Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)
Физический факультет

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ В ГЭК
Руководитель ООП
д-р физ.-мат. наук, доцент

_____ О.Н. Чайковская
подпись
« 11 » ____июня_____2026 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТА НЕЙТРОНОВ В GEANT4 ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ В ФИЗИКЕ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

по направлению подготовки 03.03.02 Физика
направленность (профиль) «Фундаментальная физика»

Бернгардт Андрей Евгеньевич

Руководитель ВКР
д-р физ.-мат. наук, профессор

_____В.Н. Иванченко
подпись
« 11 » ____июня_____2026 г.

Автор работы
студент группы № 052240

_____А.Е. Бернгардт
подпись
« 11 » ____июня_____2026 г.

Томск – 2026

АННОТАЦИЯ

Выпускная квалификационная работа бакалавра «МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТА НЕЙТРОНОВ В GEANT4 ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ В ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ» состоит из 40 страницы печатного текста и 9 рисунков. При написании работы использовано 9 литературных источников.

Ключевые слова: GEANT4, МОДЕЛИРОВАНИЕ, ТРАНСПОРТ НЕЙТРОНОВ, ФИЗИКА ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ, СЕЧЕНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НЕЙТРОНОВ, БАЗА ДАННЫХ, G4PARTICLEXS.

Объект исследования — моделирование транспорта нейтронов в Geant4.

Предмет исследования — база данных нейтронных сечений Geant4.

Цель работы — разработать новую внутреннею базу данных нейтронных для Geant4, которая позволит увеличить точность моделирования в резонансной области энергии, с сохранением вычислительной производительности.

Данная работа состоит из трех глав. В первой главе рассматривается роль нейтронов в решении фундаментальных и прикладных задач. Основное внимание уделяется использованию баз данных сечений взаимодействия при моделировании транспорта нейтронов. Приводится обзор основных библиотек нейтронных сечений, основанных на мировых базах данных, используемых в Geant4, а также обосновывается актуальность проведенного исследования. Во второй главе описывается исходный метод формирования внутренней базы данных и особенности её использования в Geant4. Третья глава посвящена описанию тестового окружения, предназначенного для оценки точности моделирования транспорта нейтронов в Geant4 с применением различных баз данных. Также рассматривается метод создания дополнительных файлов, расширяющих исходную базу данных в резонансной области. Предложенный подход позволяет повысить точность моделирования при сохранении высокой вычислительной производительности.

СОДЕРЖАНИЕ

1 ВВЕДЕНИЕ 3
1.1 Роль нейтронов и задачи их моделирования 3
1.2 Ядерные данные и методы моделирования 4
1.2.1 Проблема точности и вычислительной эффективности . 4
1.2.2 Роль резонансной структуры сечений 5
1.3 Применения моделирования нейтронов 5
1.3.1 Ядерная энергетика 5
1.3.2 Материаловедение 6
1.3.3 Медицинская физика 6
1.3.4 Физика высоких энергий 7
1.4 Постановка задачи 7

2 МЕТОД XS-СЕЧЕНИЙ 9
2.1 Основные сведения о методе 9
2.2 Метод созданий файлов с сечениями 10

3 МЕТОД XSR-СЕЧЕНИЙ 12
3.1 Экспериментальное окружение для оценки эффективности метода 12
3.1.1 Описание экспериментальной установки 12
3.1.2 Модель эксперимента в Geant4 14
3.2 Разработка уточненных R-файлов для набора XS-сечений 14
3.3 Оценка эффективности нового метода 18

ЗАКЛЮЧЕНИЕ 22

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ 24

ПРИЛОЖЕНИЕ А 26

1 ВВЕДЕНИЕ

1.1 Роль нейтронов и задачи их моделирования

Нейтроны широко используются в фундаментальных исследованиях структуры вещества, а также в прикладных задачах ядерной энергетики, материаловедения и медицины. Из-за отсутствия электрического заряда нейтроны способны глубоко проникать в вещество и взаимодействовать непосредственно с атомными ядрами посредством сильного взаимодействия. Благодаря этому нейтроны применяются для исследования свойств материалов и в радиотерапии.

Особенностью нейтронных взаимодействий является сложная энергетическая зависимость ядерных сечений, включающая выраженную резонансную структуру на низких энергиях. В резонансной области даже небольшие изменения энергии нейтрона могут приводить к существенным изменениям вероятности взаимодействия. Это усложняет задачу моделирования транспорта нейтронов в веществе.

Современные методы моделирования основаны на статистических подходах, в первую очередь на методе Монте-Карло, который реализован в таких программных пакетах, как, например, Geant4 [1], [2], [3], MCNPX и ряда других. Geant4 — это открытый пакет программ для научных и инженерных расчетов. В рамках этой программы траектория каждой частицы моделируется пошагово, а вероятность взаимодействия определяется на основе ядерных сечений. Как отмечается в данной работе, вычисление сечения выполняется на каждом шаге транспортировки частицы, поэтому скорость доступа к этим данным существенно влияет на производительность расчетов.

Следовательно, при моделировании транспорта нейтронов необходимо одновременно учитывать точность описания ядерных сечений и вычислительную эффективность используемых алгоритмов. Время моделирования в значительной степени зависит от вычислений ядерных сечений, что является предметом данной работы.

1.2 Ядерные данные и методы моделирования

Основным элементом моделирования транспорта нейтронов являются базы ядерных данных, содержащие информацию о сечениях различных процессов взаимодействия. Наиболее широко используются международные библиотеки, такие как ENDF/B [4] и JEFF [5], которые основаны на систематизации экспериментальных данных и теоретических моделей.

В среде Geant4 реализованы различные подходы к использованию этих данных. Наиболее точным является так называемый High Precision (HP) подход, основанный на прямом использовании табличных данных международных библиотек, адаптированных под Geant4, в виде сечений для отдельных изотопов. Такой подход обеспечивает наиболее детальное описание нейтронных взаимодействий.

Альтернативой является использование параметризованных или усредненных сечений, например в рамках XS-подхода, в котором используются сечения для элементов с природным изотопным составом. Такой подход ускоряет вычисления за счет предварительной обработки данных и оптимизации их структуры, однако может приводить к потере точности, особенно в резонансной области энергий, что демонстрируется в данной работе.

Следовательно, выбор метода моделирования представляет собой компромисс между точностью и вычислительной эффективностью, что является одной из проблем моделирования транспорта частиц в Geant4.

1.2.1 Проблема точности и вычислительной эффективности

Одной из ключевых проблем моделирования транспорта нейтронов является необходимость одновременного обеспечения высокой точности и приемлемой скорости вычислений. Высокоточные методы, основанные на детальном использовании полных табличных данных (HP-подход), позволяют наиболее точно воспроизводить экспериментальные данные, но существенно замедляют расчеты.

С другой стороны, упрощенные методы, такие как XS-подход, обеспечивают высокую производительность за счет использования усредненных сечений и оптимизированных структур данных. Однако, как показано в данной

работе, такие методы могут приводить к заметным отклонениям результатов в резонансной области энергий.

Искажение резонансной структуры сечений приводит к изменению вероятностей взаимодействия нейтронов с веществом, что, в свою очередь, влияет на наблюдаемые физические величины, например вероятность прохождения нейтронов через мишень.

Поэтому разработка методов, позволяющих повысить точность быстрых моделей без значительного роста вычислительных затрат, представляет практический и научный интерес.

1.2.2 Роль резонансной структуры сечений

Резонансная структура ядерных сечений является фундаментальной особенностью взаимодействия нейтронов с ядрами. Она обусловлена существованием квазистационарных состояний составного ядра и проявляется в виде узких пиков на зависимости сечения от энергии нейтрона.

В резонансной области даже небольшие изменения энергии нейтрона могут приводить к значительным изменениям вероятности взаимодействия. Поэтому корректное воспроизведение этой структуры имеет принципиальное значение для точного моделирования.

В работе показано, что использование усредненных сечений с недостаточной плотностью дискретизации приводит к сглаживанию резонансных пиков и искажению их формы, что отражается на результатах моделирования, например на зависимости вероятности прохождения нейтронов через вещество. Это важно для задач, результаты которых чувствительны к форме энергетического спектра нейтронов.

1.3 Применения моделирования нейтронов

1.3.1 Ядерная энергетика

Одной из основных областей применения моделирования нейтронов является ядерная энергетика. В ядерных реакторах нейтроны играют определяющую роль в поддержании цепной реакции деления и формировании энергетического спектра в активной зоне.

Моделирование нейтронных потоков используется для расчета пространственно-энергетического распределения флюенса, оценки реактивности, анализа безопасности реактора, прогнозирования радиационных повреждений конструкционных материалов, в частности корпуса реактора. Для этого рассчитываются такие характеристики, как число смещений на атом и скорость накопления дефектов.

Точность этих расчетов зависит от корректного описания взаимодействия нейтронов с веществом, особенно в диапазоне энергий, соответствующем эксплуатационным условиям реактора. При моделировании динамики нейтронов в ядерных реакторах необходимо учитывать температуру среды, изменение изотопного состава топлива и процессы радиоактивного распада.

1.3.2 Материаловедение

В области радиационного материаловедения нейтроны используются для изучения механизмов повреждения твердых тел под действием облучения. Взаимодействие нейтронов с атомами кристаллической решетки приводит к образованию каскадов смещений, формированию вакансий и междоузельных атомов, а также к развитию дефектных структур.

Анализ этих процессов позволяет прогнозировать изменение механических и физических свойств материалов, включая радиационное охрупчивание, изменение теплопроводности и другие эффекты. Моделирование нейтронного транспорта является важным элементом таких исследований, поскольку определяет энергетический спектр и интенсивность потока нейтронов и вторичных частиц, воздействующих на материал.

1.3.3 Медицинская физика

В медицинской физике нейтроны применяются, в частности, в нейтронзахватной и быстрой нейтронной терапии. Моделирование необходимо для расчета распределения дозы в биологических тканях и оптимизации параметров облучения.

При радиационной терапии вторичные нейтроны способны оказывать влияние на распределение дозы и сопутствующие биологические эффекты.

Высокая чувствительность биологических тканей к нейтронному излучению требует высокой точности расчетов, что делает задачу корректного описания нейтронных взаимодействий особенно важной.

1.3.4 Физика высоких энергий

В экспериментах физики высоких энергий нейтроны возникают как вторичные частицы в адронных ливнях, формирующихся при взаимодействии высокоэнергетических частиц с веществом детектора. Эти нейтроны могут обладать широким спектром энергий, включая низкоэнергетическую область, где проявляются резонансные эффекты.

