arXiv:2603.01770v1 [physics.ins-det] 2 Mar 2026

ImpCRESST ——一款专注于 keV能量下固态探测器的多功能模拟工具

G. Angloher[1], S. Banik[2,3*], A. Bento[1,10], A. Bertolini[4], R. Breier[5*], C. Bucci[6], J. Burkhart[2], L. Burmeister[4], L. Canonica[1], F. Casadei[1], E. Cipelli[1], S. Di Lorenzo[1,6], J. Dohm[7], F. Dominsky[1], A. Erb[8,11], E. Fascione[4], F. von Feilitzsch[8], S. Fichtinger[2], D. Fuchs[3,2], A. Fuss[2,3], V.M. Ghete[2], P. Gorla[6], P.V. Guillaumon[1,12], D. Hauff[1], M. Jeˇskovsk´y[5], J. Jochum[7], M. Kaznacheeva[8], H. Kluck[2*], H. Kraus[9], B. von Krosigk[4], A. Langenk¨amper[1], M. Mancuso[1], B. Mauri[1], V. Mokina[2*], C. Moore[1], P. Murali[4], M. Olmi[6], T. Ortmann[8], C. Pagliarone[6,13], L. Pattavina[6,14], F. Petricca[1], W. Potzel[8], P. Povinec[5], F. Pr¨obst[1], F. Pucci[6], F. Reindl[2,3], J. Rothe[8], K. Sch¨affner[1], J. Schieck[2,3], S. Sch¨onert[8], C. Schwertner[2,3], M. Stahlberg[1], L. Stodolsky[1], C. Strandhagen[7], R. Strauss[8], F. Toschi[4], I. Usherov[7], D. Valdenaire[2,3], M. Zanirato[1], V. Zema[1,2]1马克斯·普朗克物理研究所，85748，加兴，德国。[2]MBI - Marietta-Blau粒子物理研究所，奥地利科学院，1010，维也纳，奥地利。[3]维也纳工业大学原子研究所，1020，维也纳，奥地利。[4]海德堡大学基尔霍夫物理研究所，69120，海德堡，德国。[5]夸美纽斯大学数学、物理与信息学院，84248，布拉迪斯拉发，斯洛伐克。[6]意大利国家核物理研究院，Laboratori Nazionali del Gran Sasso，67010，阿塞尔吉，意大利。[7]蒂宾根埃伯哈德·卡尔斯大学，72076，蒂宾根，德国。[8]慕尼黑工业大学自然科学学院物理系，慕尼黑工业大学，85747，加兴，德国。[9]牛津大学物理系，牛津，OX1 3RH，英国。[10]另见：LIBPhys，科英布拉大学物理系，P3004 516，11，葡萄牙。[11]另见：Walther-Meißner低温研究所，85748，加兴，德国。[12]另见：圣保罗大学物理研究所，圣保罗，05508-090，巴西。[13]另见：卡西诺与南拉齐奥大学土木与机械工程系，03043，14，意大利。[14]另见：米兰比可卡大学物理系，米兰，20126，意大利。

*通讯作者。电子邮箱：samir.banik@oeaw.ac.at；robert.breier@fmph.uniba.sk；holger.kluck@oeaw.ac.at；valentyna.mokina@oeaw.ac.at；

摘要

我们介绍 ImpCresst，这是一款基于 Geant4 的蒙特卡罗工具，用于模拟固态探测器中的天然和宇宙成因放射性核素本底及校准信号，并模拟探测器对此类信号的响应。该工具针对快速演进的异构探测器环境进行了调整，重点面向 keV 范围内的物理研究。该工具最初由 CRESST合作组开发并验证；不过，其灵活性和可配置性也使其适用于具有类似需求的其他实验。ImpCresst 的主要功能包括：直接从 CAD 文件动态实现几何结构；基于 ROOT 持久化存储完整的事件拓扑，并自动添加数据溯源元数据标注；以及提供与多种粒子生成器的接口，尤其适用于放射成因和宇宙成因放射性核素。它还包含一种新开发的粒子生成器，用于模拟体材料和表面放射性污染，且完全独立于用户定义的限制体积。辅助工具 CresstDS 根据用户提供的经验参数化数据集，应用特定于探测器的能量和时间分辨率。我们还讨论了如何在基于 Apptainer 和 Nextflow 的高性能计算环境中管理基于 ImpCresst 的工作流。

关键词：本底模拟，Geant4，放射性污染，稀有事件搜寻，暗物质，相干弹性中微子-原子核散射（CEνNS），无中微子双β衰变（0ν2β）

1 引言

我们介绍 ImpCresst，这是一款专为用于稀有事件搜寻的固态探测器设计的模拟软件包，例如暗物质（DM）相互作用、相干弹性中微子-原子核散射（CEνNS）或无中微子双β衰变（0ν2β）。它可以轻松适配特定实验。据我们所知，这是唯一一款[1] 开源的、 Geant4 [7基于10]的模拟软件包，专注于模拟低温固态探测器中的放射性和宇宙成因本底及校准信号，并模拟探测器在 100 eV–10MeV 能量范围内对其的响应。除此之外，它也可能适用于其他类型的探测器。从 8.0 版开始，0 [11],ImpCresst 将以开源形式发布于 https://github.com/cresst-experiment/impcresst 。本文概述了该软件包的功能和设计选择。

由于稀有事件搜索中的信号率预计将显著小于背景来自已知的物理过程，而任何未知本底都可能限制各类稀有事件搜索的发现潜力。因此，要从稀有事件的观测中提取标准粒子物理模型之外的新物理特征，就必须充分了解本底来源，使可靠的本底管理至关重要。这包括通过基于蒙特卡罗的粒子模拟对本底及其来源进行建模，适用于三大用途：将本底数据分解为各个本底源，以确定其活度；预测物理数据中预期的本底量；以及确定新型探测器设计的本底抑制能力，为开发过程提供参考。为了提供适用于Cresst 直接暗物质搜索 [12], 的粒子模拟工具，S. Scholl 最初开发了 ImpCresst ，时间为 2011 [13]。尽管 ImpCresst 软件包由 Cresst 合作组 [12], 开发和维护，但近期版本也可轻松适配其他实验：Nucleus 合作组将其用于初期本底研究 [14] ，而 Cosinus 合作组则持续将其用于本底研究 [15, 16]。

[1]类似的基于 Geant4的工具要么并不专注于固态探测器（例如 PandaX合作组的BambooMC [1] ），要么未公开提供（例如Gerda与 Majorana合作组的MaGe [2] 、 Cuore合作组的QShields [3] 、 Cdex 合作组的 Sage [4] 、SuperCdms 合作组的SuperSim [5] ，或 Nucleus 模拟工具 [6]）。

自 2014 年起，ImpCresst 的开发工作重新启动，其设计聚焦于六个对 Cresst至关重要的方面：(i) 便于管理多样化的探测器几何结构和材料清单；(ii) 内置文档记录和模拟数据溯源能力，以避免不同探测器设计之间产生混淆；(iii) 详细记录模拟数据，以便研究罕见本底过程或新型探测器设计；(iv) 力求在 keV 能量下达到尽可能高的精度，并将精度提升至 100 eV 量级；未来开发中，理想情况下可达到 10 eV 量级；(v) 为宇宙成因和放射性本底源提供专用粒子生成器接口，尤其适用于体材料和表面放射性污染；(vi) 与高性能计算（HPC）环境顺畅集成。

凭借其独特的功能集，ImpCresst 是 Cresst下一代暗物质搜索路线图中的关键组成部分 [12] ，并已用于多篇论文 [13, 16——24]，这些论文证明了它能够胜任在领先的低质量暗物质搜索实验所面临的严苛环境 [25]。Imp Cresst 的功能集也受到这一环境的启发，尤其是Cresst其实验装置和本底条件。

利用由单晶制成、位于意大利格兰萨索国家实验室（LNGS）地下深处的低温量热器，Cresst 合作组一直在探索广泛的物理案例：寻找由自旋无关 [25–31] 和自旋相关 [25, 32–34] 暗物质-原子核散射引起的核反冲、暗光子-原子相互作用 [35], 以及暗物质自相互作用 [36]。多年来，探测器模块 [37]的持续发展形成了种类繁多的探测器清单，因此需要灵活处理模拟几何结构，涵盖几何结构和靶材料：大型$\mathcal{O}$（100 g）探测器 [29, 30, 34, 38], 、轻型 $\mathcal{O}$（10 g）探测器 [28, 31, 33], 、晶圆状 $\mathcal{O}$（1 g）探测器 [25, 26, 28]; 靶晶体包括 Al_2O_3[38], $CaWO_4$ [28–31], 金刚石 [27],$LiAlO_2$ [32,34], Li_2MoO_4 [33], 和硅 [25, 26]。使用闪烁靶晶体（如 $CaWO_4$, ）的探测器模块还配备了专用的小型低温探测器，用于测定光产额，以实现粒子鉴别和判别。

Cresst 如今常规实现了低于 100 eV 量级的核反冲探测阈值[25–27, 31]。使用蓝宝石上硅晶圆，探测阈值低至 6.7 eV，由此我们能够为自旋无关的弹性暗物质粒子-核子相互作用设定领先的限制，灵敏度低至 $m_{\mathrm{DM}} = 74\mathrm{MeV}/c^2$ [25]。因此，ImpCresst 着重于灵活处理多种探测器几何结构，以及低能量下的探测器模拟。

目前， Cresst 的主要本底源是探测器靶材中的放射性污染，进而引发电磁相互作用 [19, 22, 23]。中子 [16],要么由大气 μ 子产生，要么源于放射性过程；宇宙成因放射性核素 [39] 则是次要本底组件。不过，热中子的俘获与核反冲标定标准相关[40, 41] ，并且也在 Cresst的 $CaWO_4$ [16, 20] 和 Al_2O_3 [21] 靶晶体中观测到。因此，ImpCresst对物理相互作用的建模侧重于放射性衰变和原子核退激。

本文的结构遵循典型的 ImpCresst 模拟流程，该流程在 Cresst的模拟工作流中执行（第 2 节）。每一节对应工作流的一个方面：在选定的设置（第3 节）中，对来自本底或校准源（第 5 节）的粒子的相互作用（第 4 节）进行模拟。从模拟中提取数据（第6 节）并存储（第 7 节），随后应用探测器响应（第 8 节）。第9 节给出了如何在高性能计算环境中实施该工作流，并确保良好的可复现性和可追溯性的示例。最后，在第 10 节中，我们总结全文并展望 ImpCresst的未来发展。

在介绍每个部分所涉及的物理背景后，我们将说明其实现的技术细节，并通过两个实例展示实际用法[2]：模拟 ^{234}Th 对 Cresst 装置中铜部件的污染，将其作为外源本底源，并研究其衰变辐射的能谱范围（见图7）；以及 ^{234}Th 对 $CaWO_4$

[2]在发布版本 ImpCresst 软件包中，可分别在 `./examples/contaminantRange234Th/` 和 `./examples/decayPaths234Th/` 下找到示例。

靶晶体，将其作为内源本底源，并将其分解为各条核衰变路径（见图11）。为方便读者，附录 CRESST A 中给出了复现第一个实例所需的 ImpA 设置。本文中的实例和描述基于最新的 ImpCRESST 版本 8.0.0，使用GEANT4 版本 10.6.3。

2 工作流

ImpCRESST 用户决定要模拟什么之后——要模拟哪种本底或校准源（即哪种初级粒子）在何种实验装置中（即采用何种几何结构）运动——便可以使用 ImpCRESST软件包中的两种工具进行模拟：ImpCRESST 本身用于基于 GEANT4 的微观粒子相互作用模拟，而配套的 CRESSTDS 则用于应用有限探测器分辨率的影响。在小规模下验证模拟流程后，可以在高性能计算环境中（第9节）增加初级粒子的数量，以进行高统计量生产运行。对于 CRESST，这可以通过惰性并行实现，即同时启动多个模拟进程，且进程之间无需通信，因为我们不假设初级粒子之间存在任何相关性。因此，ImpCRESST目前尚未使用 GEANT4 的多线程功能。

对于选定的实验装置几何结构（第3节），并基于已实现的物理模型（第4节），ImpCRESST 会模拟初级粒子与构成所选几何结构的材料之间的微观相互作用（第5节）。如果相互作用发生在几何结构中对应探测器的部分，就会生成一个 *Hit*，其中封装了多项数据，最重要的是沉积能量（第6节）。这些 Hit（下文称为原始击中）以及粒子轨迹、元数据记录等其他数据对象，会以原始数据的形式存储为 ROOT文件格式（第7节）[42, 43]。ImpCRESST 本身通过 GEANT4 宏文件进行控制，这些文件包含宏命令 [44,p。275], 均为 GEANT4 原生且专为 ImpCRESST开发。

工具 ImpCRESST本身不会考虑探测器响应的影响，也就是说，不会考虑粒子相互作用产生信号的过程，而这些信号会由量能器和光探测器测量，且受其有限的时间和能量分-辨率影响。为考虑这些因素，需要对原始数据进行处理，以重建能量沉-积，使其与真实探测器测得的结果相当；下文将这些结果称为探测器击中，它们由 ImpCRESST[3]模拟的原始击中重建而来。此重建对于直接比较模拟数据和真实数据至关重要。由于原始数据存储在 ROOT 文件中，用户可以采用 ROOT 支持的任何方式处理这些数据。辅助CRESSTDS 工具（第8节）提供了一种仅应用能量和时间分辨率的标准处理方法。由于存在种类繁多且相当特殊的材料（例如 $CaWO_4$, $LiAlO_2$），无法以令人满意的精度基于第一性原理对的探测器响应进行微观描述。因此，CRESSTDS 依赖于通过分析（校准）数据得到的探测器分辨率经验参数化。

由于分析流程通常比实验的几何设置变化得更快，这种两步法以临时存储空间为代价节省了计算时间：使用 ImpCRESST 进行耗时的微观模拟只需执行一次，前提是探测器配置的几何结构已确定。随后可以存储模拟原始数据，并多次处理，以适应新的分析流程；这些流程可能会产生不同的有效探测器分辨率或阈值。分析流程一旦趋于稳定，就可以删除原始数据，只需存储体积较小的处理后数据。有关可实现的数据缩减效果，请参见第 8.3 节。

只要保留用于控制模拟的宏文件和随机数生成器的随机种子（详情请参阅5.1 节），就可以根据模拟数据的可追溯性 重现原始数据：Imp CRESST 遵循严格的语义化版本规范，版本号和所用宏文件会自动记录在每个模拟数据集所附带的元数据记录中。使用相同的 ImpCRESST 版本，就能确保使用相同版本的探测器几何结构。可复现性和可追溯性还可以进一步

[3]请注意，在其他实验中，这通常称为*event*重建。

通过在整合了容器化和科学流程管理的工作流中使用 ImpCresst来增强。例如，第9节介绍了为 Cresst使用的高性能计算环境所实施的工作流。

3 几何定义与实现

ImpCresst套件提供了灵活且可扩展的系统，旨在实现探测器模块及其配套装置的多种配置几何结构，这些配置由 Cresst 合作组 [19, 20, 23, 26、29–31, 33, 34, 37]开发。几何子系统以 Geant4的模块化结构为基础，用户可以选择内置的几何结构配置（第3.1节），也可以从 CAD 文件中高精度地读取这些配置（第3.2节）、对其进行配置（第3.3节），并通过可视化验证复杂的几何布局（第3.4节）。

同一套件也可调整后用于采用类似探测器技术的其他低温实验。 Cosinus合作组 [15, 16], 的应用便是一个原理验证案例，因此 ImpCresst 代码库还包含了他们最初使用的遗留几何结构[4]。

3.1 已实现的几何类型

实验的 Cresst 组件按从内到外的嵌套结构排列，从单个低温探测器模块开始，经过探测器模块阵列（即所谓的转盘），直至完整的实验装置。如图1所示，该装置由缪子 veto 以及用于抵御环境本底的厚重铜、铅和聚乙烯屏蔽层组成。屏蔽层包围着一个低温恒温器，其中容纳转盘，每个探测器模块封装一个或多个靶晶体。

在 ImpCresst 中，这些组件由派生自

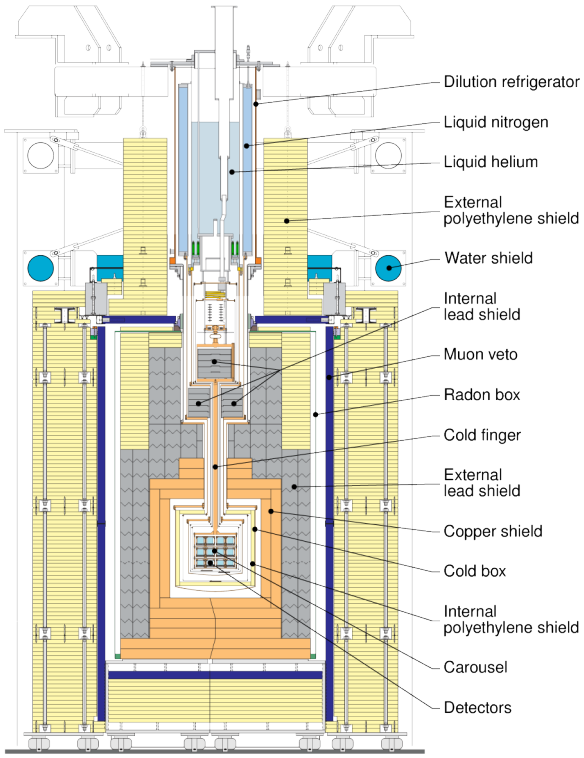

图 1： Cresst 实验装置的技术图纸。顶部可以看到容纳液氦和液氮的低温恒温器。低温恒温器下方，转盘承载着探测器模块。屏蔽由聚乙烯、铅、铜、主动缪子 veto 以及用于防止空气中氡污染的气密氡盒组成。

抽象基类`DetectorPart`[5] 并实现虚成员函数 `Construct`，参见统一建模语言（UML，例如见 [45]）类图，如图 2 所示。每个子类都以通常的 Geant4 方式，通过使用三类体积 [44，第97]页：实体体积、逻辑体积和物理体积，来实现组件及其部件的实际几何结构。几何形状和尺寸通过类型为`G4VSolid` 的实体体积表示，这些实体体积既可以是构造实体几何（CSG）基本体，也可以是镶嵌实体（见第 3.2 节）。这些实体体积通过`G4LogicalVolume` 对象与材料相关联，

