

## 目 录

第 1 章 蒙特卡罗方法简介 .....	1
§1.1 蒙特卡罗方法的基本原理 .....	1
§1.2 蒙特卡罗方法的解题手续和特点 .....	7
§1.3 用蒙特卡罗方法模拟粒子输运 .....	8
第 2 章 MCNP 程序入门 .....	10
§2.1 MCNP 简介 .....	10
§2.2 MCNP 程序的组成及特点 .....	12
§2.3 MCNP4C 程序安装、运行与源程序编译 .....	14
§2.4 MCNP 输入文件 .....	17
第 3 章 MCNP 程序中的几何构建 .....	24
§3.1 基础知识 .....	24
§3.2 几何描述卡 .....	27
§3.3 有效地构建几何 .....	31
第 4 章 MCNP 程序的数理基础 .....	34
§4.1 物理 .....	34
§4.2 记数 .....	42
§4.3 减小方差技巧 .....	48
第 5 章 MCNP 程序中的数据卡 .....	57
§5.1 问题类型卡 .....	57
§5.2 栅元参数和曲面参数卡 .....	57
§5.3 源的描述 .....	66
§5.4 记数方式的指定 .....	75
§5.5 材料的指定 .....	89
§5.6 能量和热处理方式的指定 .....	91
§5.7 问题截断条件 .....	94
§5.8 外围卡 .....	96
§5.9 MCNP 输入文件综述 .....	99
第 6 章 经验 .....	103
§6.1 一般应用步骤 .....	103
§6.2 需注意的问题 .....	103
第 7 章 应用实例 .....	105
§7.1 医学物理中的应用 .....	105
§7.2 反应堆物理计算中的应用 .....	130
附 录 .....	158
连续能量中子截面库 ENDL851 数据目录 .....	158
中子热截面库 BMCC1 数据目录 .....	159
离散中子截面库 D91 数据目录 .....	160
光子截面库 MCPLIB1 数据目录 .....	161
特殊材料 S( $\alpha$ , $\beta$ )热截面库 TMCC1 数据目录 .....	163
参考文献 .....	165

# 第 1 章 蒙特卡罗方法简介

蒙特卡罗方法, 又称随机抽样方法, 是一种与一般数值计算方法有本质区别的计算方法, 属于试验数学的一个分支, 起源于早期的用几率近似概率的数学思想, 它利用随机数进行统计试验, 以求得的统计特征值(如均值、概率等) 作为待解问题的数值解。 随着现代计算机技术的飞速发展, 蒙特卡罗方法已经在原子弹工程的科学研究中发挥了极其重要的作用, 并正在日益广泛地应用于物理工程的各个方面, 如气体放电中的粒子输运过程等。

## §1.1 蒙特卡罗方法的基本原理

就数学特性而言, 蒙特卡罗方法的发展可以追溯到18 世纪著名的蒲丰问题。 1777年, 法国科学家蒲丰(Buffon) 提出用投针试验计算圆周率  $\pi$  值的问题。 这里我们用蒲丰问题来初步说明蒙特卡罗方法的基本原理和解决问题的基本手续。

蒲丰问题是这样一个古典概率问题: 在平面上有彼此相距为 $2a$ 的平行线, 向此平面任意投一长度为 $2l$ 的针, 假定 $l < a$ , 显然, 所投的针至多可与一条直线相交, 那么, 此针与任意条平行线相交的概率可以求出, 由下面的分析可知, 此概率与所取针长 $2l$ 、平行线间距 $2a$ 有关, 并且包含有  $\pi$  值。 在这里, 任投一针的概率含义有以下三点: (1) 针的中点 $M_1$ 在平行线之间等概率落入, 即 $M_1$  距平行线的距离 $x$  均匀分布在区间 $[0, a]$ 之内; (2) 针与线的夹角  $\theta$  均匀分布在区间 $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ 之内; (3)  $x$  与  $\theta$  互相独立。

如图1.1 所示, 建立与平行线垂直且原点在某一条平行线上的 $x$  轴, 不失一般性, 假定针的中心处于图示中的 $x$ 轴上。由于对称性, 我们只需分析针中心处在  $x \in (0, a)$  范围的情况即可。令探针中心的坐标值为 $x$ , 显然, 只有 $x \leq l$ 时才可能发生相交的事件。我们来分析在条件 $x \leq l$ 满足时, 针与线相交的概率:

只有当  $\theta \leq \theta_0 = \arccos \frac{x}{l}$  时才能相交, 且相交的概率为

$$P_1 = \frac{2}{\pi} \arccos \frac{x}{l} \quad (1.1)$$

下面再来分析针中心位置在轴上的分布, 显然, 这是一个均匀分布, 即针中心处于区间  $(x, x+dx)$  内的概率为

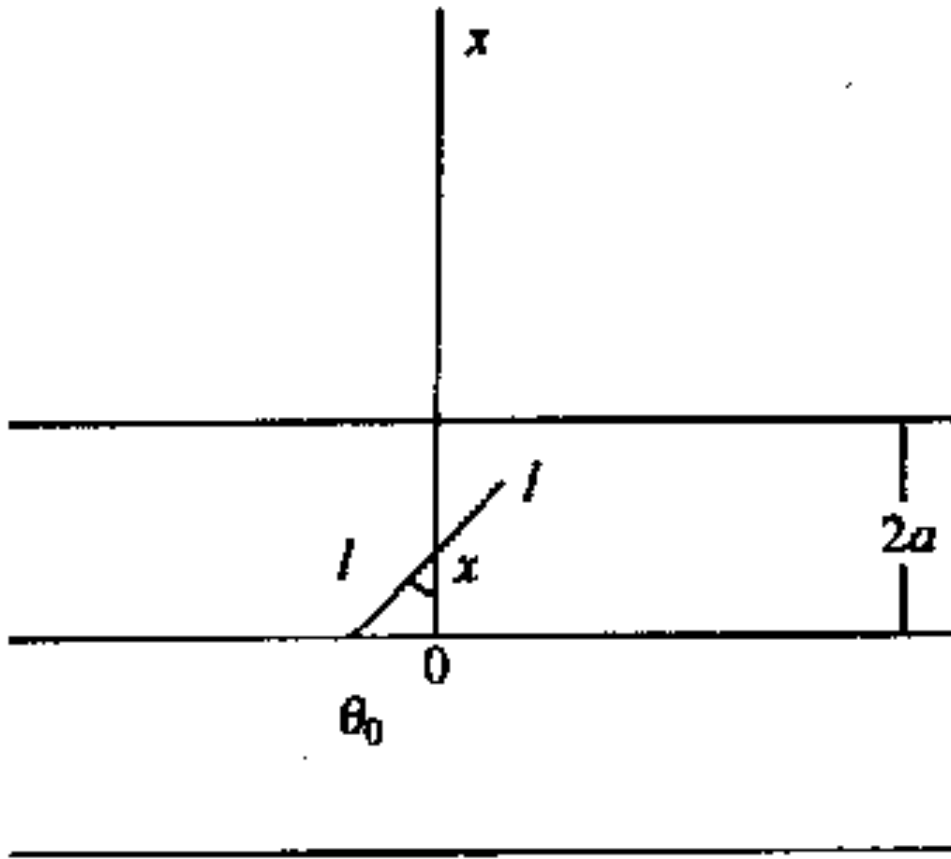


图 1.1 蒲丰问题的概率分析

$$dP_2 = \frac{dx}{a} \quad (1.2)$$

这样，一次投掷，针中心落入  $(x, x+dx)$  且与线相交的概率为

$$dP = P_1 P_2 = \frac{2}{\pi a} \arccos \frac{x}{l} dx \quad (1.3)$$

则一次投掷，针与线相交的总概率为

$$P = \int dP = \int_0^l \frac{2}{\pi a} \arccos \frac{x}{l} dx = \frac{2l}{\pi a} \quad (1.4)$$

即：

$$\pi = \frac{2l}{Pa} \quad (1.5)$$

从 (5) 式可见，可利用投针试验计算  $\pi$  值：设投针  $N$  次，其中  $n$  次针与线相交，则可用频率值  $n/N$  作为概率  $P$  的估计值，从而求得  $\pi$  的估计值为

$$\pi \approx \frac{2l}{a} \frac{N}{n} \quad (1.6)$$

这就是早期的用频率值作为概率近似值的方法的应用实例，表1是在历史上一些有名的用投针试验计算  $\pi$  值的结果，其中针长以  $a$  为单位。

表1.1 投针试验计算  $\pi$  值的结果

实验者	时间(年份)	针长	投针次数	相交次数	$\pi$ 的估值
Wolf	1850	0.8	5,000	2,532	3.1596
Smith	1855	0.6	3,204	1,218.5	3.1554
De	1860	1.0	600	382.5	3.137
Fox	1884	0.75	1,030	489	3.1595
Lezzerini	1901	0.83	3,408	1,808	3.1415929
Reina	1925	0.5419	2,520	859	3.1795

需要指出的是,上述由投针试验求得  $\pi$  的近似值的方法,是进行真正的试验,并统计试验结果,要使获得的频率值与概率值偏差小,就要进行大量的试验,这在实际中,往往难以做到。可以设想,对蒲丰问题这样一个简单的概率问题,若要进行10万次投针试验,以每次投针、作出是否相交判断并累加相交次数用时5秒钟计算,则需用时50万秒,即大约139个小时。那么,可以设想,对于象上述确定条件下的核裂变、直流气体放电中粒子的输运过程及粒子输运的总效应,若要用多次掷骰子的方法近似求出就是不可能的了。所以,在现代计算机技术出现之前,用频率近似概率的方法——抑或称为雏形时代的蒙特卡罗方法——并没有得到实质上的应用。

若用数值模拟方法代替上述的真正的投针试验,是利用均匀分布于(0,1)之间的随机数序列,并构造出随机投针的数学模型,然后进行大量的随机统计并求得  $\pi$  的近似值。

如图1.2建立坐标系,平面上一根针的位置可以用针中心 $M_1$ 的坐标 $x$ 和针与平行线的夹角 $\theta$ 来决定,在 $y$ 方向上的位置不影响相交性质。

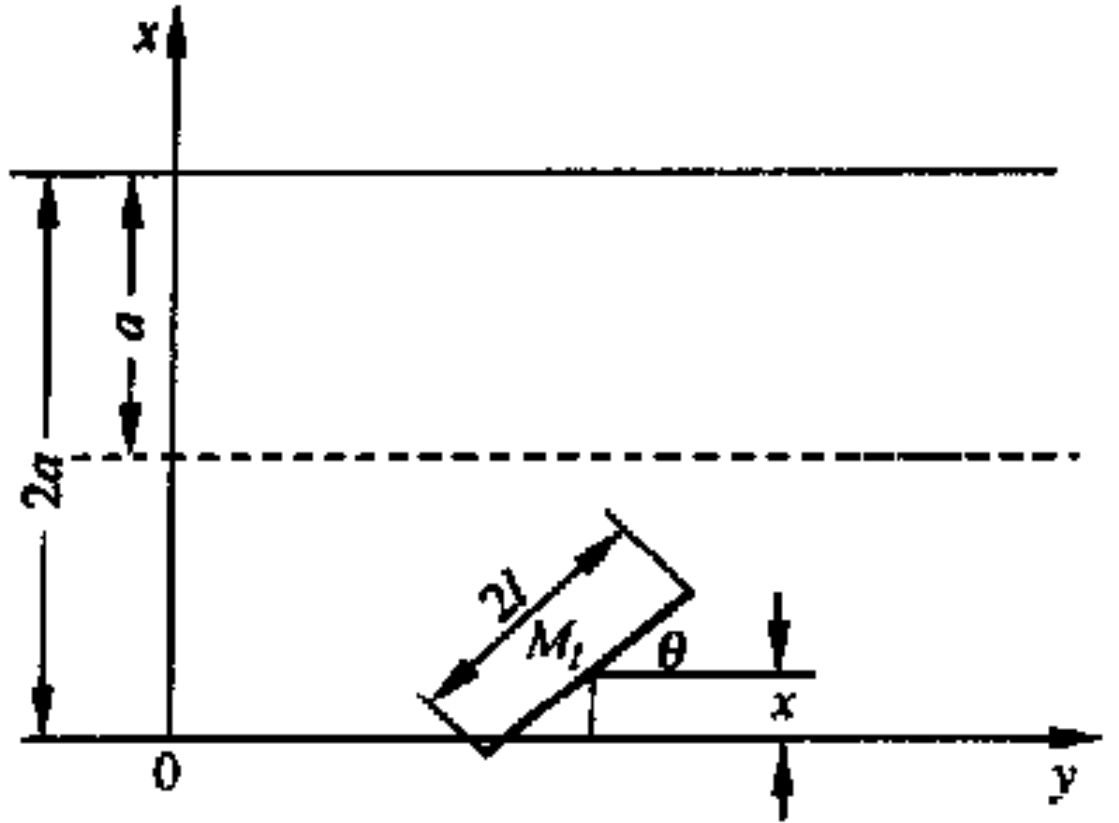


图 1.2 用数值模拟方法计算蒲丰问题

任意投针，意味着 $x$ 与 $\theta$ 都是任意取的。但 $\theta$ 的范围可限于 $[0, \pi]$ ， $x$ 的范围可限于 $[0, a]$ 。在这种情况下，针与平行线相交的数学条件是

$$x \leq l \sin \theta, 0 \leq x \leq a \quad (1.7)$$

其次，怎样模拟投针呢？亦即如何产生任意的 $[x, \theta]$ 。 $x$ 在 $[0, a]$ 任意取值，意味着 $x$ 在 $[0, a]$ 上取哪一点的概率都一样，即 $x$ 的概率密度函数为

$$f_1(x) = \begin{cases} \frac{1}{a}, & \text{当 } 0 \leq x \leq a \text{ 时} \\ 0, & \text{当 } x \text{ 为其他值时} \end{cases} \quad (1.8)$$

类似的， $\theta$ 的概率密度函数为

$$f_2(\theta) = \begin{cases} \frac{1}{\pi}, & \text{当 } 0 \leq \theta \leq \pi \text{ 时} \\ 0, & \text{当 } \theta \text{ 为其他值时} \end{cases} \quad (1.9)$$

由此，产生任意 $(x, \theta)$ 的过程就变为由 $f_1(x)$ 抽样 $x$ ，由 $f_2(\theta)$ 抽样 $\theta$ 的过程。容易得到

$$\begin{aligned} x &= a\xi_1 \\ \theta &= \pi\xi_2 \end{aligned} \quad (1.10)$$

式中,  $\xi_1, \xi_2$  均为  $(0, 1)$  上均匀分布的随机数。只要随机数的均匀性和独立性良好, 如此构造的数值模型就很好地模拟了实际试验中的一次投针, 并用下式判断是否相交且记录统计结果:

$$s(x_i, \theta_i) = \begin{cases} 1, & \text{当 } x_i \leq l \sin \theta_i \text{ 时} \\ 0, & \text{当 } x_i \text{ 为其他值时} \end{cases}$$

如果投针  $N$  次, 那么

$$s_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s(x_i, \theta_i) \quad (1.11)$$

是相交几率  $P$  的估计值。这样就实现了用数值方法模拟真正的投针试验。用此方法计算的  $\pi$  的近似值的情况如表 1.2 所示。

表 1.2 用蒙特卡罗方法计算的  $\pi$  的近似值

投针次数	10, 000	20, 000	100, 000	200, 000
$\pi$ 的近似值	3. 162233	3. 137993	3. 141179	3. 141354

表 2 中的计算结果表明, 随着模拟投针次数的增大, 所计算的  $\pi$  的近似值越来越接近于其真值, 而要进行这样的数值模拟, 就需要很大的计算量, 只有利用计算机才能实现。

从蒲丰问题可以看出, 用蒙特卡罗方法求解问题时, 应建立一个概率模型, 使待解问题与此概率模型相联系, 然后通过随机试验求得某些统计特征值作为待解问题的近似解。与此相似, 在一些物理问题, 如核裂变、直流气体放电等过程中, 粒子的输运过程及粒子输运的总效应, 也是可以与某些概率过程联系起来, 例如, 电子与原子、分子、离子的碰撞过程, 实际上就是与碰撞截面有关的概率过程, 这样, 从数学物理特征来说, 类似于用随机投针方法计算  $\pi$  的近似值, 确定条件下的核裂变、直流气体放电中粒子的输运过程及粒子输运的总效应可以用多次掷骰子的方法近似求出。

随着现代计算机技术的出现和飞速发展, 用计算机模拟概率过程, 实现多次模拟试验并统计计算结果, 进而可获得所求问题的近似结果。计算机的大存储量、高运算速度使得在短时间内, 获得精度极高且内容丰富的模拟结果。在历史上, 也正是原子弹工程研究初期阶段的工作, 为模拟裂变物质的中子随机扩散, 提出了运用大存储量、高运算速度计算机的要求, 这也成为当时推动计算机技术发展的重要动力, 也就是在第二次世界大战期间, 冯·诺依曼和乌拉姆两人把他们所从事的与研制原子弹有关的秘密工作——对裂变物质的中子随机扩散进行直接模拟——以摩纳哥国的世界闻名赌城蒙特卡罗 (Monte Carlo) 作为秘密代号来称呼。用

赌城名比喻随机模拟，风趣又贴切，很快得到广泛接受，此后，人们便把这种计算机随机模拟方法称为蒙特卡罗方法。需要指出的是，正是由于广泛领域的物理问题中存在着大量的随机过程，如粒子间的碰撞等，使得蒙特卡罗方法在计算机物理和物理工程中得到日益广泛的应用，并成为沟通理论与实验研究的一个桥梁。

需要指出的是，蒙特卡罗方法不仅在处理具有概率性质的问题方面获得广泛的应用，对于具有确定性问题的计算也因其程序简单等优点获得了广泛的应用。这里以定积分的计算简要说明其处理确定性问题的手续。

对于定积分

$$s = \int_a^b f(x) dx$$

通过变量替换，可以转换为下面的形式

$$s = k \int_0^1 g(x) dx \quad (1.12)$$

其中  $g(x) \in (0, 1)$ ，当  $x \in (0, 1)$  时即转换为求积分  $\int_0^1 g(x) dx$ ，亦即求边长为1的正方形中一个曲边梯形的面积的问题，如图1.3所示。

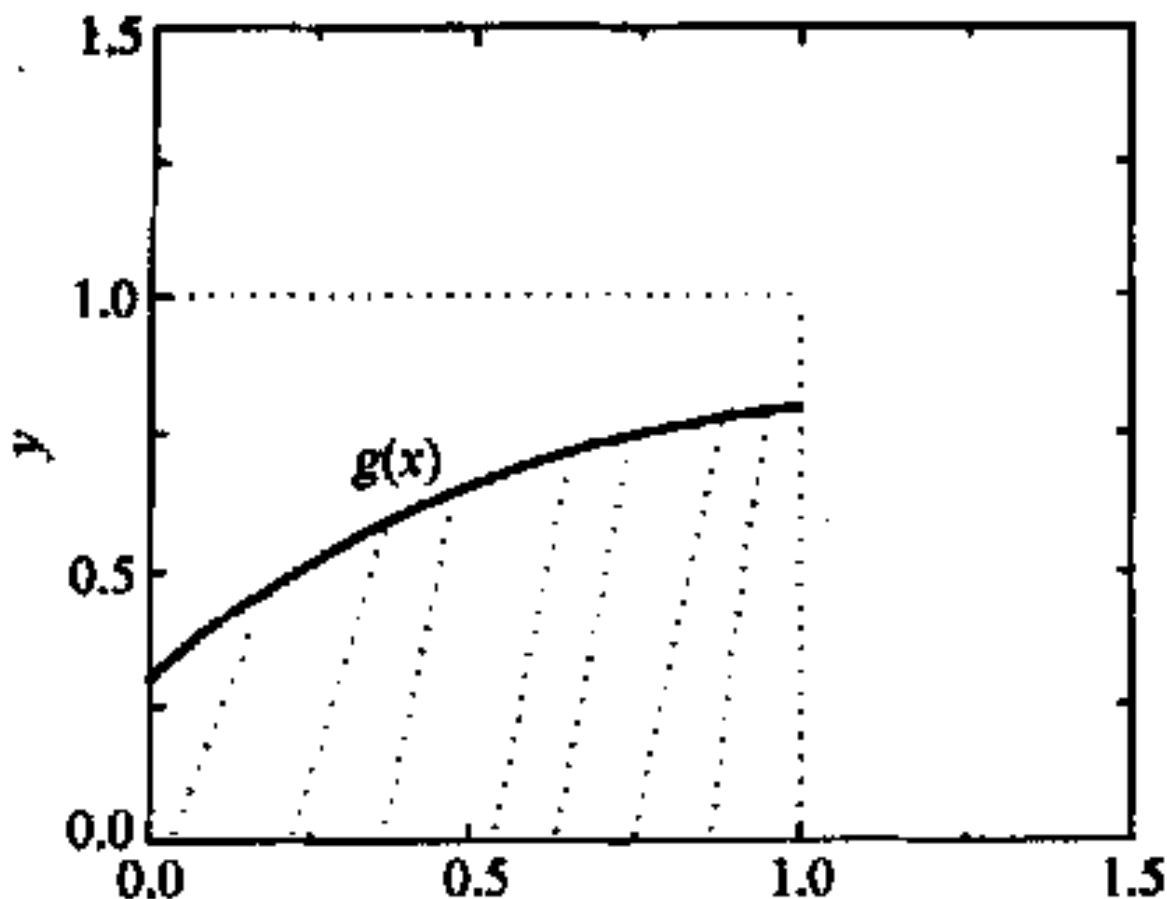


图1.3 用蒙特卡罗方法求定积分

我们可以设想这样一种随机投点求定积分  $\int_0^1 g(x)dx$  的方法：在一个边长为1的正方形上并以其两边分别为坐标轴画出曲线  $g(x)$ ，实际上就是图1.3，然后随机地在正方形内投掷小球，那么，小球击中  $g(x)$  曲线下部分的概率就等于所要求的积分  $\int_0^1 g(x)dx$ ，这样就将确定性的定积分问题转化为一个概率问题，同样可以通过数值模拟方法——蒙特卡罗方法求得其近似解。用此方法，我们计算了积分  $\int_0^1 x^2 dx$ ，当投球数为1万次时，得到的积分近似值为0.332800，与其真值  $\frac{1}{3}$  极为接近。

## §1.2 蒙特卡罗方法的解题手续和特点

在用蒙特卡罗方法解算问题时，一般需要这样几个过程：构造或描述概率过程，**对于本身就具有随机性质的问题**，如粒子输运问题，**主要是正确地描述和模拟这个概率过程**。对于本来不是随机性质的确定性问题，比如计算定积分、解线性方程组、偏微分方程边值问题等，要用蒙特卡罗方法求解，**就必须事先构造一个人为的概率过程**，它的某些参量正好是所要



求问题的解。即要将不具有随机

性质的问题，转化为随机性质的问题。这构成了蒙特卡罗方法研究与应用上的重要问题之一，然后建立各种估计量，使其期望值是所要求解问题的解，最后根据所构造的概率模型编制计算程序并进行计算，获得计算结果。

与其他的数值计算方法相比，蒙特卡罗方法有这样几个优点：

(1) 收敛速度与问题维数无关，换句话说，要达到同一精度，用蒙特卡罗方法选取的点数与维数无关；计算时间仅与维数成比例。但一般数值方法，比如在计算多重积分时，达到同样的误差，点数与维数的幂次成比例，即计算量要随维数的幂次方而增加。这一特性，决定了对多维问题的适用性；

(2) 受问题的条件限制的影响小；

(3) 程序结构简单，在电子计算机上实现蒙特卡罗计算时，程序结构清晰简单，便于编制和调试；

(4) 对于模拟象粒子输运等物理问题具有其他数值计算方法不能替代的作用。

蒙特卡罗方法的弱点是收敛速度慢，误差大的概率性质，这一情况在解粒子输运问题中仍然存在，除此之外，经验证明，只有当系统的大小与粒子的平均自由程可以相比较时，一般在10个平均自由程左右，这方法算出的结果较为满意。而对于大系统深穿透问题，算出的结果往往偏低。对于大系统，其他数值方法往往很适应，能算出较好的结果。因此，已有人将数值方法与蒙特卡罗方法联合起来使用，克服这种局限性，取得了一定的效果。

自二战以来，随着计算机技术的飞速发展，蒙特卡罗方法以其独特的优点广泛应用于计算物理和物理工程领域，特别是在核物理、辐射物理、数学、电子学等方面得到了广泛的应用。对蒙特卡罗方法的推广必将使其对物理学学科的发展发挥更大的作用。

## §1.3 用蒙特卡罗方法模拟粒子输运

中子和光子在物质中输运的宏观表现是大量粒子与原子核微观作用的平均结果，蒙特卡罗方法通过逐一模拟和记录单个粒子的历程来求解输运问题。要得到比较合理的平均结果需要跟踪大量的粒子，至于单个粒子在其生命中的某一阶段如何度过，可以在已知统计分布规律的前提下通过抽取随机数来决定。

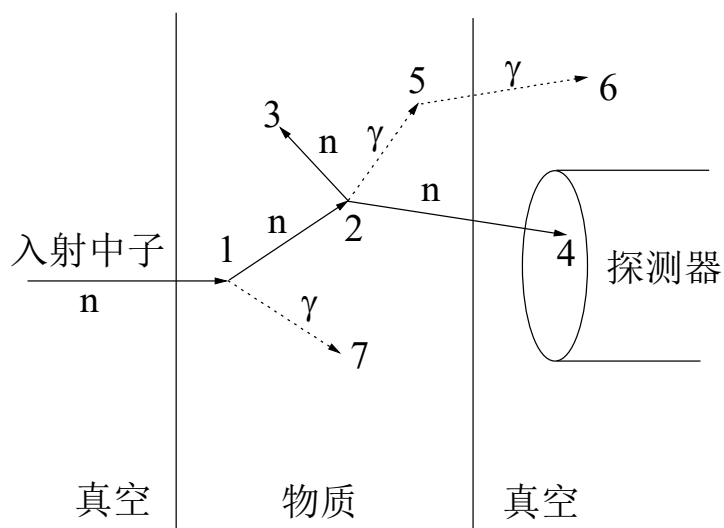


图1.4 单个中子随机历程示意

图1.4 显示了模拟中一个中子射入物质后的随机历程。首先根据中子与物质作用的物理规律(分布函数)，选取一个随机数决定中子在何处与原子核碰撞，本例中在事件1处碰撞；然后再用抽取随机数的方法决定中子与原子核发生了哪种反应，这里抽出的是非弹性散射反应；散射中子的能量和向哪个方向飞行也是用抽取随机数的方法从已知分布函数中决定的；碰撞过程中是否产生光子以及光子的能量、飞行方向等参数还是要通过抽取随机数从已知分布中决定，这里产生了一个光子，在MCNP程序中该光子暂时被存储起来，散射后的中子在事件2处与原子核发生(n, 2n)裂变反应，同时产生两个新的中子和一个光子，裂变产生的光子和一个中子被存储起来，现在开始对另外一个中子进行跟踪。这个中子在事件3处被俘获，这时取出那个刚才存储起来的中子，通过随机抽样，该中子在事件4处逃逸出平板，进入探测器，MCNP结束对该中子的模拟，重新取出裂变产生那个光子进行跟踪。这个光子在事件5处与原子核发生了一次散射，在事件6处逃逸出平板。现在取出最后一个粒子——在事件1处产生的光子进行跟踪，该光子在事件7处与原子核碰撞并被吸收。至此，入射中子的整个历史也就完成了，其有一个中子到达了探测器，感兴趣的结果被记录下来。跟踪越来越多的入射粒子历程后，平均结果就能反映出宏观效果。通过以上描述，读者不难领略蒙特卡罗方法如何通过跟踪粒子历程的方法计算问题，也了解了随机数在蒙特卡罗计算中的独特作用。需要注意的是，MCNP程序在重新取回以前存储的粒子时，是按照这样的规则进行的：最后存储的粒子最先被取出，也就是“先进后出”或“后进先出”的堆栈操作。

## 第 2 章 MCNP 程序入门

由于蒙特卡罗 (Monte Carlo) 方法在解决粒子输运问题方面的优越性, 人们开发了很多种 Monte Carlo 模拟程序, 如 EGS、MCNP、MORSE 和 FLUKA 等, 其中, EGS4 (Electron Gamma Shower, Version 4) 和 MCNP4C (Monte Carlo N—Particle Transport Code, Version 4C) 是应用最多并得到广泛验证的两种经典 Monte Carlo 模拟程序。EGS4 是由美国斯坦福直线加速器中心、日本高能物理国家实验室 (KEK) 和加拿大国家研究所 (NRC) 联合推出的一套模拟电子和光子在物质中输运过程的通用 Monte Carlo 程序系统, 是揭示电子和光子在物质中输运规律的有力和较为方便的模拟研究工具, 目前 KEK 发布了 EGS5 版本。

### §2.1 MCNP 简介

MCNP 全名为 Monte Carlo Neutron and Photo Transport Code (蒙特卡罗中子-光子输运程序), 它是由美国 Los Alamos 国家实验室应用理论物理部 (X 部) 的 Monte Carlo 小组 (X-6X 小组) 经过数十年的研究开发的一个基于蒙特卡罗方法的大型的多功能 Monte Carlo 粒子输运程序。从 1977 年开始产生到现在历经十几个版本, 解决了核能领域很多关键性问题, 功能也越来越强大。

现在 MCNP 可在微机的 UNIX、LINUX、DOS、WINDOWS 98、Windows XP 等操作系统下工作。现其最新版本的 MCNP-5 1.30 具有如下功能:

(1) 非带电粒子成相技术。在用户指定的栅格中, MCNP-5 使用多个点探测器来确定某个像素区域的粒子流量。用户可以根据需求设置尽可能多的探测点以便生成尽可能平滑的图象。

(2) 随机几何能力。该能力可用来分析颗粒燃料, 还可用来研究燃料核在石墨矩阵中的随机位置。

(3) 可处理复杂三维几何系统的输运问题, 几何界面除任意平面和二阶曲面外, 也可包括四阶椭环面。

(4) 粒子输运方式可以是中子输运、光子输运、电子输运、中子-光子联合输运、光子-电子联合输运、电子-光子联合输运、中子-光子-电子联合输运。既可用于求解通常的

输运方程，也可解多群共轭输运方程。MCNP-5 已经能够处理低能光子相互作用的不连续散射问题。

(5) 既可计算穿透问题，也可计算临界特征值问题。对临界特征值的计算，给出了 KEFF、预期寿命和生存时间的计算方法，还可计算各种记数关于介质成分、密度或截面数据的一阶、二阶微扰量。

(6) 配备的截面数据覆盖了所有常用的核素和同位素，并可选用点截面方式或多群截面方式。可处理的中子能量范围为  $10^{-11}$  至 20MeV，光子和电子为 0.001 至 1000MeV。

(7) 有多种物理量的计算选择，包括点通量、界面通量、任意独立栅格的粒子流及通量、几何体上的通量及能量沉积，可给出按空间、时间、能量的谱（分布）和联合分布，粒子流还可增加角度分布。另外还有脉冲高度谱的计算。所有量的计算结果都同时给出了统计误差。

(8) 有十余种降低方差技巧可以选用。

(9) 具有较好的图形输出功能。可作几何结构任意方位的二维剖面图，计算结果的二维 X-Y 曲线图、等值线图、三维曲面图、截面数据图及粒子径迹图。既可交互方式作图，也可用批命令方式作图，也可在中途暂挂计算进行作图。MCNP-5 可绘制最多有 64 种颜色的彩图。

(10) 既可在串行环境下运行，也可在并行环境下运行。

另外，根据具体应用的需要，MCNP 还有一些专门用途的版本。如 MCNP-X 和 MCNP-PoliMi。MCNP-X (Monte Carlo N-particle code) 是由美国 Los Alamos 实验室开发的用于多粒子传输模拟计算的蒙特卡罗程序。它是由 MCNP 4B 版本发展而来，可以跟踪的粒子数达到 40 余种，可跟踪的中子最高能量达到 GeV 以上。在辐射防护研究中也得到了广泛的应用。MCNP-PoliMi (Politecnico di Milano) 是由意大利米兰工艺学院核工程学部根据 MCNP 4C 开发用于（时间）相关性测量的蒙特卡罗软件。它可以很详细的记录粒子-核子的相互作用信息，比如每个粒子关于每一次碰撞的类型、目标核、能量沉积、位置等。MCNP-PoliMi 在处理中子输运问题时，首先抽取样品中子碰装类型，然后产生光子，这与标准 MCNP 采用的技术相反。一个与 MCNP-PoliMi 配套的后加工处理程序也已经开发，用它能够定制模拟特定特征的探测器。该软件可用于模拟塑料闪烁体对快中子或伽玛射线的探测问题。

**MCNP程序的应用范围十分广阔，主要包括：反应堆设计、核临界安全、辐射屏蔽和核防护、探测器的设计与分析、核测井、个人剂量与物理保健、加速器靶的设计、医学物理与放射性治疗、国家防御、废物处理、射线探伤等。**

## §2.2 MCNP 程序的组成及特点

### A、组成

MCNP 是主程序模块，它根据正在运行的问题之需要分别调用 IMCN、MCRUN、XACT 和 PLOT 等主要模块。各模块之间的关系，如图 1 所示。

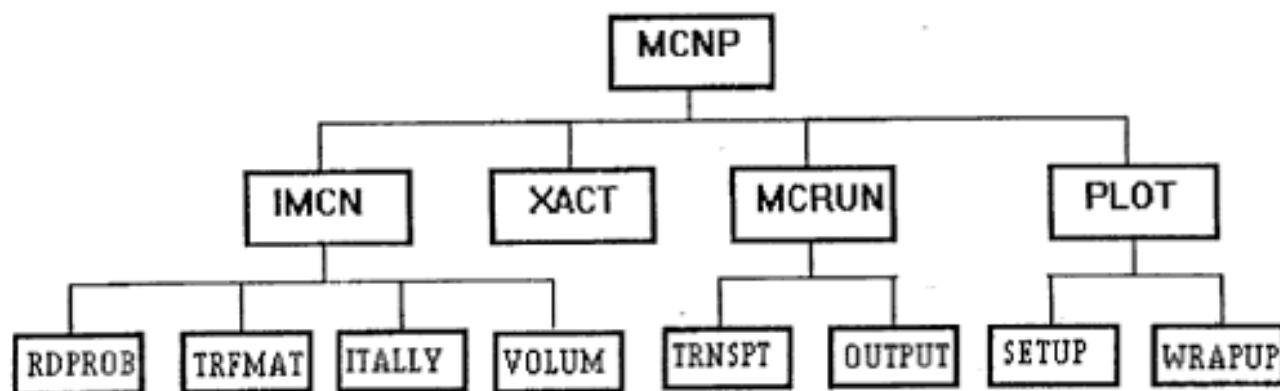


图 2.1 MCNP 程序模块构成简图

IMCN 模块总是要被调用的，其任务是读入输入文件 INP，并对输入数据进行分析处理。它根据输入信息定义动态分配存储空间的大小，对相应的动态分配数组建立相对地址索引表，随后将调用所需要的模块如 RDPROB、TRFMAT、ITALLY 和 VOLUM 等。RDPROB 模块主要是依序读入输入文件 INP 的卡片映像，通过分析处理送入相应的存储位置。TRFMAT 模块对非标准形式输入的曲面描述卡，完成坐标变换，给出曲面标准形式的方程系数；对输入的源分布处理成便于抽样的形式。ITALLY 模块对输入的记数及材料说明信息进行加工处理。VOLUME 模块则主要是计算栅元的体积及曲面的面积，但限于具有对称轴的情况。MCRUN 模块是输运计算的实体，是 MCNP 的核心部分。它将根据需要调用两个模块 TRNSPT 和 OUTPUT。TRNSPT 模块按用户指定的样本数 NPS 或时间限 CTME 完成对粒子历史的模拟。OUTPUT 模块则实现对计算结果的编辑输出。XACT 模块的任务是从截面数据文件中读出问题中所用核素的截面数据，并根据用户给出的信息删去所关心能量范围以外的中子截面数据。PLOT 模块实现在各种图像设备上绘制或显示问题的几何图形。它分别调用 SETUP 模块和 WRAPUP 模块。SETUP 模块根据用户的终端键盘信息绘制几何图形，产生图形文件 PIX。WRAPUP 模块在不同的图像设备上实现 PIX 文件的图形输出。

显然，上述各模块并不是运行任何问题都必须全部调用的，MCNP 从分析用户在输入文件 INP 上指定的信息，决定所需要调用的模块。

## B、特点

MCNP程序中物理量的单位规定为：

表2.2 MCNP程序中物理量的单位规定

物理量	单位
长度	cm
能量	MeV
时间	shake, $=10^{-8}\text{sec}$
温度	MeV (kT)
原子密度	atoms/barn-cm
质量密度	$\text{g/cm}^3$
截面	barns ( $10^{-24}\text{cm}^2$ )
加热量	MeV/collision

此外，原子质量按中子质量为1.0计算，这种单位下阿佛伽德罗常数是0.59703109；程序运行时间以分钟为单位。

MCNP程序具有很强的通用性，主要体现在：

1. 可以处理任意三维几何结构的问题。在输入文件INP中，空间被曲面(surface)分割成相互邻接的区域，称为栅元(cell)，可以给栅元填充各种物质。栅元的界面可以是平面、二阶曲面或某些四阶曲面(如椭圆环状面)。
2. 可以模拟中子输运、光子输运和二者联合输运。
3. 用户可以非常方便地在任何位置指定体源、面源、线源或点源，设置源粒子位置、能量、时间、飞行方向等参数的分布。
4. 程序提供多种记录模拟结果方法，包括通过某一界面的粒子流量或通量、进入某一栅元的通量、沉积能量和点通量。模拟结果在MCNP中称为记数(tally)，可以按位置、能量、时间、粒子来向和粒子种类记数。
5. 程序包携带了大量核反应数据库文件，包括连续和离散的中子截面库、光子点截面库、热中子点截面库等，几乎可对所有天然物质进行计算。程序能比较精细地模拟中子和光子输运过程，并对一些特定的物理过程允许用户选择使用哪种方式进行处理，如对热中子处理可选用自由气体模型或 $S(\alpha, \beta)$ 模型，对低能光子处理可以考虑或忽略相干散射等。

6. 为了提高计算时效, 给用户提供了许多可选用的减小方差(variance)技巧, 主要包括: 重要抽样、权重截断和轮盘赌、时间和能量截断、模拟俘获、指数变换、强迫碰撞、能量分裂和轮盘赌、源的偏倚、点探测器记数、确定论输运、权窗等。

7. 用户可通过设置源粒子数或运行时间来通知程序何时终止运行, 还可以在原有计算结果的基础上接续运行程序。一些结果不会因计算的意外中断而丢失。

8. 在输出文件OUTP中给用户丰富的信息, 包括输入列表、使用的截面表、粒子生成和丢失表、栅元中的粒子活动情况、中子诱发光子表、记数和记数涨落表等, 还可以根据用户要求给出其它信息。

9. 提供了简单的问题调试工具。

## §2.3 MCNP4C 程序安装、运行与源程序编译

### A、安装

通常我们能拿到的 MCNP 原始文件有两种: 一种是可以直接运行的, 这个无所谓安装, 只要你把它放在本地硬盘的一个合适位置就可以了, 多数人都是采用这种方式; 另一种是有源代码的, 里面含有安装文件 C700DOS2.EXE。对于这种具体安装步骤如下:

1. 找到并双击 C700dos2.exe;
2. 把文件解压到目标文件夹下, 如 d:\mcnp (或者其它);
3. 在 MCNP 目录下创建一个新的文件夹 work;
4. 在 d:\mcnp\exe 路径下, 复制 mcnp\_dvf.exe 并且改名为 mcnp.exe ;
5. 把 mcnp.exe 从 d:\mcnp\exe 移动到 d:\mcnp\work 下;
6. 在 d:\mcnp\exe 路径下, 复制 xsdir2\_dvf 并且改名为 xsdir;
7. 修改 xsdir 文件第一行: 把 DATAPATH=\mcnp\xs 修改为 DATAPATH=..\xs ;
8. 把 xsdir 从 d:\mcnp\exe 移动到 d:\mcnp\work 下;

9. 运行时把输入文件也放在 work 目录下 (就是说输入文件要和 mcnp.exe、xsdir 放在相同的目录下)。

### B、运行

下面以前面安装的工作为基础简单介绍在 XP 下的运行方法。若用户不修改源程序, MCNP

的输入文件包括截面数据库文件、截面库目文件 XSDIR、问题输入文件 INP 等。INP 文件是用户要填写的主要输入文件，一般把该文件特指为输入文件。OUTP 是 MCNP 的主要输出文件（文本格式），其它输出文件还有转储文件 RUNTPE（二进制格式）、运行信息文件 OUTPUT 等。所有文件的文件名不能超过 7 个字符。

运行的方法是：点击“开始”——“运行”，输入 cmd。在命令提示符下输入 d:，回车；输入 cd mcnp\work，回车；输入 cd work，回车，进入到运行目录了。

（1）如果输入卡文件名是 INP，即使用缺省文件名，则运行的命令可以是：

```
d:\mcnp\work> mcnp
```

（2）如果不是使用以上缺省文件名，则在命令行中重新指定。假设输入卡文件名是 mcin，那么运行命令可以是：

```
mcnp inp=mcin outp=mcout runtpe=mcruntpe
```

或：

```
mcnp i=mcin o=mcout ru=mcrntpe
```

如果在当前文件夹中存在与 mcnp 将要产生的文件名相同，则 mcnp 自动按字母顺序将文件名最后一个字符改变为字母表中下一字符。

（3）如果想让在一次运行中所产生的文件，有相似的文件名，使用如下方式：

```
mcnp name=job1
```

运行后产生的 OUTP 文件将为 JOB10，RUNTPE 为 JOB1R。如果文件已经存在，MCNP 将不会覆盖它们，而是给出一条消息并中断运行。

（5）如果要看几何绘图，先删除 work 目录下刚生成的 job1o 和 job1r 两个文件，再输入下面命令并回车：

```
mcnp ip n=job1
```

如果能绘图的话会弹出 plot 提示符，在此例如你可以输入 ex=100，就可以看到自己的几何描述了，详细的参数看手册。

## C、源程序的编译

MCNP 采用适应多环境能力的设计思想，即通过选择不同参数对程序文件进行加工处理，可得到能分别在 UNIX（SUN、HP、IBM RS/6000、SGI、DEC 等机型）、CRAY（UNICOS、COS、CTSS 等系统）、DEC、VAX 等多种不同环境下编译、运行的源程序。为了能对程序作诸如计数修改、添加有关子程序、截面参数调用程序编制和移植开发等方面的一些工作，用户首



先必须根据自己的计算机系统,从 MCNP 安装包中分离出适应用户机器环境的可编译源程序,然后才能进行相关工作。

## (1) 系统配置及相关文件

编译处理的 MCNP 程序版本为 4C 版本,需具备表 2.3 中所列出的文件。

表 2.3 MCNP4C 源程序相关文件

源程序文件	说明
MCSETUP. ID	Fortran 程序,用于制作编译配置文件
PRPR. ID	Fortran 程序,用于对 MCNP 程序预处理
MAKXS. ID	Fortran 程序,用于处理截面数据库
MCNPC. ID	C 程序,MCNP 的 C 程序部分
MCNPF. ID	Fortran 程序,MCNP 的 Fortran 程序部分

出于维护方便 MCNP 源程序主体是用标准 Fortran 77 写成的,非标部分比如:系统相关特性,时间相关,图形,内存动态分配部分是用 C 语言写成的,为了能对这两种语言进行编译,对于 4C 版本 WINDOWS XP 下可安装 Digital Visual Fortran ,版本 6.0;Microsoft Visual C++ , 版本 6.0。假设它们都被安装在 E:盘 Program Files 下。

## (2) 编译器环境设置

建议先创建一个目录,如 F:\MCC,以下操作均可在该目录下进行。为使编译过程简化,可在命令提示符下使用行编译命令,为此需要将 E:\Program Files\Microsoft Visual Studio\DF98\BIN 下的 DFVARS.BAT , 及 E:\Program Files\Microsoft Visual Studio\VC98\Bin 下的 VCVARS32.BAT 复制至 F:\MCC 目录下。在命令提示符窗口中,设定 F:\MCC 为当前工作目录,执行上述两个批处理文件,这一步非常重要,它将直接影响下面操作的顺利进行。

## (3) 产生编译配置文件

将安装盘中的 MCSETUP. ID、PRPR. ID、MAKXS. ID、MCNPC. ID、MCNPF. ID 复制到 MCC 目录下,并将 MCSETUP. ID 改名为 MCSETUP. for,在命令提示符窗口中执行下面的编译命令,

```
F:\MCC>f90 mcsetup. for
```

生成可执行文件 mcsetup.exe，运行该程序，进入 MCNP 编译设置主菜单界面，选择适应目标机器环境的设置，具体设置如下：

- 输入“1.1”，在出现的计算机系统描述菜单中选择“2”（PC DVF WINDOWS）；
- 输入“3.3”，在出现的绘图选项菜单中选择“5”（DVF QuickWin）；
- 输入“4.1”，在出现的截面数据路径菜单中选择“1”，出现路径输入提示行，假设机器上截面数据被存放在 D:\MCNP\XS 下，应该输入 D:\MCNP。

以上设置完成后输入“P”（Process），回车，让程序完成最后处理工作，最终将在当前目录 F:\MCC 下生成文件 install.ans、makemcnp.bat、patchc、patchf 四个文件。其中 install.ans 记录了各设置选项，makemcnp.bat 是 MCNP 程序编译批处理文件，patchc 与 patchf 是源程序预处理标识文件。

#### （4）编译源程序

在命令提示符窗口中，执行批处理 makemcnp.bat，系统将自动完成预处理及编译任务，生成可执行程序 prpr.exe、makxsf.exe、mcnp.exe，同时生成目录 flib 与 olib，在 flib 目录下存放的是 MCNP 源程序的各个模块文件，olib 目录下存放的是各个模块编译后的目标文件。用户可以根据实际需要修改对应源程序，比如使用自定义源或记数箱，之后只需对修改的模块重新编译成目标文件，然后与其它模块的目标文件重新连接即可。

## §2.4 MCNP 输入文件

### A. 输入文件的基本形式

INP 文件有初始运行和接续运行两种形式，用户须在 INP 中描述问题的几何、材料、源、记数和其它要求。INP 由一些被空行分隔的输入块组成，主要的输入块是信息块、标题和栅元块、曲面块和数据块等。输入块又由一些被称为卡的输入行组成。初始运行输入文件的格式如下：

信息卡	} 可选
空行分隔符	

标题卡

栅元卡

.

