基于图神经网络的蒙特卡罗CSG模型重用方法及应用研究

申靖文[1] 曹良志[1] 贺清明[1] 尹 苗[2] 曹启祥[2]

1（西安交通大学 核科学与技术学院 西安 710049）

2（核工业西南物理研究院 成都 610225）

摘要 在基于蒙特卡罗方法的中子学计算中，高效且准确的构建几何模型是一项关键前提。然而，传统的边界表示（Boundary Representation，B-Rep）模型向构造实体几何（Constructive Solid Geometry，CSG）转换方法在处理复杂B-Rep模型时存在布尔运算不稳定等问题导致效率低、手工工作量大。考虑到拓扑相似的B-Rep模型往往具有结构类似的CSG表达，本文通过复用已验证的CSG表达以替代传统从零开始的转换流程，从而减少复杂几何建模工作量。为实现复用过程中的模型识别，将B-Rep模型表示为属性邻接图，并采用能准确捕捉拓扑语义特征的图注意力网络（Graph Attention Network，GAT）进行图级别分类。自动检索相似几何模型后复用其CSG表达。在中国聚变工程实验堆（China Fusion Engineering Test Reactor，CFETR）典型包层模型上测试表明，该方法可在保持中子学等效性的同时显著提升复杂几何的CSG生成效率。计算得到的氚增殖比（Tritium Breeding Ratio，TBR）与传统方法结果一致，最大相对偏差小于0.5%，验证了该方法在聚变堆辅助建模场景中的可行性与准确性。

关键词 B-Rep→CSG转换，蒙特卡罗程序，图注意力网络，CSG重用，中国聚变工程实验堆

中图分类号 TL328

DOI: 10.3724/j.0253-3219.2026.hjs.49.250276

CSTR: 32193.14.hjs.CN31-1342/TL.2026.49.250276

A graph neural network-based method for reusing Monte Carlo CSG models and its application

SHEN Jingwen[1] CAO Liangzhi[1] HE Qingming[1] YIN Miao[2] CAO Qixiang[2]

1(*School of Nuclear Science and Technology, Xi' an Jiaotong University, Xi' an 710049, China*)

2(*Southwestern Institute of Physics, Chengdu 610225, China*)

Abstract **[Background]** Accurate and efficient construction of geometries is crucial for Monte Carlo neutronics calculations. The Constructive Solid Geometry (CSG) descriptions generated by traditional Boundary Representation (B-Rep) to CSG conversion methods are complex and difficult to understand, and they are not always successful because of unstable Boolean operations. Since topologically similar B-Rep models tend to share CSG structures, leveraging geometry reuse can greatly improve modeling efficiency. **[Purpose]** This study aims to develop an

国家自然科学基金(No.12475181)、中核集团领创科研项目基金资助

第一作者：申靖文，女，1995年出生，2019年毕业于华北电力大学（北京），现为博士研究生，研究领域为蒙特卡罗程序辅助建模技术研究及应用

通信作者：贺清明，E-mail：qingming_he@xjtu.edu.cn

收稿日期：2025-07-09，修回日期：2025-09-19

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.12475181), the Innovative Scientific Program of CNNC

First author: SHEN Jingwen, female, born in 1995, graduated from North China Electric Power University (Beijing) in 2019, doctoral student, focusing on Monte Carlo program computer-aided modeling technology and its application research

Corresponding author: HE Qingming, E-mail: qingming_he@xjtu.edu.cn

Received date: 2025-07-09, revised date: 2025-09-19

intelligent auxiliary modeling method that enables automatically convert B-Rep models into CSG geometry by reusing the CSG cell expressions, and is applied to fusion reactor similarity modules and seeks to reduce manual effort and improve stability while ensuring physical accuracy in subsequent neutronics calculations. **[Methods]** Firstly, a graph-based geometry representation was proposed to transform each B-Rep model into an attributed adjacency graph (AAG) with topological features, and a Graph Attention Network (GAT) was trained to perform graph-level classification, enabling efficient retrieval and reuse of pre-constructed CSG cell expressions from a manually constructed geometry database. Meanwhile, a preprocessing pipeline based on the principal axes of inertia was introduced to ensure consistency across similar models, and standardize node ordering and spatial alignment. Then, the retrieved CSG expressions were transformed into the target geometry using rigid transformation and automatically integrated into Monte Carlo programs' input files via embedded TRCL cards. Finally,the method was tested on two representative blanket modules (#3 inner and #9 outer) and other two complex structures from the China Fusion Engineering Test Reactor (CFETR). **[Results]** The average retrieval time is 0.405 ms, demonstrating superior time efficiency in CSG construction for the test cases, and the generated CSG geometry preserves structural consistency with the original Computer Aided Design (CAD) model. Neutronics simulation results showed a maximum deviation of less than 0.5% in the Tritium Breeding Ratio (TBR) compared to traditionally converted models. Additionally, the method demonstrated superior time efficiency in CSG construction for the test cases. **[Conclusions]** The proposed approach effectively reuses CSG expressions for topologically similar B-Rep models, while maintaining fidelity in Monte Carlo simulations, offering potential for similarity geometries' auxiliary modeling in nuclear fusion engineering applications.

Key words B-Rep→CSG conversion, Monte Carlo code, Graph attention network, CSG reuse, CFETR

在核工程领域，几何精细化建模是蒙特卡罗粒子输运程序（简称蒙卡程序）实现高保真中子学分析的关键环节。早期大多数蒙卡程序采用基于半空间表示的文本建模方式，这种建模方式需要用户直接处理隐式曲面方程，建模经验要求高。面对复杂系统（如聚变堆）时，往往耗时且易出错，难以高效构建出正确有效的几何模型。近年来，蒙卡程序辅助建模技术的发展显著降低了复杂系统的建模难度，主要包括两大技术路线：一是将非结构化网格计算机辅助设计（Computer Aided Design，CAD）模型嵌入构造实体几何（Constructive Solid Geometry，CSG）栅元中创建混合几何，如直接加速几何蒙特卡罗（Direct Accelerated Geometry Monte Carlo，DAGMC）库[1−4]、支持非结构网格几何的蒙卡程序MCNP6[5−6]；二是将边界表示（Boundary Representation，B-Rep）的CAD模型转换为蒙卡程序所需的CSG几何描述，即B-Rep→CSG转换方法[7−8]。然而，非结构网格方法需修改蒙卡程序源码以支持网格粒子追踪算法，目前大多数蒙卡程序并不兼容[2,5]；同时，网格精度直接影响模拟精度和计算开销，若发现模型局部存在几何问题，修改复杂且需重新网格划分[1]。而B-Rep→CSG转换方法无需对蒙卡程序源码进行改动，具备良好的通用性和可移植性，并且可以兼顾模拟精度和计算效率。