[4]命名空间 `impCresst::geometry::cosinus` 下的所有类对应于 Cosinus 合作组模拟团队用于本底模拟的过时原型的几何结构。这些几何结构此后已更新，以匹配实验所采用的最终几何结构，基于其模拟的结果将由 Cosinus 合作组在未来的出版物中报告。

[5]在本文中，当类名唯一时，我们使用简单的非限定名称；如果可能产生混淆，则也会注明（部分）命名空间。

它们通过 G4VPhysicalVolume 对象被放置在模拟世界体积内。材料在 MaterialManager类[6]中定义； CRESST 所使用的材料以 CRESST 为前缀。可用的DetectorPart类型示例（从外到内）包括：

•装置： LNGS 和CresstShielding 类型的对象可重现 LNGS 洞穴及其完整的 CRESST 装置，包括可移动屏蔽和低温恒温器。

•转盘： Carousel 类型的对象用于实现探测器阵列，表示多个探测器及其支撑结构。其几何结构对应特定的数据采集运行期，必须与之匹配，以确保模拟结果与数据可直接比较。Imp CRESST 支持模拟从旧版运行期32（Carousel32）到最新的第 37 次运行（Carousel37，见图 3a）的各种运行期。

•探测器模块： CryogenicDetector类型的对象表示数据采集期间使用的各种实际低温探测器，例如DoubleSiCRESST3Detector[26], TUM40Detector [30] （用于 [17, 19, 22–24] 的模拟研究），或CRESST3Detector [31]（本研究中使用，另见图3c）。后一类型的一个例子是名为“TUM93A”的探测器模块，该模块用于Caraousel37。此外，专用校准装置（如FeCalibration DoubleSi Left [26]）也会实现校准源（此处为^{55}Fe）的几何结构，用于对能量沉积、校准或本底表征开展受控研究。

每个DetectorPart 类型的对象都可以独立实例化，也可以组合起来表示复合组件。这类组件通过继承抽象基类ExperimentalSetup的类进行建模，见图4。例如，CresstAtLNGS类对LNGS的嵌套构成进行建模，其中包含CresstShielding，后者包含一个由Carousel的子类型实例化的对象，而该对象又包含若干由 CRESST专用子类型低温探测器实例化的对象（见图2）。与之互补的是，FreeCarousel37 省略了实际转盘之外的所有组件。前一个类的一个应用场景是模拟源自LNGS洞穴的环境本底；后一个类的一个应用场景是模拟来自放射性污染物的短程衰变辐射，这种辐射只有在探测器附近才可见（例如 ^{234}Th，参见图7）。

内部一致性检查会在初始化时自动执行，以检测体积重叠和边界不匹配，从而确保模拟几何结构符合物理布局。为进一步验证，用户可通过宏命令生成穿过几何结构的二维切片

/ 几何结构 / createVolMap <y_pos >↪ <x_half > <z_half > <n_points >

该命令会生成文件，列出所选平面上的材料组成。这些文件可在 ROOT 中进行可视化，例如绘制为散点图（图 5）。与技术图纸（图1）对比时，可确认材料边界和探测器接口，从而提供一种快速验证工具，作为图形可视化的补充（见第3.4节）。此处表明，低温恒温器上部所实现的几何结构相较CAD图纸有所简化。这一做法是合理的，因为探测器远离被简化的部分，且两者之间布置了厚重的内部铅屏蔽。

3.2 计算机辅助设计集成与快速原型设计

一种特殊的DetectorPart 子类是CADReader，它支持直接导入CAD几何。其主要用途是简化逼真探测器模型的实现（参见图3b）。它基于CADMesh [46, 47],读取Wavefront OBJ文件格式的CAD图纸，并将其中描述的几何结构建模为G4TessellatedSolid对象 [44, 第117]页。通过相应的ExperimentalSetup类型FromCADFile即可轻松进行选择。实现该功能的宏命令如下：

[6]我们注意到，我们将类型为G4Material的标准对象（用于定义材料）以及 G4VisAttribute（用于定义逻辑体积的可视化）封装在我们自己的结构 MaterialProperty 中，以确保给定材料的可视化保持一致。

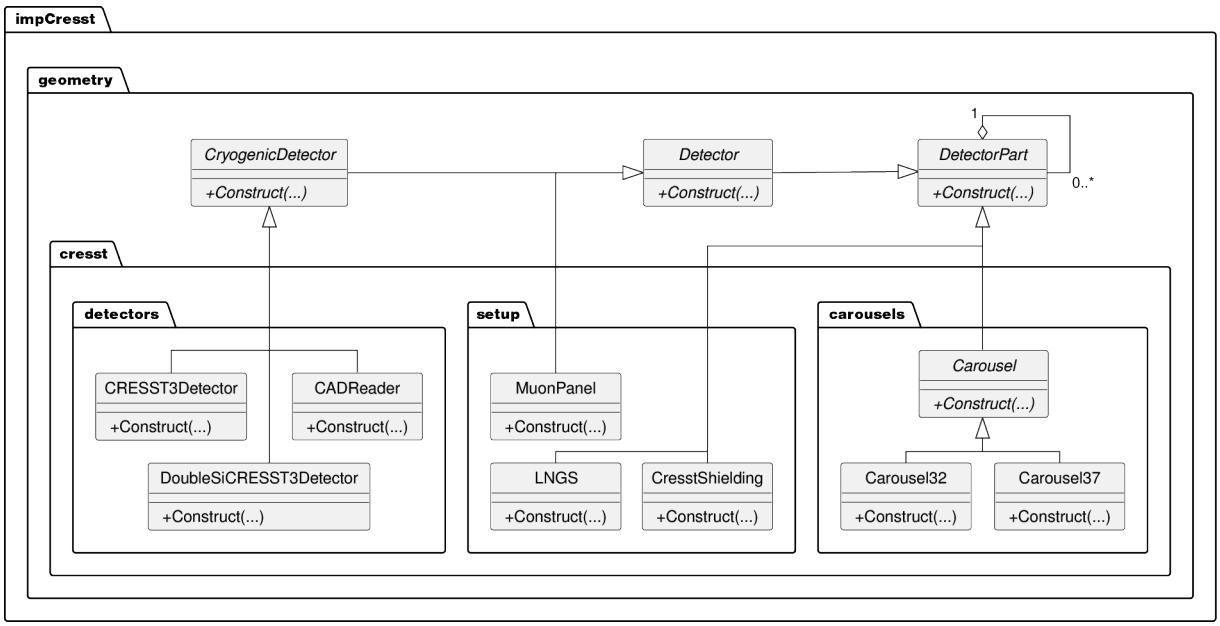

图 2：抽象基类 `DetectorPart` 及其派生类的简化 UML 类图，用于实现 CRESST 装置中组件的层次结构。为简洁起见，省略了方法的参数和返回类型。

/ 几何结构 / FromCADFile / ↪createCADReader <名称 > <obj↪ 文件 > <映射文件 >

其中，映射文件定义了 CAD 文件中的网格名称与模拟中的材料定义之间的对应关系。它还指定各个组件是否属于所谓的灵敏探测器（见第 6 节）。这样，用户便可以轻松加载任何兼容 WavefrontOBJ 的几何结构到 ImpCRESST 中，并将其用于模拟。

此功能显著加快了几何结构开发，并减少了潜在的转换错误。例如，CRESST 运行中使用的探测器模块几何结构可直接从工程模型导入，从而确保模拟探测器与真实探测器之间的机械保真度。图 3b展示了基于 OBJ 文件构建的高保真 TUM93A 探测器模块模型，并与图中所示的基于 CSG 基元的简化实现进行对比。3c。CAD 集成对于探测器设计阶段的快速原型设计尤其有益，因为机械结构的修改可以立即同步到模拟环境中，无需耗时地手动编写 CSG 基元代码。例如，图 3e 展示了通过读取 CAD 文件，可在 ImpCRESST 中查看一种潜在的未来“CmCube”探测器模块的可视化效果 [37] [7]。

3.3 动态配置

ImpCRESST 的几何子系统支持在运行时通过宏命令 [44, p.275]进行动态重新配置。用户可以选择和修改几何元素，例如更改材料、调整屏蔽位置或替换探测器模块，而无需重新编译，例如：

/ 几何结构 / 设置装置 CresstAtLNGS / 几何结构 / CresstAtLNGS /↪选择转盘 Carousel37 / 几何结构 / 构建装置 / 几何结构 / CresstAtLNGS /平移↪屏蔽右 1.0 m

选择 `ExperimentalSetup`子类`CresstAtLNGS`。该子类提供专用宏命令，可用于选择转盘（此处为第 37 次运行中采用的转盘，按`Carousel37`所实现），并打开.....的屏蔽

[7] 在 ImpCRESST 软件包中，用户可以在 `./geometry/CmCubeDetector/` 下找到 CAD 文件。

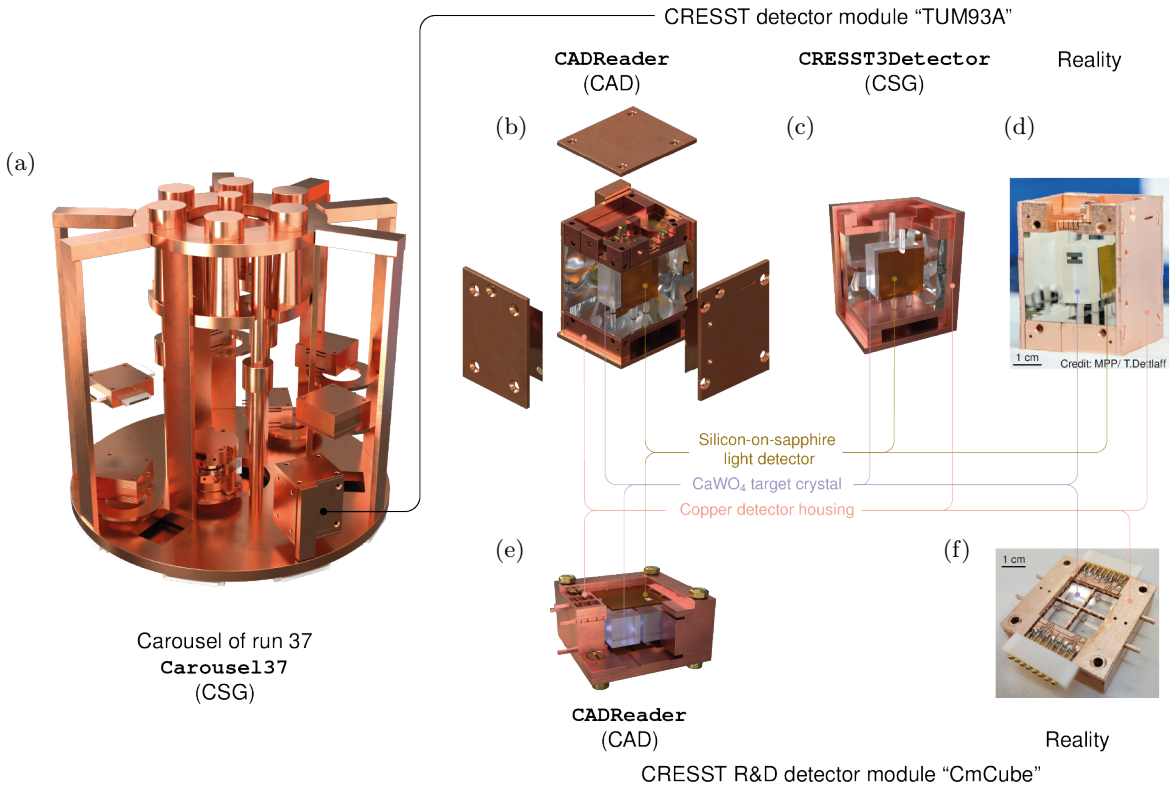

图3：使用 Blender 对 Imp 中可用的几何组件进行的示例可视化CRESST：（a）展示了 `Carousel37`，即最近一次第 37 次数据采集运行中的探测器阵列。它本身采用 构造实体几何 （CSG）实现，但会将来自 CAD 文件的探测器模块作为 `CADReader` 类型的对象加载，例如“TUM93A”模块（b，爆炸视图）。与采用 `CRESST3Detector` 类型实例实现的同一模块的 CSG 几何结构（c，剖视图）相比，CAD 实现更能忠实地还原实际情况（d，打开的模块照片）。直接从 CAD 文件加载几何结构，还可快速模拟研发项目中的设计，例如未来可能采用的“CmCube”探测器模块（e，剖视图；f，打开的模块照片）。该模块可能包含多个靶晶体，仅凭自身重量固定在探测器外壳内，详见 [37] 。

设置，以便例如插入校准源（另见清单 1，第37、39、57和60行）。这种灵活性使优化研究期间能够高效测试替代配置，例如调整屏蔽配置或探测器布置。

不同类型的实验装置（如LNGS的Cresst或从CAD文件导入）通过实现工厂设计模式的 `ExperimentalSetupFactory`来选择 [48]，见图6。类似地，LNGS的Cresst 会调用 `CarouselFactory`的一个实例来创建实际的转盘。实验装置 和转盘 会调用 `CryogenicDetectorFactory` 的一个实例来创建实际的探测器模块。这样，用户只需通过相应宏命令的字符串参数，就能轻松指定所需的装置或探测器组件；工厂则会在运行时实例化相应对象。

3.4 可视化功能

可视化是模拟的重要组成部分，既用于技术验证，也用于展示。由于可视化数据

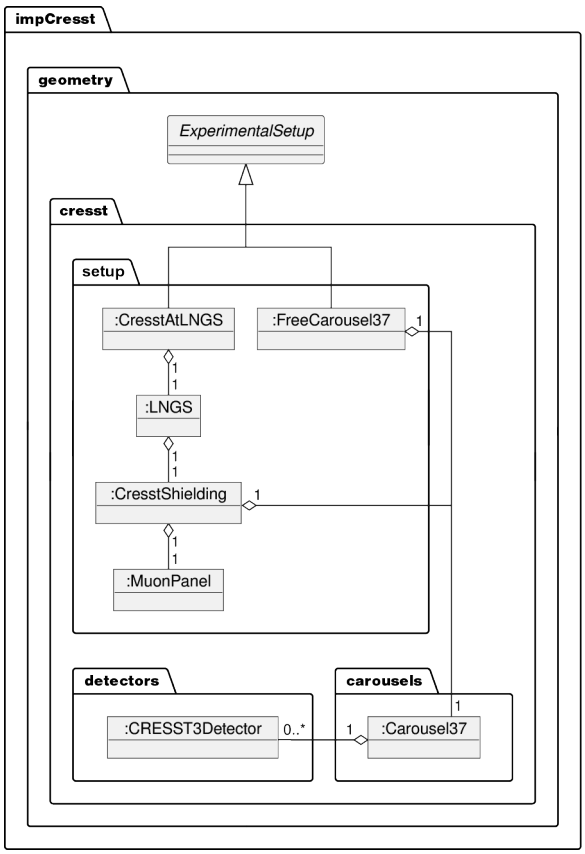

图 4：简化的 UML 对象图，展示了从 `ExperimentalSetup`子类型实例化的两个对象的组成：`FreeCarousel37` 封装了第 37 次数据采集运行中转盘及相关探测器模块的组合，而 `CresstAtLNGS`还考虑了 LNGS 的完整实验装置。探测器模块必须属于低温探测器的某个子类型，例如`CRESST3Module`。

可能会变得很庞大，因此 ImpCresst默认关闭了可视化功能。不过，只需重新模拟感兴趣的事件即可启用可视化，详见第 5.1 节。ImpCresst使用Geant4 自带的可视化驱动程序 [44, p.285]以及外部工具（需单独安装），例如 `Jas3/WIRED 4` [49]和 `Blender` [50]，，从而提供完整的工作流，用于几何结构验证、事件检查以及出版级渲染。

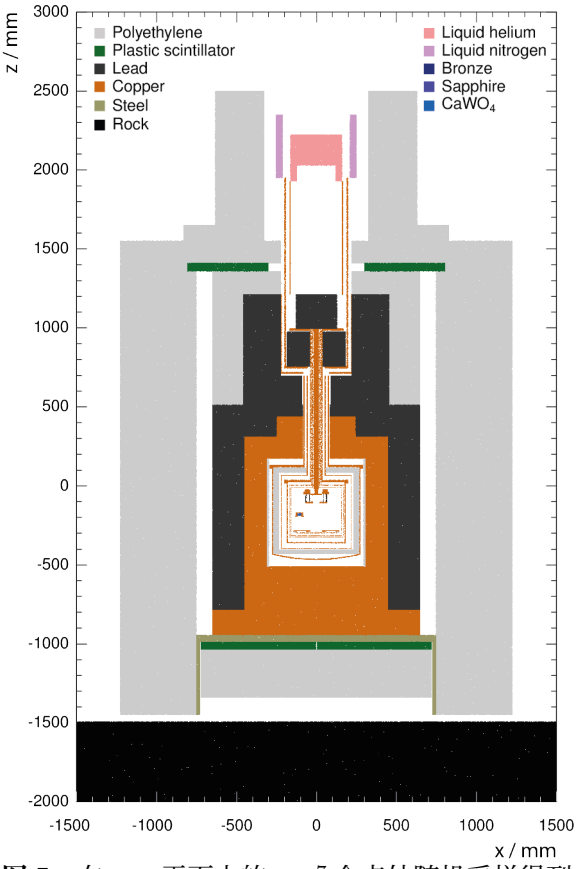

图 5：在 x-z 平面上的 10^7 个点处随机采样得到的已实现`CresstAtLNGS`装置的材料。在 $y = 0$ cm 处，缪子 veto 的左右面板之间留有一道很窄的缝隙，以便打开装置。因此，这些面板在图中不可见。

ImpCresst 支持多种 Geant4 可视化驱动程序[8]，，包括`VRML` 和`HepRepXML`，说明见 [44, 第 285] 页。后者是 ImpCresst 的默认驱动程序，允许用户直接在`Jas3/WIRED4`中渲染探测器几何结构和事件轨迹，从而便于检查事件细节并验证几何结构。

为制作出版级图像和科普材料，我们发现 ImpCresst 与 `Blender` 的组合非常适用。通过 `VRML` 可视化驱动，所加载的几何结构以 `VRML 2.0` [51] 格式导出。

[8]在 ImpCresst 发布版本中，宏文件 `./mac/visualization/visualizeGeometry.mac` 和 `./mac/visualization/vis.mac` 展示了如何选择和配置可视化驱动程序。

