

## 高温热辐射输运模拟的蒙特卡罗全局降方差方法\*

李树<sup>1)2)†</sup> 王旻<sup>2)</sup> 姬志成<sup>1)</sup> 蓝可<sup>1)</sup>

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)

(2023 年 2 月 16 日收到; 2023 年 5 月 4 日收到修改稿)

针对隐式蒙特卡罗方法模拟高温热辐射输运问题时存在的“辐射强度计算误差时空分布严重不均匀”现象, 通过理论分析和数值模拟手段, 找到决定误差大小的主要因素为“网格内的辐射径迹长度记录数”. 据此提出“隐式蒙特卡罗全局降方差方法”并推导相应的计算公式. 该方法主要包含如下 3 个关键技术: 1) 针对辐射输运蒙特卡罗模拟的自适应动态分配源粒子方法; 2) 与自适应动态分配源粒子相匹配的动态权窗设计技术及粒子权无偏估计算法; 3) 辐射强度的解析估计降方差方法. 针对这 3 个关键技术, 设计蒙特卡罗数值模拟方案, 编写相应的数值模拟程序模块. 典型辐射输运问题模拟结果显示: 隐式蒙特卡罗全局降方差方法能够使网格辐射强度计算误差在整个时空范围内分布相对比较均匀, 最大误差可控, 计算效率提升 10 倍左右. 新方法在激光惯性约束聚变的黑腔辐射输运模拟应用中取得了显著效果.

**关键词:** 隐式蒙特卡罗方法, 热辐射输运, 全局降方差方法, 惯性约束聚变**PACS:** 95.30.Jx, 02.70.Uu, 28.52.Av**DOI:** 10.7498/aps.72.20230218

## 1 引言

热平衡情况下, 热辐射 (thermal radiation, 以下简称辐射) 能量密度与温度的四次方呈正比. 当高温等离子体系统内部的温度超过百万开尔文 (开), 辐射场的能量密度变得与相应的流体力学量 (内能、动能) 可以比较, 而当系统内部的温度超过几千万开时, 辐射场的能量密度和辐射压强在系统中占支配地位<sup>[1]</sup>. 核聚变放能过程中, 温度可以高达亿开以上, 能量密度、动量密度和压强中辐射所占的比例很大, 故辐射是系统中影响能量交换和流体运动的最有效机制. 激光间接驱动惯性约束聚变 (ICF)<sup>[2,3]</sup> 研究中, 黑腔辐射场的生成及分布、靶丸的辐射烧蚀及内爆压缩、聚变材料的点火及燃烧等关键物理过程, 均与辐射热波的传播密切相关<sup>[4]</sup>. 因此, 辐射输运是 ICF 研究中重点关注的问题之一.

根据量子理论, 光子具有波粒二相性. 物理上通常采用电磁场的波动理论描述低频光子的传播行为, 采用粒子运动理论描述高频光子 (例如高温等离子体发射的辐射) 的传播行为. 描述 ICF 中辐射光子在介质中的产生、传输及与物质中电子相互作用的方程是辐射输运方程, 其一般形式如下<sup>[1]</sup>:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \frac{\partial I(\mathbf{r}, \nu, \Omega, t)}{\partial t} + \Omega \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \nu, \Omega, t) \\ &= j(\nu) \left[ 1 + \frac{c^2}{2h\nu^3} I(\mathbf{r}, \nu, \Omega, t) \right] - K_a(\nu) I(\mathbf{r}, \nu, \Omega, t) \\ &+ \int_0^\infty d\nu' \int_0^{4\pi} d\Omega' \frac{\nu}{\nu'} K_s(\nu' \rightarrow \nu, \Omega \cdot \Omega') \\ &\times I(\mathbf{r}, \nu', \Omega', t) \left[ 1 + \frac{c^2}{2h\nu^3} I(\mathbf{r}, \nu, \Omega, t) \right] \\ &- \int_0^\infty d\nu' \int_0^{4\pi} d\Omega' K_s(\nu \rightarrow \nu', \Omega \cdot \Omega') \\ &\times I(\mathbf{r}, \nu, \Omega, t) \left[ 1 + \frac{c^2}{2h(\nu')^3} I(\mathbf{r}, \nu', \Omega', t) \right], \quad (1) \end{aligned}$$

\* 国家自然科学基金 (批准号: 12035002) 和中国工程物理研究院于敏基金 (批准号: FZ025) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: li\_shu@iapcm.ac.cn

式中,  $I(\mathbf{r}, \nu, \Omega, t) = ch\nu n(\mathbf{r}, \nu, \Omega, t)$  为辐射强度, 表示点  $\mathbf{r}$  处、 $t$  时刻单位时间间隔、通过垂直于  $\Omega$  方向单位面积、频率  $\nu$  单位频率间隔、 $\Omega$  方向单位立体角的光子能量, 其中  $c$  是光速,  $h$  是 Planck 常数,  $\nu$  是光子频率,  $n(\mathbf{r}, \nu, \Omega, t)$  是相空间的光子数密度;  $j(\nu)$  是发射系数;  $K_a(\nu)$  是吸收系数;  $K_s(\nu' \rightarrow \nu, \Omega \cdot \Omega')$  是散射截面, 表示频率为  $\nu'$ 、方向为  $\Omega'$  的光子走过单位距离被散射到  $\Omega$  方向、频率  $\nu$  的单位区间内的概率. 发射系数、吸收系数及散射截面除了与介质的原子成分、光子的频率  $\nu$  相关之外, 还和介质的温度  $T_m$  密切相关, 因此辐射输运方程通常与物质温度方程耦合求解. 辐射输运方程实质上是描述的辐射能量守恒.

ICF 中的辐射输运问题具有多尺度、强耦合、非线性、高维度及多介质的特点, 这些特点决定了该问题的研究难度很大. 辐射输运方程只能通过数值方法求解<sup>[1]</sup>, 有两大类: 确定论方法和蒙特卡罗 (Monte Carlo, MC) 方法<sup>[5,6]</sup>. 即便数值求解, 其复杂程度和计算量也是非常巨大的. MC 方法求解方面, 20 世纪 70 年代初, Fleck 和 Cummings<sup>[7]</sup> 采用了隐式蒙特卡罗 (implicit Monte Carlo, IMC) 方法模拟热辐射输运问题. IMC 方法在计算稳定性、计算精度及计算效率等方面, 比传统的直接 MC 方法有非常大的提高<sup>[8,9]</sup>, 很好地克服了直接 MC 方法求解辐射输运方程遇到的困难, 逐步成为国际上求解辐射输运问题的主要方法<sup>[10–12]</sup>. 随着计算机的运算能力提高和 IMC 计算方法的不断改进, 目前 IMC 方法已经在美国的 ICF 辐射输运模拟中扮演着重要角色<sup>[13,14]</sup>.

