Geant4 中子高精度软件包的改进：中子弹性散射核与截面的多普勒展宽

M. Zmeˇskal[a, b, *], L. Thulliez[c], E. Dumonteil[c]

[a] *Dept. of Nuclear Reactors, Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, Czech Technical University in Prague, V Holesovickach 2, Prague, 180 00, Czech Republic*[b] *Research Centre Rez, Hlavni 130, Husinec-Rez, 250 68, Czech Republic*
[c] *Université Paris-Saclay, CEA, Institut de Recherche sur les Lois Fondamentales de l'Univers, 91191, Gif-sur-Yvette, France*

arXiv:2303.07300v1 [physics.comp-ph] 13 Mar 2023

摘要

无论是用于屏蔽应用还是安全临界研究，要以足够高的精度数值求解中子输运方程，都需要精确估算在自由气体中运动的中子于热能与超热能区的多普勒展宽弹性散射核。在 Geant4 中，低能中子采用由中子高精度（Neutron-HP）软件包处理的评价数据文件库进行输运。该代码的 11.00.p03 版尤其实现了由所谓"靶核速度抽样"（SVT）方法提供的多普勒展宽弹性散射核。然而，对于 ^{238}U 等共振重核，该方法会失效，并可能严重影响易裂变介质中玻尔兹曼方程的求解。为克服这一缺陷，Geant4 中实现了多普勒展宽拒绝修正法（DBRC），并使用参考蒙特卡罗中子输运代码 Tripoli-4® （第11版）成功完成验证。此项开发将纳入该代码的下一次发布。本文还仔细研究了在线执行的截面多普勒展宽过程，并介绍了逐次模拟改进该过程的方法。所有验证均借助自动化基准测试工具完成，该工具旨在支持 Geant4 中子高精度软件包的质量保证。目前，该工具可通过专用 GitLab 仓库获取，并将纳入 Geant4。

关键词：
Geant4、Neutron-HP、中子弹性散射核、多普勒展宽、DBRC、Tripoli-4®

1. 引言

蒙特卡罗代码常用于粒子输运应用，因为它们能够逐个追踪粒子，并最终保留粒子之间的关联。为此，Geant4开源工具包由一个国际合作组开发，旨在支持高能物理应用以及空间科学、医学物理、工程学和核物理等其他领域。[1, 2, 3]过去几十年来，Geant4 的物理模拟范围已扩展至更低能量，包括通过开发中子高精度（Neutron-HP）软件包实现低能中子输运即20兆电子伏特以下）。该软件包主要基于评价核数据文件库，能够准确描述中子-物质相互作用。尤其是近年来，随着加速器物理、医学成像和放射治疗、基础物理、核工业等应用对更广泛的多粒子输运代码所需的中子输运能力需求不断增长，Neutron-HP 软件包得到了持续改进[4, 5, 6, 7], 。Geant4 的这些最新进展使其性能接近 Tripoli-4® [8] 和 MCNP6 [9]等基准中子输运代码。

*通讯作者*Email addresses:* zmeskma1@fjfi.cvut.cz (M. Zmeˇskal), loic.thulliez@cea.fr (L. Thulliez)
Preprint submitted to Annals of Nuclear Energy

March 14, 2023

中子输运模拟高度依赖于对中子-物质相互作用的准确描述，尤其是正确处理中子所处材料的温度，因为低能中子（热中子和超热中子）会受到分子和原子热运动的影响。在中子输运过程中，通常不能忽略后者，因为它会影响截面和反应末态。实际上，系统质心系中的可用能量取决于中子与运动靶核之间的相对速度。这种效应会导致多普勒展宽过程，其表达式为：

$$\sigma_T(v_n) = \frac{1}{v_n} \int v_r \sigma_{T=0\mathrm{K}}(v_r) \mathcal{M}(\mathbf{V}_t, T) d\mathbf{V}_t \tag{1}$$

其中， σ_T温度为 T 时的多普勒展宽截面， $\mathcal{M}(\mathbf{V}_t, T)$ 为靶核速度分布，$v_r = \|\mathbf{v}_n - \mathbf{V}_t\|$ 为中子 $\mathbf{v}_n$ 与靶核 $\mathbf{V}_t$ 之间的相对速度。截面的多普勒展宽可以通过例如 SIGMA-1 算法 [10]精确完成。反应末态的定义必须与多普勒展宽后的截面值保持一致。蒙特卡罗中子输运代码通常根据中子能量 E_n，将末态定义划分为三个能区，如图 1 所示。对于 E_n>SVT 最大能量，当 SVT 最大能量为$=400k_BT$ (∼10.5 电子伏特，温度为300开尔文)且 k_B 为玻尔兹曼常数时，靶核被视为静止，因此采用所谓的 0 K 渐近弹性散射核。对于 E_n< SVT 最大能量，假设靶核表现为自由气体，即彼此自由运动，并由麦克斯韦速度分布描述；对于许多靶材（尤其是金属）而言，这是一种有效近似。因此，在下文中， $\mathcal{M}(\mathbf{V}_t, T)$ 设为麦克斯韦-玻尔兹曼分布。随后，假设相对速度范围内的截面为常数，根据公式 1 推导末态，这便是所谓的“靶核速度抽样”（SVT）方法。此外，如果分子键和原子键的影响显著，即对于 E_n<S(α,β) SVT 最大能量（Geant4 中 S(α,β) SVT 最大能量为$=4$ 电子伏特），自由气体模型便不再适用，必须使用能够反映中子-分子或中子-原子相互作用复杂底层物理过程的 S(α,β) 表，以计算截面和散射核。这些表适用于核反应堆物理中使用的大多数材料，例如轻水或二氧化铀，因为它们会对模拟预测结果产生显著影响。

用于计算 E_n<SVT 最大能量下末态的 SVT 假设并不适用于共振重核，因为这类核素的截面会在很窄的能量范围内迅速变化数个数量级。为克服这一缺陷，在第2节介绍本文所用工具之后，第3节将介绍多普勒展宽拒绝校正（DBRC）算法在 Geant4 中的实现与验证。随后，第4节将深入研究 Geant4 中的在线截面多普勒展宽过程，并提出改进建议。

2. 基准方法和工具

本文的开发工作基于 Geant4 11.00.p03版完成。结果与基准中子输运代码 Tripoli-4® （第11版）和 MCNP6（第6.2版）进行比较。Tripoli-4® 自20世纪90年代中期起由法国原子能和替代能源委员会（CEA）CEA-Saclay（法国）开发，并被法国主要核能公司 [8]用作基准代码。MCNP6由洛斯阿拉莫斯国家实验室（美国）开发，在全球范围内被用作涉及中子的许多应用的基准中子输运代码。这两种代码均用于临界安全系统研究、燃耗计算和屏蔽应用。它们拥有一个规模庞大的验证与确认数据库，其中收录了1000多个实验基准，并定期通过代码间比较进行验证和鉴定 [11]。

本研究通过 Geant4 中的 G4NDL4.5 库使用评价核数据库 ENDF/B-VII.1 [12] 。

下文中，采用称为薄圆柱基准测试 [4, 7] 的微分微观基准，对 Geant4 中进行的开发进行了验证。其几何形状为半径为r=1 μm、长度为 L=2 m 的薄圆柱。平均自由程为 λ_n的单能中子沿圆柱轴射入。圆柱尺寸经过选择，以确保至少发生一次碰撞（$\lambda_n << L$），并确保

中子在圆柱体内只发生一次碰撞（$r << \lambda_n$）。碰撞后会统计中子的特征，例如能量、角度等。需要指出的是，这项薄圆柱基准测试属于一套更广泛的自动化基准测试，其中还包括一项称为球体基准的积分宏观基准：在该基准中，会统计一个半径为 30 cm 的球体内的中子通量，球心处设有单能各向同性源 [7]。这些自动化基准测试旨在测试和评估 Geant4 新版本中 Neutron-HP 软件包的质量。在此框架下，完成 Geant4 模拟后，该工具会将 Geant4 的结果与汇总在数据库中的 Tripoli-4® or MCNP6 结果进行比较，并检验结果的统计显著性，以提示潜在问题。最后，工具会输出一份总结结果的报告。此代码已通过以下 GitLab 仓库向社区开放 [13] and，并将纳入 Geant4。

