

Métodos Numéricos em Física Médica

11^a aula

MCNPX

Introdução

MCNPX = Monte-Carlo N-Particle X

- Código que permite o transporte de qualquer tipo de partícula utilizando métodos de Monte-Carlo

Execução

mcnpx i=<input> ip _____> visualização gráfica

mcnpx i=<input> o=<output> _____> correr simulação

Atenção: o ficheiro de input/output não pode ter mais 8 caracteres.

Geral:

Mcnpx i=<input> o=<output> [opções]

Introdução

- Unidades utilizadas no MCNPX:
 - Comprimento (cm)
 - Energia (MeV)
 - Densidade mássica (g cm^{-3})
 - Densidade atómica ($10^{-24} * \text{cm}^{-3} = \# / (\text{cm-barn})$)
 - Secções eficazes (barns)

Estrutura do ficheiro de input

88 caracteres por linha ('&' indica que continua na linha seguinte)

geometria

Title card ----- primeira linha
CELL CARDS (linhas com a definição das
células)

<linha em branco>

c SURFACE CARDS (linhas com a definição das superfícies)

<linha em branco>

c DATA CARDS

m... (materiais) \$ (ex:alumínio)

Sdef (source definition)

Sp.. (source probability.)

etc.

f (definição de tallies – grandezas a calcular)

<linha em branco>

Dados de materiais
Fontes
Física
Tallies
...

Exemplo

Titulo

c celulas

1 1 -1 -1 imp:p=1

2 0 1 imp:p=0

c superficies

1 s 0 0 0 5 \$ esfera raio 5 cm

c dados

mode p

m1 1001 2 8016 1

sdef par=2 pos=0 0 0 erg=1

nps 1000

mcnpx i=<input> ip → visualização gráfica

mcnpx i=<input> o=<output> → correr simulação

Notas: - 80 colunas por linha

- c significa comment

- \$ significa comentário
após linha

- Não utilizar TAB

Exercício 1



Copiar o código escrito na página anterior e correr o código em modo visualização e em modo de correr.

Ferramenta de visualização

- Na ferramenta de visualização pode utilizar vários comandos:
 - ✓ `px, py, pz` → visualizar nos planos definidos desta forma.
 - ✓ `cursor` → permite escolher uma parte do visualizador em detalhe a partir do cursor.
 - ✓ `factor` → permite fazer zoom in e out pelo factor referido.
 - ✓ `scales` → 0,1,2 permite desenhar escalas no desenho.
 - ✓ `label` → 0,1... permite colocar labels nas superfícies, células e nos materiais (separados por vírgulas)
 - ✓ `help,?,options` → lista dos comandos disponíveis.


Geometria

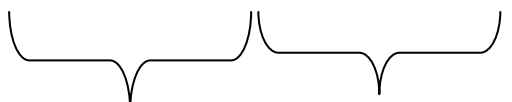
CELL E SURFACE CARDS

- Superfícies e células são numeradas de 1 a 9999
 - sólidos geométricos simples são definidos por comandos que definem superfícies
 - Planos (px, py, pz)
 - Esferas (s, s0)
 - Cilindros (cx, cy, cz)
 - Cones (kx, ky, kx)
 - etc.
 - Células são definidas através de operações booleanas sobre as superfícies definidas.
 - TODO o espaço tem de ficar definido

EXEMPLO geral de célula:

1	1	-15		
2	0		-1	imp:p,e=1
			1	imp:p,e=0

 material dens

 superfícies dados como a importancia

EXEMPLOS Superfícies

1 px 5 (plano perpendicular ao eixo dos x=5 cm)
2 so 10 (esfera centrada no centro (0,0,0) com r=10 cm)
3 cy 20 (cilindro ao longo do eixo dos y com 20 cm de raio)