Нейтроны вносят значительный вклад в отклик детекторов, особенно в адронных калориметрах. Например, низкоэнергетические нейтроны могут длительное время сохраняться в объеме детектора, формируя так называемое нейтронное облако. Такие нейтроны способны создавать дополнительный фон и влиять на регистрируемые сигналы. Для оценки величины такого фона требуется моделирование.

Моделирование таких процессов в среде Geant4 широко используется при проектировании и анализе экспериментов, включая эксперименты на коллайдерных установках. При этом высокая вычислительная сложность задач требует использования оптимизированных методов работы с ядерными данными.

1.4 Постановка задачи

Для повышения вычислительной эффективности был предложен метод XS-сечений [6]. Его суть — обеспечить оперативный доступ к сечениям для всего спектра энергий, допуская некоторые потери в точности. Поскольку вычисление сечения выполняется на каждом шаге транспортировки частицы в методе Монте-Карло, скорость доступа к этим данным оказывает существенное влияние на общую производительность моделирования. Это актуально для приложений в физике высоких энергий.

При моделировании экспериментов на коллайдерах использование XS-сечений вместе со стандартной физической конфигурацией FTFP_BERT позволяет выполнять моделирование в несколько раз быстрее, чем при исполь-

зовании конфигурации FTFP_BERT_HP. Однако следует заметить, что увеличение скорости моделирования различно в зависимости от геометрии экспериментальной установки и особенностей системы сбора данных.

Анализ энергетических зависимостей сечений, полученных методом XS, показал наличие заметных отклонений в резонансной области энергий. В связи с этим была поставлена задача модернизации набора данных XS с целью повышения точности моделирования без существенной потери его эффективности и без значительного увеличения объема базы данных. Решением стало создание дополнительных R (Resonance) файлов, содержащих уточненные данные о сечениях, начиная с энергии в 1 эВ и до верхней границы резонанса.

Актуальность работы: При моделировании в физике высоких энергий приходится сталкиваться с выбором между точностью расчетов и скоростью их выполнения. Использование высокоточных библиотек обеспечивает точность результатов на уровне современных экспериментальных данных, однако требует значительного времени вычислений. Метод XS-сечений позволяет ускорить расчеты, но приводит к неточностям в резонансной области энергий, что может искажать физические результаты.

Таким образом, практическая значимость работы заключается в преодолении указанного компромисса между точностью и быстродействием моделирования. Разработка уточненных R-файлов для набора XS направлена на то, чтобы сохранить высокую скорость моделирования и при этом существенно повысить точность расчетов в резонансной области, что необходимо для корректного и эффективного моделирования современных экспериментов.

Задачи:

1) Изучить метод построения XS-сечений.
2) Разработать экспериментальное окружение в Geant4, которое позволит оценить эффективность методов.
3) Разработать метод уточнения XS-сечений в резонансной области энергий.
4) Провести оценки эффективности разработанного метода.

2 МЕТОД XS-СЕЧЕНИЙ

2.1 Основные сведения о методе

В этой главе мы рассмотрим одну из внутренних баз данных, используемых в Geant4, а именно XS, под которой понимается некоторая файловая система.

Ниже рассматривается версия G4PARTICLEXS4.1. В ее структуре присутствуют поддиректории для различных частиц: neutron, proton, deuteron, triton, alpha, He3, gamma и neutrion. Каждая из них содержит ASCII-файлы с сечениями взаимодействия частиц с природными элементами и изотопами. Формат файлов соответствует стандарту G4PhysicsVector — основного класса для хранения данных в Geant4, внутри которого содержатся столбцы энергия-сечение. Этот класс включает в себя методы доступа к данным и различные способы их организации по шкалам. Например, возможно расположить данные в свободном порядке, при котором шаг между значениями не фиксирован; также можно использовать линейную шкалу, тогда соседние точки отстоят друг от друга на фиксированную величину, либо логарифмическую шкалу.

При инициализации компонентов, отвечающих за физические процессы, Geant4 загружает сечения для тех атомов, которые используются в геометрии моделируемой системы. Данные помещаются в объекты G4PhysicsVector. На каждом шаге моделирования для частицы вычисляется сечение процессов в конкретном материале. Для XS-подхода сечение для материала получается суммированием сечений на входящих в него элементах с учетом их концентрации. При этом структура вещества и его температура не учитываются. Такой подход эффективен для многих задач, однако, отметим, что для точного моделирования ядерных реакторов требуется использование более детальных HP-моделей и учет температуры.

Производительность XS-подхода выше, чем у HP, благодаря двум оптимизациям:

1) XS-данные содержат заранее рассчитанные сечения для элементов с природным изотопным составом, в то время как HP-подход требует суммирования сечений по изотопам на каждом шаге моделирования.

2) XS-данные используют логарифмическую шкалу по энергии. Это позволяет вычислить логарифм энергии частицы всего один раз для интерполяции всех сечений. В HP-подходе для каждого вектора сечений по изотопам необходим независимый бинарный поиск по энергии.

XS-сечения готовятся по единой методике для всех элементов вплоть до урана на основе HP-базы данных. Для каждого элемента или изотопа создается логарифмический G4PhysicsVector. Его нижняя граница определяется минимальным ненулевым значением сечения. Плотность точек для упругого рассеяния составляет 20 на декаду, для остальных процессов используется 50.

Обратим внимание на то, что объем XS базы данных около 30 МБ, что почти на два порядка меньше, чем у специализированных нейтронных данных HP: объем G4NDL4.7.1 составляет 1.15 ГБ.

2.2 Метод созданий файлов с сечениями

База данных XS содержит сечения упругого, неупругого рассеяния и радиационного захвата нейтронов. HP-библиотека, начиная с радия, также включает сечения деления тяжелых ядер под действием нейтронов. Этот процесс не является частью стандартной физической конфигурации Geant4 и имеет относительно небольшое сечение, он активируется только при использовании HP-конфигурации.

На рисунке 1 в качестве примера представлен график сечений упругого рассеяния нейтрона на ядре алюминия. Упругое сечение обладает выраженной резонансной структурой. Резонансная область уникальна для каждого элемента. Минимальная энергия для сечений определяется индивидуально для каждого элемента.

В XS-векторе, применяется процедура усреднения. Для каждой точки вектора берется интервал ± 0.5 от расстояния до соседней точки, он разбивается на 100 частей, далее вычисляются HP-сечения в этих точках, и определяется их среднее значение. Физическое обоснование этого метода заключается в том, что благодаря многократному упругому рассеянию нейтрон фактически «ощущает» усредненное сечение в среде. В результате узкие резонансные пики расширяются и уменьшаются по амплитуде, в то время как форма широких пиков сохраняется.

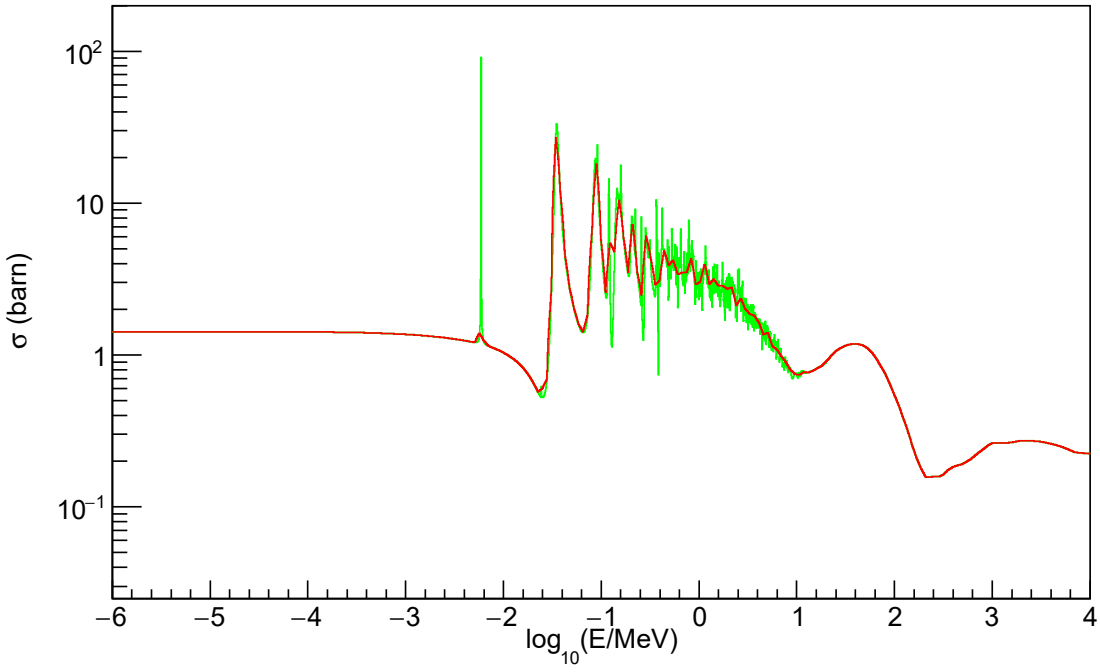


Рисунок 1 — Сечение упругого рассеяния нейтронов на алюминии как функция логарифма энергии. Расчеты приведены для Geant4 физических конфигураций по умолчанию FTFP_BERT (красная гистограмма – XS-сечения) и альтернативной FTFP_BERT_HP (зеленая гистограмма – HP-сечения)

Выбор минимальной энергии для неупругого XS-сечения производится путем нахождения наименьшей энергии среди изотопов элемента в HP данных, при котором сечение равно нулю. Если для какого-либо изотопа сечение ненулевое при всех энергиях, то нижняя граница устанавливается на основе формы упругого сечения и захвата.

Верхняя граница для сечений захвата и сечений на отдельных изотопах установлена на уровне максимальной энергии HP-данных — 20 МэВ. Для упругих и неупругих XS-сечений на элементах верхняя граница значительно выше — 20 ГэВ.

Расчет сечений в широком энергетическом диапазоне (до 20 ГэВ) использует комбинацию данных HP и параметризация Барашенкова [7].

3 МЕТОД XSR-СЕЧЕНИЙ

3.1 Экспериментальное окружение для оценки эффективности метода

Для количественной оценки качества алгоритма генерации XS-сечений и анализа влияния внесенных в метод изменений на точность моделирования требуется специализированное тестовое окружение в среде Geant4. Прямое сравнение сечений, особенно обладающих сложной резонансной структурой, является нетривиальной задачей. Поэтому валидация была реализована путем воспроизведения в Geant4 реальной экспериментальной установки. Такое тестовое окружение позволит находить вероятность прохождение нейтрона через мишень, благодаря чему можно сравнивать результаты как между различными моделями (например, XS и HP), так и с экспериментальными данными.

