

MCNP 输出数据分析与可视化软件的设计与实现

陈念年¹, 蔡勇², 张建生², 张建华³

CHEN Nian-nian¹, CAI Yong², ZHANG Jian-sheng², ZHANG Jian-hua³

1.西南科技大学 计算机科学与技术学院,四川 绵阳 621010

2.西南科技大学 制造科学与工程学院,四川 绵阳 621010

3.中国工程物理研究院 核物理与化学研究所,四川 绵阳 621900

1.Department of Computer Science & Technology, Southwest University of Science & Technology, Mianyang, Sichuan 621010, China

2.Department of Manufacturing Science & Engineering, Southwest University of Science & Technology, Mianyang, Sichuan 621010, China

3.Institute of Nuclear Physics and Chemistry, China Academy of Engineering Physics, Mianyang, Sichuan 621900, China

E-mail: magicnn@gmail.com

CHEN Nian-nian, CAI Yong, ZHANG Jian-sheng, et al. Design and realization of MCNP output data analysis and visualization software. Computer Engineering and Applications, 2010, 46(8): 208-210.

Abstract: MCNP(Monte Carlo N-Particle Transport Code) is a code for analyzing the transport of N-particle by the Monte Carlo method. It's very hard to efficiently extract and process the MCNP output data which have large amount of information. A data extraction algorithm is proposed according to the analyzing of MCNP output data, and the software is realized by combining Matlab COM with VC++ developing platform for evaluating and visualization MCNP output data. Application results of the software show that the keen demand for analyzing and visualization output data from MCNP users is met by this solution.

Key words: Monte Carlo N-Particle Code(MCNP) output data; Matlab COM; hybrid programming; data visualization

摘要: MCNP(Monte Carlo N-Particle Code)是基于 Monte-Carlo 方法的一个粒子输运计算程序。其输出数据信息量大,难以快速筛选处理有效数据。在分析 MCNP 输出数据主要内容的基础上,设计了 MCNP 结果数据提取算法,采用 VC++与 Matlab COM 混合编程技术,实现了一个 MCNP 输出数据分析与可视化软件。应用结果表明,该软件满足了 MCNP 使用人员对 MCNP 输出数据快速分析与可视化的迫切需求。

关键词: MCNP 输出数据; Matlab 组件; 混合编程; 数据可视化

DOI: 10.3778/j.issn.1002-8331.2010.08.060 **文章编号:** 1002-8331(2010)08-0208-03 **文献标识码:** A **中图分类号:** TP311.52

1 引言

MCNP(Monte Carlo N-Particle Code)是基于 Monte-Carlo 方法的一个粒子输运计算程序,由美国 Los-Alamos 国家实验室开发,主要用于计算三维几何结构中的中子/电子/光子联合输运问题以及计算核临界系统的本征值问题,是辐射屏蔽设计优化的基本工具。在分析物理实验和反应堆设计、辐射屏蔽核仪器设计、核临界安全分析、宇宙辐射模拟、辐射损伤等研究领域得到广泛普遍的应用。

MCNP 程序操作是基于控制台命令行方式,几乎没有提供图形界面,输入接口复杂、繁琐,对空间几何结构描述采用手工输入参数方式进行,过程耗时耗力,使用极其不便。国内外许多研究机构开始研究并设计基于 MCNP 的三维可视化平台,完成 CAD 几何模型到 MCNP 仿真模型转换算法,即把目前大型 CAD 软件,如 UG、AutoCAD、Solid Works 等所建立的 CAD 几

何模型转换为 MCNP 仿真模型,自动快速生成 MCNP 计算所需的输入文件^[1-3]。但是上述平台均存在较少关注 MCNP 程序输出数据分析的问题。事实上,MCNP 输出数据文件涵盖信息量巨大、冗长,含有大量无用的便于阅读的注释信息,一个简单几何结构的粒子输运计算结果 MCNP 输出文件都有几百行,复杂几何结构的输出文件更达到几千甚至上百万,造成要从结果数据中筛选出感兴趣的内容费时费力、效率低下,难以满足快速处理结果数据的需求。因此,设计一个 MCNP 输出数据分析与可视化软件,实现 MCNP 输出数据的有效筛选、分析与可视化具有很高的应用价值。

2 MCNP 输出数据分析与可视化软件的总体设计

目前,对 MCNP 计算所生成的输出数据文件,一般是通过文本编辑软件打开后,手动选择有效计算结果数据段并拷贝复

基金项目:国家自然科学基金(the National Natural Science Foundation of China under Grant No.10576027, No.10676029);四川省教育厅基金(the Fund of Department of Education of Sichuan Province, China under Grant No.2006C075)。

