

JMCT 程序在线多普勒展宽研究

刘雄国 邓力 胡泽华 李瑞 付元光 李刚 王佳

Study of on-the-fly Doppler broadening in JMCT program

Liu Xiong-Guo Deng Li Hu Ze-Hua Li Rui Fu Yuan-Guang Li Gang Wang Jia

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 092501 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.092501

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.092501>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I9>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

BN 协同掺杂金刚石电子结构和光学性质的第一性原理研究

First-principle studies of the electronic structures and optical properties of diamond crystal co-doped with B and N

物理学报.2016, 65(8): 087101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.087101>

CrMoNi 在 γ -Fe(C) 中的键合性质及对相结构稳定性的影响

The bond characters and phase stability effects of Cr Mo and Ni in bulk γ -Fe(C)

物理学报.2016, 65(3): 037101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.037101>

Y 掺杂 ZnO 最小光学带隙和吸收光谱的第一性原理研究

Optical bandgap and absorption spectra of Y doped ZnO studied by first-principle calculations

物理学报.2016, 65(3): 037103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.037103>

单层硅 $\text{Si}_6\text{H}_4\text{Ph}_2$ 的稳定性和电子结构密度泛函研究

Density functional study on the stability and electronic structure of single layer $\text{Si}_6\text{H}_4\text{Ph}_2$

物理学报.2012, 61(24): 246801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.246801>

Al 掺杂的尖晶石型 LiMn_2O_4 的结构和电子性质

Structural and electronic properties of Al-doped spinel LiMn_2O_4

物理学报.2012, 61(18): 187306 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.187306>

JMCT程序在线多普勒展宽研究*

刘雄国¹⁾²⁾³⁾ 邓力^{2)3)†} 胡泽华²⁾³⁾ 李瑞²⁾³⁾ 付元光²⁾³⁾
李刚²⁾³⁾ 王佳²⁾³⁾

1)(中国工程物理研究院北京研究生部, 北京 100088)

2)(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

3)(中国工程物理研究院高性能数值模拟软件中心, 北京 100088)

(2015年12月22日收到; 2016年1月24日收到修改稿)

在核反应堆堆芯物理分析中, 考虑燃料核素的多普勒效应对反应性的影响是必要的. 基于最小二乘拟合法, 在自主蒙特卡罗粒子输运程序 JMCT 中开发了在线多普勒展宽功能. 在 300—3000 K 的温度范围内, 利用核数据处理程序 (NJOY) 制作了系列温度点下的连续能量核数据. 在统一的能量网格上, 进行最小二乘拟合, 得到拟合参数. JMCT 利用这些拟合参数, 快速计算得到任意温度的核数据, 用于输运计算. 计算结果表明, 拟合得到的核数据与 NJOY 制作的核数据符合很好, 满足精度要求. JMCT 临界模型计算结果表明, 拟合参数计算有效增殖因数 k_{eff} 与直接采用 NJOY 加工得到核数据的计算结果吻合.

关键词: 蒙特卡罗, JMCT 程序, 在线多普勒展宽

PACS: 25.60.-t

DOI: 10.7498/aps.65.092501

1 引言

随着计算机性能的不不断提升, 蒙特卡罗方法在核反应堆中子动力学计算中的运用越来越广泛. 各国都投入大量的人力物力研发通用蒙卡程序和核反应堆用蒙卡程序, 中国工程物理研究院高性能数值模拟软件中心粒子输运团队也开发了通用蒙卡程序 JMCT^[1]. 这些蒙卡输运计算程序的功能都越来越强大, 计算效率越来越高. 因此, 用蒙卡方法计算核反应堆堆芯功率分布和各种堆芯设计参数成为新的研究热点. 同时, 新的发展趋势也对核数据加工方法提出了新的挑战.

在蒙卡输运计算中, 需要固定格式核截面数据, 通常方法是采用核数据处理程序 (NJOY^[2] 等) 预先加工出温度相关的核截面数据库. 对于共振丰富的核如 ^{238}U , 为正确描述其共振结构和多普勒展

宽效果, 300 K 时一个 ACE 格式的数据大小为 32 MB. 随着计算规模越来越大, 蒙卡程序所使用的核截面数据总量也越来越大. 例如, 用蒙卡程序计算压水堆精细功率分布时, 需要大量不同温度点下连续能量核截面数据, 这时核截面数据文件的总存储量会升至数 GB 甚至数十、数百 GB.

