

热辐射输运问题的高效蒙特卡罗模拟方法

许育培 李树

An efficient Monte Carlo simulation method for thermal radiation transport

Xu Yu-Pei Li Shu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 69, 029501 (2020) DOI: 10.7498/aps.69.20191315

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191315>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于蒙特卡罗-离散纵标方法的氘氚激光等离子体聚变反应率数值模拟

Numerical simulation of deuterium-tritium fusion reaction rate in laser plasma based on Monte Carlo-discrete ordinate method

物理学报. 2019, 68(21): 215201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190440>

流注放电低温等离子体中电子输运系数计算的蒙特卡罗模型

Monte Carlo simulations of electron transport coefficients in low temperature streamer discharge plasmas

物理学报. 2017, 66(19): 195101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.195101>

基于蒙特卡罗方法的4H-SiC(0001)面聚并台阶形貌演化机理

Formation of step bunching on 4H-SiC (0001) surfaces based on kinetic Monte Carlo method

物理学报. 2019, 68(7): 078101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182067>

光子与相对论麦克斯韦分布电子散射截面的蒙特卡罗计算方法

Monte Carlo method for computing relativistic photon-Maxwellian electron scattering cross sections

物理学报. 2018, 67(21): 215201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180932>

氧空位迁移造成的氧化物介质层时变击穿的蒙特卡罗模拟

Monte Carlo simulation of time-dependent dielectric breakdown of oxide caused by migration of oxygen vacancies

物理学报. 2017, 66(21): 217701 <https://doi.org/10.7498/aps.66.217701>

平面团簇稳定结构的蒙特卡罗树搜索

Monte-Carlo tree search for stable structures of planar clusters

物理学报. 2017, 66(16): 163601 <https://doi.org/10.7498/aps.66.163601>

热辐射输运问题的高效蒙特卡罗模拟方法*

许育培¹⁾²⁾ 李树^{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研究生院, 北京 100088)

(2019年8月31日收到; 2019年10月30日收到修改稿)

惯性约束聚变研究中, 热辐射光子在介质中的输运以及热辐射光子与介质的相互作用是重要研究课题, 蒙特卡罗方法是该类问题的重要研究手段之一. 隐式蒙特卡罗方法虽然能正确地模拟热辐射在介质中的输运过程, 但当模拟重介质 (材料的吸收系数大) 问题时, 该方法花费的计算时间将变得很长, 导致模拟效率很低. 本文以离散扩散蒙特卡罗方法为基础, 开发了“离散扩散蒙特卡罗方法辐射输运模拟程序”, 可以较好地解决重介质区的计算效率问题, 但是离散扩散蒙特卡罗方法在模拟轻介质区时精度不够高. 辐射输运问题中通常既有轻介质也有重介质, 为了能同时解决蒙特卡罗方法模拟的效率和精度问题, 本文研究了离散扩散蒙特卡罗方法与隐式蒙特卡罗方法相结合的模拟方法, 并提出了新的扩散区与输运区界面处理方法, 研制了混合蒙特卡罗方法的辐射输运模拟程序. 典型辐射输运问题模拟显示: 在模拟重介质问题时, 该程序能大幅缩短模拟时间, 且能取得与隐式蒙特卡罗方法一致的结果; 在模拟轻重介质均存在的问题时, 与隐式蒙特卡罗方法相比, 混合蒙特卡罗方法的模拟精度与其相当且计算效率同样能够得到显著提升.

关键词: 热辐射输运, 隐式蒙特卡罗, 离散扩散蒙特卡罗, 界面处理方法**PACS:** 95.30.Jx, 02.70.Uu, 28.52.Av**DOI:** 10.7498/aps.69.20191315

1 引言

惯性约束聚变 (inertial confinement fusion, ICF) 中, 热辐射 (X 光波段) 扮演着重要的角色. 间接驱动 ICF 中, 黑腔壁产生的热辐射光子烧蚀驱动飞层对热核材料进行压缩, 产生高温高密度的等离子体, 实现聚变点火. 因此, 热辐射光子在介质 (材料) 中的输运以及热辐射光子与介质的相互作用是 ICF 的重要研究课题之一.

在辐射输运过程中, 辐射光子与物质的相互作用很复杂, 辐射强度和物质温度强耦合, 描述辐射场时空演化的辐射输运方程组是非线性的^[1], 只能用数值方法求解实际的热辐射输运问题. 蒙特卡罗 (Monte Carlo, MC)^[2,3] 方法是常用的求解粒子

输运问题的数值方法. 传统的显式蒙特卡罗方法基于与时间相关的、非线性的辐射输运方程, 通过随机抽样来确定粒子的吸收、散射与发射, 以迭代的方式模拟热辐射输运过程^[4]. 然而, 当物质的吸收系数较大或系统接近热力学平衡态时, 传统的显式蒙特卡罗法的模拟结果存在严重的涨落和能量不平衡等问题^[5].

为解决传统蒙特卡罗方法存在的问题, Fleck 和 Cummings^[6] 提出了隐式蒙特卡罗 (implicit Monte Carlo, IMC) 方法. 该方法天然具有无条件稳定性, 较传统的显式蒙特卡罗方法更稳定, 精度、效率更高. 然而, 当系统的吸收系数变得更大时, IMC 方法会出现计算时间过长的问题, 导致模拟效率低下. 为了提高模拟效率, Fleck 和 Canfield^[7] 基于概率方法首先提出“随机游走法” (random

