



核科学与工程

基于 SALOME 的蒙卡计算模型 CAD 反转可视化

匡蓝璐^{1,3}, 于涛^{1,3}, 张华健^{1,3}, 孙爱扣^{1,3}, 陈珍平^{1,3}, 谭波², 甘斌², 陈富财²

(1. 南华大学核科学技术学院, 湖南衡阳 421001; 2. 中国核动力研究设计院核反应堆系统设计技术国家重点实验室, 成都 610213; 3. 湖南省数字化反应堆工程技术中心, 湖南衡阳 421001)

摘要: 基于开源 SALOME 平台, 采用以体代面思想和栅元层次多叉树方法, 开展蒙卡计算模型 CAD 反向转换及三维可视化研究。基于本文方法开发了 CAD 反转可视化程序模块 SALOME-MC, 模块可实现蒙卡计算模型几何建模、材料建模和三维可视化等功能。选取三种典型反应堆蒙卡计算模型对本文方法和程序进行测试验证, 测试结果表明, 本文方法和程序可妥善处理蒙卡计算模型的复杂几何体与大规模重复结构, 并精准地实现蒙卡计算模型 CAD 三维反转可视化, 证明 SALOME-MC 的蒙卡计算模型反转能力和可视化效果的正确性与可靠性, 提高了蒙卡计算模型几何建模效率和展示度。

关键词: 蒙特卡罗; 模型反转; 以体代面; 层次多叉树; SALOME

中图分类号: TP391.9

文献标志码: A

doi: 10.11884/HPLPB202335.220276

CAD-based inversion visualization of monte Carlo Computational model based on SALOME

Kuang Lanjun^{1,3}, Yu Tao^{1,3}, Zhang Huajian^{1,3}, Sun Aikou^{1,3}, Chen Zhenping^{1,3}, Tan Bo², Gan Bin², Chen Fucai²

(1. School of Nuclear Science and Technology, University of South China, Hengyang 421001, China;

2. Science and Technology on Reactor System Design Technology Laboratory, Nuclear Power Institute of China, Chengdu, 610213, China;

3. Hunan Engineering & Technology Research Center for Virtual Nuclear Reactor, Hengyang 421001, China)

Abstract: In this paper, based on the SALOME platform, Open CASCADE works as the geometric modeling engine and adopts the idea of replacing a surface with an entity and Cell hierarchical multinomial tree structure to carry out the research on the Inversion of the computing model and 3D visualization method. Based on this method of this paper, the inversion visualization program module SALOME-MC is developed, and the module can realize the functions of Monte Carlo computational model geometric modeling, material modeling, and model 3D visualization. Three typical reactor models were selected to test and validate the method and procedure, the test results show that the method and program can properly handle the complex geometry and large-scale repeated structure of the Monte Carlo calculation model, and accurately realize the CAD three-dimensional inversion visualization of the Monte Carlo calculation model, which proves the correctness and reliability of the inversion ability and visualization effect of the SALOME-MC Monte Carlo calculation model, and improves the geometric modeling efficiency and display degree of the Monte Carlo calculation model.

Key words: Monte Carlo, model conversion, replacing a surface with an entity, hierarchical multinomial tree, SALOME

随着计算机技术的发展, 蒙特卡罗方法(MC)已广泛应用于反应堆物理、辐射屏蔽、医学物理等领域。蒙特卡罗程序普遍采用手工编写文本方式进行建模, 模型显示度低, 对于复杂模型无法直观判断模型的正确性, 且难以发现和修正错误, 使得建模工作费时、效率低^[1-2]。因此, 将蒙卡计算模型进行三维 CAD 可视化是解决上述问题的有效方法。本文针对蒙卡程序无法直观验证计算模型正确性的问题, 基于法国电力集团(EDF)、法国原子能委员会

* 收稿日期: 2022-07-08; 修订日期: 2022-12-05

基金项目: 国家自然科学基金项目(12175101); 湖南省自然科学基金项目(2022JJ40345); 湖南省教育厅科学研究项目(19A422); 湖南省科技创新计划项目(2020RC4053)

