

Documentation Pratique

pour MCNP

(version 4c2)

I)	GENERALITES	3
A)	Structure et règles du fichier MCNP	3
B)	Procédures d'exécution.....	3
1)	<i>Voir la géométrie</i>	3
2)	<i>Effectuer un calcul</i>	4
3)	<i>Interrompre un calcul</i>	4
4)	<i>Visualiser des résultats en cours de calcul.....</i>	4
5)	<i>Continuer un calcul arrêté.....</i>	4
C)	Bases de données	5
1)	<i>Fichier Xsdir</i>	5
2)	<i>Informations sur les bases de données.....</i>	6
3)	<i>Problèmes courants.....</i>	6
II)	GEOMETRIE	7
A)	Définition des Surfaces	7
B)	Les Cellules	7
III)	RESULTATS	9
A)	Résultats standards	9
1)	<i>Liste des créations et disparitions de particules.....</i>	9
2)	<i>Taux de réaction par cellule et par matériau</i>	10
B)	Tallies	11
1)	<i>Généralités</i>	11
2)	<i>Courant surfacique : F1.....</i>	11
3)	<i>Flux surfacique : F2.....</i>	11
4)	<i>Flux volumique : F4.....</i>	12
5)	<i>Energie déposée : F6</i>	12
6)	<i>« Pulse height tally » : F8.....</i>	12

C)	Options des tallies.....	13
1)	<i>Volume.....</i>	<i>13</i>
2)	<i>Groupement.....</i>	<i>13</i>
3)	<i>Limitation spatiale</i>	<i>13</i>
4)	<i>Multiplicateur.....</i>	<i>14</i>
5)	<i>Découpage en énergie.....</i>	<i>15</i>
6)	<i>Découpage angulaire.....</i>	<i>16</i>
IV)	PARAMETRES DE CALCUL MCNP	18
A)	Carte MODE (Problem Type Card)	18
B)	Carte SDEF (General Source Card)	18
1)	<i>Source ponctuelle isotrope.....</i>	<i>18</i>
2)	<i>Source unidirectionnelle</i>	<i>18</i>
3)	<i>Source directionnelle</i>	<i>19</i>
4)	<i>Source plane ronde</i>	<i>19</i>
5)	<i>Source plane.....</i>	<i>19</i>
6)	<i>Source volumique</i>	<i>20</i>
7)	<i>Distributions utilisées pour les sources</i>	<i>20</i>
C)	Carte PHYS (Energy Physics Cutoff Card)	23
D)	Carte DBCN (Debug Information Card).....	23
E)	Carte PRINT (Output Print Table).....	24
1)	<i>Généralités</i>	<i>24</i>
2)	<i>Source de particules</i>	<i>25</i>
3)	<i>Coordonnées des particules sources.....</i>	<i>25</i>
F)	Erreurs de géométrie et carte VOID	26
1)	<i>Avertissement des erreurs</i>	<i>26</i>
2)	<i>Recherche des erreurs.....</i>	<i>26</i>
V)	TECHNIQUES DE REDUCTION DE VARIANCE	27
1)	<i>Simplification de la géométrie</i>	<i>27</i>
2)	<i>Moyenne sur de grands volumes.....</i>	<i>27</i>
3)	<i>Importances des cellules</i>	<i>27</i>
4)	<i>Cut-off</i>	<i>28</i>

I) GENERALITES

A) Structure et règles du fichier MCNP

Le fichier MCNP se décompose en trois grandes parties, séparées par une ligne vide : les cartes des cellules, les cartes des surfaces et les cartes des données.

La première ligne du fichier est réservé à une ligne de titre, mais toutes les autres lignes de commentaire doivent commencer par le caractère ‘c’.

Aucune ligne du fichier ne doit dépasser 80 caractères. Terminer si besoin une ligne par le caractère ‘&’ et continuer sur la suivante. Le nom du fichier MCNP ne doit pas dépasser 8 caractères.

Le compilateur ne fait pas attention au nombre d'espaces utilisés mais n'apprécie pas les tabulations.

Les deux premières lignes vides sont nécessaires pour séparer les cartes des cellules, des surfaces et des données. **Tout ce qui est placé après une troisième ligne vide (après les cartes des données) n'est pas interprété par MCNP.**

B) Procédures d'exécution

Pour exécuter un fichier MCNP, il est nécessaire d'avoir dans le répertoire le fichier xsdir faisant le lien entre code de matériaux et emplacement des fichiers de sections efficaces.

Pour plus d'informations sur les commandes de lancement, se reporter à la page 1-31 de la documentation MCNP.

1) Voir la géométrie

Commande : **mcnp ip i= [nom]**

Ceci génère trois fichiers (out, comou et srct, tous les trois suivis d'une lettre) à chaque lancement. Sous MCNP4C2, il suffit de cliquer sur les différentes parties de l'écran pour avoir accès aux fonctions :

- zoom : cliquer sur le facteur de zoom en haut à droite, puis sur l'écran pour le centre du zoom
- changement de vue : à gauche se trouvent les différents plans de coupe : XY, YZ et ZX
- redessiner : cliquer sur « Redraw » en bas
- afficher/masquer les n° de surface : cliquer en bas à gauche sur « surf » à côté de « LABEL », puis sur « Redraw »
- information supplémentaire : les n° de cellule, les densités, les températures, les importances, etc... peuvent être affichées à l'écran. Il faut pour cela cliquer dans le bandeau de droite sur l'information désirée, puis en bas à gauche sur « off » à côté de « LABEL », et enfin sur « Redraw »
- afficher l'échelle : cliquer une ou deux fois (suivant l'échelle désirée) sur « SCALE » situé à gauche
- afficher/masquer les couleur : cliquer sur « COLOR » situé à gauche, puis sur « Redraw »

- imprimer l'écran : cliquer sur « Postscript » situé à gauche, puis sur « Redraw »
- quitter : cliquer sur « End » en bas à droite

Signalons que le son gênant ne peut pas être désactivé dans MCNP. Une solution consiste alors à changer ce son sous linux par la commande : xset b 100 150 10 (ici un son de 150 Hz durant 10 ms). Attention, cette commande remplace définitivement la configuration audio précédente.

2) Effectuer un calcul

Commande : **mcnp n= [nom]**

Ceci génère plusieurs fichiers :

- [nom]o : rassemble tous les résultats dans un format lisible, avec beaucoup d'informations supplémentaires
- [nom]m : rassemble tous les résultats des tallies dans un format peu lisible
- [nom]r : fichier (dit runtp) permettant le re-lancement du calcul à partir d'un point donné (par exemple la fin du calcul précédent)

Signalons que ces fichiers doivent être effacés avant le lancement d'un calcul MCNP.

3) Interrompre un calcul

Appuyer sur : **Ctrl + C**

S'affiche alors : “**** interrupt. enter s (status), m (mcplot), q (quit), k (kill)”

Status : affiche le statut actuel du calcul et le reprend

donne par exemple le nombre actuel de particules sources émises

Mcplot : visualisation possible des tallies

Quit : sort proprement du calcul

écrit un fichier r

Kill : tue le calcul

n'écrit pas de fichier r

Plus d'information en page 1-35 de la documentation MCNP.

4) Visualiser des résultats en cours de calcul

La commande Mcplot, accessible lors d'une interruption d'un calcul MCNP, permet de visualiser des tallies sans devoir arrêter le calcul. Les commandes sont détaillées à partir de la page B-15 de la documentation MCNP. On retiendra plus particulièrement :

- afficher un tally : « TALLY n » avec n le numéro du tally
- changer l'échelle linéaire/logarithmique : « LINLIN », « LINLOG »...
- changer les bornes de l'échelle : « YLIMS bmin bmax » avec bmin et bmax les bornes minimum et maximum
- supprimer la normalisation automatique : « NONORM »
- supprimer les barres d'erreur : « NOERRBAR »

5) Continuer un calcul arrêté

Il est nécessaire de disposer :

- d'un fichier r (obtenu soit après la fin d'un calcul MCNP, soit après un arrêt propre (quit))
- d'un fichier explicitant l'action à effectuer : à savoir en général de continuer le calcul

Ce dernier fichier peut permettre de modifier un paramètre du fichier MCNP initial, comme par

exemple le nombre de particules sources. Pour continuer un calcul il faut que le fichier contienne la commande « continue ». Ce fichier doit se terminer par une ligne vide.

