

## MCNP 辅助建模工具中的关键问题研究

刘晓平<sup>1,2)</sup> 罗月童<sup>1)</sup> 黄群英<sup>2)</sup> 吴宜灿<sup>2)</sup><sup>1)</sup>(合肥工业大学可视化与协同计算(VCC)研究室 合肥 230009)<sup>2)</sup>(中国科学院等离子体物理研究所 12 室 合肥 230031)

(lxp@mail.hf.ah.cn)

**摘要** 大型通用中性粒子计算程序 MCNP 的输入文件包含三维几何模型. 研究了 B-Rep 到 CSG 的自动转换算法. 该算法是开发 MCNP 辅助建模工具的基础. 在 Shapiro 等工作的基础上, 结合 MCNP 几何模型的特点, 对算法中的“构造‘充分曲面集’”和“分解‘栅元’”两点进行了改进, 降低了问题的复杂度, 减少了冗余分解; 并在此基础上, 开发了 MCAM(MCNP Automatic Modeling)软件, 该软件已在国内外多家单位进行了测试和应用, 取得了满意的效果.

**关键词:** CAD; MCNP; 几何模型; 充分曲面集; 分解

**中图法分类号:** TP302; TP391

## Research on Key Problems of Aided Modeling Tool of MCNP

Liu Xiaoping<sup>1,2)</sup> Luo Yuetong<sup>1)</sup> Huang Qunying<sup>2)</sup> Wu Yican<sup>2)</sup><sup>1)</sup>(CAD & CG Division, Computer & Information College, Hefei University of Technology, Hefei 230009)<sup>2)</sup>(12 Division, Institute of Plasma Physics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031)

**Abstract** MCNP(Monte Carlo N-Particle Transport Code) is a general purpose N-particle transport code, and its input file contains 3-D geometry model. The paper studies the algorithm of automatic conversion from B-Rep to CSG. The algorithm is the basis of developing MCNP aided modeling tool. Based on SHAPIRO's work, and taking into consideration of the features of MCNP geometry model, the paper improves the algorithm on two aspects, constructing sufficient surface set and decomposing cell. The improvement reduces the algorithm's complexity, and removes some redundant decomposition. Based on the algorithm, the software package Mcam(MCNP Automatic Modeling) is developed. It has been used & tested by many users at home and abroad, and the test result is satisfactory.

**Key words** CAD; MCNP; geometry model; sufficient surface set; decomposing

## 1 引言

MCNP(Monte Carlo N-Particle transport code)是由美国橡树岭国家实验室研制开发的通用中性粒子输运计算程序,它能够进行中子、光子、电子以及中子/光子/电子的耦合输运计算,广泛应用于多个学科领域<sup>[1]</sup>. MCNP 输入文件的结构复杂,格式要求严格,输入文件中描述三维空间的部分被称为 MCNP 几何模型. 实践表明,不借助任何工具准备 MCNP 输入文件不仅烦琐,而且容易出错,经常需

要进行反复修改,且几何模型部分的问题尤其突出. 目前,在制作 MCNP 输入文件的过程中,计算机充当文本编辑工具的角色,尚未发现被广泛应用的辅助软件,所以开发 MCNP 输入文件的辅助制作工具有重要意义<sup>[2]</sup>. 现在,相关的研究工作都是针对 MCNP 几何模型,根据采用的方法的不同,可把相关工作分成两类.

(1) 开发可视化制作环境. 在可视化环境中制作几何模型,使制作过程更加形象直观,从而提高效率,减少错误. 市场上已有的商业软件如 MCNP-VISED 4C2<sup>[3]</sup>, Sabrina<sup>[4]</sup>等.

(2) 开发转换工具. 根据给定的 CAD 模型直接生成 MCNP 几何模型, 这种方法具有下列优点:

a. 可以在商用或自主开发的 CAD 软件中制作几何模型. 因为 CAD 技术已经发展得非常成熟, 所以制作过程比较方便、快捷.

b. 能对 CAD 模型进行多种自动检测, 排除错误, 如对 CAD 模型进行干涉检测等.

c. 能充分利用现有的 CAD 技术成果, 减少开发工作量.

d. 随着 CAD 技术的普及, 多数情况下, CAD 模型已经在前期设计工作中建立, 可以直接或稍加修改就可继承使用.