* 中国工程物理研究院于敏基金 (批准号: FZ025) 和国家自然科学基金 (批准号: 11775033, 11775030) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: li_shu@iapcm.ac.cn

walk, RW), Giorla 和 Sentis^[8] 基于扩散方程推导了 RW 方程, 建立了以粒子所在位置为球心的球形子区域以及判据, 当判据满足时, 球形子区域内粒子的多次散射过程将由一个扩散过程代替, 从而有效提高了模拟效率. 然而, 球形子区域的半径有最小值 (其半径不能小于数倍粒子平均自由程), 当粒子接近边界时, 球形子区域半径与粒子平均自由程的关系将不再满足, RW 方法将失效, 只能转用 IMC 方法运输. 因此, 若吸收系数不够大, 或系统网格划分较小, RW 模拟辐射运输的效率提高则不明显. 20 世纪 90 年代, Urbatsch 等^[9] 首次提出离散扩散蒙特卡罗 (discrete diffusion Monte Carlo, DDMC) 方法. DDMC 方法从离散的扩散方程出发, 把 IMC 方法中的多次散射过程替换成一个扩散过程, 在保证相同精度的前提下, 很大程度上提高了辐射运输模拟的效率. 之后, Evans 等^[10] 推导出平衡态下的 DDMC 方法; Gentile^[11] 对扩散方程进行空间和时间离散, 得到矩阵方程, 推导出二维的时间、空间离散 DDMC 方法; Densmore 等^[12,13] 对扩散方程进行空间离散, 进而推导出二维的时间连续、空间离散 DDMC 方法; Cleveland 等^[14] 提出多群 DDMC (原作者称其为 implicit Monte Carlo diffusion, IMD) 方法, 以解决与频率相关的热辐射运输问题; Densmore 等^[15] 基于频率积分扩散方程, 开发了与频率有关的 DDMC 新方法.

国外已有基于 DDMC 方法开发的数值模拟程序, 并与 IMC 方法结合以求解热辐射运输问题, 但由于问题的敏感性, 国外 DDMC 方法模拟程序实现的关键环节及程序代码并未对外公开. 经过多年努力, 国内已开发出较成熟的 IMC 方法辐射运输模拟程序^[16], 且已经成功用于 ICF 方法实验的模拟与分析^[17], 但是至今未有基于 DDMC 方法的辐射运输模拟程序. 因此有必要独立开展 DDMC 方法研究并开发相应的数值模拟程序, 应用于 ICF 方法相关课题研究中. 本文在 DDMC 方法基础上, 解决了 DDMC 粒子 (用 DDMC 运输的粒子) 运输模拟的关键技术, 研制了 DDMC 方法辐射运输模拟程序, 研究了 DDMC 与 IMC 方法的耦合方法, 并提出一种新的界面处理方法, 进而研制了 DDMC-IMC 程序. 该程序能准确且高效地模拟不同光性厚度介质中的热辐射运输问题.

2 DDMC 方法及数值模拟流程设计

下面以一维平板问题为例, 介绍 DDMC 方法的主要思想并推导相应的数学方程. 考虑一维、均匀、无独立外源的无限平板, 热辐射运输方程及能量方程^[6,18] 为

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \mu \frac{\partial I}{\partial x} + \sigma I = \frac{1}{2} \sigma a c T^4, \quad (1a)$$

$$C_v \frac{\partial T}{\partial t} = \int_{-1}^1 \sigma \left(I - \frac{1}{2} a c T^4 \right) d\mu, \quad (1b)$$

其中, I 为辐射强度, t 为时间变量, c 为真空中的光速, μ 为粒子运动的方向余弦, x 为空间变量, σ 为介质的吸收系数, a 为辐射常数, T 为介质温度, C_v 为介质比热.

将平板网格化, 即 $0 = x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_I$, x_1, x_2, \dots, x_I 为网格边界所在的位置, 每个网格中的位置变量满足 $x_i < x < x_{i+1}$; 将时间离散化, 即 $0 = t_1 < t_2 < t_3 < \dots < t_N$, t_1, t_2, \dots, t_N 为各个时间步结束的时刻, 每个时间步中的时间变量满足 $t_n < t < t_{n+1}$. 应用 IMC 方法后, 方程 (1) 改写为^[6]

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \mu \frac{\partial I}{\partial x} + \sigma_n I \\ & = \frac{1}{2} \sigma_{es,n} \int_{-1}^1 I(x, \mu, t) d\mu + \frac{1}{2} \sigma_{ea,n} a c T_n^4, \end{aligned} \quad (2a)$$

$$C_v \frac{\partial T}{\partial t} = \int_{-1}^1 \sigma_{ea,n} \left(I - \frac{1}{2} a c T_n^4 \right) d\mu, \quad (2b)$$

其中带下标 n 的变量表示第 n 个时间步中对应的变量值, σ_{es} 为有效散射系数, σ_{ea} 为有效吸收系数,

$$\sigma_{es} = (1 - f_n) \sigma_n, \quad (3)$$

$$\sigma_{ea} = f_n \sigma_n, \quad (4)$$

$$f_n = \frac{1}{1 + \alpha \beta_n c \sigma_n \Delta t_n}, \quad (5)$$

$$\beta_n = \frac{4U_{r,n}}{U_{m,n}}, \quad (6)$$

其中, f 为 Fleck 因子, U_r 为辐射能量密度, U_m 为物质能量密度, Δt 为时间步长.

当介质的吸收系数很大时, 粒子的平均自由程将变得很小, 由方程 (5) 可知, f_n 也将变小, 即有效散射系数 σ_{es} 将接近 σ_n , 而有效吸收系数 σ_{ea} 将接近 0, 因此系统中粒子的散射将占据主导地位. 综上, 在吸收系数很大的情况下, IMC 中粒子的历史

变得过于漫长, 导致计算效率降低.