3.1.1 Описание экспериментальной установки

В качестве прототипа для моделирования была выбрана время - пролетная (Time-of-Flight, ToF) установка, расположенная в центре имени Гельмгольца Дрезден-Россендорф (Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, HZDR). Данная установка (рис. 2) позволяет проводить эксперименты по измерению вероятности сквозного прохождения нейтронов через мишень. В её основе лежит источник нейтронов белого спектра — гидросвинцовый нейтронный радиатор, испускающий частицы изотропно. Генерируемые нейтроны имеют кинетическую энергию в широком резонансной области — от 100 кэВ до свыше 10 МэВ.

На пути формируемого нейтронного пучка размещается исследуемый образец, который устанавливается непосредственно перед системой коллиматоров. Сама система коллимации выполнена в виде стальных труб, оснащенных коническими вставками из борированного полиэтилена и свинца и окруженных бетонной защитой. Такая конструкция позволяет сформировать узкий пучок нейтронов диаметром примерно 3.0 см.

В качестве детектора прошедших частиц используется сцинтиллятор в связке с фотоумножителями

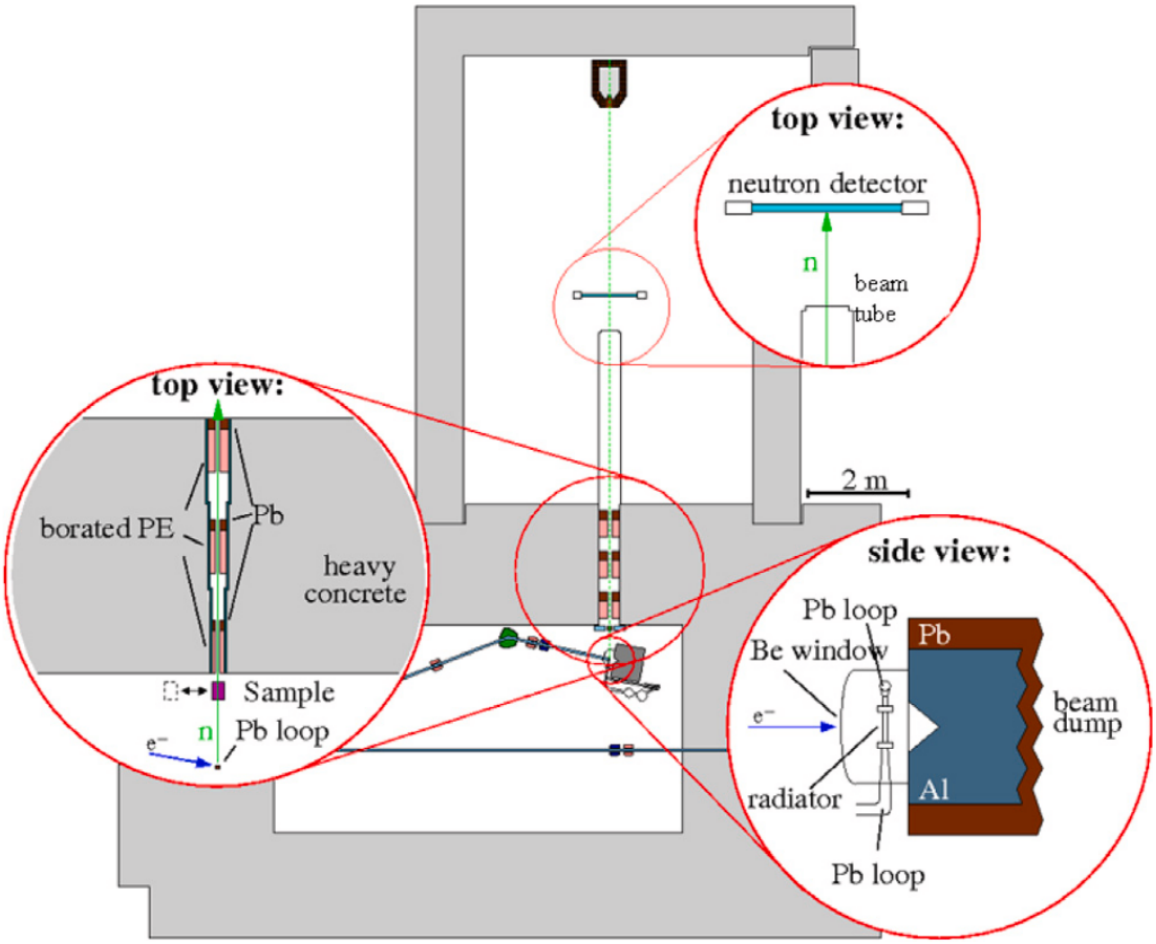


Рисунок 2 — Принципиальная схема экспериментальной установки nELBE для проведения эксперимента по измерению вероятности прохождения нейтронов через мишень.

Для получения графика вероятности прохождения потока частиц через мишень необходимо определить поток частиц до мишени и после нее. Поскольку прямое измерение потока до мишени невозможно, а поток после мишени регистрируется детектором, используется косвенный метод. Проводятся измерения числа зарегистрированных частиц в двух конфигурациях: с установленной мишенью и без нее. Затем отношение этих величин рассчитывается в заданном диапазоне энергий, что позволяет определить вероятность прохождения частиц через вещество.

Геометрия и параметры моделирования в Geant4 были воспроизведены на основе работы [8].

3.1.2 Модель эксперимента в Geant4

В среде Geant4 была описана геометрическая модель экспериментальной установки. Конструкция предусматривает возможность изменения размеров и толщины исследуемых образцов. В качестве мишени берется диск из заданного материала, диаметром 25 мм и толщиной 20 мм. Источник частиц генерирует нейтроны, энергия которых равномерно распределена в заданном диапазоне. Моделирование проводилось в промежутке от 1 эВ до 10 МэВ. Вероятность попадания нейтрона в любую точку поверхности мишени одинакова.

Для исключения из моделирования нерелевантных событий частицы, попавшие в коллиматор, удаляются из процесса трекинга. Регистрации подлежат только те нейтроны, которые достигли активной области детектора.

В эксперименте nELBE для работы с газообразными веществами использовались специальные трубки, позволяющие поддерживать высокое давление [9]. Для корректного моделирования такого эксперимента необходимо воспроизвести конструкцию этих трубок, однако в рамках данной работы это не выполнялось

По результатам моделирования строится итоговая гистограмма, которая представляет собой зависимость вероятности прохождения нейтрона через мишень от его начальной энергии. Для ее получения используется аналогичный используемому в эксперименте подход. Сначала получается распределение числа частиц, зарегистрированных детектором, в двух случаях: при наличии мишени на пути пучка и при ее отсутствии. После этого соответствующие гистограммы делятся друг на друга, что позволяет определить вероятность прохождения частиц через вещество в зависимости от энергии. Этот результат, используется для последующего анализа и сравнения с экспериментальными данными или другими моделями.

3.2 Разработка уточненных R-файлов для набора XS-сечений

Как показало моделирование, основным недостатком исходного XS-набора данных являлось искажение формы сечений в резонансных областях. Применявшаяся процедура усреднения значений сечения между соседними точками энергетической сетки приводила к уменьшению высоты и одно-

временному уширению резонансных пиков, что эквивалентно их размытию. Проведенные тестовые моделирования с использованием исходных XS данных продемонстрировали, что характерная резонансная структура сечения оказывает существенное влияние на форму кривой вероятности прохождения нейтронов через мишень. Вследствие описанного искажения, полученный в моделировании график вероятности прохождения частицы через мишень (см. рисунок 3) качественно отличался от экспериментальных данных.

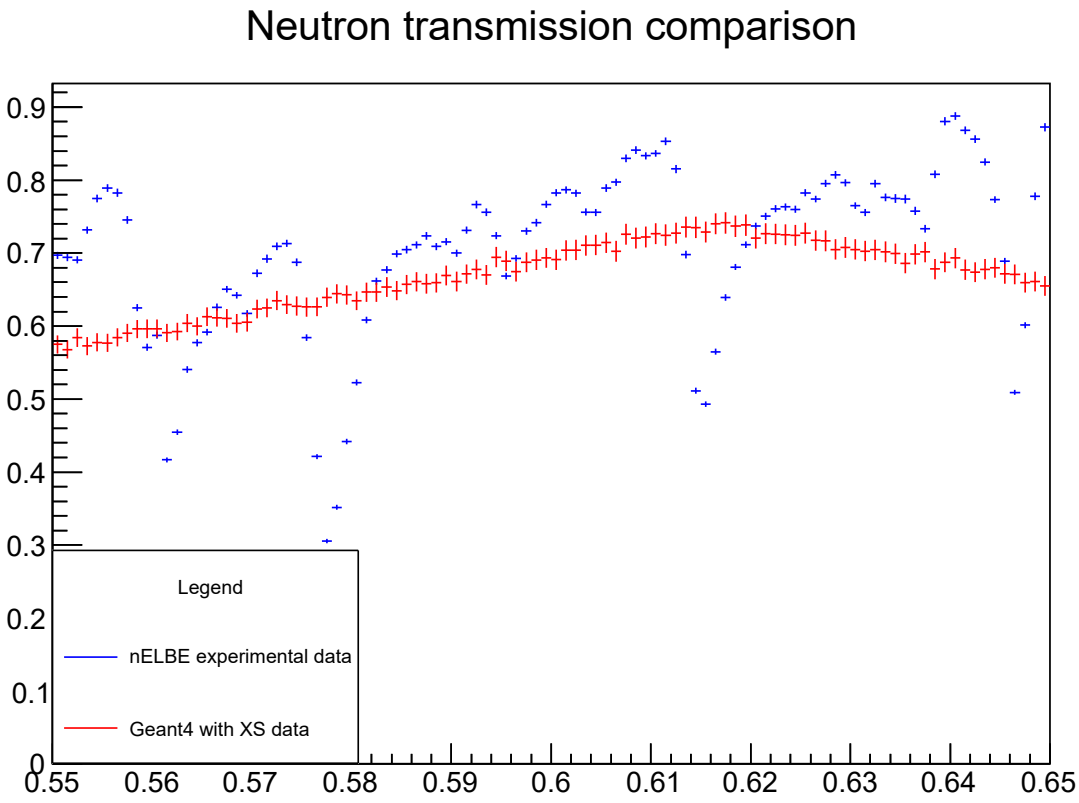


Рисунок 3 — Вероятность прохождения нейтрона через чистое железо. Расчеты приведены для физических конфигураций по умолчанию FTFP_BERT (красная гистограмма – XS-сечения) и экспериментальных данных nELBE (синяя гистограмма).