可视化制作环境类软件发展得比较成熟, 但转换工具类软件的发展相对滞后. 目前尚未发现其他基于转换工具的辅助软件, 但相关研究取得了一定的进展, 如德国 Karlsruhe 研究中心反应堆安全研究所完成了理论研究<sup>[5]</sup>. 近年来, 我们深入研究了转换工具中的相关技术, 并在研究工作的基础上开发了软件——Mcam. Mcam 已经在德国 FZK、日本 NIFS、中国原子能院 401 研究所等多个国内外单位进行交流使用, 取得了满意的效果<sup>[6]</sup>.

## 2 问题分析

### 2.1 MCNP 几何模型表示

MCNP 几何模型描述了整个三维空间的构成, 根据具体要求, 把整个空间分成不同的区域. MCNP 几何模型就是关于各个区域的形状以及材料构成等信息的描述. 本文讨论形状的描述. 在 MCNP 中, 每个区域被称为一个栅元, 我们沿用这个叫法. 一个 MCNP 几何模型可能由成百上千个栅元组成, 但每个栅元的处理方法相同, 所以在不失一般性的前提下, 我们将以仅有一个栅元构成的 MCNP 模型为例来讨论转换算法.

在三维欧氏空间  $\mathbb{R}^3$  中, 方程  $f(x, y, z)$  能够唯一地确定一个曲面,  $\mathbb{R}^3$  中的集合  $H^+(f) = \{P(x, y, z) | f(x, y, z) \geq 0\}$  和  $H^-(f) = \{P(x, y, z) | f(x, y, z) \leq 0\}$  分别被称为曲面  $f$  在  $\mathbb{R}^3$  中的正半空间和负半空间. MCNP 采用半空间表示法表示栅元<sup>[7]</sup>. MCNP 几何模型由两部分组成, 分别被称为曲面卡和栅元卡.

曲面卡按规定格式定义各种曲面, 曲面卡中的每条记录描述一个曲面, 并有惟一 ID 号. 如“4 P 1 2 3 4”定义了 ID 号为 4 的平面:  $x + 2y + 3z - 4 =$

0. 栅元卡中的一条记录对应 MCNP 几何模型中的一个栅元, 通过定义曲面卡中的一个或多个曲面的半空间的组合来表示栅元的几何形状. 图 1 所示为只有一个栅元的 MCNP 几何模型的曲面卡和栅元卡, 其中“(-2 1):(3 -1)”的意义是  $(H^+(f_1) \cap H^-(f_2)) \cup (H^+(f_3) \cap H^-(f_1))$ .

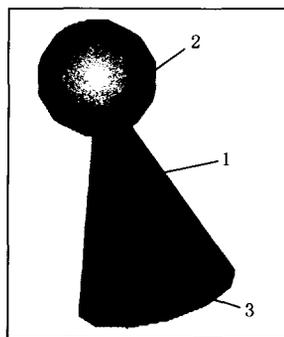


图 1 MCNP 几何模型

实际上, 半空间表示法是构造实体几何 (Construct Solid Geometry, CSG) 的一种<sup>[8]</sup>, CSG 表示法通过适当地组合简单形体 (体素) 来表示复杂形体<sup>[9]</sup>. 通过 CSG 表示法的定义可知, CSG 表示法由两部分构成: (1) 一组简单形体, 被称为体素; (2) 简单形体的组合关系. 它们分别与 MCNP 几何模型的曲面卡和栅元卡对应.

### 2.2 CAD 模型表示

B-Rep 表示法因其具有很多优点, 被各种造型系统和 CAD 系统广泛采用, 它包含几何和拓扑两部分信息. 几何部分定义面、边和点; 拓扑部分则定义面、边、点间的连接关系. 下文中的 CAD 模型是指采用 B-Rep 表示法的三维实体模型.