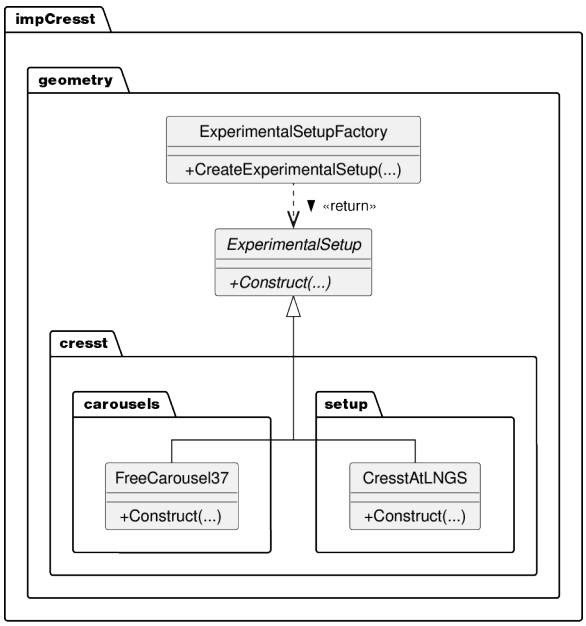

图6：用于返回实现抽象基类 `ExperimentalSetup` 的类型实例的工厂模式 UML 类图，以具体类型`CresstAtLNGS` 和 `FreeCarousel37`为例。为简洁起见，省略了方法的参数和返回类型。

生成的文件可在外部三维查看器中查看，例如 `ParaView` [52] 或直接在 `Blender`中渲染。这使探测器组件的逼真可视化成为可能，见图 3 作为示例。

在CRESST等低温稀有事件搜索中，几何结构的准确性会直接影响探测器响应预测。ImpCRESST中的可视化工具已证明必不可少，可用于确认几何结构完整性、检查导入的 CAD 模型，并向合作者及更广泛的科学界展示探测器布局。事件显示、确定性事件重放和高级渲染相结合，确保模拟结果既可在技术层面验证，也直观透明。

4 物理建模

如第1节所述，ImpCRESST的一项要求是，精确模拟强屏蔽实验装置中在 keV 能量尺度下残留的本底，包括其主要和次要组件。该本底主要由放射性污染物的电磁相互作用产生 [19, 22,23], ，而宇宙线活化 [39] 以及中子（来自自发裂变、(α,n)反应或由大气 μ 子诱发）[16] 是当前一代 CRESST本底的次要来源；俘获热中子对于探测器校准 [16,20, 21]具有重要意义。由于 GEANT4 指出，在通用蒙特卡罗代码[9]中，其电磁物理模型 [53]的适用性下限最低，因此我们选择它来进行 CRESST的本底模拟。遵循 GEANT4针对深度屏蔽实验应用场景的建议，我们将 ImpCRESST的物理实现建立在“Shielding”物理列表 [58, p. 17] 之上，该列表随GEANT4版本 10.6.3提供。较新版本可能提供不同的功能、命令和默认设置。

除 Shielding 物理列表外，我们优先保证 keV 能量尺度上的高精度，而非模拟性能，因此对放射性的建模（第4.1节）、电磁相互作用（第4.2节）、原子核退激（第4.4节）、产生截断（第4.3节）以及光学相互作用（第4.5节）进行了调整。需要指出的是，ImpCRESST是开源软件，并基于开放的 GEANT4框架，因此任何用户都可以根据自身需求进一步修改物理列表。

4.1 放射性

默认情况下， GEANT4 通过 `G4RadioactiveDecayPhysics` 物理构造器 [59, 第 403], 页实现放射性，其读取评价核结构数据文件（ENSDF）[60]。若衰变产生激发态子核，则通过`G4PhotonEvaporation`类[59, 第349]页实现原子核退激。自GEANT4 10.6版起，`G4RadioactiveDecayPhysics` 依赖于 `G4RadioactiveDecayBase`类，该类不再支持偏置技术 [61]。然而，偏置可能与未来研究相关，例如来自深地实验室周围岩石的残留环境本底

[9]除 GEANT4 之外，其他常用的通用蒙特卡罗代码有 FLUKA [54, 55] 和 MCNP [56, 57]。

或宇宙线活化作为本底在 CRESST类实验中的影响。因此，ImpCRESST使用 `G4Radioactivation` 类，该类除 `G4RadioactiveDecayBase`的功能外还提供偏置。此外，GEANT4默认将氚视为稳定核素。然而，氚是10keV能标上重要的潜在本底来源 [23]。因此，我们应用了参考文献 [62] 中所述的修改，以正确考虑氚的衰变。

我们注意到，通常会将核衰变链的模拟拆分为 $X_i \rightarrow X_{i+1} \rightarrow X_{i+2} \rightarrow$。.. 逐步衰变 $X_i \rightarrow X_{i+1}$, $X_{i+1} \rightarrow X_{i+2}$, $X_{i+2} \rightarrow \ldots$。例如，要在子体核素到达基态后停止$^{234}_{90}$Th 衰变，我们使用以下 GEANT4命令（参见清单1，第95行）

```
/grdm / nucleusLimits 234 234 90 90
```

以配置`G4RadioactiveDecayBase`。之所以可以拆分，是因为我们可以忽略那些半衰期短于^{214}Po（$T_{1/2} = 163\mu s$）的放射性核素对真实数据的贡献，例如 $\mathcal{O}$，其半衰期短于 CRESST的探测器（见第8.1节）的（1ms）时间分辨率。因此，在模拟中无需考虑衰变链中连续衰变之间的相关性。因此，我们可以将每次单独衰变的能量沉积模拟为归一化能谱，并在后处理中将其缩放至测得的绝对污染活度，或假设不同程度的久期平衡。因此，对于污染活度不同的材料，我们无需重新运行模拟。更多详情见 [19, 22, 23]。

为了精确考虑放射性衰变后的原子退激，我们通常会在模拟中启用荧光、粒子诱发 *X* 射线发射 (PIXE) 以及俄歇电子发射，并通过相关的 GEANT4 宏命令，参见列表 1，第 98-102 行。为确保荧光光子和俄歇电子始终作为独立的粒子径迹生成，我们忽略原子退激过程的任何产生截断。对于 PIXE 截面和荧光线，我们使用默认数据集。

4.2 电磁相互作用

由于放射性污染物的电磁相互作用是本底的主要来源

表 1：根据[59, 第24]页，`G4EmStandardPhysicsoption4` 中采用的物理模型。对于每个过程，仅列出适用于最低能量的模型。MCS 表示多重库仑散射。

过程	模型
e^-/e^+ 对产生	Penelope
康普顿散射	莫纳什大学
光电效应	利弗莫尔
瑞利散射	利弗莫尔
电子- 多重库仑散射	Goudsmit-Sounderson
离子多重库仑散射	Urban
离子电离	ICRU73

对于 CRESST，所选用的 电磁物理构造器 （EMPC） [58, p. 21] 至关重要：它决定了用于实现电磁相互作用的物理模型。我们默认的 EMPC 是 `G4EmStandardPhysics option4`，这被认为是针对低能相互作用最精确的 EMPC[10]。与放射性诱发相互作用相关的所用模型列于表 1中，完整描述请参见 [59, p.24]。对于数据驱动的 Livermore 模型，建议其适用下限为 250eV [53]。尽管它们在更低能量下仍可运行，但对于我们关注的材料，其与实验数据的一致性尚未得到验证。目前，正在一个专门项目中研究如何验证其GEANT4 在低于 250eV 的能量下于 $CaWO_4$ 和 Al_2O_3,中的适用性，以及在必要时如何扩展其适用范围 [63]。

若要轻松选择其他电磁物理配置，ImpCRESST提供了一个宏命令，参见清单 1，第 21 行。目前，ImpCRESST几乎支持 GEANT4[11]提供的所有电磁物理配置。

4.3 产生截断

除了所选的物理模型外，产生截断也会影响粒子模拟：如果潜在次级粒子的平均自由程小于产生截断，就不会产生次级粒子，而是将其动能沉积在局部。对于给定材料，这种对粒子射程的截断可以表示为对

[10]参见 [44, 第 211]页：“`G4EmStandardPhysics option4`，其中包含标准与低能电磁物理工作组提供的最准确模型。”[11]除 `G4EmDNAPhysics` EMPC 外，我们支持 [58, 第 21] 页所列的所有电磁物理配置，因为该配置不在 ImpCRESST的范围内。

粒子能量 [44, p. 204]的截断。较低的产生截断有助于模拟低能量下的泄漏，即探测器表面附近产生的低能粒子逃逸，这会减少沉积在探测器内部的能量。然而，较低的产生截断会增加模拟的独立次级粒子数量，从而延长所需的计算时间。因此，ImpCRESST 采用按区域设置的产生截断 [44, p. 254]：几何区域距离探测器越远，该区域中的低能粒子到达探测器的概率就越低。因此，对远处区域设置较大的产生截断（例如，包含 LNGS 实验室洞穴的`Rock` 区域），而对靠近探测器的区域设置较低的产生截断（例如，包含探测器模块本身的`CryogenicDetectors` 区域）。默认产生截断为 GEANT4 的 Imp值为0.7mm [44, p. 204], 使用表 CRESST 2中列出的数值。

默认情况下，产生截断可转换到的最低能量为 990eV [44,p. 204]。在 ImpCRESST中，我们将该值降至 250eV，这是 Livermore 模型建议的适用范围下限 [53]。对于探测器体积，我们将产生截断设为 1nm：由于其尺寸有限，几乎可以保证无论实际探测器材料是什么，该截断都会转换为最低能量值 250eV。由于核反冲是我们感兴趣的信号的标志 CRESST (见第 1节)，我们将质子的产生截断设为 0，以确保始终对核反冲进行模拟；该设置适用于所有反冲离子。

4.4 热中子俘获

尽管热中子（$E_{\mathrm{n}} = 25\mathrm{meV}$）的动能低于大多数低温探测器的探测阈值，但在这些能量下，中子俘获的概率会增加。在辐射俘获中，发射的 γ 射线通常远高于 CRESST的探测阈值，因此适用于类似的稀有事件搜索。例如，$_{20}$Ca(n,γ) [64] 中最显著的 γ 线能量为 $E_{\gamma} = 1.9\mathrm{MeV}$。除了对 CRESST本底预算的这一微小贡献外，辐射中子俘获 $^{A}X(\mathrm{n}\ \gamma)^{A+1}X$ 还可作为核反冲的标定标准：例如，如果在原子核退激过程中只发射一条 γ 射线，核反冲将具有精确已知的单一能量 [16, 40]。迄今为止，CRESST 已在$CaWO_4$ [20]和Al_2O_3 [21]中观测到这一反应。

因此，必须准确模拟中子减速至热能的过程。对于 CRESST，中子主要通过与低温恒温器内外聚乙烯屏蔽中的氢原子核散射而减速。按照参考文献 [44, p. 220]的建议，我们将`G4NeutronHPElastic` 过程 [59,p. 393]，（用于模拟中子与非束缚靶原子的弹性散射）的适用范围限制为能量高于 4eV 的中子。对于能量更低的中子，我们使用`G4NeutronHPThermalScattering`过程[59, p. 394]，，该过程通过采用热中子散射专用的截面数据，模拟中子与束缚靶原子的弹性散射。在我们的情况下，使用的是材料聚乙烯中的热中子氢所提供的聚乙烯中束缚氢的热中子截面数据。这两种中子散射过程均由数据驱动，并使用`G4NDL4.6` 汇编 [59,p. 393],中的截面数据，该汇编主要依赖 JEFF-3.3 [65] 和 ENDF/B-VII.1 [66] 数据库。

对于低温恒温器内一些克量级的聚乙烯部件，材料温度处于 $\mathcal{O}$(10mK)量级，远低于GEANT4提供表格化热截面数据的最低温度。对于非弹性 中子散射，[12] GEANT4版本10.6.3中的`G4NeutronHPThermalScattering`会尝试将与温度相关的数据线性外推至mK量级，这有时会导致散射中子的能量出现不符合物理规律的负值。作为一种变通方法，我们在这种情况下将能量设为 0。由于受影响部件的质量可以忽略不计，尤其是与室温下吨量级的聚乙烯屏蔽相比，我们预计这不会对模拟精度产生显著影响。

默认情况下，无法准确描述辐射中子俘获引起的核反冲，因为标准 GEANT4 缺少单个-γ 和多个-γ 发射所需的精确概率 [40]，，这限制了我们此前的研究

[12]实际上，`G4NeutronHPThermalScattering` 是`G4ParticleHPThermalScattering`的别名。

表 2：ImpCresst 中针对不同几何区域应用的产生截断值。对于每个区域中最主要的材料，还给出了 γ 射线、电子和质子对应的能量截断值。各区域按距探测器由远及近的顺序排列。详情请参阅正文。

区域	产生截断 / mm	材料	能量截断 / keV		
			γ射线	电子	质子
Rock	50	GSRock	49.12	27 380	5 000
聚乙烯和铅屏蔽	3	Lead	138.4	3 963	300
铜屏蔽	1	铜	24.74	1 387	100
缪子面板	0.5	BC408	1.844	227.2	50
腔体	0.1	铜	7.320	249.8	10
转盘	0.01	铜	2.150	61.13	1
CryogenicDetectors	10^{-6}	$CaWO_4$	0.250	0.250	0

参考文献中的先前研究 [16, 20]。为解决这一问题，版本 8.0.0 的 ImpCresst 使用了 `fifrelin4geant4` 库 [67]：它支持使用 Fifradina 数据集 [68] 生成最终态（即退激 γ 的发射以及反冲子核），适用于中子俘获于 ^{27}Al、^{182}W、^{183}W、^{184}W 和 ^{186}W 的情况。该数据集基于 FIFRELIN [69]计算，提供了考虑能量和动量守恒 [40]的精确发射概率。它还通过 Iradina 计算 [71]考虑了退激过程中反冲子核减速的影响 [70] 。

4.5 光学相互作用

通常，适用的靶晶体以及缪子反符合探测器的塑料闪烁体所发射的闪烁光，都是在后处理中根据相应的沉积能量，使用 CresstDS（第 8 节）计算的。不过，用户也可以选择使用 Geant4 的 `G4OpticalPhysics`类，该类可通过以下方式启用（参见清单1，第 18 行）

```
/物理/激活光学物理↪ true
```

以实际模拟光的发射和传播。若启用此功能，可通过闪烁或切伦科夫过程产生光学光子，并可能发生瑞利散射、体吸收以及边界反射 [59, p.207]。对于反射，靶晶体附近铝、青铜和铜部件的光学表面被建模为抛光的电介质-金属边界。对于 $CaWO_4$ 靶晶体，接地的电介质-电介质界面采用粗糙度描述，其斜率分布的标准差为 $\sigma_\alpha = 6.7°$。这是经过典型的 Cresst-II 靶晶体表面处理后的测量值 [72, 表 2.9]。由于缪子 veto 的塑料闪烁体面板包裹着皱褶铝箔，因此采用 `groundair` 表面处理，并使用电介质-电介质界面。对于后一种情况，我们在边界过程的模拟中使用 `UNIFIED` 模型 [73]；其他所有情况则使用 `GLISUR` 模型。

对于闪烁过程，在模拟的微观物理中，我们不考虑不同粒子种类（γ、电子-、α、反冲的 Ca、O、W 原子核）对闪烁产额的猝灭，因为我们无法复现观测到的行为 [18]。相反，我们在后处理中通过经验参数化来考虑这一点，使用 CresstDS [18]，参见第 8 节。

5 初级粒子生成

ImpCresst 允许用户通过多种方式生成初级粒子[13]（例如参见清单1，第81行），可从Geant4的默认粒子种类 [44,第 251]页。此外，Geant4的通用粒子源(GPS)[44, 第 22],页。我们还接入了更适用于模拟宇宙成因本底来源的粒子生成器：CRY（第5.2节）和 MUSUN（第5.3节）。在ImpCresst中，我们

[13]在已发布的 ImpCresst 软件包中，可在 `./mac/` 下找到通过宏文件配置初级粒子生成器的示例。

还提供了一种专为表面和块体放射性污染开发的粒子生成器：*ContaminantSource*（第5.4节）。为确保 ImpCresst 后续各次运行在统计上相互独立，粒子生成器和后续粒子追踪（第6节）均使用伪随机数生成器(RNG)进行随机化，该生成器在启动时以不同的随机种子初始化（第5.1节）。

5.1 随机数生成器

我们使用 RANLUX [74–76][14]，这是一种适用于蒙特卡罗模拟的高质量随机数生成器 [75]。我们将其奢华等级设为最高值 4，并以纳秒级启动时间[15]作为随机种子进行初始化。我们可以放心地假设，在同一纳秒内启动的模拟任务数量可以忽略不计，因为即使在高性能计算环境中大规模并行提交作业，作业调度器启动后续作业也需要几十个 CPU 周期。因此，ImpCresst的每次运行都会有唯一的随机种子，从而生成相互独立的随机数序列 [77]。我们决定不使用（伪）随机种子[16]，因为这可能导致“生日悖论” [78]，即偶然产生相同的随机种子值。

ImpCresst允许通过保存每个事件开始时的随机数生成器状态来重新运行单个事件[17]。例如，可以从一次较大的模拟运行中挑选出一个特别有趣的事件进行可视化（见第 3.4 节）；在这次模拟中，为提升性能而关闭了可视化。如果用户决定重新运行某个特定事件，可以从原始数据中保存的 `Event` 对象恢复随机数生成器状态（见第 7 节），并将其导出为简单的文本文件[18]，然后在重新运行开始时使用该文本文件重新设置随机数生成器的种子（参见清单 1，第 130 行）。

[14]由 Geant4 通过 `CLHEP::Ranlux64Engine` 实现 [44, , 参见第 57].[15]时间通过 `std::chrono::high resolution clock` 获取，该方法自 C++11起可用。尽管其精度取决于机器，但我们的高性能计算节点可达到至少 1 纳秒的精度。[16]例如，在类 Unix 系统上通过 `/dev/urandom` 获取，或通过对时间戳进行哈希处理获取。[17]如果用户通过 Geant4 宏命令 `/run/storeRndmStatToEvent 1`启用此功能，则每个 Event 的随机数生成器状态都会开放使用。在这种情况下，ImpCresst 通过 `G4UserEventAction::BeginOfEventAction(const G4Event*)`调用 `G4Event::GetRandomNumberStatus()` 来获取该状态。[18]对于选定的 Event，可以通过 Imp Cresst `Event::StoreRngStateToFile(` 的函 `const TString& fileName)` 数从原始数据中导出随机数生成器状态。