Таким образом, была сформулирована задача модификации метода генерации данных, направленная на сохранение высокой производительности исходного XS-подхода при одновременном воспроизведении резонансной структуры сечений, без существенного увеличения объема итогового набора данных.

Как отмечалось в главе 2, посвященной XS-подходу, его ключевое преимущество заключается в использовании класса G4PhysicsLogVector. Наличие логарифмической шкалы в этом классе обеспечивает быстрый доступ к значению сечения для заданной энергии, в отличие от векторов со свободной

шкалой, где доступ требует выполнения бинарного поиска. Поэтому было принято решение сохранить в качестве основой структуры данных логарифмические векторы.

В исходном методе плотность дискретизации составляла 20 или 50 точек на декаду в зависимости от типа процесса. Для компенсации столь разреженной сетки использовалось физически обоснованное усреднение, моделирующее эффективное усреднение сечения при многократном рассеянии частицы в веществе. Для исключения этой процедуры необходимо увеличить плотность точек в логарифмической сетке, что и было выполнено.

Основным критерием создания R-файла является наличие у элемента резонансной области. Дальнейший отбор обусловлен особенностями моделирования, в частности невозможностью работы с газообразными веществами, а также наличием резонансных уровней, расположенных ниже рассматриваемого энергетического диапазона. Таким образом, газы и элементы, границы резонансной области которых не попадают в диапазон моделирования, не рассматриваются, и для них R-файлы не создаются. Окончательный выбор элементов был выполнен на основе анализа качества, представленного в следующей главе в разделе 3.3.

Первая версия новой базы данных G4PARTICLEXS4.2 была создана в 2025 году и использовалась в публичной версии Geant4 11.4 (декабрь 2025 года).

В новой версии набора данных G4PARTICLEXS4.3 будет изменена его структура. R-файлы теперь будут начинаться с энергии 1 эВ и заканчиваться на максимальном значении верхней границы резонанса среди процессов захвата и упругого рассеяния. Для неупругого процесса границы определяются следующим образом: если при энергии 1 эВ значение сечения ненулевое, то верхняя граница файла совпадает с соответствующей границей для процессов упругого рассеяния и захвата. В противном случае нижняя граница устанавливается на первом ненулевом значении сечения, а верхняя определяется максимальной энергией резонансной области для данного процесса. Пример сечения созданного данным методом представлен на рисунке 4.

Кроме того, XS-файлы больше не будут задаваться отдельно — они будут непосредственно продолжать R-файлы с точки их окончания.

Благодаря тому, что границы некоторых R-файлов совпадают, в Geant4 отпадает необходимость вычислять логарифм энергии отдельно для каждого

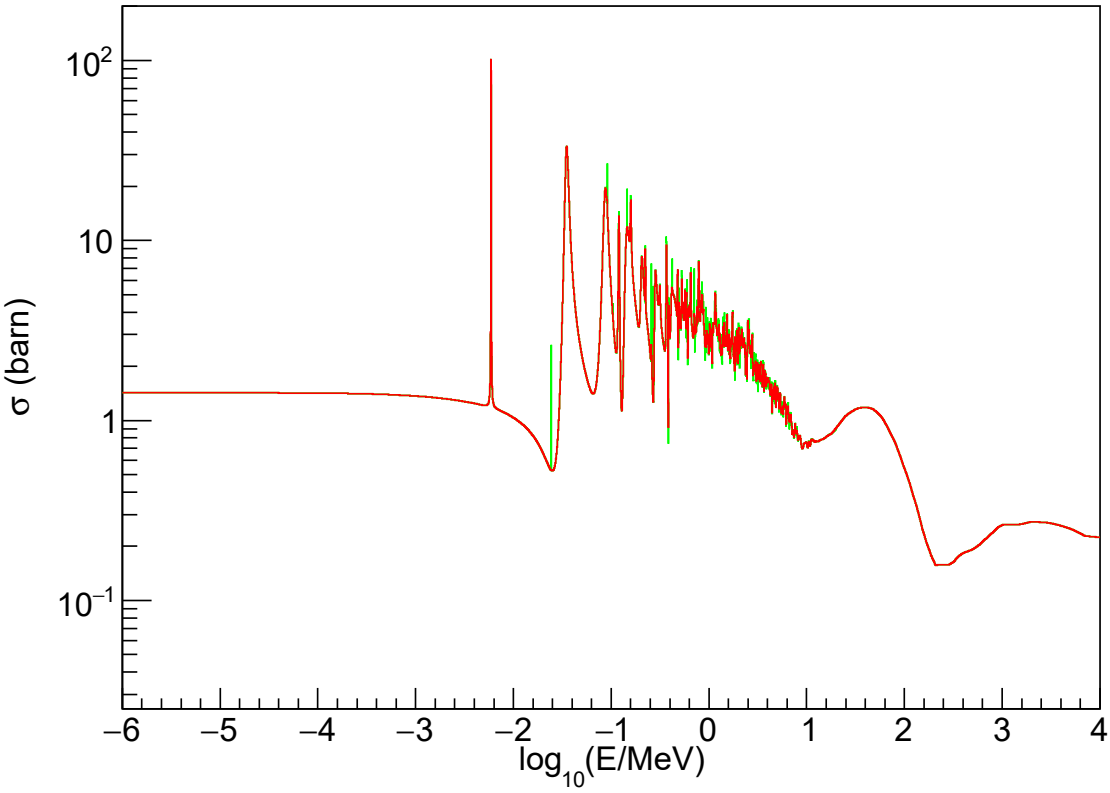


Рисунок 4 — Сечения упругого рассеяния нейтронов в алюминии как функция логарифма энергии. Расчеты приведены для Geant4 физических конфигураций по умолчанию FTFP_BERT (красная гистограмма – XS-сечения вместе с R файлами) и альтернативной FTFP_BERT_HP (зеленая гистограмма – HP-сечения)

процесса при определении соответствующего бина. Теперь это вычисление требуется выполнить только один раз, что повышает эффективность. Повышение нижней границы XS-файлов также позволяет сократить объём хранимых данных.

В рамках исследования были рассмотрены различные значения параметра плотности дискретизации. Также была протестирована методика усреднения сечений, аналогичная используемой в XS-методе, с тем отличием, что применялось большее значение плотности дискретизации на декаду.

В ходе моделирования Geant4 проверяет наличие R-файла для соответствующего элемента: если файл присутствует, система использует его данные для расчетов, в противном случае применяются стандартные XS-сечения.

3.3 Оценка эффективности нового метода

Для проверки корректности разработанного метода, а также для определения оптимального значения плотности дискретизации для каждого элемента, использовался тест, описанный в разделе 3.1.2. Основной целью являлось достижение компромисса между точностью и объемом данных.

Тестирование проводилось в диапазоне энергий от 1 эВ до 10 МэВ, что соответствовало построению 35 гистограмм распределения вероятности прохождения нейтронов через мишень. В качестве эталонной модели использовалась FTFP_BERT_HP.

Расчеты выполнялись для мишеней с атомным номером Z в диапазоне от 3 до 92. Для каждого элемента тесты запускались при различных значениях плотности дискретизации, а также для исходного набора данных XS. Для каждой полученной гистограммы вычислялось значение среднего абсолютного отклонения, которое использовалось в качестве метрики качества.

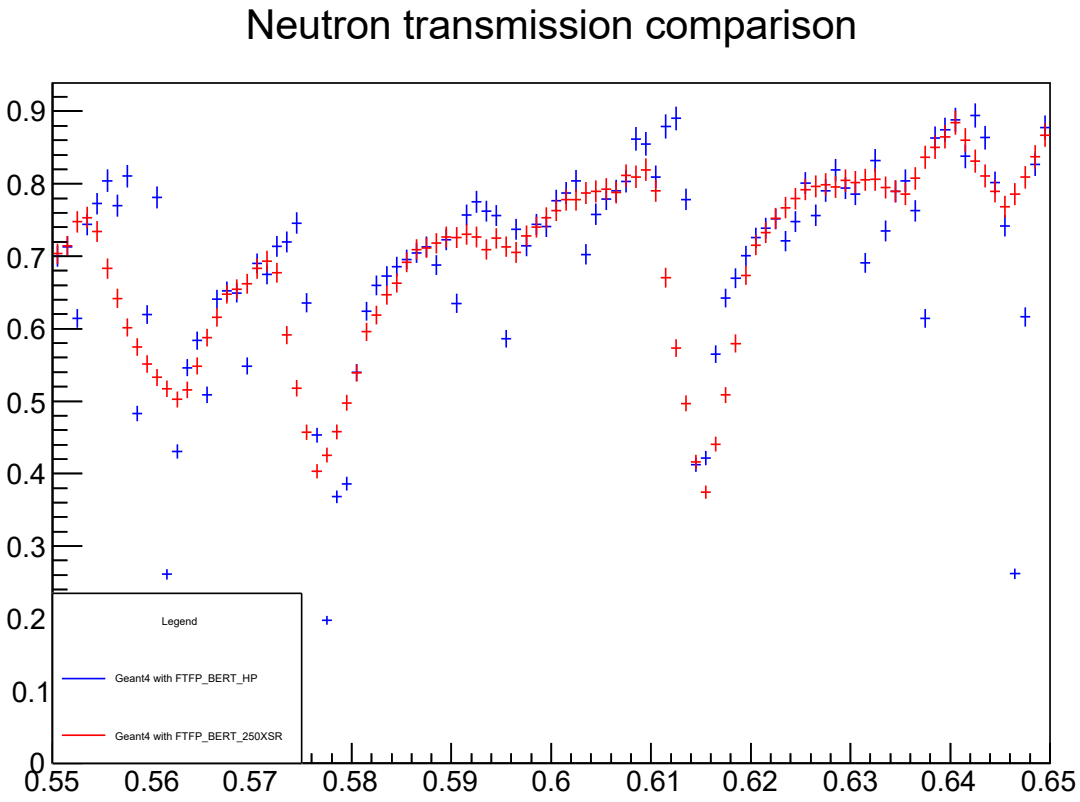


Рисунок 5 — Вероятность прохождения нейтрона через чистое железо. Расчеты приведены для физических конфигураций по умолчанию FTFP_BERT (красная гистограмма – XS-сечения с R файлами) и альтернативной FTFP_BERT_HP (зеленая гистограмма – HP-сечения)