### 2.3 转换的关键问题

MCNP 几何模型采用 CSG 表示法, CAD 模型采用 B-Rep 表示法, 所以问题演变成如何实现从 B-Rep 到 CSG 的转换. 20 世纪 80 年代就有成熟的 CSG 到 B-Rep 转换的算法; 反之, 则未然. 虽然没有通用算法, 但结合具体应用领域, 设计局部有效的算法仍有可能. 如美国威斯康星州大学 Shapiro 等教授提出的算法要求栅元表面必须由不高于二阶的曲面构成<sup>[10-12]</sup>. 该算法的流程如下:

Step1. 从栅元  $C$  的 CAD 模型中提取信息.

Step2. 构造栅元  $C$  的充分曲面集.

Step3. 遍历曲面集  $F$  的划分, 判断是否被  $C$  包含, 记下所有被包含的划分, 我们称这个过程为分解.

Step4. 所有被包含的划分的并集是栅元  $C$  的 CSG 表示.

定义 1. 充分曲面集. 给定栅元  $C$  和曲面集合

$F$ , 如至少存在  $C$  的一个半空间表示, 该表示所涉及的所有曲面都包含在  $F$  中, 那么称  $F$  是  $C$  的一个充分曲面集, 用  $Sufficient(C)$  表示.

由定义 1 可知, 栅元  $C$  的充分曲面集  $Sufficient(C)$  并不惟一.

**定义 2.** 划分. 给定有限曲面集  $F = \{f_1, f_2, \dots, f_n\}$ , 称  $\bigcap_{i=1}^n H^+(f_i), x \in \{+, -\}$  为  $F$  的一个划分.

**定义 3.** 表面集. 称栅元  $C$  的所有边界面构成的集合为  $C$  的表面集, 用  $Surface(C)$  表示. 可以证明,  $Surface(C) \subseteq Sufficient(C)$ .

该算法和 Mcam 系统的要求相近, 为了更好地满足 MCNP 的要求和实现的方便, 我们对它进行了一系列改进, 可归纳为以下两点:

- (1) 调整算法流程, 简化构造充分曲面集过程;
- (2) 提出分解算法, 获取更优分解结果.

### 3 关键算法介绍

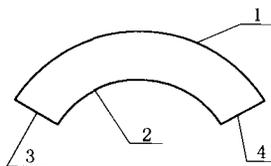
构造充分曲面集和分解栅元是整个算法的核心.

#### 3.1 构造充分曲面集

构造栅元的充分曲面集是获取其半空间表示的前提, 但相应的算法都存在以下不足:

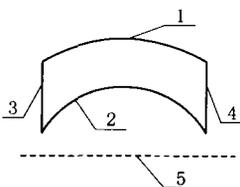
(1) 计算量大. 文献[10]需要逐个处理栅元  $C$  的每个划分, 如果以表面集的元素个数  $n$  表示输入规模, 那么时间复杂度为  $O(2^n)$ ;

(2) 判断复杂, 不便于实现. 构造充分曲面集需要综合考虑表面的形状和相互位置, 图 2 所示为两



注: 1和2为圆柱面; 3和4为平面; 充分曲面集为 {1, 2, 3, 4}

a 没有辅助面



注: 1和2为圆柱面; 3, 4和5为平面; 充分曲面集为 {1, 2, 3, 4, 5}

b 需要辅助面

图 2 曲面相互位置关系对充分曲面集的影响

个栅元表面的相互位置对充分曲面集的影响. 如果以表面集的元素个数  $n$  表示输入规模, 那么判断算法的复杂度是  $n$  的递增函数.

无论是计算量还是复杂度都是输入规模  $n$  的递增函数, 因此通过对输入进行预处理, 减小输入规模能达到简化的目的. 基于这种认识, MCAM 系统采用下述方法构造充分曲面集:

Step1. 假设为  $Surface(C)$  为  $Sufficient(C)$ .

Step2. 用第 3.2 节中的方法分解栅元  $C$ , 记分解结果为  $\{C_1, C_2, \dots, C_m\}$ .