5.2 CRY接口

初级宇宙射线在大气中产生的粒子 [79]是地表或浅层地下实验室 [80, 81]实验的重要本底源。针对这一应用场景，ImpCresst 可以链接到宇宙射线簇射库 (CRY) 1.7版[82, 83]。这使得程序能够生成大气中的中子、质子、γ、电子-、μ和π，适用于三个不同的海拔，并考虑地球磁场和太阳活动的影响；太阳活动会影响低能部分的粒子能谱。

5.3 MUSUN接口

对于位于深地下实验室的实验，只有大气 μ 子能够穿透覆盖岩层，同时仍具有显著的相互作用截面 [80, 81]。由于 μ 子能谱会受到穿过岩层时产生的能量损失影响，因此必须考虑实际的覆盖层地形。如果地下实验室位于地形复杂的山脉之下，情况尤其如此，例如位于格兰萨索山脉之下的 LNGS 中的 Cresst 。针对这一用途，我们开发了一个接口，使 ImpCresst能够读取 MUSUN [84]生成的输出文件。MUSUN 是一种专门用于计算深地下地点 μ子通量的粒子生成器，并提供 μ 子穿过由给定地形图指定的覆盖岩层后的顶点数据（位置、方向、电荷和能量）。由于 MUSUN 是外部程序，用户有责任运行该程序，并确保计算出的顶点数量与使用 ImpCresst模拟的事件数量相符。如果提供的顶点过少，ImpCresst 会在发出警告后循环回到第一个顶点并重新开始。

5.4 ContaminantSource

最后，我们开发了一种专用于模拟 Cresst 实验装置中组件放射性污染的粒子生成器，可模拟放射性核素对组件体积或表面积造成的污染：*ContaminantSource*。它基于三步法：(i) 用户选择需要“污染”的组件，然后 ImpCresst(ii) 为每个

组件分配统计权重，并且(iii)对初级粒子顶点的起始位置进行抽样，这些顶点被限制在这些组件内。

第一步，我们提供宏命令，以便根据名称、相关材料或包围的父组件来选择组件或其部件（实现为类型 G4VSolid 的对象，见第 3.1 节）。从技术上讲，这是通过在 GEANT4的 G4PhysicalVolumeStore中查找相关对象来完成的。例如（参见清单 1，第 81、91、92 行），

```
/ source /type contaminantSource /
contaminantSource / 限制
    ↪ ToMaterialInVolume↪CRESST_
铜 Carousel37 / contaminantSource / 初
始化
```

是用于选择放置在Carousel37内部的所有铜组件的宏命令。

第二步，为每个选定的组件分配一个统计权重：根据 ContaminantSource 的模式（体污染或表面污染），该权重为该组件的体积[19] 或其表面积[20] ，并分别归一化到所有选定体积的总体积或总表面积。由于几何构造期间的一致性检查可防止探测器部件发生重叠（见第 3.1 节），相对体积和相对表面积是合适的统计权重。

在最后一步，我们分两步从所选组件中抽样起始位置：由于体积和表面都具有可加性，起始位置的概率分布被分解，因此可以先抽样一个组件，然后再在该组件的体内或表面上抽样一个随机点。组件的抽样实现为逆变换抽样 [85]，基于统计权重的累积分布函数 （累积分布函数）。

在ContaminantSource 表面模式下，通过 G4VSolid::GetPointOnSurface()在组件表面获取一个随机点。由于 GEANT4没有提供类似的功能来获取G4VSolid 对象内部的随机点，我们便通过拒绝抽样[85]手动获取：将所选组件包围起来，无论其形状如何，都用一个包围盒[21]将其圈定。随后，从包围盒中均匀抽取点，只保留实际位于所选组件内部的点[22]。我们会考虑所选体积的局部坐标与 GEANT4的世界体积全局坐标之间的变换；我们需要在该世界体积中抽样，以获取合适的起始位置[23]。

在表面模式下，用户还可以考虑表面污染物的注入深度 x，即起始位置被随机下移到表面以下的程度。目前已实现三种双参数模型，均接受偏移量 A：（i）指数分布 $A - \exp(-x/\lambda)$，其中 λ 为其特征长度；（ii）高斯分布 $G(x;\ A,\ \sigma)$，其中 σ 为其标准差；（iii）均匀分布 $A + x_{\max} \cdot U(x)$，其中 $x_{\max}$ 为其取值范围的最大值。

用户可以通过 GPS 设置初级粒子起始顶点的粒子种类和动能数据；对于中子，也可以通过与 SOURCES 的接口进行设置4 [86]。以下命令示例展示了 GPS 的用法，选择 ^{234}静止的 Th 作为污染物（参见清单 1，第 85-88 行）：

```
/gps/ 粒子离子 /gps/ion
90 234 /gps/ang/ type
iso /gps/ 能量 0 MeV
```

这种非平凡衰变会显著影响 CRESST的击中重建，见第8节。

对于中子，ContaminantSource 能够从通过 SOURCES4 完成的中子产额计算所生成的输出文件中采样中子的动能。在这种情况下，初始中子方向假定为各向同性。

[19]通过 G4VSolid::GetCubicVolume()获得。[20]通过 G4VSolid::GetSurfaceArea()获得。

[21]包围盒的尺寸设为通过 G4VSolid::BoundingLimits(G4ThreeVector min, G4ThreeVector max) 得到的最大值。[22]我们使用G4Navigator::LocateGlobalPointAndSetup(G4ThreeVector position、 G4ThreeVector direction)，以获得包含所采样 position的体积。[23]所选体积可能属于以世界体积为根的嵌套体积层级。 ContaminantSource 通过访问给定体积的母体积（借助 G4PhysicalVolumeStore），从所选体积开始朝世界体积方向反向遍历该层级。在每一步遍历中，通过 G4VPhysicalVolume::GetObjectTranslation() 和 G4VPhysicalVolume::GetObjectRotationValue()获取当前母体积与子体积之间应用的任何几何变换。将各个变换串联起来，即可得到总变换。

根据本节使用的示例，图7展示了在体模式下使用ContaminantSource 的结果： 灰度图像显示了 ^{234}Th 的起始顶点，这些顶点被限制在Carousel37几何结构的铜部件中。将图7 与图3a 进行比较可以看出，顶点明显局限于铜部件中，这证实了采样过程的正确性。

6 粒子追踪

生成初级粒子时，会创建一个GEANT4 事件（类型为G4Event）：它封装了后续所有操作，例如粒子相互作用或次级粒子的产生，直到所有粒子离开模拟的世界体积、发生衰变或停止。下文中，粒子轨迹的当前状态由一个轨迹（类型为G4Track）对象表示，其传播过程则分为单独的步进（类型为G4Step）。为了提取粒子在已实现几何结构中沿轨迹运动时的信息，ImpCRESST使用基类型为G4VSensitiveDetector和G4VPrimitiveScorer的对象。

灵敏探测器 [44,第173], 页，派生自类G4VSensitiveDetector，表示类探测器行为这一抽象概念，即实验组件对通过与该组件材料的相互作用而沉积的能量的灵敏度。因此，只有将它们附加到与材料相关联的几何体积上才有意义，也就是属于第3节所述质量几何结构 [44, 第73]页中的体积。能量沉积表示为G4VHits的子类型。在 ImpCRESST中，我们使用该框架对两类探测器进行建模：(i) 将 CRESST的缪子 veto 的塑料闪烁体面板作为类型为PlasticScintillator的灵敏探测器，产生类型为PlasticScintillatorHit的击中；(ii) 将低温探测器模块内的靶晶体和光探测器作为类型为Bolometer[24]，的灵敏探测器，产生类型为BolometerHit的击中。

[24]我们注意到，CRESST的低温探测器也可以在 *calorimetric* 模式下运行。不过，从模拟的角度来看，这与 *bolometric* 模式并无区别，因此我们不会在软件设计中区分这两种模式。

为了提取与材料的相互作用无关的数据，例如穿过几何体积表面的粒子通量，我们使用计分器 [44,第173]页，派生自类G4VPrimitiveScorer。它们被放置在GEANT4的平行世界 [44,第184]页中：该平行世界覆盖于质量几何结构之上，是另一套体积层次结构，不必与材料相关联。在此情况下，粒子可以在不发生相互作用的情况下穿过平行世界中的体积。这使得它非常适合在测量粒子通量时不影响粒子。默认情况下， GEANT4 为这种所谓的计分提供了多种可能，例如通过宏命令定义平行世界体积及相关计分器 [87]。然而，它缺少一种便捷方法，使用户无需手动输入体积的位置和尺寸，即可将平行世界中的计分器附加到质量世界中的现有组件上。ImpCRESST提供了这一功能：可用的宏命令允许用户选择质量世界中的某个组件，并为其附加一个基本计分器，以便在粒子穿过该组件表面时提取粒子流、通量或能量。例如，要对入射伽马射线穿过体积TUM93A 钨酸钙所有表面的能量进行计分，即 $CaWO_4$ 靶晶体，属于探测器模块TUM93A （Carousel37中），以下宏命令即可（参见清单1，第67至73行）：

/geometry/ 添加计分器 TUM93A_钨酸钙↩伽马能量 0，在 /geometry/ buildParallelWorld 中

技术实现很直接：通过G4PhysicalVolumeStore获取与所选组件相关的质量世界体积，并在运行时于平行世界中创建一个形状和尺寸相同的体积。随后，附加一个实现抽象基类G4VPrimitiveScorer 的计分器。由于通量的正确计算取决于体积的实际形状，目前计分仅限于G4Box、G4Tubs和G4Sphere类型的体积。

通过继承 GEANT4的用户动作类[44, p. 268],ImpCRESST 不仅能提取灵敏探测器记录的击中以及计分器测得的数值，还能

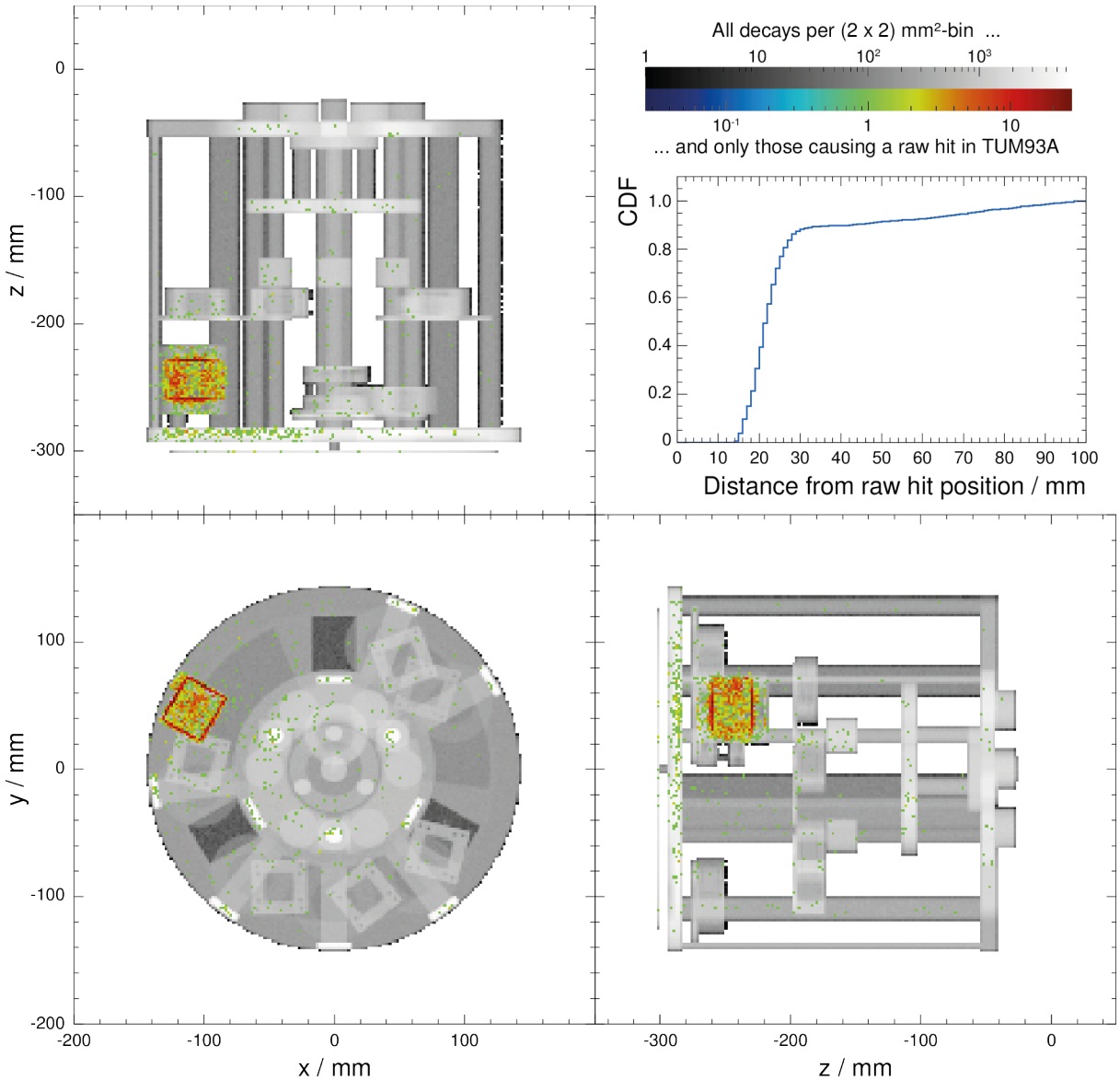

图 7：对置于 CRESST的Carousel37全部铜部件中的 ^{234}Th的 10^7 衰变进行模拟。三向投影以对数灰度显示初级粒子的顶点。对数色标 显示其中2 351个在TUM93A探测器模块的$CaWO_4$ 靶晶体内引起能量沉积（即原始击中）的初级粒子的顶点。累积分布函数 （累积分布函数）表明，大多数引起能量沉积的初级粒子起源于距击中位置不足3 cm处。

完整的 事件拓扑：初级粒子、其产生的次级粒子以及它们造成的击中之间的关联。这些数据的存储方式见第 7节。

7 原始数据持久化

ImpCRESST 版本 8.0.0 使用 ROOT [42] 版本 6.32.08 将模拟数据流式写入文件。以下章节2将详细说明原始数据的实际布局（参见章节7.1），因为它是

后续后处理（章节 8）的输入。此外，我们旨在将数据模拟与 GEANT4 以及使用 ROOT 进行的数据处理的依赖项解耦，这也会影响相关数据容器的设计（章节 7.2）。关于如何尽可能减小生成文件的大小，将在章节7.3中讨论。最后，我们为模拟数据添加元数据，以便进行数据溯源（章节 7.4）。

7.1 数据布局

我们的目标是存储完整的事件拓扑。这尤其包括粒子径迹与其“父轨迹”和“子轨迹”之间的关系，以及粒子径迹与其所产生的击中之间的关系。因此，我们采用单体事件类 [88]，它作为 ROOT`TTree` [89] 的叶节点，存储在类型为 `TFile` [90] 的 ROOT 文件中。IMPCRESST 的数据接口[25]与 GEANT4 的用户动作类 [44、263],灵敏探测器和计分器（第6节）交互，以提取数据并将其传递给专用容器类，这些容器类由我们的 ROOT 事件类聚合[26]。

图8展示了由此形成的数据布局的 UML 对象图 [91] ，并指出了所存储数据中最重要的部分[27]。可以看到，我们用自己的容器类映射了大多数相关数据类：`G4VHit/Hit`；`G4Track/Track`，`G4Event/Event`，`G4Step/ParticleState`，`G4ParticleDefinition/ParticleDefintion`，以及`G4VSensitiveDetector/Detector`。通过使用 ROOT 的`TRef` [93] 和`TRefArray`[94] 类型，我们实现了不同`Track` 对象与`Hit` 对象之间轻量且持久的引用。例如，每个击中都指向创建它的径迹，反之亦然；或者，我们通过`PrimaryTrack` 提供一个快捷方式，用于访问`Tracks` 集合中存储的、属于初级粒子的`Track` 对象。

除了原始 GEANT4 数据外，还为每个探测器类提供了三个派生实体：SumEnergy、AverageHit和EnergyWeightedHit 分别用于快速获取当前事件中探测器内部的总能量沉积、计算所有探测到的击中的平均值，以及根据每次击中的相对能量沉积对平均值加权。

为了展示获取完整事件拓扑的实用性，图7以色标显示了那些在`TUM93A`探测器模块的靶晶体中沉积能量的 ^{234}Th 衰变的位置。对于存储在原始数据中的给定事件，这很容易实现：从`Detectors`集合中检索`TUM93A` ，检查其`Hits`集合是否非空；若非空，则访问`PrimaryTrack`的`StartState` 中存储的`Position`。计算初级粒子的起始顶点与`AverageHit`位置之间的距离可见，^{234}Th 是一种具有短程衰变辐射的污染物：在探测器中可见的衰变中，超过 80% 位于探测器周围 3 厘米范围内。

另一个示例如图 11所示：通过识别中间核能级，将由内禀 ^{234}Th 污染导致的能量沉积分解为不同的退激发路径。由于完整的事件拓扑均已存储，因此可以使用简单的 ROOT 宏递归遍历该拓扑，识别衰变级联中的第一个和最后一个能级，并据此划分数据（更多详情见第 8.1节和 8.3节）。

7.2 模拟与数据处理的解耦

为了使数据容器的接口与对 GEANT4 的任何依赖解耦，我们采用了桥接 模式 [48]。图 9 以轨迹类为例进行了说明：用户专门化的 GEANT4 用户操作类`G4UserTrackingAction`会创建并调用一个`interfaces::Track` 类型的对象。该对象提供了从`G4Track` 对象提取数据的所有功能。因此，它依赖于 GEANT4，并在其接口中公开了 GEANT4 数据类型，例如`G4int`。在内部，它会实例化一个`containers::Track`类型的对象，用于存储提取的数据；这些数据会先转换为 ROOT 数据类型，例如将`G4int` 转换为`Intt`。该容器类仅依赖于 ROOT，并会传递给`containers::Event` ，以便存储到输出 ROOT 文件中。因此，一旦模拟数据

[25]这些类封装在命名空间`impCresst::dataRecord::interfaces`中。[26]这些类封装在命名空间`impCresst::dataRecord::containers`中。[27]完整列表请参阅 Doxygen [92] API 文档；该文档可在安装 IMPCRESST 时生成。

表 3：ImpCresst 原始数据文件的相对大小，以及采用 ROOT 不同压缩设置（包括压缩算法和压缩级别）时模拟的相对运行时。数值均以 ROOT 的标准设置为基准进行归一化，标准设置以星号标记（*）。作为测试案例，在 TUM93A 的 $CaWO_4$ 靶晶体中模拟了 10^3 次 ^{234}Th 衰变。在该测试案例中，100% 对应于所用计算机上 215MB 的绝对文件大小和 94s 的绝对运行时。为避免文件大小出现统计涨落，每种设置均使用相同的随机数生成器种子进行模拟。运行时的离散程度对应于 7% 的相对不确定度。

