

文章编号: 1007-4627(2012)04-0388-07

# 基于 MCNP 多群伴随计算与正算分析的比较

王超<sup>1</sup>, 邓力<sup>2</sup>

(1. 中国工程物理研究院北京研究生部, 北京 100088

2. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

**摘要:** 为研究 MCNP 伴随计算与正算的一致性及其差异, 利用 3 个模型作为算例进行比较计算, 并对其结果进行分析。模型 I 的计算结果表明, 伴随计算与正算结果基本一致, 而且伴随计算的 FOM 值大约为正算的 2 倍左右; 模型 II 研究了伴随计算对不同材料的适用性, 结果显示, 在散射截面较大的情况下, 伴随计算的通量与正算通量的差异在 20% 左右, 而且正算的 FOM 值比伴随计算的大; 模型 III 研究了伴随在产生重要函数中的应用, 并与权窗进行比较, 经分析, 虽然它们产生重要函数的机制不同, 但所得函数的性质基本相同, 而且使用伴随重要函数的 FOM 值大约是使用权窗的 1.5 倍。

**关键词:** 伴随计算; 正算; 重要函数(价值函数); 权窗

**中图分类号:** O571.5      **文献标志码:** A

## 1 引言

蒙特卡罗(MC)方法在粒子输运领域已经得到了广泛的应用。目前有许多通用的 MC 程序, 如美国 LANL 研制的 MCNP 程序, 以其强大的处理复杂几何和复杂核反应过程的功能倍受青睐。随着计算机和计算方法的发展, 模拟问题的几何和物理过程越来越复杂, 对计算精度和效率的要求也非常高, 正算已经不能满足特殊问题的需要。由于正算粒子是从源到探测器, 因此, 当探测器较大, 而源较小时, 计算效果非常好; 反之, 当探测器较小, 而源较大时, 正算结果就不太理想。然而, 由于伴随计算是从探测器到源进行模拟, 所以, 当源较大, 探测器较小时, 采用伴随计算可以非常好地解决正算计算困难的问题。因此, 通过对 MCNP 伴随计算进行系统研究, 可分析其与正算的一致性及其差异。本文选取 3 个简单的模型对伴随计算的构造、适用性以及产生价值函数中的应用进行了分析研究, 并把结果与正算做了比较, 以寻找其异同。

## 2 伴随问题的构建

MCNP 提供了非常方便的粒子多群正算和伴

随计算, 只要在输入文件中加入 MGOPT 卡片, 并对 MCAL 参数赋值, 便可对粒子进行多群正算和伴随计算。然而, 仅仅通过对 MCAL 参数赋值为  $a$  实现的伴随模拟是不准确的, 这种方法只是简单地对粒子碰撞做伴随处理。要想实现完全的伴随计算, 就必须重新定义粒子源、计数类型及相应概率分布等。

### 2.1 算法

伴随计算的实质就是对正算的粒子进行逆向模拟, 但是仅仅简单互换模型的源区域和计数区域、源类型和计数类型, 以及相应的概率分布, 往往使模拟的问题发生变化, 导致正算和伴随计算不一致, 从而得不到正确的结果。因此, 我们引入响应函数  $R(P)$ , 对于任意一个正算问题, 与其相应的伴随计算满足如下关系式<sup>[1]</sup>:

$$S(P)R(P) = S^*(P)R^*(P), \quad (1)$$

其中:  $S(P)$  和  $R(P)$  分别为正算源分布和响应函数;  $S^*(P)$  和  $R^*(P)$  分别为伴随计算的源分布和响应函数。故当要模拟的问题不能满足式(1)时, 可以通过计算:

$$S(P)R(P) = \lambda S^*(P)R^*(P) \quad (2)$$

求出伴随计算和正算的转化因子 $\lambda$ ，以此实现正算和伴随计算的一致性。下面通过具体的模型，讨论伴随问题的构造。

### 2.2 计算模型

#### (1) 模型 I

模拟中子穿过 10 cm 厚的水柱，几何模型示于图 1，源为一个半径为 25 cm 的圆盘面源。为了提高模拟的效率，对源粒子方向做余弦偏倚抽样，采用 30 群中子截面( $G=30$ ,  $E_0$  对应高能,  $E_G$  对应低能)，能量范围从  $1.39 \times 10^{-10}$  到 17 MeV，第  $i$  个能量群中子的抽样概率为

$$p_i = \frac{\int_{E_i}^{E_{i+1}} (10 - E) dE}{\int_{E_0}^{E_G} (10 - E) dE}, \quad i = 1, 2, \dots, G \quad (3)$$