传统B-Rep向CSG转换方法的核心思想是将复杂B-Rep实体分解为若干简单凸体，这些凸体的CSG表达式可以通过半空间或几何元素的布尔运算给出，复杂实体可以表示为这些凸体的布尔运算。但传统方法也有一些局限性，如分割算法计算复杂、分解结果碎片化、CSG表达式冗余，导致聚变堆等大型系统的蒙卡模型复杂度剧增达数万个栅元，进而导致蒙卡程序输运计算效率低；此外，该方法高度依赖三维造型引擎（如开源几何引擎Open Cascade）的布尔运算，大规模模型转换时仍存在失败风险。而在工程实践中，蒙卡程序几何模型的自动化高效建模是提升设计迭代效率的关键技术瓶颈。因此，如何优化B-Rep向CSG转换算法，提升其稳健性和效率，仍是核工程建模领域亟需解决的问题。罗月童等先后提出转换特征识别法等方法[9−11]以优化CSG树结构，减少布尔运算依赖，提升模型转换速度。Lu等[12]通过曲率自适应分割与三角碰撞检测，使蒙卡程序辅助建模工具McCAD的分解成功率提升28%，并解决小曲率结构生成的薄片问题。Du等[13]通过辅助面生成策略提升复杂模型转换稳定性，但极端模型仍需人工预处理。Luo等[14]首次结合深度学习优化转换流程，避免传统转换算法对布尔运算的依赖。Harb等[15]提出空间二分-密度驱动分割算法与分层空腔，显著提高了碰撞检测效率，并使分层空腔减少71%表达式复杂度，使蒙卡程序粒子追踪速度提高50%。此外，针对传统转换方法需要频繁

手动调优的问题，研究者提出利用模型相似性重用CSG表达以减少重复工作。王国忠等[16]基于惯性主轴坐标系提出相似性评价方法。该方法为引入专家经验库奠定基础，但需严格比较模型的拓扑结构和几何参数。周波等[17]通过拓扑相似性重用CSG表达，引入图卷积网络（Graph Convolutional Networks，GCN）实现属性邻接图分类，避免传统方法依赖布尔运算的稳定性问题。但该方法仅适用于全连通模型，无法处理聚变堆包层中存在平行空腔阵列的情况，且未结合核装置中子学性能需求，可能生成物理无效模型。

综上所述，通过重用几何数据库中已有的CSG几何描述，可高效生成新模型的CSG几何描述，从而显著减少人工建模成本。与传统方法相比，该策略不仅避免了频繁的重复转换操作，更重要的是能够有效承载并复用研究人员在历史工程实践中积累的建模经验，充分发挥几何模型数据库的知识价值。本文工作旨在提升蒙卡程序在聚变堆大量重复几何建模任务中的自动化与效率，并改善CSG表达质量。通过引入图注意力网络（Graph Attention Network，GAT）[18]提升相似性判定的泛化能力，从而突破现有方法的局限性。最终，所提方法已能够在聚变堆典型包层模型等场景中实现相似性建模，并支撑聚变包层中子学分析[19]应用。

1 理论与方法

1.1 CSG几何重用框架概述

如图1所示，本文方法与传统的B-Rep向CSG转换方法是相互辅助的关系，对于一个新的待转换CAD模型，如果通过检索在几何数据库中找到与之相似的几何模型，则通过本文方法重用历史CSG表达式得到新CAD模型的CSG几何描述，从而避免从零开始运行传统转换方法；否则，通过传统转换方法得到新CAD模型的CSG几何描述。图2是本文方法的整体架构示意，包括相似几何的识别和相似几何的CSG重用两大部分。

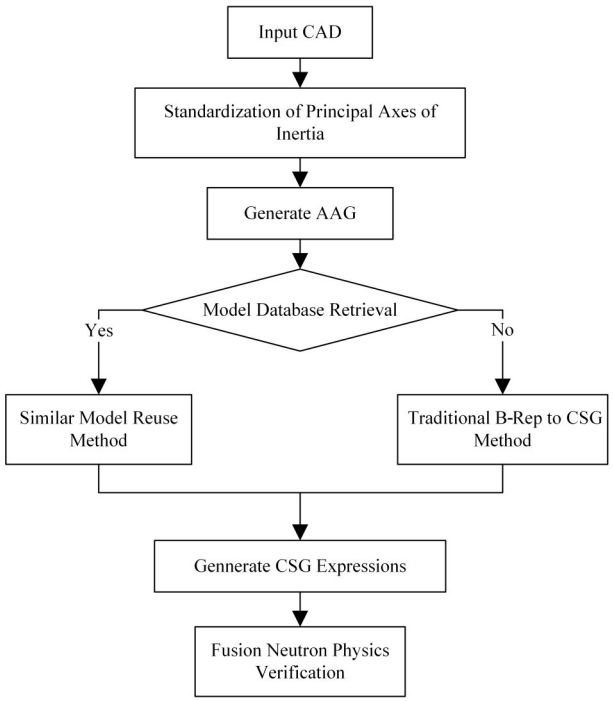

图1 改进后的B-Rep→CSG转换流程示意
Fig.1 Illustration of the improved B-Rep→CSG conversion process

