化(F4 计数, 每 10 cm 为一个栅元)。由图 5 可见, 合并处理后的截面计算的中子通量密度与仅有相干截面的中子通量密度更为接近, 如果仅采用非相干弹性散射截面, 与混合弹性散射截面计算结果相比, 最大偏差为 32.564%, 最小偏差 27.6%; 如果仅采用相干弹性散射截面, 最大偏差 17%, 最小偏差 0.96%。如果仅考虑一种弹性散射截面, 可能会造成较大偏差, 因此本文提出的混合弹性散射处理方法具有必要性。

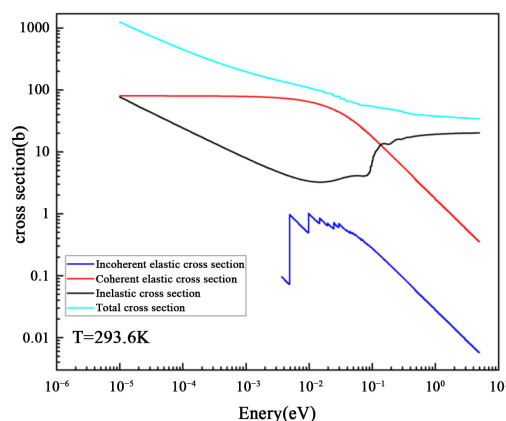


Figure 4. The variation of the coherent elastic cross section and the incoherent elastic scattering cross section of H in LiH with the incident neutron energy

图 4. H in LiH 的相干弹性截面和非相干弹性散射截面随入射中子能量的变化

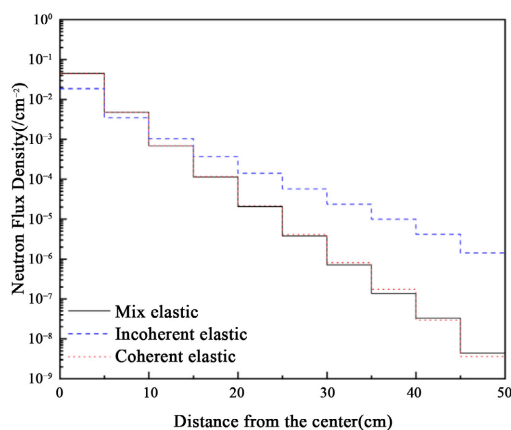


Figure 5. In a 50 cm model, the variation of neutron flux density with position is calculated using F4 tally, with each cell being 10 cm

图 5. 50 cm 的球模型中中子通量密度随位置的变化, F4 计数, 每 10 cm 为一个栅元

3.3. 基于一声子模型的热中子截面计算和自适应能量网格技术

在传统的核数据库评价中，金属 ^9Be 、石墨等材料由于束缚核散射相干截面远大于非相干截面，通常采用非相干近似的方法，即忽略非弹性散射过程中的相干部分，这部分从物理上讲，主要由材料中的声子发射和吸收决定，这其中一个声子发射和吸收起主导作用，这种考虑一个声子贡献的相干非弹性散射截面的热中子散射模型，称为一声子模型。目前在最新版本的 ENDF/B-VIII.1 评价数据库中，专门给出了考虑一声子模型的热散射律文件。本文采用 ENDF/B-VIII.1 中给出的核素 TSL 数据，分别读取石墨和一声子石墨的数据，温度为 296 K，使用 AXSP 程序中热中子散射截面计算模块 ThermalXS，计算生成了考虑一声子模型的热中子散射截面，计算结果与晶体石墨(采用非相干近似方法)的截面进行了对比，对比结果见图 6 所示。图 6 中“NJOY”表示采用 NJOY2016 程序的计算结果[20]。由图 6 可见，针对晶体石墨和一声子模型石墨，AXSP 与 NJOY 之间的计算结果都吻合较好。相比晶体石墨热散射截面结果，一声子石墨计算得到的热散射截面有了较大的改进，且与实验值更加吻合，在 0.001 eV 以下能区，精度提高约 26%。