其中  $E_i$  和  $E_{i+1}$  分别为每个能量群的能量间隔。上式满足  $\sum_{i=1}^G p_i = 1$ 。

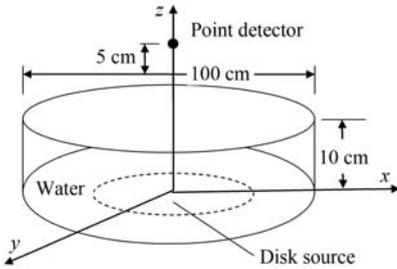


图 1 模型 I 几何示意图

用 MCNP 的 F5 点探测器计数，并对其构造 30 个能量箱，边界划分与能量群一致，能量响应满足

$$R(E) = \begin{cases} \frac{1}{2}(E_i + E_{i+1}), & E_{i+1} \leq E \leq E_i \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

#### (2) 模型 I 伴随问题的构建

第一步，重新定义伴随源和计数。伴随中子源能量采用响应函数的归一化处理  $R(E)/\int R(E) dE$ ，位置置于正算的点探测器处；计数变为由  $S(E)$  为能量响应的 F1 流计数，计数区域为正算的圆盘面。

第二步，正算，伴随源和响应函数，见表 1。由概率密度函数求出每个能量群的概率 (SP2 卡的值)，由能量响应函数求出每个能量箱的 EM0 卡的值，然后用正算 SP2 卡的值作为伴随计算 EM0 卡的值，用正算 EM0 卡的值作为伴随计算 SP2 卡的值。

第三步，计算归一化因子 (伴随粒子的初始权重)。对正算源的能量概率 (SP2 卡的值) 求和  $\sum P_g = 49.9088$ ，以此作为源能量分布的归一化因子；正算能量响应 (EM0 卡的值) 求和  $\sum R_g = 32.6410$ ，以此作为响应函数的归一化因子。假定中子源分布和响应函数的每个变量相互独立，则  $S(P)$  和  $R(P)$  可进行变量分离<sup>[2]</sup>：

$$S(P) = S(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) = S_1(\mathbf{r})S_2(E)S_3(\boldsymbol{\Omega})S_4(t), \quad (4)$$

$$R(P) = R(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) = R_1(\mathbf{r})R_2(E)R_3(\boldsymbol{\Omega})R_4(t). \quad (5)$$

同理  $S^*(P)$  和  $R^*(P)$  也可同样地变量分离，然后把表 1 的值代入式 (2) 化解得

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{S(P)R(P)}{S^*(P)R^*(P)} = \frac{2\pi \sum R_g}{\sum P_g} \\ &= \frac{2 \times 32.6410\pi}{49.9088} = 1.308025\pi. \end{aligned}$$

第四步，MGOPT 卡中的 MCAL 参数由  $f$  变为  $a$ 。

表 1 伴随和正算问题的归一化形式

	空间密度	方位密度	时间密度	能量密度	空间响应	方位响应	时间响应	能量响应
	$S_1(\mathbf{r})$	$S_2(\boldsymbol{\Omega})$	$S_3(t)$	$S_4(E)$	$R_1(\mathbf{r})$	$R_2(\boldsymbol{\Omega})$	$R_3(t)$	$R_4(E)$
正算	$\frac{r^2}{(25)^2}$	$\frac{\mu}{\pi}$	1	$\frac{P_g}{\sum P_g}$	1	1	1	$R_g$
伴随计算	1	$\frac{1}{2\pi}$	1	$\frac{R_g}{\sum R_g}$	$\frac{r^2}{(25)^2}$	$\frac{\mu}{\pi}$	1	$P_g$



率为：0.0 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.6 0.6 0.6。

### 3.2 计算结果及分析

按照模型 I 中的方法，构造本问题的伴随模块，分别对材料水和铁进行计算，并与正算进行比较，总共模拟的粒子数均为 150 万。从图 4 可以看出，曲线(1)和(2)，曲线(5)和(6)完全不吻合，因此伴随计算和正算结果相差很大，可见散射截面的大小对计算结果产生了很大的影响。从曲线(3)和(4)可以看出，随着散射次数的增加，伴随计算的误差基本都比正算的小，这是因为水几乎在所有能区的散射截面都较小，只有在能量很低的个别能区较大，因此对伴随计算的整体误差影响不大。随着能量群的变化，从曲线(7)和(8)可知伴随计算的误差一直比正算结果好，但在 18 群 ( $1.39 \times 10^{-10}$  MeV 到  $1.52 \times 10^{-7}$  MeV)，伴随计算误差急剧增大，约为正算的 25 倍，这是因为水在低能区有很大的散射截面造成的。

