

特征 γ 射线谱分析的蒙特卡罗模拟技术*邓力¹⁾²⁾ 李瑞^{2)†} 王鑫²⁾ 付元光²⁾

1) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

2) (中物院高性能数值模拟软件中心, 北京 100088)

(2020年2月24日收到; 2020年3月23日收到修改稿)

蒙特卡罗方法 (MC) 是模拟核探测问题的理想方法, 用中子照射客体, 中子诱发产生非弹 γ 和俘获 γ , 通过特征 γ 射线能谱和时间谱分析, 确定客体核素组成和重量百分比. 本文基于非弹 γ 和俘获 γ 时间谱测量技术, 给出了脉冲源发射下探测器响应计数公式. 在中子与核作用产生次级光子方面, 采用期望值估计 (expect value estimator, EVE) 产光. 为了避免大量小权光子模拟带来的计算存储量增加, 设计了 EVE 产光与直接估计 (direct estimator, DE) 产光耦合. 仅增加少量计算时间, 便实现了特征 γ 射线解谱. 数值模拟在自主 MC 软件 JMCT 上开展, 计算结果初步验证了方法的正确有效性.

关键词: 蒙特卡罗方法, 核探测, 非弹 γ 射线, 俘获 γ 射线, 期望值估计

PACS: 28.52.Av, 29.30.Kv, 28.41.Ak

DOI: 10.7498/aps.69.20200279

1 引言

蒙特卡罗方法 (Monte Carlo, MC) 具有模拟核探测问题的天然优势, 近年已广泛用于 X-射线荧光分析, 在线中子俘获瞬发 γ 射线分析, 基于 γ 射线光谱的脉冲中子孔隙度测井, 隐藏爆炸物探测等. 相比 X 光常规探测, 中子诱发 γ 射线探测具有穿透能力强, 容易穿透包括钢、常规/化学武器包壳、核武器内部结构, 可用于确定客体的化学变化等, 这是核探测的优势所在.

目前核探测的主要手段是利用高能中子照射客体, 产生次级光子, 通过特征 γ 射线能谱、时间谱测量, 确定客体核素组成及份额. 在中子作用下, 绝大部分元素都可以发射可辨别的特征 γ 谱线, 慢中子可以引起除氮以外所有元素的非弹性散射反应, 并发射特征 γ 谱线. 利用特征 γ 射线原级线光子不随入射中子能量变化这一特点, 通过特征 γ 射线的能峰特征, 确定客体内所含核素, 通过特征

γ 射线直穿贡献, 确定客体核素份额. 方法可用于化学/常规武器甄别、隐藏爆炸物/毒品探测、放射性石油测井和探测器灵敏度优化设计等.

由于核探测环境复杂, 涉及空间 r 、能量 E 、方向 Ω 、时间 t 七维变量的 Boltzmann 方程求解, 一般采用连续能量 MC 求解. 目前包括著名的 MCNP^[1] 程序, 特征 γ 射线解谱还存在一定困难, 虽然 F8 计数理论上能够算出探测器响应-脉冲高度谱, 但代价大, 解很难收敛. 另外, 中子产生次级光子采用直接估计, 存在随机因素的影响, 无法保证不漏掉某些重要核素的贡献. 文献 [2–6] 在这方面开展了大量研究, 针对特征 γ 射线解谱, 发展了多项技巧. 我们参考了其部分研究成果, 近期在自主 MC 粒子输运软件 JMCT^[7–12] 上开发了特征 γ 射线分类标识计算及非弹 γ 射线和俘获 γ 射线时间箱计数方法. 特别在中子与核作用产生次级光子处理上, 先采用期望值估计 (expect value estimator, EVE) 产光, 分别统计原级线光子和原级连续光子对探测器的直穿贡献. 为了避免

* 能源局重大专项子项 (批准号: 2019ZX06002033)、国家自然科学基金 (批准号: 11805017) 和装发 (批准号: 32102010406) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: li_rui@iapcm.ac.cn

EVE 产生的大量小权光子模拟带来的计算量和存储量的增加,做完直穿贡献后,光子历史结束,立即回到原来的直接估计 (direct estimator, DE) 产光模式,每次最多产生一个光子,对其进行跟踪,只记录散射贡献,这样在不增加计算存储量下,实现了特征 γ 射线解谱.