本研究将薄圆柱体的材料设为 ^{238}U，因为其截面中存在低能共振。初级中子的能量选在前三个共振能量以下，即 6.52 电子伏特、20.2 电子伏特和 36.25 电子伏特。研究了温度效应对弹性散射核的影响，所用 ^{238}U 材料的温度设为 300 开尔文、 600 开尔文和 1000 开尔文。对于每种温度 - 能量组合，模拟了 10^8 个中子。

3. 多普勒展宽中子弹性散射核

3.1. 重核 *SVT* 算法研究

热运动对末态定义的影响主要对弹性散射很重要，因为这是一种非阈值、非吸收反应。因此，许多中子输运代码中，SVT 算法仅应用于弹性散射；而在 Geant4 中，该算法应用于所有反应道（弹性散射、俘获等）。下文仅考虑弹性散射反应。

靶核的热运动会改变出射中子的能量和散射角概率。为将其纳入考虑，靶核速度$\mathbf{V}_t$ 的采样必须以一种能够保持公式 1 [14]所给反应率的方式进行。该采样可以转化为对数对 (μ, V_t) 的选择，其中 μ 是中子速度与靶核速度之间夹角的余弦。将 $\mathcal{M}(\mathbf{V}_t, T)$ 的精确形式代入公式 1，并对其进行方位角积分，可得以下联合概率分布：

$$p(V_t, \mu) dV_t d\mu = \frac{v_r \sigma_0(v_r) \frac{\beta^3}{\pi^{\frac{3}{2}}} V_t^2 e^{-\beta^2 V_t^2} 2\pi}{v_n \sigma_T(v_n)} dV_t d\mu \tag{2}$$

其中 $\beta = \sqrt{\frac{M}{2k_B T}}$ 和 M 为靶核质量。在该分布中，μ 和 V_t 彼此相关，不能独立采样。假设 $\sigma_0(v_r)$ $\sigma_T(v_n)$ 在相对速度范围 v_r内为常数，即可得到 SVT 联合概率分布：

$$p_{\mathrm{SVT}}(V_t, \mu) dV_t d\mu = C \underbrace{\frac{d\mu}{2}}_{(A)} \underbrace{(v_n + V_t) \frac{4\beta^3}{\sqrt{\pi}} V_t^2 e^{-\beta^2 V_t^2} dV_t}_{(B)} \underbrace{\left(\frac{v_r}{v_n + V_t} \right)}_{(C)} \tag{3}$$

在 SVT 算法中，首先在 $[-1, 1]$之间均匀采样 μ。然后，从 (B) 中采样 V_t 时，以概率 $P_1 = \frac{v_n}{v_n + \frac{2}{\sqrt{\pi}\beta}}$ 从 $\frac{4\beta^3}{\sqrt{\pi}} V_t^2 e^{-\beta^2 V_t^2} dV_t$ 中采样 V_t，再以概率 $P_2 = 1 - P_1$ 从 $2\beta^4 V_t^3 e^{-\beta^2 V_t^2} dV_t$ 中采样。最后，以 (C) 给出的概率接受数对 (μ, V_t)，其中 $v_r = \sqrt{v_n^2 + V_t^2 - 2 v_n V_t \mu}$。

Geant4 中的 SVT 方法近期经过修订，并已成功通过与 Tripoli-4® [7] 的基准测试 .
本研究再次进行了基准测试，重点关注共振重核，此处为 ^{238}U，以验证作为 DBRC 方法构建模块的 SVT 算法。SVT 最大能量的默认值已从 $400 k_B T$ （300开尔文时为 ∼10.5 电子伏特）提高至 50 电子伏特，以便对 ^{238}U 的前三个共振使用 SVT 算法。图 2、3 和 4 的左栏显示，次级中子的能量

使用 Geant4 计算的结果与 Tripoli-4® 在统计不确定性范围内吻合良好。对于 MCNP6 使用 SVT 算法的能量—温度组合，计算结果总体上也与 MCNP6 吻合良好。事实上，本研究无法更改 MCNP6 中 SVT 最大能量的默认能量阈值 $=400k_BT$ 。这些比较确保 SVT 方法在 Geant4 中得到了良好实现，并再次验证了当前研究的、适用于共振重核的 DBRC 算法构建模块。

3.2. 共振重核的 *DBRC* 方法

对于轻核和中核，由于其截面在低能区通常保持恒定，因此采用恒定截面假设的 SVT 方法是有效的。过去，人们认为该假设有效，是因为当时认为重核不会显著参与中子慢化过程。然而，研究 [15, 16, 17] 表明，不应忽视共振重核中的低能共振效应，尤其是在屏蔽和核反应堆应用中。事实上，例如，Becker 等人 [15]证明，对于基于压水堆组件的相同燃料棒元件无限阵列，使用 DBRC 精确处理 ^{238}U 共振的弹性散射核，而非采用 SVT 假设，可使 k_{eff} 值变化高达 350 pcm，多普勒系数变化 16%。此外，这也会影响根据实验数据提取共振参数，例如文献 [18]所示。

为克服 SVT 近似的不足，Rothenstein 和 Dagan [19, 20]在 20 世纪 90 年代中期，通过将 S(α, β) 表扩展至更高能量，成功开发了适用于超热区共振核的散射核。如今所讨论的 DBRC 算法最初由 Rothenstein [21]提出，近期又由 Becker 等人 [15]重新推广。为了在 SVT 算法（公式 3）的基础上，从公式 2 中精确抽样（μ, V_t）对，还需增加另一个拒绝循环／判据（D），以获得精确的多普勒展宽弹性散射核 [22]:

$$p_{\text{DBRC}}(V_t, \mu) = C' p_{\text{SVT}}(V_t, \mu) \underbrace{\left(\frac{\sigma_0(v_r)}{\sigma_0^{\max}(v_\xi)} \right)}_{(D)} \tag{4}$$

其中 C' 是归一化常数， $\sigma_0^{\max}(v_\xi)$ 是范围 $v_n \pm 4\sqrt{\frac{2k_{\text{B}}T}{M}}$ 内的最大 0 K截面。此范围的选取与 SIGMA-1 算法的积分限保持一致，该算法用于精确的多普勒展宽过程 [10]。从拒绝项（D）可以看出，共振附近的接受概率可能很低。因此，这个附加项提高了选取某一速度V_t 的概率，使中子以共振能量发生散射。由于接受概率较低，这会导致计算时间增加。

DBRC 方法已在现有 SVT 算法的基础上实现于 G4ParticleHPElasticFS::GetBiasedThermalNucleus 中，与先前的工作一致 [15, 23, 24, 25]。为了在 Geant4 中使用和修改 DBRC 算法的行为，用户可以使用五条新命令来调整其行为，如图 1 所示:

- /process/had/particle_hp/use_DBRC 用于启用（true）/禁用（false）DBRC 算法。
  默认情况下该算法处于禁用状态。
- /process/had/particle_hp/DBRC_A_min 用于设置应用 DBRC 算法的最小原子质量（以中子质量为单位）。默认值为 200 原子质量单位。
- /process/had/particle_hp/SVT_E_max 用于设置使用 SVT 算法的最高能量。默认值为 $400k_{\text{B}}T$。高于用户定义值时，使用 0 开尔文下的散射核。
- /process/had/particle_hp/DBRC_E_min(max) 用于设置应用 DBRC 算法的最低（最高）能量。默认

E DBRC min 的值设为 0。1 电子伏特，低于该值时使用 SVT 算法。该值应对应于所考虑的同位素不存在核共振的能量。E DBRC max 的默认值设为 210 电子伏特。这些值根据 [23, 24] 设定。

由于当前版本的 MCNP6 尚未实现 DBRC 方法，因此 Geant4 的 DBRC 结果仅与 Tripoli-4®进行比较。Zoia 等人 [24] 已对后者进行了验证，全面检验了其实现，并将其与其他计算多普勒展宽弹性散射核的方法进行了比较，例如使用扩展至更高能量的 S(α,β) 表 [26]，权重校正方法（WCM） [27],或直接计算 [29]中的 [28]积分。

薄圆柱基准测试采用了与 SVT 基准测试相同的条件。图 2、3 和 4 右侧各列所示的 DBRC 结果表明，Geant4 与 Tripoli-4® 的结果非常吻合，差异在统计不确定性范围内。可以看出，与 SVT 方法所得结果相比，次级中子能量分布发生了显著变化。表 1 列出了散射中子平均能量，显示采用 SVT 方法时，不同温度下的平均能量保持不变；而采用 DBRC 方法时，平均能量随温度升高而增加。Geant4 与 Tripoli-4® 的结果相互吻合良好，因为 SVT 和 DBRC 方法的相对误差均约为 10^{-3} %。平均中子能量的增加与上散射概率的增加相符（即散射后能量高于初始中子能量的中子所占比例），如表 2 所示。同样，Geant4 与 Tripoli-4® 的结果吻合良好，相对差异小于 1%。所有这些结果都验证了 Geant4 中 DBRC 算法的实现。

