

蒙特卡罗仿真建模中自动添加辅助面的算法研究

罗月童¹, 刘晓平^{1, 2}, 黄群英²¹合肥工业大学计算机学院 CAD&CG 室, 合肥 230009, ²中国科学院等离子体物理研究所 CAD 室, 合肥 230031

摘要: MCNP 是用于计算中子、光子或者中子/光子/电子输运方程的通用蒙特卡罗中性粒子程序, 该系统应用广泛, 但其仿真模型的建模工作非常复杂, 尤其是几何模型。为了简化建模过程, 开发了该系统辅助建模工具。本文讨论了辅助建模工具中的核心算法之一——“自动添加辅助面”算法, 该算法用于解决辅助工具中处理复杂几何模型时的关键问题。文中详细的介绍了该算法的设计思路和流程, 并给出有效性的数学证明。随后通过例子展示算法的功能, 以该算法为核心算法之一的辅助工具已经在实际中得到运用, 并取得较好的效果。

关键词: 几何模型; 辅助面; 仿真; 建模

中图分类号: TP302; TP391

文献标识码: A

Research on Algorithm of Auto-adding Aided Surface in MCNP Modeling

LUO Yue-tong¹, LIU Xiao-ping^{1, 2}, HUANG Qun-ying²¹CAD&CG Division, Computer College, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China,²Institute of Plasma Physics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, 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. It's used widely, but it is very complicated to construct its simulation model. And due to requirement of complex geometry modeling, this paper introduces software that has been developed to construct geometry model of the MCNP and simplify the work. One of the key algorithms discussed in the paper is named as "Auto-adding aided surface". The main contribution of algorithm is to solve the key problem in processing complex geometry model. The paper gives a detailed presentation of how to design the algorithm and how the algorithm runs. The algorithm's validity and function are proved by some examples. The result is satisfied.

Keywords: geometry model; auxiliary surface; simulation; construct model

1 引言

“系统仿真是通过对系统模型的实验研究一个存在的或设计中的系统”^[1]。计算机的出现和计算技术的发展为仿真技术的发展提供了强有力的手段和工具。最近几年, 随着计算机的迅速发展和普及, 尤其是微型计算机的发展和普及, 很多大计算量的仿真系统得以实现, 并在国民生产、科学研究等领域得到广泛的应用。对于给定目标, 仿真过程可大致分为仿真建模、程序实现、仿真结果的统计分析三大部分^[2]。其中仿真建模是最基础的、关系整个仿真成败的环节。如果有软件能够辅助用户方便快捷地完成仿真建模工作, 那么不仅可大大减少工作量, 而且还可使用户集中精力于提高建模质量^[3]。

在核装置设计领域, MCNP (蒙特卡罗) 仿真系统的使用非常广泛。MCNP 是由美国 Los Alamos 实验室研制的

蒙特卡罗中子—光子输运方程^[4]。MCNP 的仿真模型包括几何模型、物理模型等多个模型。其中几何模型的建立工作最为费时、繁杂。为了提高用户的建模效率, 开发了一个辅助建模工具。事实证明, 在辅助建模工具的帮助下, 用户能够快速、准确的建立几何模型。本文将讨论辅助建模工具中的关键算法之一——“自动添加辅助面”算法, 即自动为“复杂几何模型添加”辅助面, 把一个“复杂几何模型”分解成多个“简单几何模型”。(本文后面将给出“复杂几何模型”和“简单几何模型”的定义, 关于简单几何模型的建模方式, 不在本文的讨论范围), 这个算法用于解决“复杂几何模型”建模中的关键问题。全文分为四个部分: 首先介绍 MCNP 系统的几何模型的建模方法。第二部分是全文的主体, 这部分详细的介绍了“自动添加辅助面”算法, 并给出这个算法的有效性的数学证明; 第三部分通过一些实例来展示算法的功能。最后对全文进行了简单的总结和展望。

2 几何模型的建模方式

“几何模型”反应系统的几何形状信息。“建模方式”指的是用何种方式记录模型的信息。“几何模型的建模方式”

收稿日期: 2001-07-18

修回日期: 2001-09-11

基金项目: 中科院“百人计划”基金、安徽省自然科学基金(01042201)资助
作者简介: 罗月童(1978-), 男, 博士, 研究领域为 CAD/CG; 刘晓平(1964-), 男, 教授, 博导, 研究领域为 CAD、可视化; 黄群英(1964-), 女, 副研究员, 研究领域为反应堆概念设计,