Step3. 依次构造栅元  $C_1, C_2, \dots, C_m$  的充分曲面集.

先分解, 再构造的方法有下列优点:

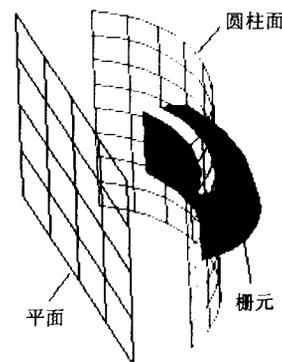
(1) 减少计算量.

a. 文献[10]证明了  $Surface(C)$  是  $Sufficient(C)$  的子集, 所以 Step2 的工作可以在后续分解中被继承, 不会引入额外计算;

b. 如果分别用  $n, n_1, n_1, \dots, n_m$  表示栅元  $C, C_1, C_2, \dots, C_m$  的输入规模, 那么  $\sum_{i=1}^m n_i = k \times n$ ,  $k \in \mathbb{Z}^+$ ; 所以存在正整数  $N$ , 当  $n > N$  时,  $2^n \gg \sum_{i=1}^m 2^{n_i}$ . 可见, 这种方法对能够减少复杂栅元的计算量.

(2) 降低复杂度. 采用先分解, 再构造方法, 问题的复杂度取决于  $\max(n_1, n_2, \dots, n_m)$ , 显然  $\max(n_1, n_2, \dots, n_m) \leq n$ , 所以该方法能够降低复杂度.

现有的构造充分曲面集的算法计算量大、复杂度高. 本文提出先分解、再构造的方法能减少计算量, 降低复杂度. 图 3 所示栅元的充分曲面集由表面集和图示平面、圆柱面组成, 其中平面和圆柱面由 MCAM 自动产生.



注: 栅元的充分曲面集由栅元的表面和图中所示的平面、圆柱面构成

图 3 充分曲面集实例

#### 3.2 分解栅元

栅元  $C$  的半空间表示总的来说是一个逻辑表达

式,所以总可以转化成  $\bigcup_{i=1}^n C_i$  的形式(其中  $C_i$  仅含“ $\cap$ ”运算符,因为  $H^+(f) = \overline{H^-(f)}$ ,  $\overline{H^-(f)} = H^+(f)$ ,所以可以消除“补”运算符).分解的 CAD 模型,获得  $C_i(i=1,2,\dots,n)$  对应的子 CAD 模型是转换中的重要内容.但分解结果并不惟一,图 4 所示为一个栅元的两种分解结果.文献[10]中的判断充分曲面集的划分和栅元的包含关系的方法行之有效,并有易于理解、便于实现等优点,但会出现分解冗余,图 4b 所示为该方法的结果,但  $A_1, A_2$  或  $A_2, A_3$  完全可以合并,这种冗余对 MCNP 计算非常不利.本文提出的分解算法,在确保完成分解的前提下,力图减少这种冗余,并取得了较好的效果.如对方图 4 所示栅元,本文算法的分解结果为图 4a 中所示  $A_1$  和  $A_2$  两部分.

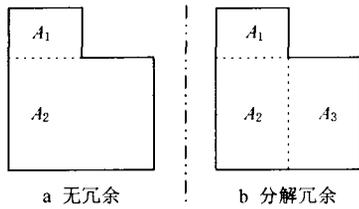


图 4 两种分解的比较

**定义 4.** 分解面. 栅元  $C$  的分解面  $f$  满足下面两个条件

- (1)  $f \in Sufficient(C)$ ;
- (2)  $H^+(f)$  和  $H^-(f)$  都不能完全包含栅元  $C$ , 即  $(C - H^+(f) \neq \emptyset) \wedge (C - H^-(f) \neq \emptyset)$ .