Commande : `mcnp c n= [nom_fichier_continuation] ru= [nom_fichier_r]`

Attention, les résultats ne sont pas placé dans les fichiers o/m/r habituels mais dans les fichiers o/m/r du nouveau nom de fichier (avec quelques différence mineures). Comme pour le démarrage standard, ces fichiers de résultats ne doivent pas déjà exister.

Exemple :

nom du fichier MCNP :	test
nom des fichiers résultats :	testo / testm / testr
Après interruption, création de nouveau fichier et exécution : « <code>mcnp c n= cont ru= testr</code> »	
nom du fichier de continuation :	cont
nom des fichiers résultats :	conto / contm / contr

C) Bases de données

1) Fichier Xsdir

Pour être exécuté, MCNP a besoin de bases de données pour les réactions. Le lien entre chaque noyau et l'endroit où se situe sa section efficace est écrit dans le fichier xsdir. Un exemplaire de ce fichier se trouve dans le répertoire d'installation des bases de données de MCNP. Dans ce fichier sont définis tous les chemins pour retrouver les différentes sections efficaces. Ce fichier doit donc être copié dans le répertoire de travail.

Cependant, ce chemin est indiqué **en relatif**, c'est à dire à partir du répertoire d'installation des bases de MCNP. Il faut donc modifier le fichier xsdir pour lui donner le chemin des bases depuis le répertoire de travail. Pour ce faire il y a deux solutions.

a) Chemin absolu

Il est possible de mettre un chemin en absolu, c'est à dire depuis la racine, devant le nom du fichier de section efficace. Comme les lignes du fichier xsdir ne doivent pas dépasser 80 caractères, il arrivera fréquemment de devoir couper une ligne en deux, ce qui peut être fastidieux.

Exemple :

```
64158.55c 156.567000 misc5xs 0 1 160841 113916 0 0 2.5300E-08
deviendrait
64158.55c 156.567000 /usr/local/mcnp/mcnp/xs/misc5xs 0 1 160841 113916 0 0 2.5300E-08
Mais il faudrait couper la ligne en deux partie, soit au final:
64158.55c 156.567000 /usr/local/mcnp/mcnp/xs/misc5xs 0 1 160841 113916 &
0 0 2.5300E-08
```

b) Chemin relatif

Plutôt que de mettre un long chemin absolu, il est préférable de créer un lien symbolique du répertoire de travail vers le répertoire des bases de mcnp par la commande :

“ `ln -s [répertoire_des_bases_MCNP] [nom_lien]` ”

Il suffit ensuite d'insérer « `[nom_lien]/` » devant le nom du fichier de section efficace.

Exemple :

```
64158.55c 156.567000 misc5xs 0 1 160841 113916 0 0 2.5300E-08
deviendrait (après avoir fait un lien vers les bases MCNP nommé xs-mcnp)
64158.55c 156.567000 xs-mcnp/misc5xs 0 1 160841 113916 0 0 2.5300E-08
```

c) Codification

Les lignes du fichiers xsdir peuvent paraître un peu complexe de prime abord. Chaque ligne est codée de la façon suivante (pour plus d'informations, se reporter à la Documentation MCNP page F-3):

ZZAAA.NNx Masse Chemin ... Température

Avec :

- ZZ : le numéro atomique sur un ou deux chiffres
- AAA : le nombre de masse sur trois chiffres ('000' pour composition naturelle)
- NNx : un nombre à deux chiffres et une lettre servant de code
- Masse : la masse du noyau (en uma)
- Chemin : l'accès aux bases de données en partant du répertoire du xsdir
- Température : la température pour laquelle sont calculées ces données (en MeV)

Le « code » permettant d'identifier le fichier de section efficace suit une certaine logique :

- la lettre se réfère au type de données : c (continue), d (discrète), m (multi-groupe), t (traitement thermique S(α, β)), y (dosimétrie), e (électron), p (photon)
- le nombre se réfère à la version de la base (.23c est par exemple l'amélioration de .22c)

2) Informations sur les bases de données

Les données sont réparties dans un petit nombre de fichiers (« endf5p », « endf6dn », « el03 », « endf60 », etc...), appelés en fonction du noyau par le fichier xsdir. Le répertoire contenant ces données comporte également un ou plusieurs fichiers « Readme » qu'il est important de consulter afin de comprendre le rôle de chaque fichier.

Notons que l'ensemble de ces fichiers est parfois regroupé en package sous une même : « DLC189 » pour MCNP4B et « DLC200 » pour MCNP4C.

3) Problèmes courants

Il est très fréquent qu'MCNP s'interrompe dès le démarrage en raison d'une section efficace manquante. Cette *fatal error* indique le code de la section efficace manquante. Cela peut avoir diverses causes :

- la plus fréquente est que le fichier xsdir ne contient pas la ligne du noyau concerné. Cela peut arriver quand on rajoute un matériau supposé classique mais jamais utilisé (par exemple ^{nat}Si au lieu de ²⁸Si)
- il arrive également souvent que le chemin mentionné soit incorrect, généralement à cause du lien symbolique absent
- il se peut enfin que le fichier de section efficace recherché n'existe pas.

La résolution de ces problèmes peut être très rapide (rajouter un lien symbolique) ou très longue (se procurer un fichier de base de données). En ce qui concerne la ligne manquante, il est nécessaire de la rajouter manuellement dans le fichier xsdir. Consulter la documentation MCNP est ici indispensable (page C-14 entre autres).

II) GEOMETRIE

A) Définition des Surfaces

Rappel : Les surfaces sont définies dans la partie II du fichier MCNP, après la définition des cellules.

On utilise la notation suivante :

N type coord

avec : N le numéro de la surface

‘type’ le type de surface

‘coord’ les coordonnées

Les types de surfaces avec leurs coordonnées associées sont les suivantes :

PX a plan orthogonal à l'axe x le coupant en (a;0;0)

CX r cylindre centré sur l'axe x et de rayon r

C/X b c r cylindre parallèle à l'axe x dont l'axe passe par (0;b;c) et de rayon r

SO r sphère centrée en (0;0;0) de rayon r

SX a r sphère centrée en (a;0;0) de rayon r

S a b c r sphère centrée en (a;b;c) de rayon r

Un tableau récapitulatif de toutes les surfaces est disponible en page 3-14 de la documentation MCNP.

B) Les Cellules

Rappel : Les cellules sont définies dans la partie I du fichier MCNP, avant à la définition des surfaces.

a) Généralités

Les cellules sont des boites constituant la géométrie à simuler, généralement de forme simple, homogène en composition et en température. Les observables demandées (cf. Tallies) seront moyennées sur l'ensemble d'une cellule.

Une cellule pleine est définie de la manière suivante :

N m d S₁ S₂ ... S_n imp:x=1 vol=V

avec : N le numéro de la cellule

m le numéro du matériau qui remplit la cellule

d la densité en g/cm³ (signe ‘-‘ devant) ou en 10²⁴ at/cm³ (pas de signe devant)

S_i les surfaces définissant la cellule avec les signes adéquats

imp:x=1 l'importance de la cellule pour la particule x, généralement à 1

vol=V le volume de la cellule

Une cellule vide est définie similairement :

N 0 S₁ S₂ ... S_n imp:n=1 vol=V
 Avec 0 pour le matériau et l'absence de densité

Enfin, la cellule externe est définie par :
 N 0 S₁ S₂ ... S_n imp:n=0

Il est possible de ne pas définir le volume de la cellule (ou de le définir à la fin du fichier MCNP avec la carte VOL). Cependant, en cas d'absence de cette définition du volume, MCNP le calcule lui-même par méthode Monte-Carlo. Si l'on utilise des tallies, les volumes doivent être donnés à MCNP (dans la définition des cellules, en utilisant la carte VOL, ou la carte SD dans les tallies). Pour plus de détails, se reporter à la documentation MCNP (page 3-23).

b) Sens des surfaces

Le sens d'une surface est défini par un signe '+' ou un signe '-' devant le numéro de surface. Le signe '+' désigne le côté de la surface orienté dans le même sens que l'axe de coordonnées correspondant. Appliqué à une surface fermée de type sphère ou cylindre, le signe '+' désigne l'extérieur.

La valeur par défaut dépend du type de surface :

- '+' : plan
- '-' : sphère, cylindre

c) Exclusion de cellules

Il est possible d'exclure une cellule d'un espace par le caractère '#'.

Exemple :

5 2 -1.86000E+00 1 -4 -8 #3 imp:n=0

...
 PX 1 -10
 PX 4 10
 CX 8 5

La cellule 5 représente l'intérieur d'un cylindre à l'exclusion de la cellule 3.

d) Union de cellules

L'union de cellule se fait par le caractère ':'. Il est cependant conseillé de limiter son utilisation au cas strictement nécessaires.