“十二五”期间, 本课题组在中国工程物理研究院科学技术发展基金重点项目的资助下, 在国内首先引入了 IMC 方法, 研制了我国首个三维 IMC 辐射输运数值模拟程序——IMC3D<sup>[15,16]</sup>, 开展了大量典型例题及辐射 benchmark 问题的计算分析工作, 验证了 IMC 方法及程序求解辐射输运问题的正确性和适用性. “十三五”期间, IMC3D 程序已在我国的 ICF 黑腔辐射场研究中获得了初步应用<sup>[17–19]</sup>. 在大多数辐射输运问题模拟中发现存在如下问题: 有的计算区域 (网格) 统计误差 (简称“误差”) 已经很低, 但有的区域误差依然很难降下来; 同一计算区域的误差随时间会发生变化; 采用大规模增加蒙特卡罗模拟的源粒子数 (简称“MC 源粒子数”、“粒子数”) 手段也很难解决问题且极其不经济. 由于

存在这些问题, 在开展 ICF 实际应用问题模拟研究时, 这种误差的非一致性及局部网格温度误差偏大时常导致程序无法顺利完成计算.

下面以典型辐射输运 Marshak 波问题<sup>[20–22]</sup> 为例展示此现象. 图 1 是每个时间步模拟  $10^4$  个粒子计算条件下, 3 个时刻  $t = 1.0, 3.2$  和  $7.4$  ns 的辐射温度空间分布 (1 维), 图 2 是对应的 MC 计算统计误差 (以下简称误差) 分布; 图 3 和图 4 分别是每个时间步模拟  $10^5$  个粒子计算条件下的辐射温度和误差.

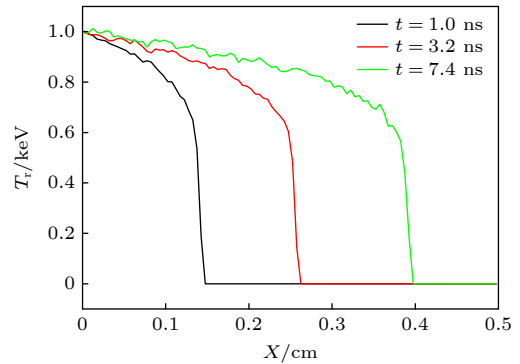


图 1 Marshak 波辐射温度分布 ( $10^4$  粒子/步)

Fig. 1. Radiation temperature for the Marshak wave ( $10^4$  particles/step).

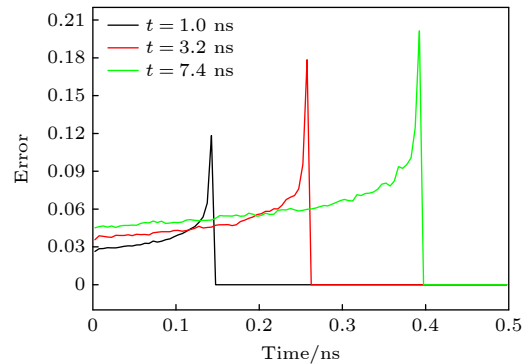


图 2 Marshak 波辐射温度误差分布 ( $10^5$  粒子/步)

Fig. 2. Statistical error of radiation temperature for the Marshak wave ( $10^5$  particles/step).

从图 1—图 4 中的计算结果可以得到以下 3 点.

1) 误差的空间分布 ( $X$  轴方向) 严重不均匀. 对于本问题, 大的误差主要出现辐射波波头位置 ( $X = 0.1425, 0.2575, 0.3925$ ). 然而, 辐射波头决定了辐射波的传播速度, 是需要重点关注的对象, 数值模拟要求误差不应该更大.

2) 误差时间分布 (3 个时刻) 严重不均匀. 对于本问题, 相同位置的误差随着时间变化、误差较大的位置随时间发生变化.

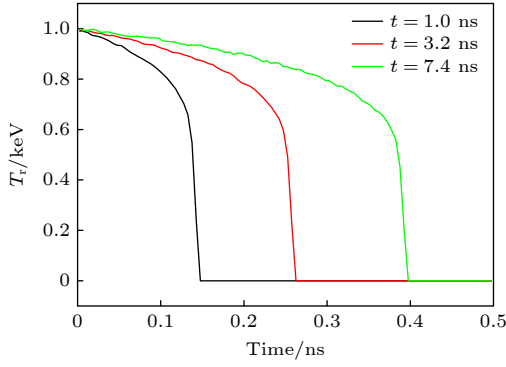

 图 3 Marshak 波辐射温度分布 ( $10^5$  粒子/步)

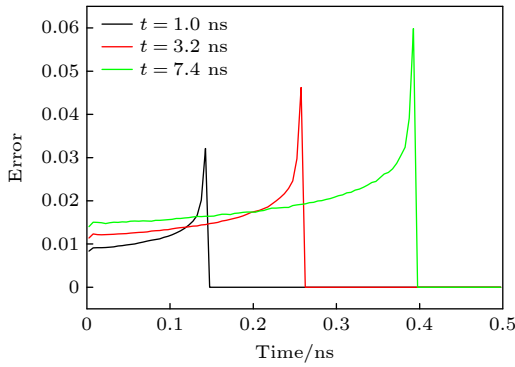
 Fig. 3. Radiation temperature for the Marshak wave ( $10^5$  particles/step).

 图 4 Marshak 波辐射温度误差分布 ( $10^5$  粒子/步)

 Fig. 4. Statistical error of radiation temperature for the Marshak wave ( $10^5$  particles/step).

3) 增加模拟粒子数可以整体减小系统的统计误差 (图 2 和图 4), 但是无法解决误差的时空分布不均问题. 增加 10 倍模拟粒子数仅使得误差降低了 3.3 倍左右 (注: 根据中心极限定理, MC 误差收敛与模拟粒子数的  $1/2$  次方呈反比).

综上所述, 辐射输运是 ICF 研究中的重点和难点问题之一. 该问题的数值模拟方法中, IMC 方法具有鲜明的特色并在 ICF 研究中扮演着重要角色. 但是, 该方法在模拟某些实际问题时, 存在“误差的时空分布严重不均匀”问题. 针对此问题, 本文研究 IMC 全局降方差方法, 根据模拟对象的关注点, 在空间和时间尺度上自适应动态分配 MC 源粒子数, 有效降低整体方差, 提高数值模拟的整体精度和计算效率. 第 2 节通过理论及数值模拟手段分析 IMC 计算误差的主要影响因素. 第 3 节介绍 IMC 全局降方差方法的主要技术手段. 第 4 节利用典型辐射输运 benchmark 问题及 ICF 研究中的实际应用问题验证本文方法的有效性. 第 5 节给出研究结论及研究意义.

