

蒙特卡罗程序 TRIPOLI 自动建模方法研究

张俊军¹, 曾 勤^{1,2}, 王国忠², 吴宜灿^{1,2}, FDS 团队^{1,2}

(1. 中国科学院等离子体物理研究所, 安徽 合肥 230031;

2. 中国科学技术大学核科学技术学院, 安徽 合肥 230027)

摘要: TRIPOLI 是法国原子能署(CEA)开发的三维蒙特卡罗粒子输运计算程序, 在反应堆物理分析、辐射防护设计、核安全评估等领域得到广泛应用。但是手工描述其输入文件耗时, 容易出错, 质量得不到保证。本文研究了 TRIPOLI 自动建模方法, 实现了 CAD 工程模型与 TRIPOLI 模型的相互转换。通过对基准例题的计算分析, 证明了其转换结果正确、可靠。

关键词: TRIPOLI; 中子学模型; 自动建模; 几何引擎; MCAM; 构造实体几何

中图分类号: TL371 **文献标志码:** A **文章编号:** 0258-0918(2010)03-0272-05

Automatic modeling for the monte carlo transport TRIPOLI code

ZHANG Junjun¹, ZENG Qin^{1,2}, WANG Guo-zhong², WU Yican^{1,2}, FDS Team^{1,2}

(1. Institute of Plasma Physics, Chinese Academy of Sciences, Hefei of Anhui Prov. 230031, China;

2. School of Nuclear Science and Technology, University of Science and Technology of China,
Hefei of Anhui Prov. 230027, China)

Abstract: TRIPOLI, developed by CEA, France, is Monte Carlo particle transport simulation code. It has been widely applied to nuclear physics, shielding design, evaluation of nuclear safety. However, it is time-consuming and error prone to manually describe the TRIPOLI input file. This paper implemented bidirectional conversion between CAD model and TRIPOLI model. Its feasibility and efficiency have been demonstrated by several benchmarking examples.

Key words: TRIPOLI; neutronics model; automatic modeling; geometry engine; MCAM; constructive solid geometry

MCAM(Monte Carlo Automatic Modeling^{[1])} 是 FDS 团队研发的蒙特卡罗粒子输运自动建

收稿日期: 2010-08-01; 修回日期: 2010-08-25

基金项目: ITER 国际工作组核分析合同(编号: ITER/CT/09/4100001055)

作者简介: 张俊军(1978—), 男, 安徽广德人, 博士研究生, 从事核反应堆数值模拟方面的研究

模系统,可实现多种格式的 CAD 工程模型与 MCNP^[2] 蒙特卡罗粒子输运计算模型之间的相互转换,有效地解决了 MCNP 计算建模的瓶颈问题,并被国际热核聚变实验堆 ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor) 国际组织选作中子学分析参考软件。

TRIPOLF4.3^[3] 是法国原子能署(CEA)开发的基于蒙特卡罗方法的三维粒子输运计算程序,它能够详细模拟中子、光子以及中子光子耦合的输运过程,使用精细的点截面以及多群等效截面的数据库,广泛用于裂变反应堆堆芯物理计算以及屏蔽分析中。作为 MCAM 的功能扩展,本文研究了 TRIPOLI 自动建模方法。新开发的 MCAM 5.1 版本实现了 CAD 模型与 TRIPOLI 模型的相互转换,提高了中子学的分析效率,保证了设计质量。

1 CAD 和 TRIPOLI 几何模型

CAD 几何模型通常采用边界表示法^[4] (boundary representation, 简称 BREP) 表示几何模型。它详细定义了模型中的所有几何元素如体、面、环、边、点的几何信息及相互间的拓扑连接信息。这种表示法有利于以面和边为基础的各种几何运算和布尔运算。边界表示法是 CAD 系统中最通用的表示法。