面对这一挑战, 国内外学者提出了多种方法来减少核截面数据的存储量. 粗略归纳这些方法可分为以下两种类型. 第一种, 针对一些特定核素, 按一定温度间隔事先制定不同温度点的数据, 产生一个多温核数据库, 输运计算时通过插值方法得到实际温度对应的数据. Trumbull^[3] 提出了在线插值法, 预先产生以 10—20 K 为间隔的温度核参数, 输运计算时在线插值得到 T 温度截面. Conlin 等^[4] 提出了随机混合法, 预先产生以 50—100 K 为间隔的温度核参数, 以高温 T_1 ($T_1 > T$) 和低温 T_2 ($T_2 < T$) 核参数按一定比例混合而得到 T 温度

* 能源局 06 专项 (批准号: 2015ZX06002008)、国家自然科学基金重点项目 (批准号: 91118001)、国防科工局核能发展计划 (批准号: [2012]1523)、中国工程物理研究院科学基金 (批准号: 2014B0202029) 和国家高技术研究发展计划 (2012AA01A303) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: deng_li@iapcm.ac.cn

下的核参数. 第二种, 利用 NJOY 程序进行外耦合计算, 即在输运计算时采用经典多普勒展宽算法实时加工出核参数数据. 外耦合方法普遍较慢, 需要对 NJOY 程序进行优化, 以减少截面加工的计算时间. 国外有学者^[5]采用并行方法对 NJOY 程序进行并行加速; 国内清华大学李松阳博士^[6]采用两点 Gauss-Legendre 求积法发展了所谓的“快速多普勒展宽法”. 然而以上各种方法都存在一定不足, 第一种方法计算量小, 但存储量大; 第二种方法存储量小, 但计算量大.

近年来, Yesilyurt 等^[7]提出了一种基于最小二乘拟合的在线多普勒展宽算法, 并在最新的 MCNP6 版本中得到应用. 该算法的最大优点是能迅速加工出任意温度下等效共振截面, 而且数据存储量小. 本文采用此方法研制了多种核素的多温共振截面数据, 并集成到 JMCT 程序中, 实现了 JMCT 程序对可分辨共振区截面数据的在线温度展宽功能.

2 在线多普勒展宽算法

2.1 在线多普勒展宽理论模型

在 ENDF/B-VII.0 评价库中, 绝对零度下的共振截面大多采用 Multi-level Breit-Wigner 公式和 Reich-Moore 公式表示. 这两个共振公式都是假定靶核在实验系下是静止的, 即不考虑多普勒温度效应. 1976 年, Cullen 和 Weisbin^[8]提出了精确多普勒展宽公式来处理多普勒温度效应. 假设靶核热运动速度服从 Maxwell-Boltzman 分布, 根据反应率守恒原则, 可以推导出精确多普勒展宽公式, 如 (1) 式所示.

$$\sigma(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}y^2} \int \sigma(x)x^2 \times \left\{ e^{-(x-y)^2} - e^{-(x+y)^2} \right\} dx, \quad (1)$$

其中, $\sigma(y)$ 表示靶核热运动温度 T 下等效截面; $y = \sqrt{\alpha E}$, E 为入射中子能量; $\sigma(x)$ 为绝对零度下截面; $x = \sqrt{\alpha E_r}$, E_r 为入射粒子与靶核的相对能量; $\alpha = M/(2kT)$; M 为靶核质量; k 为玻尔兹曼常数.