Exemple :

17 0 -1:4:8 imp:n=0

...
 PX 1 -10
 PX 4 10
 CX 8 5

La cellule 17 représente le vide extérieur (densité = 0, importance = 0), et est l'union de la partie située à gauche du plan -1, à droite du plan 4 et à l'extérieur du cylindre 8.

III) RESULTATS

Les résultats d'un calcul MCNP sont regroupés dans les fichiers o (tout sur le calcul effectué) et m (résultats des tallies uniquement). Dans le premier se retrouvent l'ensemble des informations du calcul, avec les tables (voir la partie IV)E pour ajouter des tables), les listes, et les tallies.

En particulier, sont donnés par défaut un certain nombre d'information sur les créations/disparitions de particules, sur les taux de capture/fission regroupés par cellules ou par matériaux... Ces derniers résultats sont normalisés par particule source.

En plus de ces résultats « par défaut », il est possible de demander certains résultats particuliers par le biais des tallies (des observables). Ces tallies doivent figurer dans le fichier MCNP avant l'exécution du calcul.

A) Résultats standards

1) Liste des créations et disparitions de particules

Sont résumées dans un tableau toutes les informations sur les créations et disparition de particules (un tableau par type de particule).

Exemple :

neutron creation	tracks	weight (per source particle)	energy	neutron loss	tracks	weight (per source particle)	energy
source	2820482	1.0000E+00	1.0000E-07	escape	2821896	9.7733E-01	7.6299E-03
				energy cutoff	0	0	0
				time cutoff	0	0	0
weight window	0	0	0	weight window	0	0	0
cell importance	0	0	0	cell importance	0	0	0
weight cutoff	0	5.5471E-04	2.0734E-11	weight cutoff	6570	5.5332E-04	2.1020E-11
energy importance	0	0	0	energy importance	0	0	0
dxtran	0	0	0	dxtran	0	0	0
forced collisions	0	0	0	forced collisions	0	0	0
exp. transform	0	0	0	exp. transform	0	0	0
upscattering	0	0	4.9986E-09	downscattering	0	0	1.2674E-03
photonuclear	0	0	0	capture	0	2.5245E-02	5.1670E-05
(n,xn)	14	4.5134E-06	4.9959E-06	loss to (n,xn)	7	2.2567E-06	1.3808E-05
prompt fission	13367	4.3120E-03	8.9608E-03	loss to fission	5390	1.7388E-03	3.1564E-06
delayed fission	0	0	0				
total	2833863	1.0049E+00	8.9659E-03	total	2833863	1.0049E+00	8.9659E-03
number of neutrons banked				average time of (shakes)		cutoffs	
neutron tracks per source particle				escape	7.3795E+04	tco	1.0000E+34
neutron collisions per source particle				capture	4.4145E+04	eco	0.0000E+00
total neutron collisions				capture or escape	7.3048E+04	wc1	-5.0000E-01
net multiplication				any termination	7.2983E+04	wc2	-2.5000E-01

On y trouve en particulier le nombre de particules source, les créations/disparitions de particules par certaines réactions type (fission, (n,g),...), les particules s'échappant de la géométrie... Ces résultats sont normalisés par particule-source et non-renormalisés. Pour les neutrons, on peut par exemple calculer v par le rapport entre les neutrons créés par fission (colonne de gauche), sur les neutrons disparus par fission (colonne de droite).

2) Taux de réaction par cellule et par matériau

Un grand nombre d'information sont rassemblées dans la liste des « taux de réaction » par cellule et par matériau.

Exemple :

cell index	cell name	nuclides	atom fraction	total collisions	collisions * weight	wgt. lost to capture	wgt.gain by fission	wgt. gain by (n,xn)	photons produced	photon wgt produced	avg photon energy
2	2	7014.60c	1.00E+00	2976	9.2864E-04	8.9239E-05	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
3	3	7014.60c	1.00E+00	5725	1.8140E-03	1.7072E-04	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
4	4	7014.60c	1.00E+00	11446	3.5732E-03	3.4684E-04	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
5	5	7014.60c	1.00E+00	10179	3.1532E-03	3.1110E-04	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
6	6	7014.60c	1.00E+00	11406	3.5588E-03	3.4530E-04	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
7	7	7014.60c	1.00E+00	7075	2.5051E-03	2.1896E-04	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
8	8	7014.60c	1.00E+00	38	1.2310E-05	1.1285E-06	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
9	9	7014.60c	1.00E+00	365098	1.2938E-01	1.1304E-02	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
10	10	14028.03c 8016.60c 1001.60c	2.86E-01 6.43E-01 7.14E-02	245939 1034366 818518	5.2786E-02 2.2174E-01 1.7302E-01	3.3891E-03 1.1829E-05 1.6609E-03	0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00	0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00	0	0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00	0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00
...
33	33	92233.61c	1.00E+00	5663	2.0036E-03	1.7680E-04	2.5733E-03	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
...
total				2858381	7.0644E-01	2.5245E-02	2.5733E-03	2.2567E-06	0	0.0000E+00	0.0000E+00
 total over all cells by nuclide											
				total collisions	collisions * weight	wgt. lost to capture	wgt. gain by fission	wgt. gain by (n,xn)	photons produced	photon wgt produced	avg photon energy
1001.60c				826784	1.7561E-01	1.6816E-03	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
1002.60c				47817	1.4632E-02	1.2366E-06	0.0000E+00	2.2567E-06	0	0.0000E+00	0.0000E+00
6000.60c				130	4.5849E-05	1.6442E-08	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
6012.50c				60831	1.8641E-02	8.6703E-06	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
7014.60c				416806	1.4585E-01	1.2875E-02	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
8016.60c				1040875	2.2370E-01	1.2348E-05	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
12000.60c				1105	3.8425E-04	3.6237E-06	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
13027.60c				176722	6.1445E-02	4.8596E-03	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
14000.60c				20	6.1145E-06	2.6240E-07	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
14028.03c				247722	5.3324E-02	3.4154E-03	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
15031.60c				3	8.4028E-07	2.0272E-08	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
16000.60c				1	3.2632E-07	7.1830E-08	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
17000.60c				883	2.5916E-04	1.3822E-04	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
18000.59c				192	6.7640E-05	2.0452E-05	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
22000.60c				4063	1.2127E-03	5.3217E-04	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
24000.50c				1446	4.3034E-04	1.1792E-04	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
25055.60c				247	7.3649E-05	5.6346E-05	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
26000.55c				10410	3.1106E-03	3.6160E-04	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
28000.50c				3024	9.0061E-04	1.1569E-04	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
29000.50c				13431	4.6774E-03	8.5419E-04	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
42000.60c				206	6.1535E-05	1.3646E-05	0.0000E+00	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00
92233.61c				5663	2.0036E-03	1.7680E-04	2.5733E-03	0.0000E+00	0	0.0000E+00	0.0000E+00

Attention : ces résultats représentent les poids gagnés ou perdus par différentes réactions. La capture mettant en jeu une seule particule, le poids perdu est égal au taux de capture. En revanche, la fission produit plusieurs particules et le poids gagné n'est pas égal au taux de fission : le résultat affiché dans cette liste représente ($v-1$) fois le taux de fission (1 neutron perdu, v neutrons gagnés).

B) Tallies

1) Généralités

Les tallies sont les observables définies dans MCNP. Les informations détaillées sur les tallies sont situées aux pages 2-76 et 3-73 de la documentation MCNP. Ces tallies se présentent de la manière suivante :

Fkn:X S₁ S₂ ... S_n (tally sur une surface)

Fkn:X C₁ C₂ ... C_n (tally sur une cellule)

avec : k un nombre entre 0 et 99 destiné à différencier les tallies de même type

n un chiffre entre 1 et 8 destiné à indiquer le type de tally calculé

X le type de particule

S_i une surface sur laquelle on veut calculer le tally

C_i une cellule sur laquelle on veut calculer le tally

On a :

- n = 1 (F1) : courant surfacique

- n = 2 (F2) : flux surfacique

- n = 4 (F4) : flux volumique

- n = 6 (F6) : énergie déposée

- n = 8 (F8) : « pulse height tally »

On peut rajouter une * devant le F pour changer l'unité du résultat (se reporter à la documentation MCNP)

MCNP renvoie autant de résultat que de surface ou cellule sur lesquelles sont calculés les tallies.
Par exemple :

F11:X S₁ S₂ S₃

MCNP renvoie trois résultats : le courant surfacique sur S₁, sur S₂ et sur S₃

2) Courant surfacique : F1

On obtient le courant de surface par le tally F1, noté :

Fk1:X S₁ S₂ ... S_n

Avec : k un nombre entre 0 et 99 destiné à différencier les tallies de ce type

X le type de particule

S_i les surfaces dont on veut le courant

Ce tally donne comme résultat le nombre de particules ayant traversé la surface dans l'un ou l'autre sens : F1 ≡ p/p-source. On peut après intégrer l'activité de la source pour obtenir des p/s.