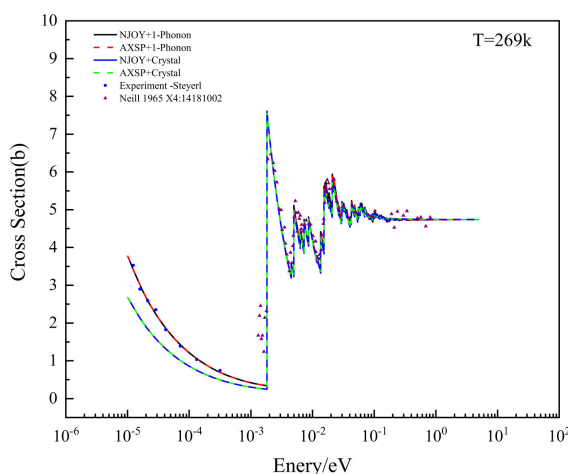


Figure 6. Comparison of graphite total cross-section data evaluated using AXSP and NJOY and their comparison with experimental data [21] [22]

图 6. 使用 AXSP 与 NJOY 评价的石墨总截面数据及其与实验数据的对比[21] [22]

针对热中子散射截面，NJOY2016 处理时采用了固定入射中子能量网格方法，即固定 118 个能量网格。这种固定能量方法针对绝大多数材料，精度较高，但对于金属氢化物，比如 ZrH、LiH 等，由于非相干非弹性散射会出现振荡现象，固定能量网格无法真实描述这种震荡情况。为此，ThermalXS 程序提出了自适应能量入射中子能量网格方法来考虑这种震荡现象，自适应入射能量网格方法的基本思想是根据热散射律数据库中能量转移网格来调整入射中子的能量网格，这样就能比较好的来表达非相干非弹性散射会出现振荡现象。具体处理方法为：根据 TSL 文件中 MF = 7，MT = 2 处给出的能量转移 β 网格，根据公式，可得到入射能量与 β 的关系式，如下所示：

$$\beta = \frac{E' - E}{kT}$$

$$E = kT\beta - E'$$

在计算时，将 E' 设置为 0，就可以得到一组 E 的数据，将这组数据与原先设置的 118 个固定能量网

格进行合并,重新排序删除重复能量点,便可以得到细化的能量网格,用新的能量网格计算 ZrH 的非相干非弹性散射并于原先网格计算的结果比较,见图 7 所示,细化后的截面值在高分区可以更好的描述振荡情况。

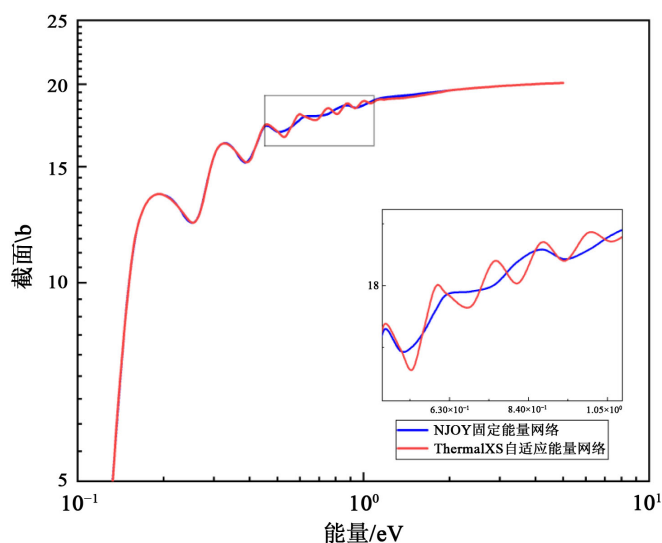


Figure 7. Comparison of calculation results between adaptive energy grid and fixed energy grid
图 7. 自适应能量网格和固定能量网格计算结果比较