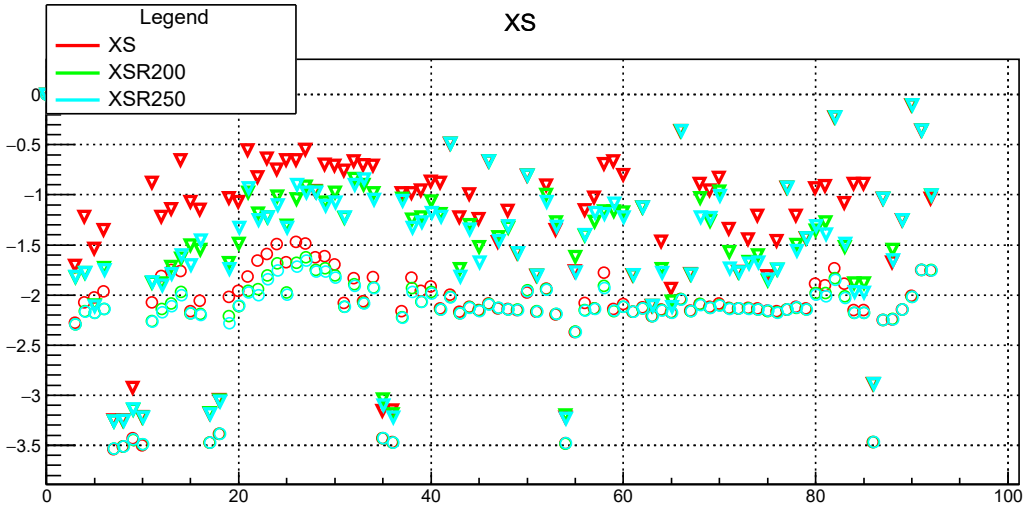


Рисунок 6 — Среднее и максимальное абсолютное отклонение для различных элементов для исходных XS и R файлов при плотности дискретизации 200 и 250 точек на декаду. Треугольник - максимальное абсолютное отклонение, круг - среднее абсолютное отклонение.

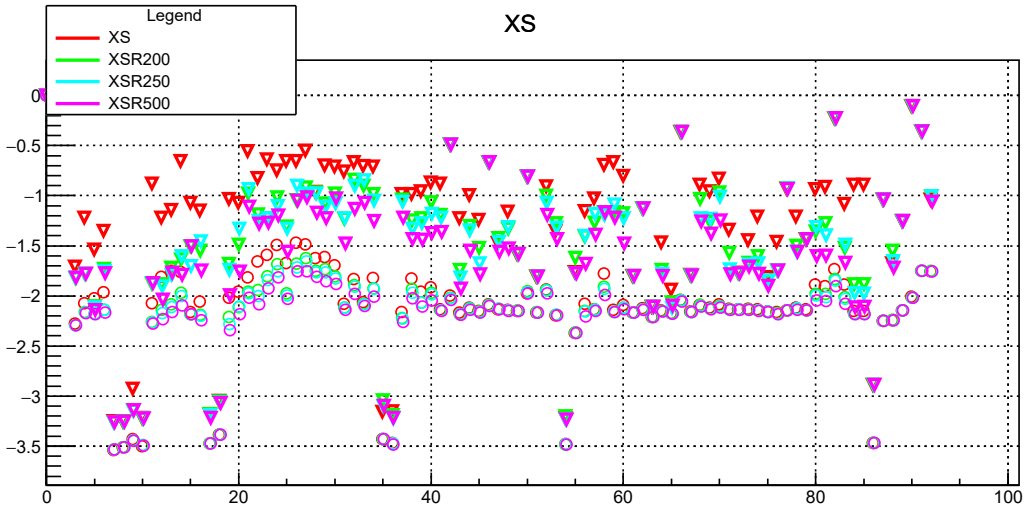


Рисунок 7 — Среднее и максимальное абсолютное отклонение для различных элементов для исходных XS и R файлов при плотности дискретизации 200, 250 и 500 точек на декаду. Треугольник - максимальное абсолютное отклонение, круг - среднее абсолютное отклонение.

Для анализа результатов были разработаны скрипты, позволяющие автоматически извлекать значения среднего абсолютного отклонения для каждой гистограммы, вычислять их среднее значение, а также определять максимальное отклонение. На основе этих данных строились графики для каждого элемента, на которых отображались средние и максимальные значения отклонения для различных конфигураций набора данных (см. рис. 6, 7).

По таким графикам выбиралось значение плотности дискретизации, обеспечивающее минимальные значения как среднего, так и максимального отклонения. При этом наблюдается, что для большинства элементов использование XS-сечений приводит к увеличению максимального отклонения.

В ряде случаев значения среднего и/или максимального отклонения не изменялись с увеличением плотности дискретизации. Для анализа таких ситуаций был разработан дополнительный инструмент, позволяющий отображать на одном графике гистограммы, полученные при различных параметрах (см. рис. 8).

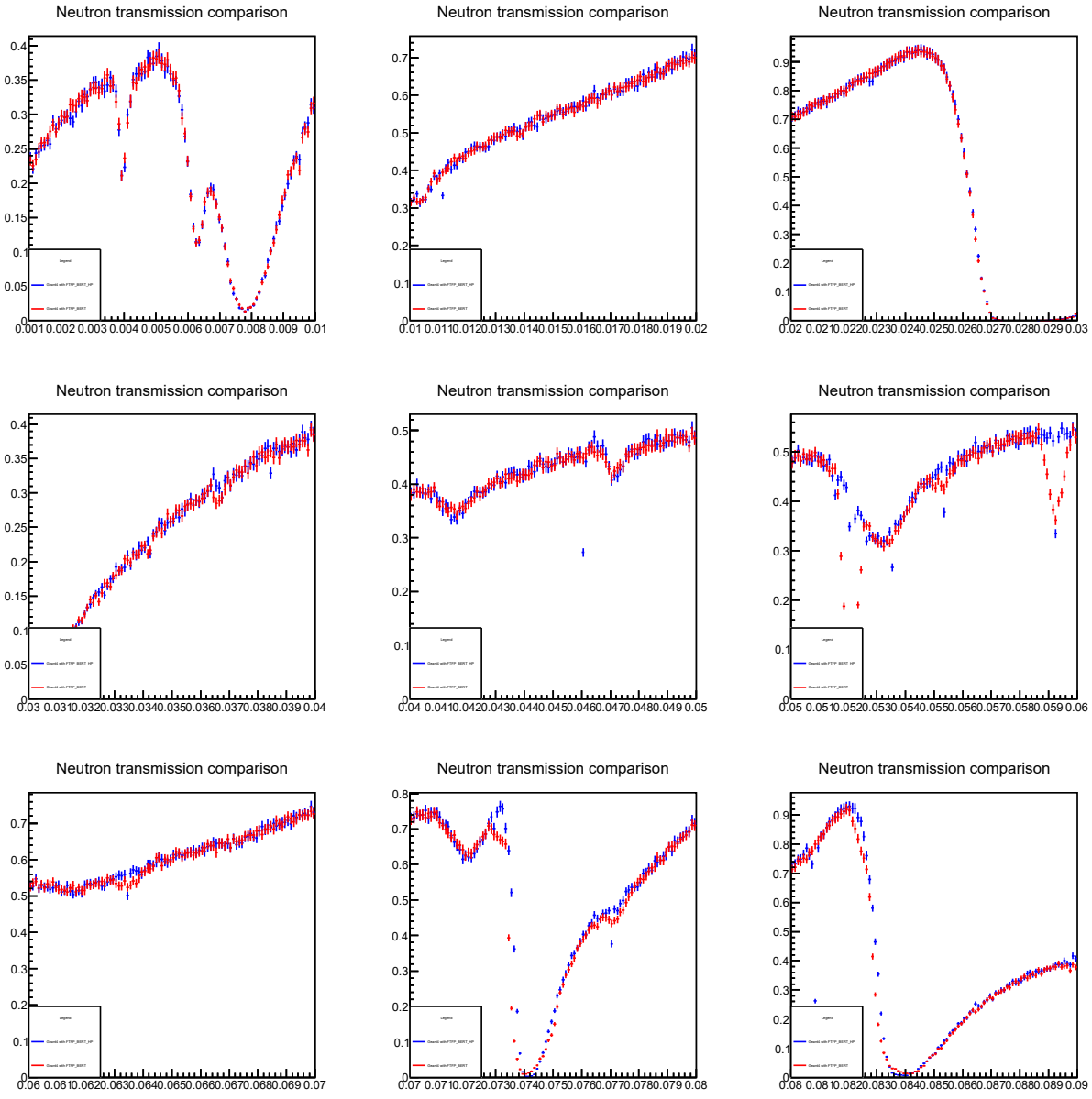


Рисунок 8 — Гистограммы распределения вероятности прохождения нейтронов через мишень для различных интервалов энергий

Также была исследована возможность усреднения сечений внутри R-файлов. Данный подход позволил для ряда элементов снизить как среднее, так и максимальное отклонение (см. рис. 9).

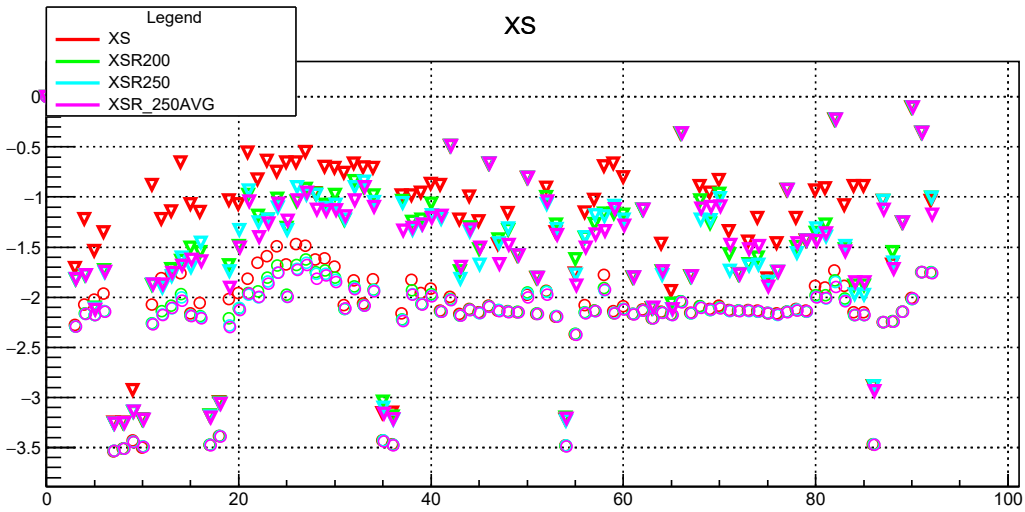


Рисунок 9 — Среднее и максимальное абсолютное отклонение для различных элементов для исходных XS и R файлов при плотности дискретизации 200, 250 точек и 250 точек на декаду с усреднением. Треугольник - максимальное абсолютное отклонение, круг - среднее абсолютное отклонение.