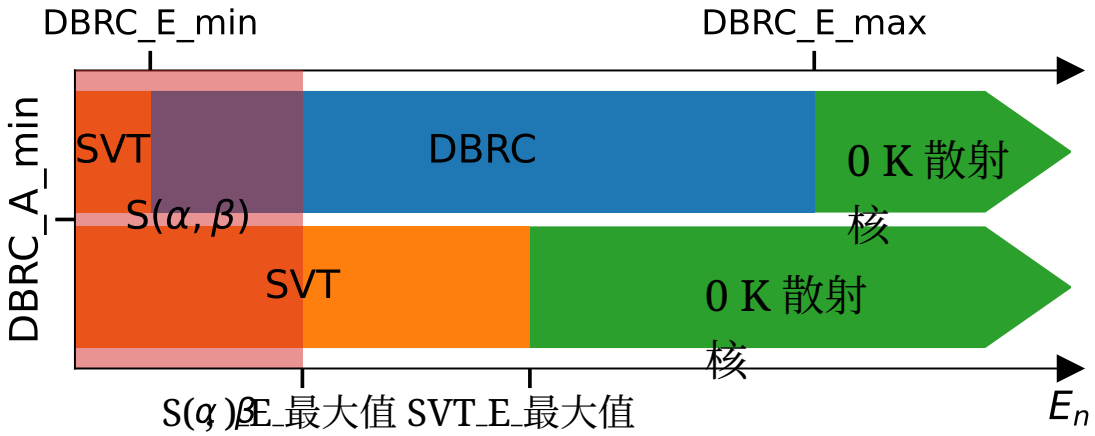
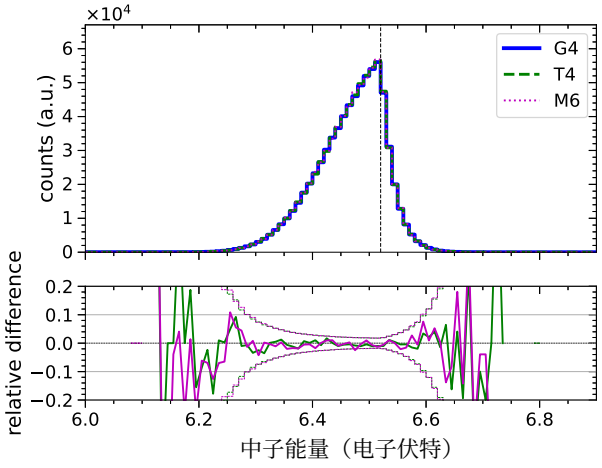
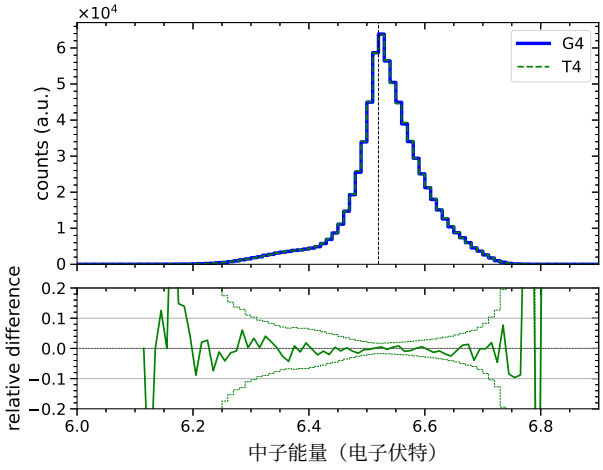


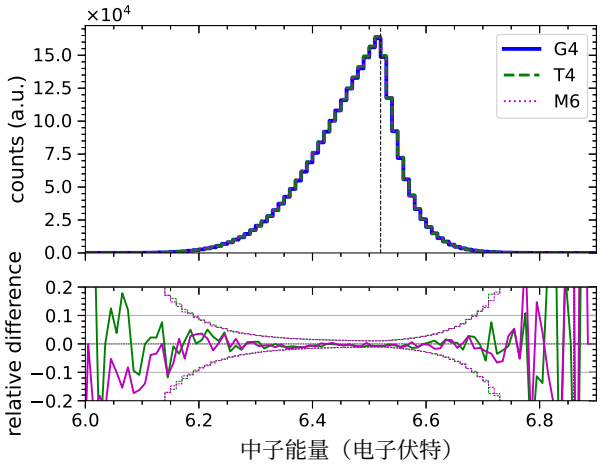
图 1：多普勒展宽弹性散射末态模型随中子能量 E_n 的变化。下方箭头：已关闭 DBRC 选项。上方箭头：已启用多普勒展宽拒绝加权选项。**SVT** 表示靶核速度抽样，**DBRC** 表示多普勒展宽拒绝校正，**S(α, β)**表示用于描述中子-分子或中子-原子相互作用复杂底层物理的表格，而**0 K 散射核** 表示假设靶核速度为零时的弹性散射。Geant4 中的默认阈值为：S(α, β) 最大能量=4 电子伏特，SVT 最大能量=$400k_BT$，DBRC 最小能量=0.1 电子伏特，DBRC 最大能量=210 电子伏特，以及 DBRC 最小质量数=200 原子质量单位。



