

文章编号: 1007-4627(2006)02-0134-04

S_N 方法粒子输运计算程序自动建模关键技术问题研究

胡海敏, 李静惊*, 李莹, 郑善良, 吴宜灿
(中国科学院等离子体物理研究所, 安徽合肥 230031)

摘要: 在充分调研和分析 S_N 方法粒子输运计算程序自动建模方法的基础上, 对建模过程中的模型文件格式识别、属性编辑、空腔处理及自动划分离散网格等关键技术问题进行了研究, 并提出了合理可行的解决方法。通过对 SNAM 程序建模部分功能测试, 验证了这些方法的正确性和有效性。

关键词: S_N 方法; CAD; 建模; SNAM

中图分类号: TP31 **文献标识码:** A

1 引言

在核领域的中子学分析和计算中, 采用离散纵标 S_N 方法的多维粒子输运计算程序(简称 SN 计算程序)得到了越来越广泛地应用。SN 计算程序的主要优点是计算效率高, 可以准确计算具有各向异性、中子注量率分布不均匀的反应堆, 并可获得分布量的计算结果。

然而, 尽管 SN 计算程序有着灵活的几何处理能力, 但是缺乏有效的建模软件。在手工编辑 SN 计算程序的输入文件时, 通常需要用数以百万的二维或三维离散网格及其表示材料属性的混合表来描述复杂的中子学计算模型, 建模过程抽象、效率低下, 而且易于出错。在计算机能力日益强大和模型复杂程度越来越高的情况下, 繁琐而耗时的建模过程成为 SN 计算程序使用的“瓶颈”, 严重限制了 SN 计算程序的广泛应用。针对这一情况, 国内外很多研究机构和大学正在对 SN 计算程序的自动建模方法和建模工具进行研究和开发尝试。

本文在广泛调研国内外研究动态及 SN 计算程序自动建模特点的基础上, 深入研究了 CAD 模型与 SN 模型转换的关键技术问题。本文第 2 部分介绍了 SN 计算程序自动建模方法的研究现状; 第 3 部分对 CAD 接口程序实现自动建模的关键技术问题进行研究, 并提出了合理可行的解决方法; 第 4

部分通过实例测试, 验证了本文对关键技术研究的正确性和有效性; 第 5 部分对本文进行了总结。

2 研究现状

本文中的 CAD 工程模型(简称 CAD 模型或工程模型), 指在工程实践中为了机械加工、建筑构造或效果展示而建立的三维几何模型, 完全对应需要加工和装配的机械零件或建筑结构。中子学计算模型(简称中子学模型), 指在工程模型基础上, 从中子学计算角度进行了必要简化和补充后的模型。中子学模型与 CAD 模型相比有如下特点: 中子学模型的实体除包含几何信息外, 还包含材料信息及其它重要的辅助信息; 中子学模型中的实体充满整个模型空间, 且不存在任何空腔和缝隙。SN 模型是指 SN 计算程序输入文件中以指定格式对中子学模型的离散化描述。

一般来说, 针对 SN 计算程序的建模有两种可能方式: (1) 直接在 SN 计算程序的源程序文件中嵌入 CAD 几何造型引擎, 使 SN 计算程序能够直接识别各种 CAD 模型, 并转换为 SN 模型进行计算; (2) 使用接口程序, 把 CAD 模型转换为 SN 计算程序需要的 SN 模型, 直接供 SN 计算程序使用。第 1 种方式的优点是可以直接使用各种 CAD 模型, 简化模型转换过程, 但对 SN 计算程序的源程序结构

收稿日期: 2005-11-20; 修改日期: 2006-01-12

作者简介: 胡海敏(1975-), 男(汉族), 河南安阳人, 博士研究生, 从事中子物理与计算机图形方面的研究。

* 联系人: 李静惊, E-mail: jili@ipp.ac.cn

却要做根本性的调整,工作量庞大,而且极易出现错误。第2种方式相当于在CAD软件和SN计算程序之间架起了一座桥梁,工程设计人员可以使用自己熟悉的CAD软件来创建各种工程模型,通过使用接口程序把CAD工程模型转换为SN模型。这种方式的优点是可以使用大量先进的商用CAD软件进行建模,也可共享已有的CAD工程模型,又无需对SN计算程序的源程序做任何修改。从技术角度看,这种方式具有通用性,且便于扩展,符合软件工程的要求,但需要发展转换算法和克服一系列的技术问题,如多种CAD工程模型文件格式的识别、中子学模型的属性编辑、空腔处理和离散网格划分等关键技术问题。