## 2 IMC 计算误差的主要影响因素

前面提到, 辐射输运方程中的发射系数、吸收系数及散射截面跟介质温度  $T_m$  密切相关. 在局域热动平衡情况下, 忽略散射项, 则物质温度求解方程如下:

$$\begin{aligned} c_v(\mathbf{r}, T_m) \frac{\partial T_m(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \\ = \iint K_a(\nu) I(\mathbf{r}, \nu, \Omega, t) d\Omega d\nu \\ - 4\pi \int K_a(\nu) B(\nu, T_m) d\nu, \end{aligned} \quad (2)$$

式中,  $T_m(\mathbf{r}, t)$  为点  $\mathbf{r}$  处、 $t$  时刻介质的温度 (物质温度);  $c_v(\mathbf{r}, T_m)$  是该介质温度  $T_m$  对应的比热容; 这里的  $K_a(\nu)$  是考虑诱导发射修正后的吸收系数;  $B(\nu, T_m)$  是 Planck 函数:

$$B(\nu, T_m) = \frac{2h\nu^3}{c^2} (e^{h\nu/T_m} - 1)^{-1}. \quad (3)$$

耦合求解 (1) 式和 (2) 式, 即可获得辐射强度  $I$  和物质温度  $T_m$  的时空演化规律. 在局域热动平衡情况下, 辐射温度  $T_r$  与辐射强度  $I$  具有如下关系:

$$T_r(\mathbf{r}, t) = \left[ \frac{1}{ac} \iint I(\mathbf{r}, \nu, \Omega, t) d\Omega d\nu \right]^{1/4}, \quad (4)$$

式中,  $T_r(\mathbf{r}, t)$  为点  $\mathbf{r}$  处、 $t$  时刻的辐射温度;  $a$  是辐射常数.

从 (2) 式和 (4) 式可以看出物质温度  $T_m$  和辐射温度  $T_r$  均与辐射强度  $I$  密切相关, 因此, 二者的求解精度直接决定辐射强度的求解精度. 利用 IMC 方法模拟求解辐射输运方程时, 辐射强度表示  $\mathbf{r}$  处单位体积中、方向为  $\Omega$  附近单位立体角内、频率为  $\nu$  附近单位频率间隔内的辐射能量 (光子) 在单位时间内所走过的径迹长度.

IMC 方法求解辐射输运问题时, 需将空间位置变量  $\mathbf{r}$  离散为“网格”、时间变量  $t$  离散为“时间步”, 逐步推进求解各网格辐射强度  $I_{i,n}$  (下标  $i$  表示第  $i$  个网格,  $n$  表示第  $n$  个时间步), 物质温度  $T_{m,i,n}$  和辐射温度  $T_{r,i,n}$  等物理量. 某时间步内某网格中辐射能量所走过的总径迹长度 (对方向和频率变量积分) 主要取决于: 网格介质材料类型、温度、网格体积和时间步长.

MC 方法计算某估计量的统计误差 [5]:

$$\varepsilon = \frac{X_\alpha \sigma}{\sqrt{N}} \cong \left[ \frac{\sum_{i=1}^N x_i^2}{\left( \sum_{i=1}^N x_i \right)^2} - \frac{1}{N} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

式中,  $\sigma$  是均方差;  $X_\alpha$  与置信度  $\alpha$  相关, 可从正态分布积分表中查到;  $N$  是 MC 模拟总粒子数. 网格辐射强度采用径迹长度估计, 当有光子在其中输运时, 就有记录数  $x_i$ , 显然当记录数越多, 则 (5) 式的值越小, 误差就越小. 因此, 在给定模拟粒子数  $N$  情况下, 网格辐射强度计算误差取决于网格内的径迹长度记录数.

对于某个时间步某网格来说, 材料是确定的, 时间步长也是确定的, 径迹长度记录数就取决于网格自身的 MC 模拟源粒子数及邻近网格进入的轨迹数. MC 模拟源粒子数在无偏倚情况下正比于辐射源粒子数, 而辐射源粒子数又正比于网格辐射能量密度 (与温度的 4 次方呈正比) 和体积, 进入的轨迹数则与本网格体积及邻近网格辐射情况相关. 因此, 理论上网格辐射强度计算误差大的情况是: 温度较低或网格体积较小. 仍然以 Marshak 波问题为例, 图 5 和图 6 分别是数值模拟结果给出的 3 个时刻的 MC 模拟源粒子数 ( $M$ ) 空间分布、辐射强度统计误差 (Error) 分布, 再结合图 1 和图 2, 可以分析得出结论: 温度低  $\rightarrow$  辐射源粒子少  $\rightarrow$  MC 模拟源粒子少  $\rightarrow$  辐射强度计算误差大  $\rightarrow$  温度计算误差大.

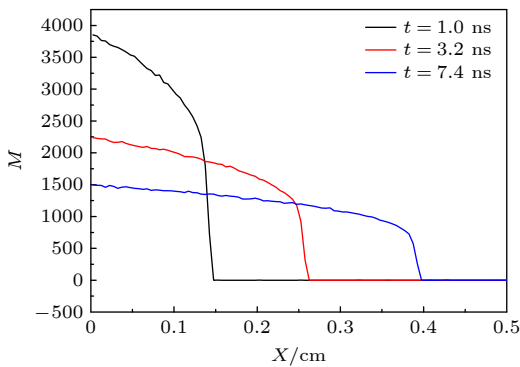


图 5 3 个时刻的 MC 模拟源粒子分布  
Fig. 5. MC simulated source particles for three time step.

基于上述理论及数值模拟结果分析, IMC 全局降方差的焦点是: 如何提高低温网格或小体积网格的 MC 模拟源粒子数及进入的轨迹数?

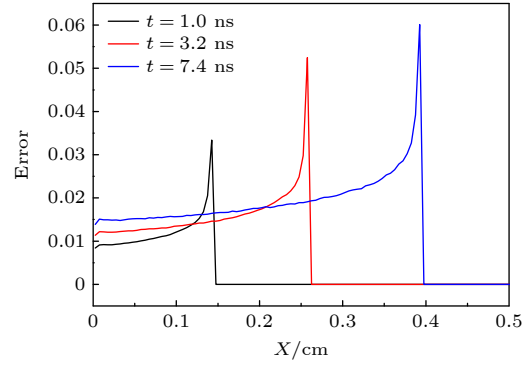


图 6 3 个时刻的辐射强度误差分布  
Fig. 6. Statistical error of radiation intensity for different time step.