Geometria

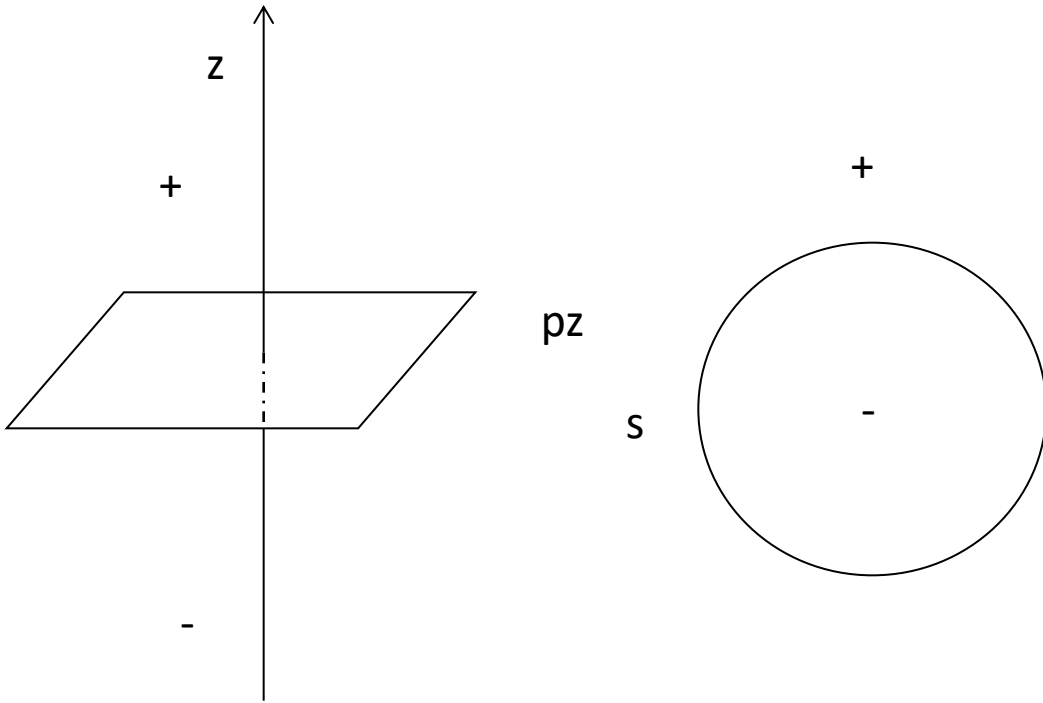
Mnemonic	Type	Description	Equation	Card Entries			
P PX PY PZ	Plane	General Normal to x-axis Normal to y-axis Normal to z-axis	$Ax + By + Cz - D = 0$ $x - D = 0$ $y - D = 0$ $z - D = 0$	A B C D D D D			
SO S SX SY SZ		Sphere	Centered at Origin General Centered on x-axis Centered on y-axis Centered on z-axis	$x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$ $(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$ $(x - \bar{x})^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$ $x^2 + (y - \bar{y})^2 + z^2 - R^2 = 0$ $x^2 + y^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	R $\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ R$ $\bar{x} \ R$ $\bar{y} \ R$ $\bar{z} \ R$		
C/X C/Y C/Z CX CY CZ			Cylinder	Parallel to x-axis Parallel to y-axis Parallel to z-axis On x-axis On y-axis On z-axis	$(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$ $(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$ $(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2 - R^2 = 0$ $y^2 + z^2 - R^2 = 0$ $x^2 + z^2 - R^2 = 0$ $x^2 + y^2 - R^2 = 0$	$\bar{y} \ \bar{z} \ R$ $\bar{x} \ \bar{z} \ R$ $\bar{x} \ \bar{y} \ R$ R R R	
K/X K/Y K/Z KX KY KZ				Cone	Parallel to x-axis Parallel to y-axis Parallel to z-axis On x-axis On y-axis On z-axis	$\sqrt{(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2} - t(x - \bar{x}) = 0$ $\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2} - t(y - \bar{y}) = 0$ $\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2} - t(z - \bar{z}) = 0$ $\sqrt{y^2 + z^2} - t(x - \bar{x}) = 0$ $\sqrt{x^2 + z^2} - t(y - \bar{y}) = 0$ $\sqrt{x^2 + y^2} - t(z - \bar{z}) = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ t^2 \pm 1$ $\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ t^2 \pm 1$ $\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ t^2 \pm 1$ $\bar{x} \ t^2 \pm 1$ $\bar{y} \ t^2 \pm 1$ $\bar{z} \ t^2 \pm 1$
					± 1 used only for 1 sheet cone		