	压缩设置 算法、级别	文件大小 / %	运行时 / %
	kLZ4, 1	113	97
*	kZLIB, 1	100	100
	kOldCompressionAlgo, 1	100	90
	kZSTD, 1	80	99
	kLZMA, 1	72	116
	kLZMA, 7	68	249
	kLZMA, 9	68	258

存储后，它们可以在没有任何 Geant4 依赖项的情况下进一步处理或分析。

处理后文件的数据结构取决于实际的处理过程。有关使用12处理时的数据结构，请参见第8节中的图 CresstDS。

7.3 文件大小缩减

生成的 ROOT 文件使用kLZMA 算法进行压缩，因为它比 ROOT 默认的kZLIB [90, 95, 96]更高效。我们选择了压缩级别 1，因为它在压缩效率提升（−28%）与运行时开销（16%）之间取得了平衡。更高的压缩级别（例如 ROOT 为kLZMA 推荐的值 7，或最大值 9 [97, 98],）带来的改进极其有限，但开销却显著增加，详见表3。为便于处理，文件每 50GB 会自动分割。

为了在减少详细数据存储的同时控制文件大小，提供了以下宏命令：

- 若不存储 AverageHit 和 能量加权命中，请参见清单1第 113、114行。
- 若不存储每个 Event 的全部径迹，而仅存储造成 Hit 的径迹，请参见清单 1第111行。此设置适用于例如仅关注沉积能量的粒子的情形。然而，若要回溯这些粒子的来源，则需要存储全部径迹，以保留完整的父子径迹链。
- 如需不存储击中信息，请参见列表 1，第 116 行。此设置适用于仅关注能量沉积总和，或用户自定义计分器在每个事件中的累积值等情况。在这种情况下，无法再使用 CresstDS 进行后处理。
- 如需仅存储初级粒子，请参见列表1，第120 行。此设置适用于例如研究粒子穿过辐射屏蔽体时的透射情况。
- 如需每次击中仅存储精简数据集（能量沉积、可见能量沉积、命中时间和步长），请参见列表1，第122 行。

表4以^{234}Th 衰变作为 10^3 $CaWO_4$靶晶体的本底污染为例，展示了这些设置对文件大小的影响，该晶体属于TUM93A。正如预期，在此使用场景下，每次击中仅存储精简数据集，既能最大限度地减小文件大小，又不会失去使用 CresstDS处理数据的可能性。因此，这是 ImpCresst 的默认设置。关闭所有物理信息的存储（自上而下第八行），则显示数据结构本身带来的额外开销相对较小。

对于本征 本底，关闭storeAllTracks 并不能显著减小文件大小，因为每条径迹通常至少会产生一次 Hit。因此，由于storeHitTracks默认处于开启状态，它仍会被存储。相反，在模拟外源 本底时，将storeAllTracks=false 是减小文件大小的有效方法。

7.4 元数据标注

为了实现可靠的数据溯源或数据血缘，每个所创建的输出文件还包含一个类型为 dataRecord::containers::Record 的对象，该对象会自动记录有关模拟的某些元数据。如果 ImpCresst 是使用所提供的 CMake 构建配置 [99]从本地 Git 仓库 [100], 编译的，它将知晓所使用的 ImpCresst版本、

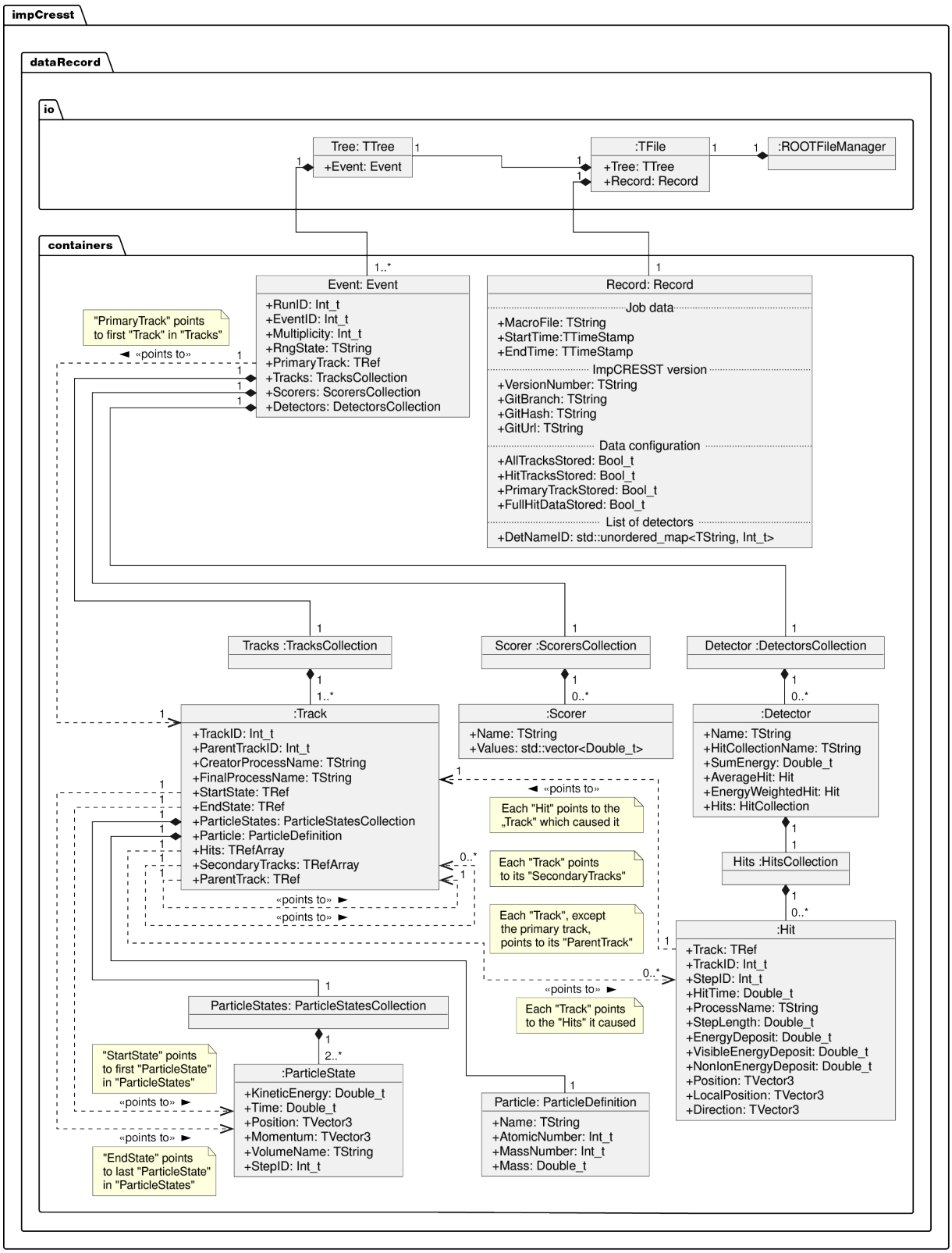

图 8：ImpCresst 用于在 ROOT 文件中存储模拟原始数据的数据结构的简化 UML 对象图。为简洁起见，未显示 `Record` 的所有数据成员。详情请参阅正文。20

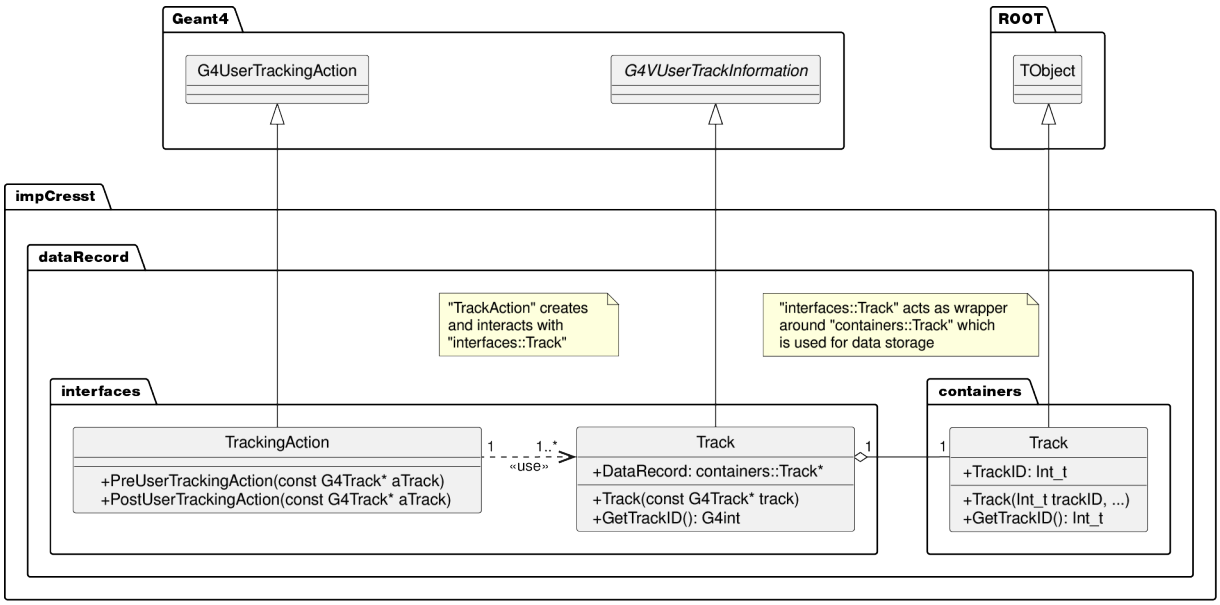

图 9：桥接设计模式的简化 UML 类图，以 Track 类为例，展示如何将对GEANT4 和 ROOT 的依赖项分离。详情请参阅正文。

所用的 Git 仓库，以及其中是否包含尚未发布的修改[28]。若有此类修改，则会给出相应的 Git 提交哈希。此外，还会记录用于配置 ImpCRESST 模拟的宏文件、模拟的起止时间以及运行模拟的机器，并记录其他元数据，参见图 8。此外CRESSTDS还会自动添加一个类似的 Record 对象，参见图 12。

8 探测器响应

如第 2 节所述，我们的模拟流程分为两个步骤。首先，ImpCRESST模拟微观物理（第 4 节），并保存包含所有相关信息的原始数据，如图 8 所示。第二步是使用 CRESSTDS对原始数据进行后处理，以应用真实探测器响应的效应，包括有限的时间和能量分辨率以及闪烁光探测。也就是说，根据灵敏探测器（第 `dataRecord::containers::Hit` 节6）记录的 `dataRecord::containers::Hit` 类型原始击中并包含在 `Detector` 对象中（图 8），它会构建我们称为 探测器击中 的 `cresstDS::containers::DetectorHit` 类型数据，其可与真实 CRESST 探测器模块（第 8.1 节）测得的数据相比较。响应模型通过针对各探测器配置的数据处理器应用（第 8.2 节），处理后数据再次以 ROOT 文件形式保存（第 8.3 节）。

8.1 探测器响应建模

首先应用的探测器响应效应是有限的时间分辨率。我们将其建模为时间段 T，在此期间，原始击中通过由两个状态组成的有限状态机进行积分：积分窗口处于打开或关闭状态，见图 10。处理过程从读取第一个原始击中开始，该击中会触发积分窗口打开。随后，将落在此窗口内的原始 击中所沉积的能量 E_i i 累加E_{sum}。积分窗口关闭后，E_{sum} 会被存储为新的探测器 击中，接着下一个原始击中会打开另一个积分窗口。我们发现，采用 $T = 2\,\mathrm{ms}$ 的经验值进行处理后，得到的数据与使用CRESST 探测器模块采集的真实数据相符。

[28]在配置构建流程时，CMake 会从本地 Git 仓库提取这些数据，并通过其 `add compile definitions` 命令 [101]将其作为预处理器定义提供给构建流程。在 ImpCRESST中，命名空间 `impCresst::buildInfo` 中的函数会访问这些预处理器定义，对其进行处理，并将数据传递给 `containers::Recorder` 对象。

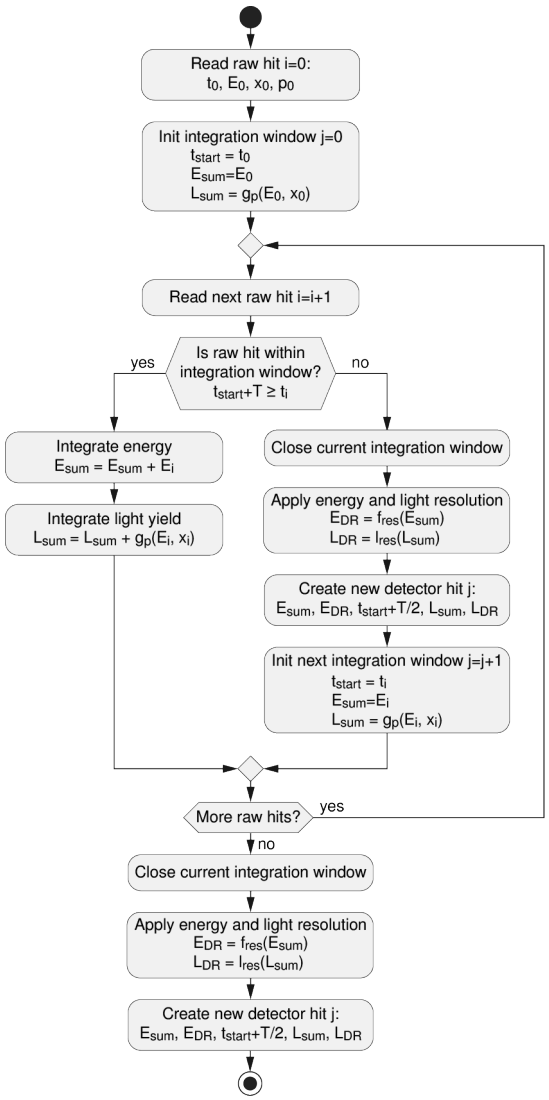

图 10：探测器响应建模的 UML 活动图：探测器击中（类型为 `cresstDS::containers::DetectorHit` 的对象）通过对原始击中（类型为 `dataRecord::containers::Hit` 的对象）进行积分而创建，其中，持续时间 T 即积分窗口，代表探测器的时间分辨率。对于每个原始击中，根据参数化g从沉积能量 E_i 计算闪烁光产额；该参数化还可能取决于导致原始击中的步长 x_i和粒子 p 。积分窗口关闭后，通过使用经验参数化 f_{res}对积分能量 E_{sum} 进行随机化，以应用能量分辨率。同样，闪烁光产额 L 也会经过积分，并由 l_{res}进行随机化。索引“DR”表示已应用探测器响应的量。

表 4：由指定宏命令控制的不同数据配置下，ImpCresst原始数据文件的相对大小。圆点 (●) 表示宏命令设为真，空心圆点 (○) 表示设为假。星号 (∗) 表示默认配置。作为测试案例，对 `TUM93A` 的 $CaWO_4$ 靶晶体中的 ^{234}Th 衰变进行了模拟。在此测试案例中，100% 对应的绝对文件大小为 152 MB。为避免文件大小出现统计涨落，每种设置均使用相同的随机数生成器随机种子进行模拟。

	宏命令							相对大小 / %
	`storeAverageHit`	`storeEnergyWeightedHit`	`storeAllTracks`	`storeHitTracks`	`storePrimaryTrack`	`storeFullHitData`	`storeHits`	
	●	●	●	●	●	●	●	100.00
	○	●	●	●	●	●	●	99.93
	○	○	●	●	●	●	●	99.84
	○	○	○	●	●	●	●	97.02
	○	○	○	○	●	●	●	64.77
	○	○	○	○	○	●	●	64.73
	○	○	○	○	○	○	●	22.26
	○	○	○	○	○	○	○	0.67
∗	○	○	○	●	●	○	●	54.96
	○	○	○	○	●	○	○	0.71

在 ^{234}Th 衰变的情况下，时间分辨率的影响显而易见（见图 11[29]）：衰变级联经过同核异能态 ^{234}Pa^{m}，其半衰期长达 $T_{1/2} = 1.159$ 分钟，相较于 Cresst的时间分辨率要长得多。因此，每次 ^{234}Th 衰变都有很高的概率产生两个 探测器击中：第一个是瞬发击中，对应图 11中的红色、蓝色或橙色 群体；另一个是延迟击中，对应绿色 或紫色群体。对于^{234}Pa 的所有其他激发能级， ^{234}Th 衰变时 β 衰变后的原子核退激，相较于时间分辨率都很快，因此 β 能谱会发生偏移，因为

[29]有关如何在基于 ImpCresst/CresstDS 的工作流中识别所示衰变路径的技术细节，请参见第 7.1 节和8.3节。

发射的能量 γ射线（蓝色和红色群体）。由于我们拆分核衰变链的方式（见第4.1节），图 ^{234}中未包含11所示的 Pa 衰变本身，但必须单独模拟，参见例如文献 [23]。

应用的第二种效应是有限的能量分辨率。在窗口关闭状态下，积分能量 E_{sum} 会通过函数$f_{\mathrm{res}}(E)$进行随机化，该函数用于参数化能量分辨率，类型为 ROOT 的`TF1` [103] 。对于 CRESST，这通常是一个以 E_{sum} 为中心的高斯函数，其随能量变化的标准差由（校准）测量经验得出。不过，用户可以自由指定 `TF1` 类支持的任何函数。由于 CRESSTDS也会保存 E_{sum}，即未经随机化的积分能量沉积，因此无需原始数据文件即可应用不同的能量分辨率。这样便可轻松调整处理后数据，以适应实际测量中不同的分析流程，从而获得不同的能量分辨率。

由于 ImpCRESST 默认不会模拟 CRESST的闪烁靶晶体发出的光（第 4.5 节），因此在后处理期间，也会使用 L 通过线性近似计算淬灭后的闪烁光产额 CRESSTDS。与能量积分类似，会计算每个原始击中的光产额L_i ，并在窗口开启状态下将其累加到L_{sum}。在窗口关闭状态下， L_{sum} 会根据分辨率函数进行随机化 l_{res} ，并赋给所生成的探测器击中。 CRESSTDS 提供两种计算 L_i的方法：一种基于最初为有机闪烁体开发的 Birks 闪烁理论 [104]，另一种基于经验参数化。