当前使用第1种方式进行建模的研究还处于尝试阶段,如美国威斯康星大学正在进行相关研究^[1]。使用第2种方式进行建模的初步成果主要有BOT3P^[2], Attila Radiation Transport Software^[3]和PENTRAN Supporting Code^[4]等。BOT3P是ENEA核数据中心针对DORT/TORT开发的辅助建模程序系统,可以生成SN模型的输入文件,但还不能识别CAD工程模型文件格式。Attila Radiation Transport Software是针对Attila辐射输运程序开发的建模程序系统,由Transpire, Inc.开发,其主要特点是为Attila准备四面体的无序网格,在模型可视化方面有着一定的优势,但在通用性方面存在欠缺。PENTRAN Supporting Code是针对PENTRAN而设计开发的辅助程序系统,该系统在离散网格划分方面进行了初步研究,在模型转换和可视化方面还不完善。

继大型蒙特卡罗粒子输运计算建模与可视化程序系统MCAM^[5]之后,中国科学院等离子体物理研究所的FDS组正在研发的离散纵标方法粒子输运计算建模与可视化程序系统SNAM (S_N Automatic Modeling),是CAD工程模型与SN计算程序之间的接口程序。SNAM是一个集自动建模、模型可视化及计算结果可视化于一体的综合程序系统,可为多种SN计算程序所使用,具有较强的通用性。

3 关键问题的解决

使用接口程序在技术上需要解决以下两大类问题:第一类是从CAD工程模型转化为中子学计算

模型,具体包括CAD工程模型文件格式识别、模型属性编辑和空腔处理等。第二类是从中子学计算模型到SN模型的转换,具体包括离散网格的划分和输入文件格式的自动生成等。本文结合开发SNAM程序系统实践,对这些关键问题进行了详细研究,并提出了可行的解决方法。

3.1 CAD工程模型文件格式识别

为了识别多种CAD工程模型文件格式,在SNAM中使用了CAD工程模型文件格式识别接口。该接口可以把SAT, STEP和IGES等几种主要的CAD模型文件格式转换成SNAM默认的SAT文件格式,从而便于在SNAM的可视化场景中对模型进行编辑和转换。

在设计模型文件格式识别接口过程中,充分使用了面向对象思想和基于组件的编程技术,因此,该接口具有良好的可扩展性和易维护性。

3.2 模型属性编辑

CAD工程模型转换为中子学模型的一个关键环节是为每个实体添加中子学计算所需要的材料信息以及其它重要的辅助信息,使CAD工程模型的几何实体转换为中子学模型的材料区间,这一环节称之为模型的属性编辑。

模型属性编辑实现的关键是实体属性结构扩充与图形交互操作。CAD工程模型的实体属性结构一般只包含颜色信息,而不包含材料信息,因此需要对其进行扩充,增加中子学计算所需要的材料信息以及其它重要辅助信息。在设计SNAM的模型属性编辑模块时,以美国Spatial公司的ACIS 3D Modeler^[6]作为基本的几何造型引擎,实现了实体属性结构的扩充。通过引入图形交互操作功能,使用户能够以可视化方式对模型任意实体的属性结构进行填充和修改,不仅方便快捷地实现了从CAD工程模型实体到中子学模型材料区间的转换,而且减少了转换过程中出现操作性错误的几率。

3.3 模型空腔处理

CAD工程模型转换为中子学模型,除了需要对工程模型的实体进行属性编辑外,还必须消除工程模型内部所包含的空腔,即把工程模型内部的空腔部分用相应大小和形状一致的实体来填充。在研发

SNAM 的模型空腔处理模块时,使用了自动填充空腔法。

自动填充空腔法的原理是,通过分析工程模型所有实体的几何信息、属性信息和实体之间的拓扑关系,得到模型内部空腔的数量和每个空腔的几何信息,根据每个空腔的几何信息构造出大小形状一致的实体,然后填充到对应空腔的位置。使用自动填充空腔法可以迅速和快捷地用实体填充模型内部任意复杂形状的空腔,基本解决了手工填充复杂空腔时存在的耗时且易错等问题。

3.4 离散网格划分

中子学模型转换为 SN 模型的实质是中子学模型的离散化,即根据 SN 计算程序需要,把中子学模型划分为含有几何信息与材料信息的二维或三维离散网格。网格的数量随着模型复杂程度与计算精度的不同而不同,通常情况下需要划分几十万或几百万个网格。用手工方法在复杂模型内部寻找每个实体边界并划分数以百万的网格非常困难,不仅耗时、费力和繁琐,而且很容易出错。为避免这些问题,本文使用自动划分网格法实现中子学模型的离散化。