.

.

空行分隔符

曲面卡

.

.

.

空行分隔符

数据卡

.

.

.

空行结束符

其它

信息卡的1~8列应填写MESSAGE:，后面跟着用空格分隔的参数项。可用A=B参数项更改输出文件名，如OUTP = MYOUT。信息块是可选的。

在信息块之后的第一行是问题的标题卡，它仅限于一行，占用1~80列，可以是任何信息，将作为OUTP文件中各个输出表的标题被复制。

用户在栅元块和曲面块中描述问题的几何。栅元由栅元卡描述。空间必须由彼此相邻的栅元填满，栅元之间不能重叠，也不能出现无栅元的空区，否则会出现错误。构建栅元的曲面由曲面卡定义，曲面卡在曲面块中给出。

曲面块之后是数据块，在数据块中用户描述源、记数方式、材料等。

无论数据块后是否有空行结束符，MCNP都能运行。用户可以把希望保留的一些附加信息写在数据块的空行之后，MCNP会将它们复制到OUTP文件末尾。

## B. 一个简单的例子

为说明如何填写INP文件，这里例举一个简单问题。如图2.2所示，在一个边长10cm的石墨立方体3中有两个半径0.5cm的球形空间，球1中充满氧气，球2是铁球。在球1中置一14MeV各向同性中子点源，计算球2外表面与能量相关的中子通量。建立的INP文件如下：

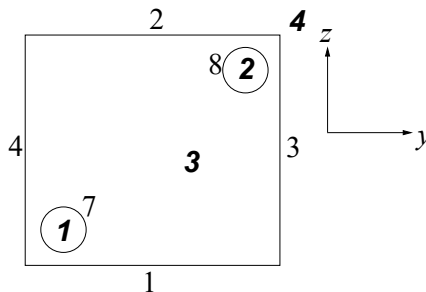


图2.2 例子的几何示意图

SAMPLE PROBLEM INPUT DECK

```
1  1  -0.0014  -7
2  2  -7.86    -8
3  3  -1.60    1 -2 -3 4 -5 6 7 8
4  0          -1:2:3:-4:5:-6
```

←空行

```
1    PZ   -5
2    PZ    5
3    PY    5
4    PY   -5
5    PX    5
6    PX   -5
7    S    0 -4 -2.5 .5
8    S    0  4  4 .5
```

←空行

MODE N

IMP:N 1 1 1 0

SDEF POS=0 -4 -2.5 ERG=14

F2 8

E0 1E-5 1E-4 1E-3 .01 .1 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13

M1 8016 1

M2 26000 1

M3 6000 1

NPS 10000

←空行

本例中没有信息块，第一行是标题卡，之后至空格前为栅元块。栅元卡上依次填写栅元号、材料号、密度和构成栅元界面的曲面号(带正负号)，这里定义了4个栅元：栅元1由球面7围成，里面填充材料1( $^{16}\text{O}_2$ 气体)，密度是 $0.0014\text{g}/\text{cm}^3$ ；栅元2由球面8围成，填充材料2(铁)，密度 $7.86\text{g}/\text{cm}^3$ ；栅元3由平面1、2、3、4、5、6围成，不包括球面7、8以内的空间，填充材料3(石墨)，密度 $1.6\text{g}/\text{cm}^3$ ；栅元4是栅元3以外的空间，为真空。

曲面卡上需要填写曲面号、曲面类型和曲面参数，本例中定义了8个曲面，前6个为与原点距离5cm垂直于各坐标轴的平面，后两个是半径0.5cm的球面，球心分别在(0, -4, -2.5)和(0, 4, 4)。

数据块中指定了问题类型、源、记数方式、材料和运行粒子数，各卡数据项的意义如下：

MODE卡	问题类型是中子输运
IMP卡	4个栅元的中子重要性分别是 1 1 1 0
SDEF卡	位于(0, -4, -2.5)、能量14MeV的各向同性点源
F2卡	在曲面8上做中子通量记数
E0卡	对记数能量分区，1~14MeV之间间隔为1MeV，1MeV~ $10^{-5}\text{MeV}$ 之间间隔为一个数量级
M1卡	材料1是 $^{16}\text{O}$ 核素
M2卡	材料2是Fe元素
M3卡	材料3是C元素
NPS卡	运行源粒子数10000

以上例子仅用于说明INP文件格式，有关各输入卡的详细内容，读者在此不必深究。

## C. 接续运行的输入文件

为了继续一个早先被终止的计算，或想对早先终止的计算进行重新编辑打印(指向文件输

出，即PRINT语句，不是向打印机输出)，可以接续运行MCNP。

接续运行INP文件中必须有信息块，信息卡中必须有C或C m参数，其中m表示从第m次转储开始接续运行，m缺省表示从最后一次开始。接续运行输入文件的格式为：

MESSAGE: C m

空行分隔符

CONTINUE

数据卡

.

.

空行结束符

其它

此时INP中不能有标题卡、栅元块和曲面块。数据块第一行必须是CONTINUE，允许使用的数据卡只是NPS、CTME、PRINT、FQ、DD、PRDMP、LOST和DBCN卡。NPS卡参数为累积运行的总源粒子数，CTME卡参数相对于本次运行的开始时间。如果给NPS置负参数，表示仅从转储文件中提取数据重新打印。

接续运行的另一个必要条件是上次运行的转储文件RUNTPE还没被删除。因每次运行都生成新的转储文件，若想对一次运行结果多次重新打印，则应把RUNTPE文件做备份。各次转储时运行的源粒子数和时间可从OUTPUT文件中查到。

## D. 卡片格式

INP文件的每一行都限于使用1~80列。卡片都可以按行填写，数据卡也允许按列填写。

### a) 行输入格式

通常卡片的1~5列用于填写栅元号、曲面号或数据卡的助记名，6~72列填写卡片参数，73~80列为注释，\$符号之后也为注释。序号或卡片助记名可以写在1~5列的任何地方。带有粒

子标识符助记名可能需要5列以上，但冒号必须写在6列以内。如果1~5列空白，表示本行为上一行的接续行。6列之后可以写数据项，多个数据项之间用空格分隔。一个数据项必须在一行上写完，不得接续到下一行。相同编号的卡片只能有一张。

填写卡片参数时可以使用以下书写功能：

1. nR功能，表示它前面的数据再重复n遍。
2. nI功能，表示与其前后相临两个数之间插进n个线性插值点。
3. xM功能，表示数值等于它前面数据的x倍。
4. nJ功能，表示从本项开始的n个数据使用缺省值。

## b) 列输入格式

列输入只能用于数据块中，对栅元参数和源的描述比较有用。按行输入的栅元重要性、体积、权窗等数据项可读性较差，而且增加或删除栅元时要在行输入卡上仔细寻找相应项。列输入的可读性有很大提高，删除或增加与某一栅元相对应的数据项时也比较方便。

列输入格式的第一行以#开始，#可以放在1~5列的任意位置，卡片助记名逐个放在该行6列以后，在这些助记名之下按列给出数据项。同一个列输入格式块中的卡片必须是同一类卡片，比如都是栅元参数卡、都是曲面参数卡或都是源参数卡等，在#号下面的1~5列放置栅元号、曲面号或源分布号。

## c) 粒子标识符

粒子标识符是卡片助记名的一部分，:N表示中子，:P表示光子，有时也能遇到表示中子-光子联合输运的:N P。下面一些数据卡需要粒子标识符：IMP、EXT、FCL、WWN、WWE、WWP、WWCE、DXT、DXC、Fna、PHYS、ESPLT和CUT。

## d) 缺省值

MCNP许多输入卡的参数项有缺省值，用户不必每次都给出这些参数，如果卡片输入项有固定顺序，可以使用nJ功能跳过n个输入项。如果卡片上所有数据项都想缺省，只给出卡片助记名即可。有些卡片不给出也有缺省值，如MODE N卡就可以省略。

## E. 输入错误信息

MCNP对输入文件作广泛的检查，如果用户违反输入规定，将在输出文件OUTP中打印致命错误信息(FATAL ERROR)，程序停止运行。第一个致命错误是真实的，后面的致命错误不一定是真实的。

MCNP还给出许多警告性的提示(WARNING)，对这些提示用户也不可忽视。

如果遇到任何代码损坏，如零作除数，MCNP将给出BAD TROUBLE信息，并终止运行。



## 第 3 章 MCNP 程序中的几何构建

本章介绍MCNP几何构建方法，INP文件中栅元卡和曲面卡格式，以及用户定义栅元时应注意的事项。

### §3.1 基础知识

#### A. 概述

用户在三维正交坐标系(见图3.1)下定义曲面，用曲面围成栅元，在栅元中填充物质。栅元可由一些曲面包围区域的交集和并集构成。曲面可通过设置解析方程参数或指定曲面上一些已知点定义。

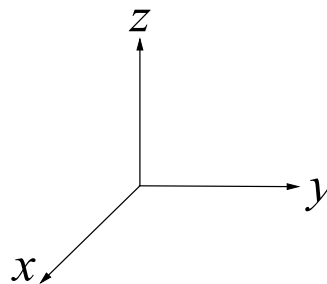


图3.1 迪卡尔坐标系

#### B. 栅元定义中的一些概念

##### 坐向 (sense)

定义栅元时，一个重要的概念是坐标点相对于曲面的坐向。假设 $s=f(x, y, z)=0$ 是一曲面S的方程，对于任意一点 $(x', y', z')$ ，代入 $s=f(x, y, z)$ 后，若 $s=0$ 则该点在曲面S上。若该点不在曲面S上，有两种情况： $s>0$ 时称该点相对于曲面S具有正的坐向，反之称该点相对于S具有负的坐向。例如，球面以外的点相对于球面具有正坐向，沿坐标轴正向离开垂直于坐标轴平面的点相对该平面具有正坐向。

任何曲面都把空间分成两部分，一部分相对于该曲面具有正坐向，另一部分具有负坐向。填写栅元卡时，在曲面号之前用正负号表示栅元中的点相对于该曲面的坐向，正号可省略。

## 交和并 (intersection & union)

交集是两个集合的公共部分，如图3.2a所示。并集是两个集合的合集，见图3.2b。MCNP中交算符是隐含的，在栅元卡上两个曲面号之间只有空格就表示交运算。并算符用冒号：表示。

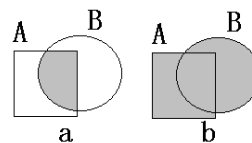


图3.2 交和并

若想仅用交算符定义栅元，栅元内所有点对特定的界面必须有相同的坐向。如图3.3所示，1、2、3、4、5面围成一个实体，用密度为 $1.0\text{g/cm}^3$ 的材料1填充，外部是真空。实体内P1和P2点相对于4面有负坐向，P3点相对于4面有正坐向；P1点相对于3面有正坐向，P2和P3点相对于3面有负坐向。这时最好借助另一平面6把实体分成两部分，从而顺利定义栅元：

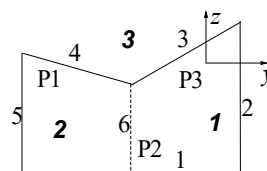


图3.3 例子

```
1      1 -1.0    1  -2  -3  6
```

```
2      1 -1.0    1  -6  -4  5
```

然而，只用交算符还不便定义实体之外的区域，这时用并算符比较方便，实体外可由3、4面以上区域的交集和其它几个面以外区域的并集构成一个栅元：

```
3      0          -5 : -1 : 2 : 3 4
```

当然实体之内的区域也可以借助并算符定义，把1、2栅元合并(这样定义会降低计算速度)。由于交运算优先，所以要用括号把并运算括起来：

```
1      1 -1.0    1  -2  (-3 : -4) 5
```

## 补 (complement)

补算符#的用法有两种：

1. #n 表示当前定义的栅元是栅元n其余的部分。
2. #(...) 表示括号内曲面号定义区域之外的部分。

引入坐向概念后，补运算就不是交运算和并运算之外的新概念，而是交和并的另一种表示方法。例如，对上面第一种情况的处理过程是，去掉#号，把n用括号括上，n中的交运算符变成并算符，n中的并算符变成交算符而且加上背靠背的括号) (，曲面之前的坐向取相反符号。数学中常用 $\times$ 表示交运算、用 $+$ 表示并运算、 $\bar{\phantom{x}}$ 表示补运算，有 $\overline{a+b}=\bar{a}\times\bar{b}$ ， $\overline{a\times b}=\bar{a}+\bar{b}$ ，此处 $\bar{a}$ 和 $a$ 则用坐向指定。

使用补算符时要格外小心，用户常因对补算符理解不透而弄出几何逻辑错误，因此建议不使用补算符。另外， $\#(n)$ 是不合规定的。

## C. 曲面定义中的一些概念

### a) 模糊面 (ambiguity surface)

有时需借助栅元界面之外的曲面来描述栅元。如图3.4所示，假设图中实体绕y轴旋转对称，栅元1和2相对于球面都有正坐向、相对于平行于y轴的柱面都有负坐向。这时，可用垂直于y轴的平面a ( $y=0$ ) 来区分栅元1和2，平面a被称为模糊面。模糊面是为了使栅元描述不模糊而设置的曲面，它不是本栅元界面，但通常是其它栅元的界面，有时需要借助不止一个模糊面。

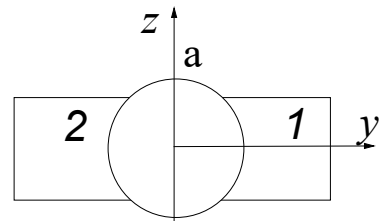


图3.4 模糊面的作用

### b) 叶 (sheet)

锥面和椭环面分多叶。通常用方程定义的锥面含有两个叶，相对于锥面旋转对称轴所平行的坐标轴而言，一个具有正的展开方向，另一个具有负向斜率。一个使用二叶锥面描述的栅元常要借助模糊面来区分栅元在锥面的哪一个叶。为了减少使用模糊面，可以在曲面卡上只定义锥面的一个叶，用+1表示正斜率的叶，-1表示负斜率的叶。这种描述方法仅适用于旋转对称轴平行于坐标轴的锥面。

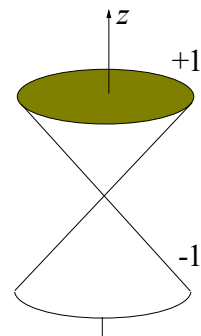


图2.5 二叶锥面

## D. 思考题

1. MCNP用什么方法描述几何。
2. 如何用曲面描述栅元几何。
3. 模糊面有什么作用。

## §3.2 几何描述卡

在输入文件INP中，栅元卡用于栅元块，曲面卡用于曲面块。

### A. 栅元卡 (cell card)

格式: j m d geom param

j: 在1~5列上填写的栅元标号，可以不连续。MCNP按照读入的顺序对栅元另行编号，称为栅元的程序编号，从1开始单调上升。为避免程序编号和栅元标号混淆，建议按顺序给出栅元标号

m: 该栅元的材料号，是材料卡Mm中相应的序号。真空栅元m=0

d: 栅元材料的密度。填正值表示原子密度，单位atoms/barn-cm。负值表示质量密度，g/cm<sup>3</sup>。对于真空栅元，该项不填写

geom: 栅元几何说明，列出界定该栅元的曲面的号(有符号，表坐向)，和描述这些曲面包围区域之间关系的布尔算符。布尔算符包括交算符(缺省)、并算符(:)和补算符(#)。缺省运算顺序是，先补，再交，最后

并。可用括号改变运算次序

param: 可选的栅元参数说明, 形式为: 关

键字=某一值

在栅元卡上可以定义栅元参数, 以替代在输入块中定义栅元参数。这里允许的关键字是: 带有粒子标识符的IMP、VOL、PWT、EXT、ECL、WWN、DXC和TMP。栅元卡参数项上的等号可用空格代替。若在栅元卡上指定了某种栅元参数, 则在数据块中不能重复指定。

## B. 曲面卡 (surface card)

### a) 由方程定义曲面

格式: j n list

j: 在1~5列上填写的曲面标号, 可以不连续

n: 方程助记名

list: 按规定次序给出的方程数据项

下表列出了MCNP识别的曲面的类型、方程、助记名和数据项次序:

助记名	类型	说明	方程	数据项
P	平面	一般 <sup>c)</sup>	$Ax+By+Cz-D=0$	A B C D
PX		垂直于x轴	$x-D=0$	D
PY		垂直于y轴	$y-D=0$	D
PZ		垂直于z轴	$z-D=0$	D
SO	球	球心在原点	$x^2+y^2+z^2-R^2=0$	R
S		一般	$(x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2-R^2=0$	$x_0 \ y_0 \ z_0 \ R$
SX		球心在x轴	$(x-x_0)^2+y^2+z^2-R^2=0$	$x_0 \ R$
SY		球心在y轴	$x^2+(y-y_0)^2+z^2-R^2=0$	$y_0 \ R$
SZ		球心在z轴	$x^2+y^2+(z-z_0)^2-R^2=0$	$z_0 \ R$
C/X	圆柱	平行于x轴	$(y-y_0)^2+(z-z_0)^2-R^2=0$	$y_0 \ z_0 \ R$
C/Y		平行于y轴	$(x-x_0)^2+(z-z_0)^2-R^2=0$	$x_0 \ z_0 \ R$
C/Z		平行于z轴	$(x-x_0)^2+(y-y_0)^2-R^2=0$	$x_0 \ y_0 \ R$

蒙特卡罗方法与 MCNP 程序入门

CX		轴心为x轴	$y^2+z^2-R^2=0$	R
CY		轴心为y轴	$x^2+z^2-R^2=0$	R
CZ		轴心为z轴	$x^2+y^2-R^2=0$	R
K/X	锥	平行于x轴	$[(y-y_0)^2+(z-z_0)^2]^{1/2}-t(x-x_0)=0$	$x_0 \ y_0 \ z_0 \ t^2 \pm 1$
K/Y		平行于y轴	$[(x-x_0)^2+(z-z_0)^2]^{1/2}-t(y-y_0)=0$	$x_0 \ y_0 \ z_0 \ t^2 \pm 1$
K/Z		平行于z轴	$[(x-x_0)^2+(y-y_0)^2]^{1/2}-t(z-z_0)=0$	$x_0 \ y_0 \ z_0 \ t^2 \pm 1$
KX		轴心为x轴	$[y^2+z^2]^{1/2}-t(x-x_0)=0$	$x_0 \ t^2 \pm 1$
KY		轴心为y轴	$[x^2+z^2]^{1/2}-t(y-y_0)=0$	$y_0 \ t^2 \pm 1$
KZ		轴心为z轴	$[x^2+y^2]^{1/2}-t(z-z_0)=0$	$z_0 \ t^2 \pm 1$
SQ	椭圆面 双曲面 抛物面	轴心平行于 x、y或z轴	$A(x-x_0)^2+B(y-y_0)^2+C(z-z_0)^2$ $+2D(x-x_0)+2E(y-y_0)+2F(z-z_0)$ $+G=0$	A B C D E F G $x_0 \ y_0 \ z_0$
GQ	柱面、锥面椭圆面、双 曲面或抛物面， 轴心不平行于坐标轴		$Ax^2+By^2+Cz^2$ $+Dxy+Eyz+Fzx$ $+Gx+Hy+Jz+K=0$	A B C D E F G H J K
TX	平行于坐标轴的椭圆 或环形		$(x-x_0)^2/B^2+\{[(y-y_0)^2+(z-z_0)^2]^{1/2}-A\}^2/C^2$ $-1=0$	$x_0 \ y_0 \ z_0 \ A \ B \ C$
TY			$(y-y_0)^2/B^2+\{[(x-x_0)^2+(z-z_0)^2]^{1/2}-A\}^2/C^2-1=0$	$x_0 \ y_0 \ z_0 \ A \ B \ C$
TZ			$(z-z_0)^2/B^2+\{[(x-x_0)^2+(y-y_0)^2]^{1/2}-A\}^2/C^2-1=0$	$x_0 \ y_0 \ z_0 \ A \ B \ C$

## b) 用点定义对称曲面

格式: j n list

j: 在1~5列上填写的曲面标号, 可以不

连续

n: =X、Y或Z,

list: 一至三个点的坐标, 每个点用一对

值表示

类型为X、Y或Z的曲面卡用坐标点而不是用方程来分别描述关于X、Y或Z轴对称旋转的曲面。如果这个曲面由一叶以上组成，指定的点必须都在一叶上。每对坐标值定义曲面上的一个点，例如，在Y卡上可以给出

j      Y    y<sub>1</sub> r<sub>1</sub>    y<sub>2</sub> r<sub>2</sub>

其中(y<sub>i</sub>, r<sub>i</sub>=(x<sub>i</sub><sup>2</sup>+y<sub>i</sub><sup>2</sup>)<sup>1/2</sup>)是i点的坐标。给出点数不同，曲面类型也不同：i) 一对坐标定义一个平面(PX、PY、PZ)；ii) 两对坐标定义一个线性曲面(PX、PY、PZ、CX、CY、CZ、KX、KY、KZ)；iii) 三对坐标定义一个二次曲面(除以上类型还有S0、SX、SY、SZ和SQ)。

### c) 用点定义一般平面

格式： j      P    x<sub>1</sub> y<sub>1</sub> z<sub>1</sub>    x<sub>2</sub> y<sub>2</sub> z<sub>2</sub>    x<sub>3</sub> y<sub>3</sub> z<sub>3</sub>

j: 在1~5列上填写的曲面标号，可以不连续

x<sub>1</sub> y<sub>1</sub> 定义该平面的坐标点

z<sub>1</sub>:

MCNP对用户指定的P型曲面，将检查数据项个数，若是4项，则作一般平面方程Ax+By+Cz-D=0的系数理解；若是9项，则作为平面上三个点的坐标值理解，所产生的平面方程系数遵循以下原则：1) 应使坐标原点相对于该平面具有负坐向；2) 当平面通过原点(D=0)，应使(0, 0, ∞)相对该平面具有正坐向；3) 若以上两项无法满足(D=C=0)，应使(0, ∞, 0)相对该平面具有正坐向；4) 若以上三项无法满足(D=B=C=0)，应使(∞, 0, 0)相对该平面具有正坐向；5) 若以上四项都无法满足，那么用户指定的三个点一定处于一条直线上，则打印警告信息。

### d) 用宏定义曲面

详见4C手册3-19页。

## C. 思考题

1. 栅元卡的格式如何。为什么最好按顺序指定栅元标号。卡上材料号对应什么，密度数据项填负值表示什么。
2. 如何用曲面卡定义曲面。

## §3.3 有效地构建几何

即使是十分有经验且细心的用户，在构建比较复杂的几何时，也经常会犯一些错误。有些错误程序可以检查出来，有些则不能，以致造成错误结果。几何构建还直接影响程序运行效率，不合适的几何构建将浪费机时。

### A. 定义栅元的原则

#### 原则 1：栅元界面要少

尽管可用大量的并算符定义一个几何上比较复杂的栅元，但这样做并不明智。问题在于，每次计算栅元内碰撞之间的径迹时，都计算径迹和栅元所有界面是否相交以判断粒子是否进入其它栅元，太多的栅元界面会浪费机时。如，图3.6a中的几何只是一些平行的柱面，较容易定义，然而两个大柱面之间的栅元有14个界面(包括前后界面)；图3.6b则是比较有效的栅元定义，复杂界面的栅元被分隔成一些小栅元，每个栅元的界面有所减少。

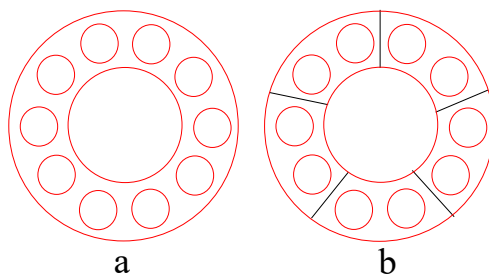


图3.6 栅元界面示意

#### 原则 2：栅元大小要合适

构建物理空间时，除按不同材料区域分割栅元外，还必须考虑效率因素。为了节省运算时间，栅元不能定义得太大或太小。在比较重要的区域，建议调整栅元大小，使粒子进入相邻栅元后数量约减少一半，以利于使用几何分裂和轮盘赌技巧。



### 原则 3：尽量用简单曲面定义栅元

如前所述，MCNP 频繁计算碰撞点到界面距离。点到二阶以上曲面的距离一般不能用解析法求解，用牛顿下山法求解时，多次叠代很浪费时间。如果问题条件允许，尽量使用二阶以下曲面分段替代二阶以上曲面。

### 原则 4：避免曲面和曲面相切

即使使用双精度变量，也不能计算出点到曲面的确切距离，因而在曲面和曲面相切处有时会因计算精度不够导致栅元重叠或空缺，造成粒子丢失。虽然这种粒子丢失几率很小，一般不会影响记数结果，但计算大量粒子问题时可能会因为丢失粒子数量超过限制，使程序停止运行。

## B. 检查几何错误

MCNP 检查 INP 文件的数据时，不能检查出几何逻辑错误。而运行中粒子丢失时，才能检查出栅元重叠或栅元之间的空缺。因此在正式运算前，应采取以下办法检查几何逻辑错误：

- 1) 增加一个 VOID 卡。这个卡将废弃这个问题的材料说明，将全部栅元设为真空，并把加热记数转化为通量记数。
- 2) 对这个问题增加一个大球面，这个球面包围需计算的系统，球面把系统之外的栅元分成两个栅元。球内面是现在问题的边界，内部所有栅元的重要性都置为 1。
- 3) 源描述改为：SDEF SUR=m NRM=-1，其中 m 是刚才定义大球面的标号。

由于上述改动使粒子在计算系统中没有碰撞，一个短时间运行就会使大量粒子的轨迹穿过系统，可能在出现几何错误的地方引起粒子丢失。

粒子丢失时，OUTP 文件上将产生丢失粒子打印表。表中列出丢失粒子跨越的所有曲面，并告诉你粒子在什么位置上向什么方向运行后丢失。你可以从这些信息中推断出粒子丢失的原因。

## C. 习题

1. 请描述如图 3.7 所示井况模型，为高 1m、半径 70cm 的圆柱体。地层半径为 10cm 至 70cm，材料号为 1，密度  $2.65\text{g/cm}^3$ 。水泥环厚 30mm，材料号为 2，密度  $1.95\text{g/cm}^3$ 。套管外径 140mm，

厚7.72mm，材料号为3，密度 $7.86\text{g}/\text{cm}^3$ 。井内介质材料号为4。为缩短计算时间，地层栅元的大小取高5cm、环距7.5cm，其它栅元高度也取5cm。本题中共有220个栅元。

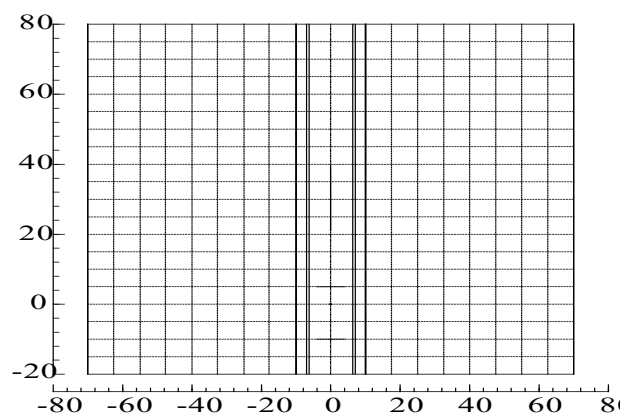


图3.7 井况模型

## 第 4 章 MCNP 程序的数理基础

本章介绍粒子在物质中输运的处理，记数的设置，以及减小方差的技巧。

### §4.1 物理

#### A. 粒子权重 (particle weight)

若严格模拟实际过程，则一个MCNP粒子仅代表一个实际粒子，且具有为1的权重。然而为了提高计算效率，MCNP允许用户使用许多并非实际过程的偏倚技巧。偏倚就是使一些感兴趣区域(包括位置、时间、能量等方面的区域)中粒子数增加，另一些区域中粒子数减少。为使计算结果不出现偏差，人为地改变粒子数后，相应地要调整每个粒子的权重。所谓粒子权重，就是每个模拟粒子携带的一个数 $w$ ，它代表该粒子对最终结果有 $w$ 份贡献，或者说该粒子相当于 $w$ 个实际粒子。 $w$ 不一定是整数，有时小于1。

不论模拟多少个源粒子，MCNP都给出相对于一个源粒子的记数。如果用户希望得到一定源强条件下的结果，可在SDEF卡上改变源粒子权重，指定 $WGT=w$ ，这时记数结果是相对于发射 $w$ 个源粒子。

#### B. 粒子径迹 (particle tracks)

径迹是源粒子和诱发粒子在其历程中的运行轨迹，粒子在两次与原子核碰撞之间的运行线路是直线，粒子自身之间的作用忽略不计。在任何给定材料的栅元中，MCNP计算沿径迹方向到下次碰撞点的距离而不是计算单位体积内碰撞几率。假设微观总截面是 $\Sigma_t$ ，要抽样的径迹长度是 $l$ ，可以证明， $l$ 和抽取出的 $[0, 1)$ 区间随机数 $\xi$ 之间的关系是

$$l = -\ln \xi / \Sigma_t \quad (4.1)$$

#### C. 中子与物质作用

中子不带电，它与物质中原子的相互作用主要表现为与原子核作用，与核外电子的作用可忽略。

不同能量的中子与原子核的作用有不同特点：

(1) 能量在 $0 \sim 1\text{keV}$ 之间的慢中子与原子核主要发生弹性散射和俘获反应。热中子能量 $kT=0.025\text{eV}$  ( $k$ 是玻尔兹曼常数,  $T$ 是绝对温度, 取 $293\text{K}$ )，它是和原子热运动达到平衡时的能量，其速度分布接近麦克斯韦分布。能量 $\geq 0.5\text{eV}$ 的中子称为超热中子。能量在 $1\text{eV}$ 至 $1\text{keV}$ 之间的中子称为共振中子，这种中子被原子核强烈地共振吸收，吸收截面很大。

(2) 能量在 $1\text{keV} \sim 0.5\text{MeV}$ 之间的中能中子与原子核的主要作用形式是弹性散射。

(3) 快中子的能量在 $0.5\text{MeV} \sim 10\text{MeV}$ 之间，与原子核主要发射弹性散射和非弹性散射反应。

(4) 能量高于 $10\text{MeV}$ 的特快中子与原子核发生弹性散射、非弹散射反应等。MCNP3B模拟中子的能量范围是 $10^{-11} \sim 20\text{MeV}$ 。

当能量很高的中子与大块物质作用时，经过多次与原子核碰撞，能量不断减小，最后或者被俘获，或者变成热中子。低能中子和原子核碰撞时受热运动的影响，也受碰撞原子核周围原子的影响。MCNP一般用自由气体模型处理原子核热运动，这种模型下弹性散射截面在零温度截面基础上作修正；其它中子反应的截面不随温度变化。对于某些常用原子，MCNP还提供一些温度条件下的考虑了晶格和化学键影响的精细 $S(\alpha, \beta)$ 表。如果中子能量足够低，使用 $S(\alpha, \beta)$ 表后，总截面是常规截面表中俘获截面以及 $S(\alpha, \beta)$ 表中弹性截面、非弹性截面的总和。否则，总截面从常规截面表中得出，随温度变化作调节。

MCNP模拟中子输运时，要跟踪径迹反复考虑如下事项：a) 碰撞前中子的能量、飞行方向和径迹长度；b) 与哪种核碰撞，被碰撞核的速度与方向(除非使用 $S(\alpha, \beta)$ 处理)；c) 碰撞过程是哪种反应，如弹性散射、 $(n, xn)$ 、 $(n, p)$ 、 $(n, \alpha)$ 、俘获等；c) 碰撞过程选择地产生光子，模拟每个光子的初始能量、运动方向、权重；d) 碰撞后中子(或几个中子)的能量、飞行方向、权重，下一次在什么位置和哪种核碰撞。如此反复，直至中子能量足够低或权重足够小。

## 1) 选择碰撞核

设介质由 $n$ 种核组成， $\xi$ 是一个 $[0, 1)$ 上的随机数，当

$$\sum_{i=1}^{k-1} \Sigma_{ti} \leq \xi \sum_{i=1}^n \Sigma_{ti} < \sum_{i=1}^k \Sigma_{ti} \quad (4.2)$$

成立时，第 $k$ 种核被选择为碰撞核， $\Sigma_{ti}$ 是栅元中第 $i$ 种核的微观总截面。

## 2) 靶核速度抽样

如果不使用 $S(\alpha, \beta)$ 处理，需要考虑靶核速度。对轻核，若中子能量高于 $400kT(10\text{eV})$ ，对重核高于 $40kT(1\text{eV})$ ，靶核的速度对碰撞截面的影响可忽略不计。其它情况下，要按麦克斯韦分布抽取靶核速度，

$$P(V) = 4\pi^{-1/2}\beta^3 V^2 \exp(-\beta^2 V^2) \quad (4.3)$$

其中 $\beta = (AM_n/2kT)^{1/2}$ ， $A$ 是靶核质量， $M_n$ 是以 $\text{MeV}\cdot\text{sh}^2/\text{cm}^2$ 为单位的中子质量。靶核运动方向从各向同性分布中抽取。然后得到动能为 $E$ 的中子的等效散射截面

$$\sigma_s^{\text{eff}}(E) = \frac{1}{v_n} \iint \sigma_s(v_{\text{rel}}) v_{\text{rel}} P(V) dV \frac{d\mu}{2} \quad (4.4)$$

其中 $v_{\text{rel}}$ 是中子和靶核间的相对速度， $\sigma_s(v_{\text{rel}})$ 为相对速度的散射截面(从截面数据库中查出，未作温度修正)， $\mu$ 是中子入射和出射方向夹角的余弦。相对速度的计算公式是，

$$v_{\text{rel}} = (v_n^2 + V^2 - 2v_n V \mu_T)^{1/2} \quad (4.5)$$

其中 $v_n$ 是中子速度， $V$ 是靶核速度， $\mu_T$ 是二者速度夹角的余弦。

## 3) 弹性散射和非弹性散射

如果碰撞时中子未被俘获，它就参与弹性散射或非弹散射反应，广义的非弹散射可以是 $(n, n')$ 、 $(n, np)$ 、 $(n, 2n)$ 等。弹性散射以 $\sigma_{el}/(\sigma_{el} + \sigma_{in})$ 的概率被选择，非弹散射以余下的概率被选择，其中 $\sigma_{el}$ 是弹性散射截面， $\sigma_{in}$ 是非弹散射截面。

出射粒子方向：对弹性和非弹散射，抽取出射粒子飞行方向的方法是一样的，入射和出射方向夹角的余弦 $\mu$ 从截面文件的角分布表中抽取。对每种特定的中子入射能量，角分布表都有32个分立的 $\mu$ 箱。如果入射能量是 $E$ ，介于有角分布表的能量 $E_n$ 和 $E_{n+1}$ 之间，则以 $(E-E_n)/(E_{n+1}-E_n)$ 的几率从 $n$ 表中抽取角分布，以 $(E_{n+1}-E)/(E_{n+1}-E_n)$ 的几率从表 $n+1$ 中抽取角分布。抽取随机数 $\xi$ ，找到第 $i$ 个余弦箱，使得 $i-1 \leq 32\xi < i$ ，则有

$$\mu = \mu_i + (32\xi - i)(\mu_{i+1} - \mu_i) \quad (4.6)$$

出射和入射方向之间的方位角则从各向同性分布抽取，

出射粒子能量：对于弹性散射和分立能级非弹散射，出射粒子的能量由两体动力学规律确定；对其它的非弹散射，出射粒子能量的确定要依靠截面表。

弹性散射出射粒子能量等于

$$E_{out} = E_{in} \frac{1 + A^2 + 2A\mu_{cm}}{(1 + A)^2} \quad (4.7)$$

其中,  $E_{in}$  是入射中子能量,  $\mu_{cm}$  是质心系下入射和出射夹角余弦。

非弹散射情况比较复杂, 要按截面比例分别考虑每个出射粒子的权重, 抽取出射能量的规则有24条, 常用的一些规则是:

规则1 象抽取入射和出射方向夹角余弦一样, 出射能量从一些等几率的能量箱中抽取。

规则2 分立光子能量。假设能级差是  $EG$ , 则瞬发光子能量是  $EG$ , 俘获辐射光子能量是  $EG + [A/(A+1)]E_n$ , 其中  $A$  是原子质量,  $E_n$  是入射中子能量。

规则3 ( $n, n'$ ) 反应。用  $'$  表示质心系, 无  $'$  表示实验室系,

$$E'_{out} = \left(\frac{A}{A+1}\right)^2 [E_{in} + \frac{Q(A+1)}{A}]$$

$$E_{out} = E'_{out} + \left[\frac{E_{in} + 2\mu'(A+1)(E_{in}E'_{out})^{1/2}}{(A+1)^2}\right] \quad (4.8)$$

