

基于能量密度分布的辐射源粒子空间抽样方法研究

李树 邓力 田东风 李刚

A new sampling method based on radiation energy density for location of radiative source particles

Li Shu Deng Li Tian Dong-Feng Li Gang

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica 63, 239501 (2014) DOI: 10.7498/aps.63.239501

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.239501>

当期内容 View Table of Contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/volumn/home.shtml>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[热辐射输运问题的隐式蒙特卡罗方法求解](#)

李树, 李刚, 田东风, 邓力

2013, 62(24): 249501. 全文: [PDF](#) (375KB)

[金属铁中空位团簇演化行为的相场研究](#)

梁林云, 吕广宏

2013, 62(18): 182801. 全文: [PDF](#) (28739KB)

[Nd: YAG 激光烧蚀裂解加工技术模拟分析与实验研究](#)

于歌杨慎华王蒙寇淑清林宝君卢万春

2012, 61(9): 092801. 全文: [PDF](#) (684KB)

[深空背景下空间目标紫外特性建模方法研究](#)

袁艳, 孙成明, 黄锋振, 赵慧洁, 王潜

2011, 60(8): 089501. 全文: [PDF](#) (1753KB)

基于能量密度分布的辐射源粒子空间抽样方法研究*

李树^{1)†} 邓力¹⁾ 田东风²⁾ 李刚¹⁾

1)(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

2)(中国工程物理研究院, 绵阳 621900)

(2014年4月16日收到; 2014年5月19日收到修改稿)

利用隐式蒙特卡罗方法模拟热辐射光子在物质中的输运过程时, 物质辐射源粒子是需要细致处理的物理量. 传统的物质辐射源粒子抽样方法是体平均抽样方法, 对于大多数问题, 这样处理不会带来大的偏差. 但是对于一些辐射吸收截面大、单一网格内温差显著的问题, 体平均抽样方法的计算结果偏差较大. 分析了产生偏差原因, 提出一种基于辐射能量密度分布的辐射源粒子空间位置抽样方法, 并推导了相应的抽样公式以解决此类问题. 数值实验表明, 新方法计算结果明显优于原方法且与解析结果基本一致.

关键词: 隐式蒙特卡罗, 热辐射, 输运, 抽样方法

PACS: 95.30.Jx, 02.70.Uu, 28.52.Av

DOI: 10.7498/aps.63.239501

1 引言

惯性约束聚变、恒星或热核武器中, 温度高达数百万甚至数亿度, 热辐射(以X光为主体, 以下简称“辐射”)传输是能量的主要传递方式, 辐射传输的物理过程可以通过热辐射输运(TRT)方程来描述^[1,2]. 理论研究中, 通过求解TRT方程及与之耦合的物质能量方程可以获得辐射及物质温度的时空分布^[3]. 隐式蒙特卡罗(IMC)方法目前是热辐射输运问题的重要求解方法之一^[4], 对每个离散时间步 $[t_n, t_{n+1}]$, IMC辐射输运方程和物质能量方程如下^[4,5]:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I + \sigma_{a,n} I \\ &= \frac{1}{4\pi} \sigma_{ea,n} b_n c U_{\gamma,n} \\ &+ \frac{1}{4\pi} \zeta_n \iint \sigma_{ea,n} I d\boldsymbol{\Omega}' d\nu' + Q_n, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & T_{n+1}(\mathbf{r}) \\ &= T_n(\mathbf{r}) + \frac{f_n}{c_{v,n}} \left[\int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \iint \sigma_{a,n} \right. \\ & \quad \times I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', \nu', t) d\boldsymbol{\Omega}' d\nu' \\ & \quad \left. - (t_{n+1} - t_n) \sigma_{P,n} c U_{\gamma,n} \right], \end{aligned} \quad (2)$$