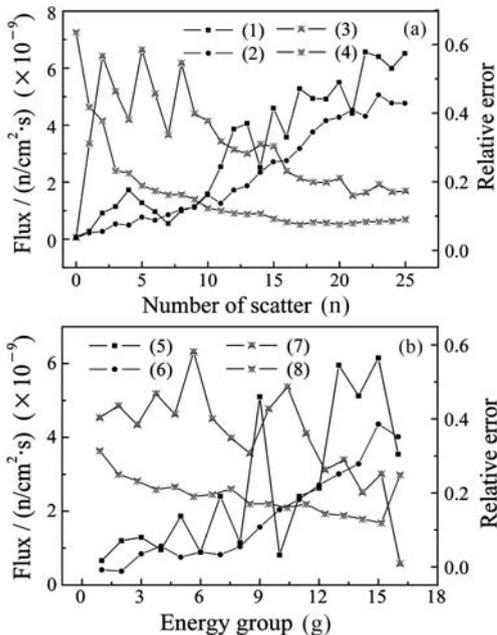


图 4 中子通量、误差随着散射次数和能量群号的变化曲线 (1)，(5)表示正算通量的变化；(2)，(6)表示伴随通量的变化；(3)，(7)表示正算的误差；(4)，(8)表示伴随的误差。

图 5 显示，就材料铁而言，从曲线(1)和(2)，曲线(5)和(6)可看出伴随计算和正算通量结果吻合得也不太理想。而且除个别点，几乎在所有的能量群中和散射次数下，伴随计算的误差结果都比正算

的大，这主要因为铁在大多数能量群中都有较大的非弹性散射截面，对整体的计算结果影响都很大。

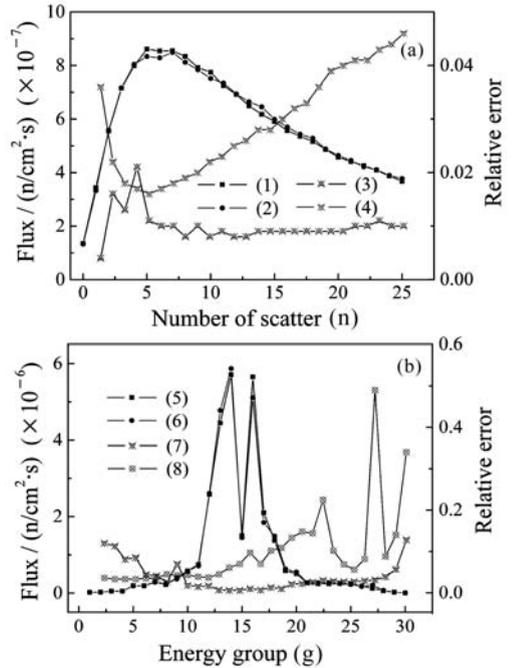


图 5 中子通量、误差随着散射次数和能量群号的变化曲线 (1)，(5)表示正算通量的变化；(2)，(6)表示伴随通量的变化；(3)，(7)表示正算的误差；(4)，(8)表示伴随的误差。

效率方面，材料水正算的 FOM 值是 1 292，伴随计算的 FOM 值是 224，故正算大约为伴随计算的 6 倍左右，而且都比较小；材料铁正算的 FOM 值是 16 908，伴随计算的 FOM 值是 8 730，故正算大约为伴随计算的 2 倍左右。综上所述，当模拟的问题中存在较大的散射截面时，采用伴随计算在计算精度和效率上都不太理想。即若从源到探测器之间物质的散射截面大，相应的吸收截面小，计数率就比较高。因此，正算效率好，采用伴随计算的作用就不大。

### 4 伴随重要函数与权窗的比较

伴随计算具有很好的应用价值<sup>[3-4]</sup>，在屏蔽计算、深穿透问题、石油测井和反应堆内的微扰计算等中都有很好的应用。最常见的应用包括重要函数(又称价值函数)的产生，用它指导 MC 计算，可以有效提高探测器计数。下面针对具体模型，分别使用权窗和伴随重要函数产生 MC 输运计算的价值函数，通过比较两个函数的性质，分析其对计算结果和计算精度的意义。