作者简介:陈念年(1977-),男,讲师,主要研究领域为图形与图像处理;蔡勇(1963-),男,博士,教授,主要研究领域为图形仿真技术;张建生(1980-),男,硕士,主要研究领域为逆向工程与计算机可视化研究;张建华(1977-),男,博士研究生,主要研究领域为工程物理。

收稿日期: 2009-09-08 **修回日期:** 2009-11-27

制到一些专业数据分析处理软件中, 如 Microsoft Excel、Origin, 然后利用这类软件进行数据分析并绘制出对应的二维或三维图形。这样方式存在以下两个缺点:

(1) MCNP 输出数据非常庞大, 手动方式获取有效计算结果数据存在筛选困难、操作繁琐耗时、容易出错等问题;

(2) 数据筛选与分析、可视化显示操作过程分离、使用工具不同, 难以进行统一与集成, 不能实现处理过程的自动化。

实际上只要保证数据筛选与分析处理可以在同一平台上完成就可以解决上述问题。MCNP 输出数据的分类与筛选采用计算机算法可以有效解决; MCNP 输出数据的分析处理又要求使用具有强大数值分析、数据可视化功能的工具, 比如 Matlab; 另一方面, 需要充分考虑平台独立性部署性; 综合几方面的因素, 采用组件技术、VC 与 Matlab 混合编程技术, 设计一个 MCNP 输出数据分析软件, 实现 MCNP 输出数据的自动筛选与数据分析、可视化等功能, 可以有效解决上述问题。软件具体功能设计图如图 1。

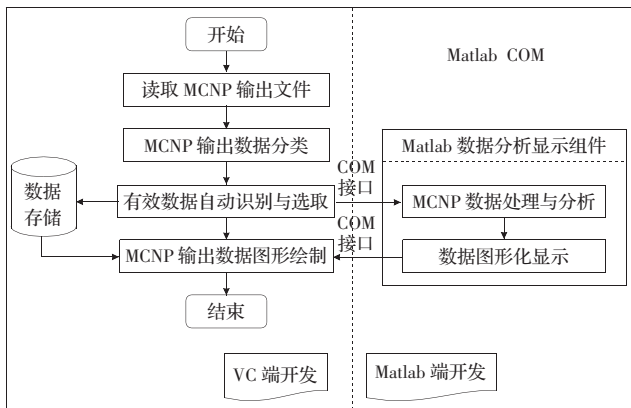


图 1 MCNP 输出数据分析与可视化软件总体功能设计图

2.1 MCNP 输出文件分析与有效数据提取

MCNP 输出文件包含许多信息, 主要有 MCNP 输入文件副本、曲面卡、栅元卡、错误警告提示信息、计算结果、计算结果诊断分析、计算结果字符图表等。其中计算结果是最重要的信息, 而其他信息均为参考之用。利用 MCNP 输入文件中的记数卡可指定用户从蒙特卡罗计算中想要得到的信息类型, 如穿过一个几何曲面的粒子通量。MCNP 记数卡共计 20 余种, 其中最常用的是 Fn 卡的曲面和栅元记数(多个曲面构成的几何体), 也是最重要的计算结果信息。Fn 卡中曲面和栅元记数类型可见表 1。

表 1 Fn 卡曲面和栅元记数类型

助记名	类型说明	Fn 单位
F1:N 或 F1:P 或 F1:E	穿过一个曲面的积分通量	粒子数
F2:N 或 F2:P 或 F2:E	穿过一个曲面的平均通量	粒子数/cm ²
F4:N 或 F4:P 或 F4:E	一个栅元的平均通量	粒子数/cm ²
F6:N 或 F6:N,P 或 F6:P	一个栅元上的平均沉积能量	Mev/g
F7:N	一个栅元上的裂变平均沉积能量	Mev/g

Fn 卡中曲面和栅元记数简单格式为: Fn:P₁ C₁, C₂, ..., C_k, 其中 n 为记数号; P₁ 为 N/P/E, 分别表示中子/光子/电子; C_i (i=1, 2, ..., k) 为用于记数的问题曲面号或栅元号集合。

例如, F1:N 1 3 6 卡指定 3 个光子通量记数, 分别是穿过曲面 1、3、6 的光子通量记数。在 MCNP 输出文件中对应于 Fn 卡, 会生成形如图 2 的记数结果, 即有效计算结果, 往往需要对这些计算结果进行分析与可视化图形显示。

```

tally 1      nps=1552528
              tally type 1 number of particles crossing a surface.
              tally for photons

surface 1
  energy
  0.0000E+00  0.0000E+00  0.0000
  1.7284E-01  8.79050E-03  0.0147
  3.4568E-01  1.42225E-02  0.0115
  .....
surface 3
  .....
surface 6
  .....
    
```

图 2 F1 记数卡信息表示结构

基于上述分析, 为了能快速提取 Fn 卡中曲面和栅元记数结果数据, 设计了如下数据提取算法:

(1) 从 MCNP 输出文件头部开始遍历, 直到找到字符串“数字+problem summary”。获得所有以“数字+字母”组合方式表示的特征字符串 $FS_{bi}=\{FS_{b1}, FS_{b2}, \dots, FS_{bk}\}$, 获取 FS_{bi} 与 FS_{bi+1} 之间的字符内容 CS_{bi} 。分别存储各分类数据集合为: $S_b=\{S_{b1}, S_{b2}, \dots, S_{bk}\}$, 其中 $S_{bi}=FS_{bi}+CS_{bi}$; 如果没有找到字符串“数字+problem summary”, 执行步骤(6);

(2) 从字符串“数字+problem summary”处开始再次遍历 MCNP 输出文件, 直到文件末尾。获得所有以“数字+字母”组合方式表示的特征字符串 $FS_{di}=\{FS_{d1}, FS_{d2}, \dots, FS_{dk}\}$, 获取 FS_{di} 与 FS_{di+1} 之间的字符内容 CS_{di} 。分别存储各分类数据集合为: $S_d=\{S_{d1}, S_{d2}, \dots, S_{dk}\}$, 其中 $S_{di}=FS_{di}+CS_{di}$;

(3) 遍历集合 S_b , 如果 FS_{bi} 等于“数字+mcnp”, 则表明 S_{bi} 的内容为 MCNP 输入文件副本; 否则, 执行步骤(6); 搜索 S_{bi} 分别获取 Fn 卡信息: Fn:P₁ C₁, C₂, ..., C_k;

(4) 根据步骤(3)中获取的 Fn 卡信息 Fn:P₁ C₁, C₂, ..., C_k, 遍历集合 S_d , 分别获取以字符串“数字+Tally n”开头的的数据, 并存储为记数结果数据集 $Tally_i=\{Tally_{i1}, Tally_{i2}, \dots, Tally_{in}\}$, 比如图 2 即为 F1 卡的记数结果;

(5) 对步骤(4)中的 $Tally_i$ 内容逐个解析, 分别获取以字符串“surface C_i”开头的的数据, 存储为某一曲面或栅元的粒子计数计算结果集: $RS=\{RS_1, RS_2, \dots, RS_k\}$;

(6) 结束。

算法第(1)、(2)步遍历时间复杂度为 $O(n)$; 通常 MCNP 输出文件中第一项内容为 MCNP 输入文件副本, 所以算法第(3)步时间复杂度为常数; 第(4)和第(5)步在实现时通常采用两层嵌套遍历, 其中第(5)步中提取的曲面粒子计数信息主要由三项构成: 粒子数目、粒子能量以及计算方差, 故(4)、(5)时间复杂度为 $O(3n)$ 。综上所述, 该 MCNP 输出数据提取算法总的时间复杂度为 $T(n)=O(n)+O(3n)=O(4n)$ 。

2.2 MCNP 输出数据的可视化

Matlab 作为专业的科学和工程计算软件, 可以完成各种精确的数值计算和数据处理的可视化显示, 但存在交互性相对较差, 功能庞大, 移植难等缺点。既要充分发挥 Matlab 数据分析以及科学数据可视化能力强的优点, 又要保证数据分析处理过程能够独立于 Matlab 运行, 许多工程软件纷纷采用 Matlab 混合编程技术^[6-9]。该技术主要有 5 种, 如表 2。

根据表 2 的分析, 采用方式 5 设计了一个 MCNP 数据分析

表2 Matlab 混合编程技术分类

序号	调用方式	优缺点
1	Matlab Engine	效率低,难以无缝连接,有 Matlab 命令窗口弹出
2	Matlab C/C++数学库	功能局限大,不支持 Matlab 很多函数命令,如绘图操作、工具箱函数
3	m 函数转 C/C++代码 ^[6]	功能局限大,不能转换 m 文件,不支持对象及动态创建
4	MatCom 控件 ^[7]	功能局限大,对部分绘图函数无法实现或得不到准确图形,尤其是三维图形。不再更新,最新版本为 4.5 版
5	Matlab COM 组件 ^[8-10]	其他语言可无缝连接,功能不受限制且可脱离 Matlab 运行环境,是目前最好的方式

与显示 Matlab COM 组件——McDataProcessor, 如图 3 和表 3 所示。通过该组件可以实现对 MCNP 输出数据中某一曲面或栅元的粒子计数计算结果集 $RS=\{RS_1, RS_2, \dots, RS_k\}$ 的数值分析与可视化显示。

```

McDataProcessor
+function [hwndFig]=CreateDataWnd(strFigName, strVisible)
+function CloseDataWnd(hFig)
+function DrawMcData(x, y, bPlot)
+function DrawMcData2(x, y, dataSet, bPlot)
+function InterpMcData(x, y, interpType)
+function InterpMcData2(x, y, dataSet, interpType)
+function [fPV]=GetDataPV(dataSet)
+function [fAvg]=GetAverage(dataSet)
+function [fRMS]=GetDataRMS(dataSet)