构造实体几何法(constructive solid geometry, 简称 CSG)^[5] 是利用基本几何体素(如球体、立方体、圆柱体、圆锥体等),通过一系列布尔运算来构造复杂三维实体的方法。由于基本几何体素比较规则,其数据结构简单,容易表达,而且需要的存储空间较小。另外,CSG 表示法对物体几何形状的描述精确、严格,可建立起较明确的数学模型。一些典型的基于蒙特卡罗方法的粒子输运程序如 MCNP、GEANT^[6]、EGS^[7] 等对于几何模型描述均采用 CSG 表示法。TRIPOLI 利用曲面的半空间的逻辑运算(并、交、差)来定义几何模型。曲面的半空间是属于 CSG 的一种表示方法^[8,9]。在 TRIPOLI 中对曲面的描述有两种方式:面相关方式和组合方式^[3]。面相关方式通过指定面的类型和系数(参数)来描述曲面,而组合方式直接定义一些基本形状如长方体、球体、圆柱体、圆锥、六

棱柱、圆环等来构造几何模型。另外,TRIPOLI 支持旋转、网格阵列等具有重复结构性质的操作,可以快速完成具有相同结构的几何模型建模如反应堆芯的建模。

虽然 CSG 表示法比较简单,但是依赖手工建立复杂几何的 TRIPOLI 中子学模型不直观、抽象,容易出错。同时,在工程实践中已经存在大量的 CAD 几何模型,直接利用这些几何模型进行中子学物理分析,则分析结果更加精确可靠。另外,如果能够进行三维交互式的检查、分析 TRIPOLI 中子学模型,并获取其描述的几何模型,则大大提高设计效率和分析质量。因此,需要对 CAD 工程模型与粒子输运计算程序 TRIPOLI 之间的相互转换进行研究。由前所述,其本质上就是几何模型的边界表示(BREP)和构造实体几何(CSG)两种表示方法的相互转换。

2 CAD 模型到 TRIPOLI 几何模型的转换方法

自动将 CAD 工程模型转换为 TRIPOLI 的几何模型,也即 BREP 模型向 CSG 的转换。基于分解的方式^[10,11],首先将几何模型分解为凸实体,由于凸实体能够被它的边界所定义,然后利用拓扑信息得到凸实体的边界面,生成对应的半空间的交,最后组合成复杂实体的半空间表达式,也即 TRIPOLI 的几何模型。另外,由于蒙特卡罗中子学计算程序需要对整个三维求解空间进行定义,但是,在 CAD 工程模型中,通常只存在三维模型零件的实体部分。因此,不仅仅需要对三维模型的零件实体进行转换,而且必须要描述整个三维问题空间中不属于 CAD 模型中的空余部分(定义为空腔实体)。利用二叉空间分割算法,将整个求解空间分割为一系列子空间,对各个子空间进行布尔运算得到空腔实体的 TRIPOLI 几何描述。

3 TRIPOLI 几何模型到 CAD 模型的转换方法

由于缺少有效的三维交互式可视化软件,TRIPOLI 对几何模型的检测局限于二维剖面图,不易发现几何模型描述中的错误,而且效率低。同时,为了满足迭代设计需要,可以三维

交互的编辑修改 TRIPOLI 描述的几何模型, 我们进行了由 TRIPOLI 几何模型到 CAD 模型的转换算法研究。由前所述, TRIPOLI 利用 CSG 表示法来描述几何模型。通过解析输入文件中的关键字建立 CSG 树。其中, 树的叶子节点表示基本几何体, 中间节点表示布尔运算。由于构造生成的每个基本几何体素和中间几何体均为 BREP 表示法的模型, 因此, 当遍历这棵树时, 最终生成的几何模型即是 BREP 表示格式的 CAD 模型。生成的 CAD 模型可以以中性文件格式(如 SAT、STEP 和 IGES 等)进行保存, 方便地导入到商业 CAD 软件中进行进一步的编辑和修改。

4 干涉检查方法

TRIPOLI 程序如同其他蒙特卡罗粒子输运程序一样, 要求栅元的描述是严格共面的, 不允许有相互之间的干涉或重叠。但是, 在 CAD 工程模型中由于精度误差等原因, 往往存在细微的干涉, 这是不被 TRIPOLI 程序所允许的。同样, 为了满足迭代设计需要, 对于 TRIPOLI 几何模型, 也必须进行检查, 发现 TRIPOLI 几何模型描述中的干涉, 保证设计质量。通过对整个模型空间的八叉树划分, 基于实体的包围盒, 进行初步检测。然后对可能发生干涉的模型实体, 再运用布尔运算进行详细检查。

