arXiv:2304.06226v2 [physics.comp-ph] 4 Dec 2023

Prompt：概率守恒截面偏置蒙特卡罗粒子输运系统

潘子怡[a,b], 杨妮[a,b,c], 唐明[a,b], 沈佩勋[a,b], 蔡潇潇[a,b,*]

[a] *Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, China*
[b] *Spallation Neutron Source Science Center, China*
[c] *University of Chinese Academy of Sciences, China*

摘要

本文介绍了一款用于模拟热中子在几何结构中传播的开源软件包。在该系统中，中子传播可通过粒子输运方法或光线追踪方法进行处理。借助精准的后端散射物理引擎，该系统能够重现复杂几何体中的中子散射实验，并有望应用于仪器表征、优化和数据分析领域。

本文简要介绍了相关理论，并详细说明了模拟流程及其用户输入语法。文中给出了五个基准测试模拟，分别侧重于模拟和散射技术的不同方面，以展示该模拟系统的应用。它们包括理想化的全散射仪器、单色粉末衍射仪、中子导管、斩波器，以及用于复杂几何体的成像装置。在适当情况下，将模拟结果与实验数据或成熟的软件包进行基准测试。结果吻合良好。

程序摘要

程序名称：Prompt 开发者代码库链接：
https://gitlab.com/cinema-developers/prompt 编程语言：C++、C 和 Python

*通讯作者：caixx@ihep.ac.cn

外部例程/库：NCrystal、VecGeom、MCPL、PyVista 许可条款：Apache License 2.0（Apache-2.0）问题性质：传统的中子光线追踪模拟方法难以考虑复杂几何体中的多重散射，因此模拟中子散射实验的准确度和精度受到限制。解决方法：提出一种结合蒙特卡洛粒子输运方法与光线追踪方法的混合系统。

1. 引言

过去几十年来，随着强流中子散裂源上的仪器设计工作不断开展，蒙特卡罗射线追踪代码逐渐成为中子仪器表征与优化的事实标准 [Tay06, MAA+06, KYN+19, LBC+11, WCC+09]。目前已有许多软件包可供使用，例如 McStas [LN99], VITESS [ZLM02], 和 RESTRAX/SIM-RES [˘SK97, SK04]。其中大多数采用线性链方法：将仪器分解为一系列组件，并且只允许中子束流从上游组件传输到相邻的下游组件。这种方法计算效率高，已被证明在估算样品处的中子仪器通量 [LNA+06, CKL+18, SDJE06, OMR+04] 以及分辨函数 [ASL+12, KNI+11, EPN+11] 方面极具价值。关于这些软件包最新发展现状的综述见 [WL20]。

在某些情况下，中子流会分流并进入多个下游组件。为处理这类情况，McStas 提供了灵活的“GROUP”关键字，供用户指定路径。另一方面，VITESS 在若干特殊组件中实现了类似的方法，例如费米斩波器、超镜和晶体分析器 [ZLM+04]。然而，对于复杂几何结构，线性链方法会变得更加繁琐，因为其内部结构无法按照上游至下游的方式排列。例如，在一个包含样品的样品环境容器组件中，容器产生的不需要的散射可能发生在中子经过样品之前或之后。为解决这一问题，McStas 引入了 Union 组件 [Ber17]，以支持定义复杂的内部结构。中子在该组件内的路径仅取决于几何结构和散射物理。

值得注意的是，NISP 中并未强制采用线性链方法 [DSTH99，SD04], 这是一个于 20 世纪 90 年代开发的软件包。该软件包继承了早期版本粒子输运代码中的部分蒙特卡罗引擎 [WL20]。由于不采用线性假设，该软件包中的中子不会

沿着预定义的链传播，因此模拟更加真实。

尽管所作的假设更少，NISP 目前仍不是最受欢迎的软件包之一。除了 [WL20], 中所述的计算效率、许可证和人力短缺问题外，块体材料中散射模型数量有限也可能是一大缺点。模型与实际物理情况之间的偏差会导致截面出现误差，进而产生不准确的结果。自 2015 年以来，NCrystal [CK20a], 这一通用开源中子散射引擎一直在积极开发中。在该软件包中，微观截面根据材料的基本性质计算 [CKKM19、KC21、KC23]。得益于其实现的稳健数值方法，中子散射能够在宽广的能量范围内进行建模，范围从超冷能量一直到数十电子伏特。

本文介绍的软件包——保概率截面偏置蒙特卡罗粒子输运系统（Prompt）是我们应对截面难题的首次尝试。第2节简要介绍了现有的中子散射模型和保概率截面偏置技术。第3节阐述了该系统的概念，并配以代码示例，展示了一个精简但完整的模拟输入脚本。第4节通过研究若干问题展示了系统的整体性能，包括理想化的全散射仪器、单色粉末衍射仪、中子导管、复杂几何体成像装置以及圆盘斩波器。本文在第5节讨论并总结。

2. Theories

本系统的目标概述见第 2.1 节。第2.2 节和2.3节分别介绍中子散射长度和散射类型。鉴于其他文献对中子散射理论有更详细的阐述，例如 [Lov84, Squ12、Sch14], ，本节将着重介绍相关参数的物理含义及其背后的截面模型。第 2.4节介绍已实现的概率守恒截面偏置方法

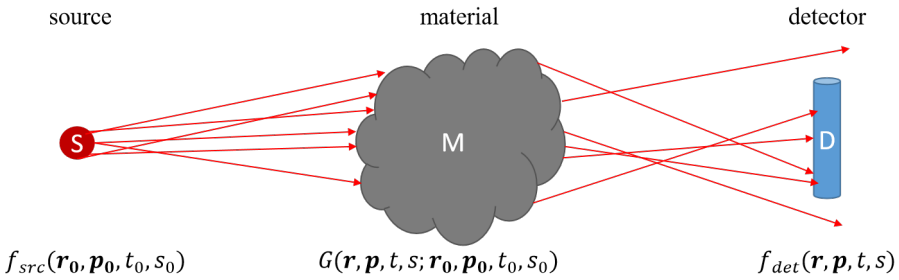


图1： 粒子穿过一段材料后被探测的简化示意图

该方法能够有效控制有限体积内中子的相互作用次数。第 2.5节介绍镜面和斩波器模型。

2.1. 系统的范围

图1展示了源发出的粒子与一段材料相互作用的过程。其中一部分粒子最终被探测器探测到。这里关注的问题是探测概率， f_{det}（$\boldsymbol{r}$， $\boldsymbol{p}$， t， s）。

从粒子输运的角度来看，这可以表示为

$$f_{det}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t, s) = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_0 \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{p}_0 \int \mathrm{d}t_0 \int \mathrm{d}s_0 \; G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t, s; \boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{p}_0, t_0, s_0) f_{src}(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{p}_0, t_0, s_0) \tag{1}$$

其中， $\boldsymbol{r}$ 是位置， $\boldsymbol{p}$ 是动量， t 是时间， s 是自旋， G函数是传播子。

这个高维积分通常使用蒙特卡罗粒子输运系统进行计算，这类系统通常将传播子分解为几何结构模块和物理模块。在此类系统中，物理模块根据给定的先验状态、材料和施加的外部场，通过对物理分布进行采样来预测粒子状态；而几何模型则沿粒子的轨迹追踪其在各体积中的运动。

另一方面，光线追踪方法通过缩放函数 ϵ简化了积分，该函数表示粒子的权重调整。此外，应用线性链近似时，会设置 ϵ 函数。

如果离开的粒子不与探测器相交，则设为零。

$$f_{det}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t,s) = \epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t,s;\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{p}_0,t_0,s_0) f_{src}(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{p}_0,t_0,s_0) \tag{2}$$

这种方法能够较为合理地描述许多光学组件中的中子透射行为。最简单的示例之一是旋转式中子圆盘斩波器。 ϵ 函数取值为一或零，分别表示中子透射或吸收事件。

Prompt 的目标是`Prompt` 求解块体材料中的方程1 以及用于模拟运动光学组件（即斩波器）的方程2 。系统中放宽了线性链近似。此版本代码仅支持热中子。请注意，在使用较长中子导管模拟冷中子时，引力场可能会很重要。通过限制粒子步长，可以模拟引力效应。然而，这种实现计算开销很大，超出了当前版本代码的范围。目前尚不支持该功能。

2.2. 中子散射长度

引言从一个极限情形开始：中子与一个在整个散射过程中固定于某一位置的静止原子核发生散射。如果靶核保持在电子基态，且中子波长远大于中子-原子核相互作用的作用范围，那么散射仅由分波中的s波分量贡献 [Sch14]。在这种情况下，散射本质上是弹性各向同性散射，可用单个参数 b来表征，即所谓的束缚散射长度 [Lov84]。这一假设 [1] 情形下的截面仅为 $4\pi|b|^2$。

在另一种极限情况下，若原子核的运动完全不受阻碍，这一过程可视为在质心系中的弹性散射。对于这种情况，所谓的自由散射长度可推导为 [Squ12] 为 $b_f = bM/(m+M)$，其中 m 和 M 分别是

[1] 固定一个静止原子核在经典力学中才是合理的，但会违反不确定性原理。

中子和靶核的质量。当入射中子的能量远高于系统中的化学键能时，例如高于数电子伏特，散射截面趋近于极限值 $4\pi|b_f|^2$，例如参见文献 [DGM14]。

实验室系和质心系中的角分布可通过式 3 [Sch14]相关联。从该方程的角度来看，束缚情形下的角分布是自由情形在 γ趋近于零时的特殊情况，也就是说，靶核的质量相对于中子而言为无穷大。

$$P(\theta_{lab}) = \frac{(1+\gamma^2+2\gamma\cos\theta_{c.m.})^{3/2}}{|1+\gamma\cos\theta_{c.m.}|} P(\theta_{c.m.})$$
$$\text{with} \quad \gamma = \frac{m}{M} \tag{3}$$

然而，无论是束缚情形还是自由情形，都无法足够准确地描述有限且具有相关性的系统中的中子散射过程，尤其是在入射中子波长与最短原子间距离相近时。

注意，散射长度 b 通常是复数。吸收振幅是 b的虚部。对于热中子，通常可以足够准确地将吸收过程与散射过程解耦，更多讨论请参见 [CKKM19]第 2.2 节。因此，在截面计算中，散射长度通常取实数值。对于不考虑核共振的情况，吸收截面通常被视为与中子速度成反比，且不受原子结构和动力学影响。

2.3. 中子散射截面

中性粒子在材料中呈现阶梯状行为。根据朗伯-比尔定律，在均匀材料中，长度为 x 处观察到自由粒子的概率可描述为

$$P(x) = \exp(-\rho\sigma x) \tag{4}$$

其中， ρ 为散射数密度， σ 为截面。截面可由双微分截面计算得出。

$$\sigma = \int\int \frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega \mathrm{d}E'} \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}E' \tag{5}$$

在玻恩近似和费米黄金法则下，热中子散射截面是散射函数的二重积分，并按散射与入射波数之比进行缩放 [CK20b],

$$\sigma(\vec{k_i}) = \int\int \frac{|\vec{k_f}|}{|\vec{k_i}|} S(\vec{Q}, \omega) \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}E' \tag{6}$$

其中 $\vec{Q} = \vec{k_i} - \vec{k_f}$ 和 $\hbar\omega = \hbar^2(k_i^2 - k_f^2)/2m$，满足动量和能量守恒定律。这里， Q 和 ω 分别为约化动量转移和能量转移。

方程 6 的评估与实现取决于统计等价子系统相对于模拟系统实验室系的取向分布 [CK20a，KC21]。对于取向材料，即单晶和层状晶体，相关晶轴应与模拟的实验室参考系对齐。这样，预定义散射函数中的动量转移便与模拟世界中的动量转移相同。有关如何配置对齐的更多讨论，请参见第3.5 节。

中子散射函数可以分解为一系列$S_{j,\ j'}$（$\vec{Q}$，ω），即部分散射函数，由 j_{th} 和 j'_{th} 原子核对 [VH54]贡献。

$$S(\vec{Q}, \omega) = \sum_{j,j'=1}^{N} \overline{b_j b_{j'}} S_{j,j'}(\vec{Q}, \omega) \tag{7}$$

这里， N 表示原子核的数量，$b_j\overline{b_{j'}}$ 强调平均是针对所有子系统的同位素和自旋进行的。

为了更真实地处理散射，在 j_{th} 原子核的 b值与同位素和自旋无关联的情况下，平均值为

$$\overline{b_j b_{j'}} = \begin{cases} \overline{b_j} \cdot \overline{b_{j'}}, & \text{for } j \neq j' \\ \overline{b_j^2}, & \text{for } j = j' \end{cases} \tag{8}$$

因此，

$$S(\vec{Q},\omega) = \sum_{\substack{j,j'=1 \\ j\neq j'}}^{N} \overline{b_j}\,\overline{b_{j'}} S_{j,j'}(\vec{Q},\omega) + \sum_{j}^{N} \overline{b_j^2} S_{j,j}(\vec{Q},\omega) \tag{9}$$

$$= S_{\text{distinct}}(\vec{Q},\omega) + S_{\text{self}}(\vec{Q},\omega) \tag{10}$$

在式 10中，第一项源自由不同原子核构成的核对，称为非相干 散射。第二项仅由单个原子核贡献，因此称为自 散射。

将 $b^2 = (\overline{b} - b)^2 + (\overline{b})^2$ 代入式 9，可得

$$S(\vec{Q},\omega) = \sum_{j,j'=1}^{N} \overline{b_j}\,\overline{b_{j'}} S_{j,j'}(\vec{Q},\omega) + \sum_{j}^{N} [\overline{b_j^2} - (\overline{b_j})^2] S_{j,j}(\vec{Q},\omega) \tag{11}$$

$$= S_{\text{coh}}(\vec{Q},\omega) + S_{\text{inc}}(\vec{Q},\omega) \tag{12}$$

其中， S_{coh} 和 S_{inc} 分别表示相干散射和非相干散射。相干散射在物理上可解释为所有散射长度都等于其平均值时产生的散射。而非相干散射与自散射成正比，代表散射长度相对于其平均值的偏差。值得强调的是，相干散射既包含异位散射，也包含一部分自散射。

$$S_{\text{coh}}(\vec{Q},\omega) = S_{\text{distinct}}(\vec{Q},\omega) + \sum_{j}^{N} \overline{b_j}^2 S_{j,j}(\vec{Q},\omega) \tag{13}$$

相干散射和非相干散射还可根据中子是否与系统交换能量进一步分类，即相对于实验室参考系的弹性散射和非弹性散射。

$$S(\vec{Q},\omega) = S^{\mathrm{el}}_{\mathrm{coh}}(\vec{Q},\omega) + S^{\mathrm{inel}}_{\mathrm{coh}}(\vec{Q},\omega) + S^{\mathrm{el}}_{\mathrm{inc}}(\vec{Q},\omega) + S^{\mathrm{inel}}_{\mathrm{inc}}(\vec{Q},\omega) \tag{14}$$