```

图3 MCNP 数据分析与显示 Matlab COM 组件

利用 Matlab COM Builder 把编写好的 Matlab 函数编译为 COM 组件,并在 Windows 平台上注册,即可在 Visual C++ 6.0 下调用该 COM 组件中的所有方法。核心调用过程如图 4 所示。

表3 MCNP 数据分析与显示组件功能函数说明

序号	函数名	功能说明
1	CreateDataWnd	创建 Matlab 窗口
2	CloseDataWnd	关闭 Matlab 窗口
3	DrawMcData	绘制通过某个曲面的粒子能量谱曲线
4	DrawMcData2	绘制所有曲面的粒子能量谱平面图
5	InterpMcData	曲线数据插值
6	InterpMcData2	曲面数据插值
7	GetDataPV	获取数据的 PV 值
8	GetAverage	获取数据的平均值
9	GetDataRMS	获取数据的均方根

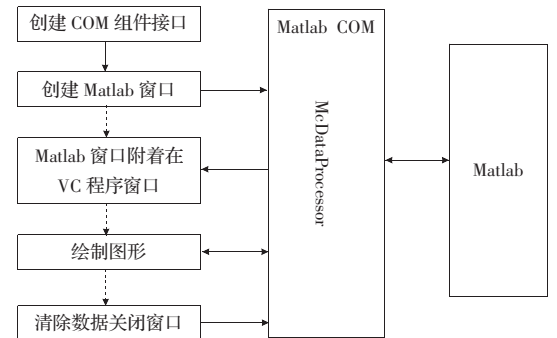
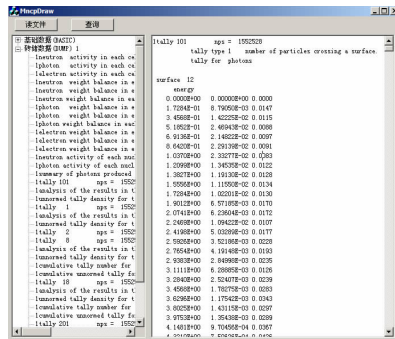
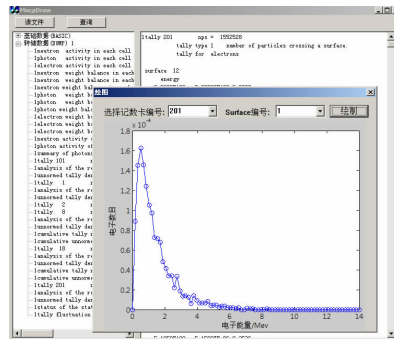


图4 MCNP 输出数据分析与显示 Matlab COM 调用流程图

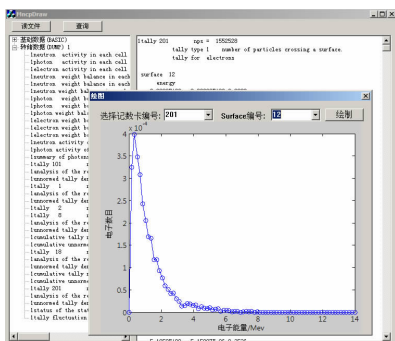
在调用过程中,为了与 VC 开发的应用程序无缝连接,应注意以下几点:(1)应以隐藏方式创建 Matlab 窗口,即 CreateDataWnd 函数第二个参数应该设置为 off;(2)创建的 Matlab 窗口应该去掉其标题栏,附着于 VC 应用程序窗口上;(3)如果需要与 Matlab 窗口进行图形交互,需要在 COM 组件中加入相应 Matlab 函数,比如 Rotate 等;(4)如果需要在 VC 应用程序下监控 Matlab 窗口鼠标、键盘操作,需要在 VC 应用程序框架上拦截对应 Windows 消息。



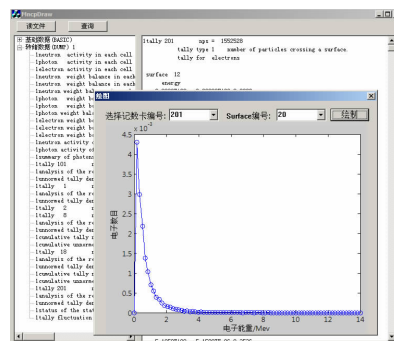
(a)MCNP 输出数据分类



(b)通过曲面 1 的电子能谱分布



(c)通过曲面 12 的电子能谱分布



(d)通过曲面 20 的电子能谱分布

图5 MCNP 输出数据分析与绘制结果