式中, 所有带有下标 n 的物理量均表示时间步初始时刻 t_n (或初始 t_0 时刻)的物理量, 且为已知量; $I = ch\nu n(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t)$, 为辐射强度, 其中, $n(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t)$ 为相空间 $(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t)$ 的光子数密度, c 为光速, h 为普朗克(Planck)常数, ν 为光子频率, t 为时间; $\sigma_{a,n}$ 为吸收不透明度系数; $\sigma_{ea,n} = f_n \sigma_{a,n}$, 为有效吸收系数; f_n 为Fleck因子; b_n 为归一辐射普朗克函数; $U_{\gamma,n}$ 为辐射能量密度; ζ_n 为局域再发射谱; $\sigma_{es,n} = (1 - f_n) \sigma_{a,n}$, 为有效散射系数; Q_n 为独立辐射外源; T_n 为物质温度; $c_{v,n}$ 为物质比热; $\sigma_{P,n}$ 为Planck平均自由程. 方程(1)中辐射强度 I 和方

* 国家高技术研究发展计划(批准号: 2012AA01A303)和中国工程物理研究院科学技术发展重点基金(批准号: 2012A0102005)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: li_shu@iapcm.ac.cn

程(2)中 t_{n+1} 时刻的物质温度 T_{n+1} 是待求未知变量. 方程(1)与方程(2)已经解耦, 可以依次独立求解[5].

2 传统辐射源粒子抽样方法及其产生的问题

利用IMC方法模拟辐射光子在物质中的产生、输运及消失等物理过程时, 一项很重要的需要细致、严格处理的物理量是辐射源粒子(能量子). 对于由空间网格来界定的某物质块, 其在某个离散时间步内的辐射源粒子通常来自以下4个方面[5,6]: 一是物质发射的; 二是独立外源发射的; 三是边界流入的; 四是上一时间步没有跟踪完而遗留在当前物质块内的. 其中, 第一项也称为物质辐射源粒子, 其强度、频率、位置、时间等特征量与物质温度紧密相关. 根据IMC辐射输运方程(1)可知相空间点 $(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t)$ 处的物质辐射源粒子的发射密度:

$$S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t) = \frac{1}{4\pi} \sigma_{\text{ea},n}(\mathbf{r}, \nu) b_n(\nu) c U_{\gamma,n}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

式中, 辐射能量密度(单位体积辐射能量)

$$U_{\gamma,n}(\mathbf{r}) = a T_n(\mathbf{r})^4 \quad (\text{单位为 keV} \cdot \text{cm}^{-3}), \quad (4)$$

其中, a 是辐射常数, $T_n(\mathbf{r})$ 是上一时间步计算获得的物质温度.

通常情况下, 在同一网格内部不考虑温度的空间变化(等温假设), 即(4)式中的 $T_n(\mathbf{r})$ 用网格平均温度 \bar{T}_n 替代. 对(3)式关于相空间 $(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t)$ 积分可得当前网格的物质在当前时间步辐射出的总能量[5]:

$$\begin{aligned} E_{\gamma,n} &= \int_{\mathbf{r} \in \partial D} d\mathbf{r} \int_0^{4\pi} d\boldsymbol{\Omega} \int_0^\infty d\nu \int_{t_n}^{t_{n+1}} \\ &\quad \times \frac{1}{4\pi} \sigma_{\text{ea},n}(\mathbf{r}, \nu) b_n(\nu) c U_{\gamma,n}(\mathbf{r}) dt \\ &= V c f_n \sigma_{\text{P},n} a \bar{T}_n^4 (t_{n+1} - t_n) \end{aligned} \quad (5)$$

(单位为keV),

式中, ∂D 是网格边界, V 是关于 \mathbf{r} 积分后得到的网格体积.

基于此, 网格的物质辐射源粒子的抽样方法: 由(5)式可以确定网格的样本数及粒子出生权(1个粒子代表的能量), 粒子的频率 ν 由 $b_n(\nu)$ 抽样、方向 $\boldsymbol{\Omega}$ 在 4π 空间均匀抽样、粒子时间 t 在离散时间步 $[t_n, t_{n+1}]$ 内均匀抽样、空间位置 $\mathbf{r}(x, y, z)$ 在网格体内均匀(以下称为“体平均”)抽样获得.