从 (1) 式可以看出, 在精确多普勒展宽公式中, 绝对零度下截面 $\sigma(x)$ 不再含有各种复杂的物理量, 而是化简为中子入射能量 E 的函数. 基于此,

NJOY 程序数据处理中, 对可分辨共振的处理分为两步, 首先完成绝对零度下的共振重造, 再进行截面的多普勒展宽计算. 为了简化计算步骤, 本算法将 Adler-Adler 共振公式直接代入到 (1) 式中, 可得到含温 Adler-Adler 共振公式. 经过一系列理论推导, 最终得到任意温度下等效截面逼近公式:

$$\sigma_{\text{tot, cap, fis}}(E, T) \cong \sum_{i=1}^k \frac{a_i}{T^{i/2}} + \sum_{i=1}^k b_i T^{i/2} + c, \quad (2)$$

式中的系数 c , a_i 和 b_i 确定后, 可以通过 (2) 式计算出任意温度下的等效截面. (2) 式中 k 的取值大小与等效截面随温度变化幅度有关, 截面变化幅度大, k 值就大, 反之较小.

2.2 在线多普勒展宽程序实现

为了实现在线多普勒展宽算法, 本文开发了一个独立的截面加工模块 JMCT-OTF. 目前, JMCT-OTF 已经能实现所有核素的多普勒展宽拟合系数文件的加工制作; JMCT 程序也进行了相应的数据结构和计算流程的修改, 能根据用户输入的材料温度 T 进行实时在线多普勒展宽. 本文重点介绍拟合系数文件的加工制作. 该拟合系数文件的制作需要分两步: 第一步是统一能量网格点构造, 第二步是拟合系数计算.

1) 统一能量网格点构造

对于特定的核素 (如 ^{238}U 等), 首先需要构造适应于最低温度 $T_{\min}$ 到最高温度 $T_{\max}$ 范围的统一能量网格点. 将 $[T_{\min}, T_{\max}]$ 温度区间划分为以 ΔT 为间隔的温度网格. ΔT 温度间隔一般取值为 25 K, 对于特定核素为了达到更高的拟合精度, ΔT 还可以取得更小, 最低温 $T_{\min}$ 和最高温 $T_{\max}$ 可根据用户需要任意指定. 采用 ENDF/B-VII.0 评价库, 使用 NJOY 程序加工得到的绝对零度下的 ACE 格式数据, 其他温度点的多普勒展宽计算值以绝对零度 ACE 数据为基础采用 NJOY 程序的 Broadr 模块加工得到. 特定核素的共振统一能量网格点以绝对零度下的初始能量网格点为基础, 构造规则如下.

步骤 1 首先根据用户输入, 读取程序初始化参数; 接着读取绝对零度下的 ACE 格式数据; 最后初始化统一能量网格点为绝对零度下的初始能量网格点, 设定第一个能量点为 E_i , 第二个能量点为 E_{i+1} .

步骤2 在全部温度网格点, 分别计算能量点 E_i , $(E_i + E_{i+1})/2$ 和 E_{i+1} 的共振反应道的等效截面 (Broadr 模块).

步骤3 在全部温度网格点上, 将上一步中得到的能量点 E_i 和 E_{i+1} 的等效截面, 通过线性插值得到中间能量点 $(E_i + E_{i+1})/2$ 的线性插值结果.

步骤4 在全部温度网格点上, 将步骤三中能量点 $(E_i + E_{i+1})/2$ 的线性插值结果与步骤二中的真实值比较, 判断是否满足用户给定的收敛准则 ($\leq 0.1\%$). 如果不收敛把该能量点 $(E_i + E_{i+1})/2$ 加入到统一能量网格点中, 更新 E_{i+1} 为 $(E_i + E_{i+1})/2$, 接着跳回到步骤二继续计算; 如果满足收敛准则, 更新能量点 E_i 为 E_{i+1} , 再读取下一个能量点 E_{i+2} 为 E_{i+1} , 接着跳回到步骤二继续计算. 循环计算, 达到该核素的最高可分辨共振能量 $E_{\max}$ 后循环结束, 生成适应于 $[T_{\min}, T_{\max}]$ 温度区间的统一能量网格点.

对于特定核素的所有共振反应道均采用一个统一能量网格点, 最终的能量点数目往往比初始能量格点的数目要多. 数值试验表明, 统一能量网格点数目大约是初始能量点数目 1.1—1.2 倍.