5 测试与应用

5.1 反应堆临界计算模型

TRIPOLI 手册中定义了一系列基本例题, 用来进行 TRIPOLI 计算测试。选择反应堆临界计算例题, 完成我们的基准测试。该输入文件中几何模型采用组合方式进行描述, 分别定义了燃料棒、控制棒、水层、屏蔽层等基本几何模型。然后通过六面体网格阵列形式定义了一个 17×17 的燃料组件。我们利用 MCAM 5.1, 将其 TRIPOLI 几何模型转换为三维 CAD 几何模型, 进行交互式的观察、检测和分析。由于 MCAM 5.1 具有良好的人机接口, 提供了多种显示观察方式, 可以根据用户要求隐藏栅元实体, 单独显示感兴趣栅元或组件。图 1 显示转

换后得到的 CAD 几何模型。图 2、图 3 分别显示了组件内部情况。分析结果表明, 可以应用于具有大量重复结构的裂变领域, 提高中子学的设计与分析效率。

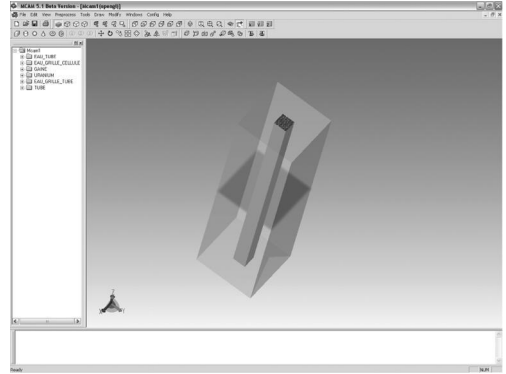


图 1 TRIPOLI 模型转换得到的 CAD 几何模型
Fig.1 CAD model from TRIPOLI input file

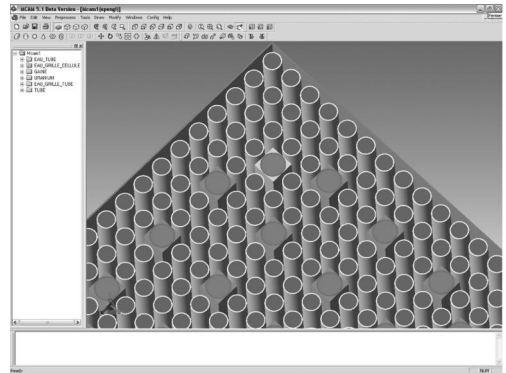


图 2 观察组件内部栅元

Fig.2 CAD model inside shown in MCAM5.1

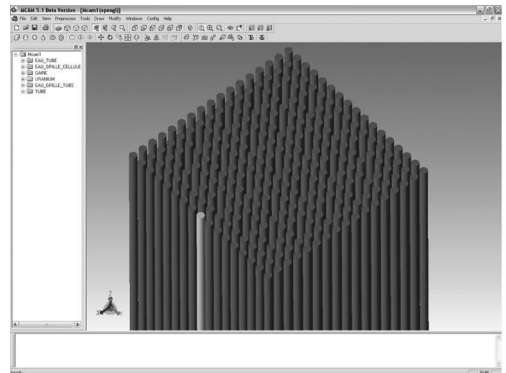


图 3 单独显示燃料棒栅元

Fig.3 MOX components alone shown in MCAM5.1

5.2 聚变反应堆模型

FDS-II^[12]是FDS团队设计的先进聚变反应堆模型,聚变功率2.5GW。该计算模型是从CAD模型的基础上简化而来,环向22.5°,模型包含113个实体和130个曲面。利用MCAM5.1自动生成FDS-II的TRIPOLI计算输入文件。为了验证产生输入文件的正确性,一方面,利用MCAM5.1的反演功能把生成的TRIPOLI计算输入文件转换为CAD模型进行交互式检查,并和TRIPOLI自带的画图软件生成的二维剖面图对比(图4、图5)。

