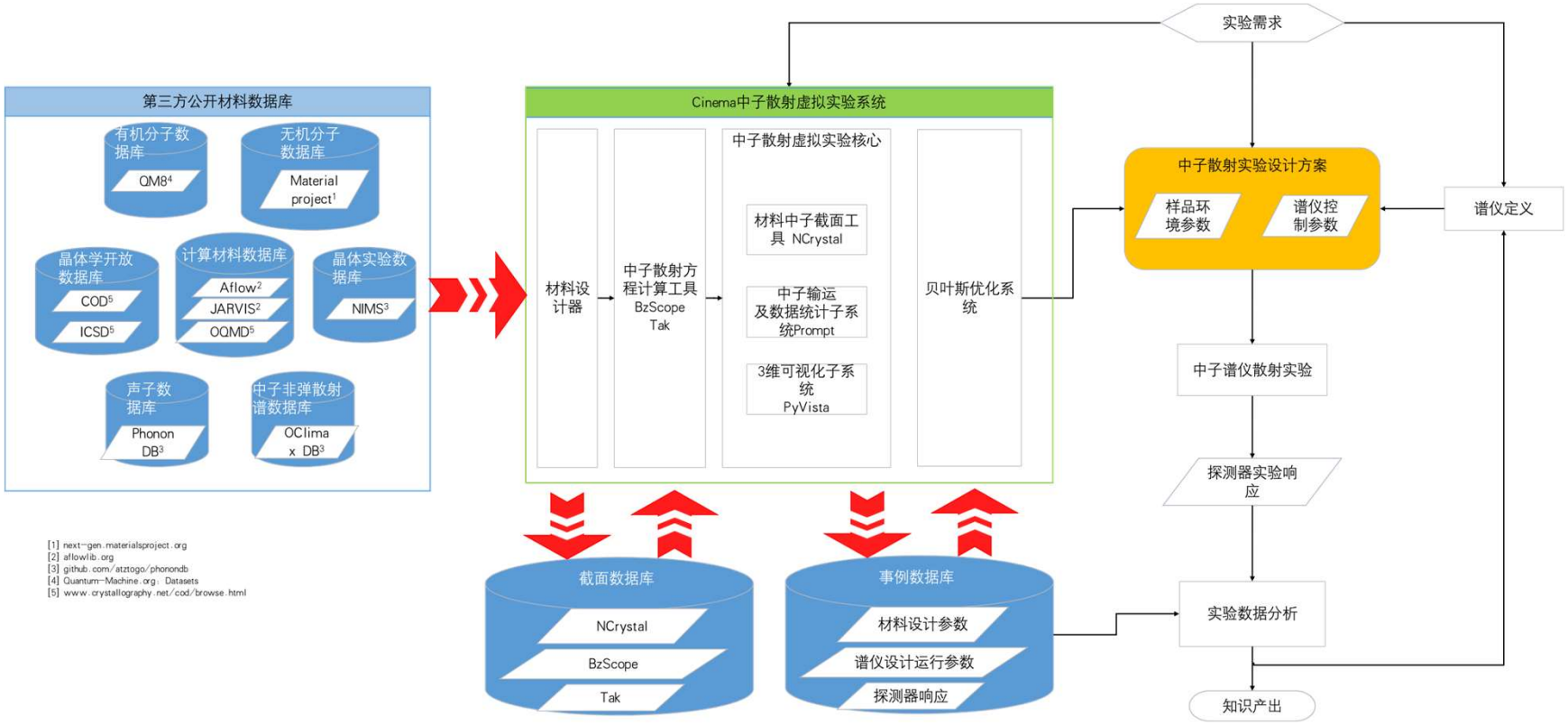
# 中子散射的蒙特卡洛模拟重建与实验数据的展开和重加权

蔡晓晓

# 背景、难点与方法

- 中子散射通过测量粒子的微分截面，研究物质在原子间距尺度的性质
- 问题和对应方法：
  1. **模型**：物理模型+参数计算的微分截面和实验数据普遍存在距离（最大熵、汉明、曼哈顿、切比雪夫等度量标准）
     - 构建细致模型缩小距离
  2. **失真**：实验数据是物理过程和观测工具的卷积（效率，分辨率，噪声过程，背底）
     - 蒙特卡洛方法的实验重建，探测器响应数据库
  3. **修正**：高维实验数据通常使用弹性假设、单次散射假设等降维
     - 高维数据的展开（unfolding）和重加权（reweighting）
  4. **拟合**：数据的单一物理过程的参数拟合/精修（经验门槛高）
     - 基于大数据库的建模
- **修正**是**失真**的浅度逆问题。**拟合**是**模型**的深度逆问题，因为对于通用性的白箱方法，该问题需考虑在不同观察工具下**失真修正**的中间步骤。
- 本报告介绍浅度逆问题的解决方案以及验证，并介绍过程中对深度逆问题数据库的构造方法。

# 浅度逆问题的框架




1. 主要内容是开发模型和软件，主要核心竞争力是数据库的质量。
2. 框架集成高维参数贝叶斯优化系统，该系统的另有应用，由潘梓毅单独介绍。

# 计算物理软件或模型的论文和开源代码

1.中子散射过程的物理引擎

Xiao-Xiao Cai and T. Kittelmann, “NCrystal: A library for thermal neutron transport,” Comput. Phys. Commun.,vol. 246, p. 106851, 2020.

开源网址： https://github.com/nctools/ncrystal

2.中子散射的双模蒙特卡洛系统

Zi-Yi Pan; Ni Yang; Ming Tang; Peixun Shen; Xiao-Xiao Cai ; Prompt: Probability-conserved cross section biasing Monte Carlo particle transport system, Computer Physics Communications, 2024, 295: 109004.

开源网址：https://gitlab.com/cinema-developers/prompt

3. 抽样的数学原理和计算机实现

Xiao-Xiao Cai, T. Kittelmann, E. Klinkby, and J. M. Damián, “Rejection based sampling of inelastic neutron scattering,” J. Comput. Phys., vol. 380, pp. 400 – 407, 2019.