Le recours à ce type de tally n'augmente pas significativement le temps de calcul.

3) Flux surfacique : F2

On obtient le flux de particules traversant une surface par le tally F2, noté :

Fk2:X S₁ S₂ ... S_n

Avec : k un nombre entre 0 et 99 destiné à différencier les tallies de ce type

X le type de particule

S_i les surfaces dont on veut le flux

Ce tally donne comme résultat le flux surfacique, c'est à dire le nombre de particules traversant un cm^2 . Ce résultat est normalisé à 1 particule source. On obtient donc : $F2 \equiv p/\text{cm}^2/\text{p-source}$. On peut après intégrer l'activité de la source en p-source/s pour obtenir des $\text{p/cm}^2/\text{s}$.

Attention, rappelons cependant que le flux surfacique ϕ_s est lié au courant surfacique J par la relation : $J = |\mu| \cdot S \cdot \phi_s$, où μ est le cosinus de l'angle et S la surface. Ce tally est par exemple utilisé pour le calcul stochastique de surface.

4) Flux volumique : F4

On obtient le flux de particules par le tally F4, noté :

Fk4:X C₁ C₂ ... C_n

Avec : k un nombre entre 0 et 99 destiné à différencier les tallies de ce type

X le type de particule

C_i les cellules dont on veut le flux

Ce tally donne comme résultat le flux, c'est à dire le nombre de particule X traversant un cm^2 dans une cellule. Ce résultat est normalisé à 1 particule source. Attention, pour donner un résultat correct, ce tally nécessite de connaître le volume de la cellule. On obtient alors : $F4 \equiv p/\text{cm}^2/\text{p-source}$. Si le volume est mis égal à 1 (voir partie III)C)1)), le tally représente alors des longueur de traces dans la cellule complète : $F4 \equiv \text{p.cm/p-source}$.

On peut après intégrer l'activité de la source en p-source/s pour obtenir des $\text{n/cm}^2/\text{s}$ ou des n.cm/s .

5) Energie déposée : F6

Ce tally permet de connaître la quantité d'énergie déposée dans une cellule en fonction de l'énergie de la particule incidente.

Fk6:X C₁ C₂ ... C_n

Avec : k un nombre entre 0 et 99 destiné à différencier les tallies de ce type

X le type de particule

C_i les cellules dont on veut l'énergie déposée

6) « Pulse height tally » : F8

Ce tally permet d'obtenir un spectre d'énergie déposée dans une cellule. Ce tally est différent du tally F6 puisqu'il n'exprime pas l'énergie déposé en fonction de l'énergie incidente, mais un nombre d'occurrence en fonction de l'énergie déposée. Compte tenu de son fonctionnement un peu particulier¹ il ne peut être appliqué qu'aux photons et aux électrons. Il est noté :

Fk8:X C₁ C₂ ... C_n

Avec : k un nombre entre 0 et 99 destiné à différencier les tallies de ce type

X le type de particule (P ou E)

C_i les cellules dont on veut le spectre

Ce tally est en général combiné avec un découpage en énergie (voir partie III)C)5)).

¹ Le transport des neutrons est dit « non analogue ». Quant un neutron est transporté, il peut être multiplié par réaction ($n,2n$), par fission ou par différence de poids des cellules. MCNP ne peut pas déterminer si les neutrons « secondaires » arrivent au même moment dans la cellule, ou s'ils y arrivent à des instants différents. L'énergie déposée ne peut donc pas être déterminée.

C) Options des tallies

1) Volume

On peut définir le volume d'une cellule nécessaire pour un tally par la carte SD :

F14:n C₁
SD14 V₁

Le résultat est alors exprimé par cm³. Signalons que la valeur de V peut être égale à 1, par exemple si l'on ne souhaite pas effectuer une normalisation par le volume. En cas d'absence de cette carte SD, MCNP utilise la valeur du volume calculée (possible uniquement dans les géométries très simples). S'il n'a pu la calculer, MCNP renvoie une erreur.

2) Groupement

On peut définir des groupements par l'ajout de '()' autour des surfaces ou cellules à grouper. Suivant le cas, le résultat donné sera égal à la **somme** (tally de courant surfacique) ou à la **moyenne pondérée** (tallies de flux surfacique ou volumique) des tallies.

De même, l'ajout du caractère 'T' après les surfaces donne le résultat du tally sur le groupement de la totalité des surfaces indiquées (sans redondance).

F11:n S₁ S₂ S₃ (S₁ S₂) T
MCNP renvoie cinq résultats :

- le courant surfacique sur S₁, sur S₂ et sur S₃
- le courant surfacique sur S₁ ∪ S₂, c'est à dire la somme des deux tallies
- le courant surfacique sur S₁ ∪ S₂ ∪ S₃, c'est à dire la somme des trois tallies

F14:n C₁ C₂ C₃ (C₁ C₂) T
MCNP renvoie cinq résultats :

- le flux volumique sur C₁, sur C₂ et sur C₃
- le flux volumique sur C₁ ∪ C₂, c'est à dire la moyenne pondérée des deux tallies
- le flux volumique sur C₁ ∪ C₂ ∪ C₃, c'est à dire la moyenne pondérée des trois tallies

3) Limitation spatiale

Si l'on veut limiter le tally à une portion de surface, on utilise la carte FS (Tally Segment card). On précise alors la ou les surfaces délimitant les surfaces ou cellules des tallies concernés.

F11:n S₁
FS11 S₂

Attention, dans le cas d'un tally normalisé (flux surfacique ou volumique), il est nécessaire d'indiquer l'aire de la surface ou le volume de la cellule découpée, par la carte SD (Segment Divisor Card) :

F14:n C₁
FS14 S₁
SD14 (V₁ V₂)
avec : C₁ la cellule dont on veut le flux

S₁ la surface segmentant la cellule C₁

V₁ et **V₂** les volumes des segments de cellules (C₁ délimitée par S₁ et C₁ délimitée par -S₁)

Les parenthèses dans la carte SD sont optionnelles mais permettent de clarifier l'écriture lorsqu'on a plusieurs cellules segmentées en plusieurs parties. Les volumes doivent alors être regroupés par cellule, par exemple au sein de parenthèses.

MCNP renvoie donc plusieurs résultats lorsqu'on utilise la carte FS :

F11:n S₁

FS11 S₂

MCNP renvoie trois résultats :

- le courant surfacique sur S₁

- le courant surfacique sur S₁ délimité par S₂ (ce qui donne un demi plan, un disque, ou un plan moins un disque, etc...)

- le courant surfacique sur S₁ délimité par -S₂

Lorsque la carte FS définit plusieurs surfaces, le tally est découpé de la façon suivante :

F11:n S₁

FS11 S₂ S₃ S₄

MCNP renvoie cinq résultats :

- le courant surfacique sur S₁

- le courant surfacique sur S₁ délimité par S₂

- le courant surfacique sur S₁ délimité par -S₂ et S₃

- le courant surfacique sur S₁ délimité par -S₂, -S₃ et S₄

- le courant surfacique sur S₁ délimité par -S₂, -S₃ et -S₄

4) Multiplicateur

On peut multiplier le résultat d'un tally par une constante grâce à la carte FM.

FMn C

avec : C une constante multiplicative

Cette carte peut également être utilisée pour multiplier le flux par une section efficace $\sigma(E)$ afin d'obtenir un taux de réaction. Pour cette opération, cette carte se note :

FMn (C m R)

avec : n le numéro du tally

C une constante multiplicative (généralement C = 1)

m le numéro du matériaux

R le numéro de la réaction

La constante C peut par exemple servir à prendre en compte la densité du matériau, exprimée alors en at/(barn.cm). Dans ce cas, le résultat du tally est exprimé en R/cm³/p-source ou en R/p-source si le volume indiqué est égal à 1. On retrouve dans ce dernier cas les résultats indiqués par les résultats standards dans le fichier o (voir partie IIIA)).