2 问题描述

高能中子与核发生非弹 (用 (n, n') 表示) 和俘获 (用 (n, γ) 表示) 反应时,将产生次级光子,用

次级光子的特征 γ 射线来确定客体的核素组成和份额,这是核探测相对 X 光探测的优势所在. 辐射俘获是吸收反应中最重要的反应之一,其反应产物之一就是 γ 射线,产生次级光子的主要反应道有 (n, γ) 和裂变 (用 (n, f) 表示). 如果中子源的能量和强度较高,则中子与核发生 (n, n') 反应的概率增大,并产生非弹 γ 射线. 表 1 给出 H, C, N 等 11 种核素发射非弹 γ 谱线和俘获 γ 谱线的能量^[13], 表 2 给出烈性炸药 (TNT) 和某些化学武器中所含元素的重量百分比^[13].

表 1 H, C, N, O 等核素发射俘获 γ 谱线和非弹性散射 γ 谱线能量
Table 1. Energy of spectrum line from inelastic γ and capture γ about H, C, N, O, etc.

元素	反应类型	特征 γ 谱线能量/MeV
H	辐射俘获	2.2233
C	非弹性散射	4.433
N	辐射俘获非弹性散射	1.8848, 5.2692, 5.5534, 6.3224, 7.2991, 10.8290, 2.3128, 4.4444, 5.1059, 7.0280
O	非弹性散射	2.7419, 3.6841, 6.1310, 6.9170, 7.1190
F	非弹性散射	0.1090, 0.1971, 1.2358, 1.3480, 1.3565
P	辐射俘获非弹性散射	2.1542, 3.5228, 3.9003, 4.6713, 6.7853, 1.2661, 2.2334
S	辐射俘获	0.8411, 2.3797, 2.9311, 3.2208, 4.4308, 4.8698, 5.4205,
Cl	辐射俘获	0.5167, 0.7884, 1.1647, 1.9509, 1.9591, 2.8639, 5.7153, 6.1109, 6.6195, 7.4138
As	辐射俘获非弹性散射	6.2941, 6.8094, 7.0192, 0.2646, 0.2795, 0.5725
Al	辐射俘获非弹性散射	0.9840, 2.9598, 4.1329, 4.2522, 7.7239, 0.8438, 1.0144, 2.2118
Fe	辐射俘获非弹性散射	0.3522, 1.7251, 5.9203, 6.0185, 7.6311, 7.6455, 8.8860, 9.2980, 0.8468, 1.2383, 1.4082, 1.8105, 2.1129, 2.5985

表 2 烈性炸药 (TNT) 和某些化学武器中所含元素的重量百分比

Table 2. Weight percentage of elements in some spirited detonators (TNT) and chemical weapons.

元素	TNT	沙林/GB	神经性毒气/VX	芥子气/HD	糜烂性毒气/L
氢(H)	2.2	7.1	9.7	5.0	1.0
碳(C)	37.0	34.3	49.4	30.2	11.4
氮(N)	18.5		5.2		
氧(O)	42.3	22.9	12.0		
氟(F)		13.6			
磷(P)		22.1	11.6		
硫(S)			12.0	20.1	
氯(Cl)				44.7	51.3
砷(As)					36.1

2.1 非弹 γ 和俘获 γ 时间门测量方法

对于某些问题,需要通过发射脉冲源,通过时间箱计数来区别非弹 γ 射线和俘获 γ 射线,图 1 给

出放射性石油测井中,碳氧比 (C/O) 能谱测井的定时测量图^[14-16]. 用脉冲方式发射中子,通常 0—10 μ s 为脉冲门发射时间间隔,10—20 μ s 为本底门时间间隔,20—90 μ s 为晚俘获门时间间隔,依据这种逻辑关系,可以得到:净非弹 γ 计数=脉冲门谱计数-本底谱计数;俘获 γ 计数=晚俘获门计数. 这个时间门测量过程同样适合其他含时核探测问题的模拟.

对应图 1 给出不同时间门下探测器脉冲高度谱计算公式. 设 $N_\delta(E, t)$ 为以 $\delta(t)$ 脉冲方式发射的 $E_0 = 14.1$ MeV 氙氟中子源探测器中测到的 γ 能谱的时间响应. 根据中子-光子输运方程的线性性质,对应于任意时间分布 $S(t)$ 的中子源,探测仪中测到的 γ 能谱时间响应为

$$N(E, t) = \int_0^t S(t') N_\delta(E, t - t') dt', \quad (1)$$

其中 E 表示能量,单位 MeV; t 表示时间,单位 μ s.