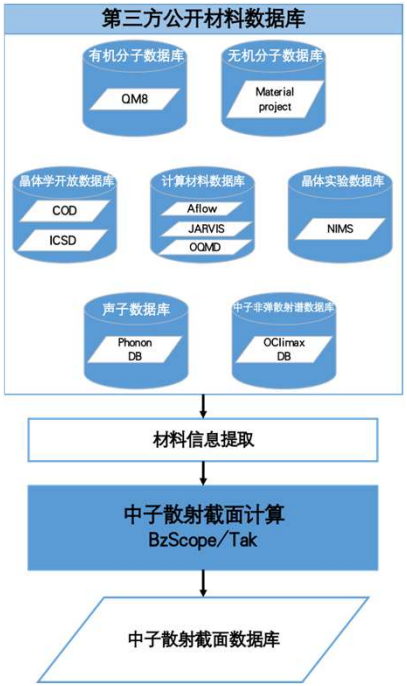
4. 截面计算工具的物理模型

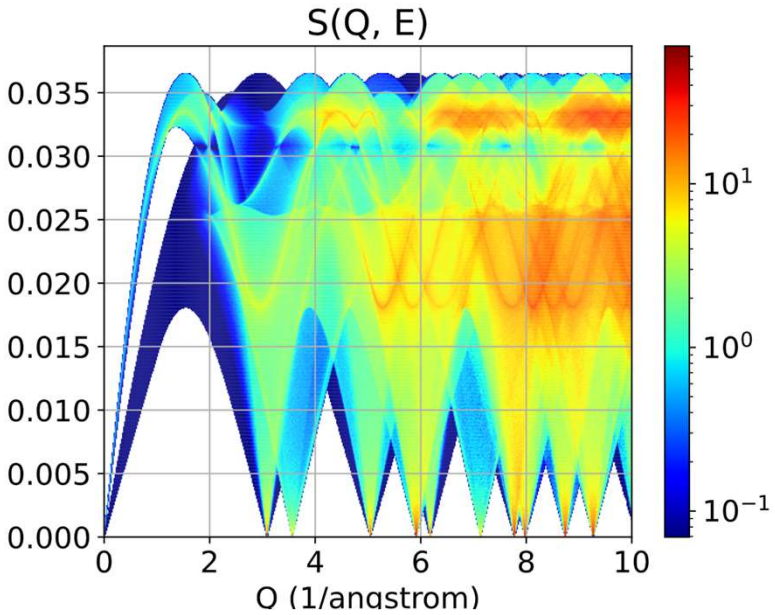
[1]Rong Du; Xiao-Xiao Cai ; Convolutional Discrete Fourier Transform Method for Calculating Thermal Neutron Cross Section in Liquids, Journal of Computational Physics, 2022, 466.

[2]T. Kittelmann, Xiao-Xiao Cai; Elastic neutron scattering models for NCrystal,J. Comput. Phys, Volume 267, 2021, 108082,

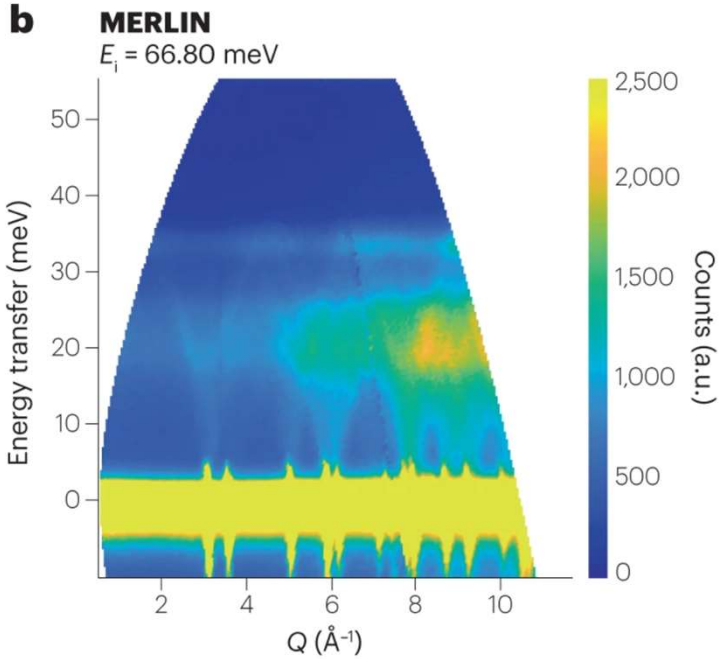
[3] Xiao-Xiao Cai; Esben Klinkby ; Neutron total cross section calculation within the framework of quasi-harmonic approximation, New Journal of Physics, 2017, 19(10): 103027