当散射过程占主导时, 考虑对方程 (2) 进行扩散近似. 方程 (2a) 等式两边对 μ 全角度积分得

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + f_n \sigma_n \phi = f_n \sigma_n a c T_n^4, \quad (7)$$

其中, ϕ 为粒子通量密度, F 为辐射流. 对方程 (7) 中等式左边的空间导数项进行有限差分,

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{F_{i+1/2} - F_{i-1/2}}{\Delta x}, \quad (8)$$

其中, Δx 为网格大小, $F_{i+1/2}$ 和 $F_{i-1/2}$ 分别为第 i 个网格左、右边界的平均辐射流. 因此对于第 i 个网格, 方程 (7) 改写为

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \frac{F_{i+1/2} - F_{i-1/2}}{\Delta x} + f_{n,i} \sigma_{n,i} \phi_i = f_{n,i} \sigma_{n,i} a c T_{n,i}^4, \quad (9)$$

其中 ϕ_i 为网格平均辐射强度.

1) 当 $1 < i < I$ 时, 应用斐克定律 [19,20], 网格边界平均辐射流的表达式为

$$F_{i+1/2} = -\frac{2}{3\sigma_{n,i}\Delta x} (\phi_{i+1/2} - \phi_i), \quad (10)$$

$$F_{i-1/2} = -\frac{2}{3\sigma_{n,i-1}\Delta x} (\phi_{i-1/2} - \phi_i), \quad (11)$$

其中 $\phi_{i+1/2}$ 为网格边界平均辐射强度.

联立方程 (10) 和 (11), 解出 $F_{i+1/2}$ 得

$$F_{i+1/2} = -\frac{2}{3\Delta x(\sigma_{n,i} + \sigma_{n,i+1})} (\phi_{i+1} - \phi_i), \quad (12)$$

类似可得 $F_{i-1/2}$ 的表达式.

将 $F_{i+1/2}$, $F_{i-1/2}$ 代入方程 (9) 中, 得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \frac{\partial \phi_i}{\partial t} + (\sigma_{R,i} + \sigma_{L,i} + f_{n,i} \sigma_{n,i}) \phi_i \\ & = \sigma_{L,i+1} \phi_{i+1} + \sigma_{R,i-1} \phi_{i-1} + f_{n,i} \sigma_{n,i} a c T_{n,i}^4, \end{aligned} \quad (13)$$

式中利用了 $\sigma_{R,i-1} = \sigma_{L,i}$ 的关系, 另外 $\sigma_{L,i}$ 和 $\sigma_{R,i}$ 分别表示第 i 个网格中粒子向左、右相邻网格扩散的截面,

$$\sigma_{L,i} = \frac{2}{3\Delta x^2} \frac{1}{(\sigma_{n,i} + \sigma_{n,i-1})}, \quad (14)$$

$$\sigma_{R,i} = \frac{2}{3\Delta x^2} \frac{1}{(\sigma_{n,i} + \sigma_{n,i+1})}. \quad (15)$$

方程 (13) 是 DDMC 方法中粒子输运所依据的方程, 其中等式左边第二项为吸收项, 等式右边为源项, 右边第一项表示从右边相邻网格向左扩散到当前网格的粒子, 右边第二项表示从左边相邻网格向右扩散到当前网格的粒子, 右边第三项表示介

质辐射的粒子.

在 DDMC 方法中, 粒子的位置变量不再有意义, 因此定义粒子平均自由时间 τ , 以确定粒子在随时间变化过程中发生的反应 (扩散、吸收或存活至当前时间步结束),

$$\tau = \frac{1}{c \sigma_{L,i} + \sigma_{R,i} + f_{n,i} \sigma_{n,i}}. \quad (16)$$

粒子平均自由时间与粒子平均自由程类似, 表示粒子发生两次反应 (扩散或吸收) 的平均时间间隔.

2) 对于系统边界处的网格, 即当 $i = 1$ 或 $i = I$ 时, 方程 (13) 不再适用, 因此有必要推导边界处粒子输运满足的离散扩散方程. 令方程 (9) 中 $i = 1$, 得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \frac{\partial \phi_1}{\partial t} + (\sigma_{R,1} + f_{n,1} \sigma_{n,1}) \phi_1 - \frac{F_{1/2}}{\Delta x} \\ & = \sigma_{L,2} \phi_2 + f_{n,1} \sigma_{n,1} a c T_{n,1}^4. \end{aligned} \quad (17)$$

应用渐进扩散极限 (asymptotic diffusion-limit) 边界条件 [21]:

$$2 \int_0^1 W(\mu) I_b(\mu, t) d\mu = \phi_{1/2} - \frac{\lambda}{\sigma_{n,1}} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{x=0}, \quad (18)$$

其中, $W(\mu)$ 为超越方程, 可以近似为 $W(\mu) \approx \mu + 3/2\mu^2$; $\phi_{1/2}$ 为系统边界平均辐射强度; λ 为外推距离.

对方程 (18) 中的空间导数项进行有限差分, 得

$$2 \int_0^1 W(\mu) I_b(\mu, t) d\mu = \phi_{1/2} - \frac{2\lambda}{\sigma_{n,1}} \frac{\phi_1 - \phi_{1/2}}{\Delta x}. \quad (19)$$

令方程 (11) 中 $i + 1 = 1$, $i + 1/2 = 1/2$, 并与方程 (19) 联立, 解出 $F_{1/2}$:

$$F_{1/2} = \frac{2}{3\sigma_{n,1}\Delta x + 2\lambda} \left[2 \int_0^1 W(\mu) I_b(\mu, t) d\mu - \phi_1 \right], \quad (20)$$

将方程 (20) 代入方程 (17) 中, 得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \frac{\partial \phi_1}{\partial t} + (\sigma_{R,1} + \sigma_{L,1} + f_{n,1} \sigma_{n,1}) \phi_1 \\ & = \sigma_{L,2} \phi_2 + \frac{1}{\Delta x} \int_0^1 P_L(\mu) \mu I_b(\mu, t) d\mu \\ & \quad + f_{n,1} \sigma_{n,1} a c T_{n,1}^4, \end{aligned} \quad (21)$$

方程 (21) 即为 $i = 1$ 时边界网格满足的离散扩散方程, 其中

$$\sigma_{L,1} = \frac{2}{3\Delta x} \frac{1}{\sigma_{n,1}\Delta x + 2\lambda}, \quad (22)$$

$$P_L(\mu) = \frac{4}{3} \frac{1}{\sigma_{n,1} \Delta x + 2\lambda} \left(1 + \frac{3}{2} \mu \right). \quad (23)$$

同理可推导出当 $i = I$ 时, 边界网格满足的输运方程.