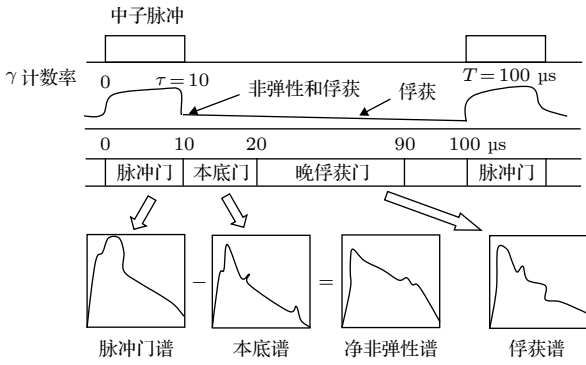


图1 碳氧比测井中子引发非弹性散射 γ 与俘获 γ 定时逻辑图

Fig. 1. The timing diagram of neutron induced inelastic γ and capture γ in C/O well-logging.

在任意测量门 $[t_a, t_b]$ 内记录的 γ 能谱为

$$\int_{t_a}^{t_b} N(E, t) dt = \int_{t_a}^{t_b} dt \int_0^t S(t') N_\delta(E, t-t') dt'. \quad (2)$$

令中子脉冲时间分布函数 $S(t)$ 为周期函数, 其周期为 τ , 有

$$S(t \pm n\tau) = S(t), \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3)$$

其中 $t \in [0, \tau]$. 又假定 $S(t)$ 为宽度为 τ 的函数

$$S(t) = \begin{cases} S_0 f_\delta(t), & 0 \leq t < \tau, \\ 0, & \tau \leq t < T, \end{cases} \quad (4)$$

其中 S_0 为一个脉冲内释放的中子总数; T 为终态时间; $f_\delta(t)$ 为脉冲时间分布函数, 满足归一条件 $\int_0^\tau f_\delta(t) dt = 1$. 则有

$$\begin{aligned} N(E, t) &= S_0 \left[\sum_{n=1}^{\infty} \int_{-nT}^{-nT+\tau} f_\delta(t') N_\delta(E, t-t') dt' \right. \\ &\quad \left. + \int_0^{\min(t, \tau)} f_\delta(t') N_\delta(E, t-t') dt' \right] \\ &= S_0 \left[\sum_{n=1}^{\infty} \int_0^\tau f_\delta(t') N_\delta(E, t-t'+nT) dt' \right. \\ &\quad \left. + \int_0^{\min(t, \tau)} f_\delta(t') N_\delta(E, t-t') dt' \right], \end{aligned} \quad (5)$$

$t \in [0, T]$.

将 (5) 式代入 (2) 式, 对 t 积分便得任意时间门内的 γ 能谱强度.

脉冲门内的测量值为

$$N_I = \int_0^\tau N(E, t) dt. \quad (6)$$

本底门内测量值为

$$N_{II} = \int_\tau^{2\tau} N(E, t) dt. \quad (7)$$

根据中子进入客体诱发的各种 γ 射线的时间特点, 将 (5) 式中的 $N_\delta(E, t)$ 分解为 4 个部分, 即

$$N_\delta(E, t) = \sum_{i=1}^4 N_i^\delta(E) f_i(t), \quad (8)$$

其中 $N_i^\delta(E)$, $i = 1, 2, 3, 4$ 分别为单位强度 $\delta(t)$ 脉冲中子源引起的非弹性 γ 射线、慢化过程中的俘获 γ 射线、热中子俘获 γ 射线和活化反应 γ 射线的 γ 能谱强度; $f_i(t)$, $i = 1, 2, 3, 4$ 分别为上述 4 种 γ 射线的时间谱, 满足归一条件 $\int_0^\infty f_i(t) dt = 1$, ($i = 1, 2, 3, 4$).