联系方式: 匡蓝璐, 1473085387@qq.com。

通信作者: 于涛, yutao29@sina.com。

(CEA)开发的 SALOME 平台^[3],研究蒙特卡罗计算模型 CAD 反转可视化方法^[4-11],并开发反转可视化模块程序,实现蒙特卡罗计算模型(输入文件)三维 CAD 可视化显示,提高模型建模的效率、准确性和展示度。

1 CAD 模型反转方法

模型反转是指将蒙特卡罗程序的计算模型进行 CAD 可视化显示,也称为模型可视化。本文 MC 模型反转三维可视化模块根据 MC 输入文件的特点,先将读取到的输入文件划分为曲面、栅元和材料三部分预处理,之后解析并将其转换成三维 CAD 模型,从而用户能更直观地观察 MC 计算模型,提高了模型的纠错能力。在错误查找方面,本程序在读取 MC 输入文件时会自动检测其文件中栅元的曲面逻辑关系,若有误则会在程序输出台上显示错误栅元编号。成功构建 MC 计算模型后,支持对每个栅元及整体模型的旋转、消隐、调整透明度等,可更直观地观察模型的结构。蒙特卡罗计算模型文本描述普遍采用构造实体几何表示法(CSG)^[12-13],为了简化 CAD 建模时对曲线和曲面实体的拓扑关系描述,本文在反转过程中主要采用“以体代面”方法和“栅元 CSG 层次多叉树”结构。

1.1 半空间表示和以体代面方法

在三维空间 R^3 中,物体内部点构成的点集闭包为正则集,点集的正则集即为有效实体。三维空间中点的正则集可以用其边界面及内部来表示,即

$$S = \{S_b, S_i\} \quad (1)$$

式中: S 为符合正则定义的实体, S_b 为 S 的边界面, S_i 为 S 的内部,即有效实体只能描述实体边界上点集和实体内部点集。在 MC 计算模型中,除实体内部还需要对实体外部进行描述,而实体模型只能定义实体内部结构,不能描述实体之外的空间,因此 MC 输入文本中引入半空间表示法,使得实体内部和外部均可描述^[14]。

三维空间中任意曲面都可将三维空间划分为两个区域,即曲面内侧和曲面外侧,每个区域都称为一个半空间。曲面的两个半空间可以是两个无限空间(如平面),也可以是一个有限空间和一个无限空间(如球面)。假设三维空间中任意曲面 F 的方程为 $f(x, y, z) = 0$, 则其正半空间 F^+ 和负半空间 F^- 的点集合可表示为

$$\begin{cases} F^+ = \{(x, y, z) | f(x, y, z) > 0\} \\ F^- = \{(x, y, z) | f(x, y, z) < 0\} \end{cases} \quad (2)$$

目前没有一种几何造型系统或 CAD 软件能提供基于半空间的实体描述,如何将 MC 输入文本中的半空间表示法转换为实体描述,以及如何解决实体不能描述 MC 中需要的实体外部空间成为 MC 计算模型反转的重点。在本文中,采取以体代面的思想解决 MC 计算模型反转的重点问题。对于有限半空间,以 CSG 中的基本体素(如球体)代替 MC 中的曲面半空间。根据 MC 计算模型输入文件中 Surface 类型和曲面方程参数得到形体的尺寸、位置、形状等几何信息,再继承 SALOME 三维构造引擎的 TOPODS 包中抽象的拓扑类实现 BREP 表示实体模型,此实体模型作为后续 Cell 层次多叉树的 CSG 体素。同时,设置一个相对无穷大的长方体作为世界体包裹半空间对应的基本实体(如平面对应长方体、圆柱面对应圆柱体等),基本实体与世界体进行布尔操作得到的布尔体即为无限半空间。