2.3.1. 弹性散射

均匀液体和气体不会发生弹性散射 [Squ12,Cre13] [2]。在后端散射引擎中，弹性散射明确源自固体材料。

非相干弹性散射和相干弹性散射的散射函数分别如式15和 16所示。

$$S^{\mathrm{el}}_{\mathrm{inc}}(\vec{Q},\omega) = N \sum_j^N [\overline{b_j^2} - (\overline{b_j})^2] \exp(-2W_j) \tag{15}$$

$$S^{\mathrm{el}}_{\mathrm{coh}}(\vec{Q},\omega) = N \frac{(2\pi)^3}{v_0} \sum_{\vec{\tau}} \delta(\vec{Q} - \vec{\tau}) \left| \sum_j^N \overline{b_j} \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{R}_j) \exp(-W_j)) \right|^2 \tag{16}$$

W 为德拜-沃勒因子， v_0 为晶胞体积， $\vec{\tau}$ 为倒易空间中的晶格点， R 为平衡位置。

对于理想化材料，晶体晶胞的取向由分布函数描述。我们采用数值过程计算给定分布的平均有效散射函数。该平均过程相当复杂，超出了本文的讨论范围，详细方法请参阅 [KC21] 。后端散射引擎支持各向同性粉末、马赛克单晶和马赛克层状晶体中的弹性散射。

[2]事实上，在弹性型中子仪器上测量这些材料确实会产生事件数据。不过，这类仪器通常只能保证分析事件数据时不考虑散射中的能量交换，却不能保证实际发生的物理过程是什么。

2.3.2. 非弹性散射

受典型蒙特卡罗模拟的内存占用和初始化时间限制，非弹性散射仅适用于各向同性材料，例如粉末和液体。

已有研究表明，在谐近似下，理想晶体粉末的非弹性散射非相干部分 [Sj¨o58]以及在涨落耗散定理下采用高斯近似的液体 [RSS62] 可以分别得到相同的形式，

$$S_{\text{inc}}^{\text{inel}}(Q,\omega) = \frac{1}{2\pi}\int e^{-i\omega t}\exp\left[-\frac{Q^2}{2}\Gamma(t)\right]\mathrm{d}t \tag{17}$$

此处，由于材料具有各向同性，散射函数取决于 Q 的模，且 $\Gamma(t)$ 是宽度函数。

$$\Gamma(t) = \frac{\hbar}{M}\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\frac{\rho(\omega)}{\omega}\left[\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right)(1-\cos\omega t) - i\sin\omega t\right] \tag{18}$$

其中，$\rho(\omega)$ 是态密度，k_B 是玻尔兹曼常数，T 是温度。这些表达式表明，对于各向同性材料，仅使用态密度来计算非相干截面是可行的。

采用声子展开法时，17 中晶体部分的数值计算效率很高 [Sj¨o58], 因此适合在线计算。另一方面，对于液体，Γ 会在 ω 趋近于零时发散，这是由扩散运动导致的。在这种情况下，散射函数通常采用基于模型辅助评估的方法 [DGM14] 或计算量更大的直接卷积方法 [DC22]预先计算。

相干非弹性散射函数也可以包含在预先计算的输入截面中。对于液体，通常采用 Sk¨近似 [Sk¨o67], 即式19。

$$S_{\text{coh}}^{\text{inel}}(Q,\omega) = \sum_{jj'=1}^{N}\overline{b_j}\,\overline{b_{j'}}S_{jj'}(Q)S_{jj}\left(\frac{Q}{\sqrt{S_{jj'}(Q)}},\omega\right) \tag{19}$$

$S_{jj'}(Q)$ 是部分静态结构因子，等于 $\int S_{jj'}(Q,\omega)\mathrm{d}\omega$。As

由散射函数的零阶求和规则可知，当 $j = j'$ 时，该值为一，即自散射函数的情形。

为简化数值计算，通常采用各向同性非相干近似，也称为高斯近似 [RSS62], ，以跳过相干非弹性散射函数的计算。在这种情况下，异散射函数消失，因此总体非弹性散射完全由自散射函数的非弹性部分近似表示（见公式 10）。异散射的缺失会导致非弹性散射函数相对于 Q变得更加平滑。因此，计算得到的角分布不应被认为在每个细节上都能与测量结果直接比较。然而，在实际应用中，当人们不太关注角分布时，非相干近似已被证明非常有用；也就是说，所关注的最终结果是在较大角度范围内的平均值，例如在测量声子态密度时（见 [Sch14]的第 9.16 节）、表征中子慢化过程时 [DGM14] ，以及估计多声子散射背景的强度时（见 [Squ12]的第 3.10 节）。

除了非相干近似外，德拜模型也可用于晶体，尤其是在主要关注结构信息时，例如对具有强相干性的样品进行粉末衍射。此时，态密度与声子能量的幂成正比，上限截止由德拜温度定义 [SSP95]。

在系统关联相对不显著的情况下，例如在强吸收性或气态材料中，可以使用短碰撞时间近似 [MK10、CKKM19], 来描述散射过程，更多讨论请参见第 3.5节。

2.4. 截面偏置机制

根据式4所表示的概率，可以按以下方式对自由粒子的步长进行抽样

$$l = -\frac{\log_e(\xi)}{\rho\sigma} \tag{20}$$

其中， ξ 是从均匀分布 $[0, 1$中生成的一个数。

如果将任意正值缩放因子 g 应用于截面，形成一个人工截面 $\sigma_g = g\sigma$（E），则采样得到的步长变为

$$l_g = -\frac{\log_e(\xi)}{g\rho\sigma} \tag{21}$$

与 l相比，当因子小于或大于 1 时， l_g 分别增大或减小。这可以有效地控制有限体积内的粒子相互作用次数。

然而，改变这样一个重要参数会扭曲式中的步长分布。4并导致错误的统计结果。

可以看出，对式4求导，然后将结果除以$P(x)$，即可得到

$$\frac{\mathrm{d}P(x)}{P(x)} = -\rho(x)\sigma\mathrm{d}x \tag{22}$$

应用人工截面时，该方程变为

$$\frac{\mathrm{d}P_g(x)}{P_g(x)} = -\rho(x)\sigma_g\mathrm{d}x \tag{23}$$

根据导数的商法则，可以将沿路径对概率应用偏置因子的影响量化为

$$\frac{\mathrm{d}P_g(x)/P(x)}{\mathrm{d}P_g(x)/P(x)} = -(g-1)\rho(x)\sigma\mathrm{d}x \tag{24}$$

已有研究表明 [MW12] 在每次相互作用结束时用补偿因子修正粒子权重后，即可消除分布畸变，具体如下:

$$W_n = W_0 \prod_{l=1}^{n} \frac{1}{g_{m,l}} \prod_{m=1}^{n} \prod_{i=1}^{N_p} \exp[(g_{m,i}-1)x_m\rho\sigma_i] \tag{25}$$

其中， W_o 是粒子的原始权重； n 是相互作用次数，第 m_{th} 步的步长为 x_m，N_p 是反应过程的数量，第 m_{th} 步中 i_{th} 过程的偏置因子为$g_{m,\ i}$， l_{th} 过程发生在第 m_{th} 步结束时，相应的偏置因子为$b_{m,\ l}$。

该实现的初衷是便于研究入射中子束与散射仪器中小样品之间的散射。在这种情况下，多重散射通常被视为一种微弱但重要的噪声。采用大于 1 的偏置因子，不仅可以改善单次散射信号的统计特性，还能显著降低多重散射噪声的方差。该方法的详细验证和性能讨论见第4.1节和第4.4节。

2.5. 中子镜和圆盘斩波器

中子镜采用`McStas` [WFK+22] 中的经验反射率模型。反射概率是一个分段函数，

$$R(Q) = \begin{cases} R_0, & \text{if } Q \leq Q_c \\ \frac{1}{2}R_0[1-\alpha(Q-Q_c)]\left[1-\tanh\left(\frac{Q-mQ_c}{W}\right)\right], & \text{if } Q > Q_c \end{cases} \tag{26}$$

其中， R_0 为低角度反射率， Q_c 为临界散射波数，α 为反射率斜率， m 为镜面的 m 值， W 为截止宽度。取自 McStas 的默认值见表1。

中子反射后，其能量保持不变，因此 Q 仅取决于反射角。反射方向 $\vec{n}_f$ 可根据中子的方向 $\vec{n}_i$和接触点的法线 $\vec{n}_r$ 计算得出：

$$\vec{n}_f = \vec{n}_i - 2\vec{n}_r(\vec{n}_i \cdot \vec{n}_r) \tag{27}$$

中子圆盘斩波器是一种采用光线追踪方法建模的中子光学元件。在输运模式下，中子的权重通过光线追踪过程进行修改，而非通过详细的散射和传播过程进行修改。

表 1： 中子镜模型的参数及其取值取自 Mcstas 导管组件。镜面 m 值为必需参数，其余参数均为固定值。

参数	值	描述	Unit
m		镜面 m 值	1
R_0	0.99	低角度反射率	1
Q_c	0.0219	临界散射波数	$Å^{-1}$
α	6.07	反射率斜率	Å
W	0.003	截止宽度	$Å^{-1}$

表 2： 提示启动器的选项。没有默认值的参数为必填项，其余为可选项。

选项	默认值	描述
`-g [file]`		设置 GDML 输入文件。
`-s [seed]`	4096	设置随机数生成器的种子。
`-n [number]`	100	设置初级事件的数量。
`-v`		用于激活几何结构和轨迹可视化的标志。

当中子到达圆盘斩波器时，会使用光线追踪方法。相应的 ϵ 方程 2 中的函数是位置和时间的掩码。若中子击中开口窗口，该函数值为 1；否则为零。在实现中，圆盘斩波器被视为无限薄。

3. 程序

可执行程序`prompt`读取用户输入文件，文件采用几何描述标记语言（GDML）格式 [CMPS06] 并启动模拟。该标准的手册详细介绍了语言架构 [gdm22]。可用选项汇总于表 2。

在典型的模拟中，粒子历史的统计分布会在事件的蒙特卡罗循环中迭-代累积。每个事件都从粒子的生成开始，并以粒子在材料中的吸收或粒子从所有体积边界逃逸而结束。在该系统中，这些累- 加器被称为计分器，并通过直方图实现

附加到体积上的。累积过程由体积上的粒子追踪状态（PTS）这一概念触发。

模拟流程在以下章节中展示：3.1。可用的粒子产生器，即粒子枪，见以下章节 3.2。体积和计分器分别在以下章节介绍：3.3 和 3.4。初始化物理模型的语法见以下章节 3.5。最后，以下章节列出并说明一个简短的输入脚本示例：3.6。

3.1. 模拟流程

模拟流程分为两个阶段：追踪阶段和相互作用阶段，如图所示。2。

系统首先在粒子堆栈中查找包含最后一个粒子的体积。成功确定一个有效体积，表明粒子位于世界内部，即位于模拟中包含所有子体积的最大体积内。否则，将终止对该粒子的模拟。随后，程序在为相互作用阶段选择模拟模式之前，断言粒子的存活状态。如果粒子不是刚刚由粒子枪在随机位置生成的，那么在此阶段它必须到达某个体积的边界。在这种情况下，系统会检查该体积是否定义了射线追踪模型，然后分支进入射线追踪模式或输运模式。

在输运模式下，如果指定了镜面，首先由镜面处理粒子。接着，计算宏观总截面，并使用公式对步长进行抽样。21。如果抽样得到的步长超过体积允许的最大距离，则将粒子移动到几何结构的交点，并进入重新定位子过程。否则，将粒子向前移动到发生相互作用的位置。在这种情况下，根据对截面的抽样结果，粒子进入传播子过程或吸收子过程。无论哪种情况，每当粒子移动时，如果截面存在偏置，就根据公式调整其权重。25

在射线追踪模式下，粒子在方程中进行模拟2。此模式与输运模式之间的主要区别在于，体积内的粒子状态完全由所实现的模型操控。系统将射线追踪体积视为黑箱，并且不了解粒子状态，直到模型决定消除该粒子，或将粒子发送至体积的边界。请注意，射线追踪模式不支持包含子体积的体积，因为无法对体积的内部结构进行系统建模。

相互作用阶段的子程序如图3所示。它们可以修改粒子参数，例如位置、能量和运动方向，也可以改变粒子追踪状态，从而触发可用的计分器。关于计分器的更多详情将在第3.4节介绍。

如图 3a所示，在重定位子程序中，粒子会被移动到下一个体积的边界处，且动量保持不变。如图 3b所示，在传播子程序中，会对粒子的散射角和能量进行采样。如图 3c所示，在吸收子程序中，粒子的存活状态会被设为 false。

3.2. 粒子枪

初始中子的位置、动量方向、能量和时间由粒子枪生成。在此版本的 Prompt 中，最初提供了几种类型的粒子枪，以便对点源、面源以及其他软件包生成的标准蒙特卡罗粒子列表（MCPL）格式的粒子历史进行建模。

提供了两种可生成中子点源的基本粒子枪，分别是 `SimpleThermalGun` 和 `IsotropicGun`。这两种粒子枪指定中子能量的方式有三种：使用单个值、从均匀分布中采样，或从系数为 kT 的麦克斯韦–玻尔兹曼分布中采样。`SimpleThermalGun` 可产生沿单一方向发射的中子，如清单 1 所示。而 `IsotropicGun` 可产生各向同性中子，即动量方向在所有立体角上等概率分布，参见清单 2。