经过一系列公式推导, 得到脉冲门能谱

$$\begin{aligned} N_I(E) - N_{II}(E) &\approx S_0 \left\{ N_1^\delta(E) + N_2^\delta(E) \left[\int_0^\tau \left(1 - \frac{2t}{\tau} \right) f_2(t) dt \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \int_\tau^{2\tau} \left(2 - \frac{t}{\tau} \right) f_2(t) dt \right] - \frac{\tau}{2} N_3^\delta(E) f_3(\tau) \right\}. \end{aligned} \quad (9)$$

可见脉冲门与本底门测量值之差除了非弹性 γ 能谱, 还受到少量慢化过程俘获 γ 射线和少量未扣除干净的热中子俘获 γ 谱的“污染”. 考虑到活化 γ 射线的发射时刻很晚, 加之活化 γ 射线的发射寿命 $\gg T$. 因此, 在脉冲门与本底门谱之差中, 活化 γ 射线的污染是很小的. 另外, 由于慢化过程中的中子俘获数目远远小于热中子俘获的数目, 所以, $N_3^\delta(E) \gg N_2^\delta(E)$, 可以认为污染源主要来自热中子俘获 γ 射线, 其中污染量大小除与中子源的特征及客体物理性质有关, 探测仪器材料的适当选择也起一定的作用.

要准确算出探测器响应的测量能谱 $N(E, t)$, 首先应设法算出 $N_\delta(E, t)$, 然后与中子源脉冲时间谱形 $f_\delta(t)$ 卷积, 并分别对两个测量门的时间间隔积分, 相减后得到. 因此, MC 模拟的关键是算出 t 时刻单位强度 δ -脉冲源相应的探测器计数 $N_\delta(E, t)$, 然后与给定的中子脉冲谱形函数 $f_\delta(t)$ 卷积, 再对指定的时间门积分, 得到任意时间门内的测量值.

2.2 $N(E, t)$ 的 MC 模拟

快中子非弹性散射, 它所测量的是非弹性 γ 射线. 理论上通过解中子-光子-电子耦合输运求出 $N(E, t)$. 由于探测器相对整个问题系统很小, 尽

管从源发出了大量的中子, 但能够进入探测器的次级光子数还是非常有限的, 依据少量的次级光子要算准探测器响应几乎是不可能的. 因此, 探测器响应-脉冲高度谱计算通常分三步进行.

第一步: 解中子-光子耦合输运方程, 求出进入探测器表面的次级 γ 流,

$$J_\gamma(E_0, t) = \int_0^t \int_{r \in S} \int_{\Omega \cdot \mathbf{n} < 0} \int_0^{E_0} \mathbf{n} \times \Omega \phi(\mathbf{r}, E, \Omega, t) dt d\mathbf{r} d\Omega dE, \quad (10)$$

其中 S 为探测器表面, \mathbf{n} 为探测器表面外法向矢量, E_0 为入射光子能量.

第二步: 解光子-电子耦合输运方程, 求出探测器响应函数 $R(E_0, h)$. 以碘化钠闪烁探测器为例, 其响应函数形式为

$$R(E_0, h) = \eta(E_0) \int_0^{E_0} D(E_0, E) G(E, h) dE, \quad 0 \leq h < E_0, \quad (11)$$

其中 $G(E, h)$ 为高斯函数; $D(E_0, E)$ 为能量沉积谱; $\eta(E_0)$ 为探测器效率; h 为能量道, 单位 MeV. 由于响应函数中含有高斯函数 G , 为了保证求积精度, 分点要足够多, 通常在全能区 $[0, E_{\max}]$ 分 256 道.

根据 Berger 等^[17] 和 Jin 等^[18] 的研究, 不同入射方向的光子对探测器响应影响很小, 因此, 方向可近似为各向同性, 当探测器形状及材料一定后, 响应函数 $R(E_0, h)$ (矩阵形式) 只需计算一次.

第三步: 卷积分得到探测器响应脉冲高度谱

$$N(h, t) = \int_0^{E_{\max}} R(E_0, h) J_\gamma(E_0, t) dE_0. \quad (12)$$

$N(h, t)$ 求解涉及瞬态中子-光子-电子耦合输运计算, 计数包括时间-能量联合谱, 是 MC 粒子输运计算中难度最大, 模拟最复杂的过程.

2.3 特征 γ 射线标识计数

中子发生非弹 (n, n') 或俘获 (n, γ), (n, f) 反应时, 将产生次级光子, 这些光子统称为特征 γ 射线. 根据次级光子能量特征, 特征 γ 射线分为原级线光子和原级连续光子, 其定义如下:

$$E_\gamma(i, j) = \begin{cases} E_G^{(i)}, & \text{LP} \neq 2, \text{原级线光子,} \\ E_G^{(i)} + \frac{A_i}{A_i + 1} E_n, & \text{LP} = 2, E_n > E_{\text{line}}, \\ & \text{原级连续光子,} \end{cases} \quad (13)$$

其中 i 为核; j 为反应道; E_n 为中子发生非弹或俘获反应时的能量; 通常取 $E_{\text{line}} = 0.001$ MeV 作为原级线光子和原级连续光子的分界能量; LP 为 ENDF 数据库反应律序号; A_i 为碰撞核 i 的原子序数; $E_G^{(i)}$ 为特征 γ 能量.