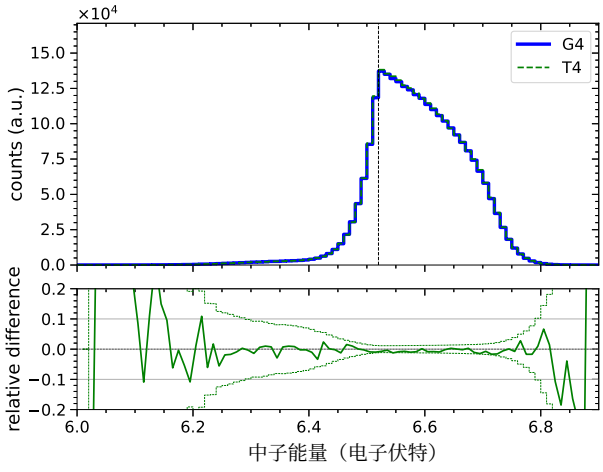
(a) 6.52 电子伏特 - 300开尔文 - SVT



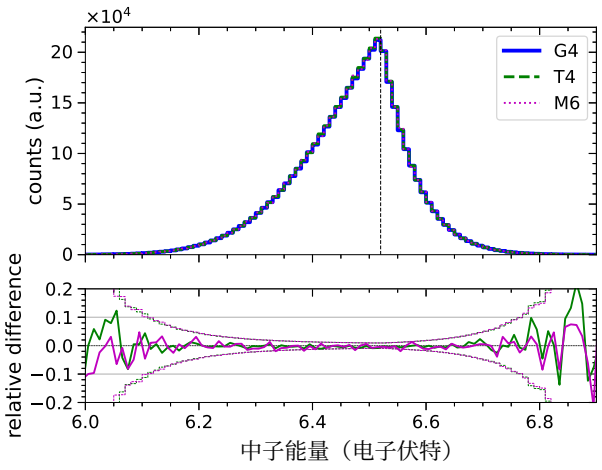
(b) 6.52 电子伏特 - 300开尔文 - DBRC



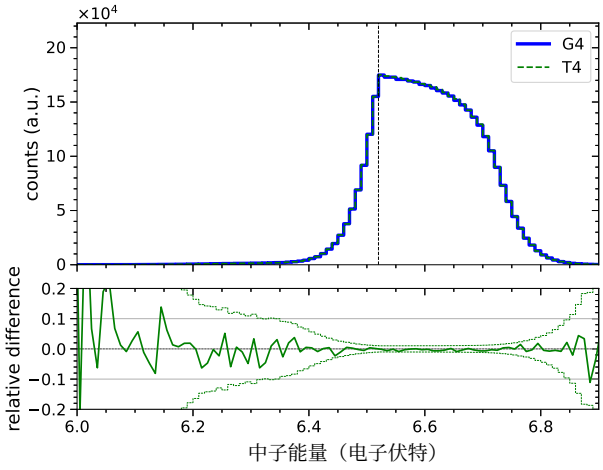
(c) 6.52 电子伏特 - 600 开尔文 - SVT



(d) 6.52 电子伏特 - 600 开尔文 - DBRC

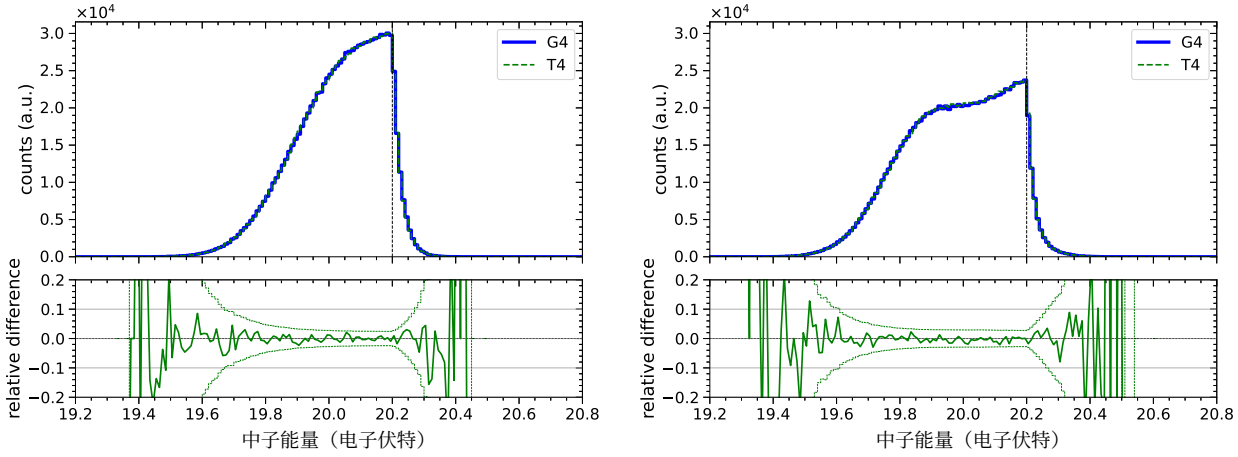


(e) 6.52 电子伏特 - 1000 开尔文 - SVT



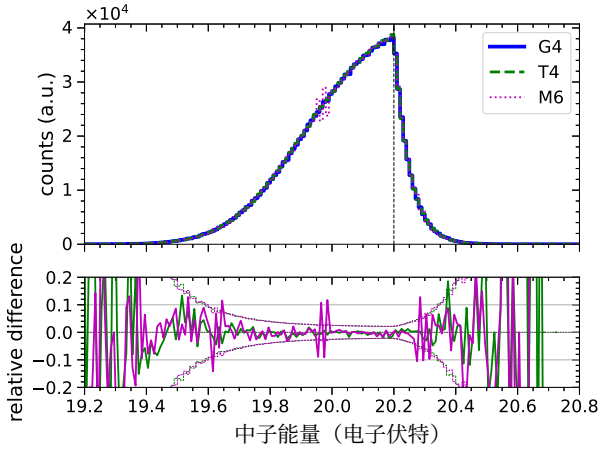
(f) 6.52 电子伏特 - 1000 开尔文 - DBRC

图 2：使用 Geant4 和 Tripoli-4®计算的不同温度下 6.52 电子伏特中子入射 ^{238}U 时，采用 SVT（左列）和 DBRC（右列）得到的散射中子出射中子能量分布。下半部分展示相对差异 G4/T4-1（绿色实线）和 G4/M6-1（洋红色实线），以及该差异标准统计误差的三倍（虚线）。MCNP6 在 300开尔文和 1000开尔文下的结果已归一化至 Tripoli-4® 的结果，因为 300开尔文和 1000开尔文下的多普勒展宽截面实际上分别取自 293.6开尔文和 900开尔文（预处理截面）。6