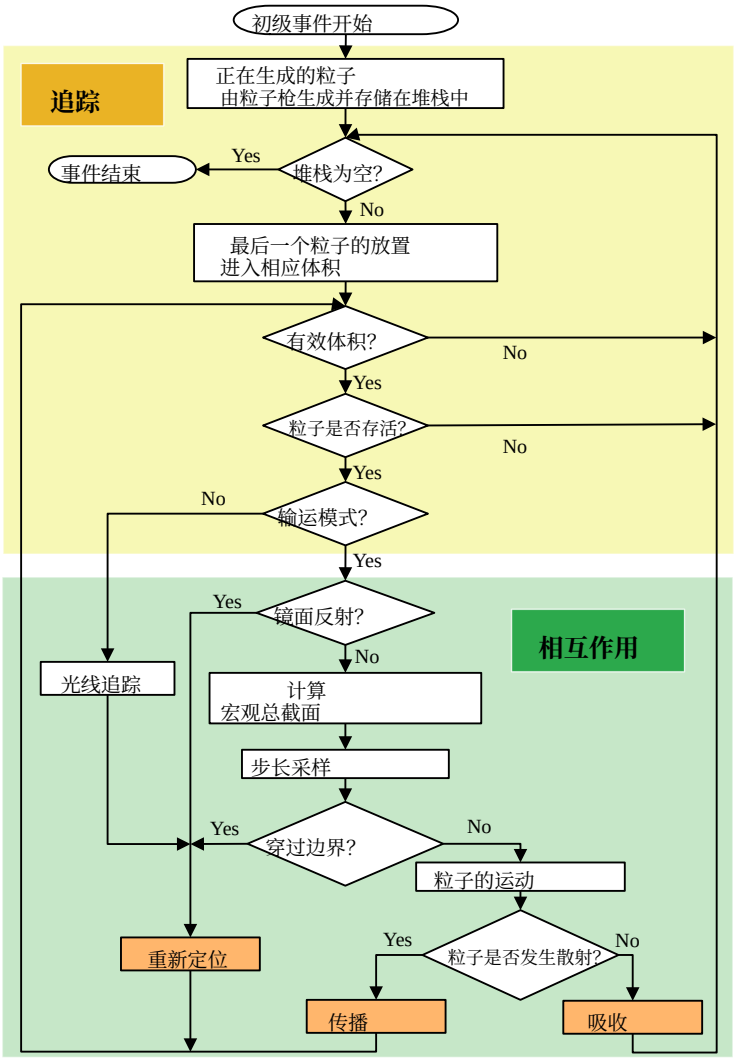
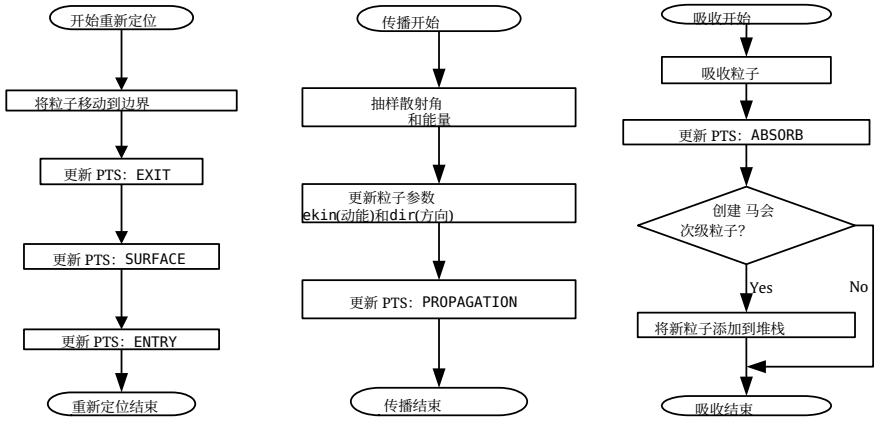


图 2： Prompt 中采用的初级事件主要模拟流程



(a) 粒子的重新定位
不同体积之间

(b) 粒子的传播
在一个体积内

(c) 粒子吸收
在体积内

图3： 三种子程序：重新定位、传播和吸收

```
<userinfo>
  <auxiliary auxtype="PrimaryGun" auxvalue="gun=SimpleThermalGun; energy=0.0253;
       position=0,0,0; direction=1,0,0" />
</userinfo>
```

清单1： SimpleThermalGun，可产生能量为 0.0253 电子伏特、位置为 (0，0，0)，方向沿 x 轴的中子。

```
<userinfo>
  <auxiliary auxtype="PrimaryGun" auxvalue="gun=IsotropicGun; energy=0.0253;
       position=0,0,0" />
</userinfo>
```

清单2： IsotropicGun，产生能量为 0.0253 电子伏特、位置为 $(0, 0, 0)$ 的径向中子束。

受 McStas 启发，Prompt 还提供 UniModeratorGun 和 MaxwellianGu n 以从慢化体表面生成中子。粒子位置从代表慢化体表面的矩形表面中随机采-样。各自方向通过在代表狭缝的另一个开口中采样另一个点来确定，该狭缝作为中子进入束流通道的入口。

从 UniModeratorGun根据输入的波长和波长范围所形成的均匀分布，随机抽取中子的动能样品，如清单 3 所示。

MaxwellianGun 接收温度作为输入，并从相应的麦克斯韦–玻尔兹曼分布中随机抽取中子的动能。

分布，如清单4所示。

```
<userinfo>
  <auxiliary auxtype="PrimaryGun" auxvalue="gun=UniModeratorGun; mean_wl=3.39;
       range_wl=0.3; src_w=100; src_h=50; src_z=-400; slit_w=5; slit_h=10;
       slit_z=1" />
</userinfo>
```

清单3： 一个 UniModeratorGun，产生能量在随机范围内选取的中子介于 3.09 Å 和 3.69 Å之间, with 位置在开口内随机选取，开口尺寸为 100毫米×50毫米，位于 $(0, 0, -400)$（单位：毫米），方向由连接两个开口的两个点

```
<userinfo>
  <auxiliary auxtype="PrimaryGun" auxvalue="gun=MaxwellianGun; src_w=100;
       src_h=50; src_z=-400; slit_w=5; slit_h=10; slit_z=1; temperature=293.15;
       " />
</userinfo>
```

列表4： 一个MaxwellianGun，产生能量随机选取（$T = 293.15$K）的中子，位置随机选取于一个位于 (0，0，−400)（单位为毫米）、开口为 100毫米×50 毫米的开口中，其方向由连接两个开口的两个点确定

使用MCPLGun 的示例见列表 5。输入文件通常由蒙特卡罗软件包生成，例如 McStas、Geant4、MCNP 和 PHITS。请注意，准备输入文件时，必须过滤掉中子以外的粒子。使用MCPL工具包中的 `mcpltool --extract -p2112 example.mcpl justneutrons.mcpl`即可轻松完成此操作。

```
<userinfo>
  <auxiliary auxtype="PrimaryGun" auxvalue="gun=MCPLGun;
       mcplfile=justneutrons.mcpl" />
</userinfo>
```

清单5： MCPLGun 从指定的 MCPL 文件中读取中子历史

3.3. 几何结构

Prompt 使用 VecGeom [A+05]v1.2.0 作为几何引擎，并使用 GDML [CMPS06] 作为定义模拟几何结构的语言。几何结构是由体积构成的层次结构，每个体积都应指定形状和组成。描述一个体积有三个重要部分，即 实体 用于描述形状，结构 用于描述层次关系，以及材料用于描述组成。本节将介绍定义 实体 和结构 的方法，而材料 部分留待第 3.5 节介绍。

目前Prompt 支持的实体取自Prompt 《GDML 用户指南 [gdm22] ，并列于附录 A中。一个实体定义实体类型及其

对应的参数。例如，列表6 中的代码行定义了一个各边长度相同的盒体。长度单位 lunit默认为毫米。也可以选择纳米（nm）、微米（um）、厘米（cm）、米（m）或千米（km）。角度的默认单位 aunit为度（deg），也可以使用弧度（rad）。

```
<solids>
    <box lunit="mm" name="Cube" x="10.0" y="10.0" z="10.0" />
</solids>
```

清单 6： 一个名为 *Cube* 的盒体，每条边长为 10 毫米该结构是由体积构成的层级结构。当一个体积关联到一个实体和一种材料时，它被称为逻辑体积。将逻辑体积放置到母逻辑体积中后，它便成为物理体积。请注意，子体积的任何边界都应包含在其母体积内；此版本的系统尚未实现边界重叠检测。模拟中的所有体积都是物理体积，因为它们都必须被放置，世界除外，它是层级结构顶端最大的体积。清单 7给出了一个示例，其中定义了两层层级结构。第一层对应于该模拟的世界，第二层则是一个名为phy2ndLevel 的体积，放置在世界的中心。

-

```
<solids>
    <box lunit="mm" name="solWorld" x="10" y="10" z="10" />
    <orb lunit="mm" name="solSphere" r="5" />
</solids>
<structure>
    <volume name="2ndLevel">
        <solidref ref="solSphere" />
        <materialref ... />
    </volume>
    <volume name="World">
        <solidref ref="solWorld"/>
        <materialref ... />
        <physvol name="phy_2ndLevel">
            <volumeref ref="2ndLevel" />
            <position name="Position" unit="mm" x="0" y="0" z="0" />
        </physvol>
    </volume>
</structure>
```

清单 7： 两级层次结构

表 3：体积中的粒子计分器。除非另有说明，统计信息均以一维直方图的形式呈现。

计分器	统计信息
ESpectrum	能谱
WlSpectrum	波长谱
TOF	粒子的飞行时间谱。
PSD	一个投影上的二维空间谱
	体积
MultiScat	体积内散射粒子的散射数谱
DeltaMomentum	动量转移谱
Angular	角谱
VolFluence	体积中的粒子通量谱

3.4. 计分器

表 3列出了八种计分器，它们用于累计粒子统计信息并生成直方图。感兴趣的变量通常固定为粒子的某一属性，例如能量、位置和时间。对于 `DeltaMomentum` 计分器，应选择弹性散射或非弹性散射来计算该变量。在弹性散射情况下，动量转移 Q 的计算方式如下：

$$Q = 2k_i \sin\theta \tag{28}$$

在非弹性情况下，动量转移为

$$Q^2 = {k_i}^2 + {k_f}^2 - 2k_i k_f \cos 2\theta \tag{29}$$

要进行设置，需将计分器附加到一个体积上，以便从中提取统计信息。例如，在清单 8 中，`PSD` 计分器附加到了名为 Detector 的体积上。计分器的参数列于

见附录 C。

```
<volume name="Detector">
  <materialref ref="Vacuum"/>
  <solidref ref="DetectorSolid"/>
  <auxiliary auxtype="Scorer" auxvalue= "Scorer=PSD; name=NeutronHistMap;
       xmin=-250; xmax=250; numBins_x=100; ymin=-250; ymax=250; numBins_y=100;
       ptstate=SURFACE; type=XY"/>
</volume>
```

清单 8： 附加到名为 Detector 的体积上的 PSD 计分器

该粒子追踪状态（见清单8 ）表示粒子追踪状态。粒子追踪状态反映粒子与体积之间的关系，同时也会触发计分器累积粒子权重。每个计分器都应分配给一个要监听的粒子追踪状态。在Prompt 中定义了五种粒子追踪状态，如下所示：

- 表面：粒子到达体积的几何边界，
- 进入：粒子进入一个体积，
- 吸收：粒子在一个体积中被吸收，
- 传播：粒子在一个体积中传播，
- 退出：粒子离开一个体积。

这些选项适用于所有计分器，但 MultiScat 不可更改地设为传播。

为说明计分器的触发机制，图 4 展示了列表 7所示几何结构中粒子的输运过程。粒子在这个简单几何结构中输运了四步。第 1 步中，粒子到达体积 Sphere 边界上的点A 时，会同时退出体积 World 并进入体积 Sphere。因此，它可以触发监听体积 World 的 EXIT PTS 的计分器，以及监听体积 Sphere 的 SURFACE 和 ENTRY PTS 的计分器。第 2 步中，粒子到达点B时，可能触发体积 Sphere 的 PROPAGATE 或 ABSORB PTS 计分器。本例选择 PROPAGATE ，以便模拟继续进行。与第 1 步类似，在第 3 步结束时，粒子到达点 C，可以触发设为 EXIT 的体积 Sphere 计分器，以及设为 ENTRY的体积 World 计分器。第 4 步结束时，粒子到达点 D，此时它位于体积 World 的边界处，即将离开体积 World。因此，粒子会被终止，并可触发设为 EXIT的体积 World 计分器。

值得注意的是，对于计分器而言，表面和进入可以互换使用。这两个 PTS 用于系统核心，以指示相互作用是采用表面模型还是体材料模型处理。

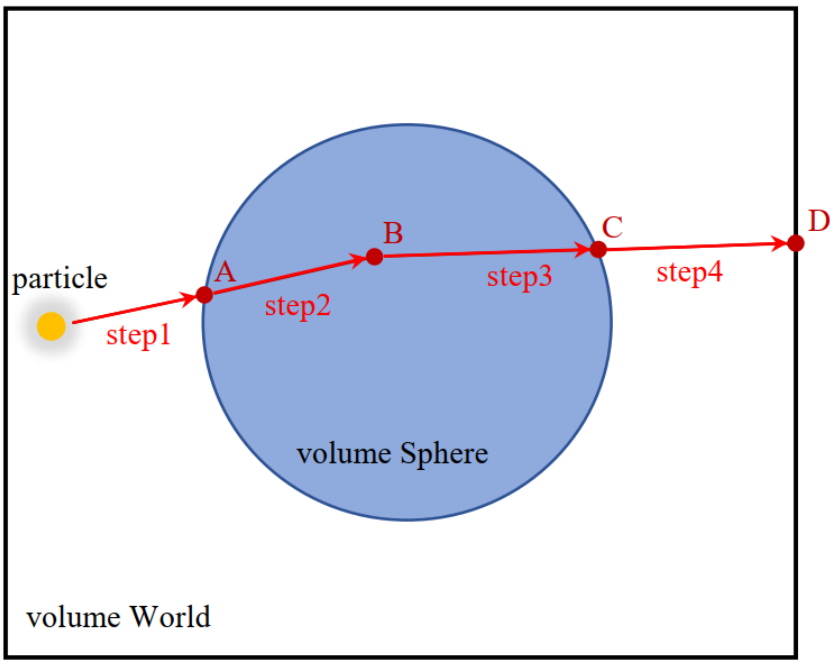


图 4：粒子在简单几何结构中的输运过程

计分器会生成一个或多个直方图，以展示统计结果。这些结果采用Numpy数组格式 [HMvdWea20] 编码，随后存储在输出 MCPL [KKK+17] 文件的文件头中。此外，每个 MCPL 文件都会附带生成一个 Python 脚本，展示后分析所需的基本读取和绘图函数。

3.5. 模拟物理

Prompt 定义了三种物理类型，即块体材料物理、镜面物理和光线追踪物理。

所有块体材料截面均由后端引擎 NCrystalv3.0.0计算。理想各向同性铝多晶体的定义语法见条目 9。传递给 NCrystal 以计算原子平均截面的物理配置字符串用单引号括起。配置字符串语法以及.ncmat 文件中的基本晶体参数详见参考论文 [CKKM19] 以及 KC23] 官方维基百科上关于 NCrystal 的详细说明。在此示例中，散射和吸收模型的截面偏置因子均加倍。请注意，在特殊情况下，若某个因子设为零，则相应模型会从模拟中移除。

```
<material name="Al_biased">
   <atom value="physics=ncrystal;nccfg='Al_sg225.ncmat';
                scatter_bias=2.0;abs_bias=2.0"/>
</material>
```

清单 9: 使用用户指定的截面偏置因子定义理想铝多晶材料的示例

偏置因子默认值为 1。由公式 25可知，这实际上禁用了截面偏置机制。等价地，材料定义可以简化为仅传入 NCrystal物理配置字符串，如代码清单 10。

```
<material name="Al">
   <atom value="Al_sg225.ncmat"/>
</material>
```

清单 10: 定义与清单 9 相同的材料，但截面偏置因子为 1

对于取向各向同性高斯马赛克单晶，为了无歧义地定义晶胞取向，应指定米勒指数中的两个不平行向量及其对应的实验室方向 [CK20a]。例如，下面给出了 Ge-511 单色器的定义。

```
<material name="Ge">
  <atom value="Ge_sg227.ncmat;mos=0.3deg;
              dir1=@crys hkl:5.1.1@lab:0.0.1:
              dir2=@crys hkl:0.1.-1@lab:1.0.0"/>
</material>
```