规则4 表分布。对每种特定的入射能量, 表包括三部分, 即次级能量  $E(I)$ 、概率密度函数  $PDF(I)$

和累积密度函数  $CDF(I)$ 。常用内插方法得到出射能量, 抽取随机数  $\xi$ , 若

$CDF(K) \leq \xi < CDF(K+1)$ , 则按直方分布得到的出射能量是

$$E' = E(K) + (\xi - CDF(K)) / PDF(K), \text{ 或按线性插值} \quad (4.9)$$

$$E' = E(K) + \left\{ [PDF(K)^2 + 2 \frac{PDF(K+1) - PDF(K)}{E(K+1) - E(K)} \cdot (\xi - CDF(K))]^{1/2} - PDF(K) \right\} / \left( \frac{PDF(K+1) - PDF(K)}{E(K+1) - E(K)} \right)$$

只有  $PDF(K+1) = PDF(K)$  时才使用直方分布。

规则5 一般蒸发谱。函数  $g(x)$  随  $x$  变化关系用表给出, 能量随入射粒子能量  $E_{in}$  的关系也用表给出, 规则是

$$f(E_{in} \rightarrow E_{out}) = g\left(\frac{E_{out}}{T(E_{in})}\right) \quad (4.10)$$

密度函数由以下方式抽取

$$E_{out} = \mathfrak{r}(\xi)T(E_{in}) \quad (4.11)$$

其中  $T(E_{in})$  是入射能量的表函数,  $\mathfrak{r}(\xi)$  是随机数的表函数。

#### 4) S( $\alpha, \beta$ )处理

若中子能量足够低，且用户指定使用S( $\alpha, \beta$ )表，则碰撞通过S( $\alpha, \beta$ )处理被模拟，而不经第3)步。中子与原子核碰撞受到原子热运动及附近其它原子的影响，S( $\alpha, \beta$ )同时考虑了二者的影响。

a) 对于非弹散射，对应入射能量表的特定能量，出射能量分布由等概率的确定能量表示，覆盖4eV到 $10^{-5}$ eV的能区，伴随着一系列角分布数据。若入射能量为 $E$ ，出射能量 $E'$ 从分布

$$P(E' | E_i < E < E_{i+1}) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \delta[E' - \rho E_{i,j} - (1-\rho) \times E_{i+1,j}] \quad (4.12)$$

抽取，其中 $E_i$ 和 $E_{i+1}$ 是在入射能量表中的相邻能量， $N$ 是等概率出射能量的数目， $E_{i,j}$ 是对应于入射能量 $E_i$ 的第 $j$ 个离散出射能量， $\rho$ 是选中入射能量表 $E_i$ 的概率

$$\rho = \frac{E_{i+1} - E}{E_{i+1} - E_i} \quad (4.13)$$

对应入射能量 $E_i$ 和出射能量 $E_{i,j}$ ，有一套等几率分立余弦箱 $\{\mu_{i,j,k} (k=1 \dots v)\}$ ，以 $1/v$ 的概率抽取其中的第 $k$ 个，有

$$\mu = \rho \mu_{i,j,k} + (1-\rho) \mu_{i+1,j,k} \quad (4.14)$$

b) 对于弹性散射，上述过程也适用于数据源于非连续近似的情况。对于连续近似，数据常被存储为一系列参数 $D_k$ ，

$$\sigma_{el} = D_k / E, \quad \text{当 } E_{Bk} \leq E < E_{Bk+1} \quad (4.15)$$

$$\sigma_{el} = 0, \quad \text{当 } E < E_{B1}$$

$E$ 是入射能量， $E_{Bk}$ 是由晶格参数得出得Bragg能量。如果 $E_{Bk} \leq E < E_{Bk+1}$ ， $P_i = D_i / D_k (i=1 \dots k)$ 表示一积累概率分布，从中抽得 $i$ ，认为散射发生在第 $i$ 个Bragg晶格的边缘。散射余弦从关系式 $\mu = 1 - 2E_{Bi} / E$ 中得到。

#### 5) 俘获

有两种处理俘获的方法：模拟和暗含。

若用模拟处理，粒子以 $\sigma_a / \sigma_t$ 的概率被杀死， $\sigma_a$ 和 $\sigma_t$ 是在入射中子能量下碰撞核的吸收截面和总截面。吸收截面是所有的 $(n, x)$ 截面总和， $x$ 是除中子以外的任何粒子。

若用暗含处理，中子权重被减小到原来的 $(1 - \sigma_a / \sigma_t)$ 倍。如果新的权重低于问题的截断

权重(在CUT卡上给出), 使用轮盘赌减少粒子, 且每一个存活的粒子都具有更大的权重。缺省情况下, MCNP使用暗含俘获处理。

对于模拟俘获, 被杀死粒子的能量和权重沉积在碰撞栅元中。对于暗含俘获,  $\sigma_a/\sigma_t$  倍的入射能量和权重沉积下来。二者宏观效果一致。

也可以在确定中子飞行距离时作暗含俘获处理, 这时抽样的飞行距离是到散射点的距离而不是到碰撞点的距离, 用下式抽取  $I$ ,

$$I = -\ln \xi / \Sigma_s \quad (4.16)$$

在散射点中子权重减小到原来的  $\exp(-\Sigma_s I)$  倍。这种处理是把指数变换技巧和碰撞暗含俘获相结合。

## 6) 光子的产生

在中子-光子联合输运问题中, 若碰撞核光子产生截面不为零, 就会产生光子, 光子权重为

$$WGT_p = WGT_n \sigma_\gamma / \sigma_t \quad (4.17)$$

其中,  $WGT_p$  是光子权重,  $WGT_n$  是中子权重,  $\sigma_\gamma$  是光子产生截面,  $\sigma_t$  是总中子截面。

假设中子从栅元  $S$  进入栅元  $I$ , 二栅元的中子重要性分别是  $IN_s$  和  $IN_I$ , PWT 卡上  $I$  栅元光子权重下限置为  $WM_I$ , 若  $WGT_p > WM_I \times IN_s / IN_I$ , 就可能产生光子分裂, 产生光子数  $N_p = WGT_p \times IN_I / (5 WM_I \times IN_s) + 1$ ,  $N_p \leq 10$ , 光子权重为  $WGT_p / N_p$ ; 反之, 用轮盘赌杀死部分光子, 光子存活几率  $WGT_p \times IN_I / (WM_I \times IN_s)$ , 权重增大为  $WM_I \times IN_s / IN_I$ 。

假设入射中子能量下第  $i$  种反应的光子产生截面是  $\sigma_i$ , 可以使用抽取随机数  $\xi$  的方法用

$$\sum_{i=1}^{k-1} \sigma_i \leq \xi \sum_{i=1}^n \sigma_i < \sum_{i=1}^k \sigma_i \quad (4.18)$$

选择反应  $k$ , 从而得到光子能量。诱发光子的方向从与能量相关的角分布表中抽取, 抽样方法和前述次级中子飞行方向抽样方法类似(见式4.6)。

## D. 光子与物质作用

MCNP模拟光子的能量范围是1keV~100MeV。有两种处理光子输运的方法, 可通过PHYS:P卡选择。



## 1) 简单的物理处理过程

这种处理对高 $Z$ 核和深穿透问题不适用，整个物理处理过程只有光电效应、电子对效应和康普顿散射，总截面 $\sigma_t = \sigma_{pe} + \sigma_{pp} + \sigma_s$ 。

光电效应被认为是纯吸收过程，由光子权重相应减少的暗含俘获来实现。在每次碰撞中，权重 $WGT\sigma_{pe}/\sigma_t$ 和能量 $E \cdot WGT\sigma_{pe}/\sigma_t$ 在相应的俘获箱中记录下来，而没有被俘获的权重 $WGT(1 - \sigma_{pe}/\sigma_t)$ 被迫经历电子对效应或康普顿散射：

以几率 $\sigma_{pp}/(\sigma_t - \sigma_{pe})$ 选择电子对效应，认为在碰撞点产生正负电子对后，动能 $WGT(E - 1.022\text{MeV})$ 转化为热能沉积下来，正电子立即湮灭，各向同性地发射一个携带 $2WGT$ 权重的 $0.511\text{MeV}$ 光子。

以几率 $\sigma_s/(\sigma_t - \sigma_{pe})$ 抽样与自由电子碰撞的康普顿散射，确定出射光子能量 $E'$ 和方向余弦 $\mu$ ，能量 $WGT(E' - E)$ 沉积下来。微分截面由Klein-Nishina公式给出：

$$K(\alpha, \mu) d\mu = \pi r_0^2 (\alpha'/\alpha)^2 [\alpha'/\alpha + \alpha/\alpha' + \mu^2 - 1] d\mu \quad (4.19)$$

其中 $r_0 = 2.817938 \times 10^{-13} \text{cm}$ 为经典电子半径， $\alpha$ 、 $\alpha'$ 为入射和散射光子的折合能量， $\alpha = E/mc^2$ ， $\alpha' = \alpha/[1 + \alpha(1 - \mu)]$ 。

## 2) 详细的物理处理过程

这一过程在MCNP中是缺省的，包括光电效应、电子对效应、相干散射和非相干散射，记录产生的荧光光子，并且考虑电子束缚的影响，从而对Thomson和Klein-Nishina微分截面进行修正。总截面 $\sigma_t = \sigma_{pe} + \sigma_{pp} + \sigma_{scph} + \sigma_s$ ，其中 $\sigma_{pe}$ 是光电截面， $\sigma_{pp}$ 是对产生截面， $\sigma_{scph}$ 是相干(Thomson)散射截面， $\sigma_s$ 是非相干(Compton)散射截面。

### a) 平均自由程

对每种元素，MCPLIB截面库中有一些与对数能量 $L_i(Z) = \ln[E_i(Z)]$ 相对应的截面数据 $L_{j,i}(Z) = \ln[\sigma_{j,i}(Z)]$ ，其中 $j=1, 2, 3$ 和 $4$ ，分别表示非相干散射、相干散射、光电效应和电子对效应。

能量为 $E$ 的光子在特定物质中的平均自由程是

$$\lambda = \frac{1}{\sum_Z N(Z) \sum_{j=1}^4 \sigma_j(Z)} \quad (4.20)$$

$Z$ 对物质中所有元素求和,  $N(Z)$ 是原子密度,  $\sigma_j(Z)$ 是截面。抽取随机数 $\xi \in [0, 1)$ , 确定到下次碰撞点距离  $l = -\lambda \ln \xi$ 。发生碰撞后, 再用两个随机数 $\xi_1$ 和 $\xi_2$ 确定元素 $Z$ 和过程 $j$ , 前者由 $\xi_1/\lambda$ 与 $N(Z)\sigma_i(Z)$ 的部分求和相比较得到, 后者由 $\xi_2\sigma_i(Z)$ 与 $\sigma_j(Z)$ 部分求和比较得到。

## b) 非相干(Compton)散射

设非相干散射微分截面 $\sigma_1(Z, \alpha, \mu) d\mu = I(Z, \nu) K(\alpha, \mu) d\mu$ , 其中 $I(Z, \nu)$ 是修正公式(3.19)的因子, 以表的形式给出,  $\nu$ 也是 $\alpha$ 和 $\mu$ 的函数。和简单物理处理一样, 从修正Klein-Nishina公式出发抽取出射光子能量 $E'$ 和方向余弦 $\mu$ 。

## c) 相干(Thomson)散射

相干散射能量不变, 只需抽样 $\mu$ 。微分截面可表示为 $\sigma_2(Z, \alpha, \mu) d\mu = C^2(Z, \nu) T(\mu) d\mu$ ,  $T(\mu) d\mu = \pi r_0^2 (1 + \mu^2) d\mu$ ,  $C^2(Z, \nu)$ 以表的形式给出。

对于高能光子, 相干散射主要是前向散射,  $\mu \approx 1$ 。使用点探测器时, 由于探测器一般并不位于散射方向, 所以详细处理比简单处理结果的方差更大。

## d) 光电效应

与简单处理相比, 详细处理的光电效应还包括荧光光子的发射。光子敲出壳层电子后, 高层电子向下跃迁后发射荧光光子, 仅考虑有1~2个能量高于1keV的荧光光子出射, 剩余能量沉积在碰撞点。 $Z \leq 12$ 时光电效应按热吸收过程处理, 因为荧光光子能量低于1keV;  $31 \geq Z \geq 12$ 时可能发射一个荧光光子,  $Z \geq 31$ 时可能发射两个荧光光子, 能量可能是 $K\alpha_1$ 、 $K\alpha_2$ 、 $K\beta_1$ ,  $Z \geq 37$ 时还可能是 $K\beta_2$ , 等几率抽样。荧光光子方向从各向同性分布中抽取。

## e) 对产生

与简单处理相同。

## f) 其它

MCNP不考虑韧致辐射。认为能量低于0.001MeV的截面全是纯吸收截面。

建议不同时使用点探测器和详细的光子物理处理, 使用简单物理处理能够明显提高点探

测器的计算效率。对能谱计算，当荧光辐射比较重要，或问题几何对能量低于1MeV的光子有几个平均自由程厚，则推荐使用详细物理处理。两种处理的比较见下表。

	简单光子物理处理	详细光子物理处理
光电效应	纯吸收，暗含俘获	产生1~2个1keV以上荧光光子
对产生	生成一个携带2WGT权重的0.511MeV光子	与简单处理相同
非相干散射	假设和自由电子作用，使用Klein-Nishina公式	考虑了电子束缚效应，引入修正因子，使前向散射、低能光子和高Z核时截面减小
相干散射	忽略	考虑
适用情况	较高能量，点探测器，荧光效应不重要(低Z)	高Z物质，深穿透，或精细的低能谱较重要

## §4.2 记数

记数是对计算结果的记录，MCNP提供一些标准记数方式，以助记符F1、F2、F4、F5a、F6等区分，用户可以根据自己的意愿加以选择。

记数都被归一化成对应一个源粒子。

### A. 面流量记数

F1型记数记录如下物理量

$$F1 = \int_A \int_{\mu} \int_t \int_E J(r, E, t, \mu) dE dt d\mu dA \quad (4.21)$$

$$*F1 = \int_A \int_{\mu} \int_t \int_E E \cdot J(r, E, t, \mu) dE dt d\mu dA \quad (4.22)$$

此记数是流过界面的粒子数(\*F1是能量)，流量与通量的关系是 $J(r, E, t, \mu) = |\mu| \phi(r, E, t) A$ ，其中 $r$ 、 $E$ 、 $t$ 和 $\mu$ 分别表示粒子通过曲面时的位置、能量、时间和方向余弦， $\phi$ 是通量函数， $A$ 是面积。用户通过FSn、En、Tn和Cn卡指定面积、能量、时间和角度的积分区间。

### B. 通量记数

F2和F4型记数可表示为

$$F2,4 = \int_t \int_E \phi(r, E, t) dE dt \quad (4.23)$$

$$*F2,4 = \int_t \int_E E \cdot \phi(r, E, t) dE dt \quad (4.24)$$

用户可在En和Tn卡上指定积分区间。

## 1) 栅元通量的径迹长度估计(F4)

粒子通量的定义是 $\phi(r, E, t) = vN(r, E, t)$ ，其中 $v$ 是粒子速度， $N$ 是粒子密度(等于粒子权重/栅元体积)。对时间积分后通量可表示为

$$\int \phi(r, E, t) dt = Wvt / V = WT_l / V \quad (4.25)$$

其中 $W$ 是粒子权重。由于径迹长度 $T$ 在分子上，这类记数就叫做栅元径迹长度记数。

## 2) 界面通量(F2)

界面通量可以理解为厚度 $\delta$ 极薄情况下的栅元通量

$$F2 = \lim_{\delta \rightarrow 0} WT_l / V = W(\delta / |\mu|) / (A\delta) = W / (A|\mu|) \quad (4.26)$$

## C. 栅元能量沉积记数

栅元加热和能量沉积记数也与径迹长度有关

$$F6 = \rho_a / \rho_g \int_t \int_E H(E) \phi(r, E, t) dE dt \quad (4.27)$$

其中 $\rho_a$ 是原子密度(atoms/barn-cm)， $\rho_g$ 是质量密度(g/cm<sup>3</sup>)， $H(E)$ 是加热函数，

$$H(E) = \sigma_T H_{avg}(E) \quad (4.28)$$

$\sigma_T$ 是中子或光子的总截面，中子和光子 $H_{avg}(E)$ 的形式不同。

对于中子，

$$H_{avg}(E) = E - \sum_i p_i(E) [\bar{E}_{out,i}(E) + Q_i - \bar{E}_{\gamma,i}(E)] \quad (4.29)$$

其中 $p_i(E)$ 是反应 $i$ 的几率， $\bar{E}_{out,i}(E)$ 是平均中子出射能量， $Q_i$ 是反应能， $\bar{E}_{\gamma,i}(E)$ 平均光子出射能量。

对于光子，

$$H_{avg}(E) = \sum_{i=1}^3 p_i(E) (E - \bar{E}_{out}) \quad (4.30)$$

其中 $i=1, 2$ 和 $3$ ，分别表示非相干散射、对产生和光电效应， $\bar{E}_{out}(E)$ 是平均光子出射能量。

## D. 探测器记数

在MCNP中，某点处的通量可用点探测器或环探测器记数来估计。

### 1) 点探测器

点探测器用确定论方法计算空间中某点处的通量，记录源粒子和碰撞产生粒子对该点的贡献。设 $p(\mu, \varphi) d\Omega$ 是粒子射向、被散射到或生成后飞向 $(\mu, \varphi)$ 方向 $d\Omega$ 立体角的几率， $R$ 是源点或碰撞点到探测器的距离，则 $p(\mu, \varphi) d\Omega \cdot e^{-\lambda}$ 是沿 $(\mu, \varphi)$ 方向 $d\Omega$ 立体角无碰撞地到达探测器的几率，其中 $\lambda = \int_0^R \Sigma_t(s) ds$ 是平均自由程的个数， $\exp[-\int_0^R \Sigma_t(s) ds]$ 是一束单能粒子通过介质的衰减几率， $s$ 是朝向探测器方向的位移， $\Sigma_t(s)$ 是在 $s$ 点的总截面。由于 $d\Omega = dA/R^2$ ， $p(\mu, \varphi) = p(\mu)/2\pi$ ，则在探测器处单位面积 $dA$ 上的上述来源的有权重粒子数(即通量分布函数)等于

$$\phi(r, E, t, \mu) = Wp(\mu)e^{-\lambda}/(2\pi R^2) \quad (4.31)$$

其中 $W$ 是粒子权重。

点探测器也被称为“下次事件估计器”，因为估计点通量记数时，下一个事件是一个无碰撞直接到达点探测器的事件。这种过程可以理解为伪粒子的输运。

注意(4.31)式中分母上的 $R^2$ 造成 $R \rightarrow 0$ 时 $\phi \rightarrow \infty$ 。解决此问题的方法是设置一个包围探测点的邻域球，半径 $R_0$ 可以以cm或平均自由程为单位给出。如果以cm为单位设置 $R_0$ ，在 $R_0$ 内的通量用球内平均通量替代，

$$\phi(R < R_0) = \int \phi dV / V = \frac{3Wp(\mu)(1 - \exp(-\Sigma_t R_0))}{2\pi R_0^3 \Sigma_t} \quad (4.32)$$

当 $\Sigma_t = 0$ ，探测器在真空中，球内无碰撞，则

$$\phi(R < R_0, \Sigma_t = 0) = \frac{3Wp(\mu)R_0}{2\pi R_0^3} \quad (4.33)$$

如果以平均自由程为单位设置 $R_0$ ，则 $\lambda_0 = R_0 = \Sigma_t R$ ，有

$$\phi(R < R_0) = \frac{3Wp(\mu)(1 - \exp(-\lambda_0))\Sigma_t^2}{2\pi \lambda^3} \quad (4.34)$$

对于探测器在真空中或稀薄介质(如空气)中，可将 $R_0$ 设置为0。典型情况下， $R_0$ 设置为平均自由程或它的几分之一较合适。如果以cm为单位设置 $R_0$ ，应考虑球内平均粒子能量的平均自由程。一般邻域球内不应出现多种物质。

## 2) 环探测器

环探测器和点探测器类似，但环探测器在一个环上记数。F5X、F5Y、F5Z探测器分别表示探测器环相对于 $x$ 、 $y$ 、 $z$ 轴旋转对称。在环状对称系统中，绕对称轴环上各点的通量相等，用户自然可以在环上选择一点记录抽样结果来计算环上平均通量。然而环探测器的优点表现在，MCNP通过位置偏倚技巧选择环上探测点，使靠近环的碰撞得到优化处理，在探测器总记数不变的前提下，经常抽样贡献较大的事件，减小相对误差。所以环探测器一般比点探测器有更高的效率。

## 3) 伪粒子和探测器可靠性

探测器是使用了确定论捷径的混合蒙特卡罗方法，从源点或碰撞点到探测位置的输运被确定估计所替代。可以理解为存在着伪粒子，伪粒子不再参与碰撞，也不影响产生它们的粒子的权重和其它效应，只用于估计对探测器的贡献。伪粒子估计通量时需要一个衰减因子，由对源点或碰撞点到探测器之间径迹的求和得到。

探测器记数虽然效率较高，但也经常误导用户。例如，考虑一个各向同性单能点源和探测器附近有一个散射区域的情况(见图4.1)，如果粒子未射向散射区，每次到达探测器的伪粒子提供相同的贡献，记数统计涨落为零。第一个粒子射向散射区后，探测器记数及其误差突然跳变，随着后来的源伪粒子到达探测器，统计误差又逐渐减小，第二个射向

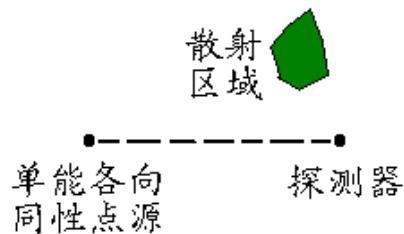


图4.1 探测器记数

散射区的事件发生后，探测器记数的误差又突然变大。这种周期性的误差变大变小是探测器的一个特点。要较好地解决这一问题，需对散射区充分抽样。建议用户仔细研究探测器诊断打印表。探测器记数相对误差大于5%的结果是值得怀疑的。

## 4) 探测器记数的减小方差技巧

一些适用于模拟粒子的减小方差技巧不适用于伪粒子，例如，虽然伪粒子在零重要性区域被杀死，但不根据栅元重要性或权重窗口分裂。MCNP提供两个专门适用于伪粒子的轮盘赌技巧。

PD卡可用于指定每个栅元的伪粒子产生几率。对栅元 $i$ 的输入项 $p_i$ 应介于0~1之间，伪粒子

产生几率为 $p_i$ ，权重为 $1/p_i$ 。缺省时 $p_i=1$ ，即每个源或碰撞事件产生一个伪粒子。设置 $p_i=0$ 可以使栅元 $i$ 中不产生伪粒子，从而去掉该栅元对探测器的直接贡献。

DD卡同时控制探测器诊断打印和向探测器输运伪粒子的轮盘赌。DD卡上的参数项 $k$ 用于指定启动轮盘赌的权重下限 $w_c$ ：若 $k \leq 0$ ， $w_c = -k$ ；若 $k > 0$ ，从第201个伪粒子开始， $w_c$ 等于以前伪粒子的平均权重的 $k$ 倍。缺省 $k=0.1$ 。

## 5) 直接贡献和总贡献

MCNP的输出文件中将自动打印对探测器的总贡献和直接贡献。直接贡献是来源于源事件的伪粒子记数，总贡献则还包括碰撞事件伪粒子的贡献。在NP联合输运方式下，中子碰撞产生光子是光子源事件。

## E. 记数精度

### 1) 平均值，方差和标准偏差

记数结果是抽样许多历史过程贡献的平均值，假定 $P(x)$ 是选择一个随机过程的概率密度函数， $x$ 是该过程产生的要估计的值， $x_i$ 是从 $P(x)$ 中抽取的第 $i$ 个历史的贡献，共抽样 $N$ 个粒子，则 $x$ 的近似期望值为

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (4.35)$$

$\bar{x}$ 就是MCNP输出文件中给出的记数平均值。

$x$ 值分布的方差 $\sigma^2$ 是其离散性的量度，此方差的估计值 $S^2$ 等于

$$S^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}{N-1} \sim \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 - (\bar{x})^2 \quad (4.36)$$

$\sigma$ 称为标准偏差，是方差的平方根，其估计值 $S$ 是实际抽样值 $x_i$ 标准偏差的总体估计。

$\bar{x}$ 的方差由下式估计，

$$S_{\bar{x}}^2 = S^2 / N \quad (4.37)$$

由于 $S_{\bar{x}}$ 与 $1/\sqrt{N}$ 成正比，减小一个数量级 $S_{\bar{x}}$ 要计算100倍原来的粒子数目。也可以固定 $N$ 通过 $S$ 的减小来减小 $S_{\bar{x}}$ ，即通过减小方差的技巧来实现。

在MCNP的输出文件中，对应每个记数平均值 $\bar{x}$ ，还给出其相对误差 $R$ ，

$$R = \frac{S_{\bar{x}}}{\bar{x}} = \left[ \frac{1}{N} \left( \frac{\overline{x^2}}{\bar{x}^2} - 1 \right) \right]^{1/2} = \left[ \frac{\sum_{i=1}^N x_i^2}{\left( \sum_{i=1}^N x_i \right)^2} - \frac{1}{N} \right]^{1/2} \quad (4.38)$$

MCNP建议 $R < 0.05$ 的结果才是可信的。

## 2) FOM

FOM(figure of merit)反映了MCNP的计算效率，定义为 $FOM = 1/R^2 T$ ， $R$ 是记数平均值的相对误差估计， $T$ 是计算时间。因 $R^2 \propto 1/N$ ， $T \propto N$ ，故理想情况下FOM应为常数。

在MCNP输出文件的末尾给出对应一定运行粒子数的FOM。FOM是一个很重要的统计参数，它还是运行结果可靠性的指示器。对于一个好的运行结果，运行初期FOM有一定统计涨落，运行后期FOM趋于某一固定值。**只要FOM还随运行粒子数的增加不断跳变，结果就不可靠。**

影响效率的因素有三种：历史贡献的效率、非零记录的离散度和每个历史所用的计算时间。其中前两个影响 $R$ ，后一个影响 $T$ 。 $R$ 可以分成两部分，即非零记录的效率部分 $R_{eff}^2$ 和本身具有的离散度 $R_{int}^2$ ， $R^2 = R_{eff}^2 + R_{int}^2$ 。定义 $f$ 为产生非零记录的那部分历史，有

$$R_{eff}^2 = (1 - f) / (fN) \quad (4.39)$$

$$R_{int}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N x_i}{\left( \sum_{i=1}^N x_i \right)^2} - \frac{1}{fN} \quad (4.40)$$

所以可以通过一种或多种减小方差的技巧来抽样那些产生非零记录的粒子，增加 $f$ 值，减小 $R_{eff}^2$ 和 $R$ 。同时，粒子权重也作相应的调整，使结果保持不变。而较小的 $f$ 值则需模拟大量的粒子来补偿，以取得精确的计算结果。

## 3) 精度和准确性

精度和准确性是两个不同的概念。精度反应结果绕平均值涨落的情况，而准确性则反应平均值与期望值的偏差。模拟结果的统计误差小并不一定意味着结果准确。

影响MCNP计算准确性的因素有两方面：程序本身和用户。程序本身的不精确是由于物理处理方法不完善、截面数据存在误差等原因造成的，有待于在今后新版本中不断完善。后一个原因是把实际问题模型化时带进偏差，主要包括源的能量及角分布指定得有问题，或不恰当的几何描述和材料物质描述等。用户也可能选用不合适的记数方式，或，也是经常地，滥



用减小方差的技巧。

影响MCNP记数结果精度的因素有三方面：记数类型、减小方差技巧和计算源粒子数。

## §4.3 减小方差技巧

### 统筹考虑

减小方差的技巧用于缩短记数达到足够精度的计算时间。影响MCNP计算时效的主要因素是记数类型和粒子随机行走的抽样方法，二者都影响着每个粒子历程对记数结果平均贡献的大小。MCNP记数结果可以表示为

$$\langle T \rangle = \int d\vec{r} \int d\vec{v} \int dt \cdot N(\vec{r}, \vec{v}, t) T(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (4.41)$$

其中  $N(\vec{r}, \vec{v}, t)$  是粒子密度函数， $T(\vec{r}, \vec{v}, t)$  是记数函数。记数函数  $T(\vec{r}, \vec{v}, t)$  是  $\delta$  函数，粒子达到记数区域时  $T=1$ ，否则  $T=0$ 。如果只简单地依物理规律抽样事件，大量粒子可能根本就不到达记数区域(包括位置、能量、时间和方向等)，使得计算效率很低。实际上，可以多抽样一些  $T=1$  的事件，少抽样  $T=0$  的事件，为使  $\langle T \rangle$  保持不变，相应地调整粒子权重，这就是减小方差的技巧。

对用户而言，合理选择和适当应用MCNP减小方差的技巧并非易事，因为每种减小方差方法有各自的优缺点和适用性。然而，还是有一些供用户遵循的一般性的原则。首先，也是最重要的一点，用户应该非常熟悉要计算的物理问题和可能使用的各种减小方差方法。如果简单抽样不能有效地计算，用户应该分析问题出在哪里，以便相应地解决。其次，选择了减小方差技巧后，考虑如何赋以适当的参数，这对用户来说是更难的事。最初设置的参数可能来源于猜测或计算同类问题的经验，一般应持较保守的态度，即使用较小的偏倚而不是较大的偏倚。然后，进行一个短计算，仔细研究输出文件提供的信息，包括：使用的技巧是否改进了对记数结果的抽样；使用的几种技巧之间是否相互干扰；FOM是否变大并且随计算粒子数变化正常；有没有其它看起来明显不对的地方等等。经过反复调整和短计算后，用户还可以试着使用权窗产生器让程序自动调整参数。

无论多么熟练的用户都应当对使用减小方差的技巧持保守和慎重的态度，过分偏倚往往是用户的通病。应当牢记减小方差技巧就是减少了对某些情况的抽样，如果这种减少达到了某种不恰当的程度，会降低结果的可靠性。用户应当保证对问题的所有区域都有与其重要程度相当的足够的抽样。

下面逐一介绍MCNP减小方差的技巧。

## 能量截断

用户设置一截断能量，低于此能量的粒子将被杀死。能量截断截掉了粒子径迹，所以能节省时间。它的优点是简单，并不直接和方差相关，但存在以下几点问题：

1) 低能粒子也可能产生高能粒子。尽管用户可能对记录低能粒子不感兴趣，但低能粒子有时也是重要的。

2) 对整个区域使用同一截断能量。一些区域中低能粒子可能不重要，另一些区域也许比较重要。

3) 也许会因能量截断出现结果系统偏小。如果计算大量粒子，记数统计涨落趋于零，容易误导用户以为计算结果以足够准确。因此，能量截断不如能量窗口好。

## 时间截断

用户设置一时限，粒子生存时间超限后，终止其径迹。时间截断应只用于与时相关问题。

## 几何分裂和轮盘赌

几何分裂和俄罗斯轮盘赌是最早的、使用最广泛的技巧。若使用得当，可节省大量机时。它的原理是，当粒子向重要方向迁移时，粒子数增加，反之粒子数减少。伴随着粒子数的增减，权重相应调整，因而结果是无偏的。

在输入文件中，用户通过IMP卡给每个栅元设置一个重要性。如当前粒子具有权重  $WGT$ ，从重要性为  $I$  的栅元要进入重要性为  $I'$  的栅元。当  $I > I'$ ，粒子有  $I'/I$  的几率存活，存活粒子权重变为  $WGT \times I/I'$ 。当  $I < I'$ ，若  $I'/I$  是整数  $n$ ，粒子分成  $n$  个相同相互独立的粒子，权重为  $WGT \times I'/I$ ；若  $I'/I$  不是整数， $n$  为  $I'/I$  的整数部分，粒子以  $P = I'/I - n$  的几率分裂成  $n+1$  个粒子，以  $1-P$  的几率分裂成  $n$  个粒子，粒子权重变为  $WGT \times I/I'$ 。

栅元重要性可以设置成任何非负实数，但相邻栅元的重要性不能相差太多(除重要性为0外，一般不大于4倍)，否则粒子数过分分裂也会降低计算实效。建议在穿透方向上栅元厚度设置为粒子数减小一半的距离，栅元重要性设为相差2倍，总体上使穿透方向上粒子数基本不变。

其它需要注意的事项是：粒子在真空栅元中不分裂也不赌；粒子进入零重要性栅元后就被杀死。

## 能量分裂和轮盘赌

能量分裂和轮盘赌经常同时使用，但用户可以根据需要只使用其中一种。能量分裂/轮盘赌与空间位置无关，如果问题具有位置-能量依赖性，使用与位置-能量相关的权窗是更好的选择。

### 分裂

有时一些能量区域比其它能区更重要，可以在重要能区使粒子数分裂，伴随相应的权重调整。粒子可以在能量降低或升高时分裂，可以设置5级能量分裂界限。

能量分裂可能导致方差减小或增大。目前MCNP权重截断不考虑粒子数是否依能量分裂过。

### 轮盘赌

多数情况下，尤其是中子进入热能区时，随能量降低粒子数增多，这些低能粒子要经历大量耗时的碰撞。当低能粒子在问题中比较重要时，不能使用能量截断技巧，但可以对粒子数用轮盘赌技巧加以控制。

采用轮盘赌技巧后，当粒子能量低于设置能限时，以设定的几率存活。存活粒子的权重相应被调大，以保证整体权重无偏。

## 暗含俘获和权重截断

### 1) 暗含俘获

暗含俘获、存活偏倚和权重减小的吸收是同义词。选中被碰撞原子核  $i$  后，如果  $\sigma_{ti}$  是总微观截面， $\sigma_{ai}$  是微观吸收截面，并不以  $\sigma_{ai}/\sigma_{ti}$  的几率吸收粒子，粒子总是存活，但权重减小为  $WGT(1-\sigma_{ai}/\sigma_{ti})$ 。

暗含俘获有两个优点：1) 粒子不会在到达记数区域之前被杀死；2) 不对存活粒子权重抽样，节省时间。暗含俘获也存在两个缺点：1) 引入了粒子权重涨落；2) 跟踪每个粒子的时间增加，当粒子权重较小时可能浪费机时。

## 2) 权重截断

当粒子权重低于用户设置的权重下限时，启动轮盘赌，粒子或者被杀死，或者权重增大到用户设置值：在栅元  $j$  中的权重截断不仅与用户在 CUT 卡上设置的 WC1 和 WC2 参数有关，而且和该栅元重要性有关。当粒子权重低于  $R_j \times WC2$  后权重截断就起作用，其中  $R_j$  是源栅元和当前栅元重要性之比。粒子存活几率是  $WGT / (R_j \times WC1)$ ，存活粒子权重调整为  $R_j \times WC1$ 。和能量截断、时间截断不一样，权重截断使用轮盘赌，因而结果是无偏的。

权重截断是为配合几何分裂/轮盘赌和暗含俘获而设计的。为了理解权重截断的必要性，可以从反面考虑如果没有权重截断会发生什么情况，设想粒子在很大的介质中输运，不使用能量截断或时间截断，粒子经过多次碰撞后损失了大量权重，跟踪大量小贡献粒子自然会浪费机时。权重截断设计成与栅元重要性之比有关，是为了兼顾在重要性大的栅元中粒子分裂后权重减小。MCNP 的许多技巧导致权重改变，由于权重截断最初是为几何分裂和暗含俘获设计的，同时使用其它技巧时要格外小心。

设置好权重截断的界限不是件易事，需要思考和试验。用户需要猜测多大的权重是值得保留的，然后在它附近做调整。

## 强迫碰撞

强迫碰撞是一种在指定栅元增加碰撞抽样的技巧。由于探测器伪粒子和 DXTRAN 粒子只在碰撞或源抽样过程中产生，因此增加碰撞次数可使这两种粒子增多。也可以应用强迫碰撞技巧在较薄的栅元中充分抽样。

强迫碰撞把进入某栅元的一个粒子分裂成碰撞部分和不碰撞部分。不碰部分还是一个粒子，直接离开本栅元，权重变为  $W_0 \cdot \exp(-DLS \cdot QPL)$ ，其中  $W_0$  是分裂前的权重， $DLS$  是沿粒子运动方向的栅元长度， $QPL$  是栅元内物质的微观截面。碰撞部分具有剩余权重  $W_0 \cdot (1 - \exp(-DLS \cdot QPL))$ ，并使用轮盘赌控制这种粒子的数量，存活几率  $f$  由用户设置，存活粒子权重调整为  $W_0 \cdot (1 - \exp(-DLS \cdot QPL)) / f$ 。当强迫碰撞栅元相邻或碰撞次数过多时，控制碰撞部分的粒子数是有必要的。粒子在飞行方向上碰撞的位置  $PMF$  由抽取随机数  $\xi$  确定

$$PMF = -\frac{1}{QPL} \ln[1 - \xi[1 - \exp(-DLS \cdot QPL)]] \quad (4.42)$$

强迫碰撞常产生很多小权重粒子，需注意权重截断和权窗对这种粒子的影响：

1) 如果在强迫碰撞卡上设置负输入项。强迫碰撞后次级粒子正常抽样。关闭权重截断。权窗在探测器粒子和 DXTRAN 粒子产生前不起作用。为使伪粒子和 DXTRAN 粒子能达到记数区，

如果使用权窗，其下限应设置为碰撞粒子权重或零。

2) 如果在强迫碰撞卡上设置正输入项。碰撞后产生探测器粒子和DXTRAN粒子，权重截断和权窗都起作用。存活的碰撞粒子可以继续参与强迫碰撞。如果使用权窗，它将限制进入栅元粒子的权重。

## DXTRAN

DXTRAN是确定性输运(deterministic transports)的缩写，它是类似探测器记数的混合蒙特卡罗方法，一般用于不能很好抽样的小区域，因为粒子射向小区域的几率很小。这时，用户可设置一包围感兴趣区域的DXTRAN球。在球外每次碰撞中，产生一特殊的DXTRAN粒子，按确定几率散射向并达到DXTRAN球表面，不再参与碰撞，权重按确定性输运计算。碰撞产生的正常粒子按蒙特卡罗方法继续处理，权重也不做特殊调整，只是正常粒子试图进入DXTRAN球时被杀死，从而可保证整体结果无偏。在球的内部，DXTRAN粒子按普通粒子处理。因此，DXTRAN是分裂、轮盘赌和从非模拟几率密度函数抽样的综合。

DXTRAN的主要缺点是，额外地跟踪DXTRAN粒子花费机时。有时DXTRAN粒子在球内多次碰撞，导致权重很低。DXTRAN球内粒子不被常规权重截断和权重窗口所控制，但有两种控制低权DXTRAN粒子数量的方法：

1) DXC卡与栅元有关，用户可以指定栅元 $i$ 中碰撞或源抽样产生DXTRAN粒子的几率 $p_i$ ，产生的DXTRAN粒子的权重乘以 $p_i^{-1}$ ，由此可以产生权重较大的DXTRAN粒子。用户可通过设置各栅元的 $p_i$ 使进入DXTRAN球粒子的权重大致相等，但选择合适的 $p_i$ 较困难，一般在权重涨落主要来源于按物质吸收系数指数衰减时应用此方法。

2) 权重涨落的另一个、也经常是主要的来源是粒子向DXTRAN球所在立体角度散射的几率不同，因此采用DD卡控制DXTRAN粒子数更方便。前面在 § 4.2 D 4)中介绍的控制探测器伪粒子的DD卡也同样适用于DXTRAN粒子。DD卡上的参数项 $k$ 用于指定启动轮盘赌的权重下限 $w_c$ ：若 $k \leq 0$ ， $w_c = -k$ ；若 $k > 0$ ，从第201个DXTRAN粒子开始， $w_c$ 等于以前DXTRAN粒子的平均权重的 $k$ 倍(缺省 $k=0.1$ )。

使用DXTRAN技巧需注意的一些事项有：

- (1) 在光密介质中不宜使用DXTRAN，**不要指望用DXTRAN解决深穿透问题。**
- (2) 当一个问题中设置多个DXTRAN球时，往往产生相当多的权重极低的DXTRAN粒子。
- (3) 因为常规粒子不能进入DXTRAN球，不要在DXC卡上对DXTRAN粒子设置0存活几率。
- (4) 最好使产生DXTRAN粒子和杀死常规粒子的权重基本平衡。

(5) DXTRAN技巧和探测器记数都是向一小区域输运非常规粒子，因此使用探测器记数需注意的事项也适用于DXTRAN。

## 源变量偏倚

MCNP允许对任何或全部通用源(SDEF卡上)的参数项做偏倚，这就是说，允许在每个源变量的重要区域多抽样一些粒子，相应地减小这种粒子的权重。例如，在一个屏蔽问题中，对于一个有确定能谱的各向同性点源，可以在记数方向上多抽样一些高能源粒子，并相应地调整每个源粒子的权重。

### 1) 通过指定外部抽样频率来偏倚

可以在SB输入卡上指定不同变量区间的源粒子产生几率，从而对某一源变量进行源粒子偏倚。如果这种硬性指定的几率与应在该变量区间产生粒子的实际几率不相符，相应源粒子的权重调整为实际几率(在SP卡上定义)除以硬性指定的几率(在SB卡上指定)，从而使该区间中粒子总权重保持不变。

### 2) 通过指定内部函数来偏倚

象指定源变量分布几率一样，也可以通过指定内部函数来做源粒子抽样偏倚。这时SB卡的输入类似于SP卡的输入(详细指定方法将在第四章讲述)，第一个参数项是用负数指定的函数号，例如：a) 方向偏倚。对源粒子出发方向的抽样可以按指数函数偏倚。b) 沿圆柱伸展方向偏倚。对源粒子出发位置的抽样，即出发位置沿圆柱体对称轴方向离开中心的距离，可以按内部函数偏倚。c) 沿球半径方向偏倚。对源粒子出发位置的抽样，即出发位置距球心的距离，可以按内部函数偏倚。等等。