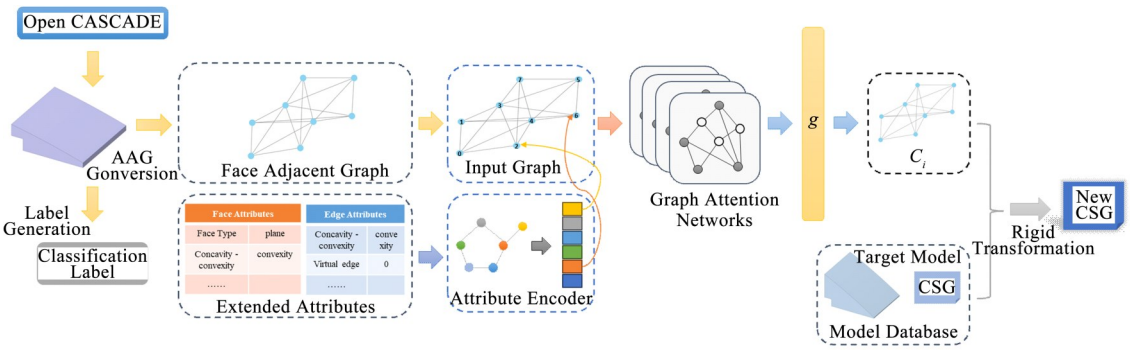

图2 本文方法架构图（彩图见网络版）
Fig.2 Architecture diagram of proposed method in this study (color online)

1.2 相似几何的识别方法

1.2.1 几何模型图表示

1）模型相似性评价

通过检索匹配相似的B-Rep模型以直接复用CSG几何逻辑运算表达式，可以避免在相似模型的转换问题中频繁调用传统B-Rep→CSG转换算法。在计算机领域中，三维模型检索指从大规模三维模型数据库中，根据用户的查询条件，快速找到与之相似的三维模型的过程。三维CAD模型检索（3D CAD Model Retrieval）是三维模型检索的一个细分领域，与普通三维模型检索相比，三维CAD模型检

索的特殊性在于需要关注CAD模型中包含的拓扑关系和参数化特征等结构化数据。基于拓扑的模型几何相似性评价方法相较于其他三维CAD模型检索分类技术，考虑了模型自身的面、边及几何连通性等信息来构建模型的无向图，适用范围更广，尤其适用于检索形状不同但结构相似的三维模型。

根据核工程领域中蒙卡程序几何建模方式的特点，文献[16]中指出拓扑相似的B-Rep模型的CSG几何逻辑运算表达式也相似，本文继续沿用这一思想。如图3所示，模型a和模型b拓扑形状相似，均具有5个拓扑面，它们在蒙卡程序输入文件中栅元（Cell）卡的CSG表达式相同。通过该具有领域特性的相似性评价标准，三维CAD模型的检索问题转换成了属性邻接图的分类问题。

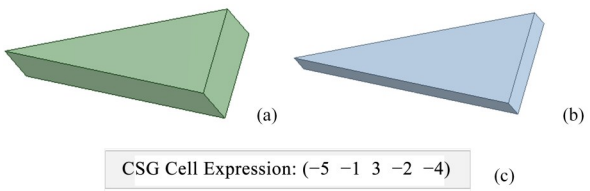

图3　模型相似性示意图
(a) 模型a，(b) 模型b，(c) CSG表达式
Fig.3　Diagram of model similarity example
(a) Model a, (b) Model b, (c) CSG cell expression

2）数据库构建

几何模型数据库是本文方法的核心，其中需要包含B-Rep表示的CAD模型及其对应的CSG几何描述。每个.STEP文件中包含一个来自反应堆结构的B-Rep表示几何实体；与之对应的蒙卡程序.INP输入文件则存储了该几何实体的CSG几何描述。如果一个CAD模型没有与之对应的预先存在的CSG几何描述，可以使用传统B-Rep→CSG转换方法产生CSG几何描述。传统转换方法已经在基于西安交通大学自主研发的蒙特卡罗粒子输运程序NECP-MCX配套的界面软件[20]中实现。

为实现上述映射关系的高效管理，本文基于Python开发了一个轻量化、可扩展的数据管理工具。该工具利用嵌入式关系型数据库管理系统SQLite作为映射存储的后端，建立并维护.STEP文件与其对应的.INP文件之间的一一映射。数据库的核心构成如表1所示。该工具支持通过自动提取或手动编辑JSON文件中的映射信息，并将其保存为.db数据库文件。

3）模型标准化处理

为了实现不同三维几何模型之间特征表达式的一致性与节点编号的对齐，本文在训练数据准备过程中继承了惯性主轴坐标系标准化方法[17]。具体而言，对于任意三维实体模型M，首先计算其质心r_c与

表1　几何文件映射
Table 1　Geometry path mapping

条目 Content	内容 Details
STEP文件路径 STEP_path	.STEP文件的相对路径 The relative path of the STEP file.
CSG文件路径 CSG_path	.INP文件的相对路径 The relative path of the INP file
时间 Time	映射关系的创建时间 The creation time of the mapping relationship

式（1）所示的惯性张量矩阵$\boldsymbol{I}$，通过对矩阵$\boldsymbol{I}$特征分解，提取出一组正交的主轴方向。然后，将这组主轴向量单位化，得到中心惯性主轴（ξ_1,ξ_2,ξ_3），并以质心为坐标原点，建立新的三维直角坐标系，即惯性主轴坐标系。标准化预处理过程即将原始三维几何模型变换至其对应的惯性主轴坐标系下，从而实现空间姿态的一致性。

$$\boldsymbol{I}=\begin{bmatrix} I_{xx} & I_{xy} & I_{xz} \\ I_{yx} & I_{yy} & I_{yz} \\ I_{zx} & I_{zy} & I_{zz} \end{bmatrix} \tag{1}$$

式中：I_{xx}、I_{yy}、I_{zz}是表示物体相对于x、y、z轴的惯性矩；I_{xy}、I_{xz}、I_{yz}是物体的惯性积。

另一方面，尽管从理论上讲，只要图结构中邻接关系和节点特征保持一致，图神经网络对节点编号顺序是不敏感的，不会显著影响其学习效果。然而在实际应用中，当多个具有相同语义标签的图结构在节点编号不一致时，图神经网络可能需要对相同图结构进行多次学习才能达到较好的训练结果。这不仅降低了训练数据的利用效率，还可能对模型的泛化能力造成不利影响。因此，在训练数据规模有限的条件下，对模型进行标准化处理，不仅有助于提升图结构在特征空间中的一致性，也是一种重要的预处理优化策略，可显著增强GAT模型的训练稳定性与泛化性能。