### 3 IMC 全局降方差方法

#### 3.1 自适应动态分配源粒子结合权窗方法

对于无独立体源、无独立边界源的单个网格 (这是通常情况), 网格  $i$  (包含的空间区域为  $D_i$ ) 内的物质在当前时间步  $[t_n, t_{n+1}]$  内通过热辐射方式发射出的能量为

$$\begin{aligned} E_{i,n}^m &= \frac{1}{4\pi} \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \int_0^{4\pi} d\Omega \int_0^\infty d\nu \int_{D_i} d\mathbf{r} \\ &\quad \times \sigma_{\text{ea},n}(\mathbf{r}, \nu) b_n(\nu, T_m) c a T_m^4(\mathbf{r}, t) \\ &= \Delta t_n \cdot V_i \cdot c \cdot U_{r,n} \cdot f_n \cdot \sigma_{p,n}, \end{aligned} \quad (6)$$

式中,  $\sigma_{\text{ea},n}(\mathbf{r}, \nu) = f_n \sigma_{a,n}(\mathbf{r}, \nu)$  是有效吸收系数;  $f_n$  是 IMC 方法的 Fleck 因子;  $b_n(\nu, T_m)$  是归一化 Planck 函数;  $\Delta t_n$  是当前时间步长,  $V_i$  是网格体积;  $U_{r,n} = a T_{m,n}^4$  是发射能量密度;  $\sigma_{p,n}$  是 Planck 平均吸收系数.

上一步结束时刻的辐射温度  $T_{r,i,n-1}$  已在上一时间步计算出, 显然其应该等于本时间步初始时刻的温度. 因此, 网格  $i$  本时间步初始时刻含有的辐射能量为

$$E_{i,n}^r = V_i \cdot a T_{r,i,n-1}^4. \quad (7)$$

当前时间步网格总的辐射源能量则为

$$E_{i,n} = E_{i,n}^m + E_{i,n}^r. \quad (8)$$

如果不采用源偏倚抽样, MC 源粒子的权  $W$  均为 1, 则网格  $i$  分配到的 MC 源粒子数为

$$M_{i,n} = \frac{E_{i,n}}{E_{t,n}} \cdot M_t, \quad (9)$$

其中, 对所有网格的辐射源能量求和表示为



$$E_{t,n} = \sum_{i=1}^I E_{i,n},$$

即当前步系统总辐射源能量;  $M_t$  是设定的当前步 MC 源粒子总数. 从 (6) 式和 (7) 式可以看出, 当网格的物质温度  $T_m$  和辐射温度  $T_r$  较低, 或体积  $V_i$  较小时, 分配到的 MC 源粒子较少. 根据第 2 节的分析, 这将导致辐射强度计算误差较大.

为了解决网格 MC 源粒子数少的问题, 可以人为增大这类网格的 MC 源粒子数, 即采用偏倚抽样方法. 由于各网格的温度随时间变化, 故各网格每个时间步所分配到的粒子数需要随时间自适应的动态变化. 同时, 为了保证计算结果的无偏性需要针对源粒子的权重做纠偏处理. 纠偏的后果是源粒子的权有大有小, 尤其是辐射波头附近网格的源粒子权相差可能很大. 这时大权粒子可能进入源小权网格内并引起大的权波动. 对于 MC 计算, 如果网格内粒子权涨落太大, 则会造成方差太大, 依然难以快速收敛, 因此必需控制网格内粒子权的变化范围. 采用“权窗”技术可以较好地控制粒子权波动. 因此, 本方法称为“自适应动态分配源粒子结合权窗方法”, 其大致的操作步骤如下.

1) 以上一步计算得到的辐射能量密度和材料温度分布为基础动态设定各网格的重要性 ( $IMP_{i,n}$ ) 值, 以网格重要性值 (而不是辐射源能量) 分配 MC 源粒子数:

$$M_{i,n} = \frac{IMP_{i,n}}{IMP_{t,n}} \cdot M_t, \quad (10)$$

其中, 对所有网格的重要性求和表示为

$$IMP_{t,n} = \sum_{i=1}^I IMP_{i,n}.$$

网格的重要性值设定遵循两条原则: 一是辐射波传播到的网格 (包括波头) 重要性高, 其他网格重要性低; 二是在温度基本相等情况下, 体积小网格重要性高.

2) 计算各网格 MC 源粒子的初始权重:

$$W_{i,n} = \frac{E_{i,n} \cdot M_t}{E_{t,n} \cdot M_{i,n}}. \quad (11)$$

3) 设置当前步各网格的权窗:

为了防止相邻网格的大权粒子进入本网格后引起的方差增大, 同时防止邻近网格的小权粒子进入本网格后引起的机时浪费, 针对每个网格设置权窗<sup>[23]</sup>. 通常情况下, 权窗上界、下界值可分别设置为

$$W_{i,n}^{\text{top}} = 2W_{i,n}, \quad W_{i,n}^{\text{bot}} = 0.5W_{i,n}.$$

4) 跟踪粒子历史, 并应用轮盘赌和分裂技巧处理超出权窗范围的粒子.

如图 7 所示, 当粒子由相邻网格进入当前网格时, 如果粒子的权重  $W$  超过当前网格的权窗上限 (图中上面的粒子), 则粒子分裂为  $k = \text{ceiling}(W/W_{i,n}^{\text{top}})$  个权为  $W/k$  的粒子并依次跟踪; 如果粒子的权重  $W$  低于当前网格的权窗下限 (图 7 中下面的粒子), 则粒子以概率  $1 - W/W_{i,n}^{\text{bot}}$  被杀死, 以概率  $W/W_{i,n}^{\text{bot}}$  存活且同时将权变为  $W_{i,n}^{\text{bot}}$ .

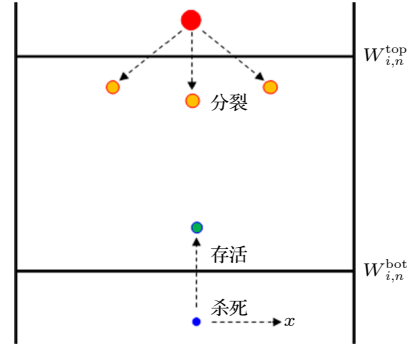


图 7 基于权窗的轮盘赌和分裂技术示意图

Fig. 7. Weight window with splitting and Russian Roulette.

5) 当前时间步所有粒子跟踪完后, 统计各网格剩余粒子权和辐射强度, 计算网格物质温度、辐射温度、统计误差等, 判断是否继续追加 MC 源粒子数.

6) 预估下一步温度和误差, 回到步骤 1), 开展下一步粒子输运模拟, 直至所有时间步结束.