На основе проведенного анализа для каждого элемента было выбрано оптимальное значение плотности дискретизации, что позволяет повысить точность итогового набора данных.

По вычислительной производительности была проведена оценка времени выполнения (CPU time) моделирования, а также затрат оперативной памяти при моделировании эксперимента CMS на большом адронном коллайдере. Полученные результаты показали, что отличия по сравнению с исходным набором данных XS находятся на уровне порядка одного процента, что свидетельствует об отсутствии существенного влияния разработанного метода на производительность.

Проектное обеспечение, разработанное в рамках данного проекта сохранено в git-репозиторий на ресурсах лаборатории анализа данных физики высоких энергий (URL:https://git.hep.tsu.ru/geant4/hadronics/geant4-xs). Результаты тестирования доступны на интернет ресурсах лаборатории.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках данной работы в инструментарий Geant4 был добавлен новый набор данных и разработан усовершенствованный метод генерации внутренней базы данных нейтронных сечений G4PARTICLEXS4.3, эта база будет включена в новую версию Geant4 11.5. Для сохранения резонансной структуры были введены дополнительные R-файлы. Это позволило улучшить соответствие результатов моделирования как с HP-данными, так и с результатами экспериментальных измерений. При этом метод сохранил основное преимущество исходного XS-подхода — высокую скорость доступа к данным за счет использования логарифмической шкалы.

В соответствии с поставленными задачами:

1) Детально изучен метод построения XS-сечений, выявлен его основной недостаток — сглаживание резонансов из-за разреженной сетки и процедуры усреднения.

2) Разработано экспериментальное окружение в Geant4, представляющее собой модель время-пролетной установки nELBE, позволяющее количественно оценивать точность моделирования путем сравнения вероятности прохождения нейтронов через мишень.

3) Разработан новый метод создания R-файлов с логарифмической шкалой и переменной плотностью дискретизации, что позволило сохранить резонансную структуру.

4) Проведена оценка эффективности. Показано, что использование R-файлов снижает среднее абсолютное отклонение от эталонной HP-модели в резонансной области. При этом вычислительная производительность (CPU time) и потребление оперативной памяти изменились не более чем на 1%.

Валидация метода проведена на 90 элементах с атомными номерами от 3 до 92. Для каждого элемента подобрана оптимальная плотность дискретизации, обеспечивающая наилучший компромисс между точностью и объемом данных. Показано, что для газообразных элементов и элементов, чья резонансная область лежит вне рабочего диапазона энергий (1 эВ – 10 МэВ), R-файлы не создаются — для них по-прежнему используются стандартные XS-сечения.

Результаты работы докладывались на семинарах ТГУ, на совещаниях коллаборации Geant4 и были представлены на международной конференции CHEP2026.

В качестве дальнейших направлений развития работы планируется:

1) Добавление процесса вынужденного деления в физические конфигурации QBBC и FTFP_BERT с разработкой соответствующих сечений.

2) Создание базы данных нейтронных сечений при комнатной температуре.

3) Распространение разработанного подхода на легкие ионы (протоны, дейтроны, альфа-частицы) для создания набора данных.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. *Agostinelli S.*, *Allison J.*, *Amako K.*, [et al.]. Geant4—a simulation toolkit // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2003. — Vol. 506, no. 3. — P. 250–303. — URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900203013688 (visited on 04/17/2026).

2. *Allison J.*, *Amako K.*, *Apostolakis J.*, [et al.]. Geant4 developments and applications // IEEE Transactions on Nuclear Science. — 2006. — Vol. 53, no. 1. — P. 270–278. — URL: https://ieeexplore.ieee.org/document/1610988 (visited on 04/17/2026).

3. *Allison J.*, *Amako K.*, *Apostolakis J.*, [et al.]. Recent developments in Geant4 // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2016. — Vol. 835. — P. 186–225. — URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900216306957 (visited on 04/17/2026).

4. *Brown D.*, *Chadwick M.*, *Capote R.*, [et al.]. ENDF/B-VIII.0: The 8^{th} Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data // Nuclear Data Sheets. — 2018. — Vol. 148. — P. 1–142. — URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0090375218300206 (visited on 04/17/2026).

5. *Plompen A.J.M.*, *Cabellos O.*, *Saint Jean C. de*, [et al.]. The joint evaluated fission and fusion nuclear data library, JEFF-3.3 // European Physical Journal A. — 2020. — Vol. 56, no. 7. — P. 181. — URL: https://link.springer.com/article/10.1140/epja/s10050-020-00141-9 (visited on 04/17/2026).

6. *Багуля А.В.*, *Гришин В.М.*, *Иванченко В.Н.*, *Чалый Н.А.* Новая Geant4 база данных по адронным сечениям нейтронов и легких ионов // Известия высших учебных заведений. Физика. — 2024. — Т. 67, № 12. — С. 80—84. — URL: http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/koha:001151050 (дата обр. 17.04.2026) ; Режим доступа: для зарегистр. пользователей.

7. *Барашенков В.С.*, *Полянский А.*, *Соснин А.Н.* Аппроксимация нуклон-ядерных сечений. — 1989. — Нояб.

8. *Junghans A.*, *Beyer R.*, *Capote R.*, [et al.]. Neutron transmission measurement of thick natFe targets at nELBE // Annals of Nuclear Energy. — 2025. — Vol. 218. — P. 111363. — URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030645492500180X (visited on 04/17/2026).