## 权重窗口

权重窗口是与位置和能量相关的分裂/轮盘赌技巧。用户可以指定一些能量区间，然后对每个栅元的每个能量区间指定权重上下限，其中上限是下限的固定倍数。如果在特定位置-能量区域中，粒子权重低于设置下限，则启动轮盘赌；若高于设置上限，则分裂。可以在粒子碰撞或穿越界面时检查其权重。

虽然权重窗口可以单独使用，且实践证明它是一种很有效的减小方差技巧，但设计它的

初衷是为了弥补其它减小方差技巧造成权重变化过大的缺陷。尤其是，在某些情况下，由轮盘赌导致粒子权重过大，这种生存几率很小且权重相对较大的粒子对记数稳定性起负面作用；相反，分裂过程产生一些很小权重的粒子，对记数贡献也很小，跟踪它们会造成机时浪费。因此保证抽样过程中粒子权重的基本平衡是十分重要的。虽然不能强求每个粒子历史对记数的贡献完全相等，但通过设置与重要性成反比的权重窗口，可以使每个径迹的贡献大致相当。与重要性成反比的系数和窗口的宽度是需要用户调节的主要参数。实践中发现，当窗口上限是下限的5倍时比较好，并且计算效率对窗口的宽度并不十分敏感。与重要性成反比的系数一般选择成使一些参考栅元中粒子数比较合理，最方便的选择方法是使源栅元中粒子权重处于窗口中。

对某些位置的某些能量区域，可以通过把下限设置为零来关掉权窗。需要注意的是，如果碰撞中权窗关闭，权重截断工作，有时可能杀死过多的粒子。

## 1) 权窗和几何分裂的区别

虽然二者都使用分裂和轮盘赌技巧，但存在一些显著区别：a) 权窗与位置和能量有关，几何分裂只与位置有关；b) 权窗依粒子权重决定如何处理，几何分裂不管粒子携带的权重有多大；c) 权窗技巧的判据是权重上下限，几何分裂的判据是重要性之比；d) 权窗在栅元界面和碰撞点起作用，几何分裂只在界面起作用；e) 权窗可控制其它技巧造成的权重涨落，几何分裂保持这种涨落。

## 2) 权窗产生器

用户使用权窗技巧时需要设置随位置和能量变化的权窗上下限，如果问题中栅元较多，或想在较多能量区间中操纵粒子权重，就得输入很多参数。用户可能需要凭借猜测、直觉、经验和不断摸索才能将这一技巧有效地利用起来。由于权窗上限都是下限的固定倍数，下限又设置成反比于区域重要性，可以把下限随栅元-能量区间的变化看成二维离散函数，称为权窗重要性函数。MCNP提供的权窗产生器能自动计算权窗重要性函数，从而简化了用户的工作。

如果想让粒子径迹对记数的贡献相等，应使相空间中某点的重要性正比于进入该区间的粒子对记数的贡献。模拟一定数量的粒子后，可按下式计算重要性，

$$\text{重要性} = \frac{\text{进入该栅元粒子对记数的贡献}}{\text{进入该栅元的总权重}} \quad (4.43)$$

然后按重要性倒数的分布指定权窗，并在输出文件中提供输入文件需要的权窗卡。

虽然实践证明权窗产生器很有用，但它决不是解决所有重要抽样问题的万金油。用户有时要站在自己的角度思考问题，权窗产生器计算的权窗就不太适用；多数情况下，用户还要判断计算出的权窗是否合理。用户需牢记，产生的参数是统计结果，有可能带很大误差，除非在设置的相空间中已充分抽样。为此，用户应在使用权窗产生器时预先给相空间粗略设置比较合理的重要性，经过计算-设置-再计算的多次过程才能得到较好的权窗；要对计算结果加以判断，对那些值得怀疑的参数重新设置。另外，若未充分划分相空间，也会导致权窗产生器失效。

## 指数变换

指数变换从非模拟概率密度函数中抽样碰撞距离，在特定方向上人为地减小微观截面并且在相反方向上增大微观截面，截面按下式修改

$$\Sigma_t^* = \Sigma_t(1 - p\mu) \quad (4.44)$$

其中  $\Sigma_t^*$  是变换后的截面， $\Sigma_t$  是实际总截面， $p$  是控制偏倚程度的指数变换参数， $\mu$  是和参考方向夹角的余弦。 $|p| < 1$ ，可取常数，在暗含俘获中取  $p = \Sigma_a / \Sigma_t$ 。

为保证结果无偏，粒子碰撞或穿越界面时需修改其权重，乘以因子  $w_c$ 。碰撞时，

$$w_c = \exp(-p\Sigma_t\mu s) / (1 - p\mu) \quad (4.45)$$

穿越界面时，

$$w_c = \exp(-p\Sigma_t\mu s) \quad (4.46)$$

其中  $s$  是碰撞距离或到界面距离。

对于高吸收性介质中的深穿透问题，方差一般随  $p$  从 0 变到某一  $p'$  逐渐减小，再随  $p$  从  $p'$  变到 1 逐渐增大。习惯把  $p < p'$  称为欠偏倚， $p > p'$  为过偏倚。用户需要凭经验和不断试验寻找合适的  $p$ 。以下是一些应用经验：

1) 若不把指数变换和权窗同时使用，MCNP 将提出警告。大量实践表明，单独使用指数变换经常得到不可靠的记数结果和误差估计，因此需要合适的权窗加以控制。

2) 指数变换适用于高吸收性介质；不适用于高散射性介质。

3) 对于中子在水泥或土壤中输运，变换参数  $p$  取 0.7 比较合适。对于光子在高  $Z$  介质中输运，更高的偏倚，如  $p$  取 0.9，也许是合适的。



## 相关抽样

非相关抽样往往使问题微小变化的结果差异被统计误差所掩盖, 相关抽样技巧使得对这种小量变化的估计成为可能。MCNP总是从固定的序列中挑选伪随机数。假设第 $i-1$ 个粒子使用的第一个随机数是序列中的第 $n$ 号数, 不管第 $i-1$ 个粒子使用了多少个随机数, 第 $i$ 个粒子所使用的第一个随机数都是序列中的第 $n+4297$ 号数, 然后该粒子的后续随机数又在序列中此后固定步长的位置挑选。

如果计算微扰问题, 对原始和微扰后情况而言, 相对应的每一个新历史的起始随机数都相同, 而后模拟粒子径迹的随机数序列也相同, 除非微扰使随机数序列分岔。

## 点探测器

与其它减小方差技巧不同, 点探测器不仅控制粒子随机行走, 它本身就是一种记数类型, 并且和在半径极小的DXTRAN球面法线上记录面通量是等价的。在 § 4.2 D中已对点探测器记数详细介绍, 这里不在赘述。

## 第 5 章 MCNP 程序中的数据卡

数据卡在INP文件的数据块中使用。常用的数据卡分以下几类：

节号	类型
§ 5.1	问题类型卡
§ 5.2	栅元参数和曲面参数卡
§ 5.3	源的描述
§ 5.4	记数方式的指定
§ 5.5	材料的指定
§ 5.6	能量和热处理方式
§ 5.7	问题截断条件
§ 5.8	外围卡

### §5.1 问题类型卡

格式： MODE X

X: N, 中子输运（卡可缺省）

N P, 中子-光子联合输运

P, 光子输运

此卡用于指定计算问题的类型，MODE N问题的源粒子是中子，MODE P的源粒子是光子，MODE N P的源粒子可以是中子也可以是光子，省略MODE卡表示MODE N。MCNP中，中子碰撞产生光子，光子碰撞不产生中子。

### §5.2 栅元参数和曲面参数卡

除AREA卡外，下面大部分卡用于定义栅元参数：

助记名	卡类型	节内编
-----	-----	-----

		号
IMP	栅元重要性	A
VOL	栅元体积	B
AREA	曲面面积	C
PWT	光子产生的权	D
EXT	指数变换	E
VECT	矢量输入	F
FCL	强迫碰撞	G
WWE	权窗能量	H
WWN	权窗边界	I
WWP	权窗参数	J
WWG	权窗产生器	K
WWGE	权窗产生器能量	L
PDn	探测器贡献	M
DXC	DXTRAN贡献	N

以上卡中只有IMP卡是需要有的(使用权窗时除外)，多数卡可用于降低方差。栅元参数卡或曲面参数卡上的数据项必须与栅元描述卡或曲面描述卡在INP文件中的顺序一致、个数相等。

## A. IMP 栅元重要性卡 (Cell Importance Card)

格式: IMP:n  $X_1$   $X_2$  ...  $X_l$

n: N, 中子; P, 光子

$X_i$ : 栅元i的重要性

l: 栅元总数

栅元重要性用于几何分裂和轮盘赌技巧,能使更多的粒子轨迹朝向几何位置上较为重要的区域运动。

粒子在0重要性栅元被杀死,对探测器和DXTRAN球的贡献也终止。

在MODE N P问题中,若省略IMP:P卡,则全部栅元光子重要性取1,除非中子重要性为0的栅元,此栅元光子重要性也取0。

**B. VOL 栅元体积卡 (Cell Volume Card)****C. AREA 曲面面积卡 (Surface Area Card)**

格式: VOL  $X_1$   $X_2$  ...  $X_l$

$X_i$ : 栅元 $i$ 的体积

1: 栅元总数

格式: AREA  $X_1$   $X_2$  ...  $X_l$

$X_i$ : 曲面 $i$ 的面积

1: 栅元总数

通常MCNP可以自动计算栅元体积和曲面面积,并在OUTP文件中打印。为了某种记数的目的,用户可以用VOL和AREA卡修改这些参数。有时MCNP不能计算全部的栅元或曲面参数,如果记数中用到它们,用户又没手工输入,则会出现致命错误。以上二卡可被分段除数卡SDN代替。

**D. PWT 光子产生权重卡 (Photon Weight Card)**

格式: PWT  $W_1$   $W_2$  ...  $W_l$

$W_i$ : 中子在栅元 $i$ 内碰撞产生光子的权重的相对阈值

1: 栅元总数

仅在MODE N P问题中PWT卡有效,它的作用是控制中子碰撞时诱发光子的权重和数目。通过诱发光子的权重与PWT卡上指定的有关权重阈值之比来控制光子的产生及其权重,权重阈值与栅元中子重要性有关,若 $W_i < 0$ 还与源中子权重有关。设中子从栅元 $s$ 出发,在栅元 $i$ 与原子核碰撞,两个栅元的中子重要性分别是 $I_s$ 和 $I_i$ ,该中子在栅元 $s$ 内时的权重为 $W_s$ ,抽样出的诱发光子权重是 $W_p$ , $W_i$ 是PWT卡上栅元 $i$ 的数据项:

- 1) 若 $W_i \geq 0$ :  $W_p \geq W_i \times I_i / I_s$ 时,光子权重不变;  $W_p < W_i \times I_i / I_s$ 时,取 $W_p = W_i \times I_i / I_s$ ,用轮盘赌决定光子是否存活。若 $W_i = 0$ ,诱发光子权重不变,都存活。
- 2) 若 $W_i < 0$ : 用 $-W_i \times W_s \times I_i / I_s$ 替代 $W_i \times I_i / I_s$ 作为是否启动轮盘赌和存活光子权重的判据。若 $W_i = -1E6$ : 关闭栅元 $i$ 的光子产生。

如果希望较少的诱发光子(携带较大权重),应增大 $W_i$ 的绝对值。如果缺省此卡,则所有栅元的 $W_i$ 均被置为-1。

## E. EXT 指数变换卡 (Exponential Transform Card)

## F. VECT 矢量输入卡 (Vector Input Card)

格式: EXT:n  $A_1 A_2 \dots A_l$

n: N, 中子; P, 光子

$A_i$ : 对应栅元  $i$  的数据项, 格式为  $QV_m$ ,

其中  $Q$  是拉伸长度,  $V_m$  是坐标轴或

VECT 卡定义的方向, 表示拉伸方向

l: 栅元总数

格式: VECT  $V_m X_m Y_m Z_m \dots V_n X_n Y_n Z_n$

m, n: 标记矢量  $V_m$ ,  $V_n$  的符号, 任意

$X_m Y_m Z_m$ : 定义  $V_m$  方向的末点坐标

指数变换方法是通过调整总截面来拉伸特定方向上碰撞之间的径迹长度, 权重则相应调低。总截面调整为  $\Sigma_t^* = \Sigma_t(1 - p\mu)$ , 其中  $\Sigma_t^*$  是调整后总截面,  $\Sigma_t$  是真实总截面,  $p$  是拉伸参数,  $\mu$  是粒子方向和拉伸方向夹角余弦。

EXT 卡数据项中  $Q$  可以是绝对值小于 1 的常数或符号  $S$ , 前一种情况下该常数绝对值就是拉伸参数  $p$ , 后一种情况下  $p = \Sigma_a / \Sigma_t$ ,  $\Sigma_a$  是俘获截面。  $A_i = 0$  表示该栅元中不拉伸。

可以用 VECT 卡指定的  $V_m$  在 EXT 卡数据项中定义拉伸方向, 即碰撞点到  $(X_m Y_m Z_m)$  点的方向。或者用  $X$ 、 $Y$  或  $Z$  表示拉伸方向与坐标轴平行。这两种情况下若  $Q$  为负值都表示拉伸方向与  $V_m$  相反。也可以在  $A_i$  项中不设置  $V_m$ , 表示各项同性地拉伸, 一般不推荐使用这个方法, 除非想在飞行方向上做暗含俘获处理, 这时  $Q$  填写符号  $S$ 。

在强迫碰撞栅元中或在没有权窗控制的栅元中不应使用指数变换。仅当粒子通量按指数分布时, 如强吸收问题, 使用指数变换才较为合适。

## G. FCL 强迫碰撞卡 (Forced Collision Card)

格式: FCL:n  $x_1 x_2 \dots x_l$

n: N, 中子; P, 光子

$x_i$ : 第  $i$  栅元强迫碰撞控制参数,

$-1 < x_i < 1$

## 1: 栅元总数

FCL卡控制栅元内中子或光子的强迫碰撞，主要用于光疏介质中的粒子输运问题，对向探测器或DXTRAN球产生贡献也非常有用。粒子进入强迫碰撞栅元时在界面上不做权窗处理。

如果 $x_i \neq 0$ ，进入栅元 $i$ 的全部粒子被分成碰撞部分和不碰撞部分，并配以相应的权重。如果 $|x_i| \neq 1$ ，对碰撞部分用存活几率 $|x_i|$ 做轮盘赌以防止径迹过多。如果一些强迫碰撞栅元彼此邻近，则建议选 $|x_i| < 1$ 。

若 $x_i < 0$ ，强迫碰撞仅用于进入栅元 $i$ 的粒子。强迫碰撞之后，忽略权重截断并以通常的方式处理后续碰撞。不忽略权窗，并在对探测器或DXTRAN球作贡献之后使用权窗。

若 $x_i > 0$ ，对进入栅元 $i$ 的粒子和权截断或权窗处理后存活的粒子作强迫碰撞处理。粒子将继续被分成不碰撞和碰撞(概率 $|x_i|$ )两部分，直到粒子被权截断或权窗杀死为止。

## H-J. 权窗卡

除重要性(IMP)卡和能量分裂(ESPLT)卡外，权窗是对指定的位置和能量提供分裂和轮盘赌依据的另一种方法。

权窗的优点是：

- 1) 权窗同时提供能量和位置的重要性函数；
- 2) 权窗控制粒子的权重；
- 3) 与其它减小方差的技巧不矛盾，如指数变换(EXT卡)；
- 4) 粒子跨越界面或碰撞时都可以起作用；
- 5) 能控制分裂或轮盘赌的程度；
- 6) 可在指定的位置或能量区域关闭权窗；
- 7) 可用权窗产生器自动生成权窗。

权窗的缺点是：

- 1) 权窗不如重要性或能量分裂直接明了；
- 2) 当改变源的权重时，权窗必须重新归一。

## H. WWE 权窗能量卡 (Weight Window Energy Card)

## I. WWN 权窗边界卡 (Weight Window Bound Card)

## J. WWP 权窗参数卡 (Weight Window Parameter Card)

格式: WWE:n  $E_1$   $E_2$  ...  $E_k$

n: N, 中子; P, 光子

$E_i$ : 能量间隔上限,  $E_{i-1} < E < E_i$ ,  $E_0=0$

k: 能量间隔数, 要求  $k < 100$

格式: WWNi:n  $W_{i1}$   $W_{i2}$  ...  $W_{i1}$

n: N, 中子; P, 光子

$W_{ij}$ : 在栅元 j、能量区间为  $E_{i-1} < E < E_i$  的权的下限,

若没有 WWE 卡,  $i=1$

l: 栅元总数

格式: WWP:n WUP WSURV MXSPL WHERE SWITCH

n: N, 中子; P, 光子

WUP: 当权超过 WUP 与权窗下限之积时, 粒子将被分裂, 要求  $WUP \geq 2$

WSURV: 对轮盘赌存活的粒子, 它的权变为 WSURV 与权窗下限之积, 要求  $1 < WSURV < WUP$

MXSPL: 粒子分裂时, 分支数不超过 MXSPL, 做轮盘赌时, 存活概率不小于  $1/MXSPL$ , 要求  $MXSPL > 1$

WHERE: 此参数用于指定在什么地方检查粒子权重,  
=-1, 仅在碰撞点处检查,  
=0, 在碰撞点和界面上检查,

=1, 仅在界面上检查

SWITCH 若大于 0, 权窗下限将被指定为

: SWITCH除以粒子所在栅元重要性

WWE卡定义在WWN卡上指定的权窗边界的能量间隔。最低能量是0, 在WWE卡上不填写。如果没有WWE卡而又使用了权窗, 则对应于要计算的问题只建立一个能量区间。

WWN卡指定与位置及能量相关的权窗下限, 它必须与WWP卡一起使用, 如果权窗与能量相关, 还应有WWE卡。如果使用WWN:n卡, 可以不用IMP:n卡, 这里n是粒子类型。如果 $W_{ij} < 0$ , 则进入栅元j的粒子全被杀死, 这时必须保证该栅元所有能区的 $W_{ij}$ 都小于零。如果 $W_{ij} > 0$ , 进入栅元j或在栅元j碰撞的粒子根据WWP卡的选择做分裂或轮盘赌。如果 $W_{ij} = 0$ , 则关掉栅元j能区i的权窗处理, 改用权截断处理。

WWP卡上的参数用于控制WWN卡上指定的权窗下限的应用。缺省参数值为WUP=5, WSURV=0.6×WUP, MXSPL=5, WHERE=0, SWITCH=0。如果不使用WWN卡, 也可以使用IMP卡与WWP卡设置权窗下限。

## K-L. 权窗产生器

权窗产生器估算由用户指定的位置-能量相空间中区域的重要性, 然后按与该重要性成反比关系计算权窗下限。权窗产生器应该用于记数与角度没多大关系的问题。

权窗产生器估算相空间的平均重要性, 如果区域太大, 其内部重要性变化也较大, 平均重要性不能很好地代表这个区域的特征。不适当的几何说明会导致栅元之间重要性相差很大, 恰好权窗产生器能够提供重要性方面的信息。

### K. WWG 权窗产生器卡 (Weight Window Generation Card)

### L. WWGE 权窗产生器能量卡 (Weight Window Generation Energy Card)

格式: WWG  $I_t$   $I_c$   $W_g$   $X_r$   $Y_r$   $Z_r$  J

$I_t$ : 问题的记数号 (Fn卡上的n)

由TFn卡定义的对权窗产生器合适的特定记数箱



$I_c$ : 参考栅元, 一般为源栅元

$W_g$ : 指定  $I_c$  栅元的权窗下限。当  $W_g=0$  时,  
这个值将是源权重的一半。

$X_r$   $Y_r$  粒子朝向点或离开点的坐标

$Z_r$ :

J: 调试打印标记。=1打印, =0不打印

格式: WWGE:n  $E_1$   $E_2$  ...  $E_j$

n: N, 中子; P, 光子

$E_i$ : 能量间隔上限,  $E_{i-1} < E < E_i$ ,  $E_0=0$

j: 能量间隔数,  $j < 100$

WWG卡用于产生  $I_c$  记数的最佳重要性函数, 在输出文件OUTP中做打印和评价, 所产生的权窗用于以后运行中的WWP和WWNi卡。对许多问题, 这种产生的重要性分布(权重下限)比有经验的用户在IMP卡上猜想的好。

为了产生与能量有关的权窗, 需使用WWGE卡。如果没有WWGE卡, 又要使用权窗产生器, 则根据问题的能量范围只产生一个能量区间。如果有WWGE卡, 但卡上没有数据项, 则产生10个能区, 每个  $E_i=10^{i-8}$  MeV。

## M. PDn 探测器贡献卡 (Detector Contribution Card)

格式: PDn  $P_1$   $P_2$  ...  $P_l$

n: 记数号

$P_i$ : 栅元i对探测器贡献的概率

l: 栅元总数

PDn卡减少对给定探测器相对不太重要的栅元对探测器记数的贡献, 节省了计算时间。在栅元i的每次碰撞, 将以概率  $P_i$  判断它是否参与探测器记数。为了保证结果无偏, 当判定它参与记数时, 权重除以  $P_i$ ,  $P_i=0$  的栅元除外。用户可以对离探测器较远(与平均自由程比较)的栅元置以小于1的  $P_i$  值, 这样可以提高计算速度。也可以有选择地对某些栅元置  $P_i=0$ , 从而抑制这些栅元对探测器的贡献。

此卡缺省  $P_i=1$ 。可以建立缺省探测器贡献卡PD0。

## N. DXC DXTRAN 贡献卡 (DXTRAN Contribution Card)

格式: DXC:n P<sub>1</sub> P<sub>2</sub> ... P<sub>l</sub>

n: N为中子, P为光子

P<sub>i</sub>: 栅元i对DXTRAN球贡献的概率

l: 栅元总数

此卡用法与PDn卡类似, 但它控制对DXTRAN球的贡献。

## O. 例子

例1 IMP:N .25 2M 2M 2M 1

问题中共有5个栅元, 中子重要性分别是0.25、0.5、1、2和1。

例2 EXT:N 0 0 .7V2 S -SV2 -.6V9 0 .5V9

SZ -.4X

VECT V9 0 0 0 V2 1 1 1

EXT卡上10个数据项对应10个栅元, 对栅元1、2、7不做指数变换, 其它栅元的径迹拉伸见下表:

栅元	A <sub>i</sub>	Q	V <sub>m</sub>	拉伸参数	方向
3	.7V2	.7	V2	p=.7	指向点(1, 1, 1)
4	S	S		p=Σ <sub>a</sub> /Σ <sub>t</sub>	粒子方向
5	-SV2	S	-V2	p=Σ <sub>a</sub> /Σ <sub>t</sub>	远离点(1, 1, 1)
6	-.6V9	.6	-V9	p=.6	远离原点
8	.5V9	.5	V9	p=.5	指向原点
9	SZ	S	Z	p=Σ <sub>a</sub> /Σ <sub>t</sub>	沿着X轴
10	-.4X	.4	-X	p=.4	沿着-X轴

例3WWE:N E1 E2 E3

WWWN1:N W11 W12 W13 W14

WWWN2:N W21 W22 W23 W24

WWWN3:N W31 W32 W33 W34

这些卡对一个有四个栅元的中子问题定义了三个能量区间及相应的权窗边界。

例4WWN1:P W11 W12 W13

这个例子没有WWE卡，只对三个栅元定义与能量无关的光子权窗。

## P. 思考题

1. 栅元重要性卡IMP有什么作用，如何填写。什么时候必须给出栅元重要性卡，什么时候可以省略IMP:P卡。
2. 栅元体积卡VOL和曲面面积卡AREA有什么作用，如何填写。什么情况下使用它们，二者可被什么卡取代。
3. 什么问题中可以使用光子权重卡PWT，它有什么作用，如何填写。PWT卡上数据项为正、为负和为零各有什么含义，缺省为何值。判断是否产生光子时为什么要把 $W_i$ 乘以 $I_i/I_s$ 。如何关掉某栅元的光子产生。
4. 什么情况下考虑使用指数变换卡EXT(及矢量输入卡VECT)。卡上数据项如何填写，数据项的正负号有什么含义。什么情况下考虑使用强迫碰撞卡FCL，卡上数据项的正负号有什么含义，数据项缺省为何值。不同时使用EXT卡和FCL卡的物理原因是什么。
5. 权窗卡是比较常用和比较重要的卡，它和重要性及能量劈裂卡相比有什么优点。如何用WWE卡设置权窗的能量区间。如何使用WWN卡设置某一栅元某一能区的权重下限，数据项为正为负各有什么含义。WWP卡上各参数有什么作用，当粒子权重低于权重下限或高于权重上限时MCNP如何处理。
6. 权窗产生器有什么作用。WWG卡上各项含义是什么。如何使用权窗产生器自动计算栅元权窗。
7. 探测器贡献卡PDn和DXTRAN贡献卡DXC各有什么作用。

## §5.3 源的描述

MCNP3B提供4种描述源的方式：通用源(使用SDEF卡)、曲面源(SSW和SSR卡)、临界源

蒙特卡罗方法与 MCNP 程序入门  
(KCODE和KSRC卡) 和用户提供源(子程序SOURCE)。

曲面源描述方式是在初始运行MCNP时用SSW卡将以一定方向穿过某些曲面或进入某些栅元的粒子轨迹记录下来，接续计算时再以这些粒子作为源粒子，用SSR卡读出后继续计算。这里讲的曲面源描述方式和后面介绍的用SDEF卡在曲面上定义源的曲面源是两个概念。

临界源用于计算裂变问题。

如果INP文件中没有SDEF、SSR或KCODE卡，便采用用户提供的子程序SOURCE描述源。

由于我们常用的只是通用源描述方式，下面仅就这种源的描述方法进行介绍。描述通用源分布函数的相关卡还有SIn、SPn、SBn和DSn。

助记符	卡片类型	节内编号
SDEF	通用源	A
SIn	源的信息	B
SPn	源的概率	C
SBn	源的偏倚	D
DSn	相关的源分布	E
SCn	源的注释	F

MCNP对所产生的每一个源粒子确定以下参量：

ERG	粒子能量
TME	初始时间
UUU, VVV, WWW	飞行方向
XXX, YYY, ZZZ	粒子位置
IPT	哪种粒子，中子=1，光子=2
WGT	粒子权重
ICL	发射粒子的栅元
JSU	发射曲面。若不在曲面上，=0

## A. SDEF 通用源卡 (General Source Define Card)

格式：SDEF 源变量1=说明 源变量2=说明 ... ..

用途：使用通用源的问题需要此卡。

所有源变量都可以缺省，所有源变量都有缺省值。等号可以用空格替代。源变量的说明有三种形式：1) 显值；2) D加分布号；3) 在另一个变量前加F，后面跟着D和分布号。var=Dn意味着从分布n抽取源变量var的值，每个分布仅用于一个源变量。var Fvar' Dn意味着从分布n抽取源变量var，分布n与变量var' 有关，仅允许一级相关。上述描述形式可以理解为分三级：当源变量有显值或使用缺省值时仅存在第一级描述；当用概率分布给出源变量时出现第二级，这一级要求SI、SP卡或其一；当一个源变量与另一变量相关时出现第三级，这时要求有DS卡。

产生哪种源粒子(IPT值)由MODE卡确定，MODE N和MODE N P的源粒子是中子，MODE P的源粒子是光子。

SDEF卡的源变量和最终要确定的源粒子参量不完全是一一对应关系，下表给出源变量及其缺省值：

变 量	意义	缺省值
CEL	源粒子所在栅元	由XXX YYY ZZZ或UUU VVV WWW确定
SUR	源粒子所在曲面	零，表示栅元源
ERG	源粒子能量 (MeV)	14MeV
TME	初始时间 (shake= $10^{-8}$ s)	0
DIR	$\mu$ ，表示飞行方向和VEC夹角(极角)的余弦值。 (方位角则总在 $0^\circ \sim 360^\circ$ 上均匀抽取)。	体源： $\mu$ 在-1至1之间均匀分布 (各向同性) 面源：在 $0 \sim 1$ 之间 $P(\mu)=2\mu$ 分布 (余弦分布)
VEC	DIR的参考矢量	体源：不能缺省，除非各向同性 面源：垂直于符号由NRM确定的面
NRM	曲面法线的符号	+1
POS	抽样位置参考点	0, 0, 0
RAD	抽样位置离开POS或AXS的径向距离	0
EXT	栅元源：沿着AXS离开POS的距离 曲面源：偏离AXS方向的角度的余弦	0

AXS	EXT和RAD的参考矢量	无方向
X	抽样位置的X坐标	无X
Y	抽样位置的Y坐标	无Y
Z	抽样位置的Z坐标	无Z
CCC	栅元取舍	无栅元取舍
ARA	曲面的面积	计算面积, 或ARA=1
WGT	源粒子权重	1
EFF	舍取抽样位置的有效指标	0.01

WGT和EFF必须是数值, 不是分布。大部分源变量是标量, 要求一个值, 但VEC、POS和AXS是矢量, 要求三个数为一组的说明, 即矢量的三个分量。

源粒子初始位置的坐标由SUR、POS、RAD、EXT、AXS、X、Y、Z和CCC的各种组合来确定。用这些源变量可以指定三种不同类型的体分布和三种不同类型的曲面分布, 这些分布的退化形式是线源和点源。

三个体分布是长方、球和圆柱体。在SDEF卡上如果有CEL变量, 就可以用体分布在一个栅元内均匀抽样。

1) 用变量X、Y、Z指定一个长方体的体分布, 栅元的面要垂直于坐标轴。如果这三个值都是常数, 体源退化为点源。其它的退化形式是线源和平面矩形源。

2) 用变量POS和RAD指定一个球的体分布, 这时不能使用X、Y、Z和AXS。POS定义球中心, RAD定义半径, 在球面上均匀抽取粒子。如果RAD是一个 $a=2$ 的幂函数分布(这是缺省情况), 则得到一个球体内的均匀抽样。

3) 用变量POS、AXS、RAD和EXT指定一个圆柱体分布。圆柱体的轴沿AXS方向通过POS。在以RAD为半径的圆周上均匀抽取粒子的位置, 圆心在圆柱体轴上, 该圆位于垂直于AXS离开POS距离EXT的面上。圆柱壳体内均匀分布的设置方法是, 在SIn卡上填写圆柱两端离开POS的距离EXT、RAD的内半径和外半径, MCNP将按缺省值给出两个EXT之间的均匀抽样和两个RAD之间的幂抽样( $a=1$ )。一个常用的退化情况是EXT=0, 即平面圆形源。

对于曲面分布, SUR $\neq$ 0。若指定X、Y、Z(必须确保其分布在指定的曲面上), 它们确定源粒子位置; 若否, 则在SUR指定的面上抽取这个位置, 曲面的形状决定了抽取方法:

1) 如果是椭球面, 则按面积均匀抽取粒子位置。

2) 如果是球面, 若没有指定AXS, 按面积均匀抽样; 指定AXS后, EXT的值做为AXS方向和球的中心到粒子位置点矢量之间夹角的余弦。

3) 如果是平面, 则按面积均匀抽样源粒子位置, 除非还使用其它源变量描述。若指定

POS值, 必须保证该点在曲面上。如果再指定RAD, 则在以POS为中心、RAD为半径的圆周上抽取粒子位置。如果RAD的分布是一个 $a=1$ 的幂函数(缺省), 则在圆内按面积均匀抽样。

栅元取舍对栅元源和曲面源都适用。如CCC出现, 按上述方法抽取的位置在CCC栅元内则接受, 不在CCC栅元内的舍去并重新抽样。

源变量SUR、VEC、NRM和DIR确定源粒子初始飞行方向。若参照参考方向VEC抽取飞行方向, 可从一个分布抽取极角余弦DIR值, 方位角在 $0 \sim 360^\circ$ 之间均匀分布。若一个体分布(SUR=0)没有指定VEC和DIR, 则为各向同性分布。如果对一个曲面源的分布没有指定VEC, 按缺省使用该曲面的由NRM指定符号的法线方向。如果对一个曲面源的分布没有指定DIR, 则按缺省使用余弦分布 $P(\mu)=2\mu$ ,  $0 < \mu < 1$ 。使用DIR的偏倚分布可使较多的源粒子朝着记数区域发射, 这时用指数分布(-31)一般较为合适。允许DIR取离散值, DIR=1表示VEC方向上的单向源。

有效指标EFF适用于CCC或CEL的舍弃。如果在任何CEL或CCC指定的栅元中接受率太低, 问题将被终止。终止判据是:  $MAX(成功次数, 10)/试验次数 < EFF$ 。

## B. SIn 源信息卡 (Source Information Card)

## C. SPn 源概率卡 (Source Probability Card)

## D. SBn 源偏倚卡 (Source Bias Card)

格式: SIn option  $I_1 \dots I_k$

n: 分布号,  $1 \sim 999$

option  $I_i$ 的说明。允许值为:

: 空格或H - 定义直方分布的箱边界, 标量(缺省)

A - 定义概率密度分布的一些点

L - 定义离散的一些源变量值

S - 定义一些分布号

$I_1 \dots$  源变量值或分布号

$\dots I_k$  :

格式: SPn option  $P_1 \dots P_k$

或者: SPn f a b

n: 分布号,  $1 \sim 999$

option:  $P_i$  的说明。允许值为:

空格或D - 定义SI卡上的H或L分布的概率。SI卡上A分布的概率密度。(缺省)

C - 定义SI卡上的H或L分布的累积概率

V - 仅对栅元分布, 定义概率与栅元体积成正比。有 $P_i$ 时, 要乘以 $P_i$

$P_1 \dots$  源变量概率

$\dots P_k$ :

f: 内部函数的识别符

a b: 内部函数的输入参数

格式: SBn option  $B_1 \dots B_k$

或者: SBn f a b

SBn卡上的n, option, f, a, b均和SPn卡一样, 只有一点不同, f只能取-21或-31。

$B_1 \dots B_k$ : 源变量偏倚的概率

SP卡的第一种格式用于和相对应的SI卡联合定义一个概率分布。SI卡的数据项是源变量的值或下一级分布号, SP卡的数据项是SI卡对应项的概率。

使用H选项时, SI卡上数据项的值应该单调上升, 这些数据值是箱边界。SP卡第一个数据项必须为0, 后面的数据项是相应箱的概率或累积概率, 取决于使用D或C选项, 这些概率可不归一。抽样过程如下: 先根据箱的概率抽取一个箱, 然后在这个箱内均匀抽样。

使用A选项时, SI卡上数据项的值应该单调上升, 这些数据值定义源变量的概率密度分布, 最小和最大值定义边界。SP卡数据项是对应SI卡数据的概率密度, 这些概率密度可不归一, 第一项及最后一项数据一般为0。抽样过程中, 在指定值之间的概率密度靠线性插值得到。

使用L选项时, SI卡上数据项是源变量离散值, 如一些栅元号或光子能谱中一些能量, 不必单调上升。SP卡上的数据项是离散点的概率或累积概率, 取决于使用D或C选项。

S选项允许用另一个分布来描述本分布, MCNP能够处理20层这种结构。此时每一个分布号前可加D, D也可以省略。分布号为0表示使用这个源变量的缺省值。借助于S选项, 一个分布可以在多处出现, 但一个完整的分布描述只能用于一个源变量。

仅当源变量是CEL时才使用SP卡上的V选项。当栅元体积是粒子发射概率的一个因子时, 这个选项比较有用。如果MCNP不能计算该栅元体积, 必须在VOL卡中指定, 否则将出现致命错误。

使用SB卡是为了给抽样过程提供一个概率分布, 这个分布与SP卡的真实概率分布不同, 只是用于偏倚源变量的抽样以提高问题的统计精度。为了校正这个偏倚, 每个源粒子的权



重也被调整。适用于SP卡第一种格式的规定也适合于SB卡。

SP卡的第二种格式的第一项是负数，表示使用一个内部连续密度函数描述。下表给出部分内部函数：

源变量	函数号及参数	函数名	函数形式
DIR、RAD或EXT	-21 a	幂指数	$P(x)=C x ^a$
DIR或EXT	-31 a	指数	$P(x)=Ce^{ax}$
TME	-41 a b	高斯	$P(t)=C\exp[-(1.665(t-b)/a)^2]$

f = -21, 幂指数,  $P(x)=C|x|^a$ 。a的缺省值取决于变量x, 对于x=DIR, a=1; 对RAD, a=2, 但在定义AXS或JSU=0的情况下a=1; 对EXT, a=0。

f = -31, 指数,  $P(x)=Ce^{ax}$ 。a缺省值等于0。

f = -41, 高斯分布,  $P(t)=C\exp[-(1.665(t-b)/a)^2]$ 。其中a是FWHM, 无缺省值; b是平均值, 缺省为0。

下面给出使用内部函数的几种特殊缺省情况：

1) 对DIR、RAD或EXT的变量只要有SI卡出现就行。MCNP自动提供带缺省参数值的SP f卡。对DIR, f=-21, 但对JSU=0时的DIR, f=-31。

2) 对DIR或EXT的变量, 只要SP - 21或SP - 31出现, 对SP - 21由MCNP提供SI 0 1, 对SP - 31提供SI - 1 1。

3) 对RAD的变量, 若SI x及SP-21出现, 则把SI视为SI 0 x。

4) 对EXT的变量, 若SI x及SP-21或SP -31出现, 则把SI视为SI -x x。

## E. DSn 相关源分布卡 (Dependent Source Distribution Card)

格式: DSn option J<sub>1</sub> . . . J<sub>k</sub>

或者: DSn T I<sub>1</sub> J<sub>1</sub> . . . I<sub>k</sub> J<sub>k</sub>

或者: DSn Q V<sub>1</sub> S<sub>1</sub> . . . V<sub>k</sub> S<sub>k</sub>

n: 分布号, 1 ~ 999

option J<sub>i</sub>的说明, 允许值及相应数据项的含义是:

: 空格或H—连续分布的源变量的一些值, 标量

L—离散的源变量的一些值

S—分布号

T: 独立量的值后面跟有相关量的值, 这些变量

必须是离散的标量值

$I_i$ : 独立变量值

$J_i$ : 相关变量值

Q: 独立量的值后面跟有分布号, 独立变量是标量

$V_i$ : 一组单调增加的独立变量的值

$S_i$ : 相关变量的分布号

对与另一个源变量有关的一个变量, 使用DS卡替代SI卡, 即不使用SP卡也不使用SB卡。

MCNP首先根据独立变量概率函数抽取其值, 然后根据DS卡的格式确定相关变量的值。

如果使用第一种格式, DS卡必须与独立变量分布的SI卡具有同样多的箱数或离散点。如果相关变量和独立变量都是连续型或离散型的, 二者共享相同的分布函数。

如果使用T选项, 则在 $I_i$ 中寻找独立变量值, 如果找到一对, 相关变量取 $J_i$ , 如果没找到一对, 相关变量取缺省值。T选项常用于相关变量取缺省值时减少输入项。

如果使用Q选择,  $V_i$ 定义一组独立变量的箱。从 $V_i$ 开始, 独立变量的抽样值与 $V_i$ 比较, 如果小于等于 $V_i$ 则由 $S_i$ 分布抽取相关变量的值。 $V_k$ 的值必须大于等于独立变量任何可能值。如果分布号是0, 则使用其缺省值。当独立变量的分布是内部函数时, Q选项是SD卡唯一可用的一种格式。

## F. SCn 源注释卡 (Source Comment Card)

格式: SCn 注释

n: 源分布号, 1 ~ 999

在输出文件源分布表和源分布频率表中作为源分布n的标题部分打印这个注释。

## G. 通用源的例子

例1: SDEF (没有源变量说明项)

各项源变量都取缺省值, 这个卡指定一个位置在(0, 0, 0), 初始时间为0, 源粒子权重为1, 能量14MeV的各向同性点源。

例2: SDEF ERG=D1 POS=x y z WGT=w

SI1 H  $E_1$   $E_2$  ...  $E_k$

SP1 D 0 P<sub>2</sub> ... P<sub>k</sub>

SB1 D 0 B<sub>2</sub> ... B<sub>k</sub>

这是一个位置在(x, y, z)，具有偏倚抽样、直方连续能量分布，源粒子权重为w的各向同性点源。

例3: SDEF SUR=m AXS=i j k EXT=D6

SB6 -31 1.5

这是一个在曲面m上的源，AXS和EXT同时出现意味着曲面m是一个球面。由于没有指定描述发射方向的源变量VEC和DIR，按照缺省，VEC取发射点处球面正法线方向，DIR按余弦分布。通过指数偏倚，朝(i, j, k)方向偏倚曲面上的位置，其最小和最大源粒子权重是 $e^{-1.5}=0.223$ 和 $e^{1.5}=4.48$ 。按照缺省，MCNP提供SI6 -1 1和SP6 -31 0卡，即整体效果上发射位置在球面上均匀分布。

例4: SDEF SUR=m NRM=-1 DIR=D1 WGT=w

SB1 -21 2

这是一个球面m上指向内部的源。按照缺省，MCNP提供两个卡，SI1 0 1和SP1 -21 1。SB1卡的方向偏倚使得朝着球心的轨迹密度比不使用偏倚的余弦分布要高。

例5: SDEF POS=x y z CEL=m RAD=D2

EXT=D3 AXS=i j k

SI2 r<sub>1</sub> r<sub>2</sub>

SI3 1

这个源在一个近似圆柱的栅元m的体积内均匀分布，栅元m由中心在(x, y, z)的抽样体积所包围。抽样的轴是方向i, j, k上通过(x, y, z)的直线。抽样体的内外半径分别是r<sub>1</sub>和r<sub>2</sub>，并且由(x, y, z)沿着i, j, k方向延长±1。按照缺省，MCNP把SI3 1视为SI3 -1 1，并且提供SP2 -21 1和SP3 -21 0卡。

例6: SDEF SUR=m POS=x y z RAD=D1 DIR=1

SI1 r

这是从平面m发射的其正法线方向的一个单向源。在以位置(x, y, z)为中心，以r为半径的圆内按面积均匀抽样。按缺省，MCNP视SI1 r为SI1 0 r，并提供SP1 -21 2卡。