清单11： 具有 0.3° 各向同性高斯马赛克度对于层状晶体，即由平行层组成的晶体，还应指定层法线轴，即层的平均法线 [KC21] 如清单 12所示。请注意，如果配置字符串中已嵌入层法线轴，则无需重复指定，因为它已包含在 `.ncmat` 输入文件中。

```
<material name="Graphite">
  <atom value="C_sg194_pyrolytic_graphite.ncmat;mos=2deg;
              dir1=@crys hkl:0.0.2@lab:0.0.1:
              dir2=@crys hkl:1.0.0@lab:1.0.0:
              lcaxis=0.0.1"/>
</material>
```

清单12： 具有 2° 马赛克度的热解石墨-002 层状晶体

后端引擎还支持所谓的“非结构化材料” [KC23]，*freegas::* 和 *solid::*。它们非常适合描述气态材料或强吸收材料，在这些材料中，原子尺度的构型对总截面的贡献微不足道。 *freegas::* 类型的材料使用经典二体碰撞模型处理散射，而 *solid::* 类型的材料模型则使用德拜态密度的声子展开法来准备非弹性散射函数。对于后一种材料类型，还包括额外的非相干弹性散射。

```
<material name="Air">
    <atom value="freegas::N78O22/1.225kgm3"/>
</material>
<material name="enriched_B4C">
    <atom value="solid::B4C/2.5gcm3/B_is_0.95_B10_0.05_B11"/>
</material>
```

清单13： 定义含78% N和22% O的干燥空气，以及含95% ^{10}B和5% ^{11}B的富集B_4C固体的示例

镜面模型以表面过程的形式实现。应将其附加到指定体积，以描述镜面反射。可以通过指定镜面

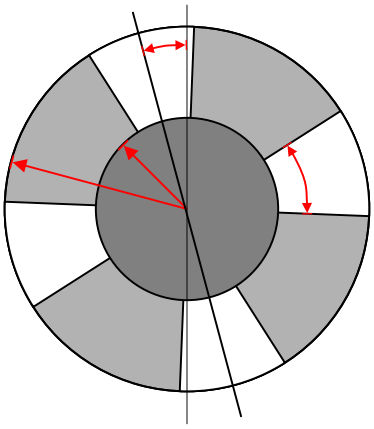


图5： DiskChopper 的示意图，其中 $n = 4$ 开口窗口用于 Prompt；phase 表示相对于原点（时间为零时的位置）偏离的角度，theta0 表示每个窗口的开口角，r 表示内半径，R 表示外半径（即 DiskChopper 所连接管的半径）。

并将SurfaceProcess 关联到体积来指定。示例见清单14。有关表面类型物理的更多讨论，请参阅第3.4节末尾。

```
<volume name="lv_Mirror">
    <solidref ref="solid_mirror"/>
    <materialref ref="Si"/>
    <auxiliary auxtype="BoundaryPhysics" auxvalue="physics=MirrorPhyiscs;m=2.0"/>
</volume>
```

清单14： 定义镜面的示例，其中 m=2，参见公式 26

一个 DiskChopper 是 Prompt 中的一种光线追踪物理组件，其功能类似于DiskChopper组件。清单 15给出了一个示例，其中向模拟中添加了一个 DiskChopper 。参数列于表 4中。磁盘的几何结构如图 5所示。半径为r 的中心圆形区域对中子完全不透明。磁盘上有 $n = 4$ 个周期性开口窗口，它们均匀分布在 2π中。窗口的角度由 θ_0定义。正值旋转频率表示遵循右手定则的旋转方向。

```
<solids>
    <tube lunit="mm" name="solid_DiskChopper" rmin="0.0" rmax="250.0" z="0.001"
        deltaphi="360.0" startphi="0.0"/>
</solids>
<structure>
    <volume name="lv_DiskChopper">
        <solidref ref="solid_DiskChopper" />
```

表4： DiskChopper 的参数。所有参数均为必填项。

参数	描述	Unit
r	圆盘斩波器的内半径	mm
n	窗口数量。如果定义了多个窗口，它们将在 2π 中均匀排列。	1
rotFreq	旋转频率。	Hz
theta0	每个窗口的开口角。	°
相位	相对于零时刻的位置发生偏转的角度。	°

```
      <materialref ref="Vacuum" />
      <auxiliary auxtype="SurfaceProcess" auxvalue="physics=DiskChopper;
          rotFreq=100; r=130; theta0=20; n=4; phase=0"/>
   </volume>
</structure>
```

清单15： 定义如图所示的圆盘斩波器的示例 5

3.6. 一个最小示例

这里给出了一个经过简化但包含大多数已介绍元素的示例。第一步，准备一个采用GDML 格式、名为example.gdml的输入文件，如清单16所示。在此示例中，来自铝粉末样品的德拜-谢乐锥面 2.2 °入射中子由位置灵敏探测器测量。

图6a 展示了一千条中子轨迹的可视化效果。可以通过以下命令重现：

```
#!/bin/bash
Prompt -g example.gdml -v -n 1000
```

可以在不使用可视化工具的情况下执行生产运行：

```
#!/bin/bash
prompt -g example.gdml -n 5e6
```

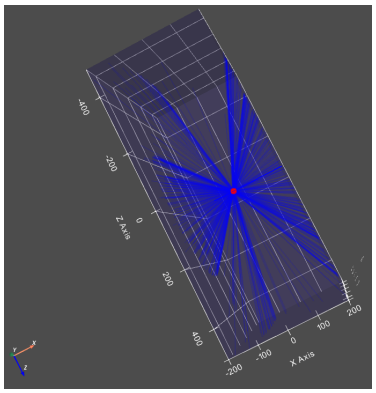
模拟结束后，会生成探测器的热图以及相应的 Python 脚本模板。如图所示，6b，运行以下命令即可将位置灵敏计分的对数刻度热图可视化

```
#!/bin/bash
Python ScorerPSD_NeutronHistMap_view.py -l
```

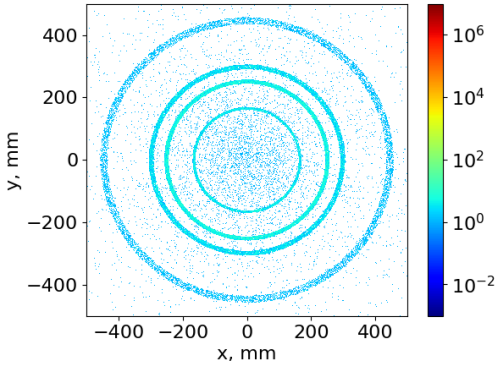
需要注意的是，所创建的 Python 脚本的文件名称取决于计分器的配置。

```
<gdml>
    <userinfo>
        <!-- Defining gun -->
        <auxiliary auxtype="PrimaryGun" auxvalue="gun=SimpleThermalGun;
             energy=0.0169; position=-80.,0.,0.; direction=1,0,0" />
    </userinfo>
    <materials>
        <!-- Defining material -->
        <material name="Universe">
          <atom value="freegas::H1/1e-26kgm3"/>
        </material>
        <material name="Al">
          <atom value="Al_sg225.ncmat"/>
        </material>
    </materials>
    <solids>
        <!-- Defining solid -->
        <box lunit="mm" name="WorldSolid" x="400.0" y="1000.0" z="1000.0" />
        <box lunit="mm" name="SampleSolid" x="10.0" y="10.0" z="10.0" />
    </solids>
    <structure>
        <!-- Defining geometry tree and hierarchy of volumes -->
        <volume name="VolSample">
            <solidref ref="SampleSolid" />
            <materialref ref="Al" />
        </volume>
        <volume name="VolWorld">
            <solidref ref="WorldSolid" />
            <materialref ref="Universe" />
            <!-- Defining PSD scorer and attaching it to World -->
            <auxiliary auxtype="Scorer" auxvalue="Scorer=PSD;
                 name=NeutronHistMap; xmin=-500; xmax=500; numBins_x=1000;
                 ymin=-500; ymax=500; numBins_y=1000; ptstate=EXIT; type=YZ"/>
            <physvol name="PhysVol_Sample">
                <volumeref ref="VolSample" />
            </physvol>
        </volume>
    </structure>
    <setup name="Default" version="1.0">
        <world ref="VolWorld" />
    </setup>
</gdml>
```

清单16： Prompt 中输入脚本的最小示例，example.gdml



(a) 德拜-谢乐的可视化使用 Prompt 重现的圆锥，使用铝粉



(b) PSD 计分器捕获的中子，德拜-谢乐圆锥以四个圆形呈现

图 6： 模拟任务的可视化与计分结果

4. 应用与基准测试

在第 4.1节中，将总散射技术应用于重水样品，以研究截面偏置技术对多重散射的有效性。在第 4.2 节中，模拟了一个包含单晶单色器的最小值静态源粉末衍射仪图样。第 4.3 节介绍了作为入射波长函数的平方形中子导管模拟。在第 4.4 节中使用复杂几何结构，以讨论几何结构对整体计算速度的影响。第 4.5节介绍了一种运动光学组件——圆盘斩波器，展示了射线追踪过程模拟的能力。

4.1. 总散射

在一个完美的球形探测器中模拟了一个重水样品。图 7 展示了几何结构和 100 条中子轨迹的可视化结果。在模拟中，使用 `SimpleThermalGun` 以 3.635 电子伏特沿正 z 轴方向发射中子。在粒子枪下游 10 米处，探测器中心放置了一个半径为 12 毫米的球形样品；探测器的内半径为 2000 毫米，厚度为 1 毫米。一个 `MultiScat` 计分器

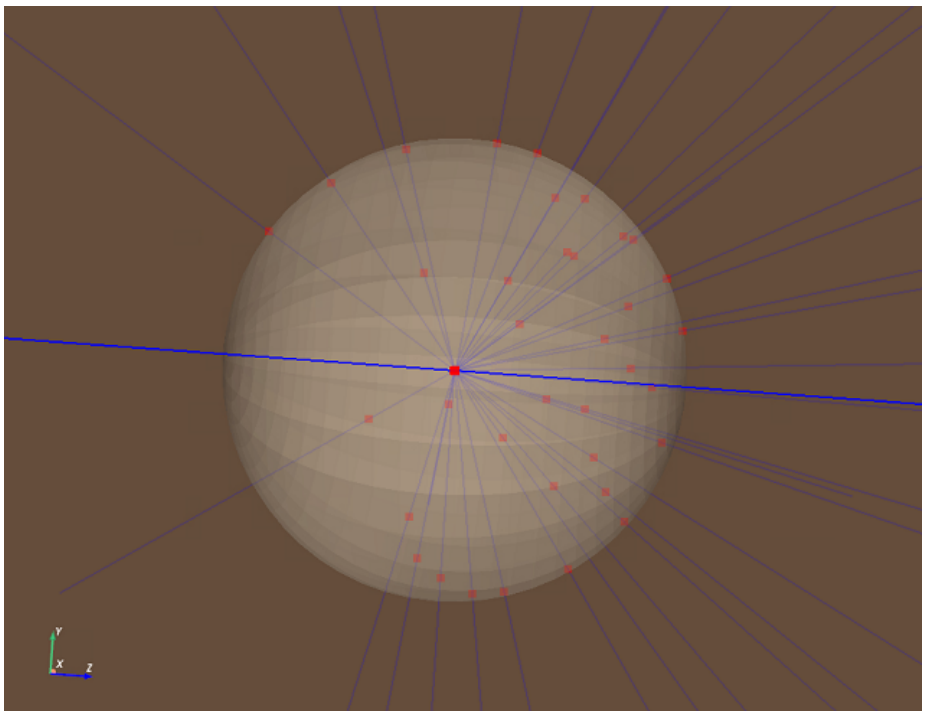


图 7：总散射模拟的几何可视化

附着在样品上，并与探测器配合使用，以分析已探测事件的散射次数。

一些DeltaMomentum 计分器由进入PTS触发，并附着在探测器上，以获得样品中不同时刻发生散射的中子的动量转移分布。由于探测器具有特殊的几何结构，累积的单次散射 $P(Q$与静态结构因子成正比 $S(Q)$。另一方面，重水所采用的CAB [DGM14]截面是在Sk¨old近似下使用式19生成的。因此，模拟得到的结构因子与截面生成中使用的$S_{j,\ j'}(Q)$——部分静态结构因子——相关。

图8中，将未进行偏置的样品的单次散射动量转移分布，与Soper测得的重水干涉微分散射截面（DCS）进行了比较 [Sop13]。模拟结果的结构总体上与测量结果相似，但峰的宽度略有不同。此外，模拟未能再现曲线在最低 Q 处的上升趋势。观测到的差异可以用截面计算中所用静态结构因子与测量所得静态结构因子之间的差异来解释。

如式 19所示，对于多原子系统，应使用部分静态结构因子。为获得这些因子，需要将测量数据拟合到微观模型，以确定候选原子结构。因此，峰宽的差异可能是由拟合过程引入的。其次，实验数据在较低 Q 处的升高是由液体密度涨落导致的；拟合模型可能未纳入这种涨落，因此截面中也未包含它。

图 9 展示了通过无偏模拟和有偏模拟得到的不同散射次数中子的动量转移分布 $P(Q)$ 对比。当 Q 小于 $3\ ^{\circ}\mathrm{A}^{-1}$ 时， $P(Q)$ 的所有散射情形与单次散射几乎无法区分。然而，随着 Q 值增大，它们之间的差异也随之增大，这表明多次散射变得越来越显著。

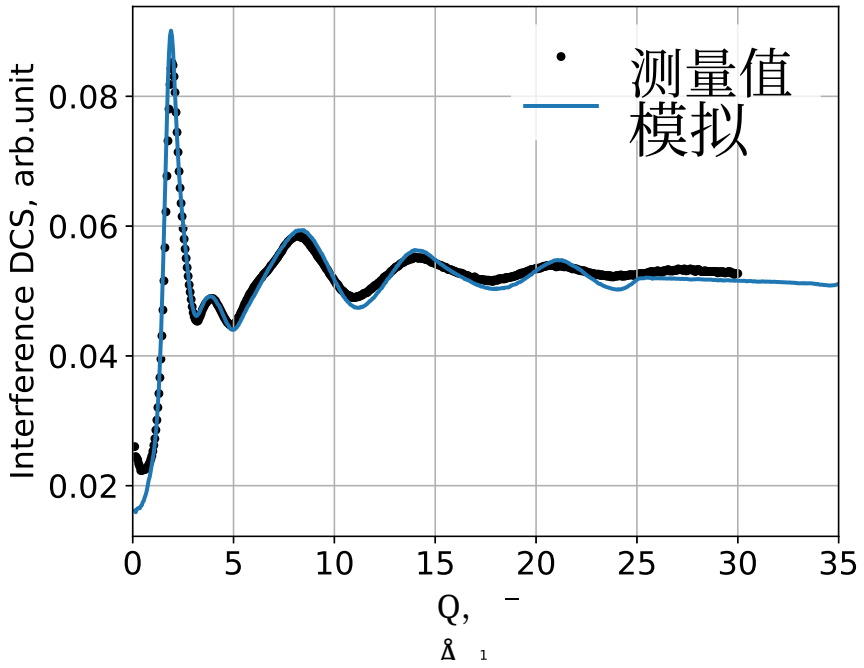


图 8： Prompt 模拟结果的归一化与 `Prompt` 和来自 Soper 的测量结果之间的比较 [Sop13]