LP $\neq 2$ 对应的 γ 原级线光子, 它不随入射中子能量变化, 是甄别客体核素组成的核心关键. 在表 1 中给出了主要核素 γ 谱线能量峰位置, 表 2 给出烈性炸药 (TNT) 和某些化学武器中所含元素的重量百分比^[13], 依据表 1 和表 2 所列参考值, 可以快速识别出客体是否为危禁品. MCNP 程序模拟次级光子时, 没有把这两类光子区别开来, 因此, 次级光子能谱中的一些特征 γ 峰会随散射能谱磨平, 无法确定客体的核素组成.

当前 ENDF 最新评价核数据库提供了两种中子产光子模式: 1) 30×20 产光模式, 中子从 10^{-5} eV 到 20 MeV 分 30 个能群, 每个中子群对应 20 个等高度谱线, 次级光子的发射方向按各项同性处理; 2) 按碰撞核对应反应道的产光概率产光子. 模拟采用第 2) 种产光模式.

2.4 EVE 产光

设中子与 i 核发生 j 种反应的产光概率为 $p_{i,j}$ ($j = 1, 2, \dots, J$), 满足归一条件 $\sum_{j=1}^J p_{i,j} = 1$, 这里 J 为 i 核对应的反应道总数.

DE 方法 已知 i , 抽随机数 ξ , 求出满足不等式

$$\sum_{k=1}^{j-1} p_{i,k} \leq \xi < \sum_{k=1}^j p_{i,k} \quad (14)$$

的 j , 则 j 反应道产光, 光子权重为 w_γ .

EVE 方法 已知 i , 按概率 $p_{i,j}$ ($j = 1, 2, \dots, J$) 全部产光, 相应光子权重为

$$w_{i,j} = p_{i,j} w_\gamma, \quad j = 1, \dots, J. \quad (15)$$

不难证明两种估计方法的数学期望是一致的. DE 存在随机因素, 某些小概率大贡献事件会因为随机因素少抽或漏抽, 这对隐藏爆炸物探测这类问题是不允许的. 故采用 EVE 是必要的. 我们早期开发研制的 MCCO 程序, 对 EVE 产出的光子进行全部跟踪, 用统计估计计数^[19], 增加了大量计算存储量. 考虑到特征 γ 射线探测主要关心的是次级光子的直穿贡献, 实际上跟踪所有小权次级光子的散射过程没必要. 为此, 我们设计了现在的组合产光模式.

组合产光模式 对 EVE 产生的大量小权光子, 仅做直穿估计, 之后回到原来的 DE 产光, 每次最多产生一个次级光子, 对该光子进行全程跟踪, 只统计散射贡献, 最后的数值模拟解由两部分组成, 即

$$\text{光子总计数} = \text{EVE光子直穿计数} + \text{DE光子散射计数} \quad (16)$$

由于直穿估计可以解析计算, 所花时间可以忽略不计. 因此, 采用组合产光模式后, 实现了特征 γ 射线能量-时间解谱, 而总计算时间和存储量增加很少.

3 数值实验

炸药球模型 几何单位为 cm, 对行李箱进行安检. 如图 2 所示, 设行李箱长、宽、高分别为 80, 30, 50, 内放一半径为 3.51, 密度为 $\rho = 1.654 \text{ g/cm}^3$ 的 RDX 炸药小球 (分子式为 $\text{C}_{2.63}\text{H}_{4.69}\text{N}_{0.658}\text{O}_{0.85}$); 探测器位于行李箱上方, 为 $3'' \times 3''$ 碘化钠闪烁晶体正圆柱探测器, 密度为 $\rho = 3.67 \text{ g/cm}^3$, 柱中心坐标为 (0, 0, 38.75); 采用 14.1 MeV 各项同性氚中子点源, 源位置为 (0, 45, 0), 计算进入探测器的

次级 γ 流 $J_\gamma(E, t)$. 采用源方向偏倚发射, 偏倚立体张角覆盖行李箱. 对比程序选择 MCNP^[4], 采用相同的数据库、样本数和源方向偏倚技巧.