是指如何记录系统的几何形状的信息。使用 MCNP 仿真系统进行仿真的系统在物理空间上被分为多个部分, 每个部分被称为一个“栅元”(CELL), 每个“栅元”都有一定的体积、形状。它代表实际系统中的一个或多个部件, 也可以是一个部件的一部分。正确建立系统的 MCNP 系统的几何模型就是正确记录系统涉及的所有“栅元”的几何形状信息。

根据半空间理论, 任何形状的几何体都可以表示为一个逻辑表达式。MCNP 系统根据半空间理论建立系统的几何模型, 每个“栅元”都用一个逻辑表达式表示。至此, 问题变为如何辅助用户为每个“栅元”生成正确的逻辑表达式。在讨论主体之前, 首先在这里对“半空间理论”^{[5][6]}做一些简单的介绍。

[定义 1] 半空间: 无限空间可被任何曲面 S 分为两部分, 这两部分分别被称为曲面 S 的正半空间和负半空间。如果用方程 $F(x,y,z) = 0$ 表示曲面 S , 那么称空间点的集合 $H = \{P(x,y,z) | F(x,y,z) > 0\}$ 为曲面 S 的正半空间, 而称空间点的集合 $H = \{P(x,y,z) | F(x,y,z) < 0\}$ 为曲面 S 的负半空间。正半空间和负半空间统称为半空间。

MCNP 系统的几何模型中, 用于表示“栅元”的逻辑表达式是通过逻辑运算符(包括交、并、减)联接一个或多个曲面的正半空间或负半空间的表达式。为了方便后面的叙述, 我们在这里作下面两点约定:

(1) 如果用符号 f 表示某个曲面, 那么 f 在逻辑表达式中就表示这个曲面的正半空间, 而 $-f$ 表示该区面的负半空间。

(2) 在逻辑表达式中, 我们分别用空格()、冒号(;) 和井号(#) 代表交、并、减三个逻辑运算符。

3 算法介绍和有效性证明

[定义 2] 简单三维实体: 我们把满足下面两个条件的三维实体称为简单三维实体:

- (1) 如果点 A 不属于该三维实体, 那么存在曲线 L , 曲线 L 连结点 A 和无穷远点 B , 并且曲线 L 上的任意一点都不属于该三维实体。也就是该三维实体上不存在内孔。
- (2) 如果任意两点 A, B 属于这个实体, 那么总存在曲线 L , 曲线 L 连结点 A, B , 并且曲线 L 上的任意一点都属于这个实体。

可以证明, 任何三维实体都可以用一个或多个简单三维实体来表示。本文后面讨论的所有几何模型对应的三维实体都是简单三维实体, 本文后面不在作特别说明。可以证明, 任何一个三维实体都可以用一个或多个简单三维实体表示。至于如何用一个或多个简单三维实体表示一个一般的三维实体, 本文不作讨论。

[定义 3] 简单几何模型: 设一个几何模型 S 有边界面 $f_1,$

f_2, f_3, \dots, f_n 。如果对于给定的任何一个边界面 f , 几何模型 S 都能被边界面 f 的正半空间或负半空间完全, 那么就几何模型 S 就是“简单几何模型”。

[定义 4] 复杂几何模型: 如果一个几何模型不能被称为“简单几何模型”, 那么就称它为“复杂几何模型”。一个“复杂几何模型”可以被分解成多个“简单几何模型”。

如果一个“复杂几何模型” S 被分解成 n 个“简单几何模型” S_1, S_2, \dots, S_n , 并且 S_1, S_2, \dots, S_n 对应的逻辑表达式为 L_1, L_2, \dots, L_n , 那么逻辑表达式 $L = L_1 : L_2 : \dots : L_n$ 可以正确的表示“复杂几何模型”。

如图 1 中所示的长方形就是一个“简单几何模型”, 它对应的逻辑表达式为 $1 \ 2 \ -3 \ -4 \ -5 \ 6$ 。而图 2 中(1)对应的模型是一个“复杂几何模型”, 它就不可以简单的用逻辑表达式 $-1 \ -2$ 表示。事实上, $-1 \ -2$ 表示的几何模型是如图 2(2)所示。能正确的表示(1)中的几何模型的逻辑表达式是: $-1 : (1 - 2)$ 。