对于 Birks 方法，

$$L_i = g(E_{\mathrm{hit},i}, x_i) = \int_x \frac{\mathrm{d}L_i}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x = S \cdot \frac{E_{\mathrm{hit},i}}{1 + kB\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}}$$

我们通过$E_{\mathrm{hit},i}$ 近似特定能量损失 $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$ ，其中 x为相关步长，并将S 和 kB 视为经验参数。

或者，也可以使用淬灭光产额$L_i = L_{i,p} = g_p(E_{\mathrm{hit},i})$的经验参数化，其中 p 是造成原始Hit的粒子类型。对于 $CaWO_4$, ，我们提供了参考文献 [105] 中 Birk 方法的默认值，以及参考文献 [106] 中的淬灭光产额参数化。同样，用户也可以输入任何受 `TF1` 类支持的参数化。对于CRESST，我们发现使用参数化的$L_{i,p}$可以使模拟结果与真实数据吻合良好，见 [16, 18]。

光分辨率函数 l_{res} 可以是 `TF1` 类所支持的任意函数。与能量分辨率的情况类似，对于 CRESST 它通常是高斯函数，其依赖能量的标准差通过（校准）测量以经验方式获得。

8.2 可配置数据处理

该 CRESST实验使用多个探测器，因此使用 CRESSTDS 进行的数据处理必须具备模块化、灵活和动态的特性：它会识别原始数据中存在的所有灵敏探测器，并为每个探测器创建一个 探测器命中构建器类型的对象，该对象负责应用特定探测器的响应，并根据原始 击中创建探测器 击中。每个探测器命中构建器 都注册到一个数据处理器对象中；该对象读取原始数据，识别由给定灵敏探测器记录的原始击中，并将其分派给相应的探测器命中构建器。这些探测器命中构建器 对象通过结构化文件进行配置，这些文件由 *libconfig* 库[107], 以下称为探测器配置文件解析，示例见列表2。

此文件由若干组 设置组成，每项设置都是一个键值对。在这里，一个组对应一个探测器，包含探测器响应参数和探测器名称。例如，清单2第 34 至40 行的组对应 TUM93A 探测器模块，而第 35 行的设置指定了其名称。组通过灵敏探测器名称与相关的探测器命中构建器对象匹配。

如果未找到匹配的组，则默认组（参见列表 2，第 1-32行）将被使用，并且CRESSTDS 会发出警告。默认组还用于替代探测器专用组中缺失的设置。因此，通用标准值只需指定一次，即置于默认

[30]请注意，若采用 Birks 方法，可能需要对最大步长进行一定的微调才能获得满意的结果，参见 [18]。ImpCRESST 为此提供了第54 行的宏命令，见清单1。

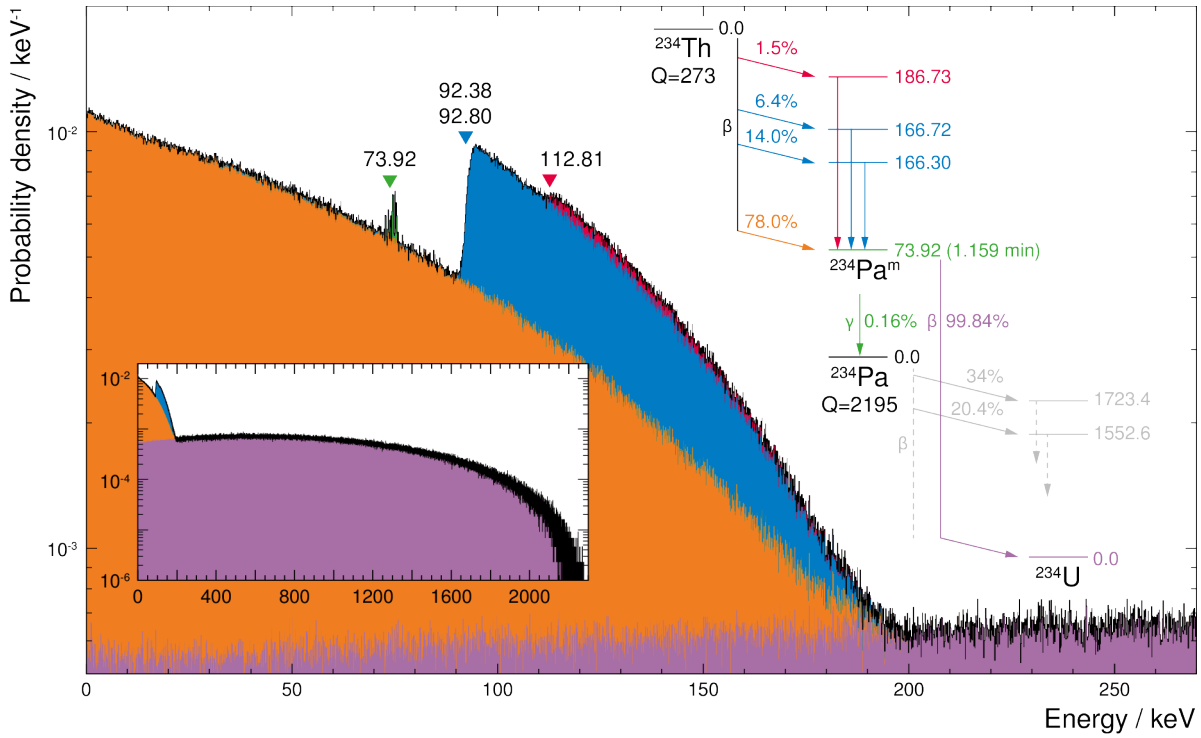

图 11：模拟 $4.377\,5 \cdot 10^6$ 衰变，即 ^{234}Th 在 $CaWO_4$ 靶晶体（TUM93A 探测器模块）内的衰变，并应用探测器响应模型（分箱大小为 100 eV）。插图将显示范围扩展至 2.3 MeV（分箱大小为 1 keV）。由于同核异能态 $^{234}\mathrm{Pa}^{\mathrm{m}}$ [73.92 keV]，该衰变产生即时（橙色、蓝色和红色填充直方图）与延迟（紫色填充直方图以及绿色峰，位于 73.92 keV）探测器击中。模拟在到达子体核素 ^{234}Pa 与 ^{234}U 之一的基态后结束。因此，^{234}Pa 本身的衰变未包含在内，须单独模拟。简化能级图的数据取自 [102]，并以 keV 给出。^{234}Pa 的衰变纲图仅部分给出，并通过灰色虚线加以示意。

组内，而无需针对每个探测器重复。例如，对于列表2 中的 TUM93A 组，仅将能量分辨率函数 f_{res} 指定用于该模块（第 39行），而光分辨率函数 l_{res} 则取自默认组（第 10行）。由于 libconfig 文件是人类可读的，用户可以轻松提供自己的组，包括默认组。

8.3 处理后数据布局

为了对处理后数据进行高层分析，除了记录的探测器击中外，还必须存储其他数据，例如初级粒子、模拟事件总数以及元数据记录。

CRESSTDS 数据布局包含了所有这些数据，如图12所示。

与原始数据（图 8）类似，每个事件的处理后数据也以叶节点的形式存储在 ROOT `TTree`中。不过，由于粒子径迹与原始击中之间的关联在积分过程中丢失，因此不再需要单体事件类。我们改用多个 `TBranches` [108]：分支 `PrimaryParticle` 存储与 ImpCRESST模拟中的初级粒子相关的 `cresstDS::containers::Primary`类型数据。与原始数据布局（图 8）类似，探测器击中的集合按探测器对象分别存储，每个对象的类型为 `cresstDS::containers::Detector`；探测器对象集合则存储为分支`Detectors`。计分器（第6节）的数据存储在分支 `Scorers`下。

由于原始击中累积为探测器击中，处理后文件的大小通常

显著小于原始文件的大小，因此适合长期数据存储。例如，图11 基于 683GB 的原始数据，这些数据经 197 倍压缩后变为 3.46GB 的处理后数据。

尽管在使用 CRESSTDS进行处理时，原始击中与径迹之间的关联会丢失，但仍可根据原始径迹属性分析生成的探测器击中，如图 11所示：首先，根据所研究的标准（此处为核衰变路径）对原始数据进行相应的数据分区。之后，分别处理每个数据分区。这种方法可以方便地通过工作流来实现，例如使用 Nextflow 管理的工作流（见第 9节）。

9 可追溯性与可复现性

ImpCRESST 的设计高度重视可追溯性与可复现性，确保使用该软件包执行的每次模拟都能可靠地复现并独立验证。

模拟文件的元数据标记（参见第 7.4 节）使我们能够识别每个模拟数据集所用的 ImpCRESST 版本以及所用的宏文件。如果原始数据是使用 CRESSTDS处理的，也会记录所用的探测器配置文件。我们遵循语义化版本原则 [109], ，每个发布版本都会明确标注，以反映更改的性质——主版本、次版本或补丁更新——并且具有唯一标识。发布版本和完整代码库均采用基于 Git 的版本控制[100], ，从而提供所有修改的透明记录。此外，每个发布版本都包含一套全面的安装说明，严格列明 ImpCRESST 及其计算环境的依赖项[31]。这些说明和版本管理使用户能够精确复现软件在已发表分析中所用的计算环境。在相同环境中使用相同的宏文件和相同的随机数生成器种子运行模拟，将得到相同的模拟数据。

为增强跨平台的可复现性，我们使用容器镜像将环境容器化，其中封装了特定版本的 ImpCRESST发布版本及其依赖项。容器镜像通过与我们的内部 Git 仓库集成的持续集成和持续部署（CI/CD）流水线创建。我们采用嵌套容器化策略：一个专用的内部 Git 仓库托管 CI/CD 流水线，用于构建包含 GEANT4 和 ROOT[32],的容器，该容器作为构建 ImpCRESST 容器[33]的基础环境。由于 GEANT4和 ROOT 环境通常在多个 ImpCRESST 发布版本期间保持稳定，这种嵌套方式避免了每次发布新的 ImpCRESST版本时不必要且耗时的 GEANT4 和 ROOT 重新编译。当内部 ImpCRESSTGit 仓库中的任何分支被“标记”时，CI/CD 流水线就会触发，例如发布新的 ImpCRESST版本时。新创建的容器会自动部署到协作组的内部容器注册表。经授权的用户可以轻松拉取容器，将其作为 Docker [112]或 Apptainer [34] [113]镜像。后者是首选的容器框架，适用于在高性能计算环境中部署。使用容器镜像可确保在相同容器中执行的模拟运行于逐位完全相同的环境中，而不受底层操作系统或硬件配置的影响；这对于科学可复现性至关重要。

容器化还便于我们在生产运行中使用惰性并行（见第2节），这些生产运行在马克斯·普朗克计算与数据中心（MPCDF，慕尼黑，[114]）和云基础设施平台（CLIP，维也纳，[115]）进行。通过并行启动大量独立的模拟实例来编排可扩展的并行计算，既可以用简单的 Shell 脚本完成，也可以使用 Nextflow [116][35] 等现代科学工作流管理器。在 CRESST 中，我们对后者有良好的使用经验 [117]:

[31]对于 ImpCRESST 版本 8.0.0，运行环境基于 AlmaLinux 9 版。5 [110], GCC 版本为 8。3 [111], GEANT4 版本为 10.6。3 [10], ROOT 版本为 6.32。08 [43]; 遵循 C++17 标准。详情请参阅随 ImpCRESST 软件包一同发布的文件 `./README.md`、 `./CONTRIBUTING.md` 和 `./doc/codingStyle.md` 。

[32]我们决定不使用官方的 GEANT4 和 ROOT 容器，以确保 GEANT4、ROOT 与 ImpCRESST 的构建设置一致。[33]构建流程的配方以 Dockerfile 格式给出。为方便用户，ImpCRESST 软件包中附带了 GEANT4/ROOT 和 ImpCRESST 构建流程的配方：分别为 `./examples/geant4RootContainer/Dockerfile` 和 `./Dockerfile`。[34]此前称为 Singularity。[35]我们在发布的

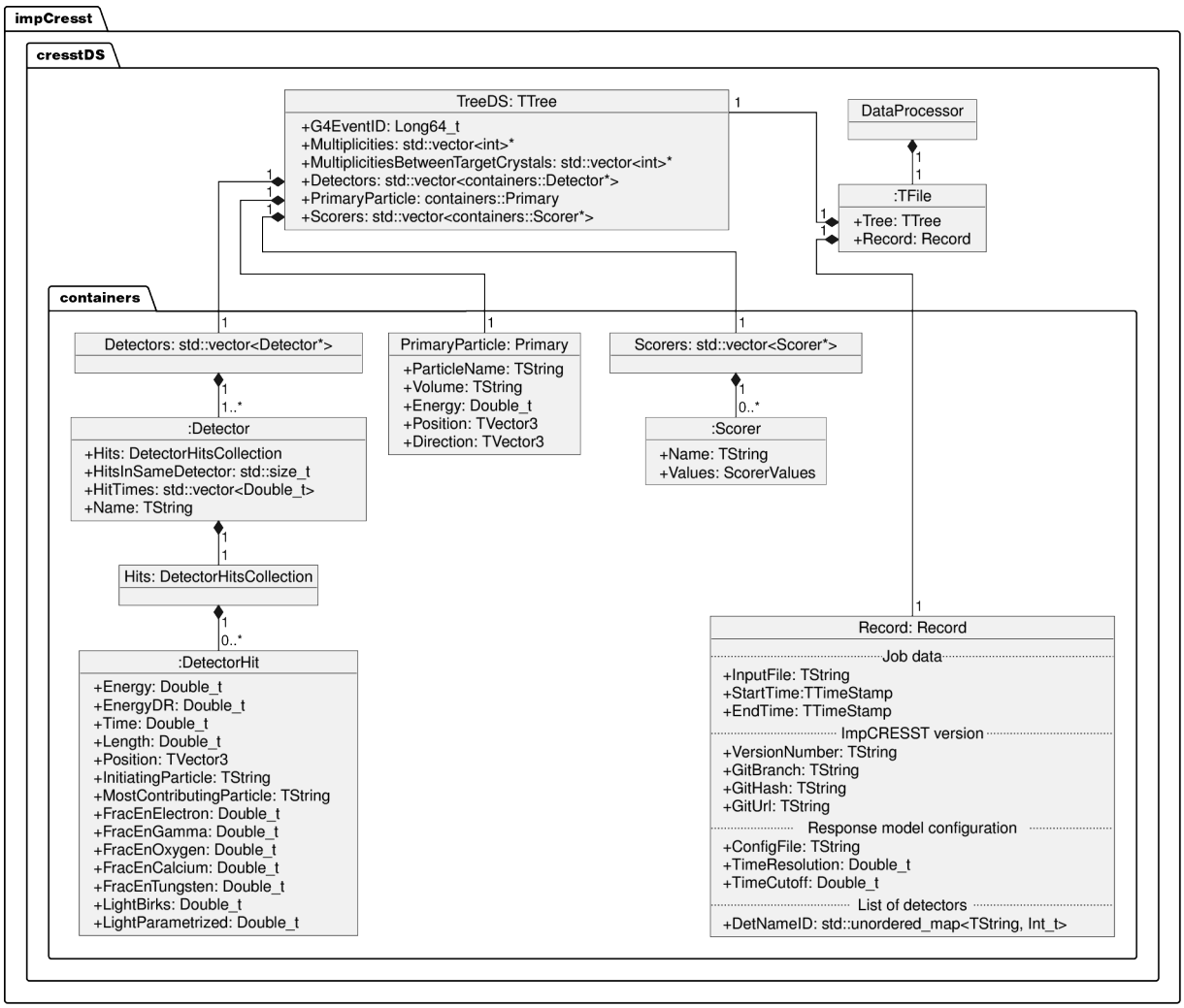

图 12: CresstDS 用于在 ROOT 文件中存储处理后数据的数据结构的 SimplifiedUML 对象图。为简洁起见，未展示 `Hit` 和 `Record` 的所有数据成员。详情请参阅正文。

它可以轻松编写工作流脚本（多次并行运行 ImpCresst，每次运行后使用 CresstDS对原始数据进行后处理，最后合并处理后数据），它会透明地加载容器镜像，并处理与作业调度器的通信，在我们的案例中为 Slurm [118]。它还增强了可复现性，因为不仅可以复现模拟本身，还可以通过重新运行 Nextflow 脚本来复现整个模拟工作流。

ImpCresst 软件包，分别参见 `./examples/simulationWorkflowBash/` 和 `./examples/simulationWorkflowNextflow/`。

10 结论与展望

本文介绍了 ImpCresst，这是一款开源、基于 Geant4 的蒙特卡罗模拟工具，专为搜寻暗物质的 Cresst 实验开发，适用于低温固态粒子探测器。该工具也可轻松适配其他采用固态探测器的稀有事件搜索。

据我们所知，ImpCresst 是唯一公开可用的模拟程序，专门针对异构且快速演变的探测器环境进行了调优：提供灵活的几何结构处理，用于新探测器的快速原型设计

通过直接读入 CAD 文件（见第3节）；在 keV 范围开展本底研究，提供电磁相互作用与原子核退激的详细建模（第4节）；以及面向放射性成因本底源和宇宙成因本底源的通用、易用粒子生成器。ImpCresst还包括ContaminantSource，一种便于用放射性体污染物或表面污染物对灵活的几何区域选择进行“污染”的粒子生成器（第5节）。为支持快速的实验开发过程，ImpCresst提供完整事件拓扑的数据持久化，作为开发经调优的数据后处理与分析的基础。自动元数据标注能够实现稳健的数据溯源（第7节）。对于标准数据分析，我们提供辅助 CresstDS 工具，以灵活应用时间和能量分辨率的参数化模型。其探测器特定参数存储在一套易于维护的人类可读配置文件中（第8节）。ImpCresst 非常适合以可追溯且可复现的方式部署于高性能计算环境。作为示例，我们描述了基于 Apptainer 进行容器化、基于 Slurm 进行作业调度以及基于 Nextflow 进行工作流管理的工作流，见第9节。

此外，使用 ImpCresst 模拟液态和气态探测器靶材，以及模拟 10 MeV 量级以上的相互作用，在技术上也是可行的；然而，由于这些用例超出了 Cresst 的范围，我们不会对其进行验证或调优。同样，我们不支持对半导体探测器中的电子-空穴相互作用进行建模。