Exemple :

F14:n 5

FM14 (1 2 102) (1 3 102)

...

m2 14000.00c 0.3333 8016.00c 0.6667

m3 14000.00c 1.0000

MCNP renvoie donc pour la cellule 5 le taux de capture du SiO₂ mais également le taux de capture du Si pur. Attention toutefois, le taux dans le Si est surévalué d'un facteur 3 puisque calculé avec du Si pur au lieu d'un matériau avec seulement 33% de Si. Ces deux résultats ne tiennent pas compte du nombre d'atomes par cm³.

Il est possible d'écrire à la place :

F14:n 5

FM14 (0.066 2 102) (0.022 3 102)

...

m2 14000.00c 0.3333 8016.00c 0.6667

m3 14000.00c 1.0000

La constante 0.066 exprime le nombre d'atomes de Si ou O par barn.cm, et 0.022 le nombre d'atomes de Si uniquement par barn.cm. Ces taux sont directement exprimés en captures/cm³/n-source ou en captures/n-source suivant le volume mentionné.

Les numéros de réactions sont disponibles à la page G-1 de la documentation MCNP.
Cette opération augmente significativement le temps de calcul.

5) Découpage en énergie

a) Type de découpage

On peut découper le résultat MCNP en énergie grâce à la carte E, noté :

En binning

avec : n le numéro du tally

binning le découpage en énergie : E₀ E₁ E₂ E₃ ... E_n

Ce qui donne :

Exemple :

F14:n 5

E14 0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1

Groupes d'énergie linéaires de 0.1 MeV de large

F14:n 5

E14 1E-09 1E-06 1E-03 1E+00

Groupes d'énergie logarithmique de 3 décades de large

Pour un binning linéaire (mais pas pour le logarithmique), il est également possible de noter :

En Emin (N-1)i Emax

avec : n le numéro du tally

Emin l'énergie minimum

N le nombre de bin (i est un caractère à écrire à coté du nombre)

Emax l'énergie maximum

Exemple :

F14:n 5

E14 0 9i 1

Ce qui correspond à 9+1 bins en énergie entre 0 et 1 MeV.

Il est également possible de mixer ce binning automatique avec un binning manuel.

Exemple :

F14:n 5

E14 0 0.001 0.01 0.1 1 9i 2

Ce qui correspond à plusieurs bin logarithmiques plus 9+1 bins linéaires en énergie entre 1 et 2 MeV.

Pour exprimer ce tally en unité d'énergie (/dE) ou de léthargie (/dlnE), il est nécessaire de diviser le tally par la largeur du binning (avec la carte FM).

Exemple :

FM4:n 4.343 pour un binning logarithmique à 10 bins par décade ($=1/d\ln E=1/0.230=1/\ln(10^{0.1})$)
 FM4:n 43.43 pour un binning logarithmique à 100 bins par décade ($=1/d\ln E=1/0.023=1/\ln(10^{0.01})$)

b) Découpage par défaut

En l'absence de carte E, le résultat est donné pour un seul bin couvrant toute la gamme d'énergie. Il est possible de redéfinir le binning par défaut avec E0.

Exemple :

E0 1E-09 1E-06 1E-03 1E+00

F14:n 5

F24:n 6

F34:n 7

F44:n 8

E44 0 9i 1

Les trois premiers tallies seront découpés selon le binning E0, tandis que le dernier sera découpé selon E44.

c) Résultat

MCNP donne à la fois la valeur « découpée » et la valeur totale du tally.
 Cette opération augmente significativement le temps de calcul.

6) Découpage angulaire

On peut découper un tally de type 1 (et uniquement) de manière à faire apparaître l'angle d'incidence des particules sur une surface. On utilise pour cela la carte C.

F11:n S₁

C11 x₁ x₂ x₃ 1

avec : x_i le cosinus de l'angle d'incidence maximum de chaque bin

Le binning angulaire commence automatiquement par cos = -1 (donc la valeur x₁ doit être supérieure à -1). Le binning doit se terminer par la valeur x_k = 1. Attention, la valeur du cosinus dépend du sens de la normale à la surface, et il est utile de vérifier le sens de cette normale.

Exemple :

F11:n 23

C11 0 1

Cette carte découpe le résultat en deux groupes suivant la provenance des particules (par exemple de la droite de la surface ou de la gauche), ce qui peut être pratique pour déterminer grossièrement la provenance des particules.

IV) PARAMETRES DE CALCUL MCNP

A) Carte MODE (Problem Type Card)

Cette carte permet de définir le type de particules transportées. Elle s'utilise comme suit :

MODE X

avec : X = N (neutrons), P (photons), E (électrons), NP (neutrons et photons), ... , NPE (neutrons, photons, et électrons)

La valeur par défaut est N et n'est donc pas nécessaire pour le transport de neutrons seuls.

B) Carte SDEF (General Source Card)

C'est la source la plus classique. Elle est définie par plusieurs paramètres, tels que :

- POS : position de la source (par défaut en (0;0;0))
- ERG : énergie des particules sources (par défaut 14 MeV)
- VEC : vecteur directeur de la source si non isotrope
- DIR : cosinus directeur de la source si non isotrope
- PAR : le type de particule (N=1, P=2, E=3, défaut dépendant de la carte MODE utilisée)

La partie concernant les sources de particules se trouve à la page 3-49 de la documentation MCNP.

Il est très fortement conseillé lorsque l'on définit des sources un peu complexes (non ponctuelles et isotropes), de les vérifier grâce à la carte DBCN ou PRINTF 110 (table 110). Un « grep » approprié permet alors de tracer des répartition de coordonnées de position ou de vecteur directeur.

1) *Source ponctuelle isotrope*

Exemple :

SDEF

Définit une source isotrope positionnée à l'origine de particules de 14 MeV

SDEF POS= -100 0 0 ERG= 10

Définit une source isotrope positionnée en x = -1m de particules de 10 MeV

Attention, une source ponctuelle ne doit pas être positionnée exactement sur une surface, car cela peut entraîner des problèmes de particules perdues.

2) *Source unidirectionnelle*

Pour donner une même direction aux particules, on utilise VEC et DIR. VEC est le vecteur directeur, et DIR est le cosinus par rapport à ce vecteur directeur. Par exemple :

Exemple :

SDEF VEC= 1 0 0 DIR= 1

Définit une source positionnée à l'origine de particules de 14 MeV. Cette source est dirigée selon l'axe des x et vers l'avant.

SDEF VEC= 1 0 0 DIR= -1

Définit une source positionnée à l'origine de particules de 14 MeV. Cette source est dirigée selon l'axe des x et vers l'arrière.

3) Source directionnelle

Des sources un peu plus complexes peuvent être définies en ne posant une valeur inférieure à 1 pour DIR. Rappelons que DIR représente le cosinus de l'angle entre le vecteur directeur de la particule sources et le vecteur VEC.

Exemple :

SDEF VEC= 1 0 0 DIR= 0.5

Définit une source positionnée à l'origine de particules de 14 MeV. Cette source est dirigée sur la surface d'un cône d'axe confondu avec l'axe des x et de demi-angle au sommet 60° (puisque $\cos(60^\circ) = 0.5$).

4) Source plane ronde

Il faut dire qu'on se place sur une surface avec SUR. RAD donne alors la rayon de la source (centrée grâce à POS). Attention, pour faire des sources étendues, il est indispensable d'utiliser une « distribution » pour le rayon et non une valeur chiffrée (pour plus d'information, se reporter à la partie IV)B)7) ou à la page 3-57 de la documentation MCNP).

Exemple :

SDEF SUR= 1 POS= 10 0 0 RAD= 5

Définit une source positionnée sur la surface 1. Cette source est un cercle centré en x = -10 cm et de rayon 5 cm.

SDEF SUR= 1 POS= 10 0 0 RAD= D1

SI1 5

Définit une source positionnée sur la surface 1. Cette source est un disque centré en x = -10 cm et de rayon 5 cm. Ici D1 représente la distribution n°1, détaillée par la carte SI1 (qui donne le rayon).

Il est indispensable de situer la centre de la source sur une paroi (afin qu'MCNP puisse déterminer l'orientation du disque). Attention à bien vérifier que le point défini par POS se trouve effectivement **sur** la surface définie par SUR. Si ce n'est pas le cas, la distribution se fera parallèlement à la surface SUR et centrée par POS, **mais cela engendre généralement des problèmes de particules perdues**.

Attention, comme précisé dans la documentation MCNP page 3-55, la distribution de DIR (lorsqu'elle n'est pas indiquée) va de 0 à 1 (aucune particule émise vers l'arrière), avec une probabilité $p(\text{DIR})=2*\text{DIR}$ (source piquée vers l'avant).