### 4.1 计算模型

#### (1) 模型 III

该模型与模型 I 基本相似, 能量从 0.01 MeV 到 10 MeV, 只把 10 cm 的水变为 60 cm 的铅。这个模型可以视为一个简化的深穿透问题, 直接模拟需要大量的样本和计算时间。因此, 通过重要函数的产生和使用, 寻求提高计算效率的途径。在计算过程中, 把铅物质所在 60 cm 的圆柱分为 19 个栅

元。为了在模拟过程中, 提高到达探测器的粒子数, MCNP 重要性卡片 IMP 的选取至关重要, 先采用近似选取, 尽管不够精确, 但可与直接模拟进行比较。模拟过程如下:

#### (2) 直接模拟

设定每个非真空栅元的 IMP 值都为 1, 正算和伴随计算各进行一次, 分析输出文件中进入各个几何块(即 cell, 几何最小单元)的粒子径迹数(表 2)。

表 2 每个栅元中的粒子数\*

Cell	正算		伴随计算	
	粒子径迹数	IMP 的值	粒子径迹数	IMP 的值
2	1 768 670	1	10 708	127.879
3	1 745 710	1.013	12 842	106.629
4	1 720 109	1.028	14 850	92.210
5	1 662 469	1.064	20 832	65.732
6	1 565 061	1.130	28 490	48.063
7	1 456 421	1.214	37 619	36.400
8	1 324 818	1.335	51 593	26.541
9	1 204 604	1.468	58 555	23.385
10	1 050 287	1.684	100 172	13.670
11	892 652	1.981	99 950	13.700
12	815 231	2.170	137 047	9.992
13	664 037	2.664	212 706	6.438
14	554 118	3.192	216 483	6.325
15	462 421	3.825	374 170	3.660
16	357 645	4.945	380 046	3.603
17	315 901	5.599	478 658	2.861
18	253 915	6.966	591 037	2.317
19	195 288	9.057	729 606	1.877
20	110 824	15.959	1 235 130	1.109
30	52 781	33.510	1 369 324	1

\* 正算中假定源所在的 2 号栅元的 IMP 值为 1, 其它栅元用源栅元的粒子数与其粒子数之比作为该栅元的 IMP 值; 同理, 伴随计算中假定源所在的 30 号栅元的 IMP 值为 1, 然后做同样的处理。

#### (3) 直接模拟计算

由第一步求出的 IMP 值替换初始的 IMP 卡中的值, 计算得到权窗重要函数和伴随重要函数(WWG, ADJ)。

图 6 中, 以第 10 群(1.738~2.232 MeV) 通量计数为例(图(a)), 比较两个重要函数值和通量随着栅元的变化情况, 结果显示二者吻合得很好, 与

通量变化一致。以 10 号栅元为例(粒子大约在铅中输运一半)(图(b)), 比较两个重要函数值随着能量的变化情况, 如图所示二者变化规律基本一致。由此可见, 虽然它们二者产生重要函数的机制不同, 但所得函数的性质基本相同。