除了右边第二项外, 方程 (21) 与方程 (13) 类似. 方程 (21) 右边第二项中 $P_L(\mu)$ 表示粒子穿过边界进入 DDMC 区域后而不被反射的概率, 与粒子运动方向和边界法向之间夹角的余弦 μ 有关.

需要特别指出得是: 当模拟的对象为轻介质 (吸收系数较小) 时, 扩散条件不成立, DDMC 方法模拟的精度将变差; 另外, 当吸收截面较大时, 上面的 P_L , $\sigma_{L,1}$ 与理论值相比偏小, 也需对它们做适当的修正 [22].

本文设计了基于 DDMC 方法的辐射输运问题模拟流程. 主要步骤如下.

1) 时空网格划分 根据系统的几何结构及介质属性, 将系统划分为若干空间网格, 每个网格包含同一种介质; 根据辐射源及辐射场演化特性, 将要模拟的时间范围离散成若干时间步.

2) 计算当前时间步的各类参数 根据各个网格的温度、密度、材料种类等计算网格比热、吸收系数、物质能量密度、辐射能量密度、有效吸收系数、有效散射系数、fleck 因子、粒子扩散截面、粒子转化概率等.

3) 从辐射源中抽取粒子 根据辐射总能量及模拟的粒子数, 分配三种源 (边界源、网格物质辐射源、上一时间步中存活下来的粒子) 的粒子权重及粒子数, 依次抽取源对应的粒子并确定其时间、能量、权重.

4) 粒子随机扩散 根据计算得到的扩散截面和有效吸收系数, 粒子在各个网格间随机运动, 或被物质吸收, 或扩散至相邻网格, 或存活至当前时间步结束. 若粒子未被吸收, 则记录粒子的相关参数, 在下一时间步继续输运.

5) 求解温度方程 由步骤 4) 得到的辐射能和吸收能, 以及网格的比热, 利用能量方程解出当前时间步结束时的物质温度.

6) 预估下一时间步的平均温度 由于需要根据网格温度来计算网格其他参数, 因此有必要预估下一时间步的温度, 本文采用“预估迭代”的方法, 此方法既能保持较好的精度, 又能相对节省时间.

7) 返回步骤 2), 开始下一时间步计算, 直至结束时刻.

3 DDMC 与 IMC 耦合方法

ICF 辐射输运问题中通常既包含有轻介质 (如推进层), 也包含有重介质 (如黑腔壁). 对于轻介质 (光性薄) 区域, 最好应用 IMC 方法模拟, 对于重介质 (光性厚) 区域, 则考虑应用 DDMC 方法模拟. 因此, 需要研究 DDMC 方法模拟与 IMC 方法模拟的耦合方法. DDMC-IMC 方法耦合输运的关键是处理好 IMC 区域 (应用 IMC 方法模拟的区域) 和 DDMC 区域 (应用 DDMC 方法模拟的区域) 的交界面, 即如何正确合理的处理 MC 粒子穿过交界面时的各种物理数学参数, 下面介绍其中的两个关键环节.

第一种情况, 粒子从 IMC 区域穿过界面进入 DDMC 区域. IMC 粒子 (用 IMC 方法模拟的粒子) 穿过界面时, 有 $P(\mu)$ 的概率进入 DDMC 区域并转化为 DDMC 粒子, 没有转化的粒子在界面处被反射, 并重新抽取方向和位置, 位置在界面上均匀分布.

一般情况下, DDMC 区域与 IMC 区域的不透明度相差很大, 从 DDMC 区域边界离开后进入 IMC 区域的粒子的运动方向不再是各向同性的. 实际上其运动方向的角分布与面源粒子的角分布一样, 为余弦分布 [23], 即 $f(\mu) = 2\mu$. 因此抽取粒子新方向的方法为

$$\mu' = \sqrt{\xi}, \quad (24)$$

其中 ξ 为在 $[0, 1]$ 上均匀分布的随机数.

第二种情况, 粒子从 DDMC 区域穿过边界进入 IMC 区域. DDMC 粒子穿过界面后, 转化为 IMC 粒子. 因为在 DDMC 区域中, 粒子的方向和位置没有实际意义, 因此粒子进入 IMC 区域后同样需要重新抽取位置和方向变量. 与第一种情况一样, 粒子方向的抽取按照方程 (24) 的方法, 位置在界面上均匀分布.

4 数值结果

根据上文所述的 DDMC 方法辐射输运流程以及 DDMC-IMC 界面处理方法, 本文设计、编写了“离散扩散蒙特卡罗方法辐射输运程序” (DDMC) 及“离散扩散蒙特卡罗方法与隐式蒙特卡罗方法耦

合运输程序”(DDMC-IMC). 为验证程序的适用性和正确性, 本文计算了若干典型问题, 并与已有的IMC程序计算结果比较, 计算平台为个人电脑, CPU 型号为Intel(R) Core(TM) i7-3770 @ 3.4 GHz, 核数为 8, 内存为 4.00 GB, 操作系统为 Windows 7 旗舰版, 编译器为 Intel Visual Fortran.