Si l'on veut une source isotrope, il faut mettre une probabilité pour DIR constante entre -1 et 1, ou entre 0 et 1, à l'aide des distributions (partie IV)B)7)).

5) Source plane

Dans le cas d'une source plane qui n'aurait pas une forme de disque, il est possible de mettre un Cookie-cutter cell (CCC) pour restreindre la source à une cellule :

Exemple :

```
SDEF SUR= 1 POS= 10 0 0 RAD= D1 CCC= 2
SI1    50
```

Définit une source positionnée sur la surface 1. Cette source est l'intersection entre un disque centrée par POS (c.a.d centré en $x = -10$ cm) et la cellule définie par CCC. RAD est une distribution (disque) définie par la carte SI1 50 (disque d'un rayon maximum de 50 cm).

MCNP tire au hasard un point selon la distribution SIn choisie. Si ce point est dans la cellule définie par le CCC, une particule est émise à partir de là. Sinon un nouveau tirage est effectué. Pour des questions de temps de calcul, il est préférable que la distribution ne soit pas trop grande par rapport à la cellule de restriction.

6) Source volumique

La cellule constituant la source est définie par CEL. Il n'y a pas ici besoin de CCC comme pour une source plane. On lui définit plutôt un volume dans lequel seront tirés les particules sources, MCNP transporte alors celles situées dans la cellule. Afin d'éviter que MCNP ne rejette trop de particules sources située en dehors de la cellule demandée, il est nécessaire d'adapter le volume de tirage aléatoire en fonction de la forme de la source.

a) Source plutôt sphérique

On utilise un volume de tirage sphérique, en utilisant les paramètres suivant:

- POS : coordonnées du centre de la sphère
- RAD : rayon de la sphère centrée sur POS

Exemple :

```
SDEF CEL= 1 POS= 10 0 0 RAD= D1
SI1    50
```

Cette source est l'intersection entre une sphère centrée en $x = -10$ cm, de rayon $r = 50$ cm et la cellule 1.

b) Source plutôt cylindrique

Idem avec un volume cylindrique :

- POS : coordonnées du centre du cylindre
- AXS : axe selon lequel est dirigé le cylindre
- RAD : rayon du cylindre
- EXT : demi-longueur du cylindre

Exemple :

```
SDEF CEL= 1 POS= 0 0 0 AXS= 1 0 0 RAD= D1 EXT= D2
SI1    5
SI2    50
```

Cette source est l'intersection entre un cylindre et la cellule 1. Ce cylindre est centré sur l'origine et son rayon est de 5 cm. Il s'étend sur 2x50 cm, 50 cm selon la direction (1;0;0) et 50 cm selon (-1;0;0).

7) Distributions utilisées pour les sources

a) Généralités

Une distribution permet à une variable de prendre plusieurs valeurs au lieu d'une valeur fixe entrée par l'utilisateur. Elles sont définies tout d'abord en inscrivant Dn (avec n le numéro de la

distribution) à la place de la valeur numérique. Chaque distribution utilisée est ensuite décrite par une ou plusieurs cartes : SI (Source Information Card), SP (Source Probability Card) et SB (Source Bias Card). Ces cartes sont décrites à la page 3-57 de la documentation MCNP.

Exemple :

... RAD= D1 ERG= D2

SI1 ...

SI2 ...

La carte SI précise quelle est la forme de la distribution (valeurs discrètes, histogramme, densité de probabilité...). La carte SP précise ensuite les éventuelles probabilités associées à la distribution décrite avec la carte SI.

b) Carte SI

SIn option I₁ ... I_k

avec : n le numéro de la distribution

option permettant de préciser le type de distribution

I_i les valeurs de la distribution

Option	Type de distribution	Signification des paramètres suivants
rien ou H	histogramme	délimitation des bins
L	valeurs discrètes	Valeurs
A	distribution continue	points où est décrite la densité de probabilité
S	nouvelle distribution	numéro de la nouvelle distribution

c) Carte SP

SPn option P₁ ... P_n

avec : n le numéro de la distribution

option permettant de préciser comment sont interprétés les paramètres P_i

P_i les valeurs des probabilités

Option	Option de la carte SI	Signification des paramètres suivants
rien	H ou L	probabilité de chaque bin ou valeur
	A	densité de probabilité aux points définis
D	H ou L	probabilité de chaque bin ou valeur
C	H ou L	probabilité cumulée de chaque bin ou valeur

Signalons que l'on peut également utiliser des fonctions déjà implémentées (voir la liste des fonction page 3-60 de la documentation MCNP). Il faut pour cela écrire la carte SP de la forme :

SPn -f a b

avec : n le numéro de la distribution

f le numéro de la fonction choisie

a et b des paramètres de la fonction choisie

d) Combinaisons particulières

Il existe en plus de ceci une série de combinaisons de carte SI ou SP ayant un sens différent suivant la variable de la distribution. La plus utile est que, pour les variables RAD et EXT, si seule la carte SI est définie, alors la carte SP prend une valeur par défaut. Cette valeur par défaut est SP - 21. Cette fonction (une loi puissance de type $c^*|x|^a$, avec $a=2$ avec la variable RAD et $a=0$ avec la

variable EXT) permet par exemple d'obtenir une distribution homogène sur un disque. Ces combinaisons particulières sont mentionnées à la page 3-61 de la documentation MCNP.

e) Distribution fonction d'une autre variable

Il est possible qu'une distribution dépende d'une autre distribution, par exemple dans le cas de l'énergie de particules sources dépendant de leur angle d'émission.

Tout d'abord, il convient de noter pour la variable dépendante Fxxx Dn (avec xxx le type de variable dont cela dépend, et n un numéro de distribution) à la place de simplement Dn dans le cas standard.

Ensuite, la distribution sera définie de manière légèrement différente : on utilise la carte DS (Dependant Source Distribution Card) au lieu de la carte SI, et on n'utilise pas de car SP ou SB. La carte DS est relativement complexe et son fonctionnement est décrit page 3-62 de la documentation MCNP. On retiendra l'utilisation par défaut :

DSn H J₁ ... J_n

avec : n le numéro de la distribution

J_i les valeurs de la distribution (même nombre de valeurs que la distribution dont cela dépend)

f) Exemples

... RAD= D1

SI1 5

Cette distribution a la forme d'un disque de 5 cm de rayon. Cette distribution est de plus homogène grâce à la combinaison particulière de la variable RAD et de la carte SI qui utilise une fonction en loi puissance de type $c * \text{abs}(x)^2$.

... ERG= D1

SI1 L 1 1.5 2

SP1 D 1 2 1

Cette distribution est constituée de 3 valeurs (1, 1.5 et 2 MeV), dont les probabilités respectives sont 0.25, 0.5 et 0.25 (renormalisation automatique).

... ERG= D1

SI1 H 1 1.5 2

SP1 D 0 1 2

Cette distribution est composé de 2 bins (1-1.5 MeV et 1.5-2 MeV). Toutes les valeurs à l'intérieur de chaque bin sont équiprobables. La probabilité du bin 1.5-2 MeV est 2 fois plus importante que celle du bin 1-1.5 MeV.

Attention à la largueur des bin. En effet, si la probabilité d'un bin est 2 fois plus grande mais qu'il est 2 fois plus large, la probabilité de chacune des valeurs dans le bin sera la même que celle des autres bins.

... ERG= D1

SI1 A 1 1.5 2

SP1 D 1 2 1

Cette distribution est continue de 1 MeV à 2 MeV. La probabilité atteint un maximum à 1.5 MeV où elle est deux fois plus importante qu'à 1 ou 2 MeV.