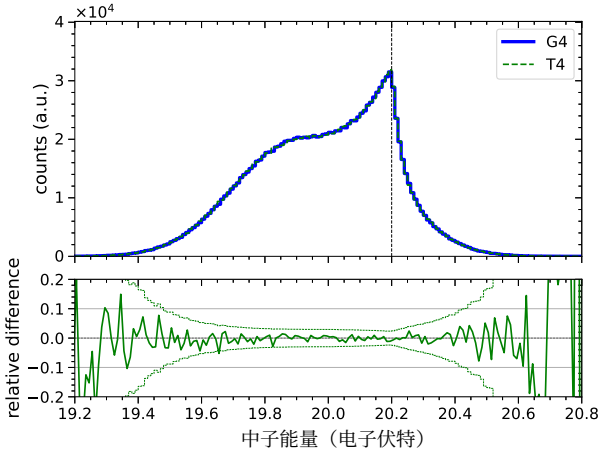


(a) 20.2 电子伏特 - 300开尔文 - SVT

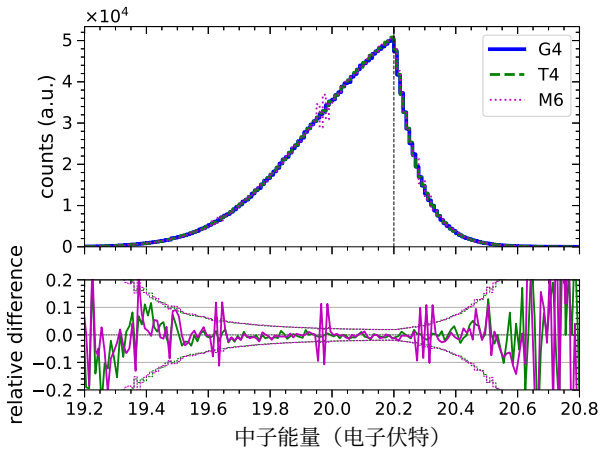
(b) 20.2 电子伏特 - 300开尔文 - DBRC



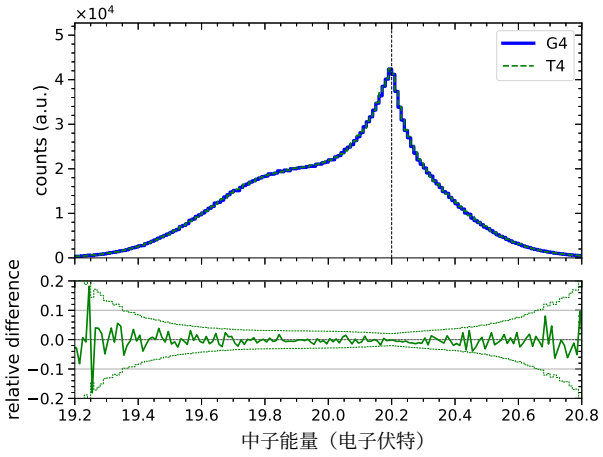
(c) 20.2 电子伏特 - 600 开尔文 - SVT



(d) 20.2 电子伏特 - 600 开尔文 - DBRC

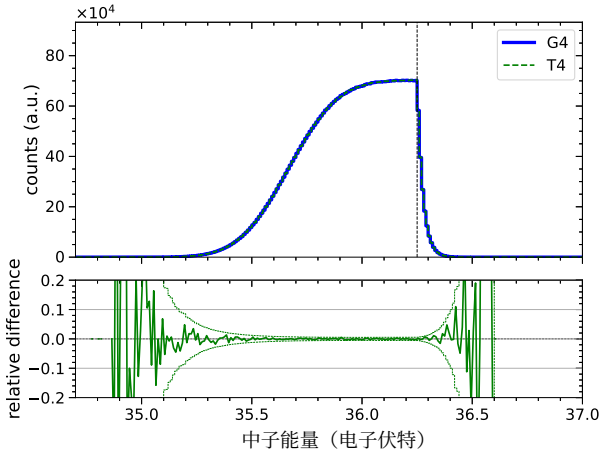


(e) 20.2 电子伏特 - 1000 开尔文 - SVT

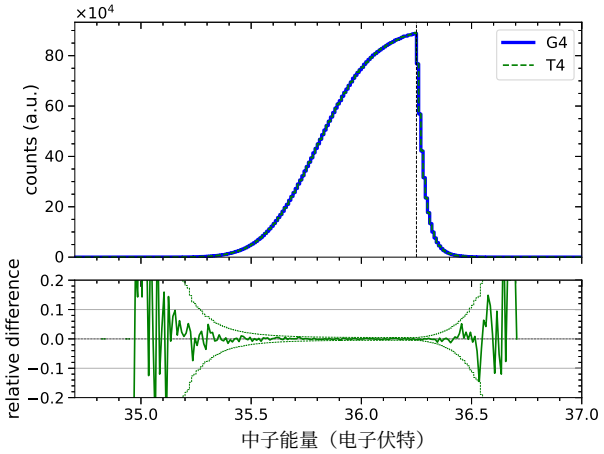


(f) 20.2 电子伏特 - 1000 开尔文 - DBRC

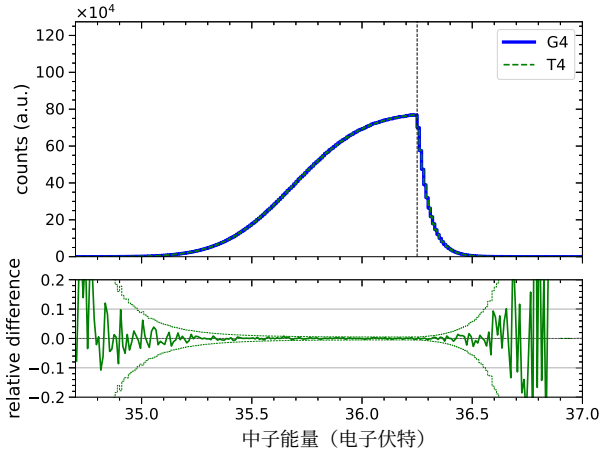
图3：使用 Geant4 和 Tripoli-4® 计算的不同温度下，20.2 电子伏特中子在 ^{238}U 上的散射中子的出射中子能量分布：左列为 SVT，右列为 DBRC。底部显示相对差异 G4/T4-1（绿色实线）和 G4/M6-1（洋红色实线），以及该差异的三倍标准统计误差（虚线）。300开尔文和 1000 K 下的 MCNP6 结果已归一化至 Tripoli-4® ones，因为 300开尔文和 1000 K 下的多普勒展宽截面实际上分别取自 293.6 K 和 900 K（预处理截面）。



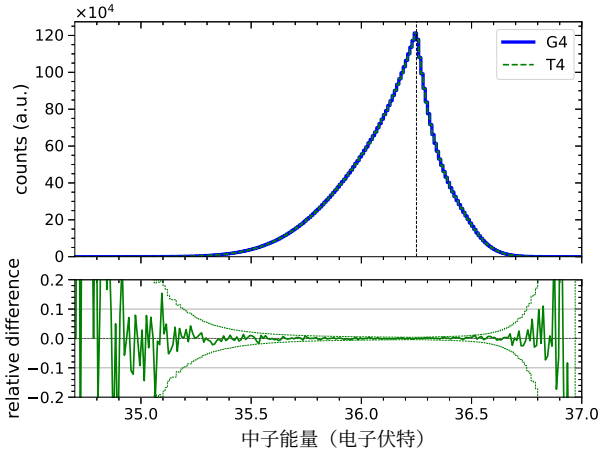
(a) 36.25 电子伏特 - 300开尔文 - SVT



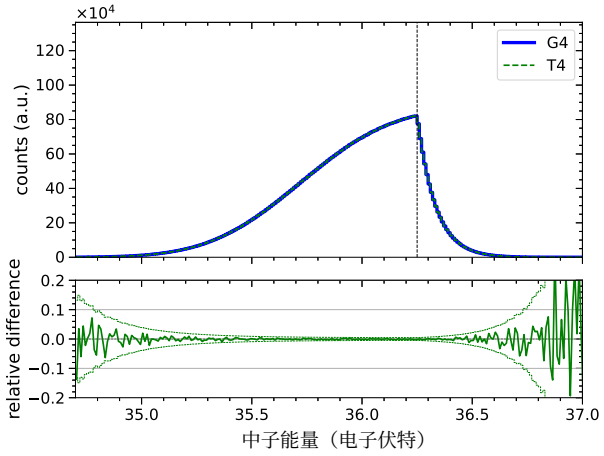
(b) 36.25 电子伏特 - 300开尔文 - DBRC



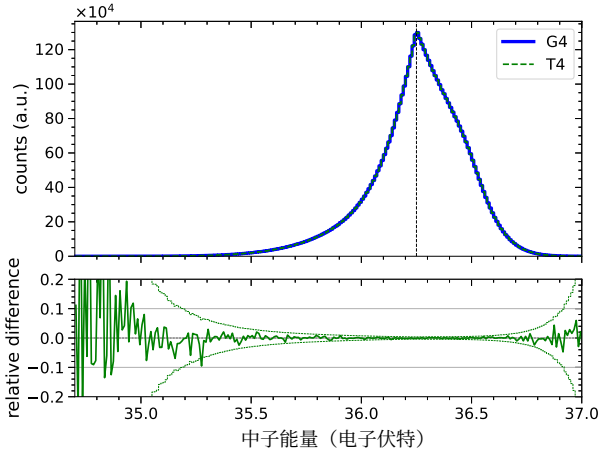
(c) 36.25 电子伏特 - 600 开尔文 - SVT



(d) 36.25 电子伏特 - 600 开尔文 - DBRC



(e) 36.25 电子伏特 - 1000 开尔文 - SVT



(f) 36.25 电子伏特 - 1000 开尔文 - DBRC

图4：使用 Geant4 和 Tripoli-4® 计算的不同温度下，36.25 电子伏特中子入射 ^{238}U 时，采用 SVT（左列）和 DBRC（右列）计算得到的散射中子出射中子能量分布。底部显示相对差异 G4/T4-1（绿色实线）以及该差异标准统计误差的三倍（虚线）。

表 1：使用 SVT 和 DBRC 方法，通过 Geant4 和 Tripoli-4® 计算得到的 ^{238}U 在不同初级能量和温度下散射中子的平均能量（电子伏特）。两种代码之间的相对差异（相对差异）为 10^{-3} %。

E	T	Geant4		Tripoli-4®		相对差异	
(eV)	(K)	SVT	DBRC	SVT	DBRC	SVT	DBRC
6.52	300	6.466	6.534	6.466	6.534	-0.85	-1.21
	600	6.466	6.589	6.466	6.589	-0.47	-0.62
	1000	6.467	6.605	6.467	6.605	-0.20	0.08
20.2	300	20.031	19.979	20.031	19.979	0.57	-0.69
	600	20.031	19.987	20.031	19.987	-0.22	1.40
	1000	20.032	20.043	20.032	20.044	0.75	-1.96
36.25	300	35.946	36.008	35.946	36.008	-0.02	-0.17
	600	35.946	36.128	35.946	36.128	-0.07	0.28
	1000	35.947	36.256	35.947	36.256	-0.08	0.02

表 2：使用 SVT 和 DBRC 方法，通过 Geant4 和 Tripoli-4® 计算得到的 ^{238}U 在不同初级能量和温度下的上散射概率（%）。两种代码之间的相对差异（相对差异）为 %。

E	T	Geant4		Tripoli-4®		相对差异	
(eV)	(K)	SVT	DBRC	SVT	DBRC	SVT	DBRC
6.52	300	18.124	62.294	18.073	62.250	0.28	0.07
	600	25.452	82.798	25.437	82.832	0.06	-0.04
	1000	30.407	84.325	30.365	84.354	0.14	-0.03
20.2	300	7.499	5.692	7.470	5.681	0.38	0.20
	600	13.502	15.456	13.413	15.434	0.67	0.14
	1000	18.848	30.725	18.789	30.791	0.31	-0.21
36.25	300	4.242	7.135	4.236	7.143	0.15	-0.10
	600	8.264	30.658	8.265	30.629	-0.01	0.10
	1000	12.712	55.275	12.713	55.264	-0.01	0.02

4. Geant4 中的在线截面多普勒展宽

在蒙特卡罗中子输运代码中，主要有两种方法可以对截面进行多普勒展宽。第一种方法是在模拟开始前精确执行多普勒展宽（由公式 1 给出），例如使用 NJOY 等预处理工具中实现的 SIGMA-1 算法 [30]。因此，模拟过程中无需为此额外花费计算时间。这种方法的缺点是可用于模拟的温度有限，而且需要较大的计算机内存来存储这些数据。它主要用于 Tripoli-4® 和 MCNP6 等基准中子输运代码。第二种方法的计算耗时更多，因为多普勒展宽是在模拟过程中进行的，即在线（OTF）处理，但可以采用用户所需的任意温度。Geant4 选择了后一种方法，因为它具有灵活性，能够满足来自不同物理领域用户的各种需求。