B-Rep模型经过标准化预处理后，对模型中每个拓扑面计算其轴对齐包围盒（Axis-Aligned Bounding Box，AABB），获取其6个边界值$\{X_{\min},Y_{\min},Z_{\min},X_{\max},Y_{\max},Z_{\max}\}$。为统一面节点编号顺序，对包围盒的最小坐标进行排序：首先按$X_{\min}$升序排列，若存在编号顺序，则依次比较$Y_{\min}$和$Z_{\min}$。通过以上排序策略，最终为每个B-Rep模型生成一组从0开始、具有稳定拓扑语义顺序的面节点编号。

4）构建属性邻接图

属性邻接图是三维几何建模中用于表示实体模型的一种图结构，它的本质是在面邻接图（Face Adjacency Graph）的基础上，为节点（面）和边（邻接关系）添加任意属性，包括几何属性、语义属性和功能属性，如图4所示。

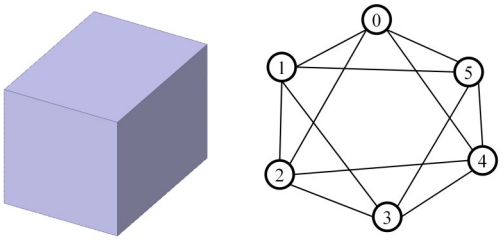

图4 长方体与其面邻接图
Fig.4 Cuboid and its face adjacent graph

针对B-Rep模型中的每一个拓扑面，本文构建了包含多维语义信息的节点属性，用于生成属性邻接图中的节点特征。所提取的特征如表2中所示，这些特征被统一编码为节点属性向量，作为GAT输入图数据中的节点特征，有助于增强GAT中对几何语义结构的感知能力，从而提升分类与检索任务中的表现。

通过以上方法构建面邻接图适用于大多数几何模型，但当几何模型的面邻接图不完全连通时，直接用于图神经网络会影响节点间的信息传播。以图5所示含空腔长方体为例，其面邻接图由两个不连通子图组成，内表面一组，外表面一组。但图神经网络要求输入图是一个整体，在这种图被分裂为多个连通分量的情况下，可能会影响信息传播及模型训练。为了解决这个问题，本文为所有样本统一添加一个“中心节点”（图5中实心节点）连接所有面片以消除连通性差异，同时增加了“是否为中心节点”与“中心连接边”两个属性特征。这种方法既可以保留局部邻接，同时又提供全局语义。

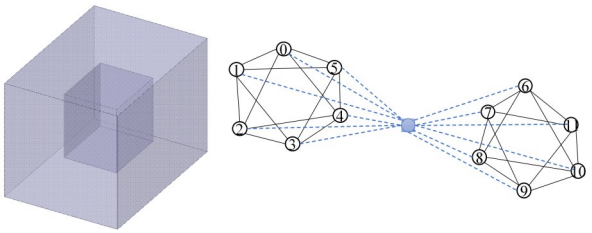

图5 面邻接图添加中心节点示意图
Fig.5 Diagram of adding a central node to a face adjacent graph

本文通过python-OCC API从B-Rep表示的几何实体中提取其拓扑与几何特征，并对这些特征进行编码，从而构建属性邻接图。该图结构将作为GAT训练过程和使用GAT代理模型进行几何类别预测时的输入数据。因此，属性邻接图的构建在整个模型检索流程中具有核心地位，其质量直接影响GAT模型的预测准确性及后续CSG几何描述的复用效果。

1.2.2 图分类代理模型架构与训练

1）图注意力网络

图神经网络（Graph Neural Networks，GNNs）是一类能够对图结构数据进行建模与推理的深度学习模型，在图像分类、语义分割、分子结构识别等工程领域得到了广泛应用。与传统神经网络不同，GNNs

表2 属性特征说明
Table 2 Description of attribute characteristics

属性类别 Attribute type	属性名称 Attribute name	说明 Details
几何与类型属性	面类型	平面、圆柱面、球面、锥面等
Geometric type	Face type	Plane, cylindrical surface, spherical surface, conical surface, *etc*.
曲率特征	面的凹凸性	凸面、凹面、平面
Curvature feature	Convexity/concavity	Convex, concave, planar
拓扑关系	面与实体的关系	外部面、内部面、交界面等
Topological relation	Face-entity relationship	Outer face, inner face, interface face, *etc*.
边属性统计	直线边数	面上具有直线边的数量
Boundary statistics	Number of linear edges	Count of edges with straight-line geometry
	圆弧边数	面上具有圆弧边的数量
	Number of circular arcs	Count of edges shaped as circular arcs
	椭圆弧边数	面上具有椭圆弧边的数量
	Number of elliptical arcs	Count of edges shaped as elliptical arcs
	其他边类型数	面上不属于常见类型的边数量
	Number of other edge types	Count of edges with uncommon or irregular geometry
	平滑边数	与相邻面法向连续变化的边数量
	Number of smooth edges	Count of edges with smooth transition in surface normal
	凸边数	形成局部凸角的边数量
	Number of convex edges	Count of edges forming local convex angles
	凹边数	形成局部凹角的边数量
	Number of concave edges	Count of edges forming local concave angles

能够捕捉图节点之间的复杂拓扑关系，通过特征聚合实现对全局结构的理解。GAT是GNNs的一种变体，它引入了注意力机制来学习节点之间的非均匀重要性，节点i和节点j之间的权重通过式(2)计算获得。在GAT中，每个节点在聚合邻居特征时，会根据自适应学习的注意力权重调整不同邻居对其影响的程度，从而提高模型对局部图结构差异的表达能力。文献中的实验评估结果显示GAT在测试节点上的平均分类准确率优于GCN。

$$\alpha_{ij}=\frac{\exp\left(\text{LeakyReLU}\left(\vec{a}^{T}[\boldsymbol{W}\vec{h}_i\|\boldsymbol{W}\vec{h}_j]\right)\right)}{\sum_{k\in N_i}\exp\left(\text{LeakyReLU}\left(\vec{a}^{T}[\boldsymbol{W}\vec{h}_i\|\boldsymbol{W}\vec{h}_k]\right)\right)} \tag{2}$$

式中：$\boldsymbol{W}$和$\vec{a}$是可训练的矩阵和向量；N_i是节点i的一阶邻居节点；$\vec{h}_i$是节点i的高维特征向量；上标T是转置操作；$\|$是拼接操作，LeakyReLU是非线性激活函数。