2) 拟合系数计算

在生成统一能量网格点之后, 在每一个统一能量网格点上分别进行各个共振反应道 (一般为总截面, 弹性散射、裂变和辐射俘获等) 的拟合系数计算. 由拟合公式 (3) 得到的最小二乘矩阵为 $Ax = b$.

$$\begin{pmatrix} 1, T_0^{-0.5}, T_0^{0.5}, \dots, T_0^{-k/2}, T_0^{k/2} \\ 1, T_1^{-0.5}, T_1^{0.5}, \dots, T_1^{-k/2}, T_1^{k/2} \\ \vdots \\ 1, T_n^{-0.5}, T_n^{0.5}, \dots, T_n^{-k/2}, T_n^{k/2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} c \\ a_1 \\ \vdots \\ b_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_0 \\ \sigma_1 \\ \vdots \\ \sigma_n \end{pmatrix}, \quad (3)$$

其中, $T_0, \dots, T_n$ 是温度网格点; $c, a_1, \dots, b_k$ 是系数; $\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_n$ 是共振反应道截面. 采用奇异值矩阵分解法 (SVD) 求解最小二乘拟合系数, 在实际计算中, 对于同一个能量点上的不同反应道, (2) 式中 k 的取值可大可小, 具体数值由程序给定的收敛标准来决定, JMCT-OTF 程序设定 k 的最小值为 1, 最大值为 8. 该拟合系数计算的步骤如下.

步骤1 首先根据用户输入, 读取程序初始化参数; 接着读取绝对零度下的 ACE 格式数据, 根据反应道预能确定需要进行在线多普勒展宽共振反应道; 最后读取统一能量网格点, 设定第一个能量点为 E_i .

步骤2 计算能量点 E_i 在温度点 $T_0, \dots, T_n$ 的所有共振反应道等效截面 (Broadr 模块). 依次遍历所有的共振反应道, 并设定 k 的迭代初值为 1, 最大值为 8.

步骤3 根据 k 的取值, 计算得到拟合矩阵 A , 采用 SVD 算法计算 (3) 式中拟合系数解 x . 判断该共振反应道拟合系数 x 是否达到收敛标准, 如果达到收敛标准或者 k 已经达到最大值, 退出循环, 进行下一个共振反应道计算, 直至所有共振反应道遍历完; 如果没有达到收敛标准, 更新 k 为 $k+1$, 继续计算.

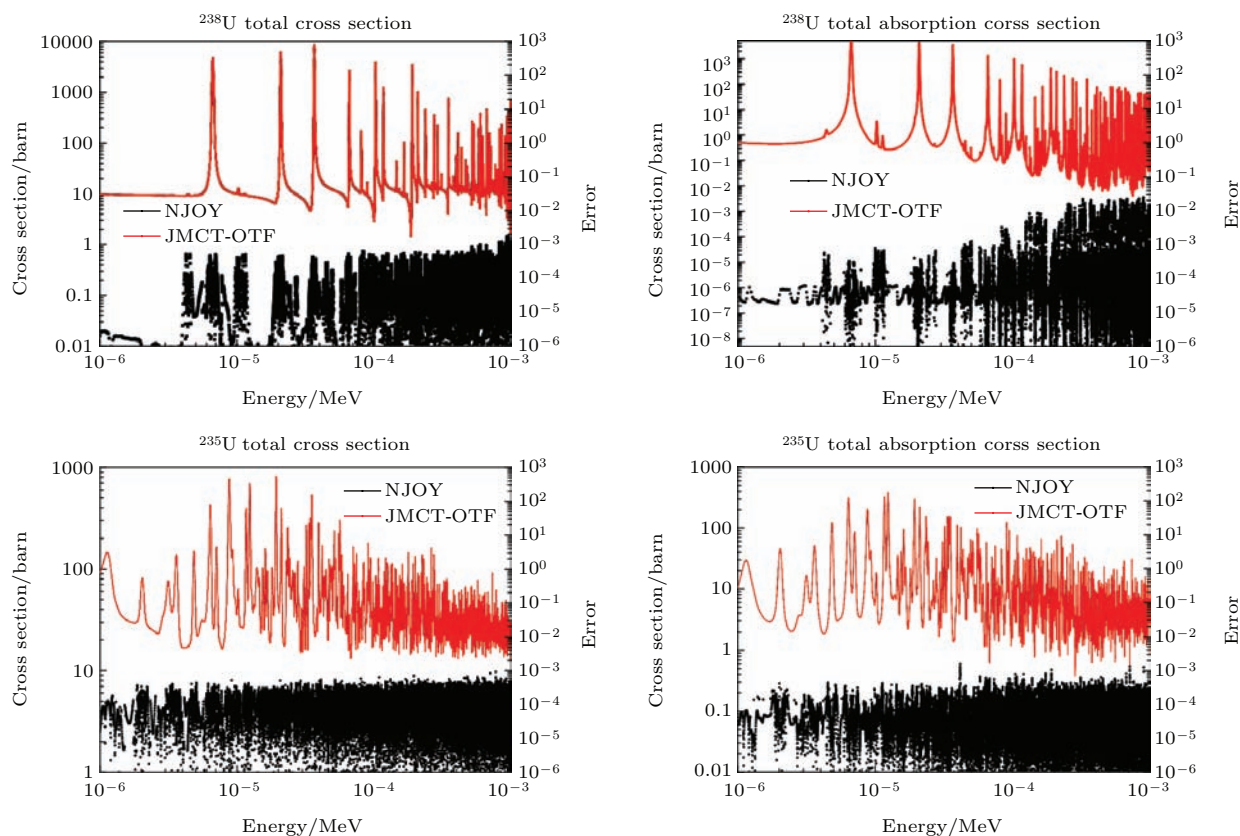
步骤4 能量点 E_i 所有共振反应道遍历完之后, 更新能量点 E_i 为 E_{i+1} , 接着返回到步骤 2 继续计算. 循环计算, 达到该核素的最高可分辨共振能量 $E_{\max}$ 后循环结束. 最后按照一定规则把拟合系数写到多普勒展宽拟合数据文件中.