比较 Geant4 和 Tripoli-4® 的薄圆柱基准测试结果后发现，Geant4 的总反应率与 Tripoli-4® 不同，而相对值（例如上散射概率）在两个代码之间吻合良好。这一差异源于 Geant4 中实现的随机在线多普勒展宽方法。例如，其在弹性散射的 G4ParticleHPElasticData::GetCrossSection 方法中的实现可概括如下：

清单 1：Geant4 中实现的截面多普勒展宽在线随机积分伪代码。

$///Initialization$
$size =$ max(10, $T/60$)
$///On-the-fly \quad stochastic \quad integral \quad computation$while (
$\left|\sigma_T^{\text{old}}(v_n) \; - \overline{\sigma_T^{\text{new}}(v_n)}\right| \overline{> \epsilon_{\text{xs}} \cdot \sigma_T^{\text{old}}(v_n))} \{\overline{\sigma_T^{\text{old}}(v_n)} = \sigma_T^{\text{new}}(v_n)$ while (
$\overline{counter < size)} \overline{\{$从麦克斯韦–玻尔兹曼分布中采样 $\mathrm{V_t}$ 获取 $\quad \sigma(v_r)\sigma_T^{\text{new}}(v_n)}$
$+= \sigma(v_r) \cdot$ |Vt− | vn$counter + +\}\sigma_T^{\text{new}}(v_n) =$ $^{\sigma}$new$_T$ (v_n) $counter$
$size += size\}^{v_n}$return $\sigma_T^{\text{new}}(v_n)$

其中，$counter$ 为算法执行的循环总数，$size$ 为每批次的循环数。在每一步中，都会计算多普勒展宽后的截面，并与其前一个值进行比较。当满足收敛判据 ϵ_{xs} 时，算法停止。

默认情况下，俘获和弹性反应的 ϵ_{xs} 分别设为 0.03 和 0.01，裂变和非弹性反应也采用这两个值。然而，正如 [31] 中指出的，以及图5a和图5b所示，这些判据并不能保证截面充分收敛。因此，我们使用薄圆柱基准测试，在 300开尔文下针对 6.52 eV中子研究了 ϵ_{xs} 对俘获和弹性散射的影响。由于分布并非对称分布（如图6a和图6b所示），我们关注的量包括平均截面、其标准差及其最概然值（MPV）。为针对每个收敛判据获得具有统计显著性的结果，Geant4 OTF算法执行了 8000 次。我们将结果与 Tripoli-4® 截面进行比较；这些截面使用 NJOY 通过 SIGMA-1 算法精确计算得出。

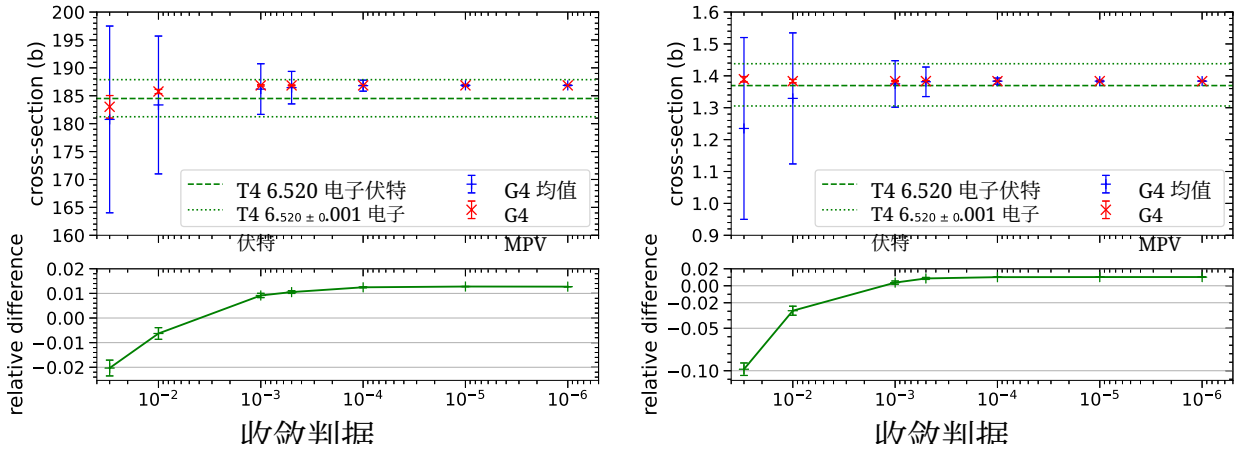
图5a和图5b展示了平均截面和最概然值截面，表明当 ϵ_{xs} 减小时，平均截面会收敛；对于所有收敛判据值，最概然值始终大致相同，且等于收敛后的平均截面值。采用默认值 ϵ_{xs}=0.03 时，俘获和弹性平均截面分别比 Tripoli-4® 的结果低约 2% 和 10%。对于

ϵ_{xs} <0.001，弹性和俘获平均截面收敛到比 Tripoli-4®的结果高 1% 的值，如图5a和图5b所示。这 1% 的差异可能由插值误差导致，因为 Geant4 的结果与 Tripoli-4® 在 6.520电子伏特 $\pm$ 1 毫电子伏特处的截面一致。因此不再进一步探究这一差异。

图7还量化了截面标准差随 ϵ_{xs} 的变化：当 $\epsilon_{\mathrm{xs}} = 0.03$ 时，弹性截面的标准差从23%（俘获为9%）下降；当收敛判据为 $\epsilon_{\mathrm{xs}} = 10^{-4}$时，两种截面的标准差均低于1%。根据这些结果，人们可能会考虑将默认的 ϵ_{xs} 值调低；然而，较低的收敛判据会导致循环次数增加，从而延长计算时间。事实上，计算时间会随ϵ_{xs} 急剧上升，之后从 $\epsilon_{\mathrm{xs}} = 10^{-4}$开始增幅放缓。未来值得评估该OTF算法与其他算法的性能，例如回归法 [32, 33], 、截面的多极表示 [34] ，或在碰撞位置显式处理靶核运动的方法 [35]。

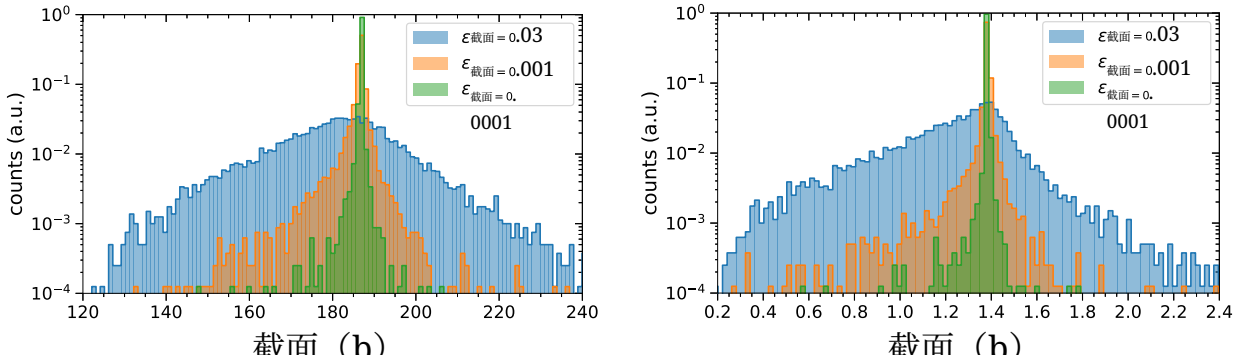
需要指出的是，第3节所呈现的所有结果均采用收敛判据 $\epsilon_{\mathrm{xs}} = 10^{-4}$ 进行计算；这是在截面精度与计算时间之间的折衷。遗憾的是，这只能用于基准测试，因为每次调用 OTF 多普勒展宽算法所需的计算时间高得令人难以接受。不过，对于积分研究而言，这个问题并不那么重要，因为多普勒展宽会执行多次（对应不同能量），因此平均而言能够得到正确结果。

最后还需指出，这种行为是由于考察的是截面的共振部分所致。事实上，对于非共振截面，例如 ^{1}H，图8显示，在所有收敛判据下，截面平均值和最概然值都大致相同，并且与 Tripoli-4® 截面一致。俘获截面仍高出约 1%，这可能是由插值误差导致的，因为弹性散射的 0 K截面在 6.52 电子伏特处几乎保持恒定，而俘获截面则显著下降。正如图9和图10所示，采用默认收敛准则时，弹性散射的标准差低于 1%，俘获的标准差低于 0.2%。