图 1 以半径为 R 的圆柱面为例描述以体代面思想。(a) 为 MC 半空间描述,圆柱面内部表示负半空间,圆柱面外部表示正半空间;(b) 为实体与世界体,其中,①是根据 MC 输入文件中 Surface 参数,构建垂直 X 轴、半径为 R 的圆柱实体代替(a)中圆柱体表面,②是相对无穷大的方体表示世界体;(c) 为以体代面思想,圆柱体与世界体布尔交操作得到的布尔几何体(③)表示负半空间;圆柱体与世界体布尔差操作得到的布尔几何体(④)表示正半空间。以体代面的方法简化了外围空间的描述,同时充分利用 MC 输入文件中 Surface 信息生成对应 CSG 基本体素,保证了实体几何建模的准确性。

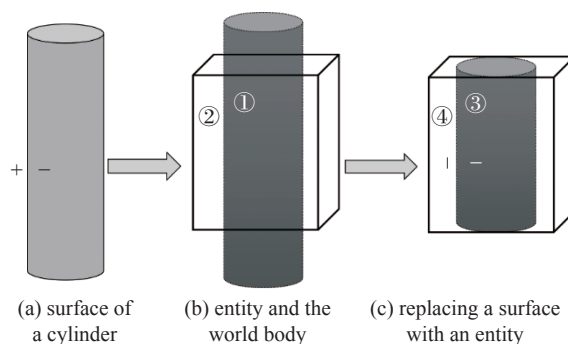


Fig. 1 The equivalent geometry modeling method for a cylinder surface by replacing it with entities

图 1 基于以体代面的半空间面建模方法

1.2 栅元 CSG 层次多叉树

MC 计算模型的构建,不仅要描述曲面 Surface 部分,还要构建 Cell 实体。本文对 Cell 实体的表示主要通过 CSG 层次多叉树来实现,每个重要性不为零的 Cell 对应一棵 CSG 层次多叉树^[8]。CSG 层次多叉树主要分为三层:基本层、中间层和实体层。MC 计算模型中 Cell 主要分为独立 Cell 和 Universe 组合的重复结构 Cell。对于独立

Cell, CSG 层次多叉树中的基本层由 Surface 属性构建的基本体素组成; 中间层为以体代面得到的正/负半空间, 即 Cell 卡中带正负号的 Surface; 实体层即单个 Cell 实体, 为独立 Cell 的 CSG 层次多叉树根结点, 并包含了栅元材料属性。层次多叉树的层次之间构成父子关系, 父结点均由其子结点通过布尔操作得到。

重复结构 Cell 是 MC 计算模型反转可视化的难点。本文通过引用独立 Cell 建造的 CSG 层次多叉树, 将其根结点作为重复结构 Cell 的 CSG 层次多叉树的子结点, 使搭建复杂结构和重复结构的实体模型变得简便, 如图 2 所示, 处理重复结构时, 只需引用之前构建好的 CSG 层次多叉树, 直接将其进行布尔运算、平移, 无需重新构建, 从而提高建模效率。