国外的IMC辐射输运数值模拟程序MILAGRO[7]及国内的半随机辐射输运数值模拟程序[8]的物质温度采用的是网格平均温度, 因此辐射源粒子的空间抽样为“体平均抽样”方法.

通常情况下, 单一时间步内, 如果网格的大小在几个平均自由程范围之内且网格温差并不显著, 则辐射源粒子在网格内均匀抽样不会给计算结果带来大的偏差. 但是, 对于某些强吸收、温差大的问题, 这样的处理明显不合理并将会使计算结果产生显著偏离. 这里以检验辐射输运计算的Benchmark问题Marshak-2B为例, 具体描述如下[7]: 无限平板, 200层(网格); 每层厚度为0.005 cm; 物质密度为 $3.0 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, 初始物质温度为 10^{-6} keV ; 初始辐射温度为0; 比热为 $10^8 \text{ J}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{keV}^{-1}$; 吸收不透明度系数(或称吸收截面)为 $100 \text{ T}^{-3}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{g}^{-1}$; 辐射源为左端面 $x = 0$ 处1 keV平面黑体辐射源; IMC计算时间步长为0.01 ns.

本问题的辐射吸收截面差异巨大, 例如: 初始温度下对应的Planck平均吸收截面达到 $3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-1}$, 即粒子平均自由程仅为 $3.33 \times 10^{-21} \text{ cm}$, 这远远小于网格尺度; 而接近辐射源温度下对应的Planck平均吸收截面为 300 cm^{-1} , 粒子平均自由程为 $3.33 \times 10^{-3} \text{ cm}$, 这与网格尺度相当. 因此, 对于那些辐射刚传到的或没有被充分加热的网格, 辐射仅能给靠近源的那部分物质提供温度上升的能量, 这就使得同一网格内部的温差非常大. 在此情况下, 前面提到的“在同一网格内部不考虑温度的空间变化”假设将不成立. 图1展示了采用物质辐射源粒子网格内均匀抽样模式计算获得的 $t = 74 \text{ ns}$ 时刻的物质温度空间分布及其与解析结果[7]的比较情况.

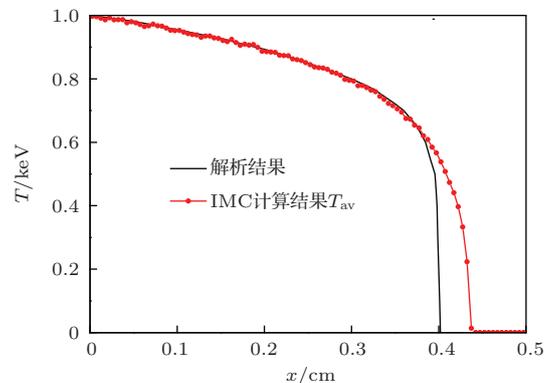


图1 采用IMC方法计算得到的物质辐射源粒子网格内均匀抽样模式下的物质温度空间分布与解析结果的比较

从图 1 可以看出: IMC 方法计算的辐射传播速度偏快, 主要差异在辐射波的波头部分 ($x > 0.35$ cm), 而波后 ($0 < x < 0.35$ cm) 的计算结果符合得较好. 究其原因是: 波前及波头附近的温度低、吸收截面大、网格温差大; 反之, 波后温度高、吸收截面小、网格温度相对较均匀. 对于辐射波头附近的网格, 由于网格温差原因, 物质辐射源粒子实际上应该大部分从后部 (x 值小) 发射出, 但是等温假设下的辐射源体平均抽样方法使得部分应该从本网格后部发射的粒子转移到了前部, 这必然使得辐射传播速度加快.