# 截面数据库



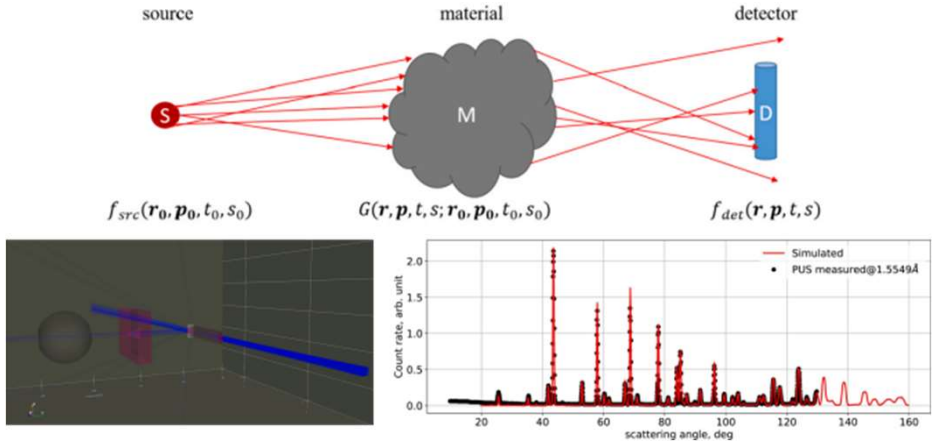

BzScope计算的Ni截面绝对值（对数颜色映射）

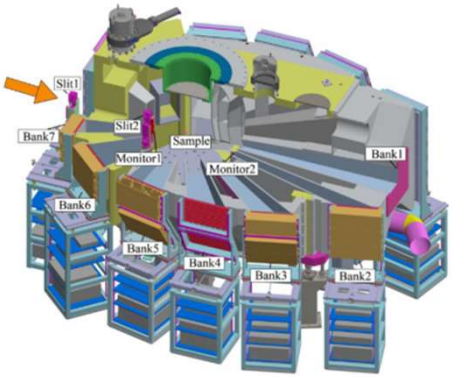


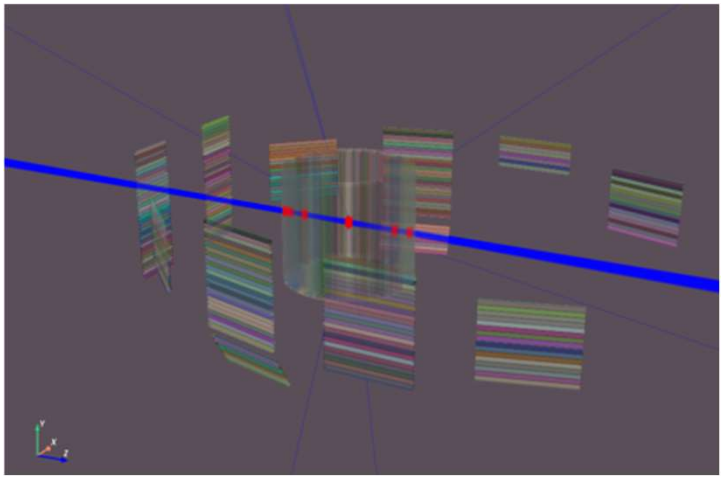

Ni实验截面（线性颜色映射），截自 Acosta, K.A., et. al., Nat Rev Phys 5, 236–249 (2023).

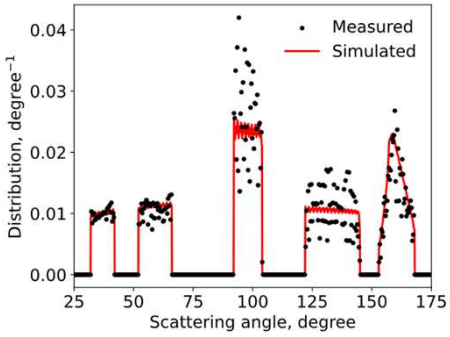
- 材料数据库→双微分截面软件系统→截面数据库
- 生产者BzScope或Tak，消费者Prompt输运系统和截面数据库BzDB。