在B-Rep模型的CSG重用问题中，传统基于几何参数和拓扑规则的相似性判定方法往往依赖严格的参数阈值，难以在复杂结构和多样性连通关系下保持稳定性和泛化能力。而B-Rep模型天然具有图结构特征，图神经网络能够通过节点与边特征的聚合有效捕捉几何与拓扑的关联关系，从而在全局层面实现更鲁棒的相似性判定。相比GCN等均匀聚合的模型，本文采用的图注意力网络在邻接节点特征聚合时引入注意力机制，可自适应地分配邻接节点的重要性，使模型在处理复杂或部分连通的CAD模型时更具区分力和表达能力。

因此，本文基于文献[17]的扩展属性邻接图，构建了以B-Rep表示为基础的几何–拓扑混合属性图，将每个拓扑面作为图节点，并提取其几何类型、面与实体的关系、边属性等信息作为节点与边的特征输入。在此基础上，引入GAT模型对图结构进行分类学习，使网络能够根据局部子结构的几何语义关系进行判别。为进一步增强图结构中的语义表达能力，使其适用于实体部分连通但非简单连通CAD模型的描述，本文还引入了边特征作为注意力机制的辅助输入，使网络能够基于不同类别的拓扑连接精细调整节点之间的特征传递方式，从而提升了分类性能和结构识别精度。

2）代理模型架构与训练策略

本文研究基于图注意力网络的图级别分类方法，用于对B-Rep表示的CAD模型进行几何类别识别。每个图对应一个三维几何实体，图结构即§2.2所述的属性邻接图，其中引入了“中心节点”以增强图的结构表达能力。为防止标签信息泄露，所有图的节点与边特征仅从拓扑属性中提取，不包含任何与类别标签直接相关的信息。类别标签仅在模型训练和评估阶段参与监督。

所采用的网络架构由两层GAT卷积层构成，每层包含64个隐藏单元。各卷积层后依次连接ReLU激活函数、Dropout（设为0.5）、全局平均池化以及全连接分类层，整体网络结构如图6所示。

训练过程采用Adam优化器，初始学习率设为0.001，权重衰减系数为1×10^{-4}。损失函数选用适用于图分类任务的交叉熵损失（Cross-Entropy Loss），在本文研究中输入的每个图结构会被分类为某一类别，交叉熵可以量化预测类别与真实类别之间的偏差。为了提升训练稳定性，引入最大范数为1.0的梯度裁剪机制（Gradient Clipping），并采用基于验证集准确率的早停策略（Patience=20），以防止模型过拟合。此外，为提高训练效率并适配大规模图数据集，本文使用了PyTorch Geometric提供的小批量（mini-batch）图训练机制，批大小设为16。

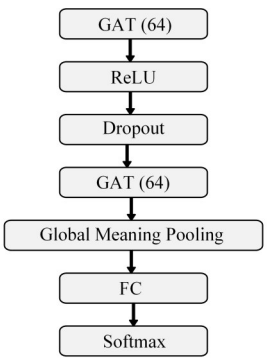

图6　网络架构示意图
Fig.6　Diagram of network architecture

1.3　相似几何的CSG重用方法

代理模型对待转换的新几何模型E_{target}的预测类别与几何模型数据库中的实体E_{lib}相对应，将E_{lib}对应的CSG几何描述复用于生成E_{target}的CSG几何描述，包括刚体变换和CSG表达式生成两个关键步骤。

1.3.1　刚体变换

刚体变换过程需要解析B-Rep数据结构并执行三维几何计算，主要包括计算惯性主轴与质心、进行刚体变换等。本研究采用python-OCC API实现这些功能。计算将目标实体E_{target}对齐至E_{lib}的惯性坐标系的变换矩阵$\boldsymbol{T}$，见式(3)：

$$\boldsymbol{T}=\begin{bmatrix}R_{\text{target}} & \boldsymbol{t}\\ 0 & 1\end{bmatrix} \tag{3}$$

式中：R_{target}为主轴之间的旋转矩阵；$\boldsymbol{t}$为平移向量。

$$R_{\mathrm{target}}=\begin{bmatrix}\xi_{1_\mathrm{lib}} & \xi_{2_\mathrm{lib}} & \xi_{3_\mathrm{lib}} & r_{\mathrm{c_lib}}\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\xi_{1_\mathrm{target}} & \xi_{2_\mathrm{target}} & \xi_{3_\mathrm{target}} & r_{\mathrm{c_target}}\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{bmatrix}^{-1} \tag{4}$$

式中：ξ_{1_lib}、ξ_{2_lib}和ξ_{3_lib}为参考模型E_{lib}的惯性主轴；ξ_{1_target}、ξ_{2_target}和ξ_{3_target}为待转换模型E_{target}的惯性主轴；$r_{\mathrm{c_lib}}$与$r_{\mathrm{c_target}}$分别表示参考模型E_{lib}与待转换模型E_{target}的质心坐标。

1.3.2 CSG表达式生成

对目标实体E_{target}应用刚体变换后得到中间实体E_{mid}，通过中间实体的几何信息生成目标实体的CSG描述。本文依据蒙卡程序构建多个具有相同几何结构但空间位置不同的栅元的思想，在Cell卡中添加TRCL=(...)字段，通过指定几何变换参数来表示目标实体的位置和朝向。具体步骤如下：

1）CSG表达式复用。从几何模型数据库中复制实体E_{lib}的CSG表达作为中间实体E_{mid}的CSG表达，此过程称为“复用”；

2）几何参数提取与Surface卡生成。利用python-OCC API提取中间实体E_{mid}所包含每个拓扑面的几何参数，并按照蒙卡程序格式输出对应的面（Surface）卡，确保几何信息完整无误；

3）变换信息添加。在中间实体E_{mid}的Cell卡基础上，添加目标实体E_{target}的空间变换信息（即TRCL卡），从而生成符合蒙卡程序输入格式的目标实体E_{target}的完整几何定义。

通过在数据准备阶段的模型标准化操作，可以确保复用过程中相似实体之间的面位置关系与节点编号保持一致，从而保证目标实体的CSG几何描述逻辑正确、结构简洁，便于后续工程分析人员理解。