此方法可提高低温网格或小体积网格的 MC 源粒子数, 同时由于采用了权窗及与之相匹配的轮盘赌和分裂技术, 统计涨落不大, 理论上这些低温或小网格的辐射强度统计误差将会下降.

### 3.2 辐射强度的解析估计方法

利用 IMC 方法模拟辐射输运时, 当前时间步内的辐射强度  $I(\mathbf{r}, \nu, \Omega)$  可用辐射光子各次散射对通量的贡献和来表示:

$$I(\mathbf{r}, \nu, \Omega) = \sum_{n=0}^{\infty} I_n(\mathbf{r}, \nu, \Omega), \quad (12)$$

其中  $I_n(\mathbf{r}, \nu, \Omega)$  为光子  $n$  次散射后对辐射强度的贡献,  $I_n(\mathbf{r}, \nu, \Omega) dV d\nu d\Omega$  表示光子在第  $n$  次散射到第  $n+1$  次散射之间, 在点  $\mathbf{r}$  的体积元  $dV$  内、频率  $\nu$

及运动方向  $\Omega$  属于  $d\Omega$  的平均径迹长度.

如图 8 所示, 辐射光子  $n$  次散射 ( $n=0$  时为源光子) 后对网格  $i$  的辐射强度贡献的解析估计值为

$$I_n^*(V_i) = W_n \int_{s_1}^{s_2} \exp \left\{ - \int_0^s K_a(\mathbf{r}_n, +l\Omega_n, \nu_n) dl \right\} ds, \quad (13)$$

式中,  $W_n$  是  $n$  次散射后光子的权;  $s_1$  和  $s_2$  分别为光子由点  $\mathbf{r}_n$  出发, 沿  $\Omega_n$  方向到达网格区域  $V_i$  的近端和远端的交点的距离. 如果点  $\mathbf{r}_n$  在  $V_i$  内, 则  $s_1 = 0$ ; 如果光子沿  $\Omega_n$  方向与  $V_i$  有多段相交, 则需将每个相交线段的贡献都计入; 如果粒子沿  $\Omega_n$  方向与  $V_i$  不相交, 则  $I_n^*(V_i) = 0$ .

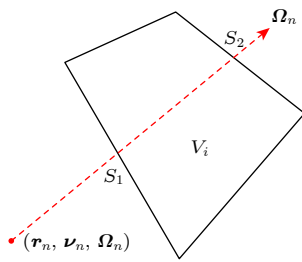


图 8 解析估计示意图

Fig. 8. Analytical estimation for specific intensity tally.

解析估计法既有优点也有缺点. 优点: 光子每发生一次碰撞 (包括辐射源点) 都要记录其对辐射强度的贡献值, 而且是直接解析计算, 因此该方法的方差小. 缺点: 由于每次碰撞都要附加额外计算, 且包含指数函数的计算, 将导致计算时间长. 因此, 在实际处理过程中只针对局部重点关注区域采用此方法, 例如辐射波波头附近部分网格、球心部分小网格等, 以解决邻近网格进入本网格的轨迹少所导致的径迹长度记录数少、辐射强度计算误差大问题, 从而达到全局降方差目的.

## 4 方法验证与应用

### 4.1 全局降方差方法的验证

首先, 在三维辐射输运数值模拟程序 IMC3D 中实现了该方法. 然后开展方法的有效性验证, 验证算例依然采用含入射源的 Marshak 波动问题. 算例模型基本参数如下: 一维平板, 等距分 100 层, 每层厚度 0.005 cm; 初始物质温度为 10 eV; 初始辐射温度为 0; 比热为  $0.1 \text{ Jerks} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{keV}^{-1}$ ; 吸收截面为  $100/T^3 \text{ cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ ,  $T$  是物质温度; 辐射源为左

端面  $X=0$  处 1 keV 平面黑体辐射源.

分以下 3 种情况 (方法) 分别进行数值模拟, 并分析结果.

情况 I: 采用空间自适应分配源粒子方法并结合权窗技巧的模拟.

情况 II: 采用空间自适应分配源粒子方法, 同时在时间维度上动态分配源粒子, 结合权窗技巧的模拟.

情况 III: 采用空间自适应分配源粒子方法, 在时间维度上动态分配源粒子, 结合权窗技巧, 同时采用辐射强度的解析估计方法计算波头部分网格的模拟.

图 9 展示了情况 I 采用空间自适应分配源粒子方法前 (old, o) 后 (new 1, n1) 的源粒子分配情况. 横坐标是空间位置、纵坐标是源粒子数, 6 条线分别代表新旧方法 3 个时刻的结果. 显然, 同一时刻新方法的源粒子空间分布明显更均匀, 重要的是新方法使得波后部分的源粒子数减少, 波头部分的源粒子数增加, 达到增加波头位置源粒子数之目的. 特别说明: 辐射波到达之前的网格 (图中源粒子数为 0 的位置), 由于温度太低、无法分配到源粒子, 也无需分配源粒子去计算.

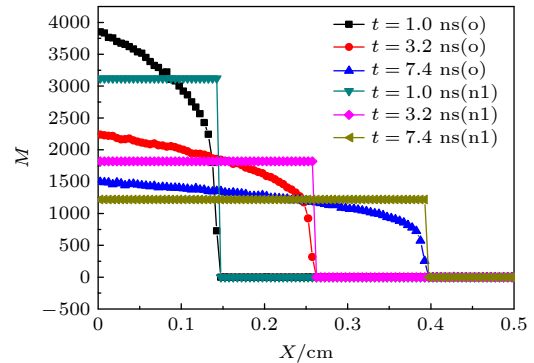


图 9 源粒子分配数比较 (old vs. new 1)

Fig. 9. Comparison of the source particles (old vs. new 1).

图 10 展示了情况 I 新旧方法计算出的 3 个时刻的误差空间分布情况. 图中波后误差略有上升, 波头误差下降 1 倍左右, 波头误差与波后误差的比值由原来的 4 倍变为了 1.5 倍左右. 但是, 从图 10 的结果来看, 仅采用空间自适应分配源粒子方法仍存在不足: 1) 误差的空间分布仍然不够均匀; 2) 误差的时间分布不均问题未得到解决 (7.4 与 1.0 ns 的最大误差比为  $0.028/0.016 = 1.75$ ).