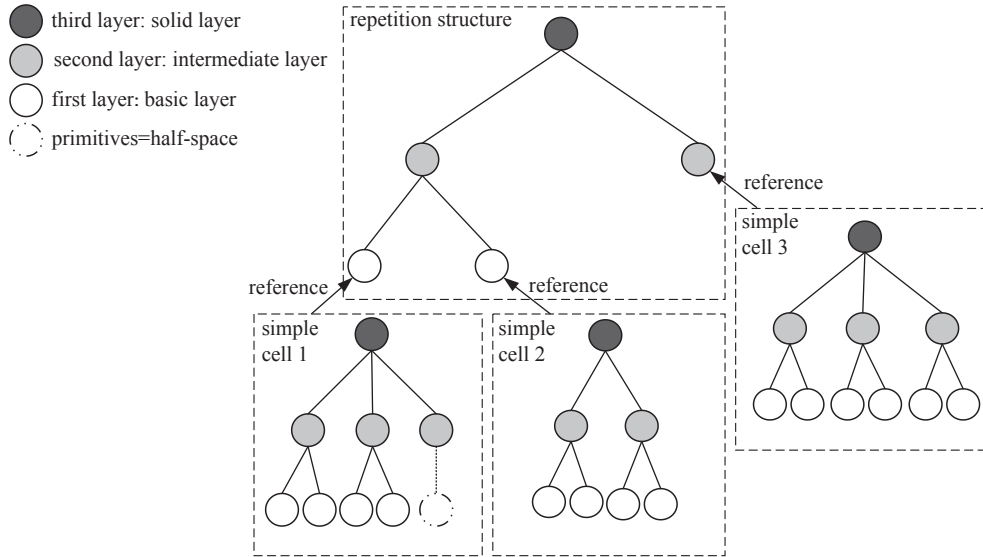


Fig. 2 CSG-based hierarchical multinomial tree structure for inversion modeling method

图 2 基于栅元层次多叉树结构的 CSG 反转建模方法

重复结构 Cell 中主要需要计算 universe 几何区域、重复结构数量和被填充 Cell 平移的几何区域。以四边形重复结构为例, 式(3)表示每个填充栅格几何区域 Ω_1 的计算方法

$$\Omega_1 = \left\{ \begin{array}{l} x \in (x_{\min}, x_{\max}) \\ (x, y, z) \mid y \in (y_{\min}, y_{\max}) \\ z \in (z_{\min}, z_{\max}) \end{array} \right\} \quad (3)$$

式中: x_{\min} 、 x_{\max} 、 y_{\min} 、 y_{\max} 、 z_{\min} 、 z_{\max} 分别为计算区域 X 、 Y 、 Z 方向边界坐标值。

重复结构数量 Ω_2 的计算方法可表示为

$$\Omega_2 = \left\{ \begin{array}{l} f_x \in (f_{x_{\min}}, f_{x_{\max}}) \\ (f_x, f_y, f_z) \mid f_y \in (f_{y_{\min}}, f_{y_{\max}}) \\ f_z \in (f_{z_{\min}}, f_{z_{\max}}) \end{array} \right\} \quad (4)$$

式中: $f_{x_{\min}}$ 、 $f_{x_{\max}}$ 、 $f_{y_{\min}}$ 、 $f_{y_{\max}}$ 、 $f_{z_{\min}}$ 、 $f_{z_{\max}}$ 分别为 X 、 Y 、 Z 方向重复结构的数量边界。

每个被填充 Cell 平移的几何区域 Ω_3 计算方法为

$$\Omega_3 = \left\{ \begin{array}{l} x \in (x_{\min} + f_x(x_{\max} - x_{\min}), x_{\max} + f_x(x_{\max} - x_{\min})) \\ (x, y, z) \mid y \in (y_{\min} + f_y(y_{\max} - y_{\min}), y_{\max} + f_y(y_{\max} - y_{\min})) \\ z \in (z_{\min} + f_z(z_{\max} - z_{\min}), z_{\max} + f_z(z_{\max} - z_{\min})) \end{array} \right\} \quad (5)$$

式中: f_x 、 f_y 、 f_z 分别为 X 、 Y 、 Z 方向重复结构的数量。

本文 MC 计算模型反转及三维可视化模块将所有重复栅元进行统一处理, 在模块界面中对单个栅元进行操作时, 此栅元所有重复结构会同时响应, 更方便观察对应栅元结构及位置, 提高了三维模型的准确度。可见, 栅元层次多叉树结构能精确表示模型结构。

1.3 反转可视化方法

本文开发的蒙卡计算模型反转可视化模块 SALOME-MC 基于 SALOME 平台开发, SALOME 平台包含仿真前处理和后处理所需的多种数值工具, 其中前处理即几何部分以 Open CASCADE 为几何建模核心, 为用户提供了三

维模型交互界面。Open CASCADE 是一个功能强大的三维建模工具,提供了点、线、面、体和复杂形体的显示和交互操作,可用于精密设备等设计。利用上述以体代面思想、CSG 栅元层次多叉树方法,开发蒙特卡罗(MC)计算模型 CAD 反转三维可视化模块。图 3 为模型反转整体流程图。模型反转可视化过程如下。