2 结果与讨论

2.1 模型训练与预测

本文制作的数据集中所有样本均来源于中国聚变工程实验堆（China Fusion Engineering Test Reactor，CFETR）三维模型，并根据几何结构与拓扑特征划分为15类，包括内外包层、偏滤器及支撑结构等的零部件，每类包含15~30个样本，相对均衡。所有样本均不包含螺纹、倒角等细节特征。该数据集可以根据应用场景进行扩充。目前，鉴于数据集规模较小，本文采用了5折交叉验证以提高评估结果的可靠性，将数据集划分为5份，轮流用其中一份做测试，其余做训练和验证。训练过程中使用早停机制，在迭代156次后，第2折的预测准确率最优，其训练和评估过程的Loss曲线变化如图7所示，最终评估指标为各折结果的平均值，在测试集上的预测准确率达到92.68%，展示了GAT网络模型极好的分类能力。硬件配置为Intel Xeon Gold 6258R CPU处理器（2.70 GHz），操作系统为CentOS Linux 7。

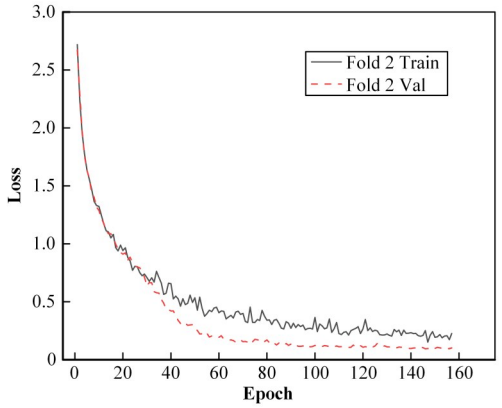

图7 第2折的训练和评估Loss曲线

Fig.7 The training and evaluation Loss curves in the second fold

2.2 应用测试

基于§2.1中训练得到的图分类代理模型，首先对CFETR设计阶段的#3内包层和#9外包层几何模型进行了类别预测。由于这两块包层结构在内部区域数量上存在差异，因此被归类为两个不同的几何类别。随后，分别检索几何模型数据库中与之匹配的包层实例，重用其对应的CSG几何描述，构建出#3和#9包层的CSG模型，并绘制其纵向截面图。以#3包层为例，如图8所示，展示了通过复用几何模型数据库中包层实例的CSG几何描述得到其CSG几何描述。其中，图8(a)是几何模型数据库中的单个包层模块的CSG几何描述示意，图8(b)是待转换的#3内包层CAD模型，图8(c)是本文方法生成的#3内包层的CSG几何描述对应的纵向截面图，图8(d)是本文方法得到的#3内包层的CSG几何描述示意。图9则显示了#9包层的相应结果。可以看出，本文方法成功实现了几何检索与CSG几何描述的准确复用，所生成的CSG几何描述在结构上与原CAD模型保持高度一致，体积相对偏差均小于0.001%，验证了本文方法在复杂包层几何处理中的有效性与可行性。

随后，利用NECP-MCX程序和所生成的CSG模型对两种包层模块分别进行中子学分析，计算Li区的氚增值比（Tritium Breeding Ratio，TBR）。采用高斯分布的14.1 MeV中子体源，设置反射边界条件，模拟粒子数为10^5。同时，将基于传统B-Rep→CSG转换方法获得的CSG几何描述在相同物理设置下进行对比计算。最终，基于两种辅助建模方法

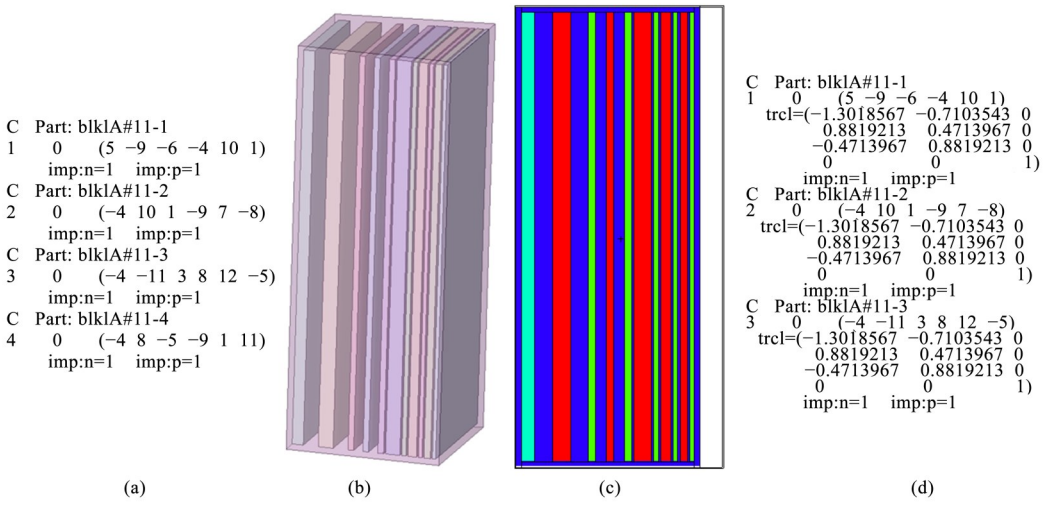

图8 #3内包层的CAD模型和CSG重用结果（彩图见网络版）
(a) 历史CSG几何描述，(b) #3 CAD模型，(c) 复用CSG几何纵向截面图，(d) 复用CSG几何描述
Fig.8 The CAD model of the #3 inner blanket module and CSG reuse results (color online)
(a) Historical CSG geometry description, (b) #3 CAD model, (c) Longitudinal section view of reused CSG geometry, (d) Reused CSG geometry description

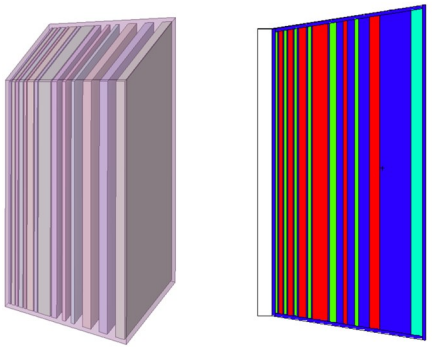

图9 #9外包层的CAD模型和CSG重用结果（彩图见网络版）
(a) #9 CAD模型，(b) 复用CSG几何纵向截面图
Fig.9 The CAD model of the #9 outer blanket module and CSG reuse results (color online)
(a) #9 CAD model, (b) Longitudinal section view of reased CSG geometry