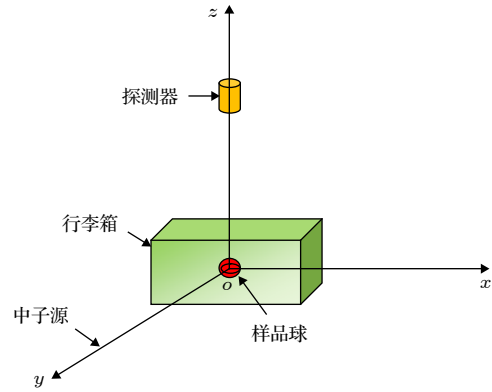


图 2 行李箱模型示意图

Fig. 2. Sketch of luggage model.

表 3 给出 JMCT 与 MCNP 探测器次级光子流 J_γ 结果比较; 表 4 给出 JMCT 统计的箱子内的核素组成及份额, 与表 1 给出的 TNT 炸药 H, C, N, O 核素百分比基本相符 (炸药类型不同); 图 3(a) 和图 3(b) 分别给出原级线光子和康普顿散射光子能谱; 图 3(c) 和图 3(d) 给出 JMCT 与 MCNP 次

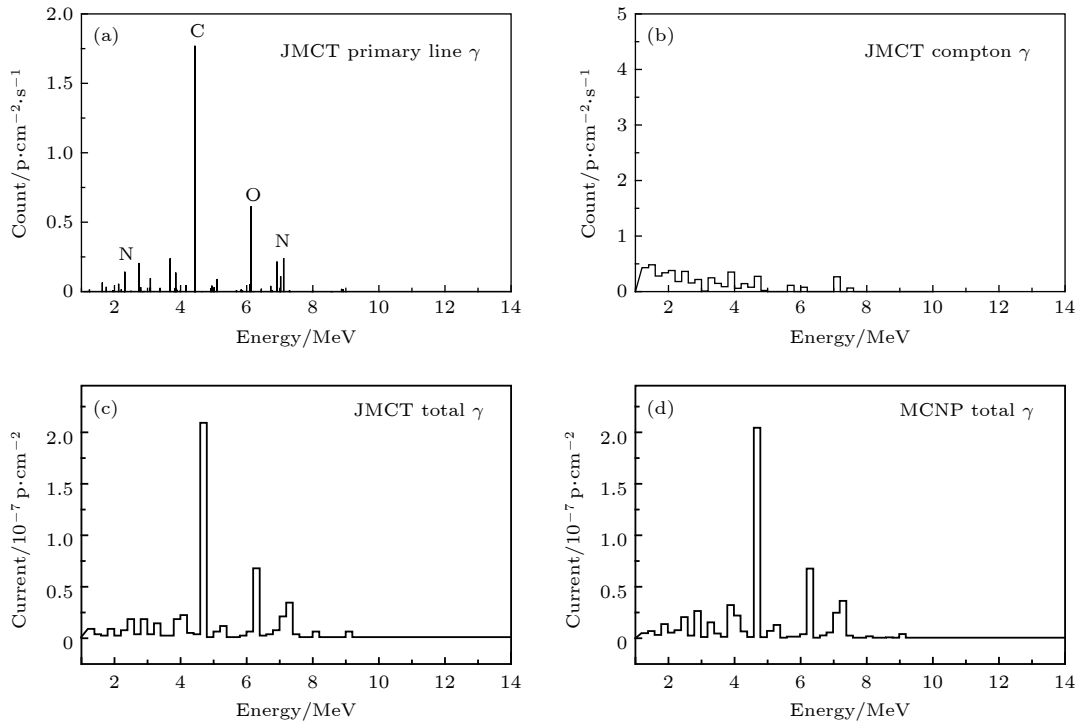


图 3 次级 γ 射线能谱计算结果比较 (a) 次级 γ 原级线光子能谱; (b) 原级连续光子与 Compton 散射能谱; (c) JMCT 次级 γ 总能谱; (d) MCNP 次级 γ 总能谱

Fig. 3. Comparison of calculated result about energy spectra of secondary γ : (a) JMCT primary line γ ; (b) JMCT Compton γ ; (c) JMCT total γ ; (d) MCNP total γ .