想要正确的生成一个几何模型的逻辑表达式, (删除几个字)需解决下面两个问题:

- (1) 如何判断一个几何模型是不是“简单几何模型”。
- (2) 如何把一个“复杂几何模型”分解成多个“简单几何模型”。

根据“简单几何模型”的定义, 我们很容易确定判断“简单几何模型”的判断规则。至于“复杂几何模型”的分解问题, 我们通过添加辅助面的办法来解决。至于如何添加辅助面, 正是本文介绍的算法的主要功能。

如果一个曲面 f 满足下列条件, 那么我们曲面 f 为这个曲面为几何模型 S 的“备选分解面”:

- (1) 曲面 f 是几何模型 S 的一个边界面。
- (2) 无论曲面 f 的正半空间, 还是曲面 f 的负半空间都不能完全包含几何模型 S 。

“简单几何模型”没有“备选分解面”, 一个“复杂几何模型”至少有一个“备选分解面”。延伸几何模型的一个或多个“备选分解面”作为辅助面, 把一个“复杂几何模型”分解成两个或多个“简单几何模型”。具体步骤描述如下:

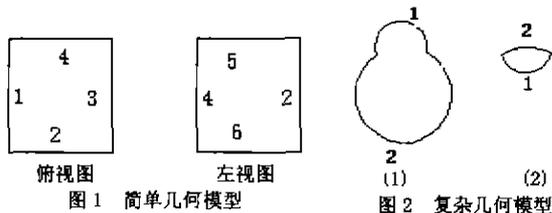
1. 如果几何模型 S 是“简单几何模型”, 那么直接按“简单几何模型”进行处理, 并返回对应的逻辑表达式 L , 否则转到第(2)步。

2. 选出几何模型 S 的一个“备选分解面” f , 延伸曲面 f , 以延伸面和几何模型 S 的交面为辅助面。辅助面把几何模型 S 分为两个部分 S_1, S_2 。

3. 用 S_1 代替 S , 调用本算法, 得到 S_1 对应的逻辑表达式 L_1 。

4. 用 S_2 代替 S , 调用本算法, 得到 S_2 对应的逻辑表达式 L_2 。

5. S 对应的逻辑表达式 $L = L_1 : L_2$ 。



俯视图

左视图

图1 简单几何模型

图2 复杂几何模型

6. 返回逻辑表达式L.

下面是该算法有效性的数学证明,也就是证明其收敛性:

为便于叙述,约定若干符号:

(1) S^k : 表示几何模型 S 经过 K 次分解后得到的几何模型。(称为几何模型添加一个辅助面为一次分解) ($K=0, 1, 2, \dots$);

(2) S^{k+1}_1, S^{k+1}_2 : 表示几何模型 S_k 经过一次分解得到的两个几何模型($K=0, 1, 2, \dots$);

(3) $F(S)$: 表示几何模型 S 的“备选分解面”的个数.

如果几何模型 S 是“简单几何模型”,那么 $F(S)=0$:

如果有几何模型 S , 并且 $F(S)=n$, 那么可以证明在递归深度不大于 n 的情况下, 就可以正确的生成几何模型 S 对应的逻辑表达式 L . 证明过程如下:

首先证明 $F(S^k) - F(S^{k+1}_1) \geq 1$:

根据辅助面的添加方法, 可得如下三个结论:

[结论 1]: 如果曲面 f 是几何模型 S^{k+1}_1 的边界面, 那么 f 一定是几何模型 S^k 的边界面.

[结论 2]: 几何模型 S^k 包含几何模型 S^{k+1}_1 和 S^{k+1}_2 .

[结论 3]: 如果几何模型 S^k 通过延伸曲面边界面 f 添加辅助面, 把几何模型 S^k 分解成几何模型 S^{k+1}_1, S^{k+1}_2 , 那么几何模型 S^{k+1}_1, S^{k+1}_2 分别被曲面 f 的正半空间或负半空间完全包含.

证明:

\because 曲面 f 是几何模型 S^{k+1}_1 的“备选分解面”.

\therefore 曲面 f 是几何模型 S^{k+1}_1 的边界面.

\therefore 曲面 f 肯定也是几何模型 S^k 的边界面 (根据结论 1).

\therefore 无论 f 的正半空间还是 f 的负半空间都不能完全包含几何模型 S^{k+1}_1 .