9. *Junghans A.*, *Beyer R.*, *ClauBner J.*, [et al.]. Neutron transmission measurements at nELBE // EPJ Web of Conferences. — 2020. — Sept. — Vol. 239. — P. 01006. — URL: https://www.researchgate.net/publication/345965717_Neutron_transmission_measurements_at_nELBE (visited on 04/17/2026).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Листинг кода генерации XSR файлов

```
//////////////////////
// Ndata_XSR.cc
// Cross-section data generation
// Used for creating  cross-section tables (XSR) for various particles
//////////////////////

#include "globals.hh"
#include <vector>
#include <iostream>

#include "G4PhysicsVector.hh"
#include "G4PhysicsLogVector.hh"

#include "G4ParticleHPManager.hh"
#include "G4ParticleHPInelasticXS.hh"
#include "G4NeutronHPCaptureXS.hh"
#include "G4NeutronHPElasticXS.hh"
#include "G4NeutronHPInelasticXS.hh"
#include "G4NeutronHPFissionXS.hh"
#include "G4IsotopeList.hh"

#include "G4NistManager.hh"
#include "G4Element.hh"
#include "G4Neutron.hh"
#include "G4Proton.hh"
#include "G4Deuteron.hh"
#include "G4Triton.hh"
#include "G4He3.hh"
#include "G4Alpha.hh"
#include "G4Gamma.hh"

#include "G4ParticleDefinition.hh"
#include "G4ParticleTable.hh"
#include "G4BGGNucleonElasticXS.hh"
#include "G4BGGNucleonInelasticXS.hh"
#include "G4VCrossSectionDataSet.hh"
#include "G4ComponentGGNuclNuclXsc.hh"
#include "G4CrossSectionInelastic.hh"
```

```
#include "G4LENDInelasticCrossSection.hh"
#include "G4LENDCombinedCrossSection.hh"
#include "G4PhysicsFreeVector.hh"
#include "G4HadronNucleonXsc.hh"

#include "G4ElementData.hh"
#include "G4ElementDataRegistry.hh"

#include "G4SystemOfUnits.hh"
#include "G4PhysicalConstants.hh"

#include "res_energy.hh"

using namespace std;

int main() {

//====================== Initialisation ======================

const G4int verbose = 0;
const G4double xs_min = 0.0;
const G4double abundlim = 0.00001;
const G4double emaxcap  = 20.*MeV;
const G4double emaxinel = 20.*GeV;
const G4int kbins = 100;
const G4int zmax = 92;
std::size_t index = 0;
G4String ff = "fname.log";

// Disable Doppler broadening
G4ParticleHPManager::GetInstance()->SetMaxEnergyDoppler(0.0);
G4ElementDataRegistry* rdata = G4ElementDataRegistry::Instance();

// Process names and corresponding particles
G4String title[9] = {"Capture","Elastic","Inelastic","Fission",
"Inelastic","Inelastic","Inelastic","Inelastic","Inelastic"};
G4String npart[9] = {"neutron","neutron","neutron","neutron",
"proton","deuteron","triton","He3","alpha"};
G4String dirname = "averagedXSR/";

// Minimum energy thresholds for each element (Z=1..94)
G4double eEmin[95] = {
0,
keV,keV,keV,keV,keV,100*eV,keV,10*eV,100*eV,100*eV, // Z=1-10
```

```
100*eV,keV,100*eV,keV,100*eV,100*eV,eV,10*eV,10*eV,100*eV,  // Z=11-20
10*eV,10*eV,10*eV,10*eV,eV,10*eV,eV,100*eV,10*eV,10*eV,  // Z=21-30
10*eV,10*eV,eV,eV,eV,1*eV,10*eV,eV,10*eV,10*eV,  // Z=31-40
10*eV,eV,eV,eV,0.1*eV,eV,eV,eV,0.1*eV,0.1*eV,  // Z=41-50
eV,0.1*eV,eV,eV,eV,eV,eV,10*eV,eV,eV,  // Z=51-60
eV,eV,0.1*eV,eV,eV,0.1*eV,eV,eV,eV,eV,  // Z=61-70
0.1*eV,0.1*eV,0.1*eV,eV,0.1*eV,eV,0.1*eV,eV,0.1*eV,eV,  // Z=71-80
10*eV,100*eV,100*eV,eV,eV,eV,eV,eV,10*eV,eV,  // Z=81-90
0.1*eV,eV,eV,eV};  // Z=91-94

// Element symbols for Z=1..94
G4String Elm[95] = {
"␣",
"H","He","Li","Be","B","C","N","O","F","Ne",
"Na","Mg","Al","Si","P","S","Cl","Ar","K","Ca",
"Sc","Ti","V","Cr","Mn","Fe","Co","Ni","Cu","Zn",
"Ga","Ge","As","Se","Br","Kr","Rb","Sr","Y","Zr",
"Nb","Mo","Tc","Ru","Rh","Pd","Ag","Cd","In","Sn",
"Sb","Te","I","Xe","Cs","Ba","La","Ce","Pr","Nd",
"Pm","Sm","Eu","Gd","Tb","Dy","Ho","Er","Tm","Yb",
"Lu","Hf","Ta","W","Re","Os","Ir","Pt","Au","Hg",
"Tl","Pb","Bi","Po","At","Rn","Fr","Ra","Ac","Th",
"Pa","U","Np","Pu"};

// Capture reaction max energy table
static const G4double cap_max_e[] = {
0,
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //1-10
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //11-20
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //21-30
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //31-40
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //41-50
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //51-60
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //61-70
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //71-80
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //81-90
20,20};

// Capture reaction min energy table
static const G4double cap_min_e[] = {
0,
0.0,0.0,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //1-10
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //11-20
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //21-30
```

```
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //31-40
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //41-50
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //51-60
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //61-70
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //71-80
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //81-90
1e-06,1e-06};

// Elastic reaction max energy table
static const G4double el_max_e[] = {
0,
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //1-10
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //11-20
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //21-30
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //31-40
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //41-50
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //51-60
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //61-70
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //71-80
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //81-90
20,20};

// Elastic reaction min energy table
static const G4double el_min_e[] = {
0,
0.0,0.0,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //1-10
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //11-20
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //21-30
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //31-40
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //41-50
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //51-60
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //61-70
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //71-80
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,  //81-90
1e-06,1e-06};

// Inelastic reaction max energy table
static const G4double inel_max_e[] = {
0,
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //1-10
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //11-20
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //21-30
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //31-40
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,  //41-50
```

```
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,   //51-60
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,   //61-70
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,   //71-80
20,20,20,20,20,20,20,20,20,20,   //81-90
20,20};

// Inelastic reaction min energy table (reaction thresholds)
static const G4double inel_min_e[] = {
0,
0.0,0.0,1e-06,0.66715,1e-06,4.1327,1e-06,1e-06,0.11584,1e-06,   //1-10
0.459294,0.60872,0.875292,1.3,0.78756,1e-06,1e-06,1.49774,1e-06,1e-06,
//11-20
1e-06,1e-06,1e-06,0.574776,0.128262,1e-06,1.1185,1e-06,1e-06,1e-06,
//21-30
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,0.919272,1e-06,
//31-40
1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,0.1,1e-06,   //41-50
0.0374095,1e-06,1e-06,1e-06,0.0816147,0.1,1e-06,1e-06,0.14,1e-06,
//51-60
0.0917255,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,0.095279,1e-06,1e-06,1e-06,
//61-70
1e-06,0.00025,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,0.0734218,1e-06,1e-06,1e-06,
//71-80
1e-06,1e-06,0.90144,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,1e-06,0.0274916,0.0495846,
//81-90
0.00925021,0.00225};

// Define particle types
G4ParticleDefinition* neutron = G4Neutron::Neutron();
G4ParticleDefinition* proton = G4Proton::Proton();
G4ParticleDefinition* deuteron = G4Deuteron::Deuteron();
G4ParticleDefinition* triton = G4Triton::Triton();
G4ParticleDefinition* He3 = G4He3::He3();
G4ParticleDefinition* alpha = G4Alpha::Alpha();

G4ParticleTable* partTable = G4ParticleTable::GetParticleTable();
partTable->SetReadiness();

G4int IsoN[95];       // Number of isotopes per element
G4int Idxmin[95] = {0};  // Minimum mass isotope index
G4int Idxmax[95] = {0};  // Maximum mass isotope index
G4NistManager* nist = G4NistManager::Instance();

G4cout << "### Ndata1: start loop over " << zmax
```

```
<< "␣elements␣###" << G4endl;
G4double kT = CLHEP::STP_Temperature * CLHEP::k_Boltzmann;

// Count isotopes for each element (Z=1..zmax)
for (G4int z = 1; z <= zmax; ++z) {
IsoN[z] = 0;
nist->FindOrBuildElement(z);
G4int N1 = nist->GetNistFirstIsotopeN(z);
G4int Numb = nist->GetNumberOfNistIsotopes(z);

if (Numb > 1) {
for (G4int n = N1; n < (N1 + Numb); ++n) {
G4double Abund = nist->GetIsotopeAbundance(z, n);
// Keep isotopes with sufficient abundance or special cases
if (Abund >= abundlim || (1 == z && 3 >= n) ||
(2 == z && 3 == n) || (2 == z && 4 == n)) {
++IsoN[z];
if (Idxmin[z] == 0) { Idxmin[z] = n; }
Idxmax[z] = n;
}
}
}

if (verbose > 0) {
G4cout << "Z=␣" << z << "␣␣Niso=" << IsoN[z]
<< "␣␣NisoMax=" << Numb << "␣Ekt(keV)="
<< kT/(aeff[z]*CLHEP::keV) << G4endl;
}
}


/*
G4cout << "static const G4int amin[] = {" << G4endl;
G4cout << "  0," << G4endl;
for(G4int z=1; z<95; ++z) {
G4int iii = Idxmin[z];
G4cout << std::setw(4) << iii << ",";
if(z/10*10 == z) { G4cout << "  //" << z-9 << "-" << z << G4endl; }
}
G4cout << "};" << G4endl;
*/

// Initialize dynamic particle for cross-section calculations
```

```
auto dynParticle = new G4DynamicParticle(neutron,

G4ThreeVector(1,0,0), 1.0);

// Cross-section data sets for different reaction types
G4VCrossSectionDataSet* sdata[9];
sdata[0] = new G4NeutronHPCaptureXS();        // Neutron capture
sdata[1] = new G4NeutronHPElasticXS();        // Neutron elastic
sdata[2] = new G4NeutronHPInelasticXS();      // Neutron inelastic
sdata[3] = new G4NeutronHPFissionXS();        // Neutron fission
sdata[4] = new G4ParticleHPInelasticXS(proton);    // Proton inelastic
sdata[5] = new G4ParticleHPInelasticXS(deuteron); // Deuteron inelastic
sdata[6] = new G4ParticleHPInelasticXS(triton);    // Triton inelastic
sdata[7] = new G4ParticleHPInelasticXS(He3);       // He3 inelastic
sdata[8] = new G4ParticleHPInelasticXS(alpha);     // Alpha inelastic

// Element data from registry
G4ElementData* edata[9] = {nullptr};
edata[0] = rdata->GetElementDataByName("neutronCaptureHP");
edata[1] = rdata->GetElementDataByName("neutronElasticHP");
edata[2] = rdata->GetElementDataByName("neutronInelasticHP");
edata[3] = rdata->GetElementDataByName("neutronFissionHP");
edata[4] = rdata->GetElementDataByName("protonInelasticHP");
edata[5] = rdata->GetElementDataByName("deuteronInelasticHP");
edata[6] = rdata->GetElementDataByName("tritonInelasticHP");
edata[7] = rdata->GetElementDataByName("He3InelasticHP");
edata[8] = rdata->GetElementDataByName("alphaInelasticHP");

// Physics vectors for He4 special handling
G4PhysicsVector* He4Inel[9] = {nullptr};

// Barashenkov parametrization for nucleon cross-sections
G4VCrossSectionDataSet* dataBGGE = new G4BGGNucleonElasticXS(neutron);
G4VCrossSectionDataSet* dataBGGI = new G4BGGNucleonInelasticXS(neutron);
dataBGGE->BuildPhysicsTable(*neutron);
dataBGGI->BuildPhysicsTable(*neutron);

G4VCrossSectionDataSet* dataBGGEP = new G4BGGNucleonElasticXS(proton);
G4VCrossSectionDataSet* dataBGGIP = new G4BGGNucleonInelasticXS(proton);
dataBGGEP->BuildPhysicsTable(*proton);
dataBGGIP->BuildPhysicsTable(*proton);

// Glauber-Gribov model for nucleus-nucleus cross-sections
G4ComponentGGNuclNuclXsc* ggnn = new G4ComponentGGNuclNuclXsc();
```

```
G4CrossSectionInelastic* theNNData = new G4CrossSectionInelastic(ggnn);

// Arrays for isotope data storage
const std::size_t nmaxis = 20;
std::vector<G4PhysicsVector*> PV(nmaxis, nullptr);
std::vector<G4int>            isa(nmaxis);
std::vector<G4double>         abunda(nmaxis);
std::vector<G4double>         afact(nmaxis);

//================ Loop over reaction types ====================
// v = 0: neutron capture
// v = 1: neutron elastic
// v = 2: neutron inelastic
// v = 3: neutron fission (skipped)
// v = 4: proton inelastic
// v = 5: deuteron inelastic
// v = 6: triton inelastic
// v = 7: He3 inelastic
// v = 8: alpha inelastic

for (G4int v = 0; v < 3; ++v) {  // Process only neutron reactions
auto cdata = edata[v];

//================ Loop over elements ========================
for (G4int z = 1; z <= zmax; ++z) {
G4int N1 = nist->GetNistFirstIsotopeN(z);
G4int Numb = nist->GetNumberOfNistIsotopes(z);

const G4Element* Elem = nist->FindOrBuildElement(z, true);
const G4String elmName = Elem->GetName();
G4String mnam = "G4_" + elmName;

if (verbose > 0) {
G4cout << "==+==␣Process:␣" << v << "␣" << title[v]
<< "␣Z=" << z << G4endl;
}

// Set energy range and reaction parameters based on type
G4double emin = eEmin[z];
G4double emax = emaxinel;
G4String dirName = "Inelastic";
G4ParticleDefinition* particle = neutron;

switch(v) {
```

```
case 0:
dirName = "Capture";
break;
case 1:
dirName = "Elastic";
break;
case 2:
// Inelastic - default
break;
default:
continue;
}

// Update dynamic particle for current reaction type
G4String pname = particle->GetParticleName();
delete dynParticle;
dynParticle = new G4DynamicParticle(particle,

 G4ThreeVector(1,0,0), 1.0);
sdata[v]->BuildPhysicsTable(*particle);

std::size_t ncomp = cdata->GetNumberOfComponents(z);
if (0 < verbose) {
G4cout << "HP data for" << title[v] << " " << elmName
<< " Z=" << z << " Ncomp=" << ncomp << G4endl;
}

G4double emint = DBL_MAX;
G4double ab = 0.0;
G4int niso = 0;

// Loop over isotopes for current element
for (G4int n = N1; n < (N1 + Numb); ++n) {
G4double abu = nist->GetIsotopeAbundance(z, n);

// Apply abundance threshold filter
if (abu < abundlim && z > 2) { continue; }
if ((z == 1 && n > 3) || (z == 2 && n < 3)

|| (z == 2 && n > 4)) { continue; }

G4PhysicsVector* pv = cdata->GetComponentDataByID(z, n);

// Special handling for missing or problematic isotopes
```

```
auto part = particle;
if ((z == 85 && n == 210) || (z == 86 && n == 222)

|| (z == 87 && n == 223)) {
pv = cdata->GetComponentDataByID(84, 209);
} else if (z == 61 && n == 145) {
pv = cdata->GetComponentDataByID(61, 147);
} else if (z == 18 && n != 40) {
pv = nullptr;
} else if (2 == v && z == 2 && n == 4) {
// He4 inelastic - use He3 data as base
pv = cdata->GetComponentDataByID(2, 3);
He4Inel[2] = new G4PhysicsVector(*pv);
pv = He4Inel[2];
}

if (nullptr == pv) { continue; }

// Mass scaling factor for kinematics
G4double fac = (part == particle) ? 1.0 :
part->GetPDGMass() / particle->GetPDGMass();

G4int miso = niso;
ab += abu;
isa[niso] = n;
PV[niso] = pv;
abunda[niso] = abu;
afact[niso] = fac;
++niso;

// Recompute He4 cross-sections using theoretical models
if (2 == z && n == 4 && 1 < v) {
abunda[1] = 1.0;
afact[1] = 1.0;
G4int nnn = PV[1]->GetVectorLength();
for (G4int i = 0; i < nnn; ++i) {
G4double ee = PV[1]->Energy(i);
dynParticle->SetKineticEnergy(ee);
G4double vy = 0.0;
if (v == 2) {
vy = dataBGGI->GetElementCrossSection(dynParticle, 2);
} else if (v == 4) {
vy = dataBGGIP->GetElementCrossSection(dynParticle, 2);
} else if (v > 4) {
```

```
vy = theNNData->GetElementCrossSection(dynParticle, 2);
}
vy = std::max(vy, 0.0);
PV[1]->PutValue(i, vy);
}
}

pv = PV[miso];

// Determine minimum energy from non-zero cross-section
G4double e1 = pv->GetMinEnergy() * afact[miso];
G4double e2 = pv->GetMaxEnergy() * afact[miso];
G4int nnn = pv->GetVectorLength();

for (G4int i = 1; i < nnn; ++i) {
if ((*pv)[i] > 0.0) {
G4double ee = pv->Energy(i - 1) * afact[miso];
e1 = ee;
break;
}
}

if (abu >= abundlim || 2 == z) {
emint = std::min(emint, e1);
}

if (0 < verbose) {
std::size_t np = pv->GetVectorLength();
G4cout << "␣Z=" << z << "␣A=" << n << "␣Np=" << nnn
<< "␣Emin(MeV)=" << e1/MeV
<< "␣Emax(MeV)=" << e2/MeV
<< "␣Emint(MeV)=" << emint/MeV
<< "␣Abund=" << abu << G4endl;
}
}  // End of isotope loop

// Adjust min energy based on isotope thresholds
if (1 < v && emint > emin && emint != DBL_MAX) {
emin = emint;
}

// Set linear interpolation ranges for smooth transitions
G4double elin1 = (v > 0) ? 18*MeV : 30*MeV;
G4double elin2 = 24*MeV;
```

```
if (z == 2 && v > 0) { elin1 = 14*MeV; }
else if (z == 1 && (v == 2 || v == 4)) { elin1 = 0.0; }

// Apply energy limits from tables
switch(v) {
case 0:
emax = cap_max_e[z];
emin = cap_min_e[z];
break;
case 1:
emax = el_max_e[z];
emin = el_min_e[z];
break;
case 2:
emax = inel_max_e[z];
emin = inel_min_e[z];
break;
case 3:
continue;
}

// Process element if valid energy range exists
if (!(emin == 0.0 || emax == 0.0)) {
// Calculate number of bins on logarithmic scale
std::size_t ibins = 200 * (G4lrint(std::log10(emax/emin)) + 1);

if (verbose > 0) {
G4cout << title[v] << "␣Z=" << z << ",␣Niso=" << niso
<< "␣nbins=" << ibins << "␣Emin(MeV)=" << emin/MeV
<< "␣Emax(MeV)=" << emax/MeV << G4endl;
}

// Create logarithmic energy vector for element cross-section
G4PhysicsLogVector* vec = new G4PhysicsLogVector(emin, emax, ibins);

// Fill vector with abundance-weighted average cross-sections
G4double vy = 0.0;
G4double dele = elin2 - elin1;

for (std::size_t i = 0; i <= ibins; ++i) {
G4double e = vec->Energy(i);
dynParticle->SetKineticEnergy(e);

vy = 0.0;
```

```
// Sum isotope cross-sections weighted by abundance
for (G4int ij = 0; ij < niso; ++ij) {
vy += abunda[ij] * PV[ij]->Value(e, index);
}
vy = std::max(vy, 0.0);
vec->PutValue(i, vy);
}

//================ Output element cross-section data ================
std::ofstream fout(ff);
switch(v) {
case 0:
fout << dirname << pname << "/Rcap" << z << G4endl;
break;
case 1:
fout << dirname << pname << "/Rel" << z << G4endl;
break;
default:
fout << dirname << pname << "/Rinel" << z << G4endl;
break;
}

std::ifstream f(ff.c_str(), ios::in);
G4String str;
f >> str;
G4cout << "### New File: " << str << G4endl;
std::ofstream fout0(str, std::ios::out);
fout0 << *vec << G4endl;
fout0.close();
G4cout << "Element cross-section done" << G4endl;

//================ Output isotope cross-section data ================
if (v == 1 || v == 3 || (niso <= 1 && z > 2)) { continue; }

for (G4int ij = 0; ij < niso; ++ij) {
auto xs = PV[ij];
G4int a = isa[ij];

if (nullptr != xs) {
// Set energy range for isotope
G4double e1 = std::max(emin, xs->GetMinEnergy() * afact[ij]);
G4double e2 = emax;

switch(v) {
```

```
case 0:
e2 = cap_max_e[z];
e1 = cap_min_e[z];
break;
case 1:
e2 = el_max_e[z];
e1 = el_min_e[z];
break;
case 2:
e2 = inel_max_e[z];
e1 = inel_min_e[z];
break;
case 3:
continue;
}

// Find first non-zero cross-section for min energy
G4int nnn = xs->GetVectorLength();
for (G4int j = 1; j < nnn; ++j) {
if ((*xs)[j] > 0.0) {
        e1 = std::max(e1, xs->Energy(j - 1) * afact[ij]);
        break;
}
}
if (e1 >= e2) { continue; }

// Create logarithmic energy vector for isotope
std::size_t bins = 200 * (G4lrint(std::log10(e2/e1)) + 1);
if (1 < verbose) {
G4cout << "Isotope data for Z=" << z << " A=" << a
<< " Nbin=" << bins << " Emin=" << e1
<< " Emax=" << e2 << G4endl;
}

G4PhysicsLogVector* vecIso = new G4PhysicsLogVector(e1, e2, bins);

// Fill isotope vector
for (std::size_t i = 0; i <= bins; ++i) {
G4double e = vecIso->Energy(i);
vy = xs->Value(e, index);
vecIso->PutValue(i, vy);
}

// Output isotope data to file
```

```
std::ofstream fout1(ff);
switch(v) {
case 0:
fout1 << dirname << pname << "/Rcap" << z << "_" << a << G4endl;
break;
default:
fout1 << dirname << pname << "/Rinel" << z << "_" << a << G4endl;
break;
}

std::ifstream f1(ff.c_str(), ios::in);
G4String str1;
f1 >> str1;
G4cout << "### New File: " << str1 << G4endl;
std::ofstream fout2(str1, std::ios::out);
fout2 << *vecIso << G4endl;
fout2.close();
}
}
} else {
G4cout << "Element Z=" << z << " skipped - no resonance region"
<< G4endl;
}
}
}
}
```