在 JMCT 程序输运计算时, 只要知道核素热运动温度 T , 就可通过该多普勒展宽拟合数据文件计算得到对应温度的等效截面, 实现 JMCT 程序的在线多普勒展宽功能.

3 程序检验和计算结果

3.1 JMCT-OTF 程序正确性检验

为检验 JMCT-OTF 程序的正确性, 本文采用 NJOY 程序和 JMCT-OTF 程序分别计算了 900 K 下核素 ^{238}U 和 ^{235}U 能量范围从 10^{-6} — 10^{-3} MeV 的总截面和总吸收截面并对计算结果绘图. 如图 1 所示, 绘图方式采用双 y 轴, 左边的 y 轴为截面值, 右边为 NJOY 程序与 JMCT-OTF 程序的绝对误差. 从图中可以看出, ^{238}U 总吸收截面在高能区误差相对较大. 在该区域共振峰较密集, 能级间隔较小, 总吸收截面在很小的能量范围内变化较剧烈, 拟合效果不太理想. 但该区域能量点所占比例较小, 对最终的计算结果影响相对较小, 快中子可以经过几次碰撞后, 中子能量就能低于该能量段. 其他计算结果都比较理想, 几乎每一个能量点上误差都小于 0.001.

图1 (网刊彩色) NJOY 程序与 JMCT-OTF 程序 ^{238}U 和 ^{235}U 截面值比较Fig. 1. (color online) Comparison of ^{238}U and ^{235}U cross section between NJOY and JMCT-OTF.

3.2 模型计算结果

模型计算之前, 使用NJOY程序加工了核素 ^{238}U 和 ^{235}U 在 600 K 和 900 K 下的ACE格式截面; 使用JMCT-OTF程序加工制作了核素 ^{235}U 和 ^{238}U 在线多普勒展宽拟合系数文件. 在下文中, 用符号JMCT+OTF表示JMCT程序采用JMCT-OTF的计算结果; 用符号JMCT+NJOY表示JMCT程序采用NJOY的计算结果.

