

文章编号: 1007-4627(2008)01-0048-04

MCNP 程序研究进展*

张建生¹, 蔡勇¹, 陈念年²

(1 西南科技大学制造科学与工程学院, 四川 绵阳 621010;

2 西南科技大学计算机科学与工程学院, 四川 绵阳 621010)

摘要: MCNP 是用来计算中子、光子、电子或者中子/光子/电子耦合问题的通用蒙特卡罗粒子输运计算程序, 它以其灵活、通用的特点以及强大的功能, 在诸多领域得到广泛认可和应用。但是由于其使用需要较强的专业水平, 因而使得其在某些方面又显出一些弱点。对 MCNP 程序的发展过程以及今后的发展趋势进行了讨论, 同时提出了作者的观点。

关键词: MCNP; 蒙特卡罗方法; 输入文件; 计算可视化

中图分类号: TP302 **文献标识码:** A

1 MCNP 介绍^[1, 2]

MCNP (Monte Carlo N-Particle Transport Code) 是基于蒙特卡罗 (MC) 方法的用于计算三维复杂几何结构中的中子、光子、电子或者耦合中子/光子/电子输运问题的通用软件包, 也具有计算核临界系统 (包括次临界和超临界系统) 本征值问题的能力。该软件包通过 FORTRAN 语言编程实现。其中, MC 方法又称随机抽样或统计实验方法, 属于计算数学的一个分支, 它是在 20 世纪 40 年代中期为了适应当时原子能事业的发展而发展起来的。传统的经验方法由于不能逼近真实的物理过程, 很难得到满意的结果, 而 MC 方法由于能够真实地模拟实际物理过程, 故解决问题与实际非常符合, 可以得到很圆满的结果。

MCNP 程序具有超强的几何处理能力, 几何系统由几何空间单元 (cell) 组成, 而几何空间单元的界面 (surface) 由平面、二次曲面及特殊的四次椭圆环曲面组成。几何空间单元中的材料由包括同位素在内的多种核素组成, 使用精确的点截面参数, 对特定的评价库 (ENDF/B-IV, V, VI 库或 ENDL851 库), 考虑了该库给出的所有中子反应类型。在截面数据文件中收集了多种评价库的数据。对热中子还配备了相应的截面数据, 可按自由气体模型或 S

(α , β) 模型处理。对光子考虑了相干和非相干散射, 并处理了光电吸收后可能的荧光发射或电子对产生。

MCNP 程序涉及面如此之多, 关键是通过读入一个经用户创建的称为 INP 的输入文件来进行计算。该文件必须遵循按照栅元卡 (card) 的格式进行组织, 指定描述空间问题的信息, 具体地有^[2]: (1) 空间几何体的描述说明; (2) 几何体的使用材料描述和交叉区域的选择估计; (3) 中子、光子以及电子这 3 种粒子源的位置和特性说明; (4) 必要的回答卡和标记卡的类型; (5) 任何必需的冗余量消除技术, 以提高计算效率。

目前, MCNP 以其灵活、通用的特点以及强大的功能被广泛应用于辐射防护与射线测定、辐射屏蔽设计优化、反应堆设计、(次) 临界装置实验、医学以及检测器设计与分析等学科领域, 并得到一致认可。但是, MCNP 的应用并不只限于这些领域。

2 MCNP 的发展历程^[3-5]

MCNP 程序是由美国 Los Alamos 国家实验室研制开发的, 为其所投入的研究、发展、程序编写及参数制作超过了 500 人年。程序诞生于 1963 年, 20 世纪 70 年代中期由中子程序和光子程序合并, 形成了最初的 MCNP 程序。自那时起, 每 2—3 年

* 收稿日期: 2007-05-08; 修改日期: 2007-11-23

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (10576027)

作者简介: 张建生 (1980—), 男 (汉族), 硕士, 从事逆向工程、虚拟现实和计算可视化研究; E-mail: zhangjiansheng@swust.edu.cn

更新一次,版本不断发展,功能不断增加,适应面也越来越广。已知的 MCNP 程序研制版本的更新时间表如下:

MCNP-3: 1983 年写成,为标准的 FORTRAN77 版本,截面采用 ENDF/B-III。

MCNP-3A: 1986 年写成,加进了多种标准源,截面采用 ENDF/B-IV。

MCNP-3B: 1988 年写成,具有阵列几何处理能力(即重复结构描述),多群截面和计数输出的图形化功能,截面采用 ENDF/B-IV 和 ENDL-851。

MCNP-4: 1990 年 7 月由 LANL 写成,截面采用 ENDF/B-V。

MCNP-4.2: 1991 年 3 月由 ORNL 的 RSIC 写成,程序有较大改进,增加了基于 Sandia 国家实验室的 ITS(Integrated Tiger Series)-连续能量电子输运包,将其编入 MCNP 程序,专用于 UNIX 系统,从此 MCNP 程序成为中子/光子/电子耦合输运程序。

MCNP-4A: 1993 年诞生,仍为 UNIX 系统,开始引入 PVM 并行,适合共享存储并行计算机,截面为 ENDF/B-V。

MCNP-4B: 1997 年 3 月正式推出,有 PC 版(需要 LAHEY 编译系统支持),UNIX 版,采用 ENDF/B-VI 截面库和彩色图形系统,仍采用 PVM 并行编程。

MCNP-4B2: 为 MCNP-4B 的升级版,其支持 FORTRAN 90 系统。

MCNP-4C: 2000 正式推出,在 MCNP-4B 基础上增加共振自屏、瞬发 α 本征值、微扰和多群伴随中子输运计算等处理,采用 F90 编译器,工作站版本支持 PVM 和 SMPP 并行。

MCNP-5: 2003 年推出。在这个版本中,完成了从 FORTRAN-77 到 FORTRAN-90 的重新组织,支持以前的 MCNP-4C2/4C3 全部功能,同时在提高图形显示,易安装性以及更好的在线文档方面有较大改善。

另外,在 MCNP 系列版本中,出现了 MCNPX 版本,该版本程序仍为该实验室研制,并由其负责维护和更新。MCNPX 开始于 1994 年,作为 MCNP-4B 和 LAHET-2.8 的代码整合项目,并第 1 次在 1999 年对外发布,版本为 2.1.5。2002 年,MCNPX 升级为 MCNP-4C,其变化包括支持 FORTRAN 90 系统,加强了 12 种新特性,并作为 2.4.0 版本对外

发布。自从 2002 年开始,MCNPX 测试组向全球 300 个机构中的 1 400 多名用户进行公开测试,在加入了数 10 个新特性后作为 2.5.0 版对外发布。MCNPX 现在已经成为世界上使用最为广泛的粒子输运程序之一。

早期的 MCNP 程序基于节约内存的目的,使用磁盘文件较多,读取文件效率极低。目前 MCNP 程序中的多数文件交换已改为内存数组,它比磁盘文件读取速度提高了 10 000 倍,加之高速缓存 Cache 的使用,并行效率显著提高。

3 MCNP 的应用状况及发展

由于 MCNP 的通用性、灵活性以及强大的功能,使得其在世界上有广泛应用,仅国内的用户就在百家之上,应用领域也从过去主要的核领域,逐渐推广到石油、医学在内的许多领域。

从 20 世纪 90 年代开始,国外已经有研究人员开始研究 MCNP 输入文件制作的简化和计算结果的图形化显示。特别是随着计算机软硬件技术的发展,在近几年取得了一些有价值的研究成果。所开发的 MCNP 可视化软件能够应用场景的二维 DXF 格式文件和三维 SAT 格式的图形文件转换成 MCNP 的输入文件,即将在目前商用 CAD 软件中绘制的计算场景的几何模型转换为 MCNP 的仿真模型。同时在场景的某些界面将 MCNP 的计算结果绘制成二维图形,实现了计算结果的可视化^[6,7]。为便于计算结果的分析、存储和共享,有的后处理软件能够将 MCNP 计算结果输出到电子表格等数据库中。

近几年,国内在 MCNP 前处理与后处理技术领域研究也取得了长足的进步。主要表现在以下几个方面:

(1)在 MCNP 的计算效率、几何局限性以及二维交互绘图等方面进行了有益的探索^[8]。

(2)为了简化 MCNP 输入文件的制作、显示 MCNP 的计算进程和计算数据的抽取与显示,研究开发了专用的 MCNP 程序可视化运行平台^[9],并能以图形化的方式显示 MCNP 的计算进程和运行时间的相关信息。

(3)为了简化 MCNP 的几何建模,提高 MCNP 计算输入文件的编写效率,研究将有关 CAD 文件中的几何模型转换为 MCNP 仿真模型的算法问题,

通过对目前商用图形软件包进行二次开发, 开发出专用的 MCNP 辅助建模工具^[10]。

另外, 可视化技术已经在自然科学领域得到了广泛的应用。目前在规则数据场的体绘制和面绘制算法等方面的技术已经趋于成熟。国内外的一些研究机构相继推出了一系列可视化软件工具及专用可视化软件^[6, 7, 11]。但在三维数据场实时动态显示、非规则数据场合矢量场的可视化计算以及基于网络的科学计算可视化理论等方面有待进一步的研究和完善。

综上所述, 近几年来国内外研究人员在 MCNP 仿真模型的建立、计算结果的可视化研究方面取得了一些重要的研究成果。

4 MCNP 程序的不足

MCNP 程序采用了 MC 方法, 由于能够准确地描述复杂几何, 并真实地考虑了粒子事件的全部物理过程, 特别是连续能量点截面和精确角分布的使用, 使 MC 方法具有很强的竞争性。然而这种方法的最大不足是误差的概率性和收敛方面, 计算耗时多, 过去受计算机条件限制, 这种方法在 20 世纪 90 年代前还受到限制, 但随着计算机的高速发展, 近 10 年 MC 方法的应用也越来越广。

同时, 由于 MCNP 是一个通用软件, 往往不能直接用来解决具体问题。在具体应用中, 必须针对具体问题作适当改进和进一步开发。

另外, 虽然 MCNP 在世界范围内得到了广泛应用, 但是存在输入接口复杂和繁琐, 对空间中几何对象描述非常困难的问题。MCNP 输入文件结构复杂, 几何模型描述工作又极为抽象、不直观和容易出错, 这样使得描述工作费时、复杂和效率低。如果采用人工方式制作, 需要建模人员具有较强的专业水平。对于一个中等复杂度的图像对象(实体图元在 50 左右), 手工制作时间为 1-2 个人月, 而且出错的可能性极大, 有时不得不重新制作或简化模型。而且 MCNP 的绘图功能仅仅局限在二维剖面图, 常会遇到不适应的情况, 特别是复杂几何的描述极易出错, 这给用户在调试几何模型输入文件时带来不便。

5 MCNP 的发展趋势及前景

针对 MCNP 程序本身以及其应用领域的特点,

今后在 MCNP 输入文件辅助制作工具、几何模型可视化等方面都很具有发展潜力, 同时在某些特殊领域, 可以对 MCNP 进行二次开发, 对其做源代码级的修改, 以适用于具体的问题。

20 世纪 80 年代后期提出了科学计算可视化这个新的研究领域。经过数 10 年的研究, 科学计算可视化已经从研究阶段转入到应用阶段。目前应用在 MCNP 的可视化研究主要体现在 MCNP 模型的可视化辅助自动建模工具。MCNP 模型相关的可视化工具主要包括 Visual Editor, Sabrina, Moritz 以及中国科学院等离子体研究所 FDS 团队开发的具有自主知识产权的自动建模可视化软件系统 MCAM^[11]。MCNP 可视化自动建模工具的开发, 可以很好地解决以手工的方式来建立 MCNP 输入文件所带来的一系列相关问题, 因而具有很广阔的发展前景。

另一方面, 随着科学计算可视化理论以及虚拟现实技术的发展, 开发具有复杂几何体的建模和虚拟组装、三维空间不规则数据场的可视化以及 MCNP 计算结果可视化处理功能的高度集成可视化平台, 也可以更好地促进 MCNP 的应用, 并在一定程度上促进科学计算可视化理论以及虚拟现实技术的进一步发展。