对网格进行细化,确实可以直观表达振荡情况。但是由于振荡幅度依旧很小,因此最后输出的截面数值在转换成 ACE 格式后对 k_{eff} 的影响相对较小。

4. 总结

GNDS 格式评价核数据库格式,采用“结构化、现代化、面向应用和长期可持续”的思想,把评价核数据库变成一个完整、自描述、机器可读的核数据知识库,旨在解决传统评价核数据库格式(如 ENDF)的历史遗留问题,可能是未来评价核数据库的主要格式。因此,开发具备 GNDS 格式处理能力的计算程序,是推动核反应物理计算软件自主化的重要一环。本研究在 GTES1.0 [23]的基础上,开发了对于热中子散射律数据从 GNDS 格式到 ENDF-6 格式的转换。它通过三个开发的函数实现了查找、转化和生成功能,将 GNDS 格式转换成 ENDF-6 格式,并基于 AXSP 程序实现了对于 GNDS 格式核数据的处理,并且针对热中子散射截面计算过程中的问题,在散射截面合并、入射中子能量网格方面做了改进,得到主要结论有: (1) 自主开发的 GTES 程序可以正确处理热散射律数据,进而生成热中子散射截面; AXSP 处理生成的热中子连续点截面 ACE 计算结果与 NJOY2016 的 ACE 库的结果吻合较好,偏差小于 100 pcm。 (2) 提出了一种将非相干弹性散射和相干弹性散射合并新方法,经过蒙特卡罗程序验证,可提高计算精度,相较于只采用干弹性散射截面,最大偏差为 17%;相较于只采用非相干散射截面相比,最大偏差为 32.564%。 (3) 自适应入射中子能量网格可以比较好的表示金属氢化物非相干非弹性散射会出现振荡现象,提高截面精度;同时发现低能区考虑一声子模型的石墨热中子散射截面与实验值吻合更好,截面精度可提高约 26%。未来需要进一步分析采用一声子模型计算得到的石墨截面对反应堆物理计算结果的影响。