又 \because 几何模型 S^k 包含几何模型 S^{k+1}_1 . (结论 2)

\therefore 无论 f 的正半空间还是 f 的负半空间也都不能完全包含几何模型 S^k

如果曲面 f 是几何模型 S^k 的一个“备选分解面”, 且几何模型 S^{k+1}_1 是由曲面 f 的延伸面分解几何模型 S^k 而得.

那么几何模型 S^{k+1}_1 肯定被曲面 f 的正半空间或负半空间完全包含 (根据结论 3).

\therefore 曲面 f 是三维实体 S^k 的“备选分解面”, 但不是三维实体 S^{k+1}_1 的分解面.

至此: 我们可以得出这样的结论:

结论: 如果曲面 f 是几何模型 S^{k+1}_1 的“备选分解面”, 那么 f 肯定是几何模型 S^k 的“备选分解面”. 但几何模型 S^k 至少存在一个边界面 f , f 是几何模型 S^k 的“备选分解面”, 但不是几何模型 S^{k+1}_1 的“备选分解面”.

$$\therefore F(S^k) - F(S^{k+1}_1) \geq 1;$$

同理可以证明: $F(S^k) - F(S^{k+1}_2) \geq 1;$

$$\text{如果 } F(S) = N, F(S^M) = 0;$$

那么 $M \leq N$;

\therefore 递归深度不大于 N ;

\therefore 任何几何模型 S 的边界面的个数是一个有限的整数.

又 \because 几何模型 S 的“备选分解面”必是几何模型 S 的边界面. (“备选分解面”的定义)

$\therefore F(S)$ 是一个有限的整数. 所以递归深度是一个有限的整数, 即这个递归算法是收敛的.

证明完毕.

4 例子

本文讨论的算法已经在我们开发的辅助建模工具中得到应用, 它能通过分析几何模型的几何信息, 自动准确的添加辅助面. 图 3 中列举了几个模型的三视图, 图中的虚线表示“自动添加辅助面”算法根据分析的结果, 自动添加的辅助面. 由辅助建模工具为三个几何模型生成的逻辑表达式如下:

- (3) (-7 6 -3 2 1 -4): (-7 6 5 -1 -4)
- (4) (-2): (-1 2)
- (5) (2 -1 -6): (3 -2 -7): (-5): (4 -3 5)

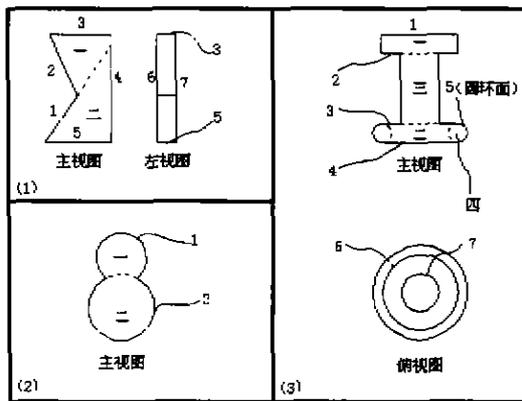


图3 例子

注: 1. 图中的阿拉伯数字表示面号

2. 图中的大写数字表示分解得到的三维实体的编号

以“自动添加辅助面”算法为核心算法之一的辅助建模工具 MCAM 1.0 已经在中科院等离子体所中投入使用. 辅助建模工具能帮助用户快速、正确的完成复杂几何模型的建模. 到目前为止, 等离子体所的科研人员已经使用辅助建模工具 MCAM 1.0 建立超导托可马克 HT-7U (中科院等离子体所设计) 和回旋器反应堆 (日本国立聚变科学研究所) 的几何模型. 据统计, 以前, 正确建立类似于 HT-7U 这样