例7: SDEF POS D1 ERG FPOS D2

SI1 L 5 3.3 6 75 3.3 6

SP1 .3 .7

DS2 S 3 0

SI3 H 2 10 14

SP3 D 0 1 2

这是一个在两个位置上的各向同性源，由SI1卡的两个x, y, z给出，以0.3和0.7的概率分别选择这两个位置。每一个位置有不同能谱，由DS2给出。

## H. 思考题

1. 定义通用源卡的源变量有哪些，各有什么作用。
2. 对源粒子需要确定哪些参量，它们和SDEF卡的源变量有怎样的对应关系。
3. 何时需要SI卡，SI和SP卡各种选项的意义是什么，两者数据项有怎样的对应关系。
4. 使用SB卡描述的概率分布与SP卡描述的分布意义有何不同。
5. 常用的SP卡内部函数有哪些，MCNP怎样给RAD和DIR指定带缺省值的内部函数。
6. 相关源分布SD卡有什么作用。

## 习题

1. C/O测井仪器发射14MeV的脉冲中子，发射时间宽度是10 $\mu$ s。考虑到探测器到中子源的距离与源本身的尺寸相比很大，可以认为是点源。请给出这种仪器中源的描述。
2. 三相流测井仪中使用109Cd放射源，发射22keV和88keV光子，两种能量光子的强度比是4:1。实际仪器中源的活性面直径4mm，由于背面有源衬，可以近似地认为它是单向源。请给出这种源的描述。

## §5.4 记数方式的指定

记数是 MCNP 模拟结果的记录。用户若想得到某种模拟结果信息，如某些位置处粒子的

面流量、点通量等，可用下列记数卡的相应组合来指定记数方式，其中 Fna 卡是必须有的，其它记数卡供选择使用。

助记名	卡片类型	节内编号
Fna	记数类型	A
FCn	记数注释	B
En	记数能量	C
Tn	记数时间	D
Cn	记数余弦	E
EMn	记数能量乘子	F
TMn	记数时间乘子	G
CMn	记数余弦乘子	H
DEn/DF n	剂量能量/剂量函数	I
CFn	记数栅元标志	J
SFn	记数界面标志	K
FSn	记数片段划分	L
SDn	记数片段的体积/面积	M
FQn	记数打印层次	N
TFn	记数涨落打印	O
DD	探测器和DXTRAN诊断指定	P
DXT	DXTRAN的参量	Q
FTn	记数特殊处理	R

n 是用户选择的记数号，可取 1~999，末位有特殊含义。同一个记数的描述卡使用相同的 n 值。

以上卡片中的大部分是用来描述记数箱的，所谓记数箱 (tally bin) 就是由记数空间 (如余弦、能量、时间等) 分割成的相邻区间。如果用户把记数分成一些箱，MCNP 除给出箱内结果外，一般还给出各箱记数之和，如各种能量记数的总和。如果用户不给出箱边界，则使用无边界的箱。

记数都被归一化成对应一个源粒子。

MCNP 对每个箱记数和总记数都给出相应于标准差的相对误差。误差大于 50% 的结果不能

使用，误差在50%~20%之间的结果的实际误差可能是几倍，误差在20%~10%之间的结果仍是不可靠的，误差小于10%的结果一般是可靠的(并非总是可靠的)，对探测器记数一般要求误差在5%以内。只要记数的FOM随着样本数的变化仍不稳定，结果便是不可靠的。

## A. Fna 记数卡 (Fna Tally Card)

常用的 MCNP 标准记数如下表所示。

助记名	类型说明	Fn单位	*Fn单位
F1:N或F1:P	穿过界面的积分流量	粒子数	MeV
F2:N或F2:P	穿过界面的平均通量	粒子数/cm <sup>2</sup>	MeV/cm <sup>2</sup>
F4:N或F4:P	栅元的平均通量	粒子数/cm <sup>2</sup>	MeV/cm <sup>2</sup>
F5a:N或 F5a:P	点或环探测器上通量	粒子数/cm <sup>2</sup>	MeV/cm <sup>2</sup>
F6:N或 F6:N, P 或F6:P	栅元上平均沉积能量	MeV/g	Jerk/g

MCNP通过记数号和粒子类型来识别记数的类型。记数号的末位用于区别记数类型，如F4:N、F14:N、F104:N和F234:N都是对栅元的中子通量记数，甚至可能都是对相同栅元记数，比如说它们有不同的箱或乘子。用户可以按自己的需要指定多个类型的记数(记数总数要小于100、探测器总数要小于20)，使它们每个具有不同的箱或标志。注意相同记数号的Fn:N和Fn:P卡不能同时出现。

记数类型1、2、4、5通常记录粒子数，然而如果在Fn卡前加\*号，则记录能量与权重之积。记数类型6前也可以加\*号，记数量的单位将由MeV/g变成Jerk，1Jerk = 10<sup>9</sup>J。

### a. 曲面和栅元记数(记数类型 1,2,4,6)

简单格式: Fn:P1 S<sub>1</sub> ... S<sub>k</sub>

一般格式: Fn:P1 S<sub>1</sub> (S<sub>2</sub> ... S<sub>3</sub>) (S<sub>4</sub> ... S<sub>5</sub>) S<sub>6</sub> S<sub>7</sub> ...

n: 记数号

P1: N或P或N, P

$S_i$ : 用于记数的问题曲面号或栅元号或T

按上面的简单格式, MCNP对所要求的记数建立k个曲面或栅元的箱, 分别对每个曲面或栅元列出结果。按一般格式, 对分别列出的每个曲面或栅元以及用括号括起来的曲面或栅元的集合各建立一个箱。括号内部的项也可以单独出现或在其它集合中出现。括号表示对其内那些项的集合作记数。对不做平均的记数(记数类型1), 集合的记数表示集合内各项的记数之和; 对平均记数(记数类型2、4和6), 集合的记数则是集合内各项记数的平均结果。符号T表示卡上所有数据项的合集。

如果曲面或栅元的记数标记多于11个字符(含空格), 为打印方便, MCNP将为其指定一个字母或数字标识符, 这个标识符[如, 若G表示(1 2 3 4 5 6)]将随记数结果一起打印。

用于记数的曲面必须是构成实际几何(栅元)的界面, 在界面的哪一边记数由坐向指定。F2记数要求界面面积, MCNP所计算的面积是可能作为多个非真空栅元边界的曲面的总面积, 而不是包围特定栅元的一部分面积。如果MCNP不能计算某种曲面的面积, 或需要一个曲面的片段, 可以用FSn卡将曲面分段, 并用SDn卡输入适当的值。作为解决问题的另一种方法, 可以重新定义几何构造。

## b. 探测器记数(记数类型 5)

点探测器格式:  $F_n: P1 \ x \ y \ z \ \pm R_0$

n: 记数号

P1: N或P

x y z: 探测点的位置

$\pm R_0$ : 探测点处邻域球半径,  $+R_0$ 以cm为单位,

$-R_0$ 以平均自由程为单位(空腔区不能用 $-R_0$ )

环探测器格式:  $F_{na}: P1 \ a_0 \ r \ \pm R_0$

n: 记数号

a: X、Y或Z, 对称轴

P1: N或P

$a_0$ : 环平面在相应对称轴上的截距(cm)

r: 环半径(cm)

$\pm R_0$ : 与点探测器相同, 但此时的邻域球心选在

环上的一点

缺省值:  $R_0=0$

若想用同一记数号 $n$ 或 $na$ 指定多个探测器,把上述参数组在同一张 $F_n$ 卡上接续地给出即可。如果相同类型的多个探测器(如 $F5:N$ 和 $F15:N$ )在同一位置上,计算碰撞点对探测器的贡献时只花一份时间,并不额外增加机时的开销。

探测器记数通常分两部分:1)对探测器的总贡献;2)源粒子对探测器的直接(或无碰撞)贡献。直接贡献总是包含在总贡献之内的,如果在探测器记数卡的末尾加上 $ND$ ,对那个记录不打印直接贡献。

选择 $R_0$ 的经验法则是: $R_0$ 应是球内粒子平均能量的约 $1/8 \sim 1/2$ 倍平均自由程。如果探测点位于空腔中, $R_0$ 取0。不推荐用平均自由程的方法给 $R_0$ ,它会增大方差。邻域球内不应包含多种材料。

用户使用探测器时,应对其物理内容有所了解,如果使用不当,会得到不可靠的结果:经过0重要性区域的贡献将不被探测器记录。在具有轴对称性的问题中应当使用环探测器而不是点探测器。若探测器的位置正好在曲面上则可能引起麻烦。在具有 $S(\alpha, \beta)$ 热处理的问题中虽可以使用探测器,但不记录 $S(\alpha, \beta)$ 的贡献。可以考虑使用 $PD_n$ 和 $DD_n$ 卡。

## **B. FCn 记数注释卡 (Tally Comment Card)**

格式:  $FC_n$  任何信息

此卡 6~80 列内容将作为  $F_n$  记数的标题输出。

## **C. En 记数能量卡 (Tally Energy Card)**

## **D. Tn 记数时间卡 (Tally Time Card)**

## **E. Cn 记数余弦卡(只用于记数类型 1) (Cosine Card)**

格式:  $En \ E_1 \dots E_k$

$n$ : 记数号

$E_i$ : 第 $i$ 个能量箱的上限(MeV)

格式:  $Tn \ T_1 \dots T_k$

$n$ : 记数号



$T_i$ : 第 $i$ 个时间箱的上限(shake)

格式:  $C_n \ C_1 \dots C_k$

$n$ : 记数号 (只用于记数类型1)

$C_i$ : 第 $i$ 个余弦箱的上限,  $C_1 > -1$ ,  $C_k = 1$

这三种卡都用于描述记数箱的边界, 卡上参数必须按递增顺序给出。缺省时, 整个记数范围将是一个箱, 除非使用0号卡(E0、T0或C0)对没有给出箱边界卡的记数建立缺省的箱结构。

如没在 $E_n$ 卡或 $T_n$ 卡的末尾加上NT字符, 所有指定箱记数的总和也被输出。只有在 $C_n$ 卡的末尾加上T字符, 所有指定余弦箱记数的总和才被输出。

余弦卡仅用于界面流量型记数, 定义极角箱边界的余弦值。极角的参考方向是曲面的正法线方向。

## F. EMn 能量乘子卡 (Energy Multiplier Card)

G. TMn 时间乘子卡 (Time Multiplier Card)

H. CMn 余弦乘子卡 (Cosine Multiplier Card)

格式:  $EM_n \ M_1 \dots M_k$

格式:  $TM_n \ M_1 \dots M_k$

格式:  $CM_n \ M_1 \dots M_k$

$n$ : 记数号

$M_i$ : 用于第 $i$ 个箱的乘子

使用这些卡分别给 $E_n$ 、 $T_n$ 或 $C_n$ 卡规定的箱内记数乘上相应的乘子 $M_i$ , 相当于通过一个相应函数修改常规的流量、通量等记数。

可以用EM0、TM0或CM0卡指定缺省的乘子表。

## I. DEn 剂量能量卡 (Dose Energy Card)

### DFn 剂量函数卡 (Dose Function Card)

格式:  $DE_n \ A \ E_1 \dots E_k$

$DF_n \ A \ F_1 \dots F_k$

n: 记数号

$E_i$ : 第i个能量 (MeV)

$F_i$ : 第i个能量的函数值

A: 取LOG或LIN插值方法(缺省为LOG)

用户可以使用DEn和DFn卡填写与能量相关的函数来修改常规记数,主要用于F6型记数的剂量计算。这两个卡必须有对应的数据项,对能量点之间的函数用对数或线性插值给出,如果粒子能量超出DEn卡指定的范围,则使用此卡最低或最高能量。可以使用DE0和DF0卡作为缺省卡。

## J. CFn 栅元标记卡 (Cell-Flagging Card)

## K. SFn 曲面标记卡 (Surface-Flagging Card)

格式: CFn C<sub>1</sub> ... C<sub>k</sub>

格式: SFn S<sub>1</sub> ... S<sub>k</sub>

n: 记数号

C<sub>i</sub>: 栅元号, 这个栅元对记数的贡献将被标记

S<sub>i</sub>: 曲面号, 这个曲面对记数的贡献将被标记

当粒子离开某些栅元或曲面时,可以对它们进行标记。打上标记的轨迹对记数的贡献,除纳入正常记数外,还将被分别列出,这是确定通过某些位置的粒子轨迹有多大贡献的一种做法。CFn和SFn可以同时使用,但只给出1份带标记的记录。

对探测器记数不能使用带标记的栅元或曲面。

## L. FSn 分段记数卡 (Tally Segment Card)

格式: FSn S<sub>1</sub> ... S<sub>k</sub>

n: 记数号

S<sub>i</sub>: 带符号的曲面号

此卡允许用户用曲面S<sub>i</sub>(i=1, 2, ..., k)把一个栅元或曲面分成k+1个段分别记数,如

果FSn卡末尾加上T则还给出总记数。曲面 $S_i$ 不必是实际几何的构成部分。例如，

Fn:N S(或C)

FSn  $S_1 \dots S_k$

表示在曲面S(或栅元C)上的记数按几何位置被分割成以下几个箱：

(1) 被 $S_1$ 划分且由 $S_1$ 坐向指向的部分，

(2) 被 $S_2$ 划分且由 $S_2$ 坐向指向的部分，上一段除外，

... ..

(k) 被 $S_k$ 划分且由 $S_k$ 坐向指向的部分，但其它段已记录过的除外，

(k+1) 所有其余部分，

(k+2) 如果在FSn卡上填写了T，将给出整个曲面S(或栅元C)上的记数。

对于探测器(记数类型5)不能使用此卡。

## M. SDn 分段除数卡 (Segment Divisor Card)

格式： SDn ( $D_{11} D_{12} \dots D_{1m}$ ) ... ( $D_{k1} D_{k2} \dots D_{km}$ )

n: 记数号

$D_{ij}$ : 第i个曲面或栅元的第j段的面积、体积或质量

k - Fn卡上的栅元或曲面个数，包括T(如存在)

m - FSn卡上的分割箱数，包括剩余部分，如

有T还包括总的部分。括号是可选的

用户可以使用此卡指定MCNP不能自动计算的分段栅元的体积或曲面的面积。对记数类型2、4和6，此卡数据项分别是面积、体积和质量。若FSn不存在，或者对于记数类型1，用户也可以采用此卡给记数设置希望的除数。

SD卡使VOL和AREA卡无效。

## N. FQn 打印层次卡 (Print Hierarchy Card)

格式： FQn a1 ... ak

n: 记数号

$a_i$ : F - 栅元, 曲面或探测器

D - 直接或带标记

S - 分片段

M - 乘子

C - 余弦

E - 能量

T - 时间

缺省时, 按上述次序打印。如果只指定一些字母, 相当于把它们放在最后, 其它按缺省排序。可以用FQ0改变缺省次序。

## 0. TF<sub>n</sub> 记数涨落卡 (Tally Fluctuation Card)

格式: TF<sub>n</sub> L<sub>1</sub> ... L<sub>k</sub>

n: 记数号

L<sub>i</sub>: 箱类型i的箱号,  $1 \leq i \leq$  总箱号

MCNP输出文件的末尾有显示每个记数涨落情况的简表, 按运行粒子数打印记数平均值、相对误差和FOM。TF<sub>n</sub>卡用于指定记数n中哪一个箱的涨落表被打印, 当一个或几个箱比缺省箱更重要时可使用此卡。

如果不使用TF<sub>n</sub>卡, 记数n的涨落表按缺省记数箱打印: 1) 在Fn卡上指定的第一个栅元、曲面或探测器, 2) 总通量而不是带标记的通量或无碰撞通量, 3) 最后的用户记数箱, 4) 最后的记数分段箱, 5) 最后的记数余弦箱, 6) 最后的记数能量箱, 7) 最后的记数时间箱。

## P. DD<sub>n</sub> 探测器诊断卡 (Detector Diagnostics Card)

格式: DD<sub>n</sub> k<sub>1</sub> m<sub>1</sub> ... k<sub>k</sub> m<sub>k</sub>

n: =空白或0, 此卡作缺省处理用

=1, 用于中子的DXTRAN球

=2, 用于光子的DXTRAN球

=特定探测器记数号

k<sub>i</sub>: 用于判断是否使用轮盘赌

$m_i$ : 用于控制对大贡献记数的诊断输出

缺省值: 如果在DDn卡上不指定 $k_i$ , 就使用DD卡上的 $k_i$ 。如果DD卡上不指定 $k_i$ , 就使用DD卡上的 $k_i$ 。如果连 $k_i$ 都不指定, 就认为 $k_i=0.1$ 。缺省 $m_i$ 的次序同 $k_i$ , 只是相应 $k_i=0.1$ 时取 $m_i=1000$ 。

此卡有两方面用途: 1) 使用轮盘赌, 限制比前面对探测器或DXTRAN球的平均历史贡献的某个 $k$ 份额还小的那些贡献, 有效地加快计算。2) 可以提供大贡献来源的信息, 或在紧靠探测器或DXTRAN球处缺乏足够碰撞次数的信息。提供的有关大贡献来源的信息对设置栅元重要性或源偏倚参数是有用的。

对探测器或DXTRAN球, 轮盘赌判断处理如下:

- 1) 如果 $k_i > 0$ , 计算前200个历史对探测器或DXTRAN球的所有贡献, 然后取平均(在问题的整个计算中将不断改变此贡献)。从201个历史开始, 每个历史对DXTRAN球或探测器的贡献只要大于 $k_i$ 倍平均贡献, 将不实施轮盘赌, 否则实施轮盘赌。 $k_i$ 必须小于1。
- 2) 如果 $k_i < 0$ , 从第一个历史开始便考虑轮盘赌, 直接记录贡献大于 $|k_i|$ 的历史, 当历史贡献小于 $|k_i|$ 时启动轮盘赌。
- 3)  $k_i = 0$ , 对探测器或DXTRAN球不做轮盘赌。非零缺省值0.1意味着总做轮盘赌。或许 $k_i = 0.5$ 对多数问题是合适的。

第二项 $m_i$ 确定对大贡献打印诊断的情况。如果 $m_i = 0$ , 没有打印。如果 $m_i > 0$ , 有两种可能情况:

- 1) 若 $k_i \geq 0$ , 则对前200个历史没有诊断打印。从第201个历史开始, 打印贡献超过 $m_i$ 倍每个历史的平均记数的前100个信息。
- 2) 若 $k_i < 0$ , 打印贡献超过 $m_i |k_i|$ 的前100个信息。

DD卡可以减少DXTRAN粒子和探测器伪粒子。轮盘赌不考虑粒子时间或能量, 因此, 对最终记数小的时间箱和能量箱由于轮盘赌可能会丢失不适量的记数份额。

## Q. DXT DXTRAN 卡

格式: DXT:n x1 y1 z1 RI1 RO1

x2 y2 z2 RI2 RO2

... DWC1 WDC2 DPWT

n: N表示中子, P表示光子

$x_i$   $y_i$   $z_i$ : 第 $i$ 对DXTRAN球中心

$RI_i$ : 第*i*个内球半径, 单位cm

$RO_i$ : 第*i*个外球半径, 单位cm

$DWC_1$ : 球内截断权上限, 缺省为零

$DWC_2$ : 球内截断权下限, 缺省为零

DPWT: 最小光子权, 仅在DXT:N上输入, 缺省为零

此卡用于改善记数区域附近的粒子抽样, 不应当把它理解为象探测器一样的记数, 它只是作为减小方差的一种技巧和记数配合使用。DXTRAN球必须不重叠。

当DXTRAN球内几何简单时, 这个技巧很有效。如果球内很复杂, 含有几个曲面, 使用DXTRAN技术反而会浪费机时。内球应包围感兴趣区。外球包围可能发射粒子到感兴趣区的相邻区。MCNP给这两个区以5:1的重要性, 即从外球区进入内球区的粒子将一分五裂。选择RI和RO的经验法则是: 内半径RI应至少有记数区那么大, RO-RI应大约是球上粒子平均能量的一个自由程。

每张DXT卡上可放五组x、y、z、RI和RO, 但对每个粒子类型仅有一组 $DWC_1$ 和 $DWC_2$ 。这对权截断值适用于外半径内的伪粒子轨迹, 其缺省值为零, 并且和CUT卡上的权截断有完全相同的功能。如果不使用简单的光子物理处理方案(MCG), DXTRAN光子权重截断是不起作用的, 一个例外情况是, 当光子离开这个球时, 不论使用哪种物理方案(MCG或MCP), 都对照CUT:P卡上的截断权值检查轨迹。

在DXT:N卡上的最小光子权DPWT几乎完全等价于PWT卡上的最小光子权, 差别仅在于DXTRAN球内产生光子在做轮盘赌时不使用当前栅元与源粒子栅元重要性比值, 因此用户必须对DXTRAN球内假粒子的权分布有一定的了解(如用DD卡做短试算), 以便有根据地指定DPWT。和PWT一样, 其值为负将使最小光子权重依赖于源粒子的初始权重。DPWT的缺省值是零, 表示DXTRAN球内光子截面不为零的材料中每次碰撞都产生光子。

$S(\alpha, \beta)$  热碰撞对DXTRAN球不做贡献。如果问题中有多组DXTRAN球, 它们可能彼此串通, 即一组球中的假粒子可能会对其它球有贡献。对第二组球的贡献通常是很小的, 但粒子数很多, 这将导致机时大量增加。这种情况下, 常需要使用DD卡对DXTRAN球内的低权粒子做轮盘赌。

## R. FTn 记数特殊处理卡

格式: FTn ID<sub>1</sub> P<sub>1,1</sub> P<sub>1,2</sub> ... ID<sub>2</sub> P<sub>2,1</sub> P<sub>2,2</sub> ...

n: 记数号

ID<sub>i</sub>: 特殊处理的关键词, 允许为:

FRV - 记数1余弦箱的固定的任意参照方向

GEB - 高斯能量增宽

TMC - 时间卷积

SCX - 标识指定源分布的抽样指标

P<sub>i,j</sub>: 特殊处理的参数

此卡的数据项指定记数n的一个以上的特殊处理。对每个ID<sub>i</sub>, P<sub>i,j</sub>的句法和意义不同。除SCX外, 对已给记数可以指定一个以上的特殊处理。特殊处理允许的参数是:

FRV x y z

x y z 是矢量 V 的三个分量, 不必归一。对记数类型 1, 如果 FRV 特殊处理有效, 便使用 V 代替曲面法线方向作为余弦的参照方向。

GEB a b

规定物理辐射探测器中观察到的能量增宽 FWNM,  $FWNM=a+b \times (\text{粒子能量})^{1/2}$ , a 的单位是 MeV, b 的单位是 MeV<sup>1/2</sup>。实际上从具有 FWNM 的高斯分布抽样记数能量。

TMC a b

所有粒子都应当在零时间开始。产生的记数象记录在时间 a 开始在时间 b 结束的实际矩形脉冲源一样。

SCX k m

第一个参数k是一个源分布号, 是出现在SIk卡上的k。第二个参数m是源分布k中的箱数。对记数n建立m+1个用户箱, 对应源分布的每个箱和一个总箱。根据源粒子来源于分布箱k的哪个箱来记录n号记数, 总箱记录没有特殊处理的n号记数。

## S. 例题

例 1: F2:N 1 3 6 T

这个卡指定4个中子通量记数, 分别是穿过曲面1、3、6的通量和穿过这三个面的平均通量。

例2: F1:P (1 2) (3 4 5) 6

这个卡指定3个光子流量记录,分别是对曲面1和2集合的记数,曲面3、4、5集合的记数,以及曲面6的记数。

例3: F371:N (1 2 3) (1 4) T

这个卡指定3个中子流量记数,分别是对曲面1、2、3集合的记数,曲面1、4集合的记数,和曲面1、2、3、4集合的记数。注意,使用T标记时,前面重复出现的曲面1仅被包括一次。

例4: E11 0.1 1 20

此卡把F11流量记数分成4个箱,三个箱的能量范围是 $0 \sim 0.1$ 、 $0.1 \sim 1$ 和 $1 \sim 20$ MeV,另一个是 $0 \sim 20$ MeV。

例5: T2 -1 1 1.0E+37 NT

此卡把面通量记数分成三个时间箱:  $-\infty \sim -1$ 、 $-1 \sim 1$ 和 $1 \sim 1.0E37$ shake。无总箱。

例6: C1 -.868 -.5 0. .5 .868 1

此卡指定在6个极角范围内记录粒子流量:  $180^\circ \sim 150^\circ \sim 120^\circ \sim 90^\circ \sim 60^\circ \sim 30^\circ \sim 0^\circ$ 。不提供总和记数。

例7: F2:N 1

FS2 -3 4

这个例子把曲面1分成三部分,并计算穿过每一部分的中子通量。分割方式如下: (1) 曲面1上相对于曲面3具有负坐向的部分, (2) 曲面1上相对于曲面4和曲面3都具有正坐向的部分, (3) 其余部分。

例8: DXT:N  $x_1$   $y_1$   $z_1$   $RI_1$   $RO_1$

$x_2$   $y_2$   $z_2$   $RI_2$   $RO_2$

$x_3$   $y_3$   $z_3$   $RI_3$   $RO_3$

DXT:P  $x_4$   $y_4$   $z_4$   $RI_4$   $RO_4$

F15X:P  $a_1$   $r_1$   $R_1$

$a_2$   $r_2$   $R_2$



DD .2 100 .15 2000

DD1 -1.1E25 3000 J J J 300

DD15 .4 10

此例中定义了三个中子和一个光子 DXTRAN 球，以及两个对称轴为 X 轴的环探测器。用 DD 卡定义了一些轮盘赌启动判据 k 和打印诊断判据 m:

探测器/球	k	m
球1	-1.1E25	3000
球2	.15	2000
球3	.2	3000
球4	.2	100
探测器1	.4	10
探测器2	.15	2000

## T. 思考题

1. 什么是记数，记数种类有哪些，各有什么物理意义。填写记数卡片时如何区别记数类型，如何在希望的栅元或曲面上记数。
2. 什么是记数箱，它有什么作用。有哪几种记数箱，相关的记数卡是什么，各起什么作用。
3. 如何对曲面或栅元进行分段记数。
4. 剂量能量/剂量函数卡有什么作用。
5. 涉及探测器记数的卡都有哪些，各有什么作用。
6. 使用DXTRAN球时应注意哪些事项。
7. 探测器诊断卡DD的主要作用有哪些。
8. 如何安排记数打印次序。

## U. 习题

1. 假定 $\gamma$ - $\gamma$ 套管厚度-水泥环密度测井仪的近探测器是一个直径2cm、长4cm的柱状栅元，栅元中心位于(0, 0, 20cm)，对称轴是Z轴。请在栅元外柱面上记录0.5~0.8MeV能量的光子面流量。考虑如何只记录与Z轴夹角130°~140°方向来的光子。

2. 脉冲中子伽马能谱测井测量能量 $0 \sim 8\text{MeV}$ 的光子，一般使用256道能谱。记录能谱的时间分别是中子脉冲前沿之后的 $0 \sim 10\mu\text{s}$ 以及 $15 \sim 45\mu\text{s}$ 。请定义相应的能量箱和时间箱。考虑如何模拟HpGe探测器的 $2\text{keV}$ 能量展宽以及使用探测效率刻度曲线。
3. 请定义一个位于 $(0, 0, 25.4\text{cm})$ 、半径 $1\text{cm}$ 、以Z轴为对称轴的环探测器，探测器位于空腔之内。假设用它模拟双发双收中子寿命测井仪的近探测器，请在此基础上定义门宽 $10\mu\text{s}$ 的250路时间定标器。
4. 三相流测井或流体密度测井的NaI探测器都较薄，可以用圆面模拟，假定其直径 $1.8\text{cm}$ ，请定义相应的记数。

## §5.5 材料的指定

这组卡片指定栅元材料成份和截面数据。

助记名	卡片类型	节内编号
Mm	材料成份	A
DRXS	离散反应截面	B
AWTAB	原子量	C
VOID	否定材料	D

### A. Mm 材料卡 (Material Card)

格式: Mm ZAID1 f1... ZAIDk fk

m: 将对应栅元卡上指定的材料号

ZAID<sub>i</sub>: 为ZZZAAA.nnx, 第i种成份元素或核素,

nnx可缺省

f<sub>i</sub>: 第i种成份在材料中比例。正数表示原子比例, 负数表示重量比例。

对于中子, AAA=000表示天然元素。若栅元密度是按 $\text{g}/\text{cm}^3$ 输入的, MCNP将按天然元素取原子量。如果所用元素并非天然元素, 则在栅元卡上应当填写原子密度, 以保证其正确性。至于哪种ZAID截面数据可以利用, 请参阅XSDIR文件和本教程附录。nnx若省略, 使用35C。

对光子输运, 无论AAA填什么, 程序置AAA=000, nnx取01P, 对光子而言元素和核素没有区别。

材料卡上核素的份额可以不归一。

## B. DRXS 离散反应截面卡 (Discrete Reaction Cross-section Card)

格式: DRXS ZAID<sub>1</sub> ... ZAID<sub>k</sub>

对卡上所列核素不使用常规的连续能量截面处理,改用离散的能量截面处理。如果该卡数据项空缺,表示对所有的核都采用离散截面。不需考虑共振能区中子输运的问题中,对轻核使用此卡可节省内存和提高计算时效。

## C. AWTAB 原子量卡 (Atomic Weight Card)

格式: AWTAB ZAID1 AW1... ZAIDk AWk

AW<sub>i</sub>: 原子量

此卡上的数据将替代截面表中的原子量。

## D. VOID 取消材料卡 (Material Void Card)

格式: VOID C1 ... Ck

C<sub>i</sub>: 栅元号

此卡用于把指定栅元内材料置为真空。如果数据项空缺,表示针对所有栅元,此时,加热记数转为通量记数,若没有NPS卡则置NPS=100000。

## E. 思考题

1. 如何指定栅元内材料。
2. 什么情况下使用 DRXS 卡。
3. 什么情况下使用 VOID 卡。

## F. 习题

1. 请计算35%孔隙度饱和水砂岩中各种元素所占份额以及这种地层的密度,并给出材料卡。砂岩骨架(SiO<sub>2</sub>)的密度可按2.65g/cm<sup>3</sup>计算。

## §5.6 能量和热处理方式的指定

这组卡片涉及到粒子能量和一些物理处理。

助记名	卡片类型	节内编号
PHYS	能量物理截断	A
ESPLT	能量分裂和轮盘赌	B
TMP	自由气体热处理	C
THTME	热时间	D
MTm	S( $\alpha, \beta$ ) 材料	E

### A. PHYS 能量物理截断卡 (Energy Physics Cutoff Card)

#### 中子

格式: PHYS:N  $E_{\max}$  EMCNF

$E_{\max}$ : 中子能量上限

EMCNF: 控制中子俘获计算方式的能量分界, 高于它时用暗含俘获处理, 低于它时用模拟俘获方式

能量超过 $E_{\max}$ 的中子截面数据不参加计算(截面数据表中最大能量的典型值是20MeV)。无论是源中子还是碰撞中子, 只要能量大于 $E_{\max}$ 就被舍弃并重新抽取粒子能量。注意低能中子在反应中可能产生高能中子。

可以用EMCNF控制俘获的计算方式。使用模拟俘获的处理方式对减少低能历史很有效, 在低吸收区可以节省大量机时。然而, 模拟俘获也可能导致一些重要的粒子在给出记数或参与一些重要的物理过程之前就被杀死。如果 $EMCNF=E_{\max}$ , 无论CUT卡上 $WC_1$ 给什么值, 都采用模拟俘获处理方式; 如果 $WC_1=0$ , 则无论EMCNF取什么值, 也都采用模拟俘获处理方式。缺省时,  $EMCNF=0$ 。

#### 光子

格式: PHYS:P EMC PF

EMCPF: 控制光子处理方式的能量分界, 高

于它时用简单的物理模拟(包括暗含俘获),低于它时用精细的物理模拟(包括模拟俘获)

光子截面数据的能区是 $0.001 \sim 100\text{MeV}$ 。对能量低于下限的光子都采用模拟俘获的计算方式,以加快历史结束。

精细的物理模拟与简单的物理模拟比,主要差别是前者在 $1\text{keV}$ 能量以上还要考虑荧光发射、Thomson相干散射、Klein-Nishian微分截面以及电子束缚效应。EMCPF的缺省值是 $100\text{MeV}$ 。

## B. ESPLT 能量分裂和轮盘赌卡 (Energy Splitting and Roulette Card)

格式: ESPLT:n  $N_1$   $E_1$  ...  $N_5$   $E_5$

n: =N表示中子, =P表示光子

$N_i$ : 粒子分裂时的分支数

$E_i$ : 粒子实行分裂的能限

像IMP卡允许按几何位置做分裂和轮盘赌一样,这个卡允许按能量做分裂和轮盘赌。卡上的能量偏倚参数最多有5组。 $N_i$ 可以不是整数;也可以在 $1 \sim 0$ 之间,表示轮盘赌中存活的概率;如果 $N_i$ 取负值,表示只在能量下降时做分裂和轮盘赌处理,能量上升时不做相反(以 $1/N_i$ 为分裂倍数)处理。

能量分裂可以导致低权粒子被权截断(CUT卡)无意地杀死。由于能量相关的权窗完成与ESPLT卡一样的功能,且不限5个能点,又具有空间相关以及更合适的其它减小方差的特点,因此不鼓励使用ESPLT卡。

## C. TMP 自由气体热温度卡 (Free-Gas Thermal Temperature Card)

## D. THTME 热时间卡 (Thermal Time Card)

格式: TMPn  $T_{1n}$   $T_{2n}$  ...  $T_{in}$  ...  $T_{ln}$

n: 在THTME卡上指定的时间的顺序号

$T_{in}$ : 在时间n时第i个栅元的温度(MeV)

1: 问题中的栅元数

格式: THTME  $t_1$   $t_2$  ...  $t_n$  ...  $t_N$

$t_n$ : 热时间,  $n$ 号TMP卡给出该时间热温度

$N$ : 指定热时间点的总数

用自由气体模型处理热问题时, 二卡用于描述与时间相关的栅元温度。当问题的一部分不在室温下, 且中子能量在轻核400倍或重核4倍热温度以内时, 使用它们是必要的。

最多允许有99个时间项。TMP1卡给出THTME卡指定的时间 $t_1$ 时各栅元的温度, TMP2卡给出时间 $t_2$ 时各栅元的温度, 等等。两个时间之内的栅元温度用线性插值确定。对最小和最大时间点之外的值, 分别取这两个时间点的温度。

热碰撞处理通常非常费时, 可以考虑使用PHYS:N卡上的EMCNF来减少热碰撞次数, 这时典型的EMCNF取几倍的热温度。

用KT表示栅元的热温度, 以MeV为单位:

$$\begin{aligned} KT \text{ (MeV)} &= 8.617 \times 10^{-11} T \quad (T \text{按K}) \\ &= 8.617 \times 10^{-11} (T + 273.15) \quad (T \text{按}^\circ\text{C}) \end{aligned}$$

如无TMP卡, 热温度缺省值为 $2.53 \times 10^{-8}$  MeV (室温)。对非真空栅元指定零温度将导致致命错误。如无THTME卡, 缺省时间为0, 即温度与时间无关。THTME卡上数据项必须是递增序列, 每一项必须对应有一张TMP $n$ 卡。

## E. MTm S( $\alpha, \beta$ )材料卡 (S( $\alpha, \beta$ ) Material Card)

格式: MTm X

X: 对Mm卡上特殊成份的S( $\alpha, \beta$ )标识符

对于Mm卡定义的材料, 它的一个或几个特殊成份可以通过MTm卡与一个存在的S( $\alpha, \beta$ )数据联系起来, 对这种材料的ZAID成份用S( $\alpha, \beta$ )数据进行热处理, 当能量高于S( $\alpha, \beta$ )数据的能量上限时才使用自由气体模型处理。典型的S( $\alpha, \beta$ )能量上限是4eV, 一般在2eV以下S( $\alpha, \beta$ )作用非常重要。使用S( $\alpha, \beta$ )处理时, 通过设置PHYS:N卡上EMCNF参数可有效减少碰撞次数, 从而大量节省机时。

S( $\alpha, \beta$ )数据存于TMCC1数据库中, 存在的标识符参见附录2或XSDIR1文件。MCNP3B中无法计算S( $\alpha, \beta$ )对探测器或DXTRAN球的贡献。

## F. 例子

例 1: ESPLT:N 2 .1 2 .01 .25 .001

规定中子能量降到 0.1MeV 以下时粒子一分为二,能量降到 0.01MeV 以下时粒子又一分为二,能量降到 0.001MeV 以下时以 25%的概率进行轮盘赌。

例 2: M14 1001 2 6102 1

MT14 POLY.03

对乙烯中的氢使用温度 500K 的  $S(\alpha, \beta)$  数据。

## G. 思考题

1. 如何使用中子和光子的 PHYS 卡。
2. 处理热问题时,如何填写栅元的温度,并考虑如何通过轮盘赌的方法减少低能中子轨迹数量和如何使用模拟俘获处理以节约时间。

## H. 习题

1. 请分别换算以MeV为单位的室温和125°C的KT值。

## §5.7 问题截断条件

这组卡片在初始或接续运行的输入文件中均可使用,它们为终止粒子轨迹或中断计算提供了手段。

助记名	卡片类型	节内编号
CUT	截断	A
NPS	历史截断	B

CTME	计算时间截断	C
------	--------	---

## A. CUT 截断条件 (Cutoffs Card)

格式: CUT:n T E WC<sub>1</sub> WC<sub>2</sub> SWTM

n: N表示中子, P表示光子

T: 历史截断时间

E: 截断能量

WC<sub>1</sub>和 截断权重

WC<sub>2</sub>:

SWTM: 源粒子的最小权重

MCNP计算每个历史过程时都记载时间(但并不考虑中子衰变), 时间超过此卡中T时历史便终止。缺省T=∞。

当能量低于卡中E时, 粒子被杀死。中子和光子的截断能量缺省值分别是0和0.001MeV。

当粒子权重WGT<WC<sub>2</sub>×R时, 将以WGT/(WC<sub>1</sub>×R)的概率存活, 且赋以权WGT=WC<sub>1</sub>×R, 其中R是源栅元与当前栅元重要性之比。若WC<sub>1</sub>和WC<sub>2</sub>给负值, 则将|WC<sub>1</sub>|×W<sub>s</sub>和|WC<sub>2</sub>|×W<sub>s</sub>分别当作WC<sub>1</sub>和WC<sub>2</sub>使用, 其中是W<sub>s</sub>源粒子最小权。对多数问题推荐使用负值的WC<sub>1</sub>和WC<sub>2</sub>。

SWTM用于指定用户提供源的W<sub>s</sub>, 本教程不介绍用户提供源的使用方法。

## B. NPS 历史截断卡 (History Cutoff Card)

## C. CTME 计算时间截断卡 (Computer Time Cutoff Card)

格式: NPS N

N: 历史数, 即源粒子数

格式: CTME X

X: 指定本次计算的最大机时量(分钟)

这两个卡都可指定结束一次MCNP运算的条件, 如果二卡同时出现, 则先满足条件的起作用。

在接续运行中, NPS卡数据项应是包括了以前运行过历史数的总数; 当NPS为负数时, 表



示只打印原有结果而不再增加源粒子。CTME卡数据项是相对于接续运行开始时的时间，它不是累计时间。

## D. 思考题

1. 如何使用CUT卡提高计算效率。
2. 如何设置一次MCNP运行的终止条件。

## E. 习题

1. 用MCNP模拟测井问题时，一般需要较长时间才能得到可靠的结果。请估算您下班之后到第二天上班之前的时间，并用CTME卡指定。

## §5.8 外围卡

下面这组卡片虽然对粒子输运没用，但给用户提供了种种方便：

助记名	卡片类型	节内编号
PRDMP	打印及转储周期	A
LOST	丢失粒子	B
DBCN	调试信息	C
PRINT	打印控制	D

### A. PRDMP 打印及转储周期卡

格式： PRDMP NDP NDM

NDP：打印记数增量

NDM：转储RUNTPE文件的增量

此卡允许用户改变记录印到OUTP和RUNTPE文件上的间隔，正数数据项表示间隔源粒子数，负数表示间隔时间(以分钟为单位)。缺省情况下，成功完成计算后在两个文件上都转储，每计算15分钟向RUNTPE文件转储一次。

## B. LOST 丢失粒子卡

格式: LOST lost1 lost2

lost1: 作业失败前允许丢失的粒子

lost2: 对丢失粒子打印的最大数目

如果无此卡，两项值都为10。

## C. DBCN 调试信息卡

格式: DBCN  $X_1$   $X_2$  ...  $X_{11}$

$X_1$ : 输入第一个粒子历史输运所使用的随机数

$X_2$ : 指定打印出第 $X_2$ 个历史的信息，包括：粒子序号，  
总碰撞数，产生的随机数总数，第一个随机数

$X_3$  /  $X_4$ : 事件记录打印的历史序号的上下限

$X_5$ : 打印每个历史记录时的最大事件数。缺省值零被解释成600

$X_6$ : 如果 $X_6$ 非零，将产生一个二进制文件HTALO，  
每隔 $X_6$ 微秒抽样一次，统计MCNP各部分运行  
时间的百分比，并记录到HTALO中

$X_7$ : 如非零，给出体积和曲面面积计算的详细打印

$X_8$ : 若非零，等同于从第 $X_8$ 个历史开始计算。控制 $X_8$   
比控制 $X_1$ 方便，后者需要准确输入随机数。 $X_8=0$ 解释为=1。