4.1 单一介质热波传播问题

模型为 0.5 cm 厚的一维平板, 左侧边界为一温度恒为 1 keV 的平面源, 右侧边界为真空边界, 平板分为 25 个网格, 网格大小为 0.02 cm, 网格比热为 $c_v = 0.1 \text{ GJ}/(\text{cm}^3 \cdot \text{keV})$, 吸收系数与温度的三次方呈反比, 即 $\sigma = \sigma_0/T^3$, 其中温度 T 的单位取 keV, σ_0 单位为 keV^3/cm , 可取不同的值, 越大表示光性越厚. 后文中吸收系数及温度单位与之相同.

网格初始物质温度为 1 eV, 初始辐射温度为 0 eV, 时间步长取 0.05 ns, 总时长为 10 ns, 每步模拟粒子数为 10000. σ_0 分别取 200, 500, 1000, 2000. 分别用 IMC 和 DDMC 方法模拟并比较. 开始进行辐射输运时, 光子从边界源出射, 与附近的物质相互作用, 加热物质; 被加热的物质重新辐射出光子, 再加热更远处的物质, 因此辐射得以从边界源处逐渐向远处传播.

图 1 和图 2 分别为 $\sigma_0 = 500$ 时, 三个时间点的物质温度和辐射温度的空间分布. 从两图中可以看出, DDMC 与 IMC 方法的模拟结果总体上符合得很好, 且随时间的演化, 曲线所描绘出的热波逐渐向前传播, 加热远处的物质, 与热辐射传播的物理过程相符.

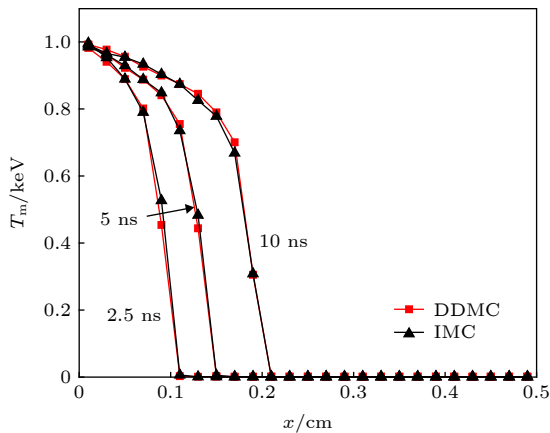


图 1 不同时刻的物质温度空间分布比较 ($\sigma_0 = 500$)

Fig. 1. Material temperature in different moments ($\sigma_0 = 500$).

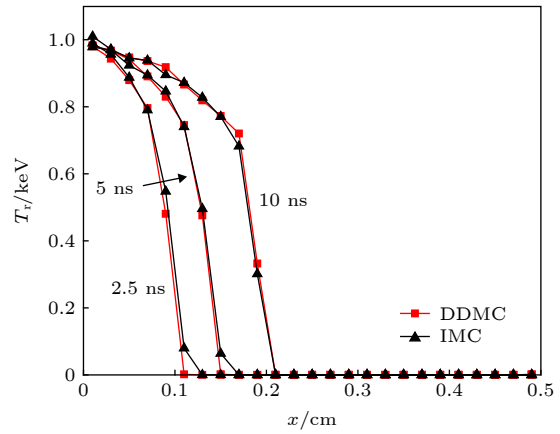


图 2 不同时刻的辐射温度空间分布比较 ($\sigma_0 = 500$)

Fig. 2. Radiative temperature in different moments ($\sigma_0 = 500$).

表 1 为不同 σ_0 取值下 IMC 和 DDMC 方法的模拟时间, 以及 DDMC 与 IMC 方法的效率比较. 从表 1 中可以看出, 随着 σ_0 的增大, IMC 方法的模拟时间明显变长, 而 DDMC 方法的模拟时间变化不大, 相比较下 DDMC 方法的效率也随之提高. 因为吸收系数越大, IMC 粒子在一个时间步内散射的次数越多, 而 IMC 方法中处理散射的过程占据了整个模拟过程的大部分时间, 相反 DDMC 粒子在一个时间步中的扩散过程随吸收截面变大而略微减少, 且一个扩散过程替代了粒子的多次散射过程, 因此随着初始截面变大, IMC 方法模拟时间明显变长, DDMC 方法模拟时间反而有所缩短, 最终使得 DDMC 的模拟效率变高.

表 1 不同 σ_0 取值下 IMC 与 DDMC 方法的模拟时间对比

Table 1. Simulation time of IMC method and DDMC method in different initial cross sections.

$\sigma_0/\text{keV}^3 \cdot \text{cm}^{-1}$	IMC time/s	DDMC time/s	Speed up
200	330.4	143.3	2.3
500	505.8	139.9	3.6
1000	894.2	142.1	6.3
2000	1158.6	142.2	8.1

4.2 单一介质热平衡问题

模型为 0.5 cm 厚一维平板, 无边界源, 且外边界均为全反射边界, 平板分为 50 个网格, 网格大小为 0.01 cm, 网格比热 $C_v = 0.1 \text{ GJ}/(\text{cm}^3 \cdot \text{keV})$, 网格初始物质温度与初始辐射温度分别为 1 (0—0.1 cm), 0.9 (0.1—0.2 cm), 0.8 (0.2—0.3 cm), 0.7

(0.3—0.4 cm), 0.6 (0.4—0.5 cm). 时间步长为 0.05 ns, 总时长为 40 ns, 每步模拟粒子数为 10000. σ_0 取值为 200, 500, 1000, 2000. 同样分别用 IMC 和 DDMC 方法模拟并比较.

由于外边界设置为全反射边界, 故系统实为全封闭系统. 随着时间演化, 理论上该系统最终将达到平衡, 即所有网格的辐射温度和物质温度都将趋于某固定值. 由于全封闭系统的能量守恒, 可以建立如下关系:

$$\sum_{n=1}^N (C_v T_{m,n}^{(0)} + a(T_{r,n}^{(0)})^4) = N (C_v T_m^{(e)} + a(T_r^{(e)})^4), \quad (25)$$

式中, $T_{m,n}^{(0)}$ 和 $T_{r,n}^{(0)}$ 分别表示第 n 个网格的初始物质温度和辐射温度; $T_m^{(e)}$ 和 $T_r^{(e)}$ 分别为平衡后的物质温度和辐射温度, 且有 $T_m^{(e)} = T_r^{(e)} = T^{(e)}$. 对于本例, 可以计算得知平衡后的温度 $T^{(e)} = 0.8$ keV.