基准模型1是一个栅元结构模型^[9]. 该模型JLAMT前处理建模如图2所示, 其中燃料为 UO_2 , 慢化剂为 HO_2 , 包壳材料为Zr, 燃料与包壳之间为He. 采用反射边界条件, 分别计算600 K和900 K下不同燃料富集度的栅元 k_{eff} . 模型1计算时, 采用相同的核参数库; 设置模型计算条件为每代100000个粒子, 共模拟500代, 舍弃前100代. 基准模型2是一个PWR组件模型^[10]. 该模型JLAMT前处理建模如图3所示. 该燃料组件由 17×17 栅格组成, 包含高、中和低三种富集度燃料棒; 红色部分为导向管. 采用反射边界条件, 分别计算600 K和900 K下组件的 k_{eff} . 模型2计算时, 采用相同的核参数

库; 设置模型计算条件为每代100000个粒子, 共模拟1100代, 舍弃前100代.

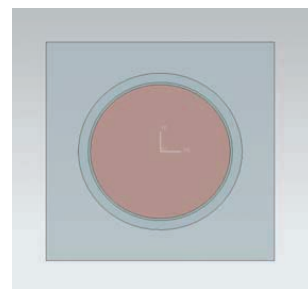


图2 (网刊彩色) 栅元模型示意图

Fig. 2. (color online) The model of pin cell.

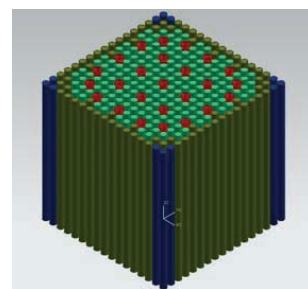


图3 (网刊彩色) 组件模型示意图

Fig. 3. (color online) The model of assembly.

表1 模型1 计算结果比较
Table 1. Comparison of k_{eff} for model one.

富集度/wt%	燃料温度/K	JMCT + NJOY	JMCT + OTF	相对偏差
0.711	600	0.66372(12)	0.66370(11)	0.00002
	900	0.65803(10)	0.65804(10)	-0.00001
1.60	600	0.96134(10)	0.96145(10)	-0.00011
	900	0.95314(11)	0.95324(10)	-0.00010
2.40	600	1.09943(10)	1.09963(10)	-0.00020
	900	1.09034(10)	1.09039(11)	-0.00005
3.10	600	1.17737(10)	1.17788(10)	-0.00051
	900	1.16786(10)	1.16803(11)	-0.00017
3.90	600	1.24016(10)	1.24061(10)	-0.00045
	900	1.23016(10)	1.23022(10)	-0.00006
4.50	600	1.27557(11)	1.27592(10)	-0.00035
	900	1.26547(10)	1.26548(11)	-0.00001
5.00	600	1.29973(10)	1.29939(10)	0.00034
	900	1.28963(10)	1.28945(10)	0.00018

表2 模型2 计算结果比较
Table 2. Comparison of k_{eff} for model two.

燃料温度/K	JMCT + NJOY	JMCT + OTF	相对偏差
600	1.292190(52)	1.292217 (51)	-0.00003
900	1.282010 (51)	1.282185 (51)	-0.00018

模型1 的计算结果列于表1; 模型2 的计算结果列于表2. 从表1 的栅元模型计算结果可以看出, 与JMCT+NJOY 计算结果相比, JMCT+OTF 的 k_{eff} 偏差均在0.0006 以内. 从表2 的组件模型计算结果可以看出, 与JMCT+NJOY 计算结果相比, JMCT+OTF 的 k_{eff} 偏差均在0.0002 以内. 通过以上两个模型的计算结果可以看出, JMCT 程序的在线多普勒展宽功能正确性得到了初步验证, 该方法的拟合精度较好, 能满足蒙卡输运程序的计算精度要求.

4 结 论

本文根据 Yesilyurt 提出的在线多普勒展宽算法在 JMCT 程序上实现了在线多普勒展宽功能. 该功能最大的优点是只需要用 JMCT-OTF 程序加工出一套拟合系数文件后, 就可以计算出任意温

度下的等效截面, 并可供 JMCT 程序多次使用. 该算法极大地减轻了蒙卡输运计算程序内存空间的占用. 本文还对 JMCT 程序的在线多普勒展宽功能进行了初步的检验. 计算结果表明, 该算法能与 NJOY 程序计算结果相符合, k_{eff} 最大偏差不超过 0.0006, 满足程序的设计要求. 今后, JMCT 程序将实时处理热散射数据的温度效应, 为核反应堆全堆芯蒙卡-热工耦合计算奠定了基础.