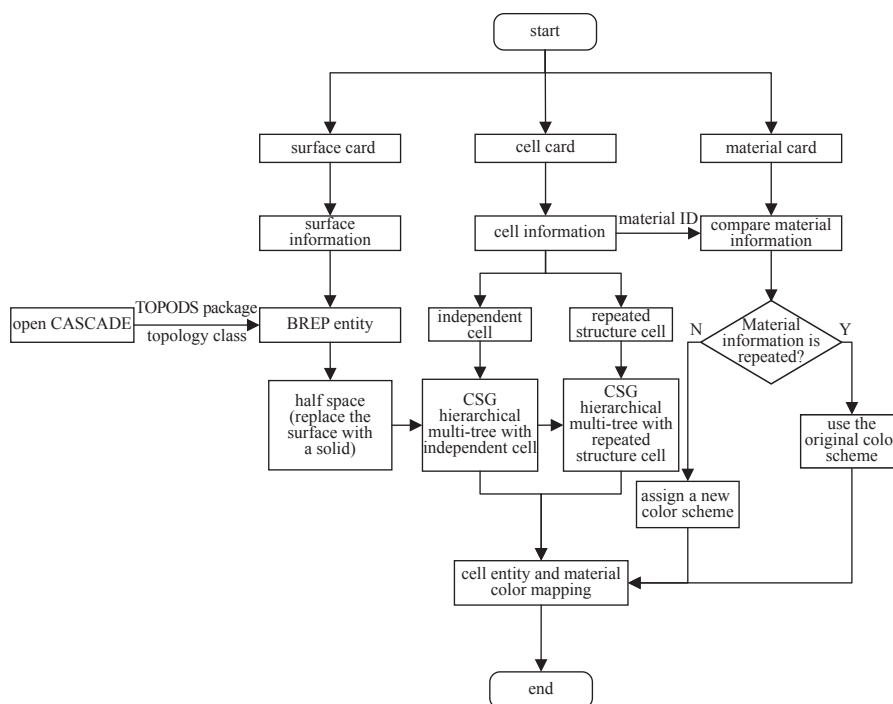


Fig. 3 CAD model inversion process for Monte Carlo computational model

图 3 蒙卡计算模型 CAD 反转整体流程

(1) 读取文本文件并进行预处理。SALOME-MC 读取 MC 计算模型的输入文件,根据 MC 输入文件的特点,先将读取到的输入文件解析出 Surface、Cell 和 Material 三部分,为构造栅元实体提供相关信息。

(2) 构建栅元实体。根据 Surface 部分的参数和 Open CASCADE 中 TOPODS 包的拓扑类,由以体代面思想构建对应的半空间,再按照 Cell 部分各半空间关系的描述,采用栅元 CSG 层次多叉树方法生成各栅元实体。目前,本文 MC 模型反转三维可视化模块支持 MC 中各种曲面描述卡,如:所有类型的平面、球面、圆柱面、圆锥面及方体、球体和圆柱体的宏定义。栅元卡中除支持布尔交(“空格”)、并(“:”)、差(“#”)运算,还支持带括号的优先级描述。同时,此模块还具备处理重复结构的能力,如:U 卡、Fill 卡和 LAT 卡。

(3) 栅元实体与材料映射。由 Cell 部分材料编号与材料卡中材料编号建立映射关系,同时进行材料信息对比,保证材料与颜色的一对一关系。所有带有材料颜色属性的栅元实体构成 MC 整体三维模型,并能选择对生成的 MC 三维模型中单个栅元实体进行隐藏和改变颜色透明度,可更直观展示模型。

2 模型反转验证

本文基于 SALOME 平台开发了蒙卡计算模型 CAD 反转可视化模块 SALOME-MC,为了验证本文方法及模块反转程序 SALOME-MC 的正确性和可靠性,以蒙卡计算程序 MCNP 计算模型为例,采用典型 1/4 pin-by-pin 压水堆模型、was126 重复结构模型和 NUREG/CR-6115 全堆模型进行测试验证,验证了本文模型及方法的正确性与有效性。