图 3 和图 4 分别是 $\sigma_0 = 500$ 时, 不同时间点的介质中物质温度和辐射温度的空间分布. 从两图中可以看出, DDMC 方法的模拟结果与 IMC 方法同样符合得很好, 随着时间变化, 温度较高处的网格温度逐渐降低, 温度较低处的网格温度逐渐升高, 且在 40 ns 时基本达到了理论平衡温度 0.8 keV. 模拟结果显示, 当系统中存在温度梯度时, 能流将从温度高处流向温度低处, 其间, 辐射光子与物质不断相互作用 (光子被吸收后再发射), 系统中温度分布、辐射场分布不断发生变化, 对于本例, 辐射

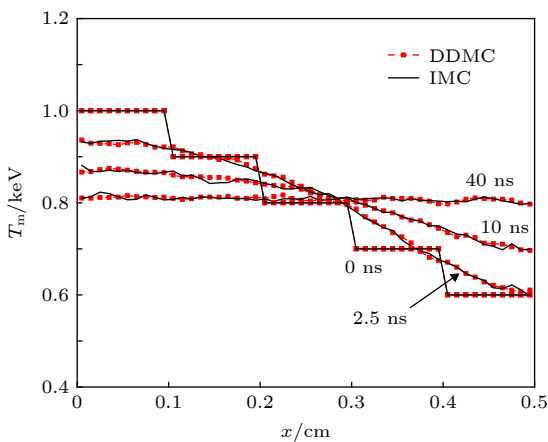


图 3 不同时刻的物质温度空间分布比较 ($\sigma_0 = 500$)

Fig. 3. Material temperature in different moments ($\sigma_0 = 500$).

温度与物质温度逐渐趋于理论平衡温度, 并在时间足够长后达到平衡.

表 2 为不同 σ_0 取值下 DDMC 和 IMC 方法的模拟时间以及效率的比较. 与表 1 相似, 随着 σ_0 的增大, IMC 方法的模拟时间明显变长, 而 DDMC 方法的模拟时间略微缩短, 相比较下的 DDMC 方法效率也随之提高, 最高接近 30 倍, 其原因上文已做出解释. 同样可得出物质吸收系数越大, DDMC 方法模拟效率越高的结论.

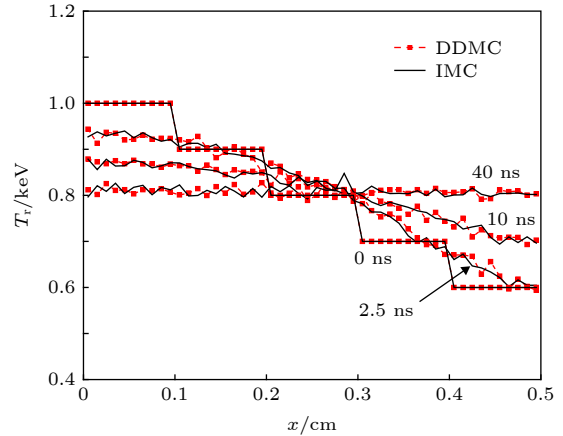


图 4 不同时刻的辐射温度空间分布比较 ($\sigma_0 = 500$)

Fig. 4. Radiative temperature in different moments ($\sigma_0 = 500$).

表 2 不同 σ_0 取值下, IMC 与 DDMC 方法的模拟时间比较

Table 2. Simulation time of IMC method and DDMC method in different initial cross sections.

$\sigma_0/\text{keV}^3\cdot\text{cm}^{-1}$	IMC time/s	DDMC time/s	Speed up
200	1184.4	298.2	4.0
500	2357.6	291.8	8.1
1000	4348.7	288.6	15.1
2000	8406.4	287.7	29.2

图 4 中辐射温度曲线的波动较大, 尤其是平衡后各网格间的温度看似并没有达到平衡 (温度相等). 初步分析其原因是蒙特卡罗方法计算的粒子数偏少、统计误差偏大所致. 为此, 在其他参数不变的情况下, 将模拟的粒子数提高至 500000 后计算, 得到图 5 和图 6 所示的物质温度和辐射温度的分布情况. 与图 3 和图 4 对比可看出, 数值波动有明显的减小, 说明较大的波动确实是由样本数较少引起的, 不影响本文对 DDMC 方法的优点及模拟结果的分析.

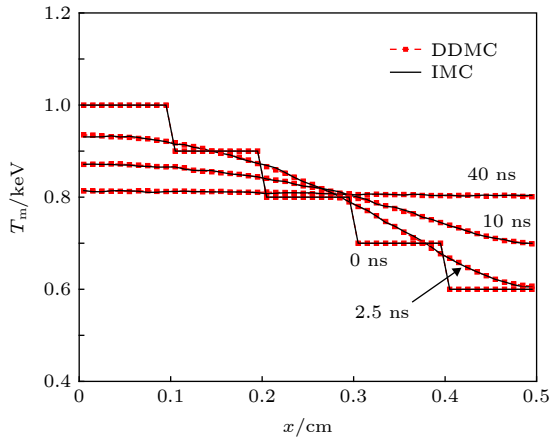


图 5 不同时刻的物质温度空间分布比较 ($\sigma_0 = 500, N_p = 500000$)
 Fig. 5. Material temperature in different moments ($\sigma_0 = 500, N_p = 500000$).