级 γ 流的能谱比较, 可以看出次级 γ 总流 JMCT 与 MCNP 结果符合良好, 能谱差异很小; 图 4 给出次级 γ 流时间谱, JMCT 与 MCNP 时间谱总计数相符, 时间谱细节上有些差异, 分析原因是由于时间箱分得过细, 某些时间箱计数的统计误差偏大.

表 3 JMCT 与 MCNP 次级 γ 流计算结果比较
Table 3. Comparison of calculated results about secondary γ between JMCT and MCNP.

程序	原级线光子	原级连续光子	散射光子	J_{γ} 总光子流	偏差/%
JMCT	4.92519-7	0	4.34947-8	5.36014-7	0.4406
MCNP	无	无	无	5.38386-7	标准解

注: 偏差 = $[J_{\gamma}(\text{JMCT}) - J_{\gamma}(\text{MCNP})] / J_{\gamma}(\text{MCNP})$.

表 4 H, C, N, O 瞬发 γ 计数及份额
Table 4. Count and percentage of prompt γ from H, C, N and O.

元素	计数	份额比/%	统计误差/%
H	3.02643×10^{-11}	0	0.56
C	1.77077×10^{-7}	36	0.49
N	1.11146×10^{-7}	23	0.12
O	2.03254×10^{-7}	41	0.18

注: 偏差 = $[J_{\gamma}(\text{JMCT}) - J_{\gamma}(\text{MCNP})] / J_{\gamma}(\text{MCNP})$.

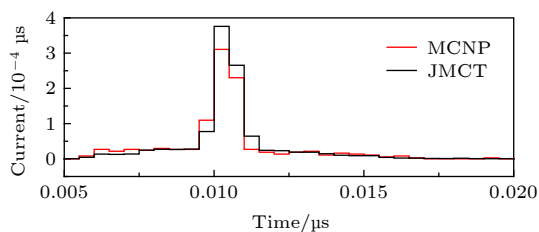


图 4 JMCT 与 MCNP 次级 γ 流时间谱比较

Fig. 4. Comparison of secondary γ -fluent time spectrum between JMCT and MCNP.

4 结 论

基于 JMCT 程序开发了特征 γ 射线能量-时间联合谱计算功能, 数值实验初步验证了软件计算的

正确高效性. 目前已开展了数十种炸药模型的计算, 构建了相应的数据库, 为反演计算做准备. 后续将配合实验样机的研制, 对测量仪器进行刻度工作, 形成能快速做出判断的计算机软件正演/反演系统, 为在线检测提供理论技术支持.

参考文献

- [1] Briesmeister J F 1997 *MCNP-a General Monte Carlo Code for n-particle Transport Code* US LA-12625-M
- [2] Gardner R P, Verghese K 1991 *Nucl. Geophys.* **5** 4
- [3] Ullo J J 1986 *Nucl. Sci. Eng.* **92** 228
- [4] Shyu C M, Gardner R P, Verghese K 1993 *Nucl. Geophys.* **7** 241
- [5] Verghese K, Gardner R P, Mickael M, et al. 1998 *Nucl. Geophys* **2** 3
- [6] Masayori I, Tooru K, Keiji K 2000 *Nucl. Instrum. and Methods Phys. Res.* **453** 614
- [7] Li D, Gang L, Baoyin Z, et al. 2018 *PHYSOR2018*, Cancun, Mexico, April 22–26 2018
- [8] Li G, Zhang B Y, Deng L 2013 *ANS Transactions* **109** 1425
- [9] Li G, Deng L, Zhang B Y, et al. 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 052801 (in Chinese) [李刚, 邓力, 张宝印, 等 2016 *物理学报* **65** 052801]
- [10] Liu X G, Deng L, Hu Z H, et al. 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 092501 (in Chinese) [刘雄国, 邓力, 胡泽华, 等 2016 *物理学报* **65** 092501]
- [11] Li D, Tao Y, Gang L, et al. 2014 *PHYSOR2014*, Kyoto, Japan, September 28–October 3 2014
- [12] Fu Y G, Deng L, Li G 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 172802 (in Chinese) [付元光, 邓力, 李刚 2018 *物理学报* **67** 172802]
- [13] Cai S H 1996 *Physics* **25** 12 (in Chinese) [蔡少辉 1996 *物理* **25** 12]
- [14] Huang L J 1985 *Principle of Radiation Oil Well-logging* (Beijing: Oil Industry Press) (in Chinese) [黄隆基 1985 放射性测井原理 (北京: 石油工业出版社)]
- [15] Zhu Z D, Luan S W, Cheng Z H, et al. 1984 *Energy Spectrum Well-logging Based on Ratio of Carbon and Oxygen* (Beijing: Oil Industry Press) (in Chinese) [朱达智, 栾士文, 程宗华等 1984 碳氧比能谱测井 (北京: 石油工业出版社)]
- [16] Deng L 2001 *Ph.D. Dissertation* (Xian: Xian Jiaotong University) (in Chinese) [邓力 2001 博士学位论文 (西安: 西安交通大学)]
- [17] Berger M J, Seltzer S M 1972 *Nucl. Instrum. Methods* **104** 317
- [18] Jin Y, Gardner R P, Verghese K 1986 *Nucl. Instrum. Methods* **242** 416
- [19] Li D, Shao H C, Zheng F H 1996 *J. Nucl. Sci. Technol.* **33** 9