2.1 1/4 pin-by-pin 压水堆模型

某典型压水堆 1/4 pin-by-pin 模型反转三维可视化不同视图如图 4 所示,其几何模型中栅元数达 1×10^5 级,堆芯内部均按照 MCNP 蒙卡计算模型的实际尺寸进行 CAD 反转自动建模,可精细地显示每个栅元的位置与结构。该 1/4 堆芯由 56 个 17×17 的组件组成,每个组件包含 264 根燃料棒,剩余棒位由不同数量和分布的可燃毒物、控制棒、导向管等填充。在此堆芯中,可燃毒物有 6 根、12 根、15 根、16 根、20 根共 5 种插法,可燃毒物建模俯视图效果如图 5。

2.2 Was126 重复结构模型

Was126 模型使用 MCNP 输入卡中带有 Lat 卡、Fill 卡、Universe 卡以及重复结构功能对燃料组件进行描述,三

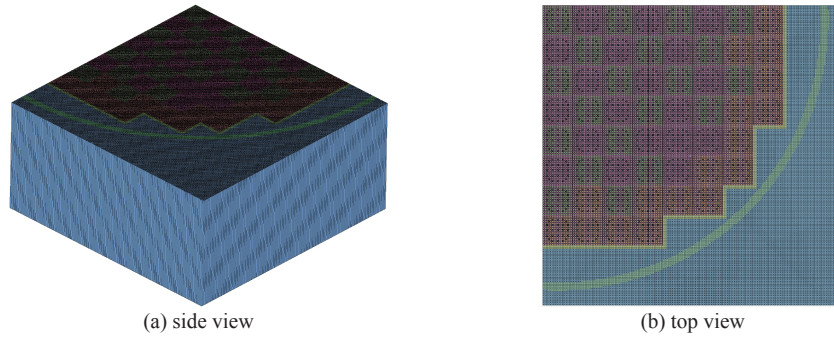


Fig. 4 3D CAD-based visualization of a typical 1/4 PWR model
图4 某典型压水堆 1/4 模型 CAD 三维可视化