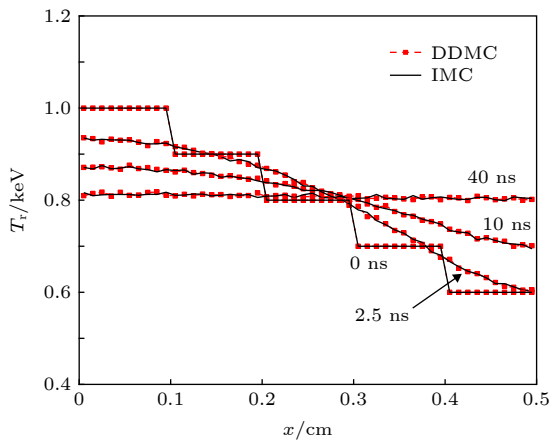


图 6 不同时刻的辐射温度空间分布比较 ($\sigma_0 = 500, N_p = 500000$)
 Fig. 6. Radiative temperature in different moments ($\sigma_0 = 500, N_p = 500000$).

4.3 双介质中热波传播问题

模型为 0.5 cm 厚一维平板, 左边界为一温度恒为 1 keV 的平面源, 右边界为真空边界, 平板分为左右两部分, 左边部分为光性厚的区域, 厚度为 0.1 cm, 划分为 20 个网格, 网格大小为 0.005 cm, 右边部分为光性薄的区域, 厚度为 0.4 cm, 划分为 20 个网格, 网格大小为 0.02 cm, 所有网格比热均为 $C_v = 0.1 \text{ GJ}/(\text{cm}^3 \cdot \text{keV})$, 网格初始物质温度为 1 eV, 初始辐射温度为 0 eV, 时间步长为 0.01 ns, 总时长为 50 ns, 每步模拟粒子数为 100000. 光性薄的区域 σ_0 取值为 1, 光性厚的区域 σ_0 取值为 1000. 在光性厚区域用 DDMC 方法模拟, 在光性薄区域用 IMC 方法模拟 (其结果称为 DDMC-IMC),

同样与全区域用 IMC 方法模拟的结果相比较.

图 7 为 10, 20, 50 ns 时, 平板中物质温度的空间分布. 从图 7 中可知, DDMC-IMC 与 IMC 方法的模拟结果很一致. 而且, IMC 方法模拟时间为 16.9 h, DDMC 方法模拟时间仅为 1.6 h, 相比 IMC 效率提高将近 10 倍. 随时间演化, 热辐射从左边边界源处逐渐向右传播, 先将光性厚的物质加热, 再加热光性薄的物质, 同样与热辐射输运过程相符.

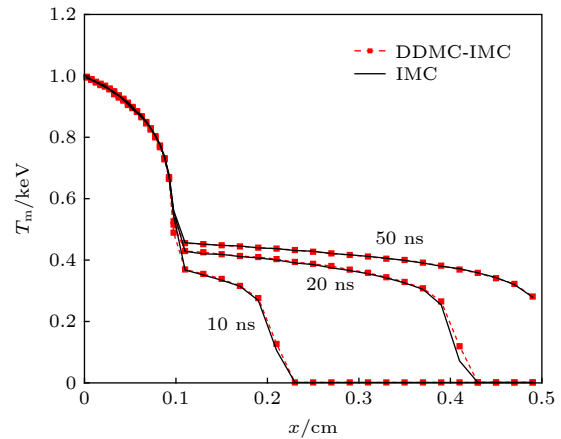


图 7 不同时刻介质中物质温度的空间分布比较
 Fig. 7. Material temperature in different moments.

实际上, DDMC-IMC 混合输运时效率的提高还与模型中 DDMC 区域和 IMC 区域的粒子数比例有关, 模拟过程中利用 DDMC 方法进行输运的粒子越多, DDMC-IMC 混合输运的效率越高. 在本问题中, 模拟过程的大部分时间内, DDMC 区域的物质温度都高于 IMC 区域, DDMC 区域分配到的粒子比 IMC 区域多, 因此加速效果明显.

5 结论

虽然 IMC 方法可以较准确地模拟热辐射在介质材料中输运的物理过程, 但在介质吸收系数较大的情况下, 粒子 (伪) 散射过程占据主导, 导致 IMC 方法模拟时间过长, 效率过低. 而在这种情况下, 粒子输运过程可以很好地由扩散近似代替, 从而缩短跟踪粒子的时间, 提高模拟效率.

本文研究了 DDMC 辐射模拟方法及流程, 提出了 DDMC-IMC 界面新的处理方法, 新研制了“离散扩散蒙特卡罗程序”, 并验证了该程序的适用性、准确性及高效性. 结果表明: 1) 在吸收截面较

大的单一介质系统中, DDMC方法可以得出与IMC方法一致的结果, 而效率却高于IMC方法, 尤其随着吸收系数变大, DDMC方法的效率提高愈加明显; 2) 在同时存在轻重介质的系统中, DDMC-IMC耦合运输的结果与IMC方法结果符合得很好, 且效率也同样高于IMC方法, 而且利用DDMC方法运输的粒子所占比例越大, DDMC-IMC混合运输的效率越高. 综上所述, 本文DDMC方法的程序可以高效、准确地模拟热辐射在介质中的运输过程, 并且可以很好地与IMC方法耦合, 高效模拟强吸收物质和弱吸收物质共存情况下的热辐射运输问题.

在DDMC-IMC耦合运输中, 目前DDMC-IMC界面是预先设定好的, 若DDMC-IMC界面能根据物质吸收系数变化情况自动调整, 模拟效率可以得到进一步提高. 因此下一步将开展可变界面的研究.