3 基于辐射能量密度的辐射源粒子抽样方法

通过前面的推导过程及例题分析我们知道, 在网格内温差较大的情况下, 采用物质辐射源粒子网格内均匀抽样模式是不合理的. 考虑到 IMC 方法中物质辐射源粒子的发射密度与辐射能量密度呈正比, 因此, 在源粒子的空间抽样时需要关注辐射能量密度的空间变化. 对于绝大多数问题, 在单一时间步长范围内, 网格内温度的空间变化接近于线性变化, 即便是前面给出的比较极端的 Marshak-2B 问题, 从图 1 所示的解析结果亦可看出, 温度在大部分空间是线性分布的, 仅在波头部分偏离线性变化. 如果辐射波头跨越几个网格, 那么单个网格内的温度也可近似看作线性变化. 下面推导基于辐射能量密度分布的物质辐射源粒子抽样方法(以下简称“新方法”).

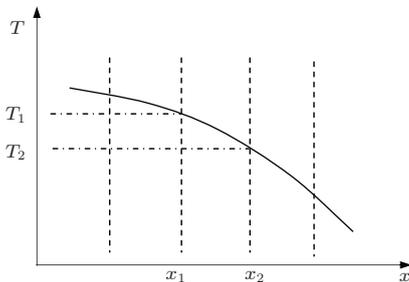


图 2 网格物质温度一维分布示意图

以一维平板问题为例, 假设网格温度沿 x 轴方向线性变化, 网格左边界 x_1 处的温度为 T_1 , 右边界 x_2 处的温度为 T_2 , 如图 2 所示.

显然, 温度沿 x 方向分布可表示为

$$T(x) = kx + b \quad (x \in [x_1, x_2]), \quad (6)$$

式中, $k = (T_2 - T_1)/(x_2 - x_1)$, $b = T_1 - kx_1$.

如果按原来的等温假设, 则辐射源粒子满足空间均匀分布, 其空间 (x 方向) 分布的概率密度函数

$$f(x) = \frac{1}{x_2 - x_1}, \quad (7)$$

满足 (7) 式概率密度函数的 x 随机抽样值为

$$x = x_1 + \xi(x_2 - x_1), \quad (8)$$

式中 ξ 为 $[0, 1]$ 之间的随机数.

如果考虑了温度的空间变化, 则网格辐射能量密度分布

$$U_\gamma(x) = aT(x)^4, \quad (9)$$

那么, 网格物质单位时间、单位体积辐射出的能量(所有频率的光子能量和)

$$E_\gamma(x) = cf_n\sigma_{P,n}aT(x)^4 \quad (\text{单位为 keV} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}). \quad (10)$$

因此在 $[x_1, x_2]$ 范围内, 辐射能量的空间 (x 方向) 分布概率密度函数为

$$f(x) = \frac{cf_n\sigma_{P,n}aT(x)^4}{\int_{x_1}^{x_2} cf_n\sigma_{P,n}aT(x)^4 dx} = \frac{5k(kx+b)^4}{(kx_2+b)^5 - (kx_1+b)^5}, \quad (11)$$

则满足 (11) 式概率密度函数的 x 随机抽样公式:

$$\xi = \int_{x_1}^x f(x') dx'. \quad (12)$$

解析求解 (12) 式得

$$x = \frac{1}{k} \left[(\xi(kx_2+b)^5 + (1-\xi) \times (kx_1+b)^5)^{1/5} - b \right]. \quad (13)$$

同理, 对于二维和三维问题, 只要我们知道网格温度在各个方向的变化斜率 k 和截距 b , 就可以采用上面的相同方法抽样粒子空间位置坐标值.

从计算效率角度来看, (13) 式的抽样计算效率较 (8) 式的抽样计算效率低很多, 因此, 在温差不大的情况下应尽量避免采用 (13) 式抽样.