$X_9$ : 碰撞循环断点的碰撞序号。如果当前历史的碰撞次数恰好等于 $X_9$ ，则跳过设置  
循环断点的那段程序

$X_{10}$ : 每个粒子最大运行时间，以秒为单位，超时MCNP  
停止。缺省值被解释为10秒。

$X_{11}$ : 若非零，在丢失粒子事件记录表中允许打印碰撞路线

此卡上的11项数据主要用于程序及问题的调试。如果没有此卡，所有数据项都是零。

## D. PRINT 输出打印卡

格式: PRINT X

X:  $X_1$   $X_2$  ... 打印指定号

如不使用PRINT卡, 会在OUTP文件中打印以下内容: 输入文件表、所使用的截面表、粒子生成和丢失帐目表, 在每个栅元内问题活动情况(如粒子数)、MODE N P问题中光子产生综合表、记数表和记数涨落简表。

使用PRINT卡后, 还将打印:

打印号	打印内容
10	源系数和源分布
20	权重信息
30	记数说明
40	材料成份
50	栅元体积、质量、面积
60	栅元重要性
70	曲面系数
72	栅元温度
80	使用的存储空间
100	截面表
110	前50个源粒子状态
130	中子/光子权重平衡表
140	中子/光子核素活化性表
150	DXTRAN诊断
170	源分布频率表
180	权窗发生器选择的综述
190	权窗发生器综述
200	权窗发生器产生权窗

如果PRINT卡不给出数据项, 打印以上所有可能的信息。

## §5.9 MCNP 输入文件综述

### A. 输入卡

下表列出MCNP3B常用输入卡。对表中有关符号说明如下：N表示中子，P表示光子，R表示需要，O表示可选，X表示禁用的卡。缺省分两种情况：1) 卡片上的值缺省，2) 卡片缺省。对后一种情况下表中用\*表示。

运行方

卡片和缺省

式

N NP P 基本的卡

O O O MESSAGE: 信息块加上分隔行

R R R 问题标题卡

R R R 栅元卡加上分隔行

R R R 曲面卡加上分隔行

O O O C 注释卡

问题类型卡

O R R MODE N

栅元参数卡

R R R IMP 使用权窗时可省略此卡

O O O VOL 0

O O O AREA 0

X O X PWT -1

O O O EXT 0

O O O VECT 无

O O O PCL 0

O O O WWE 无

R R R WWN 使用重要性卡时可省略此卡

O O O WWP 5 3 5 0 0

O O O WWG 没有

O O O WWGE 一个能量区间

0 0 0 PDn 1

0 0 0 DXC 1

### 源描述卡

0 0 0 SDEF ERG=14 TME=0 POS=0 0 0 WGT=1

0 0 0 SIn H  $L_1 \dots L_k$

0 0 0 SPn D  $P_1 \dots P_k$

0 0 0 SBn D  $B_1 \dots B_k$

0 0 0 DSn H  $J_1 \dots J_k$

0 0 0 SCn 没有

### 记数指定卡

0 0 0 Fna 当 $n=5$ 时 $R_0=0$

0 0 0 FCn 没有

0 0 0 En 机器无穷大

0 0 0 Tn 机器无穷大

0 0 0 Cn 1

0 0 0 FQn F D U S M C E T

0 0 0 DEn/DF 没有

n

0 0 0 EMn 1

0 0 0 TMn 1

0 0 0 CMn 1

0 0 0 CFn 没有

0 0 0 SFn 没有

0 0 0 FSn 没有

0 0 0 SDn 0

0 0 0 TFn 1 1 last last 1 last last  
last

0 0 0 DD 0.1 1000

0 0 0 DXT ----- 0 0 0

0 0 0 FTn

### 材料指定卡

```
0 0 0 Mm    没有
0 0 0 DRXS  *全部连续截面
0 0 0 AWTAB *使用截面表中的原子量
0 0 0 VOID  没有
```

### 能量和热处理卡

```
0 0 X      *机器无穷大 0
    PHYS:N

X 0 0      *100
    PHYS:P

0 0 0 ESPLT *没有能量分裂和轮盘赌
0 0 X TMP   2.53×10-8
0 0 X THTME 0
0 0 X MTm   没有
```

### 问题截断卡

```
      机 器 无 穷 大  0  -0.5  -0.25
0 0 X CUT:N
      SWTM

      机 器 无 穷 大  0.001  -0.5
X 0 0 CUT:P
      -0.25 SWTM

0 0 0 NPS   没有
0 0 0 CTME  没有
```

### 外围卡

```
0 0 0 PRDMP 计算完 -15
0 0 0 LOST  10 10
0 0 0 DBCN  0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 PRINT *短输出
```

## B. 存储限制

建立问题时，应注意输入项的数量限制

栅元描述的数据项 100组

记数总数 100

探测器个数 20

DXTRAN球 5

ESPLT卡项数 10

所有材料卡上核数 150

$S(\alpha, \beta)$  数据项 100

## 第 6 章 经验

### §6.1 一般应用步骤

MCNP有强大的几何构建和物理参数输入功能，用户可以利用它建立测井问题的几何形状和物理过程模型，对感兴趣的模拟结果有选择地记录，并采用适当的减小方差技巧缩短计算时间。实际应用一般遵循下列步骤：

- 1、建立测井的几何模型，对测井仪器、井眼情况、地层情况进行几何描述；建立物理模型，包括填充于几何构建中各种物质的组分和密度等，中子源或光子源的几何尺寸、发射粒子的空间和能量分布等，模拟结果记录的空间位置和物理内容等。
- 2、试模拟少量粒子的输运过程，通过使用和调整减小方差的技巧，尽量缩短计算时间和减小计算结果的统计误差。调整到比较满意时再计算大量的粒子输运过程。
- 3、从计算结果中提取有用的信息，即对计算结果后续处理。

### §6.2 需注意的问题

使用MCNP计算核测井问题是一个比较复杂的过程，即使是有经验且细心的用户，也经常犯一些错误。下面对前文指出的一些应注意的问题重新集中申述，以便于用户查对。

在策划阶段，主要应注意两点问题：建立几何模型之前，最好试算一下问题中粒子在物质中输运多远后数量减少一半，以便确定栅元的大小。测井问题多为在井眼中发射和在井眼中接受，要合理控制粒子输运方向，才能在较短时间内完成计算。这就要恰当地使用减小方差技巧，如位置重要抽样、权窗、点探测器或DXTRAN。

问题模型基本建立后，就要编写输入文件INP。INP中包括对问题几何、材料、源和记数方式的描述，及减小方差的各种技巧。应注意：

- 1、严格按要求填写输入卡。助记符用大写字母。1~5列是为助记符保留的，不要在6~72列之外填写参数项。
- 2、建议按顺序给栅元和曲面编号。



- 3、正确使用物理量单位。长度的单位是cm，而不是mm。粒子输运时间的单位是 $10^{-8}$ s。程序运行时间的单位是min。
- 4、若用 $\text{g}/\text{cm}^3$ 作材料密度单位，应输入负值参数。
- 5、构建栅元时，布尔算符的优先顺序是补、交、并。建议不使用补算符。由于交算符优先，并运算应括起来。
- 6、尽量选择简单的曲面描述几何。避免曲面相切。
- 7、为保证栅元不重叠和不出现几何空缺，建议从几何的一个方向向另一个方向逐渐添加栅元。
- 8、当栅元数量较多时，最好使用列输入方式。
- 9、养成注释的好习惯。
- 10、一定要用大球和VOID卡检查输入有无错误。

每次运行程序后，都要仔细阅读输出文件，包括：研究每个输出表，比较FOM和误差的稳定性，检验径迹分布是否合理，审查点探测器诊断表等。

虽然接续运行的输入文件很短，编写时却容易出现差错。由于每次运行都生成新的转储文件，应对初次运行的转储文件保留备份，以免由于接续运行输入文件的错误造成不应有的损失。

最后，用户应知道，并非增加源粒子数能解决一切精度问题。

## 第 7 章 应用实例

### §7.1 医学物理中的应用

#### 1、肿瘤剂量计算

##### 1.1 将要做的工作

- 1) 练习用宏体定义曲面；
- 2) 布尔交几何操作符的使用；
- 3) 多栅元问题的定义；
- 4) 使用独立和关联分布创建源分布卡；
- 5) 根据发热数，利用栅元通量计数器（F4）计算肿瘤的剂量。

##### 1.2 问题描述

在核医学中，锝（Tc-99m）是一种被广泛用于诊断研究的放射性同位素。其不同化学态可用于大脑、骨骼、肝脏、脾和肾的造影，以及进行血流方面的研究。现有一平行六面体人体组织块，内含三个球形肿瘤区，其组织与肿瘤中的Tc-99m富集度比一定。它们所发射的gamma射线是各向同性的。平行六面体的各边长均为10cm，肿瘤的半径为1cm，中心点位置分别为(0, -2, 0)，(0, 2, 0)和 (2, 0, 0)。

##### 1.3 几何

###### 1.3.1 曲面

为便于读者理解，这里采用与MCNP输入文件中不同的顺序进行叙述，在MCNP输入文件中，栅元卡是在曲面卡的之前给出的，但是在实际写输入文件时，一般是先写好曲面卡，再写栅元卡，这样做更容易些。我们将用宏体来定义曲面，本例所需的曲面卡内容如下：

```
1 rpp -5 5 -5 5 -5 5
2 s 0 -2 0 1
```

```

3 s 0 2 0 1
4 s 2 0 0 1
5 so 10

```

### 1.3.2 栅元

曲面卡定义好后，就可以定义栅元了。我们可以通过给出曲面号，并利用布尔交、联及补的操作来组合这些曲面完成栅元的定义。需要注意的是输入文件中的第一个卡是标题卡。栅元（Cell）1是一个平行六面体组织内，除去其里面的3个肿瘤栅元后的空间。这里，设栅元1的材料号为1，材料号之后紧跟的是质量密度，用负数表示。本例栅元卡的内容如下：

#### **Tissue Containing Tumor Spheres**

##### **C Cell Cards**

```

1 1 -1.04 -1 2 3 4 vol=987.434
2 1 -1.04 -2 vol=4.18879
3 1 -1.04 -3 vol=4.18879
4 1 -1.04 -4 vol=4.18879
5 2 -1.29e-3 1 -5 vol=3188.79
6 0 5

```

对于栅元1来说，组织是处在平行六面体里面的，因此曲面1的前面应该为负号。同时由于栅元1还需除去肿瘤区域，需要用到几何的布尔“交”操作，具体如上面的第3行所示。对于栅元1来说，由于其处于曲面2、3、4的外面，因此它们都应取正号。栅元2、3、4分别用曲面2、3、4的负来定义，表示它们是处于所指定曲面的内部空间。栅元5代表的是六面体曲面1外到边界曲面5之间的空间区域，边界曲面5用于界定感兴趣区几何和外部世界。栅元5的材料可以是真空，也可以是空气。由于MCNP需要定义整个空间，因此本例中剩下所需定义的几何是外部世界，即栅元6。该栅元可以被定义为void，材料号为0，即为真空。记住，一个void是没有材料密度项的。由于外部世界是由曲面5外部空间组成的，因此对栅元6来说，曲面5的前面应取正号（可省略不写）。

如果不想在平行六面体外有任何粒子输运，那么外部世界也可以用曲面1，按如下方式来定义：

```

6 0 1

```

图7.1是来自MCNP交互几何输出的屏幕截图。为了方便说明，我们在图中用不同颜色代表不同的材料。深蓝色的栅元2、3、4代表的是肿瘤组织。浅蓝色的栅元1代表正常组织。在输入卡中，实际并没有为肿瘤组织和正常组织定义不同的材料。当然，如果需要是可以通过添加一个材料卡，来为肿瘤组织指定不同的材料，并在肿瘤栅元卡中选择该材料。图中浅绿色的栅元5代表的是空气；栅元6没有颜色，是因为把外部空间的材料定义为void（空的，没有任何东西，也可被认为是真空）。

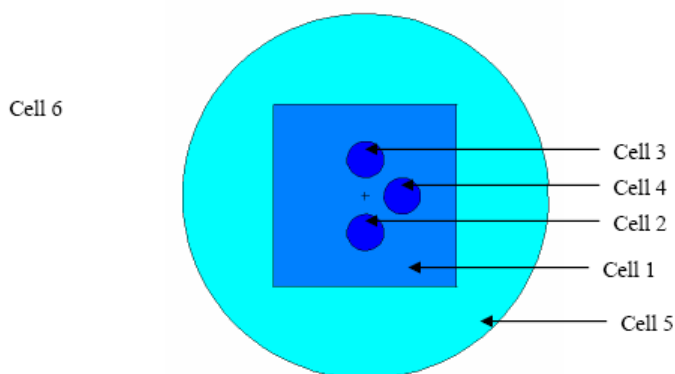


图7.1 原点处XY平面剖视图

## 1.4 材料

几何定义完成后，需要对材料进行定义。在本例中仅需定义的材料是组织和空气，它们都可以用各组成元素的重量比例来定义。软组织的组成是取自ORNL MIRD模体输入卡中定义的情况，具体定义如下：

```
c MATERIAL CARD soft tissue
m1 1000 -0.10454
6000 -0.22663
7000 -0.0249
8000 -0.63525
11000 -0.00112
12000 -0.00013
14000 -0.0003
15000 -0.00134
16000 -0.00204
17000 -0.00133
19000 -0.00208
20000 -0.00024
26000 -0.00005
```

```

30000 -0.00003
37000 -0.00001
40000 -0.00001
c MATERIAL CARD dry air
m2 7000 -0.755 8000 -0.232 18000 -0.013

```

由于未指定截面数据的扩展名，因而MCNP程序将为指定了ZAID的每种元素使用最新的截面数据。对于如本例一样的光子源问题，定义材料时使用如上所示的ZAID来表示是允许的。

## 1.5 源定义

输入文件中，接下来就是定义粒子源。本例中，肿瘤和正常组织中都有源粒子发射，它们在栅元2、3、4和1中的分布比例为6: 6: 6: 1。我们需要用通用源卡（“SDEF”）来定义源。SDEF卡的格式如下：

```

SDEF par=2 erg=d1 cel=d2 rad=fcel=d3 pos=fcel=d8
SI1 L 0.1426 0.1405
SP1 D 0.014 0.986
SI2 L 1 2 3 4
SP2 D 1 6 6 6
DS3 s 4 5 6 7
SI4 0 7.5
SP4 -21 2
SI5 0 1
SP5 -21 2
SI6 0 1
SP6 -21 2
SI7 0 1
SP7 -21 2
DS8 L 0 0 0 0 -2 0 0 2 0 2 0 0

```

对于“SDEF”源，“par=2”表示源粒子为光子。粒子的能量由分布“d1”给出，“SI1”卡中的标记符“L”表示光子具有离散能量值，这里给出的两个能量值分别为0.1426MeV和0.1405MeV。“SP1”卡表明不同能量粒子的发射概率，这里分别是0.014（14%）和0.986

(98.6%)。在本例中, 由于粒子是从4个不同的栅元发射的, 因此“cel”参数也应该是一个分布, 这里用“d2”分布给出。“SI2”卡用于表明粒子将从栅元1、2、3、4中产生, “SP2”给出栅元1、2、3、4中粒子的产生比例为1: 6: 6: 6。源定义中指定的第3个分布用于定义MCNP是否采用舍选技术(rejection technique)将源粒子放入指定栅元时所依据体积球的半径。本例中, “D3”是一个与栅元分布关联的一个分布, “DS3”卡中使用了参数“s”, 为每个栅元定义描述相应半径的次级分布。因为在源定义的第1行中指定了半径的定义是栅元分布定义的函数, 因此MCNP认为“DS3”定义的次级分布是与栅元分布中定义的栅元顺序相对应的, 例如, “DS3”中定义的4个分布, 分别对应于栅元1、2、3、4, 因此分布4、5、6和7表明把粒子放入栅元1、2、3、4所对应的体积球半径分别是7.5cm、1cm、1cm和1cm。这些分布中的“SP”卡表明源粒子是随各自半径服从由参数“-21 2”指定的2次幂分布。这里的2次幂分布表示粒子在体积球内的分布概率是均匀的。在源定义项中的最后一个分布表明位置抽样的参考点是与栅元分布相关的。“DS8”分布指定了与各栅元号相应的各源球的中心位置, 同样由于指定了参数“L”, 表明各中心位置是与栅元分布中栅元的指定顺序相一致的, 即分别对应栅元1、2、3、4。本例中, 我们定义了与各种瘤同样大小的体积球(radius=1cm)和一个能把整个平行六面体包含在内的体积球(radius=7.5cm)作为粒子的产生区。MCNP将使用舍选技术在平行六面体中产生粒子, 但不包括肿瘤区域, 因为我们是根据栅元来定义的。任何落在包围球内, 但不在栅元1内的粒子都将被舍弃, 而只有落在栅元1中的粒子才被保留。

## 1.6 记数及其它数据卡

源定义完成以后, 就可以把注意力集中在计数卡项的建立上。这里将使用“F4”(栅元通量计数器)进行记数。“F4”计数器给出的单位量纲为: 个数/cm<sup>2</sup>/源粒子(particles/cm<sup>2</sup> per particle)。为了能把上面的单位转换成剂量的单位, 需要用到“Fm”(记数乘子)卡。要实现从通量到剂量的单位转换, 可以有两种办法, 一是把一个或多个通量代入到剂量转换函数中; 另一种是使用发热数方法(a heating number method)。两种方法对光子都是可行的, 但对于中子剂量当量、周围剂量当量(ambient dose equivalent)及有效剂量, 还是推荐使用转换函数。本例演示的是采用发热数的方法。

在发热数方法中, MCNP根据比释动能(KERMA)近似来计算吸收剂量, 比释动能近似法是假定转移给带电粒子的动能全部沉积在本地, 即带电粒子的产生位置处。只要下面的条件能满足, 则KERMA近似法是可行的:

(1) 存在带电粒子平衡 (CPE) 或者至少存在瞬时带电粒子平衡以致初始辐射粒子的射程是远大于次级粒子射程的;

(2) 在介质中的辐射损失可以忽略;

而在下面的条件下, 带电粒子平衡 (CPE) 或瞬时带电粒子平衡经常是不能满足的:

(1) 在不同组成或不同密度材料的交界面处;

(2) 近射线束边缘区或离辐射源非常近的区域;

(3) 当光子通过一些特殊介质时, 其能谱随穿透深度剧烈变化;

(4) 当高能光子束入射到高原子序数 (Z) 靶时, 即辐射损失不能被忽略;

使用KERMA近似法时, 其剂量可以用下面的公式表示:

$$D\left(\frac{\text{Gy}}{\text{source particle}}\right) = \frac{C}{N} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^T \phi \sigma_T(E) H(E) \quad (7.1)$$

$$\text{这里 } C = \left(1.602 \times 10^{-10} \frac{\text{Gy}}{\text{MeV/g}}\right) \left(1 \times 10^{-24} \frac{\text{cm}^2}{\text{barn}}\right) \left(\frac{N_0 \eta}{M}\right) \quad (7.2)$$

$N_a$  = 佛加德罗常数 =  $.022 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$ ;

$\eta$  = 每个分子中的子个数;

$M$  = 摩尔质量, 克;

$\Phi$  = 通量, 粒子数/ $\text{cm}^2$ ;

$\sigma_T$  = 原子总截面, 靶恩 [barn];

$H$  = 每碰撞产生的发热数, MeV;

$N$  = 源发射的粒子总数;

$T$  = 记录到的源粒子径迹数。

表达式7.1的和表示对所有记录到的粒子径迹数 (T) 和所有源粒子 (N) 进行求和; 几种常见材料的C值在下表中给出。

表7.1 几种常见材料的C值

材料	值	单位
Air	6.6222e-12	Gy/source photon
Water	1.6045e-11	Gy/source photon
Lucite	1.4436e-11	Gy/source photon
Tissue	1.5787e-11	Gy/source photon

MCNP程序内部本身也带有一个发热数数据库, 具体情况请阅读4C手册3-89页。下面给

出针对加热数方法的记数乘子卡书写格式：

**fmn I m -5 -6**

上面的“**I**”表示的是一个与材料及源粒子数目相关的常数，该值包括上面提到的C值和任何为计算想要参数所需的转换因子。本节后面将给出计算该常数的具体例子，乘子卡中的下一个参数项是需要计算剂量的材料号，它必须是在输入文件中的数据部分所定义的材料。“-5”表示每次记录都应乘以对应该径迹能量的总微观截面 $\sigma_T(E)$ 。“-6”表示每次记录应乘以对应径迹能量的发热数H(E)。下面给出，针对本例的记数和乘子卡：

**F4:p 1**

**fm4 0.011682 2 -5 -6**

**f14:p 2**

**fm14 0.011682 2 -5 -6**

**F24:p 3**

**fm24 0.011682 2 -5 -6**

**f34:p 4**

**fm34 0.011682 2 -5 -6**

每个fm卡中的“**I**”值按下面的方法计算得到：

$$20 \times 10^{-3} \text{ Ci} \times \frac{3.7 \times 10^{10} \frac{\text{decays}}{\text{s}}}{\text{Ci}} \times \frac{1 \text{ photon}}{\text{decay}} \times \frac{1.5787 \times 10^{-11} \text{ Gy}}{\text{source photon}} = 0.011682 \frac{\text{Gy}}{\text{s}} \quad (7.3)$$

因此，每个计数器的结果都将以Gy/s为单位。

除了给出记数和乘子卡外，为了有充足的信息保证MCNP程序能运行，还需要提供其它一些重要的数据卡。具体如下：

**mode p e**

**imp:p 1 1 1 1 1 0**

**nps 100000**

“mode”卡告诉MCNP程序哪些类型的粒子是需要跟踪和记数的。虽然MCNP只能从一种粒子开始跟踪，但为了记数，它也能对次级粒子进行跟踪。通过跟踪次级电子，MCNP能跟踪次级电子产生的韧致辐射以及所得到的剂量、能量注量或其它与该辐射相关的其它感兴趣参数。“imp”卡给出了所有定义栅元的重要性，在本例中，我们是想对运动在肿瘤或周围介质中的粒子进行跟踪，但如果把离开正常组织边界的粒子直接杀死的话，是可以节省计算时间的。由于进入外部空间的粒子是被杀死的，因此用户需要设置好几何，以便处于外部空



间的粒子对记数不会有影响或影响很小。这样，我们就可把栅元1、2、3、4的重要性值都设成1，而把平行六面体以外的空间区域重要性设成0值。“nps”卡表示将要输运的源粒子数目。

完整的输入文件如下：

```
Section 3: Tumors in Tissue

C *****

C CELL CARDS

C *****

1 1 -1.04 -1 2 3 4 vol=987.434
2 1 -1.04 -2 vol=4.18879
3 1 -1.04 -3 vol=4.18879
4 1 -1.04 -4 vol=4.18879
5 2 -1.29e-3 1 -5 vol=3188.79
6 0 5

C *****

C SURFACE CARDS

C *****

1 rpp -5 5 -5 5 -5 5
2 s 0 -2 0 1
3 s 0 2 0 1
4 s 2 0 0 1
5 so 10

C *****

C DATA CARDS

C *****

109

mode p e

phys:p 3 0 0 1j 1

imp:p 1 1 1 1 1 0

SDEF par=2 erg=d1 cell=d2 rad=fcel=d3 pos=fcel=d8

SI1 L 0.1426 0.1405

SP1 D 0.014 0.986
```

```
SI2 L 1 2 3 4
SP2 D 1 6 6 6
DS3 s 4 5 6 7
SI4 0 7.5
SP4 -21 2
SI5 0 1
SP5 -21 2
SI6 0 1
SP6 -21 2
SI7 0 1
SP7 -21 2
DS8 L 0 0 0 0 -2 0 0 2 0 2 0 0
c MATERIAL CARD soft tissue
m1 1000 -0.10454
6000 -0.22663
7000 -0.0249
8000 -0.63525
11000 -0.00112
12000 -0.00013
14000 -0.0003
15000 -0.00134
16000 -0.00204
17000 -0.00133
19000 -0.00208
20000 -0.00024
26000 -0.00005
30000 -0.00003
37000 -0.00001
40000 -0.00001
c MATERIAL CARD dry air
m2 7000 -0.755 8000 -0.232 18000 -0.013
```

```

F4:p 1
fm4 0.011682 1 -5 -6
f14:p 2
fm14 0.011682 1 -5 -6
F24:p 3
fm24 0.011682 1 -5 -6
f34:p 4
fm34 0.011682 1 -5 -6
nps 250000
print

```

## 1.7 运行与输出

假设本例的输入卡文件名为ex3，则可在命令行下输入命令运行：

```
mcnp i=ex3 o=ex3out1 r=ex3r1
```

你可以使用任何你想用的输入文件名及输出文件名。一个比较好的作法是对runtpc 文件（如“r=ex3r1”所示）进行命名，以便能在一些特殊运行时容易找到。该文件在你想要对已有的运行输出记数或进行接续运行时就会被用到。一旦MCNP计算完成，请检查输出文件看看结果。输出文件的末尾部分给出了“记数涨落图”（tally fluctuation charts），在这些图上，MCNP标明你的记数结果是否通过其内建的10项统计检查。通常，你的运行结果应该通过这些检查，本例在运行了2.5E5个粒子后，通过了所有10项统计检查。通过检查每个计数器的记数涨落图，你应注意各粒子历史数的变化特征。在全部粒子历史输运完成后，所得结果应该在合理的收敛范围内。若相对误差小于5%，其结果是合理的。本例中2.5E5个粒子历史完成后，所得结果的相对误差是小于1%的，表明结果的统计误差具有很高的自信度。表7.2给出了本例运行后所得的记数结果情况。

表7.2 记数结果汇总

栅元号 (Cell)	剂量率 (Dose Rate) (Gy/s)	相对误差 (Relative Error)
1	2.4226E-06	0.0008
2	2.9142E-05	0.0036
3	2.8992E-05	0.0036

与我们所期望的一样，在正常组织（栅元1）中的剂量率要比在肿瘤球中的剂量率小很多。有意思的是，栅元4中的剂量率要明显比栅元2和3中的剂量率高，这是因为栅元4是位于栅元2和栅元3之间，它会更多地接收来自另外两个肿瘤栅元所发射粒子的剂量。对于能量为140keV的光子在组织中的平均自由程仅约为6cm，因此在组织中的剂量要比在肿瘤中的剂量小很多。

## 1.8 总结

以上提供的例子是计算4个不同栅元（包括3个肿瘤球及周围正常组织体）中的剂量率。在本例中，几何是通过宏体曲面定义的，同时用包括无关和相关类型的8种不同分布定义了一个相当复杂的“SDEF”源。另外本例也描述了如何用“F4”（栅元通量记数）计数器和发热数方法计算4个感兴趣栅元中的剂量率情况。

## 2、X 线治疗

### 2.1 概述

本例利用一个解析的Snyder头模来分析进行x线治疗的有效性，这种治疗是通过给一个脑肿瘤施加剂量的方式进行的。x线治疗是指用高原子序数的材料装载肿瘤并用千伏级x射线对其进行照射。常规的碘（iodine）与钆（gadolinium）是进行x线治疗比较理想的造影剂。因为高原子序数材料具有大光电效应截面，能产生象光电子、俄歇级联辐射以及特征x射线这样的次级辐射，这些辐射具有较高的线性能量转移系数（LET），能提高肿瘤本地剂量分布，并减小健康组织的剂量。

### 2.2 将要做的工作

- （1）用带有肿瘤的解析Snyder头模计算肿瘤受外部x线束照射的能量注量情况；
- （2）定义一个退化的圆柱形源来模拟射线束；
- （3）使用F8（脉冲高度）计数器计算光子在肿瘤中的能量沉积谱。

## 2.3 问题描述

本例介绍的是一种分析x线治疗有效性的方法，以便使肿瘤的剂量最大化，例如，可以把钆添作为造影剂添加到肿瘤中，从而提高肿瘤的剂量。通过使用“F8”（脉冲幅度）计数器，可以分析肿瘤中不同钆浓度对光子能量沉积谱的影响。

## 2.4 几何

本例将要用到的Snyder头模输入数据可以在MCNP的网站上找到，该模体由3个椭球体和一个球体组成，球体为肿瘤，其与3个椭球体是等中心的。用于创建椭球曲面的方程如下：

$$Brain: \left(\frac{x}{6}\right)^2 + \left(\frac{y}{9}\right)^2 + \left(\frac{z-1}{6.5}\right)^2 = 1$$

$$Skull: \left(\frac{x}{6.8}\right)^2 + \left(\frac{y}{9.8}\right)^2 + \left(\frac{z}{8.3}\right)^2 = 1$$

$$Skin: \left(\frac{x}{7.3}\right)^2 + \left(\frac{y}{10.3}\right)^2 + \left(\frac{z}{8.8}\right)^2 = 1$$

头部中心的肿瘤是用一个圆心在坐标原点，半径为2.54cm的球体描述的。这里之所以在该模体中加入肿瘤，目的是让大脑与肿瘤具有不同的材料，从而使用不同的钆造影剂浓度。

## 2.5 材料

本例中组成Snyder头模的材料是根据ICRU 46号出版物中给出的成人脑、头盖骨及皮肤组成定义的。表7.3给出的是不同材料的ZAID值及其重量比例情况（在每个材料卡中用负值表示）。

表7.3 ICRU 46号出版物中给出的材料说明

Adult Whole Brain		Whole Cranium		Adult Skin	
ZAID	Weight Fraction	ZAID	Weight Fraction	ZAID	Weight Fraction

1001	0.107	1001	0.050	1001	0.100
6000	0.145	6000	0.212	6000	0.204
7014	0.022	7014	0.040	7014	0.043
8016	0.712	8016	0.435	8016	0.645
11023	0.002	11023	0.001	11023	0.002
15031	0.004	12000	0.002	15031	0.001
16000	0.002	15031	0.081	16000	0.002
17000	0.003	16000	0.003	17000	0.003
19000	0.003	20000	0.176	19000	0.001

本例是用钨作为造影材料进行x线光子治疗的，为了便于说明，我们用该输入文件进行了四轮模拟计算，其中一轮是肿瘤中不含钨的，另外三轮则是改变肿瘤中钨的重量比例进行模拟的。

## 2.6 源的定义

在x线光子治疗中，掺有造影剂的肿瘤受到千伏级x线束照射。用MCNP定义射线束的一种办法就是用一个退化的零长度圆柱形源表示，本例中射线束沿z轴放置，位置为 $z=15$ ，选择的源是钯-100（palladium-100）产生的x线。表7.4中列出了钯-100所产生的x线能量与相对强度。

表7.4 钯-100源 x线能量与相对强度

Energy(keV)	Relative Intensity
32.66	4.90
42.08	13.50
53.52	0.08
61.60	0.51
72.52	0.15
74.78	92.00
84.00	100.00
86.37	0.05
119.18	0.13

126.15	15.00
139.92	0.35
151.88	0.61
154.00	0.06
158.87	3.20

以下给出的是用于产生一个射线束的退化圆柱形源的定义，它用到了钯-100产生的x线的能量与相对强度：

**SDEF pos=0 0 15 vec=0 0 -1 axs=0 0 -1 ext=0 dir=1**

**ara=78.53982 rad=d1 erg=d2**

**SI1 0 5**

**SP1 -21 1**

**SI2 L 0.03266**

0.04208

0.05352

0.06160

0.07252

0.07478

0.08400

0.08637

0.11918

0.12615

0.13992

0.15188

0.15400

0.15887

**SP2 4.90**

13.50

0.08

0.51

0.15

92.00

```

100.00
0.05
0.13
15.00
0.35
0.61
0.06
3.20

```

与先前描述的一样，线束的中心位于“0 0 15”处，它由“SDEF”卡中的“pos”参数给出。“vec”与“axs”描述的是线束相对于z轴的方向。“ext”表示退化圆柱的长度为0。面积变量，即“ara”，它只在平面源对点探测器有直接贡献时需要。“rad”变量指定了曲面源或体源的半径。在本例中，退化圆柱的半径是从0到5。“SP1”卡给出源粒子是在源盘上沿径向服从一次幂函数分布，这是圆形面源中所希望的粒子分布形式。由于当MCNP程序要对x线管靶中的韧致辐射光子产物进行跟踪时将会花很长的计算时间，为此我们在“SDEF”卡中显式指出是光子源。该线束源发射的离散光子能量由“erg”中指定的2号分布给出。“SI2”卡中的“L”表示其后面的值是离散的，其各自的出现概率由“SP2”卡给出。

## 2.7 记数及其它数据卡

为对本例中的能量沉积谱作分析，我们使用了“\*F8”脉冲幅度记数卡，它与能量分布卡一起使用，如下所示：

```

*F8:p,e 101
e8 1e-10 100i 0.2

```

这里的“e8”卡把1e-10MeV到0.2MeV的能量范围划分成了101个能量箱。尽管MCNP对电子和光子的输运下限是1keV，但程序能计算的能量沉积可以是很小很小的增量。

除了记数和能量分布卡外，本例还需一个“mode”卡和一个“nps”卡。为了防止MCNP在运行本例时进行Doppler能量展宽，需要用“phys”卡将其关闭。另外还需要用“imp”卡分别为光子及电子指定在各栅元中重要性。下面给出以上所有数据卡的输入：

```

mode p e
phys:p 1j 0 0 1j 1
imp:p 1 1 1 1 1 0

```



**imp:e 1 1 1 1 1 0**

## 2.8 运行与结果输出

本例完整的输入文件如下：

```
C*****
C CELL CARDS
C*****
c Surrounding Ellipsoids
100 100 -1.04 -10 42
101 101 -1.04 -42
200 200 -1.61 10 -20
300 300 -1.09 20 -30
400 400 -1.293E-03 30 -40
500 0 40

C*****
C SURFACE CARDS
C*****
10 sq 0.0277778 0.0123456 0.0236686 0 0 0 -1 0.0 0.0 1.0
20 sq 0.0216263 0.0104123 0.0145159 0 0 0 -1 0.0 0.0 0.0
30 sq 0.0187652 0.0094260 0.0129133 0 0 0 -1 0.0 0.0 0.0
c Snyder phantom: Surfaces, Center is 0,0,0
c (x/6)**2 + (y/9)**2 + ([z-1]/6.5)**2= 1 (brain)
c (x/6.8)**2 + (y/9.8)**2 + (z/8.3)**2 = 1 (skull)
c (x/7.3)**2 + (y/10.3)**2 + (z/8.8)**2 = 1 (skin)
c
40 so 50
42 so 2.54
c boundary with external universe
```

C

C\*\*\*\*\*

C DATA CARDS

C\*\*\*\*\*

c BRAIN (ICRU 46 Adult Whole Brain dens=1.040)

m100 1001 -0.107

6000 -0.145

7014 -0.022

8016 -0.712

11023 -0.002

15031 -0.004

16000 -0.002

17000 -0.003

19000 -0.003

c BRAIN (ICRU 46 Adult Whole Brain dens=1.040) w/ Gd!

m101 1001 -0.10699679

6000 -0.14499565

7014 -0.02199934

8016 -0.71197864

11023 -0.00199994

15031 -0.00399988

16000 -0.00199994

17000 -0.00299991

19000 -0.00299991

64000 -0.050000

c SKULL (ICRU 46 Skeleton, Whole Cranium dens=1.610 g/cm3)

m200 1001 -0.050

6000 -0.212

7014 -0.040

8016 -0.435

## 蒙特卡罗方法与 MCNP 程序入门

```
11023 -0.001
12000 -0.002
15031 -0.081
16000 -0.003
20000 -0.176
c SCALP (ICRU 46 Adult Skin dens=1.090 g/cm3)
m300 1001 -0.100
      6000 -0.204
      7014 -0.042
      8016 -0.645
11023 -0.002
15031 -0.001
16000 -0.002
17000 -0.003
19000 -0.001
c AIR (Medical Physics Air dens=0.0013 g/cm3)
m400 6000 -0.00012
      7014 -0.75527
      8016 -0.23178
      20000 -0.01283
mode p e
phys:p 1j 0 0 1j 1
imp:p 1 1 1 1 1 0
imp:e 1 1 1 1 1 0
SDEF pos=0 0 15 vec=0 0 -1 axs=0 0 -1 ext=0 dir=1 ara=78.53982 rad=d1
erg=d2
SI1 0 5
SP1 -21 1
SI2 L 0.03266
      0.04208
      0.05352
```

```
0.06160
0.07252
0.07478
0.08400
0.08637
0.11918
0.12615
0.13992
0.15188
0.15400
0.15887
```

```
SP2 4.90
```

```
13.50
0.08
0.51
0.15
92.00
100.00
0.05
0.13
15.00
0.35
0.61
0.06
3.20
```

```
*F8:p,e 101
```

```
e8 1e-10 100i 0.2
```

```
nps 10000000
```

按下面的命令运行本例题：

```
mcnp i=ex5 o=ex5out1 r=ex5r1
```

只要在一个命令行中不超过256个字符，你可以使用任何你想要的输入输出文件名。把来自输出文件中的数据粘贴到

Excel表格中，以便作图。图7.2就是用输出文件中的数据作图得到的，该图表明101个能量箱的分辨率足以显示钆—100x线在肿瘤中的能量沉积谱的主要特征。其主要特征情况已在图中标出，可以看到随着肿瘤中钆浓度的增加能谱的漂移是很明显的。这与我们预期的结果是符合的，即增加钆浓度会使x线的能量沉积谱朝高能方向漂移。

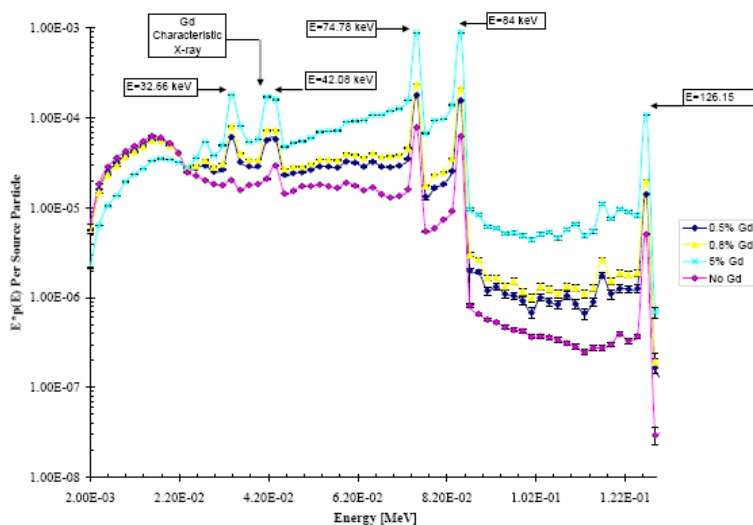


图7.2 肿瘤中不同钆浓度时的能量沉积谱

## 2.9 总结

本节介绍了一种针对用钆—100的x线和钆造影材料进行大脑肿瘤治疗技术中，如何用MCNP程序建立能量沉积谱的方法。通过在Snyder头模中添加一个肿瘤的办法，计算得到了上面的结果。与预期的一样，能量沉积谱是随肿瘤中钆浓度的增加而向高能方向漂移。

## 3、<sup>192</sup>Ir 近距离治疗源

### 3.1 问题描述

近距离放射治疗是指把放射源植入人体空腔或肿瘤（组织间插植照射），或放在紧靠肿瘤的地方（腔内照射）的这样一种医学过程。各种近距离治疗装置被设计用于给动脉内膜与表面提供高剂量率（一般为12Gy），而对周围组织产生非常小的剂量，从而使这种装置在用于治疗动脉血栓时比外照射更有吸引力。

本例针对的近距离治疗装置用<sup>192</sup>Ir伽马源对近场（小于5cm）区域周围的水进行高剂量率照射。用MCNP程序确定其径向及各向异性剂量分布情况。定义沿编织结构钢缆通过装置中

心的轴线为 $0^\circ$ 方向，各向异性分布的区间划分是从 $0^\circ$ 到 $180^\circ$ 每 $10^\circ$ 为间隔，将包围射线源的水球分割成18个楔形栅元，并在这些栅元中进行记数，如下图所示。

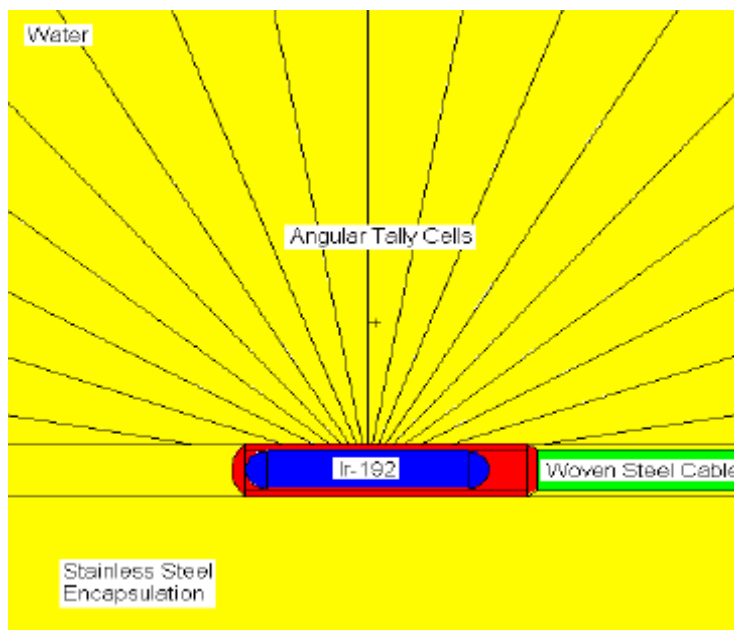


图7.3 各向异性近距离治疗模型的侧视图

径向剂量分布是用与源的柱面同心的圆柱栅元，如下图所示。

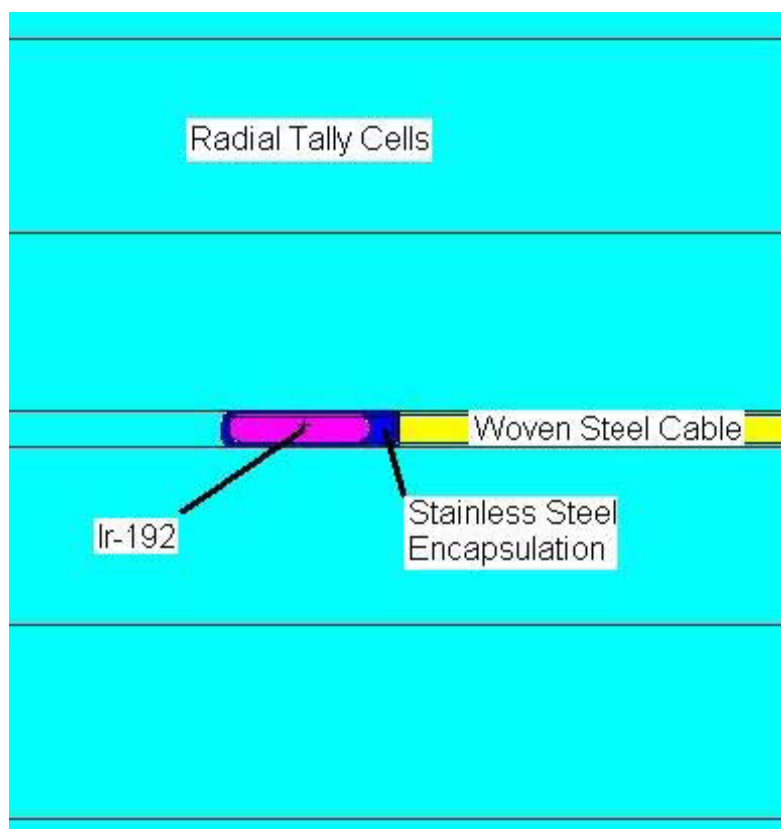


图7.4 径向近距离治疗模型的侧视图

(径向记数栅元是半径以0.5cm递增的圆柱)