用符号  $Decompose(C, S)$  表示  $C$  的分解面集合,其中  $S = Sufficient(C)$ . 可以证明,如果  $Decompose(C, Sufficient(C)) = \emptyset$ ,那么  $C$  就无需分解.整个算法的流程如下:

- Step1. 构造栅元  $C$  的充分曲面集  $S = Sufficient(C)$ .
- Step2. 提取分解面集合  $D = Decompose(C, S)$ .
- Step3. 如果  $D = \emptyset$ ,返回分解结果  $\{C\}$ ;否则,执行下一步.
- Step4. 选出分解面  $f \in D$ ,并令  $C' = C \cap H^+(f)$ ,  $C'' = C \cap H^-(f)$ .
- Step5. 分解  $C'$ ,保存分解结果  $\{C'_1, C'_2, \dots, C'_n\}$ ;分解  $C''$ ,保存分解结果  $\{C''_1, C''_2, \dots, C''_m\}$ .
- Step6. 返回分解结果  $\{C'_1, C'_2, \dots, C'_n\} \cup \{C''_1, C''_2, \dots, C''_m\}$ .

结束递归的条件是  $D(C, Sufficient(C)) = \emptyset$ . 因为  $D(C, Sufficient(C))$  是有限集,所以只要  $D(C', Sufficient(C'))$  和  $D(C'', Sufficient(C''))$  是  $D(C, Sufficient(C))$  的真子集,那么算法肯定收敛.下面证明  $D(C', Sufficient(C'))$  和  $D(C'',$

$Sufficient(C'')$ ) 是  $D(C, Sufficient(C))$  的真子集.

(1)  $Sufficient(C') \subseteq Sufficient(C)$ .

证明. 如果用  $H(C)$  表示栅元  $C$  的半空间表示,那么  $H(C') = H(C) \cap H^+(f)$ , 则  $Sufficient(C) \subseteq Sufficient(C') \cup f = Sufficient(C)$ . 证毕.

(2)  $D(C', Sufficient(C')) \subseteq D(C, Sufficient(C))$ .

证明. 因为  $\forall f \in D(C', Sufficient(C')) \rightarrow (C' \cap H^+(f) \neq \emptyset \cap (C' \cap H^-(f) \neq \emptyset)$ ,  $C' \subset C$ ; 所以  $(C \cap H^+(f) \neq \emptyset \cap (C \cap H^-(f) \neq \emptyset)$ . 又因为  $f \in Sufficient(C') \subseteq Sufficient(C)$ , 所以  $f \in D(C, Sufficient(C))$ .

因为  $f$  的任意性,所以

$D(C', Sufficient(C')) \subseteq D(C, Sufficient(C))$ .

证毕.

(3)  $D(C', Sufficient(C')) \subset D(C, Sufficient(C))$ .

证明. 假设  $C' = C \cap H^+(f)$ , 那么  $f \in Decompose(C, Sufficient(C))$ .

因为  $B' \cap H^-(f) = \emptyset$ ,

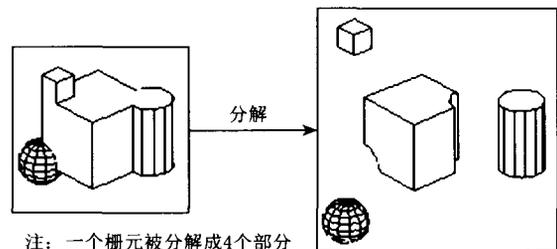
所以  $f \notin Decompose(C', Sufficient(C'))$ ,

故  $D(C', Sufficient(C')) \subset D(C, Sufficient(C))$ .

证毕.

同理可以证明,  $D(C'', Sufficient(C'')) \subseteq D(C, Sufficient(C))$ , 命题得证.

在转换算法中,对 CAD 模型的分解是一个重要步骤,并对转换结果产生决定性影响. 本文的算法对栅元进行逐步分解,能够较好地避免冗余,而且使优化成为可能. 如算法中的 Step4,不同的分解面选择策略对分解结果的影响就非常大. 图 5 所示为将一个复杂栅元分成 4 部分的实例.