未来计划对 ImpCresst 进行多项改进：为加快针对外部环境 γ 本底的屏蔽研究（这类研究耗时较长），我们目前正在实现参考文献 [119] 中所述的偏置方案。为提高对近表面放射性污染物模拟的保真度，我们团队开发了一种经过性能优化的方法，可根据真实世界的粗糙度轮廓 [120, 121]，将污染物放置在精细的表面几何结构中；该方法可在 [122] 获取，并将纳入 ImpCresst的未来发布版本。这些粗糙度轮廓也可用于改进我们的光学模拟能力。对于电磁相互作用，我们计划将默认的 EMPC 切换为 G4EmLivermore，因为我们在参考文献 [123] 中发现，与目前使用的 G4EmStandardPhysicsoption4相比，它对参数变化的鲁棒性更强，更适合我们的应用场景。为改进对本底过程的建模——这些过程目前对 Cresst而言影响较小，但未来在探测阈值降低时可能变得重要——我们正在考虑加入相干光子-原子核散射 [124, 125] 和相干中子散射 [126]。我们也可能通过与 G4CMP [127]对接来加入声子相互作用。总体而言，我们的近期目标是升级到最新的Geant4 版本 11，尤其是利用其在中子物理 [128,129] 和原子核退激建模[130]方面更高的精度。因此，ImpCresst 也将采用版本 Geant4 11 的默认多线程功能。在技术方面，我们正在考虑为定义明确的物理案例实现自动化测试，以防止软件开发过程中出现回归。我们还计划将ContaminantSource 作为独立的软件库提供，以便轻松集成到其他基于Geant4的应用程序中。

正如 Nucleus 和 Cosi-nus 合作组的使用实践所表明的那样，ImpCresst非常适合用于在异质环境中处理低温固态粒子探测器的其他实验。因此，从当前的 8.0 版本开始，0 [11], 我们将发布 ImpCresst作为 GPLv3 许可下的开源代码[131]。我们的发布版本公开镜像位于：https://github.com/cresst-experiment/impcresst/。

致谢。本研究部分经费来自德国研究联合会（DFG，德国研究基金会），资助依据为德国卓越战略——EXC2094——390783311，以及特别研究领域（合作研究中心）SFB1258“天体物理与粒子物理中的中微子和暗物质”；此外还获得德国联邦教育与研究部项目 05A23WO4 和 05 A23VTA、奥地利科学基金（FWF）DOI:10.55776/PAT1239524 以及 DOI:10.55776/I5420的资助。J. Burkhart 和 H. Kluck 获得了 FWF“ELOISE”项目的资助 DOI:10.55776/P34778。布拉迪斯拉发团队感谢斯洛伐克研究与发展局（项目 APVV-21-0377）提供的部分资助。

我们衷心感谢 S. Arora、C. Fritz 对 ImpCresst 软件包的贡献，

以及 E. Gutmann、L. Heckmann、A. Karl、M. Kirchner、V. Palu˘sov´a、L. Pfaffenbichler、M. Poneder、R. Prinz、A. Rabensteiner、F. Stummer、C.T¨urko˘glu 和 M.Weiskopf。

特别感谢 S. Scholl，他构思了最初的代码并命名为“ImpCresst”，为本项目奠定了基础。

声明。

• **利益冲突/竞争性利益：**作者没有需要披露的相关财务或非财务利益。

•**代码可用性：**ImpCresst 软件包可在以下网址获取：https://github.com/cresst-experiment/impcresst/

•**作者贡献：** H. Kluck 构思了本文并协调了写作。S. Banik、R. Breier、H. Kluck 和 V. Mokina 撰写了稿件。可视化工作由 J. Burkhart 完成，其余图示由 H. Kluck 制作。“ImpCresst”的整体开发由其指导委员会（S. Banik、R. Breier、H. Kluck 和 V. Mokina）共同完成，该委员会由维护者（H. Kluck）主持。子软件包“ContaminantSource”主要由 A. Fuss 开发。所有作者均审阅并同意了本文。

附录 A 示例文件

清单 1 摘录了 ImpCresst 宏文件，其中的模拟生成了图 7。图 CresstDS 所用配置文件的精简版本11 见清单 2。

为了展示 CresstDS 配置文件的结构，列表 2 展示了探测器模块 TUM93A 的一组设置。然而，在本文发布时， Cresst的第 37 次数据采集运行仍在进行，因此尚无该次运行中 TUM93A 的探测器响应参数。故而，TUM93A 给出的能量分辨率重复使用了默认值。对于光淬灭参数化 设置，氧和钨分别编码为 `O1` 和 `W1`；这一设置将在 CresstDS 的未来版本中更改。

列表 1：ImpCresst 宏文件摘录，展示了如何：模拟 ^{234}Th 在 Cresst 的 `Carousel37` 铜部件内部的衰变，从 CAD 文件加载探测器模块，在平行世界中创建计分器，并配置几何结构、物理列表和数据存储。以井号 (#) 开头的行是注释。在已发布的 ImpCresst 软件包中，可以在 `./examples/contaminantRange234Th/range.mac`找到完整文件。

```
1#################################################################### #
2 # 预初始化状态3 4 # 将随机数生成器状态保存到文件，并且5 # 同时将状态提供给用户代码6 /run/
storeRndmStatToEvent 17 8 # 模拟运行期间不输出详细信息9 /tracking/verbose 010 11 # 宏文件路径通
过环境变量设置12 # IMPCRESST_MACRO_PATH，该变量会在13 #./bin/thisImpCRESST.sh 或 ./bin/
thisImpCRESST.csh 脚本被 source 后自动设置。14 /control/getEnv IMPCRESST_MACRO_PATH15 /
control/macroPath {IMPCRESST_MACRO_PATH}16 17 # 可选：启用光学物理18 #/physics/activateO
pticalPhysics true19 20 # 可选：选择一个电磁物理构造器21 /physics/emConstructor
G4EmLivermore22 23 ##################################################################
##########24 # 初始化状态 25 26 # 初始化 Geant4 的运行管理器，这是创建几何结构之前 27 # 必须执行
的步骤28 /run/initialize29 30 # 几何设置 ----------------------------------------------------
----31 32 # 设置重叠检查和详细程度 33 /geometry/checkForOverlaps true34 /geometry/
verboseLevel 235
```

36 # 将装置设置为 CRESST 在 LNGS 的完整配置 37 /geometry/setSetup CresstAtLNGS 38 # 选择第 37 次数据采集运行的探测器转盘 39 /geometry/CresstAtLNGS/chooseCarousel Carousel37 40 41 # 将探测器添加到转盘： 42 # /geometry/<Carousel>/addDetector <DetectorType> <NameOfDetector>↪ <DetectorSlotPosition> <pathTo.ObjFile> <pathTo.macFile>43 # 默认安装中，包含 CAD 图纸（OBJ 文件）的「geometry」目录位于 44 # 45 /control/alias IMPCRESST_GEOMETRY_PATH↪{IMPCRESST_MACRO_PATH}/../geometry 46 47 # CRESST3Detector 48 /geometry/Carousel37/addDetector CRESST3Detector TUM93A TUM93A↪{IMPCRESST_GEOMETRY_PATH}/CRESST3Detector/CRESST3.obj↪{IMPCRESST_GEOMETRY_PATH}/CRESST3Detector/CRESST3Detector.mac 49 # 其余探测器模块也以类似方式从 OBJ 文件加载， 50 # 详情请参阅完整的宏文件。 51 52 # 在光学模拟中调整闪烁淬灭时，可能需要 53 # 将 <材料>的最大步长限制为 <步长限制>（单位：mm） 54 # /geometry/setStepLimitMaterial <material> <stepLimit>55 56 # 构建装置 57 /geometry/buildSetup 58 59 # 将屏蔽的右侧、左侧和前侧部分各移动 1 m，以打开屏蔽 60 /geometry/CresstAtLNGS/ShiftShieldingRight 1.0 m 61 /geometry/CresstAtLNGS/ShiftShieldingLeft 1.0 m 62 /geometry/CresstAtLNGS/ShiftShieldingFront 1.0 m 63 64 # 在平行世界中添加计分器：对入射到以下位置的通量和能量进行计分 65 # 电子和伽马射线：TUM93A 探测器模块的 CaWO4 靶晶体 66 # 67 /geometry/addScorer TUM93A_CaWO4 e-flux 0 in 68 /geometry/addScorer TUM93A_CaWO4 gamma flux 0 in 69 /geometry/addScorer TUM93A_CaWO4 e-energy 0 in 70 /geometry/addScorer TUM93A_CaWO4 gamma energy 0 in 71 72 # 构建平行世界 73 /geometry/buildParallelWorld 74 75 # 可选：启用可视化 76 # /control/execute./mac/visualization/vis.mac 77 78 # 初级粒子生成 ---------- 79 80 # 通过污染源生成初级粒子 81 /source/type contaminantSource

82 / contaminantSource / verbose 0 83 84 # 使用钍-234作为污染物 85 / gps / particle ion 86 / gps / ion 90 234 87 / gps / ang / type iso 88 / gps / energy 0 MeV 89 90 # 将污染物限制在 Carousel37 内的所有铜部件中 91 / contaminantSource / c o n f i n e T o M at e r i a l I n V o l u m e CRESST_Cu Carousel37 92 / contaminantSource / init 93 94 # 钍-234衰变至基态后，停止衰变链 95 / grdm / nucleusLimits 234 234 90 90 96 97 # 启用低能物理。 98 / process / em / fluo true 99 / process / em / auger true 100 / process / em / augerCascade true 101 / process / em / pixe true 102 / process / em / deex cita tionI gnor eCut true 103 104 # 输入/输出设置 - - -

```
132 # 模拟 1e6 个事件133/ run /
beamOn 1000000
```

列表 2: CRESSTDS的探测器配置文件摘录：其中提供了一组默认设置和探测器清单，后者仅包含适用于TUM93A 探测器模块的一组设置。在发布的 ImpCRESST 软件包中，可找到完整文件：

```
./示例 les/decayPaths234Th/d etect ors.c f
g. 1 default ={ 2 name =" default "; 3 阈值 = 0.0301; 4 死时间 = 0; 5 时间分辨率 = 2
E6 ; 6 e n e r g y R e s o l u t i o n I s G a u s s i a n =true ; 7 ene rgyR esol ution Sigm a =" std ::
sqrt (0.0045*0.0045 +↪ 0.0104298*0.0104298 * ( x * x - 0.0301*0.0301) ) "; 8 e n er g y R es o l
u t i o n F un c t i on =""; 9 l i g h t R e s o l u t i o nI s G a u s s i a n =true ; 10
lightResolutionSigma =" std :: sqrt (0.094*0.094 +(0.185898 * x )↪ +(0.0260744 * x * x ) ) ";
11 l ig h tR es o lu t io nF u nc t io n =""; 12 lig htBi rksC onsta nt_k B = 0.0185; 13
lightBirksConstant_A = 1.; 14 l i g h t Q u e n c h i n g P a r a m e t r i s a t i o n =( 15 { 16 粒子
=" O1 "; 17 猝灭 = "0.07908 * (1. + 0.7088 *↪ exp ( - x *1000./567.1) ) * x "; 18 } , 19 { 20 粒子
=" Ca "; 21 猝灭 = "0.05949 * (1. + 0.1887 *↪ exp ( - x *1000./801.3) ) * x "; 22 } , 23 { 24 粒子 =
" W1 "; 25 猝灭 = "0.0208 * x "; 26 } , 27 { 28 粒子 = "e -"; 29 猝灭 ="(0.938+4.6 e -5* x
*1000.) *↪ (1 -0.389* exp ( - x *1000./19.34) ) * x "; 30 } 31 ) ; 32 }{ 33 清单 = { 探测器 = ( 34 {{
35 name =" T UM 93 A_C aW O4_B olo me te r "; 36 阈值 = 0.0515008; 37 死时间 = 0; 38 e n
e r g y R e s o l u t i o n I s G a u s s i a n =true ;
```

39能量R esolu tionSigma = "std::sqrt(0.0045*0.0045 +↪ 0.0104298*0.0104298 * (x * x - 0.0301*0.0301)) ";40 }41) }

参考文献

[1] Chen, X., 等：BambooMC——一种基于 Geant4 的模拟程序，用于 Pan- daX 实验。仪器杂志 16(09), 09004 (2021年) https://doi.org/10.1088/1748-0221/16/09/t09004[2] Boswell, M., 等：MaGe——一个基于 Geant4 的蒙特卡罗应用框架，适用于低本底锗实验。IEEE Trans. Nucl. Sci. 58(3), 1212–1220(2011年6月) https://doi.org/10.1109/tns.2011.2144619[3] Adams, D.Q., 等：CUORE实验的数据驱动本底模型。物理评论D 110(5), 052003 (2024年) https: // doi.org/10.1103/physrevd.110.052003 arXiv:2405.17937 [nucl-ex][4] She, Z., 等：SAGE：一种用于锗探测器实验的蒙特卡罗模拟框架。仪器杂志 16(09), 09005 (2021年) https://doi.org/10.1088/1748-0221/16/09/t09005[5]Agnese, R., 等：SuperCDMS SNOLAB实验的预期灵敏度。物理评论D 95(8), 082002 (2017年) https: // doi.org/10.1103/physrevd.95.082002[6] Abele, H., 等：NUCLEUS反应堆CEνNS实验的粒子本底表征与预测（2025年）。 https://arxiv.org/abs/2509.03559[7] Agostinelli, S., 等：GEANT4——一套模拟工具包。核仪器与方法A辑 506, 250–303 (2003年) https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8[8] Allison, J., 等：Geant4的发展与应用。IEEE Trans. Nucl. Sci. 53, 270 (2006年) https://doi.org/10.1109/TNS. 2006.869826[9] Allison, J., 等：Geant4的最新进展。核仪器与方法A辑 835, 186–225 (2016年) https://doi.org/10. 1016/j.nima.2016.06.125 [10]Geant4合作组：Geant4。https://geant4.web.cern.ch/

[11]Angloher, G., 等：ImpCresst 8.0.0 版。https://doi.org/10.5281/zenodo.18632161 。https://github.com/cresst-experiment/impcresst[12] Angloher, G., 等：CRESST 实验：迈向新一代亚 GeV 直接暗物质探测（2025年）arXiv:2505.01183 [天体物理宇宙学[13]Scholl, S.M.：CRESST-II 实验的中子本底模拟。博士论文，蒂宾根大学（2011年）。http://hdl.handle.net/10900/49550[14]Strauss, R., 等：ν-核实验：用于首次探测相干中微子-核散射的克级有效体积低温探测器。《欧洲物理期刊C》**77**，506（2017年）

h

t

t

p

s://

doi.org/10.1140/epjc/s10052-017-5068-2arXiv:1704.04320 [仪器与探测器物理[15]Angloher, G., 等：基于模拟的 COSINUS 暗物质实验被动屏蔽设计研究。《欧洲物理期刊C》**82**(3)，248（2022年）

h

t

t

p

s://

d

oi.org/10.1140/epjc/s10052-022-10184-5arXiv:2106.07390 [仪器与探测器物理[16]Fuß, A.：CRESST 和 COSINUS 暗物质搜寻实验的模拟中子本底研究。博士论文，维也纳工业大学（2022年）。https://doi.org/10.34726/hss.2022.86617[17]T¨urko˘glu, C.：为 CRESST 实验开发基于 Geant4 的电磁本底模型。博士论文，维也纳工业大学（2018年）。https://doi.org/10.34726/hss.2018.35425[18]Fuß, A.：基于 Birks定律的 CRESST 类 $CaWO_4$ 晶体光产额和猝灭因子模拟。硕士学位论文，维也纳工业大学（2017年）。https://doi.org/10.34726/hss.2017.50966[19] Abdelhameed, A.H., 等：基于 Geant4 的电磁本底模型

CRESST 暗物质实验。《欧洲物理期刊C》**79**(10)，881（2019年）https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-019-7385-0arXiv:1908.06755 [天体物理仪器与方法]。 [出版者勘误：《欧洲物理期刊C》**79**(12)，987（2019年）https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-019-7504-y]

[20] Angloher, G.，等：在 CRESST-III 实验的中子标定数据中观测到低能核反冲峰。物理评论D**108**，022005（2023）https://doi.org/10.1103/PhysRevD.108.022005

[21] Angloher, G.，等：在 CRESST-III 中的 Al_2O_3 晶体中观测到低能核反冲峰。物理评论D 112，102008（2025）https://doi.org/10.1103/bb31-pgzg arXiv:2506.09059 [仪器与探测器物理][22] Angloher, G.，等：利用贝叶斯似然归一化评估暗物质实验 CRESST 中 $CaWO_4$ 靶晶体的久期平衡。应用辐射与同位素 194，110670（2023）https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2023.110670 arXiv:2209.00461 [仪器与探测器物理][23]Angloher, G.，等：CRESST 本底模型的高维贝叶斯似然归一化。仪器杂志 19(11)，11013（2024）https://doi.org/10.1088/1748-0221/19/11/P11013 arXiv:2307.12991 [仪器与探测器物理][24] Burkhart, J.：改进 CRESST-II 的电磁本底模型。硕士学位论文，维也纳工业大学（2022）。https://doi.org/10.34726/hss. 2022.104928[25] Angloher, G.，等：首次在 CRESST 探测器中观测到单光子，并得到新的暗物质排除限。物理评论D 110(8)，083038（2024）https://doi.org/10.1103/PhysRevD.110.083038 arXiv:2405.06527 [天体物理宇宙学]

[26]Angloher, G., 等：亚 GeV 来自 10 eV 阈值 CRESST-III 硅探测器的暗物质。物理评论D**107**(12), 122003 (2023年) https://doi.org/10.1103/PhysRevD.107.122003arXiv:2212.12513 [天体物理宇宙学]

[27]Angloher, G.，等：使用金刚石低温探测器搜索轻暗物质。欧洲物理期刊C **84**(3)，324（2024年）https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-024-12647-3arXiv:2310.05815 [天体物理宇宙学]

[28] Angloher, G. 等：用于研究 CRESST 低能本底的 DoubleTES 探测器：地面原型的研究结果。欧洲物理期刊C 84(10)，1001（2024年）https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-024-13282-8 arXiv:2404.02607[仪器与探测器物理]。 [勘误：欧洲物理期刊C 84，1227（2024年）[29]Angloher, G. 等：使用低阈值 CRESST-II 探测器获得的轻暗物质粒子研究结果。欧洲物理期刊C 76(1)，25（2016年）https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-016-3877-3 arXiv:1509.01515 [天体物理宇宙学[30] Angloher, G. 等：使用升级后的 CRESST-II 探测器获得的低质量弱相互作用大质量粒子研究结果。欧洲物理期刊C 74(12)，3184（2014）https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-014-3184-9 arXiv:1407.3146 [天体物理宇宙学[31]Abdelhameed, A.H. 等：CRESST-III 低质量暗物质计划的首批研究结果。物理评论D 100(10)，102002（2019）https://doi.org/10.1103/PhysRevD.100.102002arXiv:1904.00498 [天体物理宇宙学]