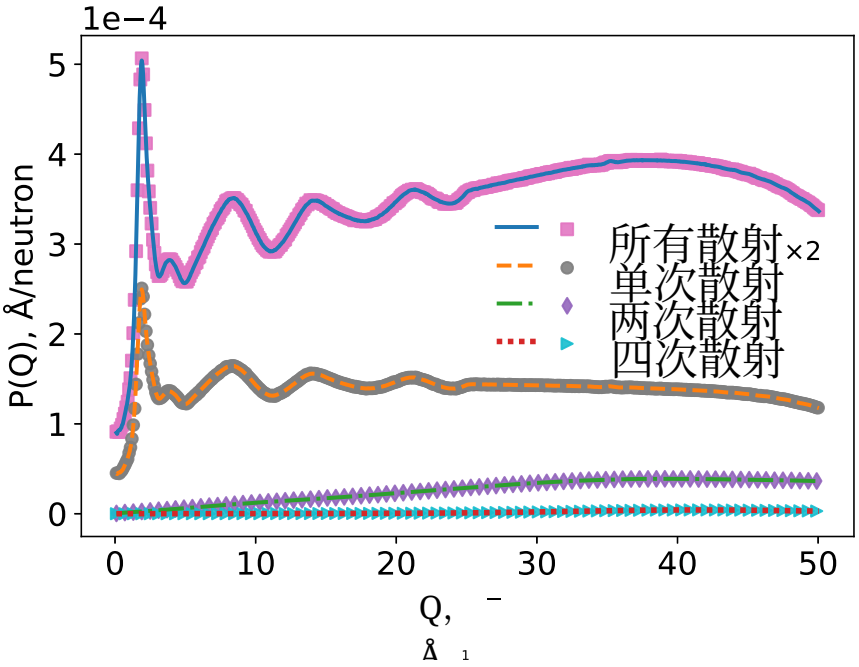


图 9：非有偏模拟和有偏模拟中，不同散射次数下的 $P(Q)$ 对比。实线、虚线、点划线和点线分别表示非有偏模拟中所有散射、单次散射、两次散射和四次散射的结果；正方形、圆形、菱形和右三角形表示有偏模拟的结果。

相同散射次数的两次运行结果相互重叠，因此应用截面偏置技术时，概率得以守恒。虽然偏置运行的入射中子数仅为非偏置运行的 10%，但两者的结果在统计上几乎等效。因此，截面偏置技术能够显著提高计算效率。

4.2. 粉末衍射

模拟了一个中子粉末衍射示例`Prompt`，采用挪威 JEEP II 反应堆 PUS 的实验配置 [HFS+00]。图 10 展示了几何结构的可视化效果以及 100 条中子轨迹。

在此示例中，使用 `UniModerator` 粒子枪作为慢化体，慢化体和狭缝的宽度和高度均为 40 mm，慢化体距下游狭缝 1.9 m。中子在 0.05 °A 区间内均匀分布，平均波长为 1.54 °A。下游设有一个 $15'$ α_1 Soller 准直系统，由 22 片 B_4C 叶片组成。将一台包含九个 Ge-511 单晶的弯曲单色器建模为单个板状几何体。这种简化忽略了单色器带来的聚焦效应，可能会对样品处通量产生较大影响，并轻微改变仪器分辨函数。在模拟中，一个尺寸为 54 mm$\times$116 毫米 $\times$ 8 毫米、马赛克度为 $16'$ 的锗单晶放置在原点。其前表面与 511 反射晶面平行。入射中子的标称掠射角为45°。在实验中，单色中子的平均波长为1.5449 ° A [HFS+00]。为与之匹配，原始 `NCrystalGe sg227.ncmat` 文件中的晶格常数相应调整为 5.7131 °A。单色器下游，在屏蔽墙内嵌入了一条长 1015 mm 的梯形束流通道，作为仪器的 α_2 准直器。其有效发散角为 $1.41°$。样品沿负 y 轴方向放置在距离单色器 2.75 m 处。为免去典型实验中的探测器校准程序，使用球形 4π 探测器覆盖所有立体角

-

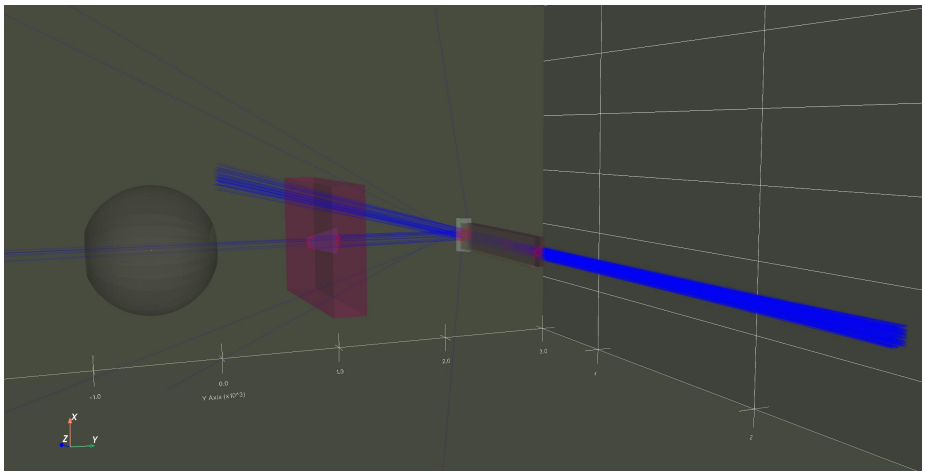


图10： 模拟的 PUS 仪器可视化图

在 20° 和 160° 出射角之间。为消除任何各向异性效应，样品也被制成半径为 2.5 毫米的球形。

图 11 展示了 Al_2O_3 样品的模拟粉末衍射图。通过对齐 143 峰，模拟数据和测量数据均进行了归一化处理 124.1°。模拟很好地捕捉到了图样的强度和分辨率特性，二者吻合得非常好。然而，实验数据在接近零度时呈上升趋势，模拟中却未观察到类似现象。在实验中，样品与探测器之间的散射环境充满了氦；而在简化模拟中，该环境实际上是真空。这种差异很可能是由于未对气体中的散射进行建模所致。

4.3. 中子导管

在 McStas 光学示例中的 Test Guides.instr 设置已在 `Prompt`中复现。模拟世界包含两个位置灵敏探测器和一根导管。图 12 展示了几何结构的可视化图以及 100 条中子轨迹。

前方位置灵敏探测器，即附带 PSD ENTRY 型计分器的真空箱，放置在距离 50 毫米×50 毫米慢化体表面 1 m 处，该表面

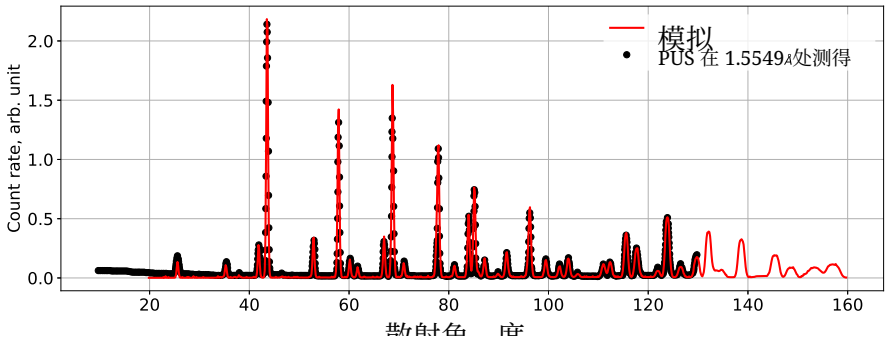


图11： 模拟 Al_2O_3 粉末衍射图 at PUS

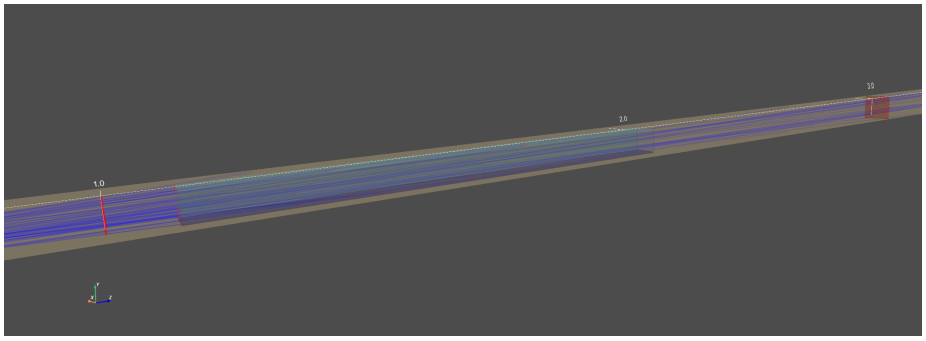


图12： 导管模拟的几何可视化

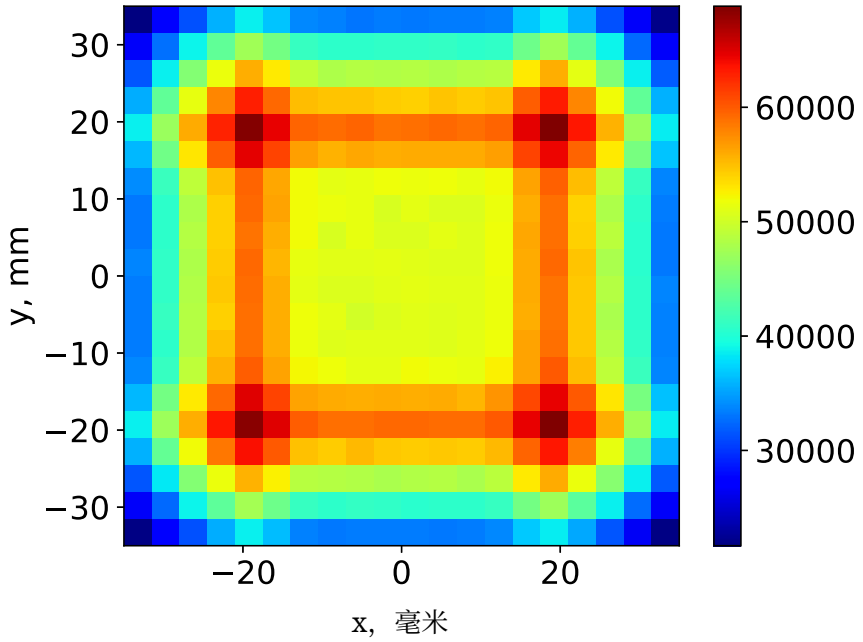


图13： 后位置灵敏探测器图样

正在发射 3.39 °A 个中子。使用四个盒体组成一个 $m = 1$ 直导管，其内部开口为 50 毫米×50毫米×1000毫米的盒体。导管入口位于前探测器之后 100 毫米处。此外，沿直线在距离源 3.2 米处放置了一个后位置灵敏探测器。

在基准测试中， 10^8 使用一台 2021 年年中推出的主流笔记本电脑，模拟中子约需 140 秒。由于 m 值过低，无法准确反映这种发散单色束，只有约 19.34% 的中子到达后探测器。探测器上的图样如图13所示。可以看出导管的方形形状，四个角也清晰可辨。McStas 对同一探测器进行模拟所得的图样与`Prompt`的结果相同，因此不再展示。

将后探测器的积分强度按前探测器计数进行归一化，并与 McStas 的结果进行比较。不出所料，由于反射率模型相同，这两个软件包的曲线完全重合。

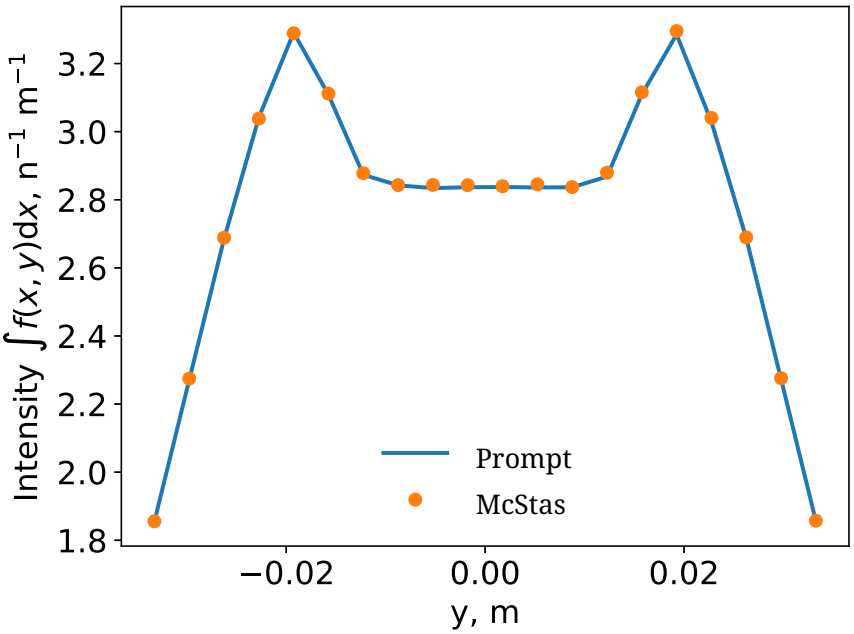


图14: Prompt模拟的积分权重与McStas所得结果的比较

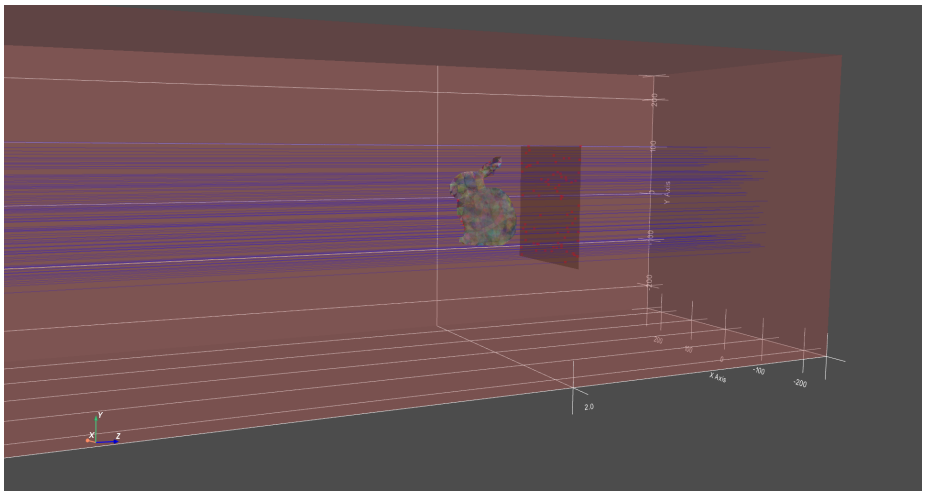


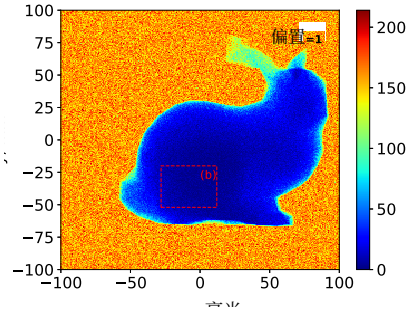
图15：关于斯坦福兔子中子成像的模拟任务可视化。为清晰起见，图中显示了100个中子。