... ERG= D1

SI1 A 1 1.5 2

SP1 D 1 1 1

Cette distribution est continue de 1 MeV à 2 MeV et de probabilité constante. Cette distribution est la même que la suivante :

SI1 H 1 2

SP1 D 0 1

... RAD= D1 VEC= 1 0 0 DIR= D2 ERG= FDIR D3

SI1 0.3

SI2 A 0.000 0.087 0.174 0.259 0.342 0.423 0.500 0.574 0.643
 0.707 0.766 0.819 0.866 0.906 0.940 0.966 0.9848 0.9877
 0.9903 0.9925 0.9945 0.9962 0.9969 0.9976 0.9981 0.9986
 0.99905 0.99939 0.99966 0.99985 0.99996 1.00000

SP2 5.160 5.430 5.710 5.980 6.200 6.390 6.620 6.990 7.670 8.840 10.60
 13.30 16.80 20.90 25.30 29.60 33.30 33.90 34.40 34.90 35.34 35.70
 35.86 36.00 36.12 36.23 36.32 36.39 36.44 36.479 36.499 36.500

DS3 H 2.821 2.951 3.086 3.225 3.366 3.508 3.650 3.790 3.927 4.057
 4.180 4.294 4.397 4.487 4.563 4.624 4.668 4.675 4.681 4.686
 4.691 4.695 4.6966 4.6981 4.6994 4.7005 4.7014 4.7021 4.70264
 4.70296 4.70299 4.70300

Ces distributions définissent une source localisée sur un disque (RAD= D1) de 3mm de rayon, dirigée de façon anisotrope sur tout le demi-espace avant (DIR= D2, avec distribution SI2 des cosinus uniquement positif), et dont l'énergie est maximum à 0° et minimum à 90° (ERG= FDIR D3, avec distribution DS3 des énergies de 2.8 MeV(cos=0) à 4.7 MeV (cos=1)).

C) Carte PHYS (Energy Physics Cutoff Card)

Cette carte, qui permet de modifier les traitements physiques utilisés, est décrite à la page 3-116 de la documentation MCNP. Cette carte dispose de plusieurs arguments, mais on retiendra surtout :

PHYS:X E

avec : X : le type de particule concerné (N, P ou E)

E : l'énergie maximum (MeV)

Exemple :

PHYS:N 20

PHYS:P 10

Permet de fixer l'énergie maximum des neutrons à 20 MeV et celle des photons à 10 MeV.

D) Carte DBCN (Debug Information Card)

Cette carte dispose d'une large palette d'utilisations. Elle sert généralement à fixer le germe des nombres aléatoires utilisés par MCNP ou écrire un historique des événements. Le détail des fonctions de la carte DBCN se trouve à la page 3-180 de la documentation MCNP.

DBCN X₁ X₂ X₃ X₄ X₅ ...

avec : X₁ : le germe des nombres aléatoires

X₂ : écriture d'un petit rappel tous les X₂ histoires

X₃ et X₄ : écriture des événements pour les histoires comprises entre X₃ et X₄

X₅ : nombre maximum d'événements par histoire (défaut à 600).

Rappelons que le caractère ‘j’ à la place d’une valeur permet de prendre la valeur par défaut et de sauter à la valeur suivante.

Exemple :

DBCN 100000 j 500 520

Permet de fixer les paramètre X_1 , X_3 et X_4 , mais de prendre X_2 par défaut

Le petit rappel de l’histoire consiste en :

- le numéro de l’histoire
- le nombre total de collisions de neutrons, photons et électrons
- le nombre total des nombres aléatoires utilisés
- le nombre aléatoire utilisé pour cette histoire

En revanche l’écriture des événements permet vraiment de visualiser la trajectoire de la particule, les surfaces traversées, les particules créées, etc...

Exemple :

Pour chaque histoire, on a un tableau ressemblant à ceci :

1 event log for particle history no. 500 ijk = 24828025071259										
cell	x	y	z	u	v	w	erg	wgt	nch	nrn
src 7	0.000+00	-1.789+00	8.334-01	1.000+00	0.000+00	0.000+00	1.000-07	1.000+00		15221
s 4	5.200+00	-1.789+00	8.334-01	1.000+00	0.000+00	0.000+00	1.000-07	1.000+00	surf= 16 npa= 0	15222
s 13	5.900+00	-1.789+00	8.334-01	1.000+00	0.000+00	0.000+00	1.000-07	1.000+00	surf= 32 npa= 0	15223
s 25	6.000+00	-1.789+00	8.334-01	1.000+00	0.000+00	0.000+00	1.000-07	1.000+00	surf= 31 npa= 0	15224
s 28	8.000+00	-1.789+00	8.334-01	1.000+00	0.000+00	0.000+00	1.000-07	1.000+00	surf= 43 npa= 0	15225
s 23	8.050+00	-1.789+00	8.334-01	1.000+00	0.000+00	0.000+00	1.000-07	1.000+00	surf= 39 npa= 0	15226
s 31	8.550+00	-1.789+00	8.334-01	1.000+00	0.000+00	0.000+00	1.000-07	1.000+00	surf= 36 npa= 0	15227
s 21	8.750+00	-1.789+00	8.334-01	1.000+00	0.000+00	0.000+00	1.000-07	1.000+00	surf= 35 npa= 0	15228
s 34	1.110+01	-1.789+00	8.334-01	1.000+00	0.000+00	0.000+00	1.000-07	1.000+00	surf= 34 npa= 0	15229
s 9	1.140+01	-1.789+00	8.334-01	1.000+00	0.000+00	0.000+00	1.000-07	1.000+00	surf= 19 npa= 0	15230
s 1	3.250+02	-1.789+00	8.334-01	1.000+00	0.000+00	0.000+00	1.000-07	1.000+00	surf= 2 npa= 0	15231
t 1	3.250+02	-1.789+00	8.334-01	1.000+00	0.000+00	0.000+00	1.000-07	1.000+00	escape	15231

La première colonne indique d'où provient la particule suivie, généralement src (source), s (surface), c (collision) ou t (transmission=fuite). Lorsque l'on a des particules créées, celles-ci sont mises en mémoire et leur histoire est suivie dès que la particule en cours a disparu. Ces histoires commencent donc par bnk (banked) au lieu de src (source).

Attention, en cas d'utilisation par copié/collé de ces valeurs, il convient de noter que les exposants ne comportent pas le symbole ‘E’.

Demander un détail des histoires ralentit considérablement le calcul (d'un facteur 10) pour ces histoires là. Il est donc déconseiller de demander par défaut le détail d'un trop grand nombre d'histoires.

E) Carte PRINT (Output Print Table)

1) Généralités

Cette carte permet d'afficher un certain nombre d'informations dans le fichier et s'utilise comme suit :

PRINT T₁ T₂ ...

avec : T₁ : le numéro de la 1^{ere} table à afficher

T₂ : le numéro de la 2^e table à afficher

La liste des tables est donnée dans la documentation MCNP à la page 3-135. On citera seulement :

- table 10 : récapitulatif des caractéristiques de la source de particule
- table 40 : récapitulatif des matériaux utilisés
- table 50 : récapitulatif des caractéristiques physiques des cellules et surfaces (volume, aire, masse...)
- table 60 : récapitulatif des caractéristiques neutronique des cellules (importance...)
- table 100 : table des sections efficaces utilisées
- table 110 : les coordonnées des 50 premières particules sources
- table 120 : analyse de la qualité des fonctions importances

2) *Source de particules*

La table 10 renseigne sur les caractéristiques de la source et en particulier les distributions utilisées.

Exemple :

values of defaulted or explicitly defined source variables

```

cel    0.0000E+00
sur    7.0000E+00
tme    0.0000E+00
dir    1.0000E+00
pos    0.0000E+00  0.0000E+00  0.0000E+00
x      0.0000E+00
y      0.0000E+00
z      0.0000E+00
ext    0.0000E+00
axs    0.0000E+00  0.0000E+00  0.0000E+00
vec    1.0000E+00  0.0000E+00  0.0000E+00
ccc    0.0000E+00
nrm    1.0000E+00
ara    0.0000E+00
wgt    1.0000E+00
eff    1.0000E-02
par    1.0000E+00

```

probability distribution 2 for source variable rad
power law 21: $f(x)=c*abs(x)^{**k}$

probability distribution 1 for source variable erg
unbiased histogram distribution

source entry	source value	cumulative probability	probability of bin
1	6.00000E-06	0.000000E+00	0.000000E+00
2	7.00000E-06	3.33333E-01	3.333333E-01
3	1.00000E-05	1.000000E+00	6.666667E-01

the mean of source distribution 1 is 7.8333E-06

order of sampling source variables.
sur rad pos vec dir erg tme

3) *Coordonnées des particules sources*

Ce tableau récapitule entre autre la position (x;y;z), le vecteur directeur (u;v;w) et l'énergie d'une particule source. Il situe également dans quelle cellule et sur quelle surface se trouve cette particule source.