注: 一个栅元被分解成 4 个部分

图 5 栅元分解实例

#### 4 系统实现和应用实例

MCNP 辅助建模工具采用 ACIS<sup>[13]</sup> 为造型内核,以 Visual C++ 6.0 为开发工具进行开发. MCAM 在德国 FZK、日本 NIFS、中国原子能院 401 所等多个

国内外单位进行了测试和使用,取得了良好的效果,表 1 列出其中的部分工作,这些都是实际装置的简化模型.图 6,7 所示分别是 MCAM 的主界面和部分转换结果.

表 1 部分模型列表

编号	名称	栅元数	曲面数	所用时间/s
1	HT-7U <sup>[14]</sup>	188	179	430
2	FFHR <sup>[15]</sup>	101	109	33
3	WCLL <sup>[16]</sup>	369	686	302
4	FBB <sup>[17]</sup>	568	104	589

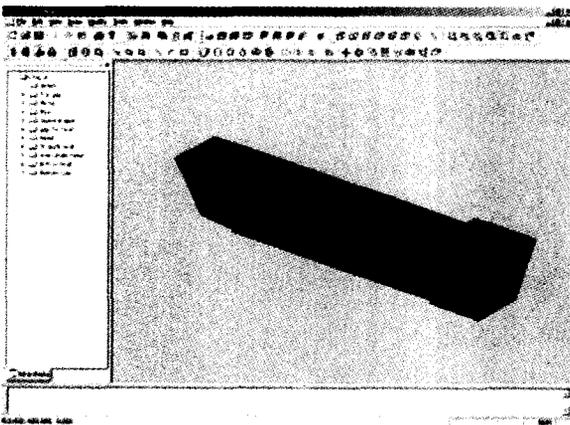


图 6 MCAM 主界面

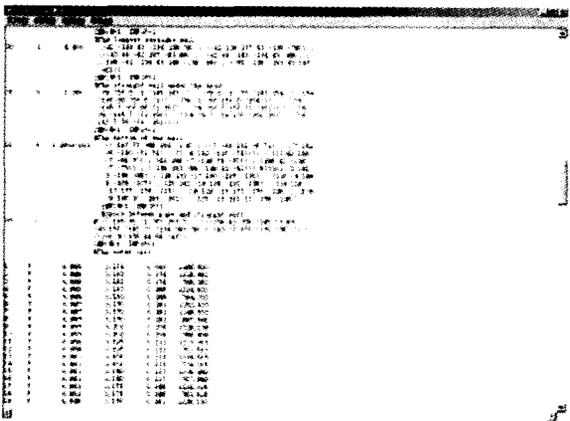


图 7 部分转换结果

## 5 结 论

在制作 MCNP 输入文件的过程中引入 CAD 技术有重要价值,尤其是在建立 MCNP 几何模型的过程中.但现有 CAD 技术不能直接应用于 MCNP 的几何建模.本文通过分析比较 CAD 模型和 MCNP 几何模型两种模型,指出实现 B-Rep 表示到 CSG 表

示的转换是问题的关键.结合 MCNP 几何模型的特点,本文在相关算法的基础上,进行了两方面的改进和创新:

(1) 通过调整构造充分曲面集和分解栅元的顺序,达到减少计算量,降低问题复杂度的效果;

(2) 提出逐步分解栅元的方法,消除分解冗余问题.

构造充分曲面集和分解栅元都是多解问题,现有算法都不能保证获得最优解,如何获取更优解是我们下一步的努力方向.