Mnemonic	Type	Description	Equation	Card Entries
SQ	Ellipsoid Hyperboloid Paraboloid	Axis not parallel to x-, y-, or z-axis	$A(x - \bar{x})^2 + B(y - \bar{y})^2 + C(z - \bar{z})^2 + 2D(x - \bar{x}) + 2E(y - \bar{y}) + 2F(z - \bar{z}) + G = 0$	A B C D E F G $\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z}$
GQ	Cylinder Cone Ellipsoid Hyperboloid Paraboloid	Axes not parallel to x-, y-, or z-axis	$Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Eyz + Fzx + Gx + Hy + Jz + K = 0$	A B C D E F G H J K
TX	Elliptical or Circular Torus.	Axis is parallel to x-, y-, or z- axis	$(x - \bar{x})^2 / B^2 + \left(\sqrt{(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2} - A^2 \right) / C^2 - 1 = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ A \ B \ C$
TY			$(y - \bar{y})^2 / B^2 + \left(\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2} - A^2 \right) / C^2 - 1 = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ A \ B \ C$
TZ			$(z - \bar{z})^2 / B^2 + \left(\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2} - A^2 \right) / C^2 - 1 = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ A \ B \ C$

Desenhar uma esfera no vácuo no ponto (0,26,0) com r=3 cm e visualizar a estrutura.

Geometria

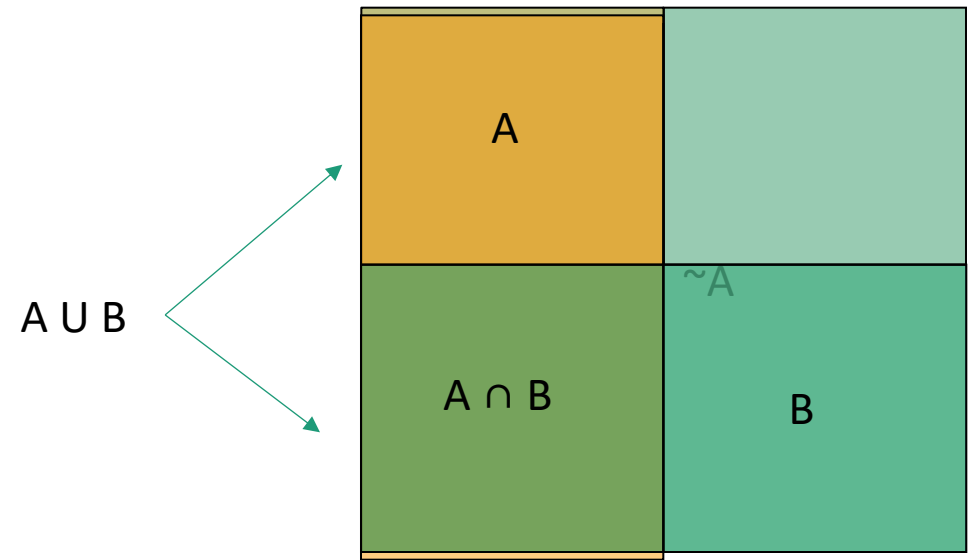
SINAIS



Explicação dos sinais – e + na definição das células

OPERAÇÕES BOOLEANAS

- o Intersecção (e) -> é um espaço “ “
- o Reunião (ou) -> é o sinal dois pontos “:”
- o Complementar (negação) -> é o sinal “#”



Exercício 2



Desenhar uma esfera no vácuo no ponto $(0,26,0)$ com $r=3$ cm e visualizar a estrutura.

Materiais

- O commando é: `Mm ZAID1 fraction1 ZAID2 fraction2 ...`

m = corresponde ao número do material no ficheiro

- *ZAID_i* = identificador do nuclídeo no formato:

ZZZAAA.nnX

ZZZ é o número atómico, *AAA* é a massa atómica

nn identifica a biblioteca, e *X* a classe de dados

Os dois últimos não são obrigatórios, sendo usados por defeito.

- *fraction_i* = fracção atómica (ou fracção ponderada se com sinal menos) constituinte *i* no material



Exemplo: Água: `m1 1001 2 8016 1`

Exemplo 2 (por alto): Ar: `m2 8016 -0.23 7014 -0.70 6012 -0.02 1001 -0.01`

titulo: ejercicio 2

C cell cards

1 0 -1 imp:p=1

2 0 1 imp:p=0

C surface cards

1 s 0 26 0 3

(1 sy 26 3)

C data cards

mode p

Exercício 3



Acrescentar uma segunda esfera centrada em 0,13,10 de raio 3 cm e fazer as duas esferas de água e visualizar.

NOTA:

Para inserir o material e densidade na célula usar o formato visto nos slides anteriores.

titulo: exercicio 3

C cell cards

1 1 -1.0 -1 imp:p=1

2 1 -1.0 -2 imp:p=1

3 0 1 2 imp:p=0

C surface cards

1 s 0 26 0 3

2 s 0 13 10 3

C data cards

mode p

m1 1001 2 8016 1