参考文献

- [1] Li G, Deng L, Li S, Mo Z Y 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 022401 (in Chinese) [李刚, 邓力, 李树, 莫则尧 2011 物理学报 **60** 022401]
- [2] Macfarlane R E, Muir D W, George D C 2000 *NJOY99.0 code system for producing pointwise and multigroup neutron and photon cross sections from ENDF/B data* p77
- [3] Trumbull T H 2006 *Nucl. Technol.* **156** 75
- [4] Conlin J L, Ji W, Lee J C, Martin W R 2005 *Trans. Am. Nucl. Soc.* **92** 225
- [5] Zangian M, Minuchehr A, Zolfaghari A 2013 *Annals of Nuclear Energy* **62** 170
- [6] Li S Y 2012 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Tsinghua University) (in Chinese) [李松阳 2012 博士学位论文 (北京: 清华大学)]
- [7] Yesilyurt G, Martin W R, Brown F B 2012 *Nucl. Sci. Engineer.* **171** 239

- [8] Cullen D E, Weisbin C R 1976 *Nucl. Sci. Engineer.* **60** 199
 [9] Mosteller R D, Eisenhart L D, Little R C, Eich W J,

- Chao J 1991 *Nucl. Sci. Engineer.* **107** 265
 [10] Yamamoto A, Ikehara T, Ito T, Saji E 2002 *J. Nucl. Sci. Technol.* **39** 900

Study of on-the-fly Doppler broadening in JMCT program*

Liu Xiong-Guo¹⁾²⁾³⁾ Deng Li²⁾³⁾† Hu Ze-Hua²⁾³⁾ Li Rui²⁾³⁾ Fu Yuan-Guang²⁾³⁾
 Li Gang²⁾³⁾ Wang Jia²⁾³⁾

1) (Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China)

2) (Institute of Applied Physics and Computed Mathematics (IAPCM), Beijing 100088, China)

3) (CAEP Software Center for High Performance Numerical Simulation, Beijing 100088, China)

(Received 22 December 2015; revised manuscript received 24 January 2016)

Abstract

In this paper, we introduce the on-the-fly (OTF) Doppler method which is used to calculate the temperature-dependent cross section. After substituting Adler-Adler multilevel representation into Doppler formulation, the theoretical formulation of temperature dependent cross section is obtained. This theoretical formulation can be approximated by a Taylor series expansion and asymptotic series expansion, which is the base of OTF method. The OTF method can be used to calculate the cross section of any nuclide at any temperature in a range of 300–3000 K based on cross section library of 300 K. For the OTF method, firstly, a series of temperature dependent cross section libraries is produced by NJOY. Secondly, a uniform energy grid is evaluated by the temperature dependent cross section libraries. Thirdly, a polynomial is used to fit the temperature dependent cross section on each energy grid. The coefficient of the polynomial is obtained by single value decomposition algorithm. Finally, the coefficients of the polynomial in all energy grids and the energy grids themselves are written in a text file. To test the cross section polynomial produced by OTF method, we compare the total and absorption cross sections of ²³⁸U and ²³⁵U calculated by the polynomial with those produced by NJOY. The errors of these cross sections obtained by these two programs are presented in the paper.

The text file produced by OTF method can be read by the Monte Carlo code JMCT, which is a coupled neutron/photon transport code developed by IAPCM. After providing the temperature and energy of the particle, the temperature dependent cross sections in two adjacent energy grids are calculated by the polynomial respectively. The cross section of target energy is obtained by linear interpolation. Two benchmarks including a pin-cell model and an assembly model are used to verify the applications of OTF method in JMCT. The results are presented in the paper.

Keywords: Monte Carlo, JMCT, on-the-fly doppler broadening

PACS: 25.60.-t

DOI: 10.7498/aps.65.092501

* Project supported by the Project of Bureau of Energy, China (Grant No. 2015 ZX06002008), the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 91118001), the Project of the Defense Department Labor Bureau, China (Grant No. [2012]1523), the Science Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2014B0202029), and the National High Technology Research and Development Program of China (Grant No. 2012AA01A303).

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