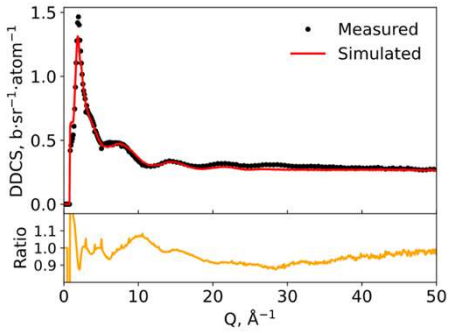
# 探测器响应数据库



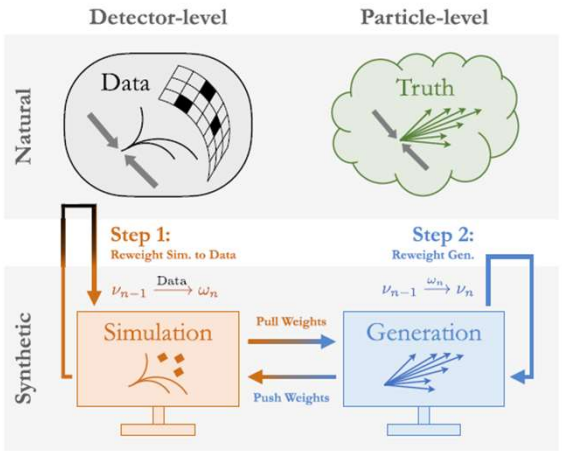





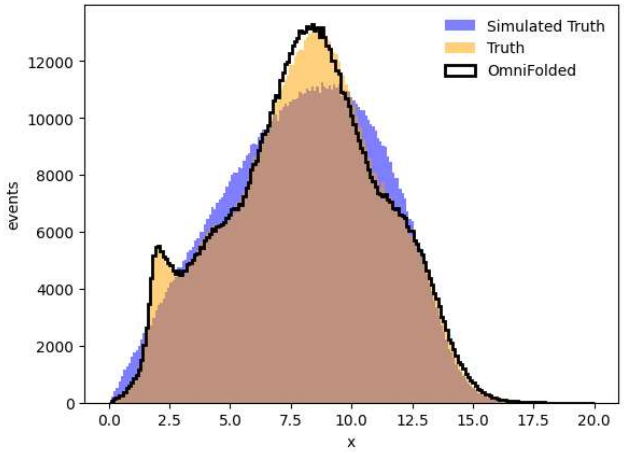




1. 源项模型+谱仪几何+样品物理→Prompt模拟系统→事例数据库
2. 通过核密度估计（KDE）构建源项模型，机器学习方法计算每个核子带宽。
3. Prompt全称（Prompt: Probability-Conserved Cross Section Biasing Monte Carlo Particle Transport System），使用截面偏置算法，计算速度可超越真实实验速度。Prompt可标注每个粒子的物理过程历史，消费者是事例数据库和浅度逆问题系统。

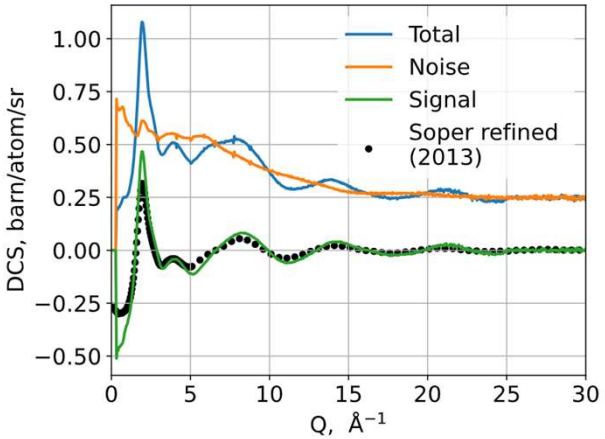
# 浅度逆问题的求解




OmniFold 算法示意图：输入为模拟散射事例，模拟探测器响应和实验探测器响应，输出为真实散射事例。A. Andreassen et. al, Physical Review Letters, 124, 182001 (2020)




OmniFold方法的在重水数据分析的浅度逆问题。模拟使用最简物理模型。




使用最简模型分析的结果，以及与Soper精修结果对比。

- 最后一图显示，浅度逆问题的解非常接近最终拟合的结果，可以用来作为用户拟合模型参数的输入。
- 通过解决浅度逆问题，实验与计算的相似度得到了质的提升。
- 下一步的工作是开展深度逆问题的研究，等效用户使用的传统拟合方法
  - 算力
  - 存储
  - 访问机制和管理平台