### 3.2 几何说明

如下图所示， $^{192}\text{Ir}$ 近距离源件是以 $^{192}\text{Ir}$ 为核心的圆柱体，半径为0.0325cm，中心在坐标原点处。两端是相同半径大小的半球帽，总长度为0.36cm。然后，对 $^{192}\text{Ir}$ 的核芯部分再用半径0.045cm的不锈钢圆柱壳封装，一端用半径0.061cm的半球帽封住，另一端用一个锥形帽连接到编织钢缆，使得锥形帽到钢帽之间的最大长度达到0.45cm。不锈钢壳与钢缆都是不锈钢，但它们的密度有差异，并假定这两种材料的分界线是在锥形体的小头端。用半径为5cm的水球把整个源件包围起来，该水球的边界也作为该问题的边界。

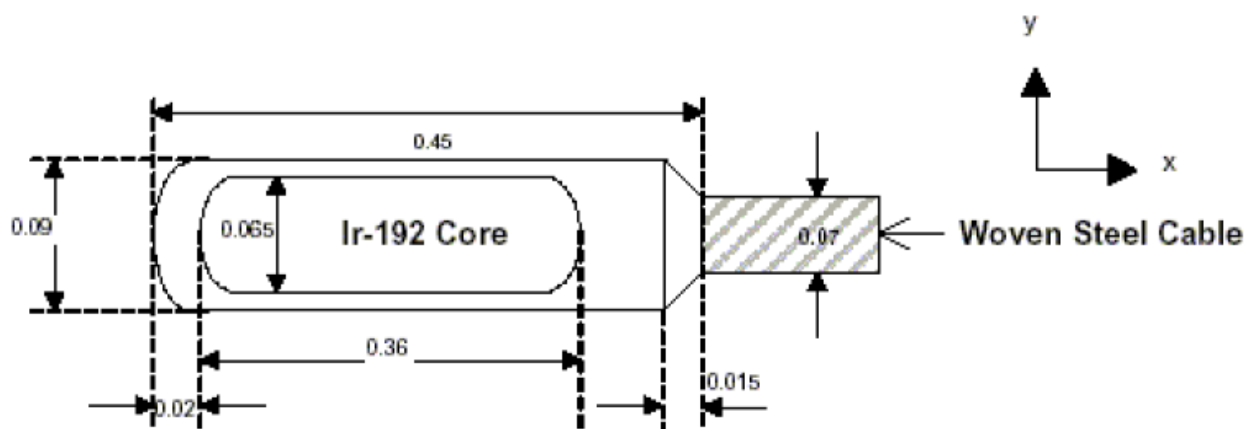


图7.5  $^{192}\text{Ir}$ 近距离治疗源件的几何

### 3.3 源项

把源件核心的 $^{192}\text{Ir}$ 部分描述为栅元1，它包括中间圆柱体和两端的半球帽部分。然后把源定义为圆柱形源，其半径等于 $^{192}\text{Ir}$ 圆柱和半球帽的半径，长度等于半球帽的外缘到中心的距离。通过在源定义卡（SDEF卡）中包含栅元1，使得源点只在栅元1中进行圆柱体抽样，这样可以使得抽样的源点几何分布能与实际的两端带有半球帽部分的源形状相近。最初，还试着使用了一些源偏倚技巧，但是发现权重很高的可能是来自源中心的粒子有时会引起协方差（VOV）变化比较大。协方差在相对误差估计中是相对统计不确定度的一个指标，它对大历史记数涨落或大的记数变化非常灵敏。

### 3.4 记数说明

径向剂量分布是通过把整个5cm的水球，以 $^{192}\text{Ir}$ 源核心及不锈钢外壳为中心轴，半径每增加0.5cm放置一个柱面来划分栅元进行记数。

各向异性分布最初设置的角度增量为5度，但是在合理的计算时间内结果并不收敛。协方差也涨落很大，表明那些权重很高或概率很低的事件没有得到足够的抽样。为了避开这个问题，把楔形体的角度增量设成10度。

在计算各向异性和径向剂量分布时，F6和\*F8计数器都被采用了。F6计数器给出的结果单位是 $\text{MeV.g}^{-1}$ ，通过记数乘子卡（FM卡）进一步转换成戈瑞（Gy）。\*F8计数器所得结果的单位是MeV，它要转换成剂量的单位Gy必须除以栅元的质量，再乘以 $6.02\text{E-}10$ ，它把 $\text{MeV.g}^{-1}$ 转换成 $\text{J.kg}^{-1}$ （Gy）。栅元的质量可以用栅元中材料的密度与其体积相乘得到。

### 3.5 结果

最终得到的径向和各向异性剂量分布都是归一到一个源粒子的贡献。下图是径向剂量分布的结果。

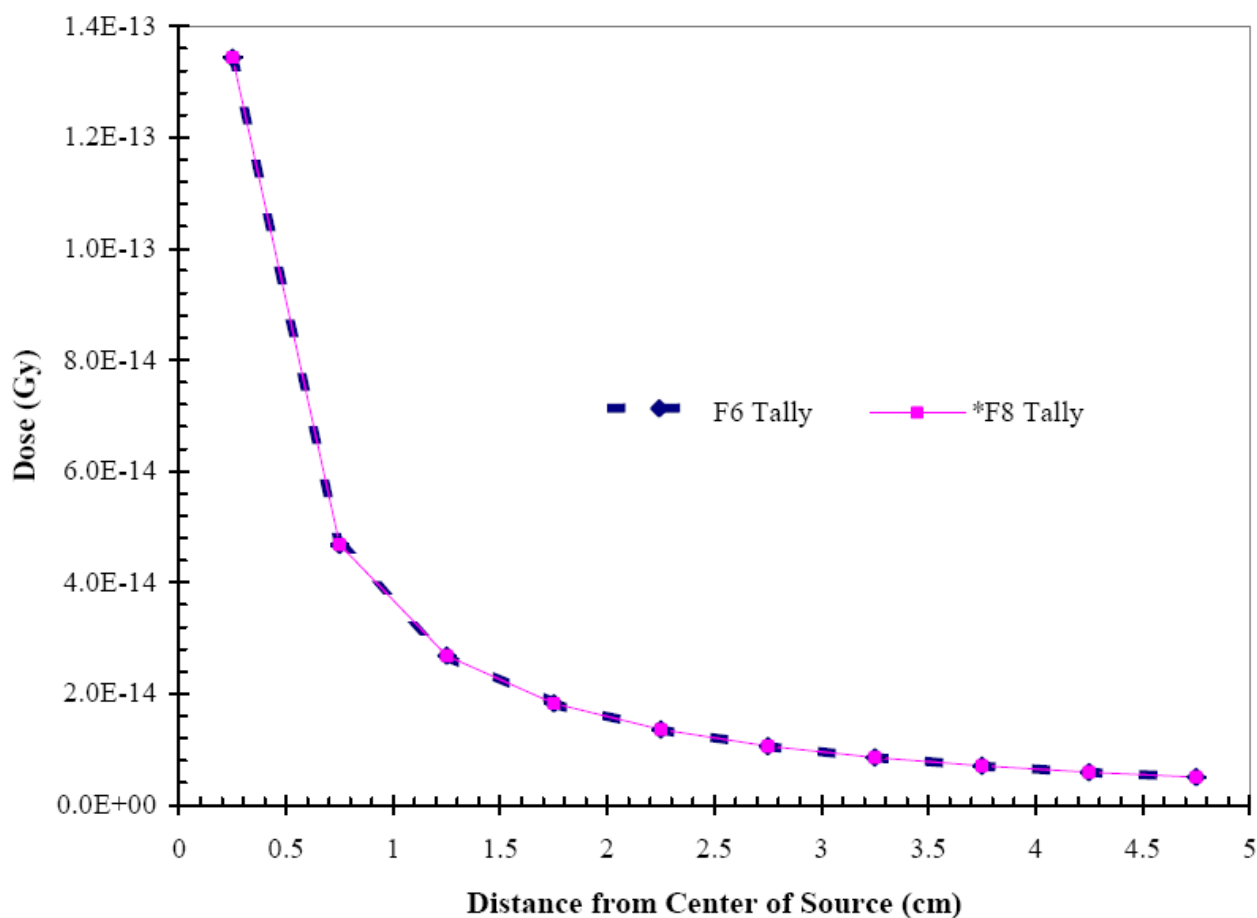


图7.6  $^{192}\text{Ir}$ 近距离治疗源件的径向剂量分布情况，统计误差给出的是1个标准偏差（ $1\sigma$ ），它要比数据点的大小要小很多。



$^{192}\text{Ir}$ 近距离治疗源件的角度剂量分布如下图所示。

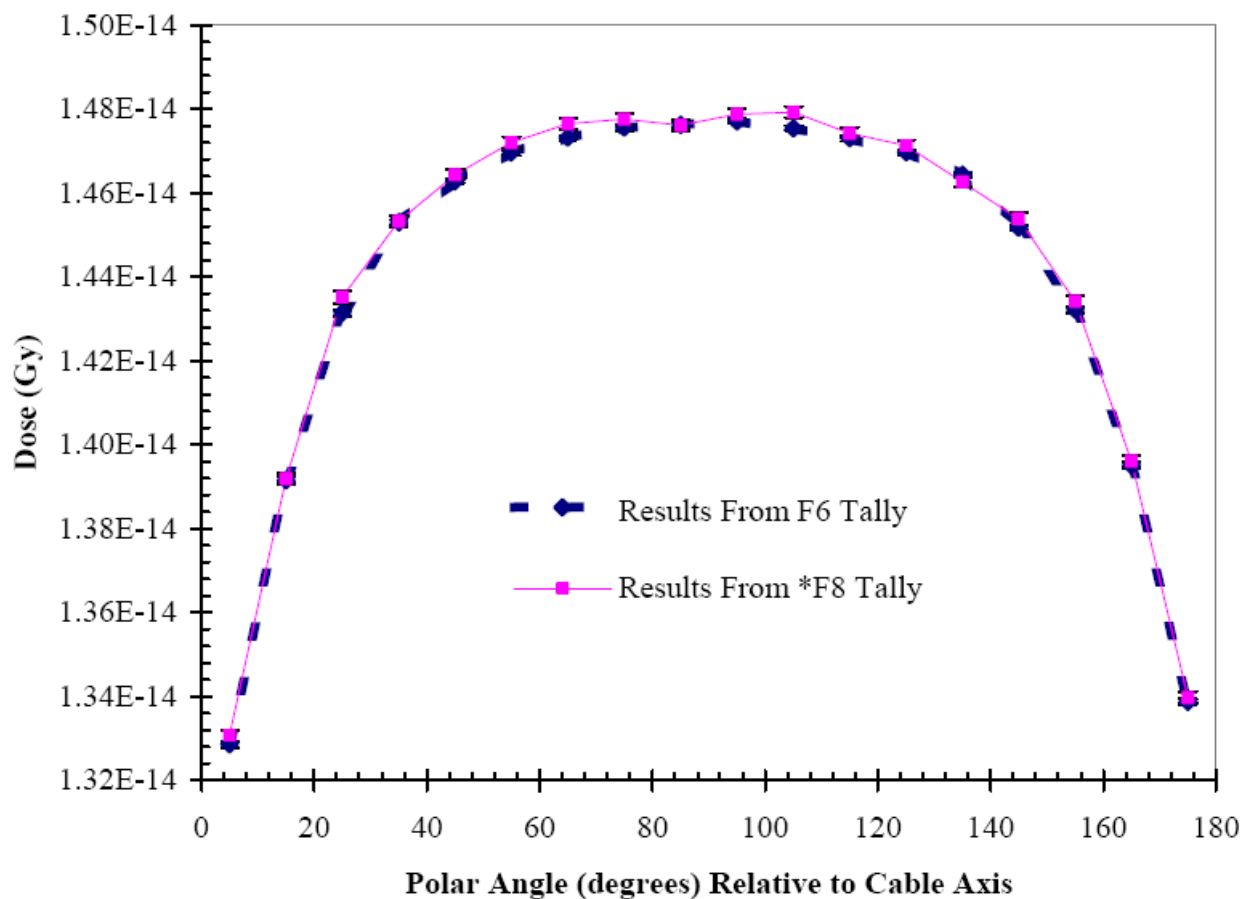


图7.7  $^{192}\text{Ir}$ 近距离治疗源件的角度各向异性剂量分布情况，统计误差给出的是1个标准偏差（ $1\sigma$ ），它要比数据点的大小要小很多。

为了更好的显示出F6与\*F8两种记数器结果的差别，下面给出的是 $40^\circ$ 到 $140^\circ$ 之间的角度各向异性剂量分布。

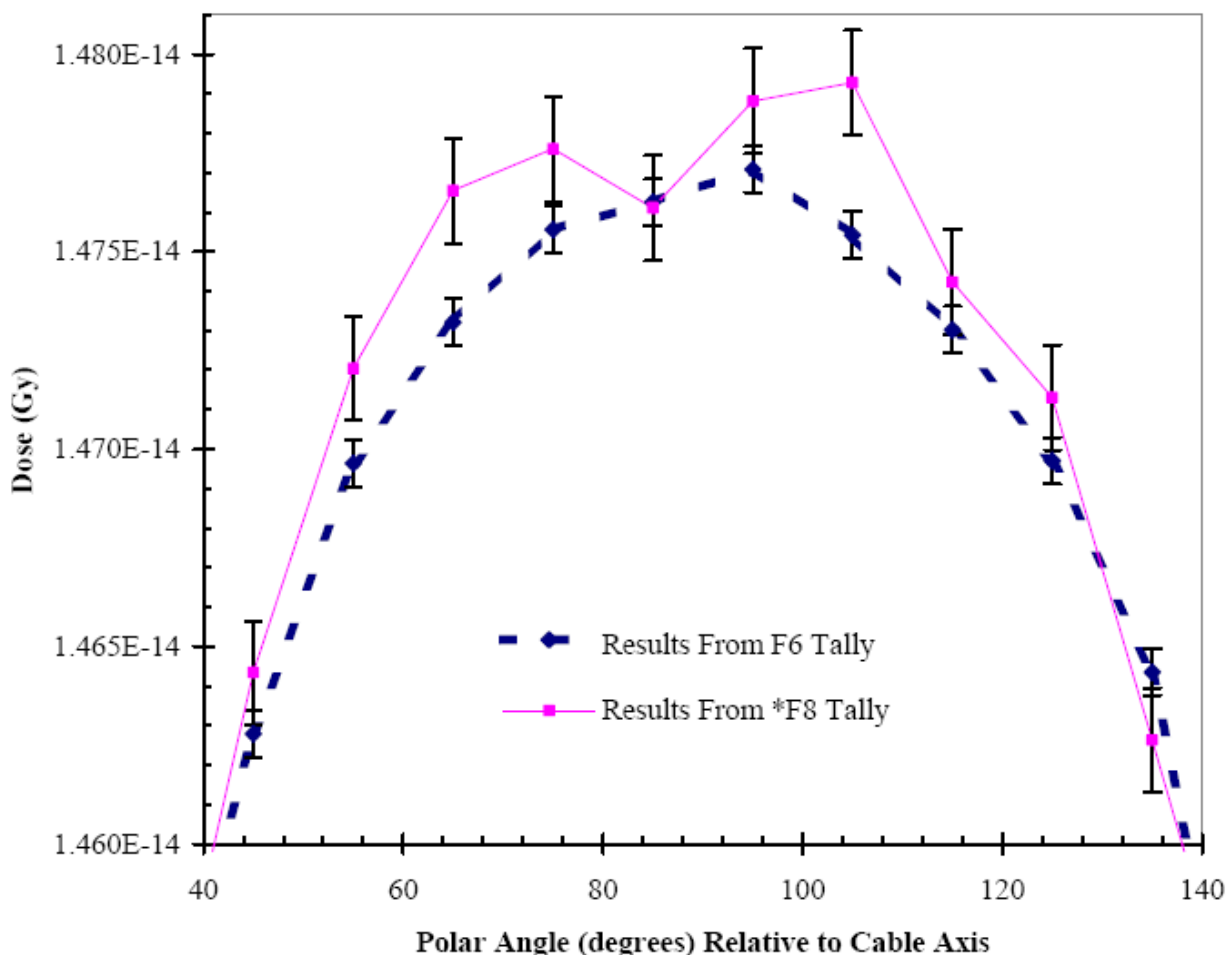


图7.8  $^{192}\text{Ir}$ 近距离治疗源件的角度各向异性剂量分布情况的局部放大 (close-up)，统计误差给出的是1个标准偏差 ( $1\sigma$ )，它要比数据点的大小要小很多。

### 3.6 讨论

由于F6记数要根据楔形体的体积来确定其质量大小，因此在计算各向异性剂量分布时，必须手工计算并输入所有楔形体的体积值。MCNP计算栅元质量的方法是用栅元体积乘以栅元的材料密度。因为在楔形体中有一个圆柱体，它不是均匀通过各楔形栅元的，因此很难对栅元的体积径向准确计算。此外，圆柱体两端又是半径为5cm的球体包覆部分，因此该包覆顶端与圆柱并不是刚好成一个角度值。假定圆柱体的长度为10cm，则其体积为 $0.0636\text{cm}^3$ 。如果忽略该圆柱体体积，则各楔形体栅元的体积都是 $14.5444\text{cm}^3$ 。最多有圆柱体的一半体积是位于栅元中的楔形体是 $0^\circ$ - $10^\circ$ 和 $170^\circ$ - $180^\circ$ ，对于这两个楔形体，其体积为 $14.5444\text{cm}^3 - 0.0318086\text{cm}^3 = 14.5126\text{cm}^3$ ，其余楔形体体积均为 $14.5444\text{cm}^3$ 。这样可能会有些误差，但是如果结果是取三位有效数字的话，是看不出有差别的。为了能比较F6与\*F8的记数结果，计算的时候两

者使用相同的体积。

在本问题中，通过取小数点后面三位有效数字，可以很好的比较两种计数器的记数结果差异情况。两种计数器的径向剂量分布差异情况是0.0%–0.22%，而各向异性的剂量分布差异是0.0%–0.28%。有意思的是，\*F8的记数结果标准偏差经常是在F6记数结果的外部。因此\*F8记数结果的精度要比F6的记数结果精度小一倍。

## §7.2 反应堆物理计算中的应用

### 1、慢化剂中的 $S(a,b)$ 热中子散射率

#### 1.1 将要做的工作

- (1) 使用和理解 $S(\alpha,\beta)$ 热中子散射率；
- (2) 理解栅元卡上的几何操作顺序；
- (3) 看看 $S(\alpha,\beta)$ 处理效果；
- (4) 对 $K_{eff}$ 的输出结果进行解释

#### 1.2 $S(\alpha,\beta)$ 热中子散射率

先说说使用 $S(\alpha,\beta)$ 散射率的原因。当中子能量降低到只有几个eV时，散射核的热运动会碰撞产生强烈的影响。要考虑这种影响，最简单的模型就是自由气体模型，该模型认为这些散射核是以单原子气体形式出现的，这也是MCNP默认的热中子作用模型。实际情况是，多数核是以液态或固态分子组成的形式出现。对于束缚态核，其能量是以振动能和转动能形式存在。单个核的**结合能**是会对热中子与这些材料的相互作用产生影响的。 $S(\alpha,\beta)$ 散射率就是用来考虑束缚核对热中子与材料相互作用影响的，因此认识到水中的氢与聚乙烯中的氢对上述作用的影响是不同的这一点很重要。MCNP中不仅有氢的各种 $S(\alpha,\beta)$ 数据，其它元素的也有。

#### 1.3 问题描述

本例是一个裸（没有反射） $UO_2F_2$ 溶液柱，铀中 $^{235}U$ 的重量百分比是4.89%，溶液柱的

半径是20.12cm，高为100.0cm，被装在一个壁和底均为0.1587cm厚，高为110.0cm的铝桶中，铝桶的上面是没有盖的。从溶液的表面到铝桶的顶部空间是空的。本问题的数据如下：

### 1.3.1 几何

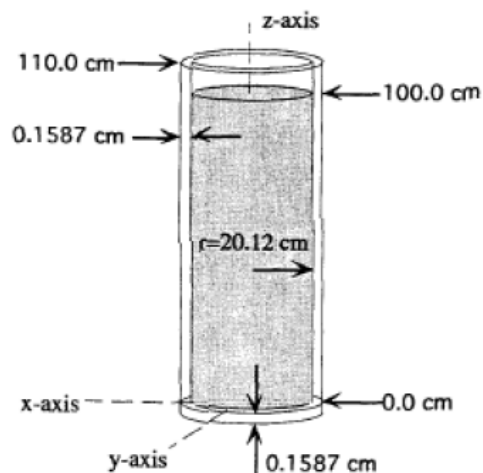


图7.9 问题几何

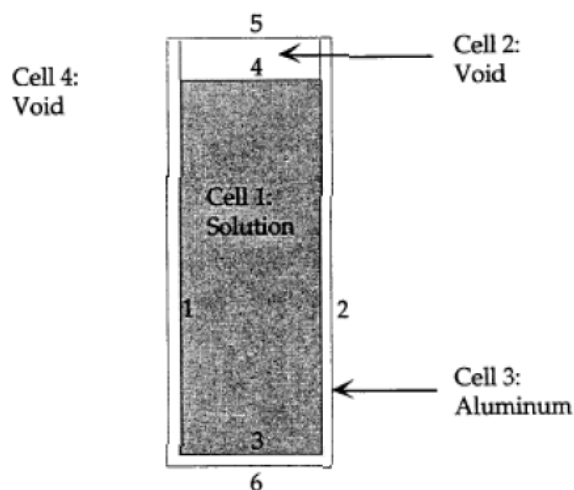


图7.10 栅元及曲面

#### A、一般的描述方法

曲面卡：

##### C Surface Cards

```
1 cz 20.12
2 cz 20.2787
3 pz 0.0
4 pz 100.0
5 pz 110.0
6 pz -0.1587
```

栅元卡：

##### Example 3-4. S(alpha, beta) Treatment

##### C Cell Cards

```
1 1 9.6586E-2 -1 3 -4 imp:n=1
2 0 -1 4 -5 imp:n=1
```

```
3 2 -2.7 (1 -2 -5 3) : (-2 -3 6) imp:n=1
4 0 2:5:-6 imp:n=0
```

上面的栅元3也可以用下面的方法进行描述:

```
3 2 -2.7 1 -2 -5 3
5 2 -2.7 -2 -3 6
```

或

```
3 2 -2.7 (1:-3) -5 -2 6
```

## B、利用宏体进行描述

随着问题几何复杂性的增加, MCNP可以有多种不同的方式来描述几何。下面给出利用宏体描述本例几何的例子:

**Example 3-4, UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> Cylinder, S(alpha,beta) Treatment**

**C Cell Cards**

```
1 100 9.6586E-2 -10 imp:n=1
2 0 -20 imp:n=1
3 101 -2.7 10 20 -30 imp:n=1
4 0 30 imp:n=0
```

**C Surface Cards**

```
10 rcc 0 0 0 0 0 100.0 20.12 $ Can of UO2F2
20 rcc 0 0 100 0 0 10.0 20.12 $ Void gap above UO2F2
30 rcc 0 0 -0.1587 0 0 110.1587 20.2787 $Exterior of Al can
```

### 1.3.2 材料

材料1是铀溶液。铀在水中是以UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub>的形式存在的, 因此有两个氧(O)浓度。在本例中, 这两个氧浓度可以合在一起写, 也可以分开单独写。这两个ZAID的库扩展名是.62c表示

其使用的数据是来自ENDF/B-VI.8版的评价库，也是ENDF/B-VI库的最终释放版本。然而，U和Pu的同位素数据，除了一些次要的同位素外，其数据与ENDF/B-VI.6版相比基本上是没有变化。与之相应的这些同位素的MCNP ZAID扩展名是.66c。在m1卡之后是S( $\alpha,\beta$ )卡（mt1），表示对材料1中的氢（H）应用S( $\alpha,\beta$ )热散射率。轻水标识lwtr是用来告诉程序要对材料1中出现的氢应用S( $\alpha,\beta$ )处理，将其看作是被束缚在轻水中而不是自由气体形式。扩展名.60t表示所使用的散射率数据是基于ENDF/B-VI.3评价库的。

材料2是铝，其原子序数为13，原子量是27。它的ZAID值是13027，由于原子量总是用3位整数表示，因此对于原子量10到99的前面必须补一个0，而对于原子量小于10的则必须补两个0。由于材料2中只有铝一种同位素，因此可以输入原子数比例系数1，表示100%都是铝。

本问题的材料卡如下：

#### C Data Cards

#### C Materials Library Cards

```
m1 1001.62c 5.7058e-2 8016.62c 3.2929e-2
9019.62c 4.3996e-3 92238.66c 2.0909e-3
92235.66c 1.0889e-4
mt1 lwtr.60t
m2 13027.62c 1
```

### 1.3.3 临界控制卡

本例中，如果把源设在溶液的中心（0，0，50.0）处，则控制卡的写法如下：

#### C Criticality Control Cards

```
kcode 5000 1.0 50 250
ksrc 0 0 50.0
```

临界问题控制：

在计算 $k_{eff}$ 时，蒙特卡罗方法会出现一些小的偏差。如果在计算每个 $k_{eff}$ 时，使用的中子数不应低于5000，当然10000个就更好，那些小偏差不会对MCNP的输出结果造成影响。如果在kcode卡中的第1项中设置每次 $k_{eff}$ 循环的中子数目越多，那么偏差就越小。因此，结合有效 $k_{eff}$ 循环数的设置不低于200，尽可能地运行更多中子历史数是比较好的。有效循环次数设成

200对于确定问题表现是否正常及裂变源是否收敛是绰绰有余了。MCNP要产生最终的keff结果列表数据，至少要保证30个有效循环数。若循环数过少则其提供的信息不足以评价计算的质量。此外，如果循环次数过少，置信区间的产生就很困难。能够计算的最大循环数是没有的，有效循环的次数不能太大，以致最终keff结果的标准偏差估计值要比keff中已经非常小的偏差还要小。一般来讲，对于临界安全方面的应用，200到500个有效keff循环就可以了。keff的初始估计值（kcode卡的第2项）仅对第2个keff循环的裂变源点的产生有影响。初始估计值过低则会导致太多的源点产生，反之亦然。在后续的循环中，源点是不会受到keff的初始估计值影响的。在kcode的第2项要声明足够的keff循环数，以便计算的空间裂变源收敛到基本模式（fundamental mode）。初始源越接近基本模式形状，需要跳过的循环次数就越少。点源可以很容易地用ksrc卡指定。在每个可裂变区，最好至少要保证设有一个源点，尤其是对于空间布有大量阵列（largely-spaced）元件的情况。对于含有成千上万根燃料棒的反应堆堆芯的临界计算，并不需要同样数量的初始点，这是因为这些燃料棒彼此都是靠得很近的。对于一个ksrc初始源最好是跳过至少50个keff循环。可以用源定义sdef卡创建一个均匀源，这样可以允许跳过更少得keff循环数。最好的初始源分布是来自先前类似系统的计算输出文件srctp，该文件是由mcnp在每次临界计算后自动创建的，对于这样的初始源需要跳过的keff循环数可以更少。

## 1.4 完整的输入文件

### Example 3-4. UO<sub>2</sub>F<sub>2</sub> Cylinder, S(alpha,beta) Treatment

#### C Cell Cards

```
1 1 9.6586E-2 -1 3 -4 imp:n=1
2 0 -1 4 -5 imp:n=1
3 2 -2.7 (1 -2 -5 3) : (-2 -3 6) imp:n=1
4 0 2:5:-6 imp:n=0
```

#### C Surface Cards

```
1 cz 20.12
2 cz 20.2787
```

```

3 pz 0.0
4 pz 100.0
5 pz 110.0
6 pz -0.1587

```

#### C Data Cards

##### C Materials Library Cards

```

m1 1001.62c 5.7058e-2 8016.62c 3.2929e-2
9019.62c 4.3996e-3 92238.66c 2.0909e-3
92235.66c 1.0889e-4
mt1 lwtr.60t
m2 13027.62c 1

```

##### C Criticality Control Cards

```

kcode 5000 1.0 50 250
ksrc 0 0 50.0

```

## 1.5 输出

在成功运行本例后，得到的 $k_{eff}$ 接近1.0。如果使用了.62c和.66c的数据，则结果是0.99842，标准偏差0.00077( $1\sigma$ )。如果没有使用 $S(\alpha,\beta)$ 处理，所得 $k_{eff}$ 的结果会有比较明显的差异。具体是0.97912，标准偏差为0.00083( $1\sigma$ )。根据问题情况，有的这种差异可能更大。对于重要的临界计算问题，强烈推荐使用合适的 $S(\alpha,\beta)$ 截面数据。需要强调的事实是，你必须对你的问题模型进行分析，并决定哪种方法适合你所分析的问题。有一种会出现的情况是，当你想用 $S(\alpha,\beta)$ 热中子散射率，但是数据库中并没有这种材料的 $S(\alpha,\beta)$ 数据，比如有机玻璃(Lucite,  $C_4H_6O_2$ )。对这种材料应该进行热处理，但是数据库中又没有它的 $S(\alpha,\beta)$ 热中子散射率数据。这时，你可以用自由气体模型处理，也可以在mt卡上用替代材料的 $S(\alpha,\beta)$ 数据。例如，数据库中有聚乙烯(polyethylene)和水中氢的 $S(\alpha,\beta)$ 数据，而聚乙烯与有机玻璃都是碳氢化合物并且都是固体，因此聚乙烯是有机玻璃的最好替代物。你应该运行所有能用的合理选项，并最终选择最保守的结果。在室温条件下的临界问题，要使用 $S(\alpha,\beta)$ 热中子散射率，虽然多数临界应用是在室温下进行的，但是还是有时需要不同温度下的截面数据。mcnp数据库含有室温和更高温度



下多种热中子截面数据及在20至2000k温度下的材料散射率数据。

## 1.6 Keff 输出

检查输出文件中“keff results for:”下面虚线框中的内容。只要至少有一个估计器的设置值是分布在68%、95%或99%置信水平上，并且至少经过30个有效循环后，才会生成该虚线框的内容。框中的最终结果是结合3个单独的估计器及它们各自的标准偏差而得出的 keff 估计值，框中同时给出了估计的68%、95%和99%的置信区间。蒙特卡罗临界计算（或其它任何蒙特卡罗计算）的结果是一个置信区间。这也就是说，对于临界计算问题，其所得的结果不仅是 keff，还有由 keff 加减一定量的估计标准偏差而形成的一个置信区间（基于中心极限定理），真实结果在该区间内有一定的存在概率。在一定的置信水平下，标准偏差数决定了置信区间内含有真实值的概率。比如，对于99%的置信区间，其存在真实值的可能性是99%，也就是说还有1%的可能性是真实值不在该区间内。为了降低这部分真实值不在置信区间的概率，使结果达到可接受的水平，可通过提高置信区间，或是运行更多的历史数，以获得更小的估计标准偏差。一般情况下，运行更多的历史数是首选的方法。68%、95%和99%的置信区间分别对应 $\pm 1$ 、 $\pm 2$  和  $\pm 2.6 \sigma$ 。

回到本例的输出文件，检查一下在“keff results for :”之后的3行信息。第1行描述的是初始源，第2行提供的信息是关于 kcode 卡上的临界问题定义。第3行显示的是本问题实际运行的情况。

```
the initial fission neutron source distribution used the 1 source points
that were input on the ksrc card.
```

```
the criticality problem was scheduled to skip 50 cycles and run a total
of 250 cycles with nominally 5000 neutrons per cycle.
```

```
this problem has run 50 inactive cycles with 250291 neutron histories
and 200 active cycles with 999870 neutron histories.
```

接下来的第4行告诉你问题是否完成。第5行是极其重要的，因为它说明了是否对所有含有裂变材料的栅元进行了抽样。如果有含裂变材料的栅元没有被抽样到，则会有警告消息输出，告诉你哪些栅元没有被抽样到。对这样的计算可能要设置更多的循环数后重新运行，或者改变初始空间源点分布，以保证所有含裂变材料的栅元都能被抽样到。

```
this calculation has completed the requested number of keff cycles using
a total of 1250161 fission neutron source histories.
```

```
all cells with fissionable material were sampled and had fission
neutron source points.
```

接下来的输出部分描述的是对3个keff估计器的常规检查结果。每次循环的中子数通常是足够多的，以保证单个keff估计器能被分布到一个正态分布中。MCNP会检查keff的值是否呈正态分布，并分别在68%和95%的置信水平下进行拟合，如果不是呈正态分布，则在99%的置信区间内进行拟合。如果估计器不是正常分布在99%的水平，则程序会打印出一条警告信息。这种情况相当于是99%的置信区间内没有包含确切的结果，它只有1%的可能性出现。3个keff估计器不会同时表现为非正态分布。如果出现这种情况，mcnp是不会打印虚线框信息的，尽管相关的结果在输出文件中的其它地方可以找到。为了帮助用户确定出现这种情况的原因，输出文件中会提供额外的信息。有一种情况会引起这种问题的，那是在裂变中子源不收敛的时候。即便3套keff的数据都表现出分布不正常，但如果进行多次单独的计算，每次计算的3个平均的keff结果仍可能是呈正态分布的。用户要谨慎检查问题的输出情况，仔细评估非正常行为的产生原因。如果有必要，可使用dbcn卡进行额外的单独计算。

## 1.7 总结

在运行了一个问题之后，你应能够根据输出情况确定你的运行是否成功。本例的主要目标是演示和说明 $S(\alpha, \beta)$ 热中子散射率的影响效果。在临界安全领域，对于有热中子的问题，应该使用合适的 $S(\alpha, \beta)$ 散射率，但是使用哪些散射率数据能对问题给出最佳分析需要用户自己确定。如果可能，尽量多运行几次，以便帮助理解系统，知道是哪些东西在驱动系统。记住，本例中用到的 $S(\alpha, \beta)$ 散射率数据是室温下的。如果需要，MCNP截面库中也提供了其它温度条件下的中子截面数据。

本例还对mcnp针对临界问题的统计输出特征进行了描述，这些特征可帮助用户确定所运行的结果是符合统计要求还是需要对问题作重新运行处理。

## 2. 简单的重复结构

### 2.1 将要做的工作

- (1) 使用universe(u)和fill卡;
- (2) 使用like m but 卡;
- (3) 使用trcl卡;
- (4) 使用2D彩色几何输出功能;

### 2.2 .问题描述

本例描述的问题是一个水箱中有两个相同的U(93.4)O<sub>2</sub>F溶液柱。假定水反射层的密度是1.g/cc，最小厚度除第一个溶液柱一侧是10cm，其它均为20cm。水面的高度与铝质容器的顶面平齐。本问题的数据如下：

#### *Uranium Solution*

N<sub>235</sub> = 1.1760e-3 (0.48 g/cc)

N<sub>238</sub> = 8.2051e-5

N<sub>Oxygen</sub> = 3.3621e-2

N<sub>Hydrogen</sub> = 6.2210e-2

N<sub>Fluorine</sub> = 2.5161e-3

N<sub>Total</sub> = 9.9605e-2

Solution height = 70.2 cm

Diameter = 12.7 cm

#### *Aluminum Container*

$\rho$  = 2.7 g/cc

Height = 80.0 cm

Surface separation = 4.0 cm

Inner diameter = 12.7 cm

Thickness = 0.15 cm

#### 2.2.1 几何

##### A、曲面

溶液柱需要6个曲面，4个平面和2个柱面。下面是所有的曲面描述，前面6个是用于圆柱的，后面5个是用于水反射层的。

```

C Surface Cards
1  cz 6.35 $ Solution radius
2  cz 6.50
3  pz 80.0 $ Top of container
4  pz 70.2 $ Top of solution
5  pz 0.0
6  pz -0.15
7  pz -20.15 $ Bottom of tank
C Sides of tank
8  px -16.5
9  px 43.5
10 py -26.5
11 py 26.5
    
```

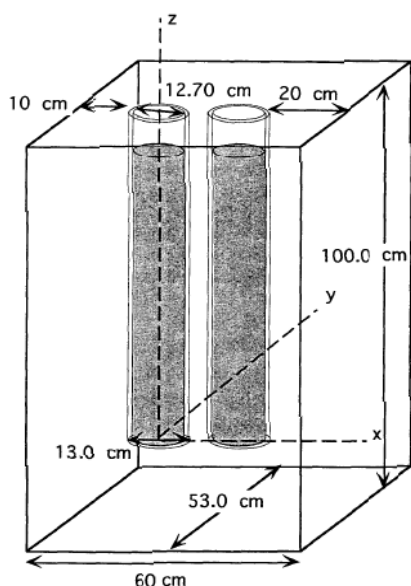


图7.11 问题几何

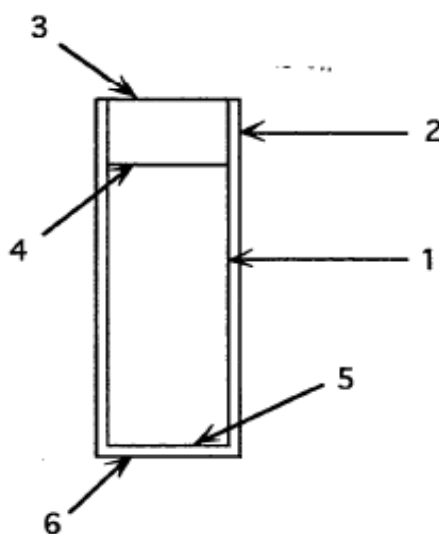


图7.12 溶液柱的曲面定义

## B、栅元

两个溶液柱都将用like m but卡和universe (u) 及fill卡定义。栅元1、2、3分别表示铀溶液、铀溶液上部的空区、铝质容器。它们都被定义为同一个universe的一个部分。

如果想构建多个装有一半溶液的敞开式金属容器罐，使用u卡和fill卡是很方便的。把溶液、铝容器罐及溶液上部的空区都定义为universe 3，以上3个栅元可以被类似当作天空，用它来填充窗口。

universe 3中的第1个栅元是铀溶液，它由曲面1的负坐向空间与曲面4的负坐向空间及曲面5的正坐向空间5相交的空间内所有点组成。

```
1 1 9.9605e-2 -1 -4 5 u=3 imp:n=1
```

栅元1内含有材料1，其原子密度是 $9.960\text{e-}2\text{g/cc}$ ，作为universe 3 的一部分，其中子重要性为1。

栅元2是溶液上部的空区，由曲面1的负坐向空间与曲面4的正坐向空间相交构成，其高度方向没有限制，中子重要性也设成1，这是因为中子有可能通过散射经过该区进入溶液。

```
2 0 -1 4 u=3 imp:n=1
```

栅元3是铝容器罐，它由曲面1的正坐向空间与曲面5的负坐向空间相联构成，它曲面1的外部或曲面5的下部空间都是无限的。

```
3 2 -2.7 1:-5 u=3 imp:n=1
```

至此，完成了universe 3的栅元说明，其几何如下图所示。空区及铝容器罐都延伸到无限远处。

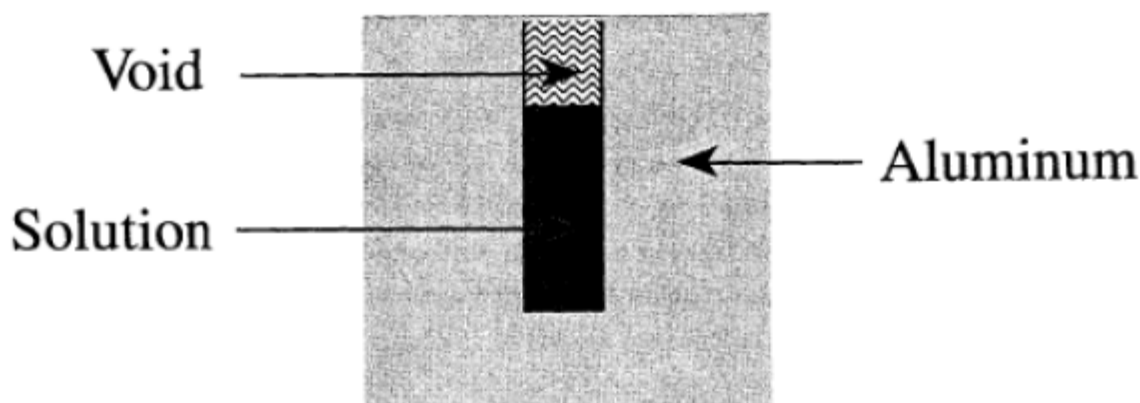


图7.13 universe 3的定义

接下来创建栅元4，把它看成类似一个窗口，用universe 3填充。栅元4被定义成一个有一定半径和高度（类似窗口的尺寸大小）的有限圆柱。

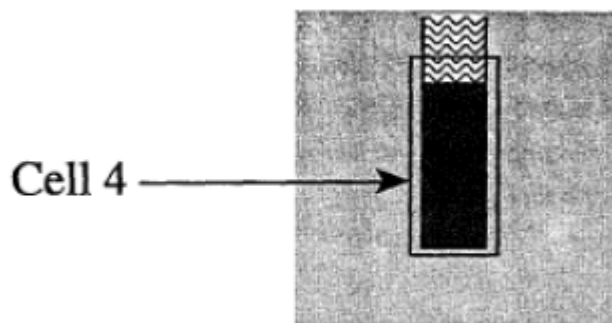


图7.14 栅元4的定义

栅元4的材料号为0，是因为其材料已在universe 3中的栅元中指定了。当用universe 3填充栅元4时，一个本问题所需要描述的溶液柱就定义好了。

```
4 0 -2 -3 6 fill=3 imp:n=1
```

现在我们已经有一个已经定义好的溶液柱，第二个可以用mcnp的重复结构功能定义。一个栅元可被定义一次，然后用like m but结构重复多次。这些特征可以减少用户的输入工作量。本例中，我们用like m but卡建立第二个溶液柱。like m but卡的格式如下：

```
J like m but list
```

j = 栅元号.

like = 用于栅元重复的关键字.

m = 预先定义好的将被重复的栅元号.

but = 用于栅元j与栅元m之间差异的关键字.

list = 栅元j与栅元m之间差异的说明.