6 结论

MCNP 是目前世界上比较成熟的 MC 软件包之一, 在多个领域获得了广泛的应用。本文比较系统地介绍了 MCNP 的程序功能以及发展历史, 并对 MCNP 在实际应用中表现出来的问题作了阐述, 提出了 MCNP 的发展趋势以及前景。随着核科学理论与技术的发展, 以及其它相应技术如计算可视化等的发展, MCNP 将会越来越受到重视, 其应用领域也必将在目前基础上向其它相关领域扩展。

参考文献 (References):

- [1] Briesmeister J F (Ed). MCNP4C General Monte Carlo N-Particle Transport Code. Los Alamos National Laboratory, LA-13709-M, 2000, 1-10.
- [2] X-5 Monte Carlo Team. MCNP-A General Monte Carlo N-Particle Transport Code Version 5. Diagnostics Applications Group Los Alamos National Laboratory, LA-UR-03-1987 (Revised 10/3/05).
- [3] McKinney G W, Durkee J W, Hendricks J S, *et al.* MCNPX

- 2.5.0-New Features Demonstrated, the Monte Carlo Method: Versatility Unbounded In A Dynamic Computing World. Chattanooga, Tennessee, April 17—21, 2005, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL(2005).
- [4] Pelowitz D B. MCNPX User's Manual Version 2.5.0. Los Alamos National Laboratory Report, LA-CP-05-0369, 2005.
- [5] Deng Li, Liu Jie, Zhang Wenyong. Journal on Numerical Methods and Computer Applications, 2003, **9**: 161 (In Chinese).
(邓力, 刘杰, 张文勇. 数值计算与计算机应用, 2003, **9**: 161.)
- [6] Schwarz R A, Carter L L, Hillesland Karl E, *et al.* Advanced MCNP Input File Creation Using the Visual Editor. Proceedings of the 1998 Topical on Radiation Shielding, Nashville, Tennessee, 1998. 317—324.
- [7] Kenneth A, Van Riper. An Interactive Geometry Editor Viewer for MCNP & MCNPX [OL]. <http://www.whiterockscience.com/moritz.html>.
- [8] Gao Yanfeng. Nuclear Electronics & Detection Technology, 1998, **18**(3): 192 (In Chinese).
(高彦锋. 核电子学与探测技术, 1998, **18**(3): 192.)
- [9] Fan Jiajin, Wang Yi, Cheng Jianping, *et al.* Nuclear Electronics & Detection Technology, 2002, **22**(1): 52 (in Chinese).
(范佳锦, 王义, 程建平. 核电子学与探测技术, 2002, **22**(1): 52.)
- [10] Luo Yuetong, Liu Xiaoping, Huang Qunying. Journal of System Simulation, 2002, **14**(4): 470 (in Chinese).
(罗月童, 刘晓平, 黄群英. 系统仿真学报, 2002, **14**(4): 470.)
- [11] Ding Aiping, Li Ying, Lu Lei, *et al.* Nuclear Physics Review, 2006, **23**(2): 130 (in Chinese).
(丁爱平, 李莹, 卢磊. 原子核物理评论, 2006, **23**(2): 130.)

Developments of Research on Code MCNP*

ZHANG Jian-sheng^{1, 1)}, CAI Yong¹, CHEN Nian-nian²

(1 School of Manufacturing Science and Engineering, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, Sichuan, China;

2 School of Computer Science and Engineering, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, Sichuan, China)

Abstract: MCNP is a general-purpose Monte Carlo N-Particle code that can be used for neutron, photon, electron or coupled neutron/photon/electron transport, and it is widely accepted and used in many fields for its features of flexibility, generality and powerful functionality. However, MCNP shows some weakness in some aspects due to its profession-using. In this paper, both the procedure of MCNP development and its tendency are expounded, while the author's point of view on MCNP code is put forward.

Key words: MCNP; Monte Carlo method; input file; computing visualization

* Received date: 8 May 2007; Revised date: 23 Nov. 2007

* Foundation item: National Nature Science Foundation of China(10576027)

1) E-mail: zhangjiansheng@swust.edu.cn