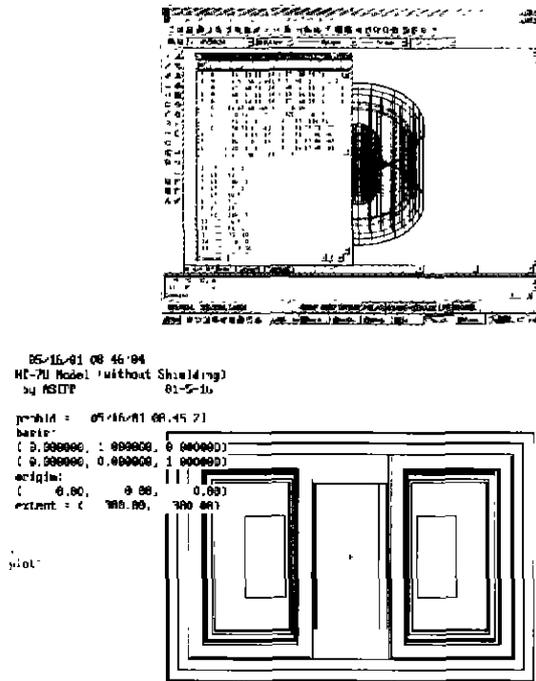


图 4 自动建模算法的运行结果

系统的几何模型需要 2-3 个月的时间。而这次我们在两个星期内就正确的建立起 HT-7U 的几何模型。图 4 辅助建模工具的运行界面和结果。

(上接第 458 页)

表 2 高加系统两类故障下主要特征参数的变化规律

特征参数	1号高加管系泄漏	2号高加管系泄漏	3号高加管系泄漏	1号高加进出水室短路	2号高加进出水室短路	3号高加进出水室短路
1号高加给水端差	略有增大	几乎不变	几乎不变	增大	略有减小	几乎不变
1号高加疏水端差	略有减小	几乎不变	几乎不变	增大	增大	增大
1号高加给水温升	减小	略有增加	几乎不变	减小	增大	略有增大
1号疏水调门开度	增大	几乎不变	几乎不变	减小	增大	基本不变
2号高加给水端差	略有减小	略有增大	几乎不变	略有增加	增大	略有减小
2号高加疏水端差	增大	几乎不变	几乎不变	略有减小	增大	增大
2号高加给水温升	几乎不变	减小	略有增加	几乎不变	减小	增大
2号疏水调门开度	增大	增大	几乎不变	减小	几乎不变	增大
3号高加给水端差	略有减小	略有减小	略有增加	略有增加	几乎不变	增大
3号高加疏水端差	增大	增大	几乎不变	略有减小	几乎不变	增大
3号高加给水温升	几乎不变	略有减小	下降	几乎不变	几乎不变	减小
3号疏水调门开度	增大	增大	增大	减小	几乎不变	略有减小

参考文献:

[1] 蔡锡琮. 高压给水加热器 [M]. 北京: 水利电力出版社, 1995.
 [2] 董卫国, 徐则民. 火电厂给水加热器的运行、维护和检修 [M]. 北京: 中国电力出版社, 1997.
 [3] 胥传普, 曹祖庆. 高压加热器系统内部故障的诊断及逻辑网络图 [J]. 华东电力, 1992, 11(10): 8-9.
 [4] 秦在从, 鲁松林, 徐治卓. 基于模糊神经网络的高加系统内部故障诊断方法 [J]. 热能动力工程, 1999, 14(6): 471-472.

5 总结

“自动添加辅助面”算法解决了“复杂几何模型”建模中的关键问题, 使得开发 MCNP 仿真系统的几何模型的辅助建模工具成为可能。文中详细讨论了算法的设计思路和流程, 并给出了算法的有效性证明。在实际实现时, 在确保正确性的前提下, 应该采用各种优化手段, 努力提高结果的质量和算法的运行效率。

参考文献:

[1] 李书臣, 赵礼峰. 仿真技术的现状及发展 [J]. 自动化与仪表, 1999, 14(6): 1-4.
 [2] 徐庚保. 系统仿真的过去、现在和未来 [J]. 计算机仿真, 1998, 15(3): 2-4.
 [3] 惠天舒, 李裕山, 陈宗基. 仿真模型的可重用性研究 [J]. 北京航空航天大学学报, 1999, 25(3): 329-333.
 [4] Briesmeister J F (Editor). MCNP-A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, LA-12625-M, Version 4B [Z]. Transport Methods Group, Los Alamos National Laboratory, March 1997.
 [5] Liu Xiaoping, Luo Yuetong, Huang Qunying and Wu Yican. Study on Automatic Modeling of Monte Carlo Transport Simulation Based on Half Space Theory [A]. The Sixth Japan-China Symposium on Materials for Advanced Energy Systems and Fusion & Fusion Engineering, Dec 4-6, 2000, Kasuga, Fukuoka, Japan.
 [6] 刘晓平, 王浩, 吴宜灿. 基于半空间理论的蒙特卡罗输运仿真模型研究 [J]. 计算机应用, 2000, 20(8): 208-209.