然而，值得注意的是，McStas 完成模拟所需的时间约为一半。可能是因为 `Prompt` 中的几何模块（即 VecGeom）不如 McStas 中使用的光线追踪算法高效。另一方面，`Prompt` 能够对复杂几何体进行建模，具体讨论见第 4.4 节。

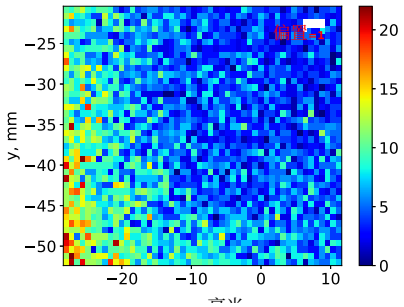
4.4. 斯坦福兔子

一个斯坦福兔子 [TL94] 使用 `Prompt` 在成像装置中进行模拟。几何可视化如图 15所示。兔子原本采用表面网格格式，使用 TetGen [Han15] 代码生成了一个由总计 2441 个实体构成的四面体网格。在模拟中，兔子由钒制成，高度约为 15 cm。兔子受到平行单色 $2\ ^{\circ}\mathrm{A}$ 中子束照射。束流尺寸为 $0.2\,\mathrm{m}\times0.2\,\mathrm{m}$。在兔子后方设置了一个 进入 类型的位置探测器，用于测量透射图样。

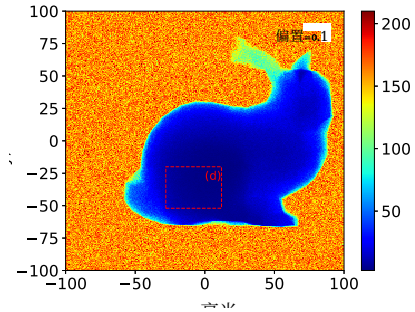
采用两种不同的吸收偏置（1 和 0）进行了两次模拟。探测器记录的图像如图 16所示。在图 16a和图 16c中，均可清楚地观察到物体的形状。偏置模拟与无偏情况所得结果在视觉上完全相同。



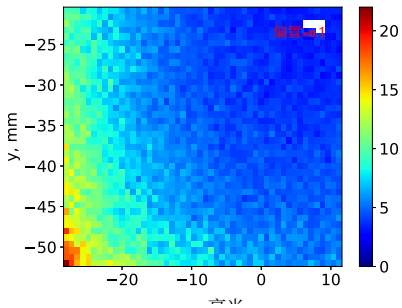
(a) PSD 图像，吸收偏置设为 1。0， 1×10^7 中子



(b) 放大 PSD 图像，吸收偏置设为 1。0， 1×10^7 中子



(c) PSD 图像，吸收偏置设为 0。1， 1×10^7 中子



(d) 放大 PSD 图像，吸收偏置设为 0.1， 1×10^7 中子

图16： 从 PSD 计分器记录的图像及其放大图像。吸收偏置分别设为 1 和 0.1。吸收偏置为 0.1 的图像看起来“更平滑”。

为比较这两次模拟的统计不确定性，分别将图 16a 和图16c矩形框内的区域放大，得到图16b和图 16d。显然，吸收偏置设为 0。1 的模拟（图 16c 和图 16d）的波动远小于偏置为 1 的模拟（图 16a 和图 16b），这表明截面偏置机制在本例中具有方差缩减的能力。

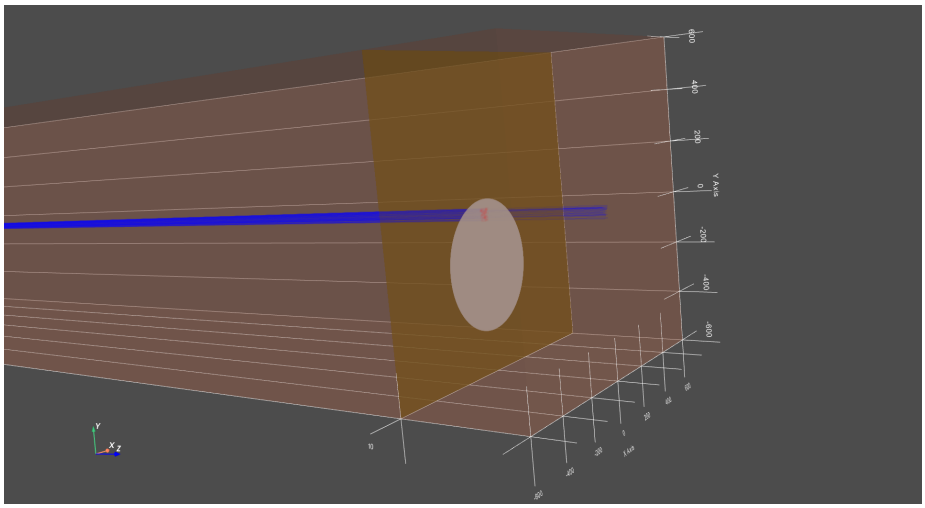


图17： Prompt 中 DiskChopper 模拟的可视化，包含 100 个中子

4.5. 斩波器

这里展示了一个圆盘斩波器模拟示例，并将结果与 McStas 进行基准测试，以展示 Prompt 在中子光学元件模拟方面的能力。

模拟如图 17 所示。一个圆盘状（厚度可忽略的管状）斩波器设有 4 个轴对称排列的 20° 窗口，其外半径和内半径分别为 0.25 米和 0.13 米，旋转频率为 100 Hz，位于距 `MaxwellianGun` 10 米处。该装置产生 293 K 麦克斯韦分布的中子，发射口径为 1 毫米$\times$1 毫米，另一端 10 米外设有一个 45 毫米$\times$45 毫米开口。还在 McStas 中复现了相同的装置，以对`Prompt`中的实现进行基准测试。斩波器后方紧邻处设有飞行时间计分器，用于测量斩波器对束流的影响。

飞行时间谱在图中进行了比较。 18。 `Prompt` 产生了与 McStas 相同的图样。时间轴上均匀分布着八个峰，间隔为 25 ms。这与中子束流看到开口窗口时的 400 Hz 频率一致。

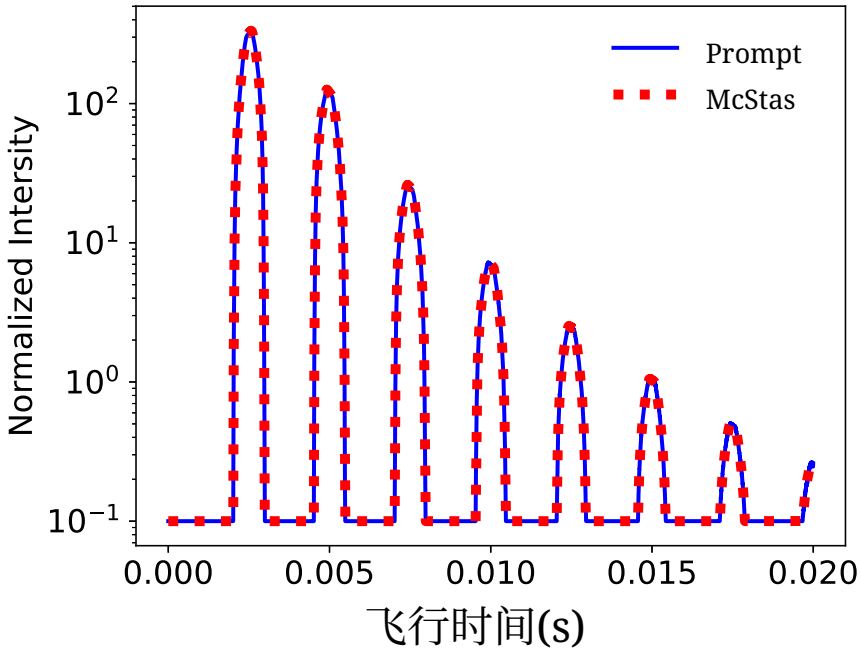


图18： 对 Prompt 的 DiskChopper 与 McStas 的 DiskChopper 进行基准测试

5. 展望

本文介绍了一种热中子模拟系统。作为独立系统，它有望应用于中子仪器表征、优化和数据分析领域。

该系统是中国散裂中子源模拟系统（Cinema）中的蒙特卡罗模块。两个相关的截面计算模块 Trajectory Analysis Toolkit（Tak） [DC22] 和 PiXiu 目前正在积极开发中。它们分别是分子动力学和密度泛函理论计算的后分析模块。预计整个系统将提供一套完整的工具链，用于根据样品的原子结构和势预测可与仪器探测器原始数据直接比较的数据。与Cinema并行，目前正处于机器学习框架的概念设计阶段。由于该模拟工具链可以将仪器和样品描述为参数，因此该框架的初步目标是优化这些参数。为配合这一框架，Prompt 预计很快将在最顶层完全采用 Python 实现。它可以实现为 Python GDML 操作器，或作为直接连接到VecGeom 代码的接口。无论采用哪种方式，该系统都将向后兼容本文介绍的GDML 用户输入。

作为一个开源软件项目，扩展该系统以支持更多应用十分简单。因此，Prompt 的未来发展在很大程度上取决于社区的兴趣。例如，对于几何体更复杂的模拟，可能需要边界重叠测试逻辑；支持更多粒子类型和物理模型，则有助于设计慢化体和屏蔽体。该系统的发布带来了诸多可能，欢迎反馈和建议。

致谢

本研究得到国家自然科学基金委员会（项目编号：12075266）和国家重点研发计划（项目编号：2022YFA1604100）的资助。作者谨此感谢各方提供的宝贵讨论和大力支持。

参考文献

[A+05] G Amadio 等。GeantV：高能物理领域并发矢量粒子输运模拟原型的研究结果（2020），2005。

[ASL+12] D. L. Abernathy、M. B. Stone、M. J. Loguillo、M. S. Lucas、O. Delaire、X. Tang、J. Y. Y. Lin 和 B. Fultz。散裂中子源 ARCS 宽角度范围斩波器谱仪的设计与运行。《科学仪器评论》，83(1):015114，2012年。

[Ber17] Mads Bertelsen。中子散射仪器模拟与设计软件。博士论文，哥本哈根大学理学院尼尔斯·玻尔研究所，Nano . . .，2017。

[CK20a] X.-X. Cai 和 T. Kittelmann。NCrystal：热中子输运库。《计算机物理通讯》，246:106851，2020。

[CK20b] X.-X. Cai 和 T. Kittelmann。Ncrystal：用于热中子输运的库。《计算机物理通讯》，246：106851，2020。

[CKKM19] X.-X. Cai、T. Kittelmann、E. Klinkby 和 J.I. M´arquez Dami´an。《基于拒绝的非弹性中子散射采样》。《计算物理学杂志》，380：400–407，2019。

[CKL+18] Jie Chen、Le Kang、Huaile Lu、Ping Luo、Fangwei Wang 和 Lunhua He。《中国散裂中子源通用粉末衍射仪》。《Physica B：凝聚态物理》，551：370–372，2018。第11届国际中子散射会议（ICNS 2017）。

[CMPS06] Radovan Chytracek、Jeremy McCormick、Witold Pokorski 和 Giovanni Santin。用于物理模拟和分析应用的几何描述标记语言。IEEE核科学汇刊，53(5):2892–2896，2006年。[Cre13] Jay Theodore Cremer。具有关联的Small Angle Scatter、散射和中间函数。载于《成像与电子物理进展》，第175卷，第1–111页。爱思唯尔，2013年。[DC22] Rong Du 和 X.-X. Cai。用于计算液体热中子截面的卷积离散傅里叶变换方法。《计算物理学杂志》，466:111382，2022年。

[DGM14] J.I. M´arquez Dami´an、J.R. Granada 和 D.C. Malaspina。水的CAB模型：采用ENDF-6格式对轻水和重水热中子散射定律的新评估。《核能年鉴》，65:280–289，2014年。

[DSTH99] L. L. Daemen、P. A. Seeger、T. G. Thelliez 和 R. P. Hjelm。用于中子散射仪器模拟的蒙特卡罗工具。《AIP会议论文集》，479(1):41–46，1999。[EPN+11] G. Ehlers、A. A. Podlesnyak、J. L. Niedziela、E. B. Iverson 和 P. E. Sokol。散裂中子源的新型冷中子斩波谱仪：设计与性能。《科学仪器评论》，82(8):085108，2011。[gdm22] GDML用户指南。https://gdml.web.cern.ch/GDML/doc/GDMLmanual.pdf，2022。[最后修改于 06/10/2022]。

[Han15] Si Hang。TetGen，一种基于Delaunay的高质量四面体网格生成器。《ACM数学软件汇刊》，41(2):11，2015。

[HFS+00] Bjørn C. Hauback、Helmer Fjellv˚ag、Olav Steinsvoll、Kjell Jo- hansson、Ole Tore Buset 和 Johny Jørgensen。挪威 Kjeller 的 JEEP II 反应堆上的高分辨率粉末中子衍射仪 PUS。《中子研究杂志》，8(3):215–232，2000 年。

[HMvdWea20] C.R. Harris、K.J. Millman、S.J. van der Walt 等。使用 NumPy 进行数组编程。《自然》，585:357–362，2020 年。

[KC21] T. Kittelmann 和 X.-X. Cai。《NCrystal》的弹性中子散射模型。《计算机物理通讯》，267:108082，2021 年。

[KC23] Thomas Kittelmann 和 蔡潇潇。NCrystal 维基百科。https://github.com/mctools/ncrystal/wiki，2023。最后访问于 2023 年 2 月 1 日。

[KKK+17]T. Kittelmann、E. Klinkby、E.B. Knudsen、P. Willendrup、X.X. Cai 和 K. Kanaki。《蒙特卡罗粒子列表：MCPL》。《计算机物理通讯》，218:17–42，2017年。

[KNI+11] Ryoichi Kajimoto、Mitsutaka Nakamura、Yasuhiro Inamura、Fumio Mizuno、Kenji Nakajima、Seiko Ohira-Kawamura、Tetsuya Yokoo、Takeshi Nakatani、Ryuji Maruyama、Kazuhiko Soyama、Kaoru Shibata、Kentaro Suzuya、Setsuo Sato、Kazuya Aizawa、Masatoshi Arai、Shuichi Wakimoto、Motoyuki Ishikado、Shinichi Shamoto、Masaki F ujita、Haruhiro Hiraka、Kenji Ohoyama、Kazuyoshi Yamada 和 Chul-Ho Lee。《J-PARC上的费米斩波器谱仪4SEASONS》。Journal of the Physical Society of Japan，80(Suppl.B):SB025，2011年。

[KYN+19] Ryoichi Kajimoto、Tetsuya Yokoo、Mitsutaka Nakamura、Yukinobu Kawakita、Masato Matsuura、Hitoshi Endo、Hideki Seto、Shinichi Itoh、Kenji Nakajima 和 Seiko Ohira-Kawamura。J-PARC中子谱仪的现状。Physica B：凝聚态物理，562:148–154，2019年。