这里需要特别说明: 采用 (13) 式的抽样方法必须满足“网格内温度在某空间维度上线性变化”假设; 如果温度是二次或更高次的变化规律, 则需重新推导抽样公式, 推导及求解过程将更复杂一些.

4 数值实验

仍然以前面提到的 Marshak-2B 问题为例, 本文分别针对辐射源粒子的两种抽样方法展开了数值模拟研究. 图 3 为采用两种抽样方法计算得到的 0.51 ns (51 步) 时的温度分布曲线.

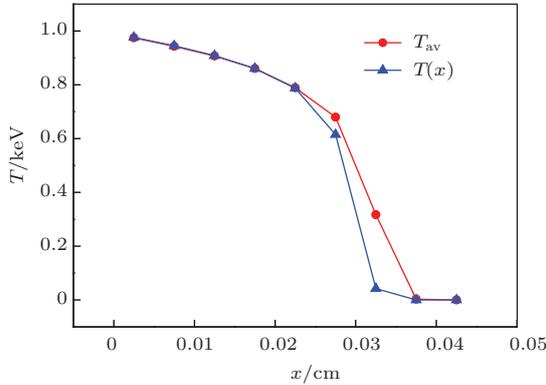


图 3 采用体平均抽样和新方法抽样得到的 0.51 ns 时刻的物质温度空间分布比较

从图 3 可以看出, 采用体平均抽样 (T_{av} 曲线) 计算的辐射传播速度明显快于采用新方法抽样 ($T(x)$ 曲线) 得到的计算结果.

接下来我们分析了模拟中的各网格的粒子平均抽样位置. 分别统计各个网格的物质辐射源粒子 x 抽样值, 然后取其平均值, 具体结果如图 4 所示.

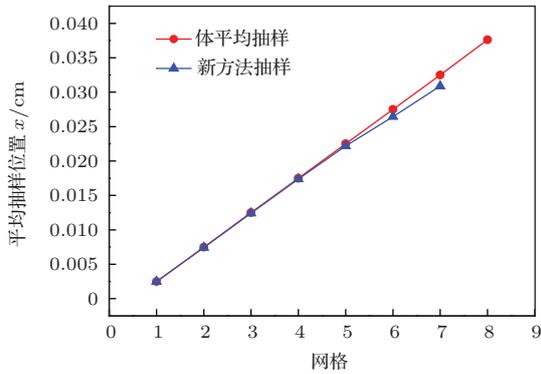


图 4 各网格的粒子平均抽样位置 (x 值) 比较

从图 4 可以看出: 对于体平均抽样, 辐射源粒子的平均位置位于网格中心; 采用了新方法抽样的辐射源粒子的平均位置情况则不同, 位于后面的 4 个网格 (网格 1—4) 的粒子平均位置也基本位于网格中心, 但是靠近辐射波头网格的粒子平均位置则在网格中心之后 (抽样平均 x 值小于网格中心的坐标值), 且越接近辐射波波头这种偏离越明显.

进一步, 我们分析单一网格内的 x 抽样值分布状况. 将网格等分为 20 份, 分别统计每份的源粒子抽样数目, 进而计算出 20 份的实际抽样概率密度 (离散) 值. 图 5 和图 6 分别为第四、七个网格的 x 抽样值概率密度分布.

从图 5 和 6 可以看出: 对于体平均抽样, 每份的概率密度值均接近于理论值 0.05; 而对于新抽样方法, 每份的概率密度值则呈递减趋势, 网格 4 的内部温差相对较小, 故每份的辐射源粒子抽样概率与理论值 0.05 偏离不大 (图 5); 网格 7 位于辐射波的波头部分, 网格内部温差显著, 源粒子空间抽样概率相差很大 (图 6), 绝大多数粒子位于网格后部, 且网格内抽样概率呈 4 次方递减趋势.