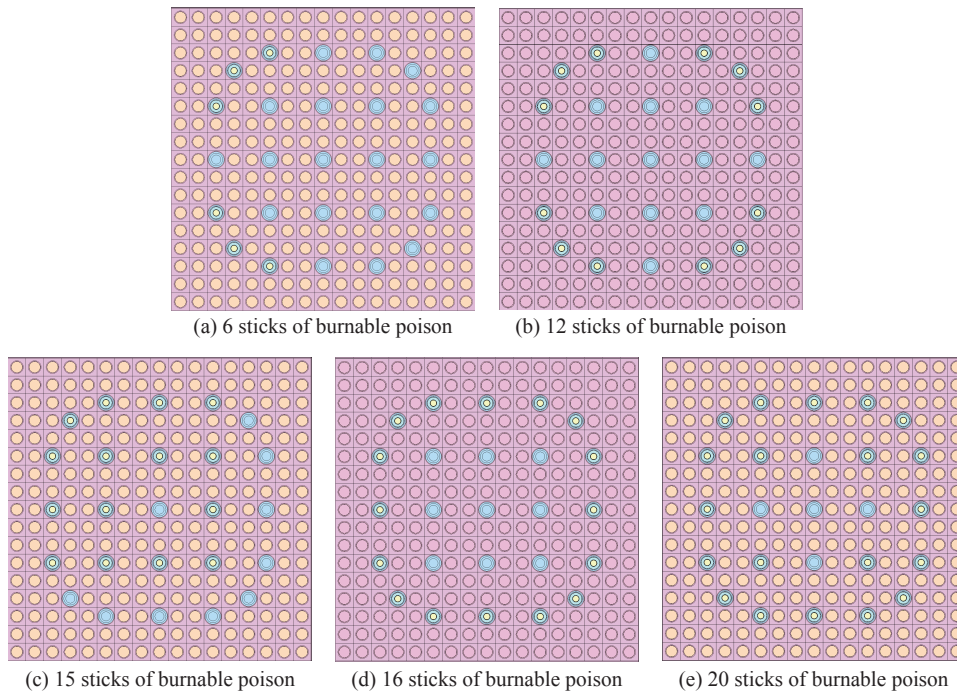


Fig. 5 CAD-based visualization of burnable poison assembly
图5 可燃毒物组件 CAD 可视化

维可视化效果见图 6。建立几何模型时,这些排列整齐的栅格元素只需要定义一个,然后通过 Fill 卡就可以用与 Lat 栅格相同的栅格元素填充,这些栅格元素则被定义为 Universe 的其他栅元填充^[15-16]。将燃料区划分为 4 个控制棒栅格和 680 个燃料棒栅格,共 684 个栅格。一个控制棒栅格占据四个燃料棒栅格并分配编号 $u=5$ 、 $u=6$ 、 $u=7$ 和

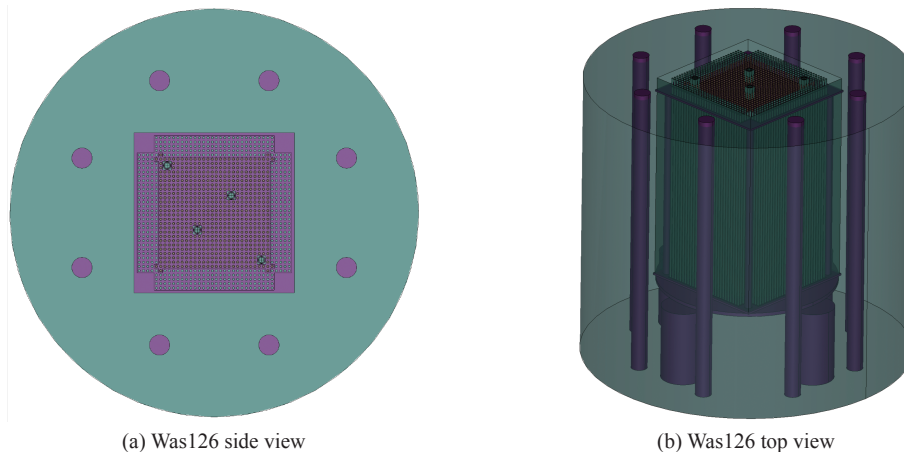


Fig. 6 3D CAD-based visualization of model Was126
图6 模型 Was126 三维 CAD 可视化

SALOME 平台开发了面向于 MC 的蒙卡计算模型 CAD 反转可视化模块,并以典型反应堆模型对模块的底层结构建模和重复结构建模反转功能进行验证,验证了反转可视化模块良好的建模能力。结果表明,本文蒙特卡罗计算模型 CAD 反转可视化模块能够描述复杂几何体和大规模重复结构,可根据用户需要显示模型,交互响应效果好,为用户提供更直观的蒙卡计算模型 CAD 三维可视化,提高几何建模效率和模型可展示度。

参考文献:

- [1] Briesmeister J F. MCNPTM—A general Monte Carlo N-particle transport code[R]. LA-13709-M, 2000.
- [2] Werner C J. MCNP User's manual—code version 6.2[R]. LA-UR-17-29981, 2017.
- [3] Ribes A, Caremoli C. Salome platform component model for numerical simulation[C]//Proceedings of the 31st Annual International Computer Software and Applications Conference (COMPSAC 2007). 2007: 553-564.
- [4] Theis C, Buchegger K H, Brugger M, et al. Interactive three-dimensional visualization and creation of geometries for Monte Carlo calculations[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2006, 562(2): 827-829.
- [5] Leppänen J. Methodology, applications and performance of the CAD-based geometry type in the Serpent 2 Monte Carlo code[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2022, 176: 109259.
- [6] Wang Dong, Song Jing, Yu Shengpeng, et al. CAD-based Monte Carlo automatic modeling method based on primitive solid[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2016, 87: 162-166.
- [7] Wu Yican, Song Jing, Zheng Huaqing, et al. CAD-based Monte Carlo program for integrated simulation of nuclear system SuperMC[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2015, 82: 161-168.
- [8] 于志翔, 邹树梁, 何震. 船用反应堆屏蔽设计的可视化与快速计算功能开发[J]. *核科学与工程*, 2017, 37(4): 554-559. (Yu Zhixiang, Zou Shuliang, He Zhen. Visualization and rapid computing function development for marine reactor shielding design[J]. *Nuclear Science and Engineering*, 2017, 37(4): 554-559)
- [9] 李春艳, 李君利, 程建平, 等. MCNP可视化输入程序的开发[J]. *清华大学学报(自然科学版)*, 2007, 47(s1): 1089-1092. (Li Chunyan, Li Junli, Cheng Jianping, et al. Development of visualized input for MCNP[J]. *Journal of Tsinghua University (Science & Technology)*, 2007, 47(s1): 1089-1092)
- [10] 汪冬, 俞盛朋, 程梦云, 等. CAD模型与Geant4几何模型双向自动转换方法研究[J]. *核电子学与探测技术*, 2015, 35(7): 679-683. (Wang Dong, Yu Shengpeng, Cheng Mengyun, et al. The research and development of automatic bi-conversion methods between CAD model and Geant4 geometry model[J]. *Nuclear Electronics & Detection Technology*, 2015, 35(7): 679-683)
- [11] 秦桂明, 马彦, 付元光, 等. 反应堆的大规模几何分层建模[J]. *强激光与粒子束*, 2017, 29: 036006. (Qin Guiming, Ma Yan, Fu Yuanguang, et al. Large-scale geometric modeling and management for reactor simulation[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2017, 29: 036006)
- [12] 梁金刚, 葛攀和, 吴高晨, 等. 反应堆蒙特卡罗程序RMC模型可视化功能开发[J]. *原子能科学技术*, 2014, 48(s1): 599-603. (Liang Jingang, Ge Panhe, Wu Gaochen, et al. Development of model visualization in reactor Monte Carlo Code RMC[J]. *Atomic Energy Science and Technology*, 2014, 48(s1): 599-603)
- [13] 丁爱平, 李莹, 卢磊, 等. 粒子输运计算模型MCNP模型的可视化实现[J]. *原子核物理评论*, 2006, 23(2): 130-133. (Ding Aiping, Li Ying, Lu Lei, et al. Visualizing input files of neutronics model for MCNP calculation[J]. *Nuclear Physics Review*, 2006, 23(2): 130-133)
- [14] 赵瑛峰, 刘检华, 武林林, 等. 基于特征分解的半空间构造实体几何模型转换算法[J]. *计算机集成制造系统*, 2021, 27(5): 1382-1389. (Zhao Yingfeng, Liu Jianhua, Wu Linlin, et al. Model conversion algorithm of half-space constructive solid geometry model based on feature decomposition[J]. *Computer Integrated Manufacturing Systems*, 2021, 27(5): 1382-1389)
- [15] 王武, 夏虹, 李伟, 等. 基于MCNP的反应堆建模方法[J]. *应用科技*, 2021, 48(4): 92-97. (Wang Wu, Xia Hong, Li Wei, et al. Reactor physical modeling method based on MCNP[J]. *Applied Science and Technology*, 2021, 48(4): 92-97)
- [16] 周少恒, 何桃, 龙鹏程, 等. MCNP大规模重复结构体素的实时交互可视化方法研究[J]. *核科学与工程*, 2012, 32(3): 266-270. (Zhou Shaoheng, He Tao, Long Pengcheng, et al. A real-time interactive visualization method of large-scale MCNP repeated structures voxels[J]. *Nuclear Science and Engineering*, 2012, 32(3): 266-270)