自动划分离散网格法的原理如下:通过遍历组成中子学模型的所有实体的几何信息与材料信息,根据划分网格的经验值或用户指定值,自动确定网格划分边界并划分网格,按 SN 计算程序指定格式自动生成 SN 模型,从而实现中子学模型的离散化。

自动划分离散网格法的优点是能够迅速和准确地确定中子学模型的实体边界,为合理划分网格提供了重要保证,不仅提高了划分网格的效率,而且确保了 SN 模型描述的正确性和精确性。

3.5 控制参数和对应数据块生成

SN 计算程序的输入文件中,除了包括 SN 模型描述外,还包括近百个控制参数,每个控制参数的取值又随着 SN 模型和具体计算要求的不同而变化。本文使用界面输入法与数据库查询相结合的方法来实现 SN 输入文件的控制参数及相应数据块描述的快速输入。

界面输入法根据控制参数的特点设计了控制参数输入界面。在输入界面中可以方便直观地看到各个控制参数的物理意义,对所有控制参数在输入界

面中给出了 SN 计算程序的默认值。用户只需简单的选择和少量的修改就可以完成对近百个控制参数的输入,并按照 SN 计算程序输入文件的指定格式自动生成所有控制参数的描述。

对于常用的固定数据块如方向余弦、求积数权重和裂变谱等编制了数据库;为经常变化的数据块,如固定体积分布源和初始通量等,编制了相应的输入函数。在自动生成 SN 计算程序输入文件时,只需对常用数据库读取和调用相应的输入函数就可以完成对 SN 计算程序输入文件中复杂数据块的输入。

4 实例测试

自动建模过程中,关键技术问题的解决方法在开发 SNAM 程序系统的自动建模功能模块时得到了充分应用。以下是对 SNAM 程序系统建模部分功能的测试情况。

4.1 模型属性编辑功能测试

图 1(a)是使用 SNAM 模型格式识别接口导入可视化场景的 CAD 工程模型,只包含几何信息而不包括材料信息。图 1(b)是经过 SNAM 属性编辑后得到的中子学模型,实体颜色不同表示材料信息的不同。图 1(a)和(b)相比,许多实体的颜色发生了变化,这是由于经过属性编辑,实体附加了材料信息和其它重要辅助信息的结果。



图 1 (a)属性编辑前和(b)属性编辑后

4.2 空腔处理功能测试

图 2(a)所示的模型,中间部分为空腔。经过 SNAM 程序系统自动空腔处理,得到了图 2(b)所示的模型,模型中间的空腔部分被一个与空腔形状大小完全一致的实体所填充。

4.3 中子学模型转化为 SN 模型功能测试

以二维中子学模型为例,把 SNAM 自动生成的



图 2 (a) 填补空腔前和 (b) 填补空腔后

输入文件与手工编写的输入文件提供给 BUDOT^[7] 使用。由两种方法得到输入文件的计算结果基本一致, 但使用 SNAM 准备输入文件的效率却远远高于手工编写输入文件的效率, 从而验证了 SNAM 自动建模整体过程的正确性和有效性。

5 结论

本文在充分调研和分析 S_N 计算程序自动建模

参考文献:

- [1] Wang Mengkuo, Timothy J Tautges, *et al.* Fusion Science and Technology, 2005, 47: 4.
- [2] Roberto Orsi. Nuclear Science and Engineering, 2004, 146: 248—255.
- [3] Comprehensive Radiation Transport Solution Environment, <http://www.radiative.com/>.
- [4] Haghghat A, Sjoden G E, Kucukboyaci V N. <http://uftg.nre.ufl.edu/~haghgha/>.
- [5] 吴宜灿, 李莹, 卢磊等, 核科学与工程, 2006, 26(1)(待发表).
- [6] 3D ACIS Modeler, <http://www.spatial.com/components/acis/>.
- [7] 刘海波. 基于 2D 输运理论燃耗计算程序的开发. 北京: 中国科学院研究生院硕士学位论文, 2005 年.

Study on Key Issues of Automatic Modeling for the S_N -method Based Particle Transport Simulation Codes Program

HU Hai-min, LI Jing-jing, LI Ying, ZHENG Shan-liang, WU Yi-can
(Institute of Plasma Physics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

Abstract: This paper presents two approaches to enhance the geometry modeling ability of S_N particle transport simulation codes and focus on the key issues that lie in the processing from CAD model to SN code geometry model, e. g. CAD file format support, void modeling, mesh generation and model-editing. SNAM (S_N Automatic Modeling system) has been developed as an interface code between commercial CAD software and S_N particle transport simulation codes. The testing results have shown that the algorithm and implementation used in SNAM are efficient and capable of all the necessary processing from CAD model to SN geometry model.

Key words: S_N -method; CAD; modeling; SNAM