（a）辐射俘获　　（b）弹性散射

图5：^{238}U 在 6.52 电子伏特和 300开尔文下的截面均值和最概然值（MPV）及其标准差，随收敛判据 ϵ_{xs} 变化的关系；该判据是在 Geant4（G4）中计算的。Tripoli-4® （T4）中使用的截面以绿色虚线表示。底部显示了 G4/T4-1 的截面相对差及其均值的统计误差。



(a) 辐射俘获　　(b) 弹性散射

图6：归一化多普勒　　展宽的 ^{238}U截面分布，适用于不同的　　收敛准则 ϵ_{xs}。

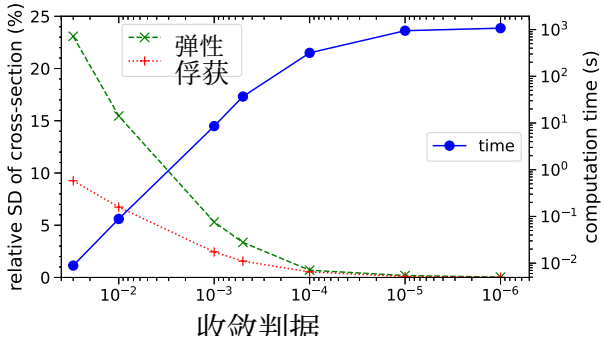
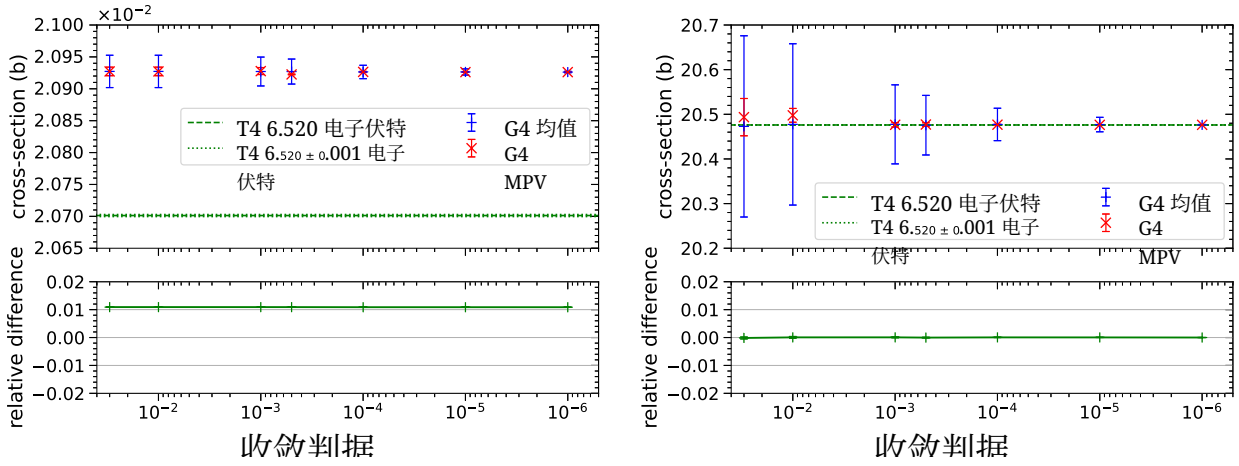
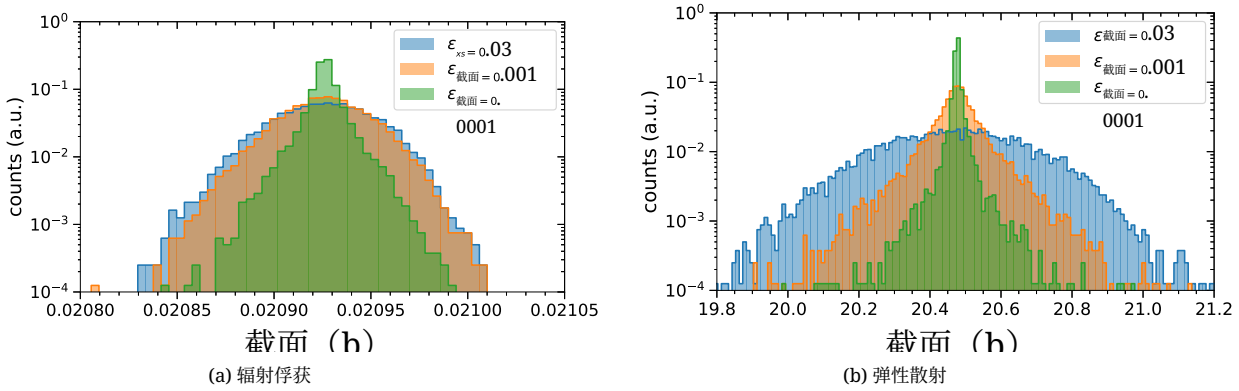


图7：不同收敛准则 ϵ_{xs}下，　^{238}U弹性和俘获截面的相对标准差（SD）（%）及计算时间。



（a）辐射俘获　　（b）弹性散射

图8： ^{1}H 在 6.52 电子伏特和 300开尔文下的截面均值、最概然值（MPV）及其标准差随收敛判据 ϵ_{xs} 变化的情况，数据由 Geant4 (G4) 计算。Tripoli-4® (T4) 使用的截面以绿色虚线表示。底部显示 G4/T4-1 的截面相对差及其均值的统计误差。



(a) 辐射俘获　　(b) 弹性散射

Figure 9：不同收敛准则 ϵ_{xs} 下 ^{1}H 的归一化多普勒展宽截面分布

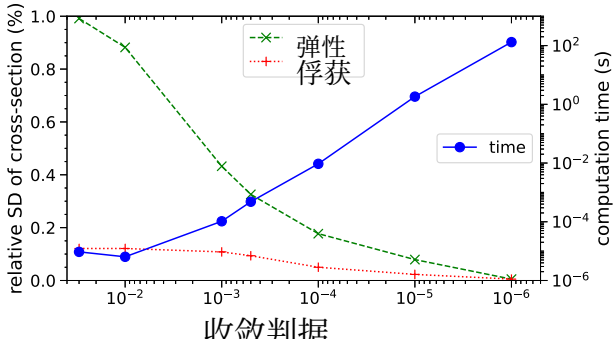


图10：不同收敛准则 ϵ_{xs} 下弹性和俘获 ^{1}H 截面的相对标准差（SD）（%）及计算时间。

5. 结论

用于准确描述共振重核弹性散射核的多普勒展宽拒绝修正算法已成功实现于 Geant4。使用基准蒙特卡罗中子输运代码 Tripoli-4® 进行的验证表明，在统计不确定性范围内，两种代码的结果高度一致。DBRC 算法将在下一个 Geant4 版本中实现。这项工作使 Neutron-HP 软件包在描述多普勒展宽弹性散射核方面达到当前最先进水平。此外，我们还研究了在线多普勒展宽程序中收敛判据的重要性，结果表明，应根据所研究的可观测量，针对每次模拟调整默认的收敛判据值。通过本项工作的开发，与基准中子输运代码相比，Geant4 唯一尚缺少的功能是利用概率表描述未分辨共振区。这一问题将很快在一篇专门的论文中探讨。

致谢

本项工作得以完成，得益于国际原子能机构 ′的技术合作计划。该计划资助了 Marek Zmeskal 在 IRFU、法国原子能和替代能源委员会的 fellowship，项目属于国家项目 CZR0011——加强核科学与技术领域人力资源能力。作者谨向 C´edric Jouanne 和 Geant4强子工作组负责人 Alberto Ribon 致以诚挚谢意，感谢他们分别就 Tripoli-4® 和 Geant4 提供了富有成效的讨论。Tripoli-4® 是法国原子能和替代能源委员会的注册商标。