得到的单块包层的TBR如表3所示。结果表明，两种方法所得TBR值基本一致，相对偏差均小于0.5%。偏差主要源于在向自动生成的CSG几何描述文件中手动添加体源栅元时产生的位置误差。

在不计入图分类代理模型训练时间的前提下，平均模型检索耗时仅为0.405 ms，展现了良好的运行效率。为进一步验证方法在不同几何复杂度下的适用性，除#3内包层和#9外包层外，还选取了几何结构1和几何结构2进行测试，如图10所示。表4展

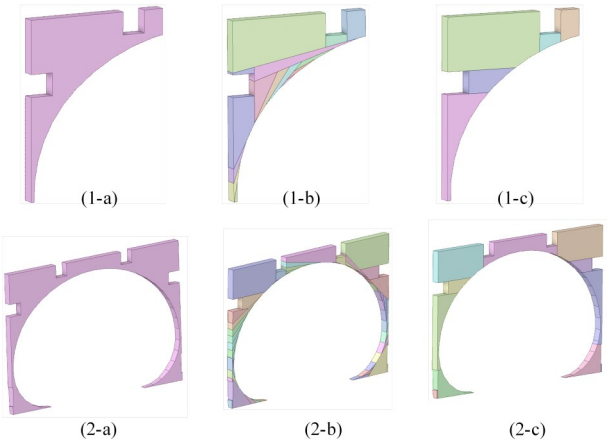

图10 几何结构1和几何结构2上测试结果
(a) 原始CAD模型，(b) 传统转换方法，(c) 本文方法
Fig.10 Test results on geometric structure 1 and geometric structure 2 (a) Original CAD model, (b) Traditional conversion method, (c) Method proposed in this paper

表3 两种辅助建模方法得到的单块包层模型的TBR结果比较
Table 3 Comparison of TBR results of blanket modules obtained by two auxiliary modeling methods

方法 Model	传统B-Rep→CSG转换方法 Traditional B-Rep→CSG conversion method		本文方法 Method proposed in this paper		相对偏差 Relative bias / %
模型 Method	氚增值比 TBR	统计相对标准差 Relative standard deviation / %	氚增值比 TBR	统计相对标准差 Relative standard deviation / %	
#3内包层 #3 inner blanket module	1.249 33	0.25	1.254 76	0.25	0.435
#9外包层 #9 outer blanket module	1.293 52	0.25	1.287 22	0.24	−0.487

示了传统B-Rep→CSG转换方法与本文方法在CSG几何描述生成时间方面的表现。结果显示，对于几何相对简单的#3内包层和#9外包层，本文方法分别比传统方法快14 ms和76 ms，效率优势不明显，但可以完成单块包层模型CSG几何描述的一次性完整复用。而在复杂的几何结构1和几何结构2中，本文方法的转换速度分别提升近8倍和20倍。进一步对比图10中两种方法的结果可见，传统方法生成的CSG几何描述存在严重碎片化，栅元数量大，而本文方法生成的CSG结果更加规整简洁，更有利于后续蒙卡程序的粒子输运计算，是高质量的CSG几何。其关键在于，本文方法通过§1.3的相似几何重用策略，直接复用了模型数据库中蕴含历史工程经验的相似几何模型的CSG描述。综上所述，本文方法在处理复杂几何模型时展现出显著时间优势和质量更高的几何转换效果，体现了其在大规模几何建模任务中的实用价值。

表4　CSG表达生成时间比较
Table 4　Comparison of CSG expression generation time

模型Model	方法Method / ms	
	传统B-Rep→CSG转换方法 Traditional B-Rep→CSG conversion method	本文方法 Method proposed in this paper
#3内包层 #3 inner blanket module	244	230
#9外包层 #9 outer blanket module	316	240
几何结构1 Geometric structure 1	500	60
几何结构2 Geometric structure 2	3 780	190

3　结语

本文发展了一种面向蒙卡程序中子学计算的辅助建模方法，用于实现B-Rep表示复杂几何结构向CSG几何描述的高效转换。该方法结合图注意力网络与属性邻接图，实现了三维CAD模型的图级分类与CSG表达复用。通过引入基于惯性主轴坐标系的标准化预处理构建属性邻接图，统一了几何模型的节点顺序与特征表达，为图分类代理模型提供了稳定且可泛化的输入基础。

在聚变堆建模测试中的结果表明，本文方法不仅在图分类精度上表现良好，达到92.68%，而且在几何复用效率和CSG几何描述质量方面相较传统转换方法展现出优势。同时，在CFETR典型包层模块建模任务中，自动生成的CSG描述与原始模型高度一致，TBR偏差低于0.5%，表明本方法具备良好的工程适应性和准确性。下一步将结合模型预处理和传统转换方法扩充几何模型数据库，将本文方法应用于更多复杂几何建模场景。

作者贡献声明　申靖文负责方法研究，计算分析，起草文章；曹良志负责课题方法论，文章审阅，经费/技术支持；贺清明负责课题指导讨论，蒙卡程序支持；尹苗负责研究数据讨论；曹启祥负责材料支持。

参考文献

1　Tautges T J, Wilson P P H, Kraftcheck J, *et al*. Acceleration techniques for direct use of cad-based geometries in monte carlo radiation transport[C/OL]. 2009. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:64465272.

2　Du K. CAD-based geometry representations for Monte Carlo fusion neutronics methods and CSG *vs*. DAGMC performance tradeoffs in OpenMC[D/OL]. Massachusetts Institute of Technology. 2024[2025-09-18]. https://dspace.mit.edu/handle/1721.1/157233.

3　Shen P, Liang J, Liu S, *et al*. Implementation and verification of the DAGMC module in Monte Carlo code RMC: Volume 2: Nuclear fuel and material, reactor physics and transport theory, and fuel cycle Technology [M/OL]. 2022. DOI: 10.1115/ICONE29-93103.