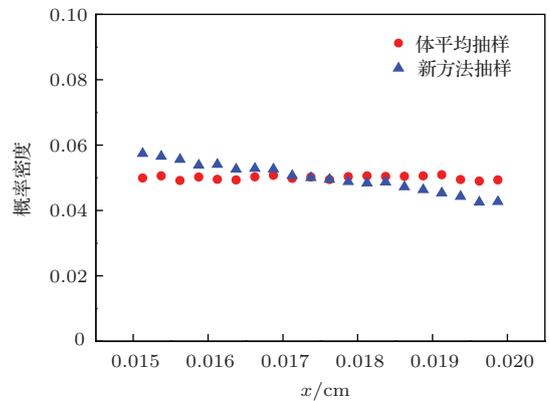


图 5 网格 4 源粒子空间抽样分布

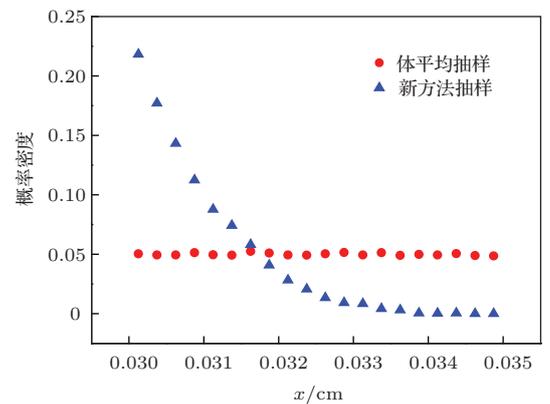


图 6 网格 7 源粒子空间抽样分布

上面的数值模拟结果及分析表明: 新方法体现了“温度越高, 辐射能量密度越大, 辐射源粒子发射越多”的物理规律. 在此基础上, 本文采用新方法模拟了 Marshak-2B 问题 (74 ns) 并与原方法及解析结果进行了对比. 如图 7 所示, 采用新方法的模拟结果 ($T(x)$ 曲线) 明显优于原方法结果 (T_{av} 曲

线), 且其与解析结果基本一致.

新方法的源粒子抽样复杂一些, 计算时间较原方法有所增加. 但由于 MC 模拟计算耗时主要在跟踪输运过程中, 因此, 总体上增加的机时并不显著.

但是, 从图 7 可以看出: 新方法给出的辐射波头部分与解析结果仍然存在一些差异, 估计主要原因在于: 本方法的“网格内温度在某空间维度上线性变化”条件在波头部分有偏离所致. 解决此问题的关键点在于根据波头网格的准确温度分布设计源粒子抽样方法. 可以考虑两种较准确的温度分布形式: 1) 采用多项式拟合函数给出波头网格温度; 2) 给出波头网格温度的分段 1 次函数. 然而, 两种方法在实际模拟算法设计中都存在较大的难度: 如何合理高效预估网格内温度分布; 辐射波头捕捉技术; 复杂温度分布 (辐射能量密度分布) 情况下的源粒子位置抽样方法及计算效率等. 因此, 有待进一步针对此类问题继续研究.

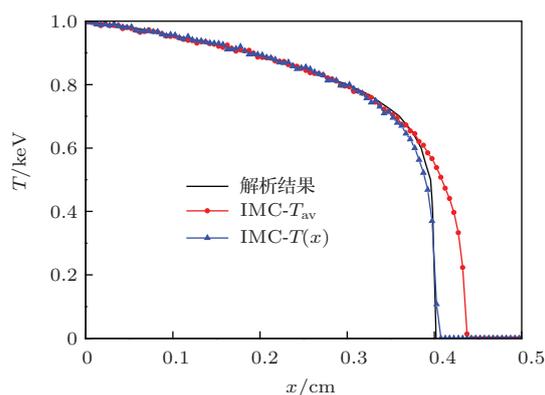


图 7 74 ns 时刻的物质温度空间分布比较

另外, 对于非平衡性更强的系统, 如果温度场的空间变化更加复杂, 即单一网格内的温度分布不能用线性或近似线性来描述, 则不能仅仅通过源粒子的空间抽样优化来解决此类问题. 原因之一, 辐射参数与网格的物质温度密切相关; 原因之二, 即便能通过多项式拟合或样条函数给出温度分布, 但是抽样将会非常复杂. 因此, 针对此类问题比较可

行的办法是精细划分网格, 或者是根据温度场分布适时调整网格 (重新划分网格), 此类方法在本文暂不讨论.