Monte Carlo simulation technology based on characteristic γ -ray spectrum analysis*

Deng Li¹⁾²⁾ Li Rui^{2)†} Wang Xin²⁾ Fu Yuan-Guang²⁾

1) (*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics (IAPCM), Beijing 100094, China*)

2) (*CAEP Software Centre for High Performance Numerical Simulation (CAEP-SCNS), Beijing 100088, China*)

(Received 24 February 2020; revised manuscript received 23 March 2020)

Abstract

Monte Carlo method is an ideal way to simulate criticality, shielding and nuclear detection. JMCT is a multipurpose 3D Monte Carlo (MC) neutron-photon-electron and coupled neutron /photon /electron transport code which is developed by IAPCM. The program is developed based on the combinatorial geometry parallel infrastructure JCOGIN and has the most functions of general Monte Carlo particle transport code, including the various variance reduction techniques. In addition, some new algorithms, such as Doppler broadening on-the-fly (OTF), uniform tally density (UTD), consistent adjoint driven importance sampling (CADIS), fast criticality search of boron concentration (FCSBC), the domain decomposition (DD), the two-level parallel computation of MPI and OpenMP, etc. have been developed, where the number of geometry zones, materials, tallies, depletion zones, memories and period of random number are big enough to simulate various extremely complicated problems. Also the JMCT is hybrid the discrete ordinate SN program JSNT to generate source biasing factors and weight window parameters for deep-penetration shielding problems. The input is based on the CAD modeling, and the result is a visualized output. The JMCT can provide technology support for radiation shielding design, reactor physics and criticality safe analysis. Especially, the JMCT is coupled depletion and thermal-hydraulic code for simulating the reactor feedback effect, including depletion, thermal feedback. In recent years, new function of γ -ray spectrum analysis has been developed.

In this paper, the working principles of timing measure are introduced. The advanced calibration count is developed for distinguishing between inelastic γ -ray and capture γ -ray based on time bin tally. On the other hand, when neutron collides with nuclide, the secondary photon is labeled into the primary line photon and primary continuous photon, where energy of primary line photon does not change with the incident neutron energy, such as carbon spectral-line at 4.43 MeV and oxygen spectral-line at 6.13 MeV. The element components of detected object can be determined by the primary line photon. On the other hand, expect value estimator (EVE) is used to produce the secondary photons. The advantage of EVE does not leak any event even with a small probability which is important for detecting the hidden exploder. However the shortage of the EVE results in producing a great number of photons with small weight. If all of these small weight photons are simulated one by one, a great amount of computation time and memory will be consumed. For avoiding this case, a new algorithm is design by coupling EVE and DE (direct estimator). The all of secondary photons from EVE only make the direct tally take a little computing time, then end the photon history and return to the DE production photon model (one photon production at most). Final, the total tally is a summation of EVE direct tally and DE scattering tally. The use of new algorithm to realize the analysis of γ -ray spectrum will increase only a little computing time. The numerical tests are done by using own Monte Carlo code JMCT. The correctness and validity of the algorithm are shown preliminarily.

Keywords: Monte Carlo method, nuclear detection, inelastic γ -ray, capture γ -ray, expect value estimator

PACS: 28.52.Av, 29.30.Kv, 28.41.Ak

DOI: 10.7498/aps.69.20200279

* Project supported by the Sub-item of Special Projects of the National Energy Bureau, China (Grant No. 2019ZX06002033), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11805017), and the Equipment Development Ministry, China (Grant No. 32102010406).

† Corresponding author. E-mail: li_rui@iapcm.ac.cn