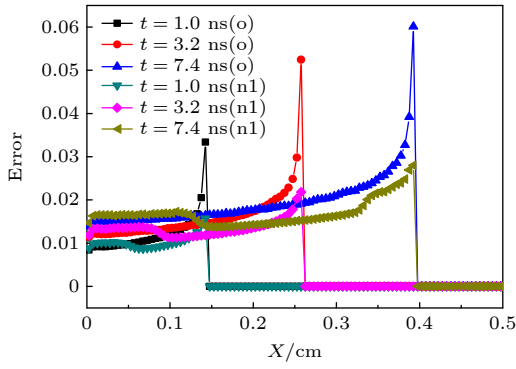


图 10 误差分布比较 (old vs. new 1)

Fig. 10. Comparison of statistical error (old vs. new 1).

为了解决误差的时间分布不均问题,除了采用空间自适应分配源粒子方法之外,又在时间维度上动态分配源粒子,即情况 II. 图 11 展示了此情况下新 (new 2, n2) 旧 (old) 方法计算出的 3 个时刻的源粒子分配情况. 显然,源粒子的分配不仅在空间维度上均匀,在时间维度上 (不同时刻) 也较情况 I 均匀多了,3 个时刻的波后波头网格分配到的源粒子数大致相等. 从图 12 可以看出,误差的时间分布不均问题基本得到解决 (7.4 与 1.0 ns 的最大误差比为  $0.022/0.02 = 1.1$ ).

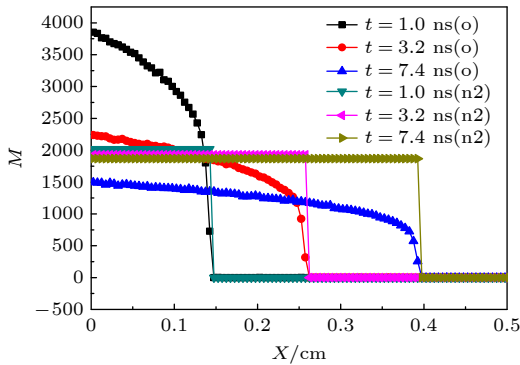


图 11 源粒子分配数比较 (old vs. new 2)

Fig. 11. Comparison of the source particles (old vs. new 2).

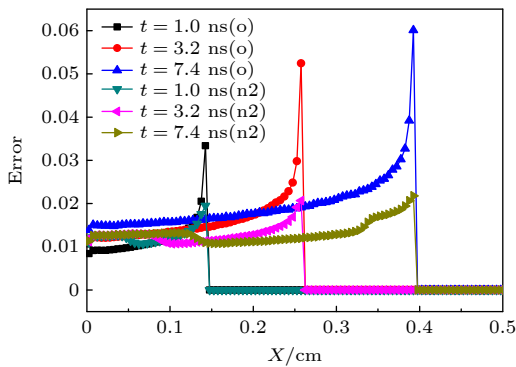


图 12 误差分布比较 (old vs. new 2)

Fig. 12. Comparison of statistical error (old vs. new 2).

从图 12 的结果来看, 仍然存在误差的空间分布不够均匀、尤其是波头部分网格误差偏大的问题. 为此, 进一步专门针对波头位置的网格采用“解析估计方法”计算辐射强度, 即情况 III. 图 13 展示采用解析估计方法前 (new 2) 后 (new 3) 的误差分布情况, 结果表明波头附近网格误差进一步降低.

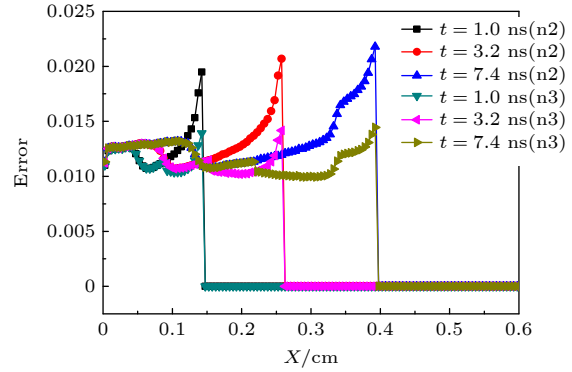


图 13 误差分布比较 (new 2 vs. new 3)

Fig. 13. Comparison of statistical error (new 2 vs. new 3).

图 14 展示采用 3 种方法 (情况 III, new 3) 后的总体效果, 与本文研究之前 (原方法, old) 结果相比, 有以下不同.

1) 误差的空间分布 ( $X$  轴方向) 不均匀性得到显著改善: 网格辐射强度最大误差与最小误差的比值由原来的约 4 倍变为约 1.3 倍.

2) 误差的时间分布 (3 个时刻) 不均匀性得到显著改善: 网格辐射强度误差不再随时间演化而不断上升, 不同时刻的误差整体水平基本保持一致.

3) 辐射波波头位置 ( $X = 0.1425, 0.2575, 0.3925$ ) 的辐射强度计算误差得到显著改善, 相同计算源粒子条件下, 误差下降 2—4 倍, 且波头误差均控制在 1.5% 之内.

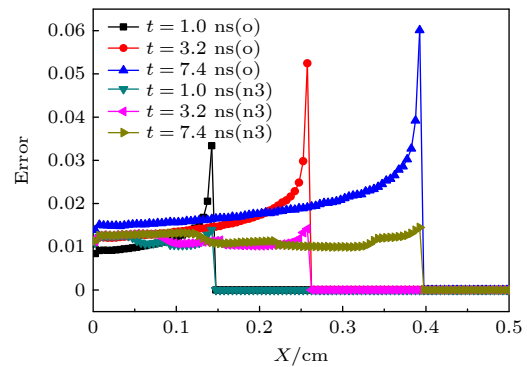


图 14 误差分布比较 (old vs. new 3)

Fig. 14. Comparison of statistical error (old vs. new 3).

表 1 计算时间及计算效率比较  
Table 1. Comparison of calculated CPU time and efficiency.

	原方法	情况I	情况II	情况III
实际计算时间/min	606	852	863	971
时间比值(情况 $x$ /原方法)	1.0	1.4	1.4	1.6
7.4 ns时刻波头误差	0.06011	0.02799	0.02179	0.01445
等效计算时间/min	606	185	113	56
效率提升(情况 $x$ /原方法)	1.0	3.27	5.36	10.82

注: 等效时间折算方法. 根据“误差与源粒子数的 $1/2$ 次方呈反比”、“源粒子数与计算时间呈正比”原则, 在误差相等条件下, 等效时间 = 情况 $x$ 实际计算时间 $\times$ (情况 $x$ 误差的 $2$ 次方/原方法误差的 $2$ 次方).