5 结 论

本文分析了“强吸收、温差大”问题情况下, 辐射源粒子采用体平均抽样方法的不合理性及其对计算结果的影响. 提出了一种基于辐射能量密度分布的辐射源粒子抽样方法, 该方法能够更加真实地体现辐射粒子的发射规律. 数值实验表明, 新方法能够有效解决原方法计算“强吸收、温差大”问题时出现的辐射传播速度明显超快问题, 模拟结果与解析结果基本一致. 本方法对提高重介质 (如金、铀) 中辐射传输的 IMC 方法模拟计算精度有较大帮助. 下一步将开展针对辐射波头的更加精确的辐射源粒子抽样方法.

参考文献

- [1] Zhang J, Chang T Q 2004 *Fundamentals of the Target Physics for Laser Fusion* (Beijing: National Defense Industry Press) p1 (in Chinese) [张均, 常铁强 2004 激光核聚变靶物理基础 (北京: 国防工业出版社) 第 1 页]
- [2] Bowers R L, Wilson J R 1991 *Numerical Modeling in Applied Physics and Astrophysics* (Boston: Jones and Bartlett Publishers) p347
- [3] Peng H M 2008 *Radiation Transport and Radiation Hydrodynamics in Plasmas* (Beijing: National Defense Industry Press) p38 (in Chinese) [彭惠民 2008 等离子体中辐射输运和辐射流体力学 (北京: 国防工业出版社) 第 38 页]
- [4] Fleck J A, Cummings J D 1971 *J. Comput. Phys.* **8** 313
- [5] Wollaber A B 2008 *Ph. D. Dissertation* (Ann Arbor: University of Michigan)
- [6] Li S, Li G, Tian D F, Deng L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 249501 (in Chinese) [李树, 李刚, 田东风, 邓力 2013 物理学报 **62** 249501]
- [7] Evans T M, Urbatsch T J 2002 *MILAGRO: A Parallel Implicit Monte Carlo Code for 3-D Radiative Transfer* (Los Alamos: Los Alamos National Laboratory) NM 87545
- [8] Feng T G, Lai D X 1996 *Sci. China: E* **39** 461

A new sampling method based on radiation energy density for location of radiative source particles*

Li Shu^{1)†} Deng Li¹⁾ Tian Dong-Feng²⁾ Li Gang¹⁾

1) (*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China*)

2) (*China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*)

(Received 16 April 2014; revised manuscript received 19 May 2014)

Abstract

When using the implicit Monte Carlo method to simulate the thermal radiative photon transfer in materials, the radiative source particles emitted by the material should be treated carefully. In traditional sampling method for the location of radiative source particles can be regarded as uniform in a single cell, and this is reasonable for most of thermal radiative transfer problems. But it may result in unacceptable error in the problem which has a large absorption cross-section and remarkable temperature difference in a single cell. The reason for this error is discussed in this paper. A new method based on radiation energy density distribution is proposed and the sampling formula is derived. Numerical test indicates that the new method will give results much better than the old method and in agreement with the analytical results.

Keywords: implicit Monte Carlo method, thermal radiative, transfer, sampling method

PACS: 95.30.Jx, 02.70.Uu, 28.52.Av

DOI: [10.7498/aps.63.239501](https://doi.org/10.7498/aps.63.239501)

* Project supported by the National High Technology Research and Development of China (Grant No. 2012AA01A303) and the Key Foundation of Science and Technology Development of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2012A0102005).

† Corresponding author. E-mail: li_shu@iapcm.ac.cn