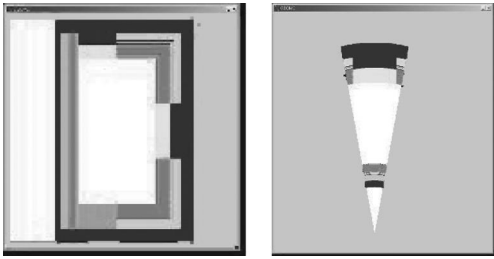


图4 TRIPOLI中的截面图

Fig. 4 Cross section drawn in TRIPOLI

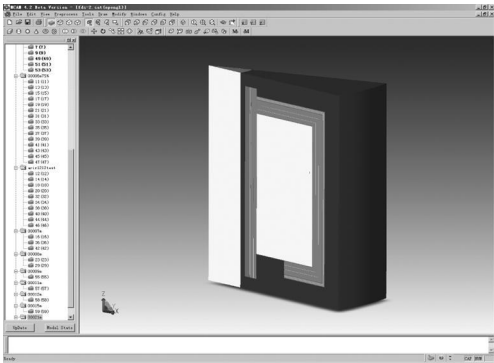


图5 MCAM读取TRIPOLI输入文件生成的模型

Fig. 5 CAD model generated from input file

另一方面,分别用TRIPOLI和MCNP程序对内包层($288\text{ cm} < Z < 380\text{ cm}$)进行中子注量率计数,完成交叉检查。相关计算参数描述如下:源强为 $13.84\text{ MeV} < E < 14.19\text{ MeV}$,数据库为JEF2(TRIPOLI),FENDL2.1(MCNP)。最终计算结果和MCNP的计算结果进行比较(图6),两种方法最大误差相差不到1%。

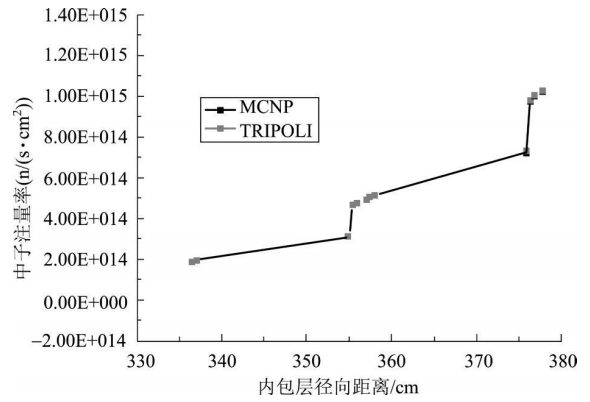


图6 TRIPOLI和MCNP计算结果比较

Fig. 6 Comparison of Neutron flux result between TRIPOLI result and MCNP result

5.3 ITER基准测试模型

ITER国际工作组为了检验各国中子学建模软件的成熟性和可靠性,发布了ITER基准测试模型^[13](图7)。其几何模型是使用商业CAD软件CATIA完成建模,描述了ITER装置在环向方向上的40°的扇形段,并做了必要的简化,最终以STEP格式发布。基准测试模型主要部件包含包层、偏滤器、真空室、环向场线圈、极向场线圈、中心螺线管、上下窗口、赤道窗口等,涉及ITER装置中所有的重要部件和组成部分,而且含有较多的复杂回旋曲面和曲面相交的情况,是一个复杂的大型几何模型。

将ITER基准测试模型导入到MCAM5.1中,进行干涉检查,确保模型没有干涉或重叠后,生成TRIPOLI的输入文件。然后,利用TRIPOLI程序完成计算,并将结果与MCNP的计算相比较,达到很好的一致,详细情况请参考文献[14]。