4　仲港其, 徐坤, 陆玉东, 等. DAG-OpenMC在聚变中子学分析中的应用研究[J]. 核技术, 2022, **45**(5): 050602. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2022.hjs.45.050602.
ZHONG Gangqi, XU Kun, LU Yudong, *et al*. Study on application of DAG-OpenMC in fusion neutronics analysis[J]. Nuclear Techniques, 2022, **45**(5): 050602. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2022.hjs.45.050602.

5　Martz R L. The MCNP6 book on unstructured mesh geometry: user's guide for MCNP 6.2.1: LA-UR-18-27630 [R/OL]. Los Alamos National Laboratory (LANL), Los Alamos, NM (United States), 2018[2025-07-02]. https://www.osti.gov/biblio/1467189.

6　Armstrong J C, Kelley K C. Generating MCNP input files for unstructured mesh geometries: LA-UR--20-27139[R/OL]. Los Alamos National Laboratory (LANL), Los

Alamos, NM, 2020[2025-09-18]. https://www. osti. gov/biblio/1660578.

7 Shapiro V, Vossler D L. Construction and optimization of CSG representations[J]. Computer-Aided Design, 1991, **23**(11): 4−20. DOI: 10.1016/0010-4485(91)90095-E.

8 Wang X, Zhang L Y, Shi X M, *et al*. Optimizations and applications in large-scale scenes of Monte Carlo geometry conversion code CMGC[J]. Nuclear Science and Techniques, 2025, **36**(4): 58. DOI: 10.1007/s41365-024-01634-8.

9 罗月童, 孙静, 薛晔. 基于转换特征的三维BREP模型的CSG树自动生成算法[J]. 现代电子技术, 2007, **30**(20): 56–59, 63. DOI: 10.16652/j.issn.1004-373x.2007.20.028.
LUO Yuetong, SUN Jing, XUE Ye. Three-dimensional CSG tree construction from BREP model based on conversion feature[J]. Modern Electronics Technique, 2007, **30**(20): 56 – 59, 63. DOI: 10.16652/j. issn. 1004-373x.2007.20.028.

10 罗月童, 樊晓菁, 俞盛朋, 等. 基于面壳封闭的B-Rep至CSG转换算法[J]. 计算机辅助设计与图形学学报, 2014, **26**(10): 1673−1680.
LUO Yuetong, FAN Xiaojing, YU Shengpeng, *et al*. Face shell shrinking based B-Rep to CSG conversion algorithm [J]. Journal of Computer-Aided Design & Computer Graphics, 2014, **26**(10): 1673−1680.

11 罗月童, 韩承村, 杜华, 等. 基于拉伸特征的B-Rep→CSG转换算法及其应用[J]. 浙江大学学报(理学版), 2021, **48**(2): 151 – 158, 166. DOI: 10.3785/j. issn. 1008-9497.2021.02.003.
LUO Yuetong, HAN Chengcun, DU Hua, *et al*. Stretch feature based B-Rep→CSG conversion algorithm and its application[J]. Journal of Zhejiang University (Science Edition), 2021, **48**(2): 151−158, 166. DOI: 10.3785/j.issn. 1008-9497.2021.02.003.

12 Lu L, Qiu Y F, Fischer U. Improved solid decomposition algorithms for the CAD-to-MC conversion tool McCad [J]. Fusion Engineering and Design, 2017, **124**: 1269 – 1272. DOI: 10.1016/j.fusengdes.2017.02.040.

13 Du H, Luo Y T, Han C C, *et al*. Development of an assistant program for CAD-to-cosRMC modelling[J]. Fusion Engineering and Design, 2020, **157**: 111662. DOI: 10.1016/j.fusengdes.2020.111662.

14 Luo Y T, Du H, Yan Y M. MeshCNN-based BREP to CSG conversion algorithm for 3D CAD models and its application[J]. Nuclear Science and Techniques, 2022, **33** (6): 74. DOI: 10.1007/s41365-022-01063-5.

15 Harb M, Leichtle D, Fischer U. A novel algorithm for CAD to CSG conversion in McCAD[J]. Journal of Nuclear Engineering, 2023, **4**(2): 436 – 447. DOI: 10.3390/jne4020031.

16 王国忠, 程梦云, 龙鹏程, 等. 基于相似性评价的辐射输运计算建模方法研究[J]. 核科学与工程, 2015, **35**(3): 458 – 463. DOI: 10.3969/j.issn.0258-0918.2015.03.010.
WANG Guozhong, CHENG Mengyun, LONG Pengcheng, *et al*. Similarity estimation based improvement of radiation transport simulation modeling [J]. Nuclear Science and Engineering, 2015, **35**(3): 458 – 463. DOI: 10.3969/j.issn.0258-0918.2015.03.010.

17 周波, 郭正跃, 韩承村, 等. 基于图卷积网络的BREP→CSG转换方法及其应用研究[J]. 图学学报, 2022, **43**(1): 101 – 109. DOI: 10.11996/JG.j.2095-302X.2022010101.
ZHOU Bo, GUO Zhengyue, HAN Chengcun, *et al*. Graph convolution network based BREP→CSG conversion method and its application[J]. Journal of Graphics, 2022, **43**(1): 101 – 109. DOI: 10.11996/JG. j. 2095-302X. 2022010101.

18 Veličković P, Cucurull G, Casanova A, *et al*. Graph attention networks[J/OL]. arXiv preprint arXiv: 1710.10903, 2017. DOI: 10.48550/arXiv.1710.10903.

19 任金才, 徐坤, 叶民友, 等. 中国聚变工程试验堆中子学分析中的GEANT4应用研究[J]. 核技术, 2020, **43**(3): 030604. DOI:10.11889/j.0253-3219.2020.hjs.43.030604.
REN Jincai, XU Kun, YE Minyou, *et al*. Study on the application of GEANT4 for CFETR neutronics analyses [J]. Nuclear Techniques, 2020, **43**(3): 030604. DOI: 10. 11889/j.0253-3219.2020.hjs.43.030604.

20 He Q M, Zheng Q, Li J, *et al*. Overview of the new capabilities in the Monte-Carlo particle-transport code NECP-MCX $V_{2.0}$[J]. EPJ Nuclear Sciences & Technologies, 2024, **10**: 14. DOI: 10.1051/epjn/2024014.