基金项目

国家自然科学基金(12575174)。

参考文献

- [1] Trkov, A. and Brown, D.A. (2018) ENDF-6 Formats Manual: Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files. <https://www.osti.gov/biblio/1425114>
- [2] Plompen, A.J.M., Cabellos, O., De Saint Jean, C., Fleming, M., Algora, A., Angelone, M., *et al.* (2020) The Joint Evaluated Fission and Fusion Nuclear Data Library, JEFF-3.3. *The European Physical Journal A*, **56**, Article No. 181. <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00141-9>
- [3] Ge, Z., Xu, R., Wu, H., Zhang, Y., Chen, G., Jin, Y., *et al.* (2020) CENDL-3.2: The New Version of Chinese General Purpose Evaluated Nuclear Data Library. *EPJ Web of Conferences*, **239**, Article ID: 09001.
- [4] Iwamoto, O., Iwamoto, N., Kunieda, S., Minato, F., Nakayama, S., Abe, Y., *et al.* (2023) Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 5: JENDL-5. *Journal of Nuclear Science and Technology*, **60**, 1-60. <https://doi.org/10.1080/00223131.2022.2141903>
- [5] Koning, A., Rochman, D., Sublet, J.-C., Dzysiuk, N., Fleming, M. and van der Marck, S. (2019) TENDL: Complete Nuclear Data Library for Innovative Nuclear Science and Technology. *Nuclear Data Sheets*, **155**, 1-55. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S009037521930002X>
- [6] Kawano, T. (2019) DeCE: The ENDF-6 Data Interface and Nuclear Data Evaluation Assist Code. *Journal of Nuclear Science and Technology*, **56**, 1029-1035. <https://doi.org/10.1080/00223131.2019.1637797>
- [7] Brown, D. (2021) Status of the Transition from the Legacy ENDF Format to GNDS. https://ncsp.llnl.gov/sites/ncsp/files/2021-05/DBrown-2-BNL_GNDS_Overview_and_Status.pdf
- [8] Brown, D., Beck, B., *et al.* (2020) Specifications for the Generalised Nuclear Database Structure (GNDS)—Version 19. Nuclear Energy Agency of the OECD (NEA), 342.
- [9] Brown, D. (2016) Detailed Requirements for a Next Generation Nuclear Data Structure. <https://www.bnl.gov/isd/documents/93323.pdf>
- [10] Mattoon, C.M., Beck, B.R., Patel, N.R., Summers, N.C., Hedstrom, G.W. and Brown, D.A. (2012) Generalized Nuclear Data: A New Structure (with Supporting Infrastructure) for Handling Nuclear Data. *Nuclear Data Sheets*, **113**, 3145-3171. <https://doi.org/10.1016/j.nds.2012.11.008>
- [11] Nuclear Energy Agency (2023) Specifications for the Generalised Nuclear Database Structure (GNDS). p. 435. https://www.oecd.org/content/dam/oecd/en/publications/reports/2023/09/specifications-for-the-generalised-nuclear-database-structure-gnds_b404751e/5f05e3db-en.pdf
- [12] Descalle, M.A., Beck, B.R., Mattoon, C.M., Jurgenson, E.D., McKinley, M.S. and Bailey, T.S. (2017) Implementation of the GNDS Format for Evaluated and Processed Nuclear Data. <https://www.osti.gov/biblio/1438785>
- [13] Beck, B.R. and Mattoon, C.M. (2014) FUDGE: A Toolkit for Nuclear Data Management and Processing. <https://www.osti.gov/biblio/1136142>
- [14] Beck, B.R. and Mattoon, C.M. (2022) LLNL's FUDGE and GIDI+ Code Packages: For Managing, Processing and Accessing GNDS 2.0 Nuclear Data Libraries. <https://indico.bnl.gov/event/15497/contributions/69508/>
- [15] Wiarda, D., Holcomb, A., Arbanas, G. and Brown, J. (2021). Status of GNDS Support in AMPX/SAMMY and Future Outlook [Slides]. *Consultancy Meeting on Model Code Output and Application Nuclear Data Form Structure (IAEA)*, Vienna, 15-17 March 2021, 6-9. <https://doi.org/10.2172/1878201>
- [16] Tada, K., Nagaya, Y., Kunieda, S., Suyama, K. and Fukahori, T. (2017) FRENDY: A New Nuclear Data Processing System Being Developed at JAEA. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:55440350>
- [17] Huang, Y., Zu, T., Cao, L. and Wu, H. (2022) Capability of Processing the GNDS Format Evaluated Nuclear Data in NECP-Atlas for Neutronics Calculations. *Progress in Nuclear Energy*, **150**, Article ID: 104293. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2022.104293>
- [18] Hu, K., Ma, X., Ma, X., Huang, Y., Zhang, C. and Chen, Y. (2022) Development and Verification of a New Nuclear Data Processing Code AXSP. *Frontiers in Energy Research*, **10**, Article ID: 1009515.
- [19] Briggs, J.B. (2002) The Activities of the International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project (ICSBEP). *Journal of Nuclear Science and Technology*, **39**, 1427-1432. <https://doi.org/10.1080/00223131.2002.10875373>
- [20] NJOY2016 (2016). <https://github.com/njoy/NJOY2016>
- [21] Steyerl, A. and Trüstedt, W.D. (1974) Experiments with a Neutron Bottle. *Zeitschrift für Physik*, **267**, 379-388. <https://doi.org/10.1007/bf01669970>
- [22] General Atomic Div. Reports, No. 6753 (1965) Integral Neutron Thermalization. J.M. Neill.
- [23] Yi, W.M., Ma, X.B. and Hu, K. (2025) GTES: A GNDS Format Nuclear Data Processing Code Interfacing AXSP. *Progress in Nuclear Energy*, **180**, Article ID: 105567. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2024.105567>