[LBC+11] Mats Lindroos, S Bousson, RCalaga, H˚akan Danared, G De- vanz, R Duperrier, J Eguia, Mohammad Eshraqi, SGam-mino, H˚akanHahn,等。欧洲散裂源。《核物理研究中的核仪器与方法》B辑：束流与材料相互作用及原子，269(24):3258– 3260，2011。

[LN99]Kim Lefmann 和 Kristian Nielsen。McStas，一款用于中子射线追踪模拟的通用软件包。《Neutron News》，10(3):20–23，1999年。

[LNA+06] K.Lefmann, Ch. Niedermayer, A.B. Abrahamsen, C.R.H. Bahl, N.B. Christensen, H.S. Jacobsen, T.L. Larsen, P. H¨afliger, U. Filges 和 H.M. Rønnow。充分发挥 RITA谱仪的全部潜力。Physica B：凝聚态物理，385- 386:1083–1085，2006。

[Lov84]S W Lovesey。凝聚态物质的中子散射理论。第1卷：核散射。牛津科学出版社，1984年1月。

[MAA+06] T.E. Mason、D. Abernathy、I. Anderson、J. Ankner、T. Egami、G. Ehlers、A. Ekkebus、G. Granroth、M. Hagen、K. Herwig、J. Hodges、C. Hoffmann、C. Horak、L. Horton、F. Klose、J. Larese、A. Mesecar、D. Myles、J. Neuefeind、M. Ohl、C. Tulk、X-L. Wang 和 J. Zhao。《橡树岭散裂中子源：材料研究的有力工具》。Physica B：凝聚态物理，385-386：955–960，2006年。

[MK10] R. MacFarlane 和 A. Kahler。《使用 NJOY 处理 ENDF/B-VII 的方法》。Nucl. Data Sheets，111(12):2739–2890，2010。[MW12] Marcus H. Mendenhall 和 Robert A. Weller。《一种用于蒙特卡罗粒子输运计算中方差缩减的守概率截面偏倚机制》。Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment，667:38–43，2012年。

[OMR+04] M Ohl、M Monkenbusch、D Richter、C Pappas、K Lieutenant、Th Krist、G Zsigmond 和 F Mezei。用于 SNS 的高分辨率中子自旋回波谱仪，带有 $\tau \geq 1$ μs。《Physica B：凝聚态物理》，350(1-3):147–150，2004年。

[RSS62] A. Rahman、K. S. Singwi 和 A. Sj¨olander。液体慢中子散射理论 I。《Phys. Rev.》，126:986–996，1962年5月。

[Sch14]Helmut Schober。《凝聚态物质中核中子散射理论导论》。《中子研究杂志》，17(3-4):109 – 357，2014年。[SD04]Philip A Seeger 和 Luke L Daemen。《中子仪器模拟软件包 NISP》。载于《X 射线与中子光学计算方法进展》，第5536卷，第109–123页。SPIE，2004年。[SDJE06] J. R. Santisteban、M. R. Daymond、J. A. James 和 L. Edwards。《ENGIN-X：第三代中子应变扫描仪》。《应用晶体学杂志》，39(6):812–825，2006年12月。[Sj¨o58] Alf Sj¨olander。《晶体慢中子散射中的多声子过程》。《Arkiv F¨or fysik》，14(21):315–371，1958年。

[˘SK97] J ˘Saroun 和 J Kulda。《RESTRAX——用于 TAS 分辨率计算和扫描轮廓模拟的程序》。《Physica B：凝聚态物理》，234:1102–1104，1997年。[SK04] Jan Saroun 和 Jiri Kulda。《使用 RESTRAX 进行中子射线追迹模拟和数据分析》。载于《X射线与中子光学计算方法进展》，第5536卷，第124–133页。SPIE，2004年。[Sk¨o 67] Kurt Sk¨old。《液态氩对冷中子的小能量转移散射》。《物理评论快报》，19:1023–1025，1967年10月。[Sop13] Alan K Soper。《从辐射总散射实验推导出的水的径向分布函数：我们究竟能确定什么？》《国际学术研究公告》，2013年，2013。[Squ12] G. L. Squires。《热中子散射理论导论》。剑桥大学出版社，第3版，2012年。[SSP95] Varley F. Sears、Eric C. Svensson 和 Brian M. Powell。《钒的声子态密度》。《加拿大物理学杂志》，73:726–734，1995年。[Tay06] Andrew Taylor。《ISIS 设施的 PROGRESS》。《Physica B：凝聚态物理》，385-386:728–731，2006年。[TL94]Greg Turk 和 Marc Levoy。《由距离图像生成的缝合多边形网格》。载于《第21届计算机图形学与交互技术年会论文集》，第311–318页，1994年。[VH54] L´eon Van Hove。《相互作用粒子系统中的时空关联与玻恩近似散射》。《物理评论》，95:249–262，1954年7月。

[WCC+09]Jie Wei、Hesheng Chen、Yanwei Chen、Yuanbo Chen、Yun- long Chi、Changdong Deng、Haiyi Dong、Lan Dong、Shouxian Fang、Ji Feng 等。中国散裂中子源：设计、研发与展望。《核仪器与方法物理研究 A 部分：加速器、能谱仪、探测器及相关设备》，600(1):10–13，2009 年。

[WFK+22] P.Willendrup、E. Farhi、E. Knudsen、U. Filges 和K. Lefmann。《中子射线追踪软件包 McStas 组件手册》，第 2.7.2 版。https://www.mcstas.org/download/components/2.7.2/doc/manuals/mcstas-components.pdf，2022 年 12 月。

[WL20] Peter Kjær Willendrup 和 Kim Lefmann。McStas (i)：简介、使用和射线追踪模拟的基本原理。《中子研究杂志》，22:1–16，2020。

[ZLM02] G Zsigmond、K Lieutenant 和 F Mezei。使用 VITESS（ESS 虚拟仪器工具）对中子散射仪器进行蒙特卡罗模拟。《Neutron News》，13(4):11–14，2002。

[ZLM+04] G Zsigmond、K Lieutenant、S Manoshin、HN Bordallo、JDM Champion、J Peters、JM Carpenter 和 F Mezei。《VITESS 对复杂中子系统模拟的综述》。《核仪器与方法物理研究 A 辑：加速器、光谱仪、探测器及相关设备》，529(1-3):218–222，2004年。

附录 A：支持的实体

附录 A.1：任意梯形

代码清单 A.1： 示例：任意梯形的定义

```
<arb8 单位="毫米" 名称="Arb8Solid" v1x="-30" v1y="-60" v2x="30" v2y="-60" v3x="50" v3y="60" v4x="-50" v4y="60" v5x="-30" v5y="-60" v6x="30" v6y="-60" v7x="50" v7y="60" v8x="-50" v8y="60" dz="70"/>
```

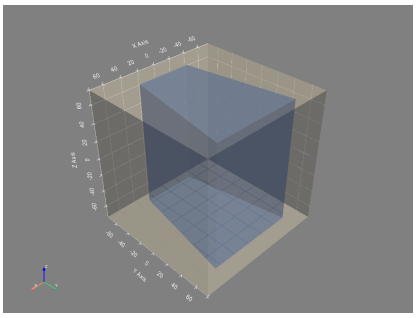


图 A.1： 任意梯形的可视化

表 A.1： 定义任意梯形的参数。若未指定，默认长度单位为 mm

参数	描述
v1x	顶点1的x坐标
v1y	顶点1的y坐标
v2x	顶点2的x坐标
v2y	顶点2的y坐标
v3x	顶点3的x坐标
v3y	顶点 3 的 y 坐标
v4x	顶点 4 的 x 坐标
v4y	顶点 4 的 y 坐标
v5x	顶点 5 的 x 坐标
v5y	顶点 5 的 y 坐标
v6x	顶点 6 的 x 坐标
v6y	顶点 6 的 y 坐标
v7x	顶点 7 的 x 坐标
v7y	顶点 7 的 y 坐标
v8x	顶点 8 的 x 坐标
v8y	顶点 8 的 y 坐标
dz	z 方向半长

附录 A.2。盒体

清单 A.2： 示例：盒体的定义。如果未指定，默认长度单位为 mm

```
<盒体 长度单位="毫米" 名称="BoxSolid" x="100.0" y="100.0" z="100.0"/>
```

表 A.2： 用于定义盒体的参数。如果未指定，默认长度单位为 mm

参数	描述
x	x 方向的半长
y	y 方向上的半长
z	z方向的半长

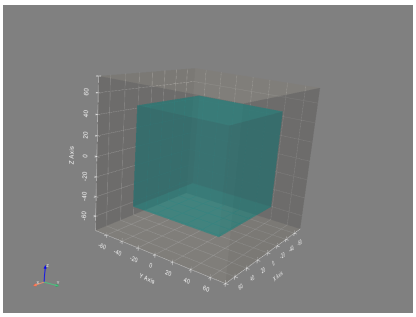


图 A.2： 盒体的可视化

附录 A.3. 圆锥

代码清单 A.3: 示例：圆锥的定义

```
<圆锥 aunit="度" lunit="毫米" 名称="ConeSolid" rmin1="0.0" rmax1=
↪"50.0"rmin2="0.0"rmax2="10.0" z="120.0" 角度增量="360.0"
↪起始方位角="0.0" />
```

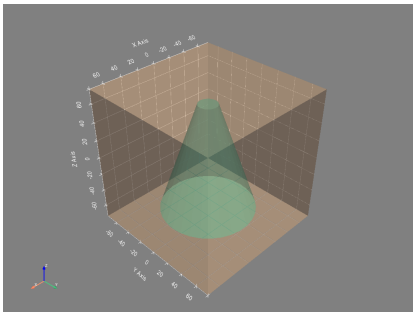


图 A.3： 圆锥的可视化

表 A.3： 用于定义圆锥的参数。若未指定，默认长度单位为mm，默认角度单位为 deg

参数	描述
rmin1	圆锥底部的内半径
rmax1	圆锥底部的外半径
r最小值2	圆锥顶部的内半径
r max2	圆锥顶部的外半径
z	圆锥段高度
startphi	分段的起始角度
角度增量	分段的角度

附录 A.4。CutTube

清单 A.4： 示例：cutTube 的定义

```
<cutTube单位="度" lunit="毫米" name="CutTubeSolid" rmin="10.0"↪rmax="
25.0"z="50.0" 角度增量="360.0" startphi="0.0" lowX="-5"↪lowY="-5" lowZ="-
5" highX="5" highY="5" 高 Z="5"/>
```

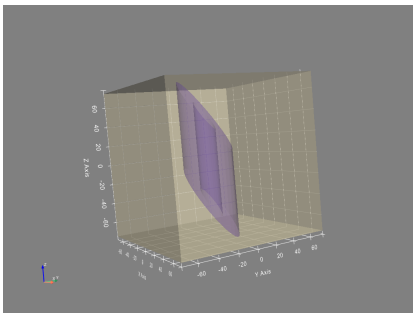


图 A.4： 切割管的可视化

表 A.4： 定义切管的参数。若未指定，默认长度单位为 mm，默认角度单位为 deg

参数	默认值	描述
z		沿 z轴 的长度
rmin	0.0	内半径
rmax		外半径
startphi	0.0	线段的起始 φ 角度
角度增量		角度的 delta phi
lowX		较低 z 平面的法线
lowY		较低 z 平面的法向量
lowZ		较低 z 平面的法向量
高X		上 z 平面处的法线
highY		上 z 平面法线
高 Z		上 z 平面处的法线

附录 A.5. 一般梯形

代码清单 A.5: 示例：一般梯形的定义

```
<梯形 单位="毫米" 名称="TrapSolid" z="130" thata="45" phi="45" y1=
↪"60" x1="40" x2="40" alpha1="45"      y2="60" x3="40" x4="40"
↪阿尔法2=“45”/>
```

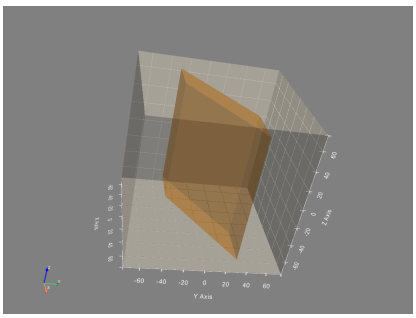


图 A.5： 一般梯形的可视化

表 A.5： 定义一般梯形的参数。若未指定，默认长度单位为 mm

参数	描述
z	沿z轴的长度
theta	与在 -/+z 处连接的各面之间的极角
phi	连接–z面中心与其中心的直线的方位角
	+z 面
y1	-z 面沿 y 轴的长度
x1	-z 面上 y 侧 = -y1 处沿 x 轴的长度
x2	-z 面上 y 侧 = +y1 处沿 x 轴的长度
alpha1	从 y 侧中心相对于 y 轴的角度
	= -y1 到 -z 处面的 y = +y1 中心
y2	面 +z 处沿 y 轴的长度
x3	= -y1 处 y 侧、 +z 处面的沿 x 轴的长度
x4	= +y1 处 y 侧、 +z 处面的沿 x 轴的长度
alpha2	从 y 处侧边中心相对于 y 轴的角度
	= -y2 到 +z 处面的 = +y2 中心

附录 A.6。双曲管

列表 A.6： 示例：双曲管的定义

```
<双曲柱体 长度单位="mm" 名称="HypeSolid" 内半径="10" 外半径="20" z="
100"实例="0.785" 外立体角="0.785"/>
```

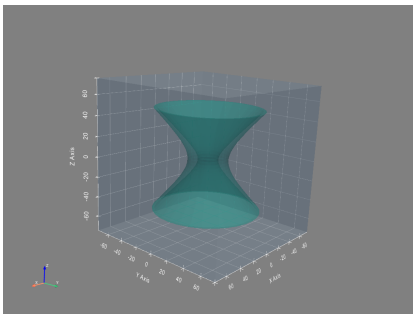


图 A.6： 双曲管的可视化

表 A.6： 定义双曲管的参数。如果未指定，默认长度单位为 mm。立体角单位只能是 rad

参数	描述
rmin	管的内半径
rmax	管的外半径
inst	内立体角
outst	外部立体声
z	z 长度

附录 A.7. 球体

代码清单 A.7： 示例：球体的定义

```
<球体 长度单位="mm" 名称="OrbSolid" 半径="50"/>
```

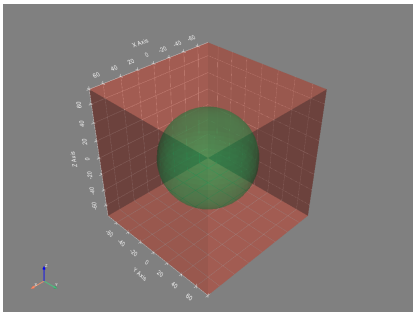


图 A.7： 球体的可视化

表 A.7： 定义球体的参数。若未指定，默认长度单位为mm

参数	描述
r	半径

附录 A.8. 抛物面

清单 A.8: 示例：抛物面的定义

```
<抛物面长度单位=“毫米”名称=“ParaboloidSolid”下内半径=“60.0”上内半径=“10.0“
dz=“60.0”/>
```