[32] Angloher, G. 等：在 CRESST-III 中使用铝酸锂靶材检验自旋相关暗物质相互作用。物理评论D 106(9)，092008（2022年）https://doi.org/10.1103/PhysRevD.106.092008 arXiv:2207.07640 [天体物理宇宙学]

[33] Abdelhameed, A.H.，等：关于亚GeV自旋相关暗物质与 ^{7}Li. 欧洲物理期刊C**79**(7),630 (2019)https://doi.org/10.1140/epjc/

s10052-019-7126-4 arXiv:1902.07587 [天体物理仪器与探测器物理]

[34]Abdelhameed, A.H., 等：$LiAlO_2$ 晶体的低温表征，以及自旋相关暗物质与普通物质相互作用的新结果。欧洲物理期刊C **80**(9), 834 (2020)https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-020-8329-4arXiv:2005.02692 [仪器与探测器物理]

[35]Angloher, G., 等：利用 CRESST-II第二阶段数据进行暗光子搜寻。欧洲物理期刊C **77**(5), 299（2017年）
https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-017-4878-6arXiv:1612.07662 [高能物理实验]

[36]Angloher, G., 等：通过直接探测研究普适束缚态中暗物质自相互作用截面的限制。欧洲物理期刊C **84**(11), 1170（2024年）
https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-024-13472-4 arXiv:2407.04004[天体物理宇宙学]

[37] Angloher, G., 等：CRESST 实验的探测器开发。《低温物理学杂志》 **216**(1-2), 393–401（2024年）
https://doi.org/10.1007/s10909-024-03154-6arXiv:2311.07318 [仪器与探测器物理]

[38] Bravin, M., 等：CRESST 暗物质搜寻。天体粒子物理**12**, 107–114（1999）
https://doi.org/10.1016/S0927-6505(99)00073-0 arXiv:hep-ex/9904005

[39]Kluck, H., 等：Cresst 钨酸钙晶体的宇宙线活化。物理学杂志会议系列 $_4$ 。**2156**, 012227（2021年）
https://doi.org/10.1088/1742-6596/2156/1/012227

[40]Thulliez, L., 等：使用中子俘获在100 eV能标校准核反冲。J.Instrum. **16**（07）, 07032（2021年）
https://doi.org/10.1088/1748-0221/16/07/P07032

[41] Abele,H. 等：观察到由中子俘获诱发的 100 eV能标核反冲峰。物理评论快报**130**(21), 211802
https://doi.org/10.1103/physrevlett.130.211802

[42]Brun, R., Rademakers, F.：ROOT：一种面向对象的数据分析框架。核仪器与方法A辑**389**, 81–86（1997年）
https://doi.org/10.1016/S0168-9002(97)00048-X

[43] ROOT 团队：ROOT：以科学方式分析拍字节级数据。https://root.cern.ch/

[44]Geant4合作组：应用程序开发者手册：10.6版。Rev4.1 - 2020年8月11日。
https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/ForApplicationDeveloper/BackupVersions/V10.6c/fo/BookForApplicationDevelopers.pdf

[45] Miles,R., Hamilton,K.：《学习 UML2.0》。O'Reilly，加利福尼亚州塞巴斯托波尔（2006年）

[46]Poole, C.M., 等：《GEANT4 的 CAD 接口》（2011年）。https://arxiv.org/abs/1105.0963

[47]Poole, C.：CADMesh：GEANT4 的 CAD 文件接口。
https://github.com/christopherpoole/CADMesh

[48] Gamma,E.（编）：《设计模式》。Addison-Wesley 专业计算丛书。Addison-Wesley，马萨诸塞州波士顿（2011年）

[49] JAS3团队：Java分析工作室 3。
https://jas.freehep.org/jas3/

[50] Blender基金会：Blender：免费开源的 3D 创作软件。https://www.blender.org/

[51] 信息技术——计算机图形学与图像处理——虚拟现实建模语言。技术报告 ISO/IEC 14772-1:1997，国际标准化组织，日内瓦（1997年）。
https://www.iso.org/standard/25508.html

[52] Kitware公司：ParaView：开源、跨平台的数据分析与可视化应用程序。
https://www.paraview.org/

[53]Geant4合作组：低能电磁物理——利弗莫尔。版本

截至2023年1月1日，最新版本由WaybackMachine归档。
htt
ps://web.archive.org/web/20230101111554/https://geant4.web.cern.ch/node/1619

[54]Ballarini，F.，等：FLUKA代码：概述与最新进展。《EPJ Nuclear Sci.Technol.》**10**，16（2024年）https://doi.org/10.1051/epjn/2024015

[55]FLUKA团队：FLUKA。https://www.fluka.eu

[56]Kulesza, J.A.，等：MCNP® 代码6.3.1版理论与用户手册。技术报告LA-UR-24-24602，修订版1，洛斯阿拉莫斯国家实验室，美国新墨西哥州洛斯阿拉莫斯（2024年5月）。
https://doi.org/10.2172/2372634 。
https://www.osti.gov/biblio/2372634

[57]Triad National Security, LLC：MCNP。
https://mcnp.lanl.gov/

[58]Geant4合作组：Geant4物理列表指南：10.6版。修订版4.0：2019年12月6日。
https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsListGuide/BackupVersions/V10.6/fo/PhysicsListGuide.pdf

[59]Geant4合作组：Geant4物理参考手册：10.6版。修订版4.0：2019年12月6日。
h
t
t
p
s://
g
e
a
n
t4-
userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/BackupVersions/V10.6/fo/PhysicsReferenceManual.pdf

[60] Tuli，J.K.：评价核结构数据文件。核仪器与方法A辑**369**，506–510（1996）
https://doi.org/10.1016/S0168-9002(96)80040-4[61]
Geant4合作组：Geant4 10.6 发布版本说明。
h
t
t
p
s://geant4.org/download/release-notes/notes-v10.6.0.ht
ml[62]Kelsey，M.：使用 rdecay01 示例进行氚核衰变模拟。2025年1月12日版本，最新版本由Wayback Machine存档。（2020）。
https://web.archive.org/web/20250112075358/
https://geant4-forum.web.cern.ch/t/triton-decay-with-rdecay01-example/2616[63] Kluck，H.：ELOISE——亚千电子伏能区的可靠本底模拟。SciPost Phys. Proc.**12**，064（2023）
https://doi.org/10.21468/SciPostPhysProc.12.064arXiv:2212.12634 [仪器与探测器物理][64]
Reedy，R.C.，Frankle，S.C.：氢至锌元素对热中子的辐射俘获所产生的瞬发伽马射线。Atom. Data Nucl. Data Tables**80**(1)，1–34https://doi.org/10.1006/adnd.2001.0870

[65]Plompen, A.J.M. 等：联合评估的裂变与聚变核数据库JEFF-3.3。欧洲物理杂志A **56**(7)(2020)
https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00141-9

[66]Chadwick, M.B.，等：用于科学与技术的ENDF/B-VII.1核数据：截面、协方差、裂变产物产额和衰变数据。核数据表**112**(12), 2887–2996(2011年)
https://doi.org/10.1016/j.nds.2011.11.002

[67] Thulliez，L.，Kluck，H.，Bonhomme，A.：Fifrelin4Geant4. https://doi.org/10.5281/zenodo.7933381

[68] Soum-Sidikov, G. 等：用于低温探测器中辐射俘获热中子过程的 Fifradina 数据集（2023）。
https://doi.org/10.5281/zenodo.7936552

[69]Litaize，O.，Serot，O.，Berge，L.：使用 FIFRELIN 进行裂变建模。欧洲物理杂志A**51**(12), 177（2015）
https://doi.org/10.1140/epja/i2015-15177-9

[70]Soum-Sidikov, G.，等：研究 γ低温探测器中俘获中子后碰撞与级联的时间。物理评论**D108**, 072009（2023）
https://doi.org/10.1103/PhysRevD.108.072009

[71]Borschel，C.、Ronning，C.：纳米结构的离子束辐照——三维蒙特卡罗模拟代码。

核仪器与方法物理研究 B**269**(19)，2133–2138（2011年）
https://doi.org/10.1016/j.nimb.2011.07.004

[72] Sivers, M.：闪烁$CaWO_4$ 晶体，用于直接暗物质搜索实验CRESST和EURECA。博士论文，慕尼黑工业大¨学慕¨尼黑（2014）。
https://mediatum.ub.tum.de/1222329

[73]Levin, A., Moisan, C.：一种更符合物理的方法，用于模拟闪烁计数器的表面处理，并将其实现到DETECT中。载于：1996 IEEE 核科学研讨会。会议Record。IEEE，纽约（1996）。
https://doi.org/10.1109/nssmic.1996.591410

[74]L¨uscher, M.：一种用于格点场论模拟的便携式高质量随机数生成器。《计算机物理通讯》**79**(1),100–110
https://doi.org/10.1016/0010-4655(94)90232-1

[75]James, F., Moneta, L.：高质量随机数生成器综述。计算机软件与大科学 **4**(1)
https://doi.org/10.1007/s41781-019-0034-3

[76]L¨uscher，M.：RANLUX 随机数生成器。
https://luscher.web.cern.ch/luscher/ranlux/

[77]James, F.：RANLUX：对 L¨uscher 高质量伪随机数生成器的 Fortran 实现。《计算物理通讯》**79**(1),111–114https://doi.org/10.1016/0010-4655(94)90233-x

[78]Cook, J.D.：随机数生成器的随机种子错误，2016年1月31日版本，由 Way-back Machine 存档，（2016年）。
https://web.archive.org/web/20160131080608/https://www.johndcook.com/blog/2016/01/29/random-number-generator-seed-mistakes/

[79]Gaisser, T.K., Engel, R., Resconi, E.: 宇宙射线与粒子物理学，第2版。剑桥大学出版社，剑桥（2016年）。
https://doi.org/10.1017/CBO9781139192194

[80] Heusser, G.:低放射性本底技术。《核与粒子科学年度评论》**45**（1），543–590（1995年）
https://doi.org/10.1146/annurev.ns.45.120195.002551

[81]Formaggio, J.A., Martoff, C.J.：地下敏感实验的背景。核与粒子科学年度评论。**54**(1),361–412(2004)
h
ttps://doi.org/10.1146/annurev.nucl.54.070103.181248

[82]Hagmann, C., Lange, D., Verbeke, J., Wright, D.：宇宙射线簇射库（CRY）。技术报告
UCRL-TM-229453，劳伦斯利弗莫尔国家实验室（2012）。https://nuclear.llnl.gov/simulation/doccry v1.7/cry.pdf

[83] Wright，D.：CRY。
https://nuclear.llnl.gov/ 模拟/

[84] Kudryavtsev, V.A.：用于地下物理的缪子模拟代码 MUSIC 和 MUSUN。计算物理通讯。**180**(3),339–346（2009）
https://doi.org/10.1016/j.cpc.2008.10.013

[85] Devroye, L.：《非均匀随机变量生成》。施普林格，纽约（1986）

[86]Wilson, W.B. 等：SOURCES：用于计算（α，n）、自发裂变以及缓发中子源和能谱的代码。《辐射防护剂量学》**115**(1–4),117–121https://doi.org/10.1093/rpd/nci260

[87]Asai, M.：计分功能。
https://indico.global/event/5912/contributions/48921/attachments/24370/41864/Scoring.pdf。ENSAR2 研讨会：核物理中的 GEANT4，马德里，西班牙，2019年4月24日至26日（2019）

[88] ROOT 团队：ROOT：自定义类的输入/输出。访问日期：2025年11月16日。
https://root.cern/manual/io customclasses/

[89]ROOT 团队：ROOT：TTree 类参考。版本 v6.32。
https://root.cern/doc/v632/classTTree.html

[90]ROOT 团队：ROOT：TFile 类参考。版本 v6.32。https://root.cern/doc/v632/classTFile.html

[91]Fowler, M.：《UML 精要》，第3版。Addison-Wesley 对象技术丛书。Addison-Wesley 专业出版社，马萨诸塞州波士顿（2003年）

[92]Heesch, D.：Doxygen。https://www.doxygen.nl/[93] ROOT 团队：ROOT：TRef 类参考。版本 v6.32。https://root.cern/doc/v632/classTRef.html[94] ROOT 团队：ROOT：TRefArray 类参考。版本 v6.32。https://root.cern/doc/v632/classTRefArray.html

[95] Zhang, Z.、Bockelman, B.：探索 ROOT I/O 的压缩技术。《物理学杂志：会议系列》**898**,
0
7
2
0
4
3https://doi.org/10.1088/1742-6596/898/7/072043

[96]ROOT 团队：ROOT：ROOT::RCompressionSetting::EAlgorithm。版本 v6.32。https://root.cern/doc/v632/structROOT_11RCompressionSetting_11EAlgorithm.html[97] ROOT 团队：ROOT：ROOT::RCompressionSetting。版本 v6.32。https://root.cern/doc/v632/structROOT_11RCompressionSetting.html[98]ROOT 团队：ROOT：ROOT::RCompressionSetting::ELevel。版本 v6.32。https://root.cern/doc/v632/structROOT_11RCompressionSetting_11ELevel.html[99] Kitware公司：CMake。https://cmake.org/

[100] Git 社区：Git。https://git-scm.com/

[101] Kitware公司：添加编译定义 - CMake 3.17.5 文档。https://cmake.org/cmake/help/v3.17/command/add_compile_definitions.html

[102]国际原子能机构核数据处：核素实时图表。访问日期：2025- 12-01。https://www-nds.iaea.org/relnsd/vcharthtml/VChartHTML.html[103] ROOT 团队：ROOT：TF1 类参考。版本 v6.32。https://root.cern/doc/v632/ classTF1.html[104] Birks, J.B.：有机晶体的闪烁：特征荧光及对不同辐射的相对响应。Proc. Phys. Soc. Sect. A 64(10)，874–877 https://doi.org/10.1088/0370-1298/64/10/303[105]Lang, R.F. 等：钨酸钙中的闪烁体非比例性与伽马猝灭。https://doi.org/10.48550/ARXIV. 0910.4414

[106] Strauss, R. 等：$CaWO_4$ 晶体在毫开尔文温度下的能量依赖的光猝灭。Eur. Phys, J. C 74(7) https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-014-2957-5[107] hyperrealm：Libconfig：用于处理结构化配置文件的 C/C++库。https://hyperrealm.github.io/libconfig/[108] ROOT 团队：ROOT：TBranch 类参考。版本 v6.32。https://root.cern/doc/v632/classTBranch.html[109] Preston-Werner, T. 等：语义版本规范 2.0.0。https://semver.org/[110]AlmaLinux OS 基金会：AlmaLinux。https://almalinux.org/[111] GCC 团队：GCC，即 GNU 编译器套件。https://gcc.gnu.org/[112]Docker 公司：Docker：加速容器应用开发。https://www.docker.com/[113]Apptainer（LF Projects 有限责任公司旗下项目）：Apptainer：可移植、可复现的容器。https://apptainer.org/[114] 马克斯·普朗克学会：马克斯·普朗克计算与数据中心。https://www.mpcdf.mpg.de/。访问日期：2023-05-25

[115]云基础设施项目：云基础设施平台。
https://www.clip.science/。访问日期：2023-05-25

[116] Seqera：Nextflow：用于并行和可扩展计算流水线的DSL。https://www.nextflow.io/

[117]Kluck, H.：使用Nextflow管理Geant4模拟（2026年）。
https://doi.org/10.5281/zenodo.18616121

[118]SchedMD：Slurm。
https://www.schedmd.com/

[119]Zatschler, B.，等：将 GEANT4的重要性偏倚应用于提高supercdms本底模拟的效率。Nucl. Instrum.Meth.Res. Sect.A**1080**, 170766（2025年）
https://doi.org/10.1016/j.nima.2025.170766

[120]Gr¨uner, C.，等：Geant4模拟中污染和探测器表面粗糙度对CRESST本底能谱的影响。Proc. Sci.**TAUP2023**，092（2024年）
https://doi.org/10.22323/1.441.0092

[121] Gr¨uner, C.：用于稀有事件搜索实验中表面污染和粗糙度效应模拟的 Geant4 库 SCoRe4 (2025年)arXiv:2511.15844 [仪器与探测器物理]

[122]Gr¨uner, C.：SCoRe4——用于模拟表面污染和粗糙度效应的 Geant4 库。
https://doi.org/10.5281/zenodo.17648567。
https://github.com/Veltly/SCoRe4

[123] Kluck, H.，等：Geant4 电磁物理构造器对稀有事件搜寻模拟精度与性能的影响。欧洲物理期刊 C**86**, 150（2026年）
https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-026-15358-z
arXiv:2507.14788[天体物理仪器与方法[124]
Omer, M.,Hajima,R.：在 GEANT4 中纳入德尔布吕克¨散射。核仪器与方法物理研究 B **405**, 43–49（2017年）
https://doi.org/10.1016/j.nimb.2017.05.028

[125] Omer, M., Hajima, R.：Geant4 对弹性散射的物理过程 γ射线。技术报告 JAEA-Data/Code2018-007, 日本原子能研究开发机构（2018年）。
https://doi.org/10.11484/jaea-data-code-2018-007

[126]Cai, X.-X., Kittelmann, T.：NCrystal：一个用于热中子输运的库。《计算物理通讯》 **246**,106851(2020)
https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.07.015
http://arxiv.org/abs/1901.08890v2

[127]Kelsey，M.H.，等：G4CMP：使用 Geant4 工具包进行凝聚态物理模拟。《核仪器与方法物理研究 A》 **1055**, 168473(2023)
https://doi.org/10.1016/j.nima.2023.168473

[128]Zmeˇskal, M., Thulliez, L., Dumonteil, E.: Geant4 Neutron-HP 软件包的改进：中子弹性散射核和截面的多普勒展宽（2023）
arXiv:2303.07300 [physics.comp-ph]

[129]Zmeˇskal, M., 等：Geant4 Neutron-HP 软件包的改进：使用概率表描述未分辨共振区（2024年）arXiv:2404.16389[physics.comp-ph]

[130] Mendoza, E，等：NuDEX：一种新的核γγ射线级联生成器。《EPJ网络会议》**239**，17006（2020）
https://doi.org/10.1051/epjconf/202023917006

[131]自由软件基金会：GNU通用公共许可证，第3版。
https://www.gnu.org/licenses/gpl-3.0.html （2007）