АНТИПЛАГИАТ
ОБНАРУЖЕНИЕ ЗАИМСТВОВАНИЙ

СПРАВКА

о результатах проверки текстового документа
на наличие заимствований

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
"НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ"

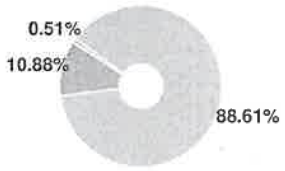
ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ АНТИПЛАГИАТ.ВУЗ

Автор работы: Бернгардт Андрей Евгеньевич
Самоцитирование рассчитано для: Бернгардт Андрей Евгеньевич
Название работы: Моделирование транспорта нейтронов в Geant4 для экспериментов в физике высоких энергий
Тип работы: Выпускная квалификационная работа
Подразделение: физический факультет

РЕЗУЛЬТАТЫ

■ **ВНИМАНИЕ, ДОКУМЕНТ ПОДОЗРИТЕЛЬНЫЙ:** ОБНАРУЖЕНЫ ПОПЫТКИ МАСКИРОВКИ ЗАИМСТВОВАНИЙ. РЕКОМЕНДУЕТСЯ ПРОВЕРИТЬ ПОЛНЫЙ ОТЧЕТ

СОВПАДЕНИЯ	10.88%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	88.61%
ЦИТИРОВАНИЯ	0.51%
САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%
ИИ-КОНТЕНТ	9.95%



ДАТА ПОСЛЕДНЕЙ ПРОВЕРКИ: 03.06.2026

Структура документа: Проверенные разделы: основная часть с.8-21, приложение с.26-40, введение с.3-8, выводы с.22-23

Модули поиска: Профессиональная лексика. Юриспруденция; Профессиональная лексика. Медицина; СПС ГАРАНТ: аналитика; ИПС Адилет; Переводные заимствования по коллекции Гарант: аналитика; Переводные заимствования; IEEE; СМИ России и СНГ; Цитирование; Профессиональная лексика. АПК и биотех; PubMed; Коллекция открытых публикаций международных издательств; Шаблонные фразы; Патенты СССР, РФ, СНГ; Публикации eLIBRARY; Сводная коллекция научных работ Беларуси; Коллекция НБУ; Медицина; Переводные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; Переводные заимствования по базе публикаций открытого доступа PubMed; Кольцо вузов; Публикации РГБ (переводы и перефразирования); Публикации РГБ; Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте; Сводная ко...

Работу проверил: Сюсина Ольга Михайловна

ФИО проверяющего

Дата подписи: 03.06.26

Подпись проверяющего

Зав. кафедрой ФЭЧ С.Л. Лонкова

Чтобы убедиться
в подлинности справки, используйте QR-код,
который содержит ссылку на отчет.

Ответ на вопрос, является ли обнаруженное заимствование корректным, система оставляет на усмотрение проверяющего. Предоставленная информация не подлежит использованию в коммерческих целях.