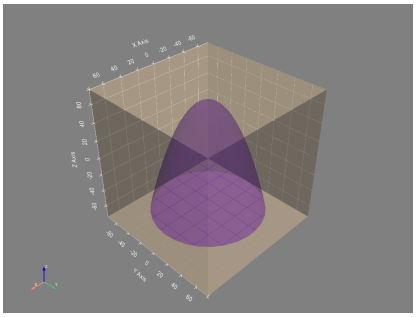


图 A.8: 抛物面的可视化

表 A.8: 定义抛物面的参数。若未指定，默认长度单位为 mm

参数	描述
`rlo`	-z 处的半径
`rhi`	+z 处的半径
`dz`	z 长度

附录 A.9. 多锥体

清单 A.9: 示例：多锥体的定义

```
<多锥体 角度单位="度" 长度单位="毫米" 名称="PolyconeSolid" 角度增量=
"360.0"  起始角="0.0">
    <z 平面最小半径="10.0" 最大半径="20.0" z="60.0"/>
    <z 平面最小半径="30.0" 最大半径="50.0" z="-50.0" />
</多锥体>
```

表 A.9: 定义多锥体的参数。若未指定，默认长度单位为 mm，默认角度单位为 deg

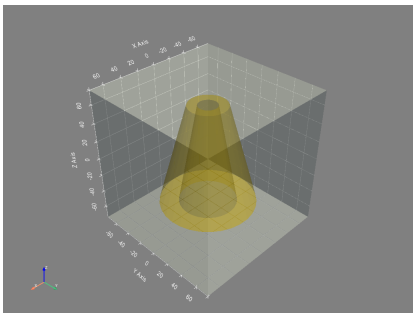


图 A.9： 多锥体的可视化

参数	默认值	子参数和描述	
起始方位角	0.0		扇段的起始角度
角度增量			分段角度
z 平面	0.0	`rmin`	此处圆锥内半径
		`rmax`	此处圆锥外半径
		`z`	平面的 z 坐标

附录 A.10. 多面体

代码清单 A.10: 一个示例：多面体的定义

```
<多面体aunit="度" lunit="毫米" 名称="PolyhedraSolid" 角度增量=
↪"360.0"startphi="0.0" numsides="6">
    <z 平面rmin="20.0" rmax="50.0" z="-50.0"/>
    <z 平面rmin="5.0" rmax="10.0" z="0.0"" />
    <z 平面r最小值="10.0"r最大值="30.0" z="60.0" />
</多面体>
```

表 A.10： 定义多面体的参数。如果未指定，默认长度单位为 mm，默认角度单位为 deg

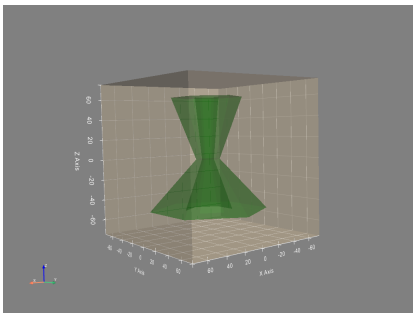


图 A.10： 多面体的可视化

参数	默认值	子参数及描述	
startphi			扇段的起始角度
角度增量			线段的角度
边数			边数
z 平面	0.0	`rmin`	此点处的圆锥内半径
		`rmax`	此处的圆锥外半径
		`z`	平面的 z 坐标

附录 A.11. 球体

代码清单 A.11: 示例：球体的定义

```
<球体角度增量单位="度" 长度单位="毫米" 名称="SphereSolid" 最小值半径="0.0"↪最大
值半径="60.0" 角度增量="180.0" 起始角="0.0" 角度增量="90.0"↪起始角="0.0"/>
```

表 A.11： 定义球体的参数。若未指定，默认长度单位为mm，默认角度单位为 deg

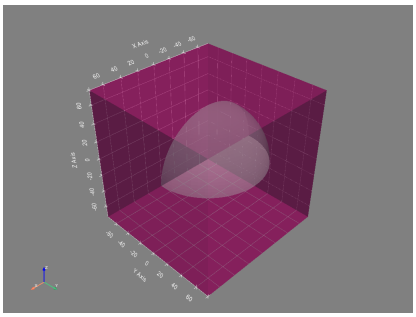


图 A.11: 球体的可视化

参数	默认值	描述
`rmin`	0.0	内半径
`rmax`		外半径
起始方位角	0.0	线段的起始角
角度增量		线段的角度增量
起始角	0.0	线段的起始角
角度增量		线段的角度增量

附录 A.12. 四面体

清单 A.12： 示例：四面体的定义

```
<定义>
    <位置名称="v1" x="-70"      y="-70" z="-60"/>
    <位置名称="v2" x="70"       y="-40" z="-60"/>
    <位置名称="v3" x="0"        y="60" z="-60"/>
    <位置名称="v4" x="0"        y="0" z="60"/>
</define>
<tet 名称="TetrahedronSolid" 顶点1="v1" 顶点2="v2" 顶点3=
↪"v3" 顶点4="v4"/>
```

表 A.12： 定义四面体的参数。如果未指定，默认长度单位为 mm

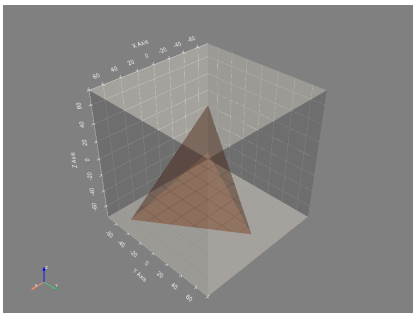


图 A.12： 四面体的可视化

参数	描述
顶点 1	顶点 1 位置
顶点 2	顶点 2 位置
顶点3	顶点3位置
顶点4	顶点4位置

附录 A.13. 梯形

代码清单 A.13: 示例：梯形的定义

```
<梯形体单位="毫米" 名称="梯形实体" x1="50"x2="100"y1="60"y2="80↪" z="130"/
>
```

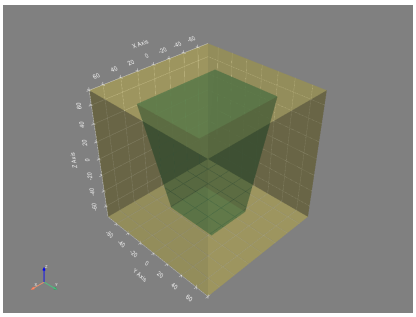


图 A.13： 梯形的可视化

表 A.13： 定义梯形的参数。如果未指定，默认长度单位为 mm

参数	描述
x1	-z 处的 x 长度
x2	x 长度为 +z
y1	-y方向在-z处的长度
y2	y 长度， +z
z	z 长度

附录 A.14：管体

清单 A.14： 示例：管体定义

```
<管 角度单位="度" 长度单位="毫米" 名称="TubeSolid" rmin="10.0" rmax="
50.0" z="120.0" 角度增量="360.0" startphi="0.0"/>
```

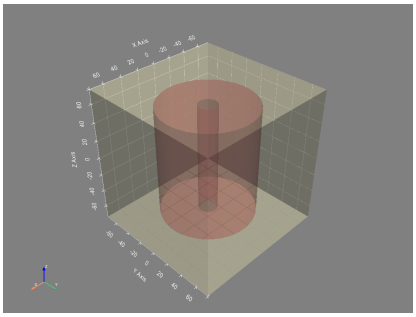


图 A.14： 管体可视化

表 A.14： 管体定义参数。如果未指定，默认长度单位为mm，默认角度单位为 deg

参数	默认值	描述
rmin	0.0	段的内半径
rmax		段的外半径
z		管段的 z 长度
起始方位角	0.0	段的起始 phi 位置角
角度增量		段的角度增量

附录 B. 粒子枪

附录 B.1. SimpleThermalGun

表 B.1： SimpleThermalGun配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数是必需的，其他参数是可选的。

参数	默认值	描述	Unit
能量	0	粒子能量。该值可以是正值[1]或零[2]。	eV
位置		初级粒子的位置。	mm
方向	0,0,1	初级粒子的方向向量。	mm

[1]输入值的单一能量。[2] 温度为 293 K 的麦克斯韦分布。

附录 B.2. IsotropicGun

表 B.2： IsotropicGun 配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必填项，其余为可选项。

参数	默认值	描述	Unit
能量	0	粒子能量。该值可以是正值[1]或零[2]。	eV
位置		初级粒子的位置。	mm

[1]输入值的单一能量。[2] 温度为 293 K 的麦克斯韦分布。

附录 B.3. UniModeratorGun

表 B.3： UniModeratorGun 配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必填项，其他参数为可选项。

参数	默认值	描述	Unit
src_w		粒子源的 X 方向尺寸（宽度）表面。	mm
源高度		粒子源的 Y 方向尺寸（高度）表面。	mm
源 Z 坐标		粒子源中心的 Z 坐标，位于全局参考系。	mm
狭缝宽度		狭缝表面的 X 方向尺寸（宽度）。	mm
狭缝高度		狭缝表面的 Y 方向尺寸（高度）。	mm
狭缝 z		全局参考坐标系中狭缝中心的 Z 坐标坐标系。	mm
平均波长	1	初级粒子的平均波长。	Å
波长范围	0.0001	均匀波长的宽度分布。	Å

附录 B.4. MaxwellianGun

表 B.4： MaxwellianGun 配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必填项，其余为可选项。

参数	默认值	描述	Unit
src_w		粒子源表面的 X 方向尺寸（宽度）表面。	mm
源高度		粒子源表面的 Y 方向尺寸（高度）表面。	mm
源 z		粒子源中心在全局参考系中的 Z 坐标。	mm
狭缝宽度		狭缝表面的 X 方向尺寸（宽度）。	mm
狭缝高度		狭缝表面的 Y 方向尺寸（高度）。	mm
狭缝 z		全局参考系中狭缝中心的 Z 坐标-erence 系统。	mm
温度 293.15		麦克斯韦能量分布的温度-分布。	K

附录 B.5. MCPLGun

表 B.5： MCPLGun 配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必填项，其余为可选项。

参数	默认值	描述	Unit
mcplfile		输入 MCPL 文件。	str

附录 C. 计分器

附录 C.1. ESpectrum

表 C.1： ESpectrum 配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必填项，其余为可选项。

参数	默认值	描述	Unit
name		直方图的名称。	str
min		直方图的最小能量。	eV
max		直方图的最大能量。	eV
箱数	100	直方图的箱编号。	1
粒子追踪状态	进入	粒子追踪状态，可用选项有：表面，进入，吸收，传播，退出。	str

附录 C.2. WlSpectrum

表 C.2: WlSpectrum 配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必需参数，其余为可选参数。

参数	默认值	描述	Unit
name		直方图的名称。	str
min		直方图的最小波长。	Å
max		直方图的最大波长。	Å
箱数	100	直方图的箱编号。	1
粒子追踪状态	进入	粒子追踪状态，可用选项—项有：表面，进入，吸收，传播，退出。	str

附录 C.3. TOF

表 C.3： TOF 配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必填项，其余为可选项。

参数	默认值	描述	Unit
name		直方图的名称。	str
min		直方图的最小时间。	s
max		直方图的最大时间。	s
箱数	100	直方图的箱编号。	1
粒子追踪状态	进入	粒子追踪状态，可用选项为：表面，进入，吸收，传播，退出。	str

附录 C.4. PSD

表 C.4: PSD 配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必需项，其余为可选项。

参数	默认值	描述	Unit
name		直方图的名称。	str
xmin		直方图的最小 x 值。	mm
xmax		直方图的最大 x 值。	mm
x 箱数 _	100	X 轴的箱编号。	1
ymin		直方图的 Y 轴最小值。	mm
ymax		直方图的 Y 轴最大值。	mm
Y 轴分箱数	100	Y 轴的箱编号。	1
type	XY	体积的投影平面，可以设置为：XY[1], XZ 或 YZ。	str
粒子追踪状态	进入	粒子追踪状态，可用选项为：表面，进入，吸收，传播，退出。	str

[1]例如，XY 表示体积在 XY平面上的投影。

附录 C.5 MultiScat

表 C.5： MultiScat 配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必填项，其余为可选项。

参数	默认值	描述	Unit
name		直方图的名称。	str
min	0	直方图的最小散射次数图。	1
max	5	直方图的最大散射数图。	1
线性	yes	线性选项 for X 轴的直方图[1].	str

[1]默认值 yes 表示采用线性 X 轴，而 no 会将 X 轴更改为对数刻度。

附录 C.6. DeltaMomentum

表 C.6： DeltaMomentum 配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必填项，其他参数为可选项。

参数	默认值	描述	Unit
name		直方图的名称。	str
样品位置		样品在全局坐标系中的位置向量参考资料。	mm
束流方向		束流方向向量。	mm
dist		中子源与之间的距离样品。	mm
min		直方图的最小值 Q	$Å^{-1}$
max		直方图的最大值 Q	$Å^{-1}$
箱数	100	直方图的箱编号。	1
方法	0	动量的计算方法转移 Q[1]。	str
粒子追踪状态	进入	粒子追踪状态，可用选项包括：表面、进入、吸收，传播 ，退出。	str
线性	yes	直方图 X 轴的线性选项直方图[2]。	str
散射次数	-1	要计数的散射次数[3]。	1

[1]默认值 0 表示非弹性散射的动量转移，而值为 1 表示弹性散射的动量转移。[2]默认值 yes 表示线性 X 轴，而 no 会将 X 轴更改为对数刻度。[3]应为大于或等于 -1 的整数。默认值表示直方图会累积事件，而不考虑散射次数。其他值则启用对指定散射次数的累积。散射次数由 MultiScat 计分器计数，因此当 scatnum 不为 -1 时，应将此类计分器附加到感兴趣体积。

附录 C.7. Angular

表 C.7： Angular配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必填参数，其他参数为可选参数。

参数	默认值	描述	Unit
`name`		直方图的名称。	str
样品位置		样品在全局参考系中的位置向量	mm
束流方向		参考系。 束流方向向量。	mm
`dist`		粒子源与	mm
`min`		样品。 的最小散射角	°
		直方图，其范围应为	
`max`		$[0, 180]$°。 的最大散射角	°
		直方图，其范围应为	
箱数	100	$[0, 180]$°。 直方图的箱编号。	1
粒子追踪状态	进入	粒子追踪状态，可用	str
		选项包括：表面、进入、吸收、	
		传播 ，退出。	
线性	`yes`	直方图的 X 轴线性选项	str
		直方图[1]。	

[1]是（默认值）表示使用线性 X 轴，而否表示将 X 轴改为对数刻度。

附录 C.8. VolFluence

表 C.8: VolFluence 配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必填项，其余为可选项。

参数	默认值	描述	Unit
name		直方图的名称。	str
min		直方图的最小能量。	eV
max		直方图的最大能量。	eV
箱数	100	直方图的箱编号。	1
粒子追踪状态	传播	粒子追踪状态，可用选项：表面，进入，吸收，传播，退出。	str
线性	yes	线性选项 for X 轴的直方图[1].	str

[1]默认值yes 表示线性 X 轴，而 no 会将 X 轴更改为对数刻度。