参考文献

[1] S. Agostinelli 等。Geant 4 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A:* ——一个模拟工具包。,,, : – . *Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment* 506 250 303, 7 2003 01689002 10 1016 ISSN . doi: . / S0168-9002(03)01368-8. [2] J. Allison 等。Geant4 的发展与应用。 *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 53:270–278, 2 2006. ISSN 0018-9499. doi: 10.1109/TNS.2006.869826. [3] J. Allison 等。Geant 4 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A:* 的最新进展。,,, : – nov . *Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment* 835 186 225, 2016 0168 9002 10 1016 ISSN - . doi: . / J.NIMA.2016.06.125. URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900216306957. [4] E. Mendoza 等。用于 GEANT4 代码的新标准评价中子截面数据库及其初步验证。*IEEE Transactions on Nuclear Science*, 61:2357–2364, 2014. ISSN 00189499. doi: 10.1109/TNS.2014.2335538. [5] E. Mendoza、D. Cano-Ott 和 R. Capote。Geant4 代码评价中子截面数据库的更新，国际原子能机构技术报告 INDC(NDS)-0758（发布 JEFF-3.3、JEFF-3.2、ENDF/B-VIII.0、ENDF/B-VII.1、BROND-3 1 4 0 2018 https://www-nds.iaea.org/geant4/figures/G4_ 和 JENDL- . u）。技术报告, 10.04.p01_VS_MCNP6_ENDF80.pdf CIEMAT，维也纳，。URL 。[6] H. N. Tran 等。MCNP6 与 GEANT4 代码中热中子散射处理的比较。 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equip- ment* 893 84 94, 2018 01689002 10 1016 2018 02 094 ,,, : – jun . ISSN . doi: . / https://linkinghub.elsevier.com/ j.nima. . . . URL retrieve/pii/S0168900218302651 .[7] L. Thulliez、C. Jouanne 和 E. Dumonteil。改进 Geant4 中子高精度软件包：从方法学到评价核数据库。 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 1027 166187, 3 2022 01689002 10 1016 2021 166187 , : . ISSN . doi: . /j.nima. . . [8] E. Brun 等。TRIPOLI- 4 *Annals of Nuclear Energy* 82 151 160, 8 2015 03064549 10 1016 2014 07 053 ®，法国原子能和替代能源委员会、法国电力公司和阿海珐的基准蒙特卡罗代码。, : – . ISSN . doi: . /j.anucene. . . . [9] C. J. Werner 等。MCNP 6.2版发行说明，2 2018。[10] D. E. Cullen。SIGMA1程序（79-1版）：对评价核数据文件/版本 B（ENDF/B）格式的评价截面进行多普勒展宽，10 1979。[11] I. Duhamel 等。用于核数据验证的国际临界基准比较。 *Transactions of the American Nuclear Society* 121 2019 , , . [12] M. B. Chadwick 等。ENDF/B-VII.1 科学与技术用核数据：截面、协方差、裂变产物产额与衰变数据。 *Nuclear Data Sheets*, 112:2887–2996, 12 2011. ISSN 00903752. doi: 10.1016/j.nds.2011. 11.002.[13] M. Zmeˇskal 和 L. Thulliez。Geant 4 2023 https://gitlab.com/lthullie/ 中子高精度基准测试应用，。geant4_neutronhp_benchmarkapp URL 。[14] R. R. Coveyou、R. R. Bate 和 R. K. Osborn。慢化剂温度对无限吸收介质中子通量的影响。 *Journal of Nuclear Energy (1954)*, 2:153–167, 1 1956. ISSN 08913919. doi: 10.1016/0891-3919(55)90030-9.

[15] B. Becker、R. Dagan 和 G. Lohnert。理想气体能量相关散射核随机公式的证明与实现。 *Annals of Nuclear Energy*, 36:470–474, 5 2009. ISSN 03064549. doi: 10.1016/j.anucene.2008.12.001. [16] R. Dagan 和 C. H. M. Broeders。共振相关散射核对燃料循环和核素库存的影响。9 2006。[17] R. Dagan、B. Becker、Y. Danon、M. Rapp、D. Barry 和 G. Lohnert。通过 DBRC 在蒙特卡罗代码中模拟共振相关角分布。 *Journal of the Korean Physical Society*, 59:983–986, 8 2011. ISSN 0374-4884. doi: 10.3938/jkps.59.983. [18] F. Gunsing、E. Berthoumieux 等。欧洲核子研究中心 n_TOF 装置对 ^{232}Th(n,γ)分辨共振的测量。*Physical Review C*, 85, 6 2012. ISSN 1089490X. doi: 10.1103/PHYSREVC.85.064601. [19] W. Rothenstein 和 R. Dagan。能量相关截面的理想气体散射核。 *Annals of Nuclear Energy*, 25 209 222, 3 1998 03064549 10 1016 0306 4549 97 00063 7 https://linkinghub.elsevier.com/ : – . ISSN . retrieve/pii/S0306454997000637 doi: . /S - ( ) - . URL . [20] W. Rothenstein。强能量相关散射截面核素的理想气体散射核公式证明。 *Annals of Nuclear Energy*, 31:9–23, 1 2004. ISSN 03064549. doi: 10.1016/S0306-4549(03)00216-0. URL https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0306454903002160. [21] W. Rothenstein。1994年特拉维夫欧洲核学会会议论文集。[22] W. Rothenstein 和 R. Dagan。重麦克斯韦气体中子散射的二体动力学处理。 *Annals of Nuclear Energy* 22 723 730, 11 1995 03064549 10 1016 0306 4549 95 00002 , : – . ISSN . doi: . / - ( ) -A. [23] E. E. Sunny、F. B. Brown、B. C. Kiedrowski 和 W. Martin。MCNP 中超热中子共振散射的温度效应。页码 803–811, 4 2012。[24] A. Zoia、E. Brun、C. Jouanne 和 F. Malvagi。Tripoli-4® 中中子弹性散射核的多普勒展宽。*Annals of Nuclear Energy*, 54:218–226, 4 2013. ISSN 03064549. doi: 10.1016/j.anucene.2012.11.023. [25] F. B. Brown。MCNP6.2 中自由气体散射的多普勒展宽共振修正，5 2019。[26] R. Dagan。关于使用 S(α, β) 表处理具有显著共振的核素。 *Annals of Nuclear Energy*, 32: 367–377, 3 2005. ISSN 03064549. doi: 10.1016/j.anucene.2004.11.003. [27] D. Lee、K. Smith 和 J. Rhodes。铀-238共振弹性散射近似对热中子反应堆多普勒反应性的影响。 *Annals of Nuclear Energy*, 36:274–280, 4 2009. ISSN 03064549. doi: 10.1016/j.anucene.2008.11.026. [28] M. Ouisloumen 和 R. Sanchez。考虑热运动效应的重同位素中子散射模型。 *Nuclear Science and Engineering*, 107:189–200, 3 1991. ISSN 0029-5639. doi: 10.13182/NSE89-186. [29] S. Z. Ghrayeb、M. Ouisloumen、A. M. Ougouag 和 K. N. Ivanov。共振中子散射高阶角矩的确定性模拟。 *Annals of Nuclear Energy*, 38:2291–2297, 10 2011. ISSN 03064549. doi: 10.1016/j.anucene. 2011.04.025.[30] R. Macfarlane、D. W. Muir、R. M. Boicourt、A. C. Kahler 和 J. L. Conlin。NJOY核数据处理系统，2016版，1 2017。[31] X. X. Cai、I. Llamas-Jansa 和 B. C. Hauback。HP模型的准确性与速度。 7 2014 https://indico. . URL . [32] cern.ch/event/319884/contributions/1698321/attachments/616390/848181/Geant4_neutron_workshop.pdf G. Yesilyurt、W. R. Martin 和 F. B. Brown。用于蒙特卡罗代码的即时多普勒展宽。 *Nuclear Science and Engineering* 171 239 257, 7 2012 0029 5639 10 13182 11 67 , : – . ISSN - . doi: . /NSE - . [33] W. R. Martin 、 F. B. Brown 、 S. Wilderman 和 G. Yesilyurt。MCNP 中的即时中子多普勒展宽。页 03102。EDP Sciences，6 2014。ISBN 978-2-7598-1269-1。doi: 10.1051/snamc/201403102. [34] B. Forget、S. Xu 和 K. Smith。使用多极表示法在蒙特卡罗模拟中直接进行多普勒展宽。*Annals of Nuclear Energy*, 64:78–85, 2 2014. ISSN 03064549. doi: 10.1016/j.anucene.2013.09.043. [35] T. Viitanen 和 J. Lepp¨anen。在连续能量蒙特卡罗跟踪程序中显式处理热运动。 *Nuclear Science and Engineering*, 171:165–173, 6 2012. ISSN 0029-5639. doi: 10.13182/NSE11-36.