6 结论

本文研究了三维蒙特卡罗粒子输运计算程序TRIPOLI自动建模方法,实现了CAD模型与TRIPOLI模型之间的相互转换,CAD工程模型可以自动转换为TRIPOLI计算输入文件;也可以读取TRIPOLI输入文件,进行交互式观察,检测其几何模型。利用反应堆临界计算模型、聚变反应堆模型以及ITER基准模型进行测试,证明了其相互转换正确、可靠。目

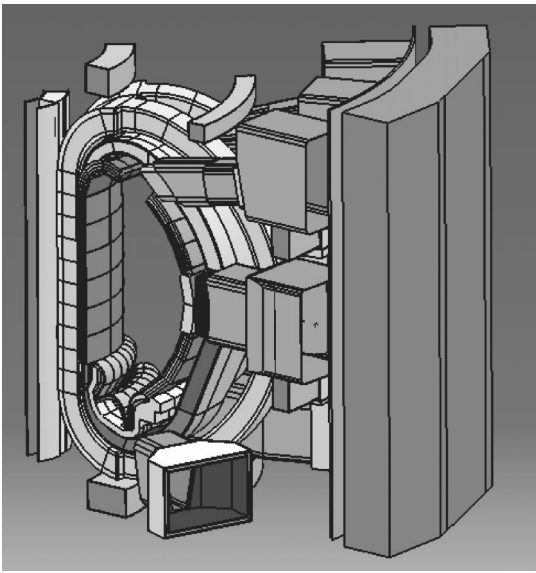


图7 ITER 基准测试模型

Fig.7 ITER benchmark model

前,该功能已经集成进 MCAM 系统中,形成 MCAM5.1 版本,在法国 CEA 得到应用。极大地提高了中子学分析设计人员的效率,可以作为核领域中子学分析的有效质量保证工具。

参考文献:

[1] Wu Y C, FDS Team. CAD-based interface programs for fusion neutron transport simulation [J]. Fusion Engineering and Design, 2009, 84: 1987-1992.

[2] Briesmeister J F. MCNP-a general Monte Carlo N^o particle transport code, version 4[R]. USA: Los Alamos National Laboratory, 2000.

[3] Petit O, Hugot F X, Lee Y K, et al. TRIPOLI4 version 4 user guide, CEA- r 6169[R]. France:CEA, 2008.

[4] Requicha A A G, Rossignac J R. Solid Modeling and Beyond [J]. IEEE Computer Graphics and Application, 1992, 12(5): 31-44.

[5] Suzanne F Buchelea, Richard H Crawford. Three dimensional half space constructive solid geometry tee construction from implicit boundary representations [J]. Computer Aided Design, 2004, 36(11): 1063-1073.

[6] Agostinelli S, Allison J, Amako K, et al. GEANT4 a simulation toolkit[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2003, 506(31): 250-303.

[7] Walter Ronaldson, Hideo Hirayama, David W O Rogers. THE EGS4 CODE SYSTEM, SLAC Report 265 [R]. USA: SLAC Technical Publications Department, 1985.

[8] 丁爱平,李莹,卢磊,等. 计算模型 MCNP 模型的可视化实现[J]. 原子核物理评论, 2006, 23(2): 130-133.

[9] Hoffmann Christopher M. Geometric and Solid Modeling: An Introduction [M]. California: Morgan Kaufmann Publishers, Inc, 1989.

[10] 吴宜灿,李莹,卢磊,等. 蒙特卡罗粒子输运计算自动建模程序系统的研究与发展[J]. 核科学与工程, 2006, 26(1): 20-27.

[11] 罗月童. 模型变换技术及其在 MCNP 建模中的应用[D]. 安徽:合肥工业大学, 2005.

[12] Wu Y, FDS Team. Conceptual design of the China fusion power plant FDS II [J]. Fusion Engineering and Design, 2008, 83: 1683-1689.

[13] 李莹,曾勤,卢磊,等. 利用 ITER 基准模型对 MCAM4.2 进行检验(I)[J]. 核科学与工程, 2008, 28(1): 47-50.

[14] Lu L, Lee Y K, Zhang J J, et al. Development of Monte Carlo automatic modeling functions of MCAM for TRIPOLI4 ITER application [J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 2009, 605: 384-387.