总之, 采用了本文的全局降方差方法之后, 验证算例的网格辐射强度计算误差在整个时空范围内相对比较均匀, 且最大误差可控. MC 方法模拟粒子输运问题时, 采用降方差方法通常需要增加额外的计算量, 因此理论上相同源粒子数的计算时间也会有所增加. 那么, 计算时间的增加与误差的降低就是相互矛盾, 因此方法的优劣评估需要综合考虑这两个因素. 对于本文算例, 相同计算源粒子数条件下, 全局降方差方法的实际计算时间较原方法有大约 60% 的增长. 但是, 如果以 7.4 ns 波头位置的误差相等为标准进行时间等效折算, 则计算时间可节约 10 倍左右, 如表 1 所列.

## 4.2 全局降方差方法的应用

上面 benchmark 算例验证结果表明, 全局降方差方法能够有效地降低整体计算误差、提高计算效率. 项目组进而利用 IMC3D 程序开展 ICF 相关数值模拟研究, 研究结果表明程序能够顺利完成各种模型模拟且网格辐射温度误差均在可接受范围之内. 下面介绍应用 IMC3D 程序模拟具有典型三维结构的六孔球腔辐射输运问题相关情况. (注: 在新方法加入之前, 由于局部网格温度波动太大, 程序无法完成计算).

六孔球腔<sup>[24–26]</sup>如图 15 所示, 黑腔形状为球形, 半径 5.5 mm, 腔壁材料为金, 壁厚 50  $\mu\text{m}$ . 黑腔分别如图 15 的 XYZ 轴上对称开有 6 个激光注入孔, 孔半径 1.2 mm, 激光由 6 个孔分别注入并在腔内壁形成 48 组光斑, 光斑在腔内壁的分布(纵剖面图)如图 16 所示. 激光在 20 ns 内注入, 激光能量注入强度如图 17 所示<sup>[27]</sup>, 注入的总能量为 1.85 MJ. 图 18 给出了 IMC3D 程序模拟的黑腔温度演化曲线(黑线), 同时还对比了文献<sup>[27]</sup>中的黑腔温度演化曲线(红线). 需要说明的是, 虽然二者

模拟所用的激光能源一致, 但腔型并不一样, 因此严格意义上是不适合比较的. 当然, 根据黑腔能量学的分析, 二者的黑腔材料一致、腔体空间及注入

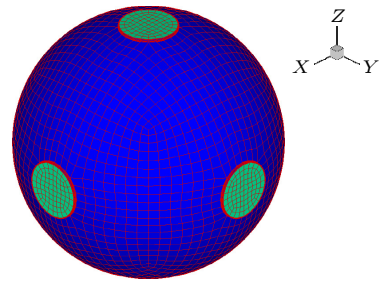


图 15 六孔球腔网格剖分图

Fig. 15. Profile of the octahedral spherical hohlraum.

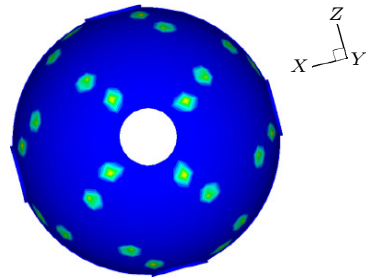


图 16 黑腔壁光斑分布

Fig. 16. Spots on the wall of the hohlraum.

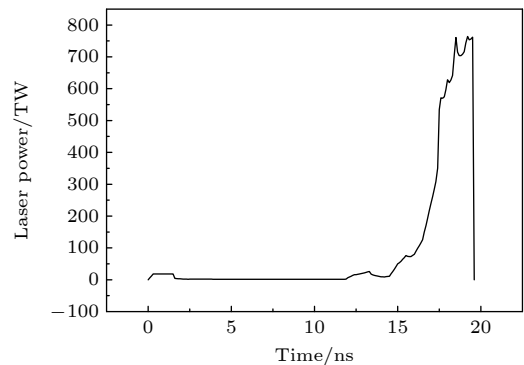


图 17 激光能源注入强度曲线

Fig. 17. Curve of laser power inject to the intensity.



孔面积基本相当、激光注入能量相同, 因此二者腔内辐射温度演化应该大致相当<sup>[28]</sup>, 图 18 的比对结果亦证实了这一点. 该实例验证了程序的模拟能力以及本文方法的有效性.

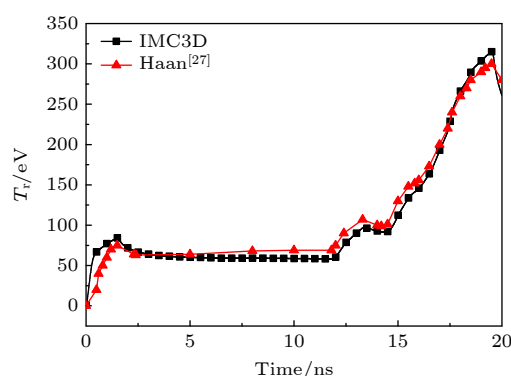


图 18 黑腔辐射温度曲线比较 (IMC3D vs. Haan<sup>[27]</sup>)

Fig. 18. Comparison of the radiation temperature (IMC3D vs. Haan<sup>[27]</sup>).

## 5 结 论

辐射输运问题是 ICF 研究中的重要课题, 利用 IMC 方法模拟此类问题具有显著的特点和优点. 例如, 可以模拟复杂三维结构、频率和角度无需离散近似、能量 (内能+辐射能) 严格守恒等. 但是, MC 方法存在固有的统计误差问题, 尤其是其模拟热辐射输运问题存在的误差时空分布严重不均匀问题, 严重影响了其计算精度和计算效率, 甚至会造成某些实际应用算例无法完成计算. 本文通过理论分析和数值模拟手段找到了决定误差大小的主要因素, 并针对此因素提出了相应的解决方案与计算方法. 将新方法在辐射输运数值模拟程序 IMC3D 上实现, 典型辐射输运 benchmark 问题计算表明, 新方法能够降低整体计算误差, 尤其是需要重点关注的辐射波波头部分的误差降低了 2—4 倍, 且整个时空范围的误差分布相对比较均匀. 对于此算例, 新方法能够有效提升数值模拟的计算效率 10 倍左右. 将包含新方法的程序应用于 ICF 研究中的实际算例模拟, 计算结果显示, 程序能够顺利完成模拟且模拟结果合理, 进一步证实了新方法的有效性. 本项研究工作对于提升 IMC 方法及程序在辐射输运问题中的实用性具有显著的意义, 新方法及程序为 ICF 辐射输运三维数值模拟提供了一种解决方案.