参考文献

- [1] Peng H M 2008 *Radiation Transport and Radiation Hydrodynamics in Plasmas* (Beijing: National Defense Industry Press) p38 (in Chinese) [彭惠民 2008 等离子体中辐射运输和辐射流体力学 (北京: 国防工业出版社) 第38页]
- [2] Hammersly J M, Handscomb D C 1964 *Monte Carlo Method* (New York: John Wiley & Sons Press) p76
- [3] Pei L C, Zhang X Z 1980 *Monte Carlo Method and Application in Particle Transportation* (Beijing: Science Press) p18 (in Chinese) [裴鹿成, 张孝泽 1980 蒙特卡罗方法及其在粒子运输问题中的应用 (北京: 科学出版社) 第18页]
- [4] Fleck J A 1963 *Computational Method in the Physical Sciences* (New York: McGraw-Hill) p43
- [5] Campbell P M, Nelson R G 1964 *Livermore, Calif: Lawrence Radiation Laboratory Report UCRL-7838*
- [6] Fleck J A, Cummings J D 1971 *J. Comput. Phys.* **8** 313
- [7] Fleck J A, Canfield E H 1984 *J. Comput. Phys.* **54** 508
- [8] Giorla J, Sentis R 1987 *J. Comput. Phys.* **70** 145
- [9] Urbatsch T J, Morel J E, Gulick J C 1999 *Proceedings of the ANS conference on Mathematics and Computation, Reactor Physics, and Environmental Analysis in Nuclear Applications* Madrid, Spain, September 27–30, 1999 p262
- [10] Evans T M, Urbatsch T J, Lichtenstein H 2000 *Proceedings of the Monte Carlo 2000 International Conference* Lisbon, Portugal, October 23–26, 2000
- [11] Gentile N A 2001 *J. Comput. Phys.* **172** 543
- [12] Densmore J D, Urbatsch T J, Evans T M, Buksas M W 2005 *American Nuclear Society Topical Meeting in Mathematics and Computations* Avignon, France, September 12–15, 2005
- [13] Densmore J D, Urbatsch T J, Evans T M, Buksas M W 2007 *J. Comput. Phys.* **222** 485
- [14] Cleveland M A, Gentile N, Palmer T S 2010 *J. Comput. Phys.* **229** 5707
- [15] Densmore J D, Thompson K G, Urbatsch T J 2012 *J. Comput. Phys.* **231** 6924
- [16] 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]
- [17] Li S, Chen Y H, Ji Z C, Zhang M Y, Ren G L, Huo W Y, Yan W H, Han X Y, Li Z C, Liu J, Lan K 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 025202 (in Chinese) [李树, 陈耀华, 姬志成, 章明宇, 任国利, 霍文义, 闫威华, 韩小英, 李志超, 刘杰, 蓝可 2018 物理学报 **67** 025202]
- [18] Mihalas D, Mihalas B W, Fu A, Arnett W D 1986 *Phys. Today* **39** 90
- [19] Xie Z S 2004 *Analysis of Nuclear Reactor Physics* (Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press) p62 (in Chinese) [谢仲生 2004 核反应堆物理分析 (西安: 西安交通大学出版社) 第62页]
- [20] Szilard R H, Pomraning G C 1992 *Nucl. Sci. Eng.* **112** 256
- [21] Habetle G J, Matkowsky B J 1975 *J. Math. Phys.* **16** 846
- [22] Densmore J D, Davidson G, Carrington D B 2006 *Ann. Nucl. Energy* **33** 583
- [23] Cashwell E D, Everett C J 1959 *A Practical Manual on the Monte Carlo Method for Random Walk Problem* (London: Pergamon Press) p19

An efficient Monte Carlo simulation method for thermal radiation transport^{*}

Xu Yu-Pei¹⁾²⁾ Li Shu^{1)†}

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

2) (*Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China*)

(Received 31 August 2019; revised manuscript received 30 October 2019)

Abstract

Thermal radiation transfer in material and the interaction between radiative photon and material are important research projects of the inertial confinement fusion, and Monte Carlo method is one of the important researching methods. Based on the implicit integral-differential transport equation, traditional implicit Monte Carlo method can accurately simulate the thermal radiation transport in material. However, the implicit Monte Carlo method would take quite a long computational time when the opacity is increased because scattering events are dominant in particles' histories, thus reducing the simulation efficiency. In this paper, based on discrete diffusion Monte Carlo method, i.e. a radiation transport code, the discrete diffusion Monte Carlo radiation transport simulation, is developed. The code increases the efficiency of thermal radiation simulations in a high opacity range, but it can yield insufficiently accurate results in a low opacity range. There exist low opacity material and high opacity material in the inertial confinement fusion. In this work, investigated are several numerical techniques that can improve the utility and accuracy of discrete diffusion Monte Carlo for grey thermal radiation simulation. First, the discrete diffusion Monte Carlo method and implicit Monte Carlo method are combined. Second, a new method of treating the interface between the diffusive region and the transport region is proposed. Finally, a hybrid radiative transfer program is developed. In order to verify the hybrid radiative transfer program and the new interface method, a series of numerical experiments for typical thermal radiation transport problem is conducted. In these problems, materials with different opacities are tested. Then the simulation efficiencies and curves of temperature, obtained by the two Monte Carlo methods, are analyzed. According to the simulation results, the program can not only accurately simulate the radiation transport in material with high opacity, but also remarkably increase the simulation efficiency. This is because many implicit Monte Carlo steps are substituted by one diffusive step and the details in the diffusive step are ignored. Also, the propagation of thermal radiation depicted with figures and tables are consistent with the radiation transport theory. In addition, the results from the hybrid Monte Carlo method reach the same accuracy as that from the implicit Monte Carlo method, and the simulation efficiency is remarkably increased.

Keywords: thermal radiation transport, implicit Monte Carlo method, discrete diffusion Monte Carlo method, interface methods

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

DOI: [10.7498/aps.69.20191315](https://doi.org/10.7498/aps.69.20191315)

^{*} Project supported by the Yu Min Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. FZ025) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11775033, 11775030).

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