为了清晰地看到重要函数与通量的变化规律, 将图 6(a)中通量放大 1 000 倍。这里只对它们的数

值大小进行比较。WWG 表示使用权窗生成的重要函数值，ADJ 表示使用伴随生成的重要函数值，

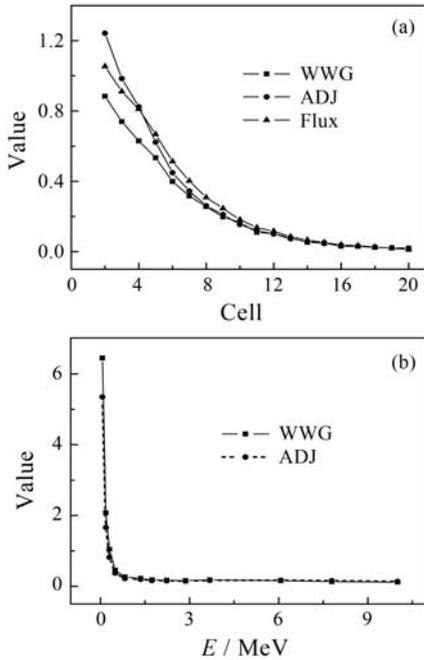


图 6 重要函数值随着栅元号和能量的变化曲线

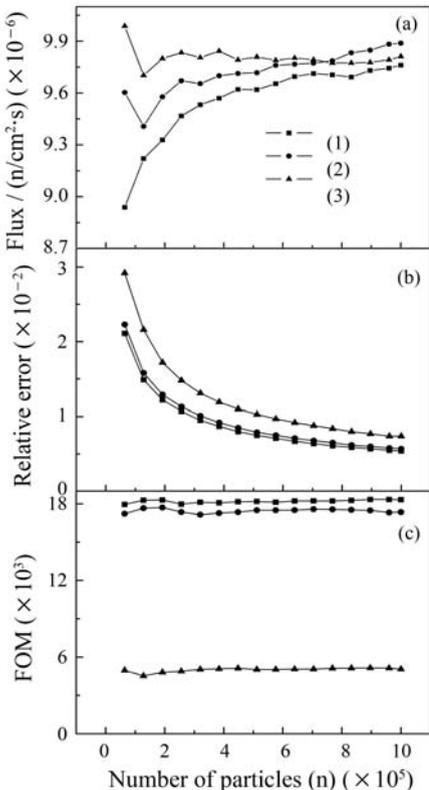


图 7 中子通量、误差、FOM 值随着粒子数的变化曲线

(1) 表示采用伴随重要函数，(2) 表示采用权窗重要函数，(3) 表示不用重要函数。

FLUX 表示通量的数值。

(4) 指导 MC 计算

对模型 III 的正算进行模拟，剔除 IMP 卡，用第二步求出的权窗重要函数和伴随重要函数代替，图 7 给出了计算的结果。

4.2 计算结果分析

如图 7 所示，当模拟的粒子数达到  $10^6$  数量级时，三者的计算结果基本吻合，MC 计算中使用重要函数比不使用重要函数的误差降低了很多，而且采用伴随重要函数比权窗重要函数的误差要小。效率方面，不用价值函数用时 3.66 min，权窗重要函数用时 1.98 min，伴随重要函数用时 1.94 min；使用重要函数的 FOM 值大约是不使用重要函数的 3 倍，且伴随重要函数的 FOM 值比权窗的要大。综上所述，在指导后续 MC 计算中，伴随重要函数的效果比权窗重要函数更好。

5 结论

用 MCNP 正算和伴随计算分别对上述 3 个模型进行了模拟计算，在相同条件下，比较了它们的计算结果，并对其原因进行了简单的分析。给出了构造伴随问题的基本步骤和影响伴随计算结果的因素以及在产生重要函数中的应用。由于模型的几何结构、材料的选择、粒子的能量等许多因素都会干扰伴随计算的结果，因此，本工作为 MCNP 正算与伴随计算的比较提供了一个参考，便于用户根据具体情况选择合适的方法。

参考文献 (References):

[1] COLO G. Los Alamos National Laboratory Internal Memorandum DGC-87-187, 1987.  
 [2] XIE Zhongsheng, DENG Li. Neutron Transport Theory and Numerical Methods[M]. Xian: Northwestern Polytechnical University Publishing House, 2005: 303-345 (in Chinese). (谢仲生, 邓力. 中子输运理论数值计算方法[M]. 西安: 西北工业大学出版社, 2005: 303-345.)  
 [3] PEI Lucheng. Numerical Methods and Computer Applications, 1982, 24(in Chinese). (裴鹿成. 数值计算与计算机应用, 1982, (1): 24.)  
 [4] LÜ Yongjun, Huang Longji. Petroleum University (Natural Science), 1994, 18(2): 19 (in Chinese). (吕永军, 黄隆基. 石油大学学报(自然科学版), 1994, 18

(2): 19.)

# Comparison Research and Analysis of Multi-group Adjoint Calculation and Forward Calculation Based on MCNP

WANG Chao<sup>1,1)</sup>, DENG Li<sup>2</sup>*(1. Beijing Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China;**2. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)*

**Abstract:** In order to investigate the agreement and difference between adjoint and forward calculations with Monte Carlo method, three models have been simulated, and the calculated results are compared and analyzed. First, the comparison shows that the calculated results of the adjoint calculation are basically consistent with those of the forward calculation in model I. The FOM value of adjoint calculation is about two times of the value of forward calculation. Second, it is investigated with model II that the applicability of the adjoint calculation for the different materials, and the results show that the difference is about 20% for the case of strong scattering between the adjoint calculation and forward calculation. The FOM value of the forward calculation is larger than that of the adjoint calculation. Finally, the important function is generated by the adjoint calculation in model III, and the results are compared with ones of the weight window game. Although their important functions are produced by different mechanisms, the values of functions are in agreement with each other, and the FOM value of adjoint calculation is about 1.5 times of the value from the weight windows.

**Key words:** adjoint calculation; forward calculation; important function(value function); weight windows