## 参 考 文 献

- [1] Briesmeister J F. MCNP—A general Monte Carlo N-particle transportcode, Version 4C [R]. Los Alamos National Laboratory, LA-13709-M, 2000
- [2] Liu Xiaoping, Luo Yuetong, *et al.* Research on modeling of transport simulation based on systematic Tokamak concept design [A]. In: Proceedings of International Conference on CAD/Graphics, Kunming, 2001. 791~795
- [3] Schwarz R A, Carter L L, Hillesland Karl E, *et al.* Advanced MCNP input file creation using the visual editor [A]. In: Proceedings of the 1998 Topical on Radiation Shielding, Nashville, Tennessee, 1998. 317~324
- [4] Kenneth A, Van Riper. An interactive geometry editor/viewer for MCNP & MCNPX [OL]. <http://www.whiterockscience.com/moritz.html>
- [5] Tsige-Tamirat H. On the use CAD geometry for Monte Carlo particle transport [A]. In: Proceedings of International Conference on Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulations and Applications, Lisbon, Portugal, 2000. 511~516
- [6] Liu Xiaoping, Tong Lili, Luo Yuetong, *et al.* Development & application of MCNP auto-modeling tool: MCAM 2.0 [A]. In: Proceedings of the 7th China/Japan Symposium on Materials for Advanced Energy Systems and Fission and Fusion Engineering. Lanzhou, 2002. 326~332
- [7] Liu Xiaoping, Wang Hao, Wu Yican. Research on Monte Carlo translation simulation model based on half-space theory [J]. Computer Application, 2000, 20(8): 208~209 (in Chinese)  
(刘晓平,王浩,吴宜灿.基于半空间理论的蒙特卡罗运输仿真模型研究[J].计算机应用,2000,20(8):208~209)
- [8] Hoffmann Christopher M. Geometric and Solid Modeling: An Introduction [M]. California: Morgan Kaufmann Publishers, Inc, 1989
- [9] Sun Jianguang, Yang Changgui. Computer Graphic [M]. 3rd ed. Beijing: Tsinghua University Press, 1998 (in Chinese)  
(孙家广,杨长贵.计算机图形学[M].第3版.北京:清华大学出版社,1998)

- [10] Shapiro V, Vossler D L. Separation for boundary to CSG conversion [J]. *ACM Transactions on Graphics*, 1993, 12(1): 35~56
- [11] Shapiro V, Vossler D L. Construction and optimization of CSG representations [J]. *Computer Aided Design*, 1991, 23(1): 4~20
- [12] Shapiro V, Vossler D L. Efficient CSG representations of two-dimensional solids [J]. *Transactions of ASME: Journal of Mechanical Design*, 1991, 113(3): 292~305
- [13] Jonathan Corney, Theodore Lim. 3D Modeling with ACIS [M]. Kippen Stirling: Saxe-Coburg Publications, 2001
- [14] Huang Qunying, Chen Zhaobin, Wu Yican. Shielding design of HT-7U nuclear fusion experimental device [J]. *Chinese Journal of Nuclear Science and Engineering*, 2001, 21(1): 79~85 (in Chinese)  
(黄群英, 陈朝斌, 吴宜灿. 核聚变实验装置 HT-7U 一维及二维辐射防护设计研究 [J]. *核科学与工程*, 2001, 21(1): 79~85)
- [15] Sagara Akio, Fukada Satoshi, Shimizu, *et al.* Design studies on FLiBe blanket system in helical reactor FFHR [A]. In: *Proceedings of the 7th China/Japan Symposium on Materials for Advanced Energy Systems and Fission and Fusion Engineering*, Lanzhou, 2002. 415~421
- [16] Giancarli L, Benamatib G, *et al.* Development of the EU water-cooled Pb-17Li blanket [J]. *Fusion Engineering and Design*, 1998, 39(40): 639~644
- [17] Zheng Shanliang, Wu Yican. Neutronics Optimization of LiPb-He dual-cooled fuel breeding blanket for the fusion-driven sub-critical system [J]. *Plasma Science & Technology*, 2002, 4(4): 1421~1428



刘晓平 男,1964年生,博士,教授,博士生导师,主要研究方向为 CAD&CG、科学计算可视化、系统仿真和协同计算。



罗月童 男,1978年生,博士,主要研究方向为计算机图形学、计算机辅助建模、科学计算可视化。



黄群英 女,1964年生,研究员,主要从事反应堆中子物理与屏蔽、放射性安全、聚变堆结构材料及反应堆物理先进计算方法及软件的开发与研究。



吴宜灿 男,1964年生,博士,研究员,博士生导师,主要研究方向为中子物理与核技术、计算机数字仿真与系统工程等。