## 参考文献

- [1] Peng H M 2008 *Radiation Transport and Radiation Hydrodynamics in Plasmas* (Beijing: National Defense Industry Press) pp39, 232 (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39, 232页]
- [2] Lindl J D 1995 *Phys. Plasmas* **2** 3933
- [3] Zhang J, Chang T Q 2004 *Fundamentals of the Target Physics for Laser Fusion* (Beijing: National Defense Industry Press) pp1–9 (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—9页]
- [4] Stefano Atzeni, Jurgen Meyer-ter-Vehn (translated by Shen B F) 2008 *The Physics of Inertial Fusion* (Beijing: Science Press) pp23, 254 (in Chinese) [阿采尼, 迈尔·特尔·费恩 著 (沈百飞译) 2008 惯性聚变物理 (北京: 科学出版社) 第23, 254页]
- [5] Pei L C, Zhang X Z 1980 *Monte Carlo Method and Application in Particle Transportation* (Beijing: Science Press) pp1–20 (in Chinese) [裴鹿成, 张孝泽 1980 蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用 (北京: 科学出版社) 第1—20页]
- [6] Kalos M H, Whitlock P A 2022 *Monte Carlo Methods* (Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co KGaA) pp1–34
- [7] Fleck J A, Cummings J D 1971 *J. Comput. Phys.* **8** 313
- [8] 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 LA-UR-05-3781
- [9] Densmore J D, Urbatsch T J, Evans T M, Buksas M W 2007 *J. Comput. Phys.* **222** 485
- [10] Cleveland M A, Gentile N, Palmer T S 2010 *J. Comput. Phys.* **229** 5707
- [11] Densmore J D, Thompson K G, Urbatsch T J 2012 *J. Comput. Phys.* **231** 6924
- [12] Cleveland M A, Wollaber A B 2018 *J. Comput. Phys.* **359** 20
- [13] Marinak M M, Remington B A, Weber S V, Tipton R E, Haan S W, Budil K S, Landen O L, Kilkenny J D, Wallace R 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3677
- [14] Rathkopf J A, Miller D S, Owen J M, et al. 2000 *KULL: LLNL's ASCI Inertial Confinement Fusion Simulation Code* (Livermore: Lawrence Livermore National Laboratory) UCRL-JC-137053
- [15] 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]
- [16] Li S, Deng L, Tian D F, Li G 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 239501 (in Chinese) [李树, 邓力, 田东风, 李刚 2014 物理学报 **63** 239501]
- [17] Li S, Lan K, Lai D X, Liu J 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 145203 (in Chinese) [李树, 蓝可, 赖东显, 刘杰 2015 物理学报 **64** 145203]
- [18] Li S, Lan K, Liu J 2015 *Laser Part. Beams* **33** 731
- [19] 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]
- [20] Marshak R E 1958 *Phys. Fluids* **1** 24
- [21] Pomraning G C 1979 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **21** 249
- [22] Hurricane O A, Hammer J H 2006 *Phys. Plasmas* **13** 113303
- [23] Cooper M A 1999 *Ph. D. Dissertation* (Ann Arbor: University

- of Michigan)
- [24] Lan K, Liu J, Lai D X, Zheng W D, He X T 2014 *Phys. Plasmas* **21** 010704
- [25] Huo W Y, Liu J, Zhao Y Q, Zheng W D, Lan K 2014 *Phys. Plasmas* **21** 114503
- [26] Lan K, Liu J, Li Z, et al. 2016 *Matter and Radiation at Extremes* **1** 8
- [27] Haan S W, Lindl J D, Callahan D A, et al. 2011 *Phys. Plasmas* **18** 051001
- [28] Cao H, Chen Y H, Zhai C L, Zheng C Y, Lan K 2017 *Phys. Plasmas* **24** 082701

# Global variance reduction method for Monte Carlo simulation of thermal radiation transport\*

Li Shu<sup>1)2)†</sup> Wang Yang<sup>2)</sup> Ji Zhi-Cheng<sup>1)</sup> Lan Ke<sup>1)</sup>

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

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

( Received 16 February 2023; revised manuscript received 4 May 2023 )

## Abstract

The implicit Monte Carlo (IMC) method is an important numerical approximation method of simulating the thermal radiative transfer problems under high temperature condition. However, one problem plaguing the IMC method is that the calculation error distributions of the radiation specific intensities are highly asymmetric in space and time. By theoretical analysis and numerical simulations, we find that the error is affected by the records of track in the tallying mesh. Accordingly, a global variance reduction method for implicit Monte Carlo simulation is developed and the corresponding formulas are derived. This method includes three key techniques: 1) the automated dynamic distribution method for the Monte Carlo simulation source particles; 2) the dynamic weight-window technique and the none-bias weight revise algorithm that is suited to the particle distribution method; 3) the analytical estimation variance reduction method of the radiation specific intensity. In view of the above, a three-dimensional simulation code, named IMC3D, is developed to simulate the thermal radiative transfer phenomena. The typical thermal radiative transport problem, known as Marshak wave, is simulated. The simulation results indicate that the global variance reduction method for implicit Monte Carlo makes the statistical errors much more symmetric in space and time and the maximum of error is controllable, thereby increasing the calculation speed approximately 10 times. The new IMC method and code are used for simulating the radiative transportation in hohlraum of ICF successfully.

**Keywords:** implicit Monte Carlo method, thermal radiative transfer, global variance reduction method, inertial confinement fusion

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

**DOI:** 10.7498/aps.72.20230218

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12035002) and the Yu Min Foundation of China Academy of Engineering Physics, China (Grant No. FZ025).

† Corresponding author. E-mail: [li\\_shu@iapcm.ac.cn](mailto:li_shu@iapcm.ac.cn)

## 高温热辐射输运模拟的蒙特卡罗全局降方差方法

李树 王阳 姬志成 蓝可

## Global variance reduction method for Monte Carlo simulation of thermal radiation transport

Li Shu Wang Yang Ji Zhi-Cheng Lan Ke

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 139501 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230218

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230218>

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

#### 热辐射输运问题的高效蒙特卡罗模拟方法

An efficient Monte Carlo simulation method for thermal radiation transport

物理学报. 2020, 69(2): 029501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191315>

#### 惯性约束聚变装置中靶面光场特性的统计表征方法

Method of statistically characterizing target plane light field properties in inertial confinement fusion device

物理学报. 2019, 68(8): 084207 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182091>

#### 球几何中辐射源粒子抽样方法的改进

Modification of method of sampling radiation source particle in spherical geometry

物理学报. 2020, 69(11): 119501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200024>

#### 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>

#### 多物理耦合计算中动态输运问题高效蒙特卡罗模拟方法

Efficient Monte Carlo algorithm of time-dependent particle transport problem in multi-physics coupling calculation

物理学报. 2022, 71(9): 090501 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211474>

#### 蒙特卡罗临界计算全局计数问题新策略研究

New strategy for global tallying in Monte Carlo criticality calculation

物理学报. 2019, 68(12): 122801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182276>