Exemple :

nps	x	y	z	cell	surf	u	v	w	energy	weight	time
1	0.000E+00	4.372E-01	-1.328E+00	7	7	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E-07	1.000E+00	0.000E+00
2	0.000E+00	-2.349E-01	4.466E-01	7	7	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E-07	1.000E+00	0.000E+00
3	0.000E+00	-1.210E+00	2.172E-01	7	7	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E-07	1.000E+00	0.000E+00
4	0.000E+00	1.275E+00	-8.359E-01	7	7	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E-07	1.000E+00	0.000E+00
...											
50	0.000E+00	4.001E-01	1.548E+00	7	7	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E-07	1.000E+00	0.000E+00

Ce tableau est très pratique pour vérifier qualitativement si une source est correctement écrite. Dans le cas de sources complexe, une vérification quantitative peut être nécessaire afin de vérifier la forme des distributions (en position, vecteur directeur ou énergie). Pour une telle opération, 50 particules sources ne sont pas suffisantes et il est conseillé d'utilisé la carte DBCN (voir partie IV(C)) et de faire un « grep » sur la 1^{re} ligne de chaque particule (ligne traitant de la source).

F) Erreurs de géométrie et carte VOID

1) Avertissement des erreurs

Les erreurs de géométries se traduisent par :

- une erreur grave empêchant la compilation
- dans le module de géométrie (mcnp ip i=) : des lignes pointillées rouges et un message d'erreur en haut à gauche
- dans le run mcnp (mcnp n=) : des particules perdues (fin du calcul après 10 particules perdues)

2) Recherche des erreurs

Pour des géométries simples, la visualisation des lignes rouges peut permettre de trouver les erreurs et de les corriger. Dans le cas de géométries plus complexes, il faut étudier les particules perdues : surface traversée en dernier, cellules rencontrées avant disparition, etc...

Afin d'accélérer cette étape, il est possible d'utiliser la carte VOID. Celle-ci supprime tous les matériaux et les interactions, et met les importances non nulles à 1. Cela permet d'une part d'accélérer grandement le calcul et d'autre part d'envoyer des particules plus facilement dans toutes les régions y compris celle où se trouve l'erreur. Cette opération conserve le calcul des tallies.

Pour les mêmes raisons, il peut être souhaitable de supprimer l'anisotropie d'une source, afin d'envoyer des particules dans tous les recoins de la géométrie.

V) TECHNIQUES DE REDUCTION DE VARIANCE

Ces techniques sont indispensables lorsqu'un calcul MCNP nécessite trop de temps pour obtenir une statistique suffisante. Il existe plusieurs techniques différentes (page 2-132 de la documentation MCNP), dont entre autres :

- simplifier la géométrie
- jouer sur les importances des cellules (incompatible avec le tally F8)
- jouer sur les cut-off en énergies

1) Simplification de la géométrie

Même si cela paraît évident, il n'est pas utile de simuler des endroits de la géométrie qui n'ont pas d'impact sur les résultats, par exemple s'ils sont loin des tallies. Cela peut permettre de gagner beaucoup de temps, particulièrement si un grand nombre de particules sont transportées dans ces régions.

De manière générale, il est préférable de décrire de la façon la plus simple possible la géométrie, sachant que chaque ajout de surfaces (surtout de surfaces complexes) ralentit le calcul.

2) Moyenne sur de grands volumes

Il est parfois nécessaire de connaître le flux en certains endroits reculés de la géométrie. Et la définition d'une cellule spécifiquement dédiée à cela (par exemple une sphère) est souvent nécessaire.

Il faut alors faire un compromis en jouant sur le volume de la cellule entre la statistique et la perte de résolution spatiale. En effet, plus la cellule sera volumineuse, plus le nombre de particules la traversant sera grand, mais moins la position de cette cellule sera précise. Si ce dernier point n'est pas rédhibitoire, il est très fortement conseillé de choisir des volumes importants.

Exemple :

On veut connaître le flux dans une salle à environ 1.2m au dessus du sol et à 10 mètres de la source de particules. La définition d'une sphère de 5cm de rayon, même si elle est adaptée proche de la source, n'est ici pas du tout recommandée.

On lui préférera une sphère de 20 cm de rayon, voire de 1 m de rayon si la proximité du sol n'est pas gênante. Le gain en statistique est respectivement de 64 et 8000 (!), sans occasionner de perte importante du point de vue de la résolution spatiale.

3) Importances des cellules

Les particules propagées ont un poids, généralement égal à 1. Ce poids intervient dans toutes les formules comme élément de pondération : une particule de poids 0.1 influençant 10 fois moins un tally qu'une particule de poids 1.

L'importance d'une cellule est définie par la carte **IMP :X=imp** avec X la particule (N, P ou E). Cette définition peut se faire sur la même ligne que la déclaration de cellule ou tout à la fin du fichier MCNP.

Exemple :

pendant la déclaration de la cellule

10 2 -3.20 1 -2 4 -6 IMP:N = 1 IMP:P = 0.5
ou en fin de fichier (ici pour un problème à 9 cellules)
IMP:N 1 1 1 0.5 0.5 0.5 2 1 0

A un changement de cellule, on peut avoir trois cas :

a) Importance constante

Dans ce cas, le poids des particules est inchangé.

b) Importance croissante

Au changement de cellule, fait deux choses :

- démultiplication de la particule dans un rapport $I'/I (>1)$
- multiplication du poids de la particule par $I/I' (<1)$
(avec I' et I les importances de la nouvelle cellule et de l'ancienne respectivement)

Exemple :

Si une particule de poids 1 passe d'une importante de 1 à une importance de 3, MCNP va alors propager 3 particules de poids 0.33 dans la nouvelle cellule.

Signalons que les importances ne sont pas nécessairement des nombres entiers. Si I'/I n'est pas entier, MCNP fait un tirage aléatoire pour savoir combien de particules propager

Exemple :

$I'/I=2.25$: 25% de chance de propager 2 particules de poids 1/2, 75% d'en propager 3 de poids 1/3

c) Importance décroissante

Au changement de cellule, MCNP fait deux choses :

- tirage aléatoire pour savoir si la particule est tuée (probabilité de survie : $I'/I (<1)$)
- multiplication du poids de la particule par $I/I' (>1)$

Exemple :

Si une particule de poids 1 passe d'une importante de 1 à une importance de 0.5, MCNP va alors propager cette particule une fois sur 2 avec un poids de 2 dans la nouvelle cellule.

Signalons encore que les importances ne sont pas nécessairement des nombres entiers.

Cette méthode est très utile pour ne pas suivre des particules dans des endroits inintéressant de la géométrie, ou pour en suivre plus dans les endroits utiles. Cette technique est particulièrement efficace :

- pour privilégier le temps de calcul dans les endroits intéressants de la géométrie où peu de particules vont (derrière un mur épais par exemple), ce qui permet une statistique suffisante dans un temps de calcul raisonnable
- pour gagner du temps de calcul (diminution de l'importance dans les coins inutiles de la géométrie)

Attention, ces méthodes ne changent rien sur des résultats intégraux (sans binning) : au lieu d'avoir 1 particule sur 1000 de poids 1 dans le détecteur, on en a 2 sur 1000 de poids 0.5.

4) Cut-off

Cette technique permet de ne plus suivre une particule lorsque certaines conditions sont réunies

(documentation MCNP page 3-123). L'utilisation la plus simple est le cut-off en énergie, qui tue une particule lorsque son énergie diminue en dessous d'un seuil fixé.

Attention, il faut s'assurer que tuer une particule de faible énergie ne représente pas une erreur. Par exemple un neutron de basse énergie peut très bien engendrer une fission et donc des gammas de haute énergie. En revanche, un gamma de basse énergie peut être supprimé plus facilement.

Le cut-off est défini par la carte CUT :

CUT:X T E W₁ W₂

avec : X : le type de particule

T : la valeur du seuil du cut-off en temps (en shakes)

E : la valeur du seuil du cut-off en énergie (en MeV)

W₁ et W₂ : deux valeurs du cut-off en poids

Exemple :

CUT :P j 0.2

signifie un cut-off en énergie avec un seuil à 0.2 MeV

Il est également possible de définir un cut-off en énergie pour chaque cellule de la géométrie, avec la carte ELPT :

CUT:X E₁ E₂ E₃ ... E_n

avec : E_i : la valeur du seuil du cut-off en énergie pour la cellule i

Exemple :

ELPT :P j 0.2 j j j 0.2 0.2 0.2 j j&
j j j j 0.1 0.1 0.1 0.1 j j&
j j j j j j 0.1

signifie un cut-off en énergie avec un seuil à 0.2 MeV pour les cellules n°2-6-7 et 8, et un seuil à 0.1 MeV pour les cellules

La technique du cut-off en énergie permet de gagner un facteur significatif (plus d'un ordre de grandeur) sur le temps de calcul. Il faut cependant veiller à l'exactitude des résultats obtenus.