多数数据卡都能被包含在list说明中。在本例中，我们准备使用trcl说明一个栅元的原点与另一个栅元原点之间的关系。

```
trcl = 01 02 03
```

trcl 中的前面3项表示重复栅元的原点相对于原栅元原点的平移坐标的x、y、z值。继续本例子，在用u卡和fill定义了第一个溶液柱（栅元4）后，我们想用like m but卡创建第二个相同的溶液柱（栅元5），并用trcl助记符对其沿x轴进行平移，使得两个铝容器罐曲面之间的距离是4cm。栅元的平移是相对于其原点坐标进行的，被重复栅元的原点是（0，0，0）。两溶液柱的中心点相距17cm，通过对栅元4（用universe 3填充）的原点进行简单平移，第二个完全一样的溶液柱就定义好了。栅元5的描述如下：

```
5 like 4 but trcl (17 0 0)
```

通过定义两个溶液柱周围的水反射层（栅元6）和水反射层外部区域（栅元7），整个栅元卡就完成了。

### Example 4-3, Repeated Structures: Two Cylinders

#### C Cell Cards

```

1 1 9.9605e-2 -1 -4 5 u=3 imp:n=1 $ Solution
2 0 -1 4 u=3 imp:n=1 $ Void region above soln
3 2 -2.7 1:-5 u=3 imp:n=1 $ Al container
4 0 -2 -3 6 fill=3 imp:n=1
5 like 4 but trcl (17 0 0) imp:n=1
6 3 -1.0 10 -11 8 -9 7 -3 #4 #5 imp:n=1
7 0 -10:11:-8:9:-7:3 imp:n=0
    
```

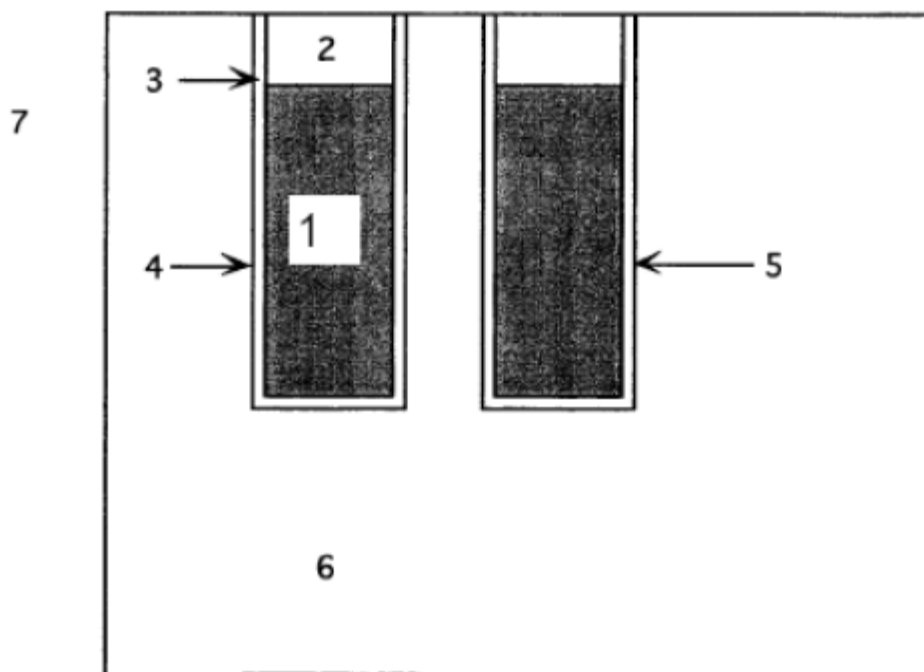


图7.15 全部栅元的定义

## 2.2.2 材料

利用问题描述中给出的信息定义材料卡。材料1是铀溶液，材料2是铝容器罐，材料3是用作反射层的水。本例的材料卡如下所示：

#### C Data Cards

#### C Materials Cards

```

m1 1001.62c 6.2210e-2 8016.62c 3.3621e-2
9019.62c 2.5161e-3
92235.66c 1.1760e-3 92238.66c 8.2051e-5
mt1 lwtr.60t
m2 13027.62c 1.0
    
```

```
m3 1001.62c 2 8016.62c 1
```

```
mt3 lwtr.60t
```

材料卡m1用的是溶液的各组成元素的原子密度比，m2和m3分别用的是铝和水中每个分子的原子个数比。这两种方法都是合适的，选择使用哪种方法是基于问题能够获得的数据来定的。由于m3卡上的原子系数所加之和不等于是栅元6的密度也不等于1.0，因此在程序输出中会打印出一条警告消息。MCNP会自动对这些给定值进行归一化处理并继续运行。由于在铀溶液和水反射层中都有氢被束缚在水分子中，因此两者都要用到轻水S( $\alpha,\beta$ )截面数据。

### 2.2.3 临界控制

kcode卡的设置同前一个例子，但对于ksrc卡，这里将为另外的溶液柱增添第二个初始源点。这样做的理由是确保能够在第二个溶液柱中的可裂变材料中进行有效的抽样。如果不添加这第二个源点，则kcode卡上的循环数将需要设置成更大的值以保证在第二个溶液柱中有一个收敛的裂变源点空间分布。临界控制卡的内容如下：

#### C Control Cards

```
kcode 5000 1.0 50 250
```

```
ksrc 0 0 35 17 0 35
```

## 2.3 完整的输入文件

### Example 4-3, Repeated Structures, Two Cylinders

#### C Cell Cards

```
1 1 9.9605e-2 -1 -4 5 u=3 imp:n=1 $ Solution
```

```
2 0 -1 4 u=3 imp:n=1 $ Void region
```

```
3 2 -2.7 1:-5 u=3 imp:n=1 $ Al container
```

```
4 0 -2 -3 6 fill=3 imp:n=1
```

```
5 like 4 but trcl (17 0 0) imp:n=1
```

```
6 3 -1.0 10 -11 8 -9 7 -3 #4 #5 imp:n=1
```

```
7 0 -10:11:-8:9:-7:3 imp:n=0
```



#### C Surface Cards

```
1 cz 6.35 $ Solution radius
2 cz 6.50 $
3 pz 80.0 $ Top of container
4 pz 70.2 $ Top of solution
5 pz 0.0
6 pz -0.15
7 pz -20.15 $ Bottom of tank
```

#### C Sides of Tank

```
8 px -16.5
9 px 43.5
10 py -26.5
11 py 26.5
```

#### C Data Cards

##### C Materials Cards

```
m1 1001.62c 6.2210e-2 8016.62c 3.3621e-2
9019.62c 2.5161e-3 92235.66c 1.1760e-3
92238.66c 8.2051e-5
mt1 lwtr.60t
m2 13027.62c 1.0
m3 1001.62c 2 8016.62c 1
mt3 lwtr.60t
```

##### C Control Cards

```
kcode 5000 1.0 50 250
ksrc 0 0 35 17 0 35
```

## 2.4 输出

在所使用的数据库是ENDF66c时，最终本问题的keff估计值是1.00803，标准偏差是

0.00091 ( $1\sigma$ )。

## 2.5 几何绘图

输入文件创建完成后，可以产生一个任意的2维几何输出。虽然不同的机器其绘图器的安装会不一样，但所有绘图命令都是相同的。在试图运行粒子之前，先用绘图器对几何进行测试是非常重要的，这样做将会节省你很多时间。绘图输出的命令格式如下：

```
mcnp inp=filename ip
```

这里ip表示进行初始化并绘图。在出现绘图命令plot后，输入回车或enter键将会显示一个缺省的绘图输出。缺省的绘图输出是中心在(0, 0, 0)的PX剖面，其Y轴的坐标范围是-100cm到100cm，Z轴坐标范围也是-100cm到100cm。如果有几何错误，则在图中以红色的点虚线显示。在命令提示符后面输入命令以获得需要的2维视图。关键字并不需要被完整输入，只要输入的字符足够以使其是唯一的就可以了，如“or”就将被指定为“origin”关键字。下面将讨论七个关键字，虽然这里为了以示区别于文本，把关键字用大写方式表示，其实大小写都是可接受的。

ORIGIN vx vy vz - 绘图输出的中心点坐标。.

缺省值 = 0 0 0.

EXTENT eh ev - 设置绘图输出的标尺，单位为cm。eh 表示的是水平方向两端离开原点的距离，ev是垂直方向上顶端和底端到原点的距离。如果输入只有一个值，则其被自动复制给第二个值。

缺省情况是： 100 100

PX vx - 绘制X=VX的yz输出。缺省： px 0

PY vy - 绘制y=vy的xz输出。

PZ vz - 绘制Z=VZ的xy输出。

LABEL s c - 分别按s与c的大小显示曲面和栅元的标号。缺省： 1 0 （不显示栅元标号）

SHADE n color - 设定材料n的颜色为color指定的颜色。

点击左上角的输出窗口，会有一个缺省的输出，显示的是通过原点平行于y轴与x轴的平面，并带有曲面标号。

09/17/03 11:57:38  
Example 4, Repeated Structures

probid = 09/17/03 11:56:30  
basis: YZ  
< 0.000000, 1.000000, 0.000000  
< 0.000000, 0.000000, 1.000000  
origin:  
< 0.00, 0.00, 0.00  
extent = < 100.00, 100.00  
.

Value for cel 1  
In Cell 1  
xyz = 0.00, 0.00, 0.00

CURSOR	Restore	CellLine
PostScript	ROTATE	
COLOR	SCALES 0	LEVEL
WV	YZ	ZX
LABELS	L1 sur	L2 off
WBODY		

Click here or picture or menu

UPRTINLFOrigin.1.2Zoom5.10

蒙特卡罗方法与 MCNP 程序入门

09/17/03 12:00:15  
Example 4, Repeated Structures

probid = 09/17/03 11:56:30  
basis: HV  
< 1,000000, 0,000000, 0,000000  
< 0,000000, 1,000000, 0,000000  
origin:  
< 0,00, 0,00, 80,00  
extent = < 100,00, 100,00)

.

Value for cel 2  
In Cell 2  
xyz = 0,00, 0,00, 80,00

CURSOR	Restore	CellLine
PostScript	ROTATE	
COLOR	SCALES 0	LEVEL
HV	YZ	ZX
LABELS	L1 sur	L2 off
WBODY		

[Click here](#) or picture or menu

UP	RT	IN	LF	Origin	.1	.2	Zoom	5,	10
----	----	----	----	--------	----	----	------	----	----



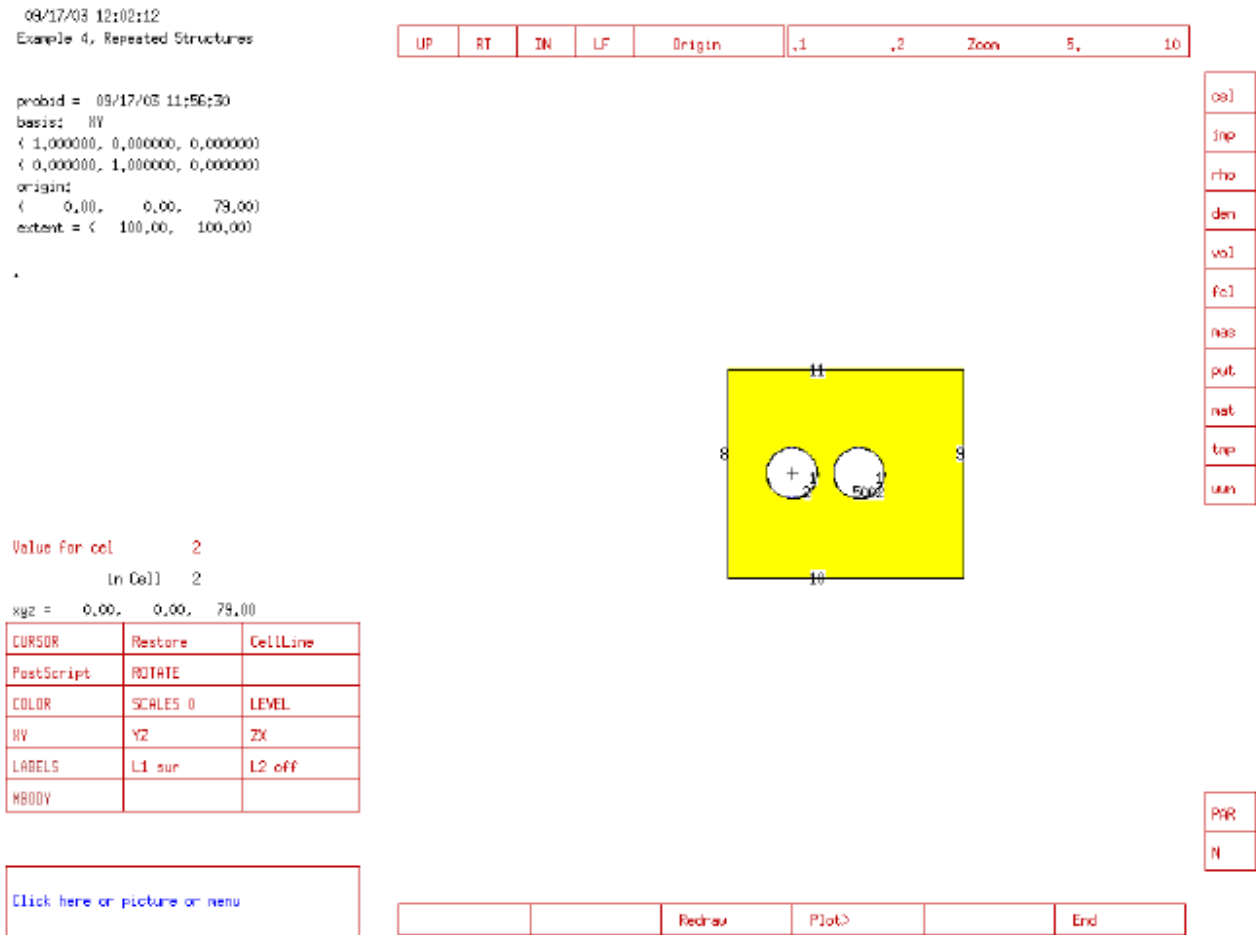
cel
inp
rho
den
vol
fc1
nas
put
nat
top
unm

PAR
N

		Redraw	Plot>		End
--	--	--------	-------	--	-----

这个输出图中只显示了每个圆柱的一半，所以要求输出平面不能与其中的一个曲面冲突，即输出平面与问题的一个曲面是重合的。这时，可以通过输入：pz 79 来移动输出平面使其离开平面pz 80一个很小的距离。

# 蒙特卡罗方法与 MCNP 程序入门



除了在下方的方框内输入命令，我们还可以通过鼠标使用其它大量命令。点击.1-.2 Zoom会视图放大，点击5 与10 会使视图缩小。点击L2按钮，显示栅元号，但必须是在绘图被刷新后才能看到效果。点击左上角的文本，会立即刷新绘图输出。点击右边的垂直条中的一项，然后点击L2按钮将改变L2标签的含义。点击cursor按钮允许用户在几何中选择两点，使其成为输出几何的左上角和右下角。点击XY、YZ和ZX按钮将根据origin（是绘图输出的origin，不是几何的origin）变量给定的固定坐标显示给定平面的几何图形。更完整的鼠标驱动命令在MCNP手册的附录B中给出。

要输出栅元号而不是曲面号，输入：

label 0 1

要使栅元号的大小更大些，输入：

la 1 2

这将在绘图输出中显示曲面号和栅元号，并增加了栅元号的大小。栅元中的材料是有颜色的，要想看栅元的材料号输入

la 0 1 mat

其它一些栅元参数也能显示，具体如下：

den: mass density

rho: atom density

mas: mass

imp: n: importances

vol: volume

cel: cell number (default)

假设要改变材料1的颜色由缺省变为yellow，输入：

```
shade 1 yellow
```

想看看还有哪些颜色可以用，输入：

```
options
```

建议你亲自实验一下这些命令，对绘图功能有一个直观的印象。

## 2.6 总结

本例介绍的重复结构是在mcnp中的功能非常强大。有了这个功能，你可以创建有大量相同结构而特性不同的几何。只要定义一个结构，就可以很容易的在任何需要的地方再次建立同样结构。MCNP的几何输出功能也是一个很好的工具。在进行粒子输运之前先输出几何，能够检查几何的错误情况，还可以通过显示栅元参数，确认几何设置是否是你实际想要的。

## 2、利用 MCNP 进行 ADS 的部分基准系统计算

### 2.1 计算的几何结构

栅元号	描述
1	散裂靶
2	质子束管空腔
3	质子束管壁
4	燃料堆1号区域
5	燃料堆2号区域
6	燃料堆3号区域

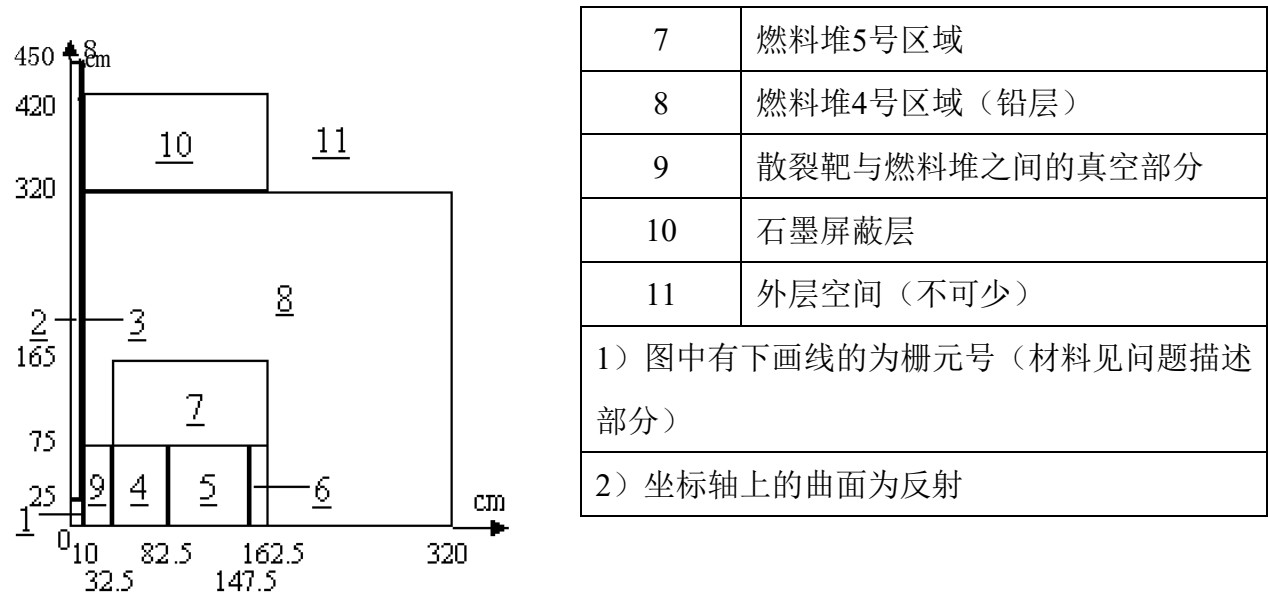


图 7.16 计算栅元结构示意图

## 2.2 问题的描述

### 2.2.1 源的描述

我们使用各向同性通用中子源如表 7.6:

表7.6 裂变中子源的源谱

组号	能量边界 (MeV)	源值
1	19.64-4.99	0.1985
2	4.99-3.03	0.157
3	3.03-1.84	0.178
4	1.84-1.11	0.165
5	1.11-0.675	0.122
6	0.675-0.410	8.0E-02
7	0.410-0.285	5.0E-02
8	0.284-0.151	5.45E-02

## 2.2.2 材料的描述

对燃料堆部分的材料描述如表 7.7:

表7.7 堆芯区域的核密度 (20°C)

核素	区域 1	区域 2	区域 3	区域 4	区域 5
$^{232}\text{Th}$			7.45E-03		
$^{233}\text{U} + ^{232}\text{Th}$	6.35E-03	7.45E-03			
$\text{O}$	1.27E-02	1.49E-02	1.49E-02		
$\text{Fe}$	8.10E-03	8.87E-03	8.87E-03		6.63E-03
$\text{Cr}$	1.12E-03	1.06E-03	1.06E-03		8.00E-04
$\text{Mn}$	4.06E-05	5.10E-05	5.10E-05		3.80E-05
$\text{W}$	4.06E-05	5.10E-05	5.10E-05		3.80E-05
$\text{Pb}$	1.77E-02	1.56E-02	1.56E-02	3.05E-02	2.41E-02

其余部分的核密度参数如表 7.8:

表7.8 其余区域的核密度

核素	Stainless Steel (316)	Carbon (Graphite)
Cr	0.015596	
Fe	0.058083	
Ni	0.009750	
Mo	0.001492	
C		0.090255

## 2.3 MCNP 输入文件准备

### 2.3.1 计算增值系数 $K_{\text{eff}}$ 的 MCNP 程序输入文件 INP:

MCNP CARD FOR

```

1      0          50 1 -2 -101    $靶区
2      0          50 2 -100 -7    $质子束管内
3      7 0.084921  50 100 2 -7 -101 $质子束管壁
4      2 0.046062  50 102 1 -3 -103 $燃料堆 1 号区域
5      3 0.047982  50 1 -3 103 -104 $燃料堆 2 号区域

```



# 蒙特卡罗方法与 MCNP 程序入门

```

6      4 0.047982   50 1 -3 104 -105   $燃料堆 3 号区域
7      6 0.031606   50 3 -4 102 -105   $燃料堆 5 号区域
8      5 0.03050    (50 3 -4 101 -102):(50 4 -5 101 -106)
                        :(50 1 -4 105 -106) $燃料堆 4 号区域
9      0              50 1 -3 -102 101   $散裂靶与燃料堆之间的真空部分
10     8 0.090255    50 5 -6 101 -107   $石墨屏蔽层
11     0              -50:7:-1:(6 -7 101):(5 -6 107):(1 -5 106) $外层空间

```

```

*1     PZ   0.0
2      PZ  25.0
3      PZ  75.0
4      PZ 165.0
5      PZ 320.0
6      PZ 420.0
7      PZ 450.0
*50    PY 0
100    CZ 8.0
101    CZ 10.0
102    CZ 32.50
103    CZ 82.50
104    CZ 147.50
105    CZ 162.50
106    CZ 320
107    CZ 60

```

```

MODE    N                      $中子运输
IMP:N    1 2 3R 6 1 8 1 8 0    $ 重要性
AREA     1 15R                  $曲面面积
VOL      1 9R 0                  $栅元体积
KCODE    3000 1.0 5 100         $临界源
KSRC     33 1 25 83 1 25 148 1 25 83 1 80  $临界计算的源点

```

F4:N	8		\$一个栅元的平均通量
M2	92233.50	0.0137858	\$zaid=ZZZAAA.nnX
	90232.51	0.1240722	
	8016.50	0.2757153	
	26000.55	0.1758499	
	24000.50	0.0243151	
	25055.51	0.0009987	
	74000.55	0.0009987	
	82000.50	0.3842647	
M3	92233.50	0.0155267	
	90232.51	0.1397393	
	8016.50	0.3105331	
	26000.55	0.1848610	
	24000.50	0.0220916	
	25055.51	0.0010629	
	74000.55	0.0010629	
	82000.50	0.3251219	
M4	90232.51	0.1552666	
	8016.50	0.3105331	
	26000.55	0.1848610	
	24000.50	0.0220916	
	25055.51	0.0010629	
	74000.55	0.0010629	
	82000.50	0.3251219	
M5	82000.50	1.0	
M6	26000.55	0.2097703	
	24000.50	0.0253116	
	25055.51	0.0012023	
	74000.55	0.0012023	
	82000.50	0.7625134	
M7	26000.55	0.6839651	

	24000.50	0.1836530
	28000.50	0.1148126
	42000.51	0.0175693
M8	6012.50	1.0

### 2.3.2 计算质子束管中子通量分布 MCNP 输入文件:

MCNP CARD FOR

```

1      0          50 1 -2 -101    $靶区
2      0          50 2 -100 -7    $质子束管内
3      7 0.084921  50 100 2 -7 -101 $质子束管壁
4      2 0.046062  50 102 1 -3 -103  $燃料堆 1 号区域
5      3 0.047982  50 1 -3 103 -104  $燃料堆 2 号区域
6      4 0.047982  50 1 -3 104 -105  $燃料堆 3 号区域
7      6 0.031606  50 3 -4 102 -105  $燃料堆 5 号区域
8      5 0.03050   (50 3 -4 101 -102):(50 4 -5 101 -106)
                   :(50 1 -4 105 -106) $燃料堆 4 号区域
9      0          50 1 -3 -102 101    $散裂靶与燃料堆之间的真空部分
10     8 0.090255  50 5 -6 101 -107    $石墨屏蔽层
11     0          -50:7:-1:(6 -7 101):(5 -6 107):(1 -5 106) $外层空间

*1     PZ  0.0
2      PZ  25.0
3      PZ  75.0
4      PZ  165.0
5      PZ  320.0
6      PZ  420.0
7      PZ  450.0
*50    PY 0
100    CZ  8.0

```

101 CZ 10.0  
 102 CZ 32.50  
 103 CZ 82.50  
 104 CZ 147.50  
 105 CZ 162.50  
 106 CZ 320  
 107 CZ 60  
 1000 PZ 54.5  
 1001 PZ 84  
 1002 PZ 113.5  
 1003 PZ 143  
 1004 PZ 172.5  
 1005 PZ 202  
 1006 PZ 231.5  
 1007 PZ 261  
 1008 PZ 290.5

MODE N P  
 IMP:N 1 1 2 2 4 4 4 4 8 4 0  
 IMP:P 1 1 2 2 4 4 4 4 2 4 0  
 AREA 4J 160849.54385 2J 10053.09649 4J 321699.08775 10J  
 VOL J 29656.63465 5J 44738684.67 2J 0  
 SDEF ERG=D1 CEL=1 POS=0 0 12.5 RAD=D2 EXT=D3 AXS=0 0 1  
 SI1 H 0.151 0.248 0.410 0.675 1.11 1.84 3.03 4.99 19.64  
 SP1 D 0 5.45E-02 5.0E-02 8.0E-02 0.122 0.165 0.178 0.157 0.1985  
 SI2 0 10  
 SI3 12.5  
 F12:N 5  
 FS12:N 101  
 SD12:N 157 160692.54385  
 F22:P 5

```

FS12:P  101
SD12:P  157 160692.54385
F32:N   101
F42:P   101
F52:N   106
F62:P   106
F14:N   8
F24:P   8
F34:N   2
FS34:N  1000 1001 1002 1003 1004 1005 1006 1007 1008
SD34:N  2965.663465 9R
F44:P   2
FS44:N  1000 1001 1002 1003 1004 1005 1006 1007 1008
SD44:N  2965.663465 9R
M2      92233.42    0.0137858
        90232.51    0.1240722
        8016.35     0.2757153
        26000.35    0.1758499
        24000.35    0.0243151
        25055.35    0.0009987
        74000.55    0.0009987
        82000.35    0.3842647
M3      92233.42    0.0155267
        90232.51    0.1397393
        8016.35     0.3105331
        26000.35    0.1848610
        24000.35    0.0220916
        25055.35    0.0010629
        74000.55    0.0010629
        82000.35    0.3251219
M4      90232.51    0.1552666
    
```

蒙特卡罗方法与 MCNP 程序入门

	8016.35	0.3105331
	26000.35	0.1848610
	24000.35	0.0220916
	25055.35	0.0010629
	74000.55	0.0010629
	82000.35	0.3251219
M5	82000.35	1.0
M6	26000.35	0.2097703
	24000.35	0.0253116
	25055.35	0.0012023
	74000.55	0.0012023
	82000.35	0.7625134
M7	26000.35	0.6839651
	24000.35	0.1836530
	28000.50	0.1148126
	42000.35	0.0175693
TOTNU		
NPS	100000	

# 附 录

## 连续能量中子截面库 ENDL851 数据目录

ZAID	原子量	ZAID	原子量
1001.35C	.999167	73181.35C	179.393568
1002.35C	1.996800	74000.35C	182.270625
1003.35C	2.990140	75185.35C	183.364126
2003.35C	2.990121	75187.35C	185.349709
2004.35C	3.968218	79197.35C	195.274505
4007.35C	6.956651	82000.35C	205.420035
5010.35C	9.926921	83209.35C	207.185129
5011.35C	10.914730	90231.35C	229.051567
6012.35C	11.896913	90232.35C	230.044718
6013.35C	12.891649	90233.35C	231.039623
8016.35C	15.857510	91233.35C	231.038298
9019.35C	18.835196	92233.35C	231.037688
11023.35C	22.792274	92234.35C	232.030405
12000.35C	24.096206	92236.35C	234.017800
13027.35C	26.749754	92237.35C	235.012345
14000.35C	27.844230	92238.35C	236.005797
15031.35C	30.707681	92240.35C	237.994368
16032.35C	31.697413	93235.35C	233.024897
17000.35C	35.148439	93236.35C	234.018847
19000.35C	38.762424	93237.35C	235.011793
20000.35C	39.735690	93238.35C	236.005951
22000.35C	47.488512	94237.35C	235.012025
24000.35C	51.549325	94238.35C	236.004576
25055.35C	54.466096	94241.35C	238.986034

蒙特卡罗方法与 MCNP 程序入门

26000. 35C	55. 367243	94242. 35C	239. 979319
27059. 35C	58. 426927	94243. 35C	240. 973962
28058. 35C	57. 437649	95241. 35C	238. 986012
29000. 35C	63. 000104	95242. 35C	239. 980114
31000. 35C	69. 121066	95243. 35C	240. 973341
33074. 35C	73. 288880	96242. 35C	239. 979411
39088. 35C	87. 154309	96243. 35C	240. 973349
40000. 35C	90. 436369	96244. 35C	241. 966113
41093. 35C	92. 108258	96245. 35C	242. 960238
42000. 35C	95. 115821	96246. 35C	243. 953366
47107. 35C	105. 986718	96247. 35C	244. 947877
47109. 35C	107. 969199	96248. 35C	245. 941265
48000. 35C	111. 444335	97249. 35C	246. 935292
50000. 35C	117. 670386	98249. 35C	246. 935157
54000. 35C	130. 172059	98250. 35C	247. 928108
54134. 35C	132. 755070	98251. 35C	248. 922668
56138. 35C	136. 720550	98252. 35C	249. 916101
72000. 35C	176. 956670		

## 中子热截面库 BMCC1 数据目录

1001. 04C	13027. 04C	41093. 30C	90232. 10C
1002. 02C	14000. 02C	42000. 01C	92233. 10C
1003. 03C	15031. 01C	48000. 01C	92234. 10C
2000. 01C	16032. 01C	50000. 01C	92235. 11C
2003. 03C	17000. 02C	50999. 02C	92236. 01C
2004. 03C	18000. 01C	56138. 01C	92237. 01C
3006. 10C	19000. 01C	63000. 01C	92238. 12C
3007. 05C	20000. 10C	64000. 01C	92239. 01C



蒙特卡罗方法与 MCNP 程序入门

4009. 03C	22000. 11C	67165. 01C	92240. 01C
5000. 01C	23000. 30C	73181. 02C	94238. 01C
5010. 03C	24000. 11C	74000. 01C	94239. 17C
5011. 02C	25055. 01C	74182. 10C	94240. 12C
6012. 10C	26000. 11C	74183. 10C	94241. 01C
7014. 04C	28000. 11C	74184. 10C	94243. 31C
8016. 04C	28058. 01C	74186. 10C	95242. 01C
9019. 03C	29000. 10C	78000. 01C	
11023. 01C	31000. 01C	79197. 10C	
12000. 02C	40000. 02C	82000. 10C	

## 离散中子截面库 D91 数据目录

1001. 04D	17000. 02D	50000. 01D	92235. 20D
1002. 02D	18000. 01D	50999. 02D	92235. 30D
1003. 03D	19000. 01D	56138. 01D	92236. 01D
2000. 01D	20000. 01D	63000. 01D	92237. 01D
2003. 03D	20000. 10D	64000. 01D	92238. 01D
2004. 03D	22000. 01D	67165. 01D	92238. 13D
3006. 10D	22000. 11D	73181. 02D	92238. 15D
3007. 05D	23000. 30D	74000. 01D	92238. 20D
4009. 03D	24000. 01D	74182. 10D	92238. 30D
5000. 01D	24000. 11D	74183. 10D	92239. 01D
5010. 03D	25055. 01D	74184. 10D	92240. 01D
5011. 02D	26000. 11D	74186. 10D	94238. 01D
6012. 10D	26000. 30D	78000. 01D	94239. 01D
7014. 04D	28000. 01D	79197. 10D	94239. 15D
8016. 04D	28000. 11D	82000. 01D	94239. 16D
8016. 30D	28058. 01D	82000. 10D	94239. 17D

蒙特卡罗方法与 MCNP 程序入门

9019. 01D	29000. 01D	90232. 10D	94239. 18D
9019. 03D	29000. 10D	92233. 10D	94239. 19D
11023. 01D	31000. 01D	92234. 10D	94239. 20D
12000. 02D	40000. 01D	92235. 01D	94240. 01D
13027. 04D	40000. 02D	92235. 10D	94240. 12D
14000. 01D	41093. 01D	92235. 11D	94241. 01D
14000. 02D	41093. 30D	92235. 15D	94243. 31D
15031. 01D	42000. 01D	92235. 18D	95242. 01D
16032. 01D	48000. 01D	92235. 19D	

## 光子截面库 MCPLIB1 数据目录

ZAID	原子量	ZAID	原子量
1000. 01P	. 999317	48000. 01P	111. 442363
2000. 01P	3. 968217	49000. 01P	113. 831536
3000. 01P	6. 881312	50000. 01P	117. 667336
4000. 01P	8. 934763	51000. 01P	120. 712028
5000. 01P	10. 717168	52000. 01P	126. 527819
6000. 01P	11. 907955	53000. 01P	125. 814300
7000. 01P	13. 886438	54000. 01P	130. 165202
8000. 01P	15. 861942	55000. 01P	131. 763705
9000. 01P	18. 835197	56000. 01P	136. 146809
10000. 01P	20. 006093	57000. 01P	137. 712194
11000. 01P	22. 792275	58000. 01P	138. 911207
12000. 01P	24. 096261	59000. 01P	139. 697185
13000. 01P	26. 749756	60000. 01P	142. 997075
14000. 01P	27. 844241	61000. 01P	143. 667877
15000. 01P	30. 707682	62000. 01P	149. 060207
16000. 01P	31. 788823	63000. 01P	150. 657141

蒙特卡罗方法与 MCNP 程序入门

17000. 01P	35. 148180	64000. 01P	155. 900158
18000. 01P	39. 604489	65000. 01P	157. 560097
19000. 01P	38. 762423	66000. 01P	161. 098819
20000. 01P	39. 733857	67000. 01P	163. 513493
21000. 01P	44. 569718	68000. 01P	165. 825350
22000. 01P	47. 455747	69000. 01P	167. 482990
23000. 01P	50. 503856	70000. 01P	171. 537027
24000. 01P	51. 549253	71000. 01P	173. 463777
25000. 01P	54. 466099	72000. 01P	176. 956288
26000. 01P	55. 366466	73000. 01P	179. 393456
27000. 01P	58. 426930	74000. 01P	182. 269548
28000. 01P	58. 182641	75000. 01P	184. 607108
29000. 01P	62. 999157	76000. 01P	188. 605651
30000. 01P	64. 835472	77000. 01P	190. 564832
31000. 01P	69. 124270	78000. 01P	193. 404225
32000. 01P	72. 008301	79000. 01P	195. 274513
33000. 01P	74. 277979	80000. 01P	198. 875705
34000. 01P	78. 310715	81000. 01P	202. 628033
35000. 01P	79. 217113	82000. 01P	205. 436151
36000. 01P	83. 080137	83000. 01P	207. 185136
37000. 01P	84. 733459	84000. 01P	207. 187152
38000. 01P	86. 864379	85000. 01P	208. 183242
39000. 01P	88. 142108	86000. 01P	220. 110325
40000. 01P	90. 439594	87000. 01P	221. 103876
41000. 01P	92. 108263	88000. 01P	224. 083728
42000. 01P	95. 106691	89000. 01P	225. 077462
43000. 01P	96. 073885	90000. 01P	230. 044724
44000. 01P	100. 201894	91000. 01P	229. 051160
45000. 01P	102. 021490	92000. 01P	235. 984125
46000. 01P	105. 513949	93000. 01P	235. 011799

47000.01P	106.941685	94000.01P	241.967559
-----------	------------	-----------	------------

## 特殊材料 S( $\alpha,\beta$ )热截面库 TMCC1 数据目录

ZAID	说明	同位素	温度(K)
LWTR.01T	轻水	1001	300
LWTR.02T	轻水	1001	400
LWTR.03T	轻水	1001	500
LWTR.04T	轻水	1001	600
LWTR.05T	轻水	1001	800
LWTR.07T	轻水	1001	1600
POLY.01T	乙烯	1001	300
POLY.03T	乙烯	1001	500
H/ZR.01T	氢化锆	1001	300
H/ZR.02T	氢化锆	1001	400
H/ZR.04T	氢化锆	1001	600
H/ZR.05T	氢化锆	1001	800
H/ZR.06T	氢化锆	1001	1200
BENZ.01T	苯	1001, 6000, 6012	300
BENZ.02T	苯	1001, 6000, 6012	400
BENZ.03T	苯	1001, 6000, 6012	500
BENZ.04T	苯	1001, 6000, 6012	600
BENZ.05T	苯	1001, 6000, 6012	800
HWTR.01T	重水	1002	300
HWTR.02T	重水	1002	400
HWTR.03T	重水	1002	500
HWTR.04T	重水	1002	600
HWTR.05T	重水	1002	800
BE.01T	铍	4009	300

蒙特卡罗方法与 MCNP 程序入门

BE. 04T	铍	4009	600
BE. 05T	铍	4009	800
BE. 06T	铍	4009	1200
BEO. 01T	氧化铍	4009, 8016	300
BEO. 04T	氧化铍	4009, 8016	600
BEO. 05T	氧化铍	4009, 8016	800
BEO. 06T	氧化铍	4009, 8016	1200
GRPH. 01T	石墨	6000, 6012	300
GRPH. 04T	石墨	6000, 6012	600
GRPH. 05T	石墨	6000, 6012	800
GRPH. 06T	石墨	6000, 6012	1200
GRPH. 07T	石墨	6000, 6012	1600
GRPH. 08T	石墨	6000, 6012	2000
ZR/H. 01T	氢化锆	40000	300
ZR/H. 02T	氢化锆	40000	400
ZR/H. 04T	氢化锆	40000	600
ZR/H. 05T	氢化锆	40000	800
ZR/H. 06T	氢化锆	40000	1200

## 参考文献

- [1] 郑华编. 实用 MCNP3B 教程. 大庆生产测井研究所 (内部资料). 1998 年 10 月
- [2] Judith F. Briesmeister, Editor. MCNP5-A General Monte Carlo N-Particle Transport Code [R]. Los Alamos National Laboratory. LA-13709-M, 2000.
- [3] 裴鹿成, 张孝泽. 蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用. 科学出版社, 1980
- [4] 卢希庭. 原子核物理. 原子能出版社, 1981
- [5] 方再根. 计算机模拟和蒙特卡罗方法论. 北京: 北京工业学院出版社, 1988.
- [6] 蒙特卡罗方法学术交流论坛. <http://www.52mc.net>.
- [7] 许淑艳. 核技术应用研究中的蒙特卡罗计算问题 (PPT). 中国原子能科学研究院。
- [8] Alexis L. Reed. MEDICAL PHYSICS CALCULATIONS WITH MCNP5: A PRIMER. Los Alamos National Laboratory, X-3 MCC, Texas A&M University, Dept. of Nuclear Engineering. June 25-28, 2007
- [9] Criticality Calculations with MCNP5: A Primer 2nd Edition, Los Alamos National Laboratory, 2008
- [10] MONTE CARLO NEUTRONIC CALCULATIONS AND PROGRAMMING, Laboratory exercise in Reactor Physics, Dept of Nuclear & Reactor Physics, KTH