arXiv:2303.06634v1 [physics.comp-ph] 12 Mar 2023

频率相关的辐射输运方程离散隐式蒙特卡罗方案

Elad Steinberg [1], * 和 Shay I. Heizler [1], †

[1]拉卡物理研究所，希伯来大学，9190401 耶路撒冷，以色列

摘要

本工作将用于模拟辐射输运方程的离散隐式蒙特卡罗（DIMC）方法从灰体处理推广至频率相关情形。数十年来一直得到应用的经典隐式蒙特卡罗（IMC）算法存在一个众所周知的数值问题，即瞬移：由于空间和时间分辨率的有限尺度，光子的传播速度可能快于精确解。半模拟蒙特卡罗算法提出使用两类粒子：光子和物质粒子，后者在光子被吸收时产生。物质粒子只能通过黑体发射转化为光子来“传播”。尽管该算法能够产生无瞬移的结果，但由于吸收—发射过程的离散性，其结果比IMC噪声更大。在此前的工作中， [Steinberg and Heizler, ApJS, 258:14 (2022)], 提出了DIMC的灰体版本。该版本使用两类粒子，因此能够得到无瞬移的结果，同时还采用了IMC的连续吸收算法，从而产生更平滑的结果。本工作是对DIMC算法的直接频率相关（能量相关）推广。我们在若干一维和二维基准测试中发现，这种新的频率相关DIMC算法一方面能够产生无瞬移的结果，另一方面还能获得具有类似IMC噪声水平的平滑结果。

* elad.steinberg@mail.huji.ac.il

† shay.heizler@mail.huji.ac.il

I. 引言

辐射输运方程（RTE）是模拟与物质相互作用的光子输运的关键方程，用于计算光子相空间密度的比强度 [1, 2]。求解RTE对于理解许多天体物理现象（例如超新星、冲击波突破等） [3, 4], 以及模拟惯性约束聚变（ICF） [5] 和一般意义上的高能量密度物理（HEDP） [6]至关重要。

辐射输运方程（RTE）是描述光子的玻尔兹曼方程，其中主要的物理过程是通过材料不透明度发生的吸收和黑体发射；在假设物质本身处于局域热力学平衡状态，且电子以给定温度下的麦克斯韦-玻尔兹曼分布进行分布的情况下，材料不透明度通常是材料温度和密度的函数 [1]。此外，还可能涉及散射项，其中散射可以是弹性的，例如采用汤姆孙近似，也可以是非弹性的，例如采用完整的康普顿处理 [1, 2]。

玻尔兹曼方程是一个积分微分方程，在三维情况下，相空间包含 7 个独立变量：3 个空间变量、3 个速度分量（通常替换为能量和方向）以及时间 [1, 7]。完整的解析解十分罕见，只有在非常简化的问题中才能获得。对于一般情况，尤其是在高维情况下，通常采用数值解法，主要有两种途径：对描述光子的确定性玻尔兹曼方程进行数值求解，或采用统计方法，例如蒙特卡罗技术。求解确定性玻尔兹曼方程最常见的近似方法是球谐函数方法（也称为 P_N近似），该方法将强度分解为其各阶矩 [1, 7], ；以及离散纵标法（也称为 S_N 方法），该方法在选定的一组离散纵标上求解强度 [1, 7]。统计方法采用基于粒子的蒙特卡罗（MC）方法，其中辐射输运中最常用的一种方法称为隐式蒙特卡罗（IMC）方法，由 Fleck 和 Cummings 提出 [8, 9]。

IMC 的主要创新在于对玻尔兹曼方程进行了隐式化 [8]。由于辐射通过黑体发射与物质耦合，求解辐射输运的显式方法是使用时间步开始时的温度。在光学薄介质中，这一假设是合理的，因为物质与辐射之间可能存在显著差异。然而，在光学厚介质中，辐射

和物质能量可能都很大，但彼此相近，因此需要使用非常小的时间步长以保持解的稳定性。Fleck 和 Cummings [8] 通过对物质能量方程进行有限差分，并将其代入辐射玻尔兹曼方程，提出了辐射蒙特卡罗的一种隐式版本。这样即使在光学厚介质中，也能够使用足够大的时间步，并利用合理的计算机资源对辐射输运进行建模。IMC 的第二项创新是采用隐式（或连续）吸收算法 [8–10]。该算法不再将吸收机制视为离散的统计事件，而是让光子沿其运动轨迹将能量沉积到空间网格单元中。与朴素的显式蒙特卡罗相比，该算法能够产生显著更加平滑的结果。经过一些修改和改进后，IMC算法在过去五十年中一直得到应用 [9, 11–27]。

然而，IMC 存在一种众所周知的数值缺陷，称为瞬移：由于有限的空间分辨率和时间步长，光子的传播速度会超过其应有速度 [13, 14, 28]。在最简单的 IMC 实现中，当光子到达冷的不透明单元时，由于平均自由程（mfp）很短，它们会在单元外侧被吸收，从而使单元温度略有变化。在下一个时间步长中，因黑体发射而产生的光子会从整个单元体积中均匀抽样，这会导致人为的传播。此外，在空间分辨率有限时，这可能会产生某个“神奇”的时间步长，此时结果是正确的；而进一步减小时间步长反而会增大数值误差 [28, 29]。解决这一问题的一种巧妙方法称为半模拟蒙特卡罗（SMC），由 Ahrens 和 Larsen 提出 [30], ，它使用两类粒子：光子和物质粒子。光子在介质中以光速传播 c ，直至被吸收，随后转变为物质粒子（速度为零）。物质粒子可通过黑体发射过程转变为光子。这样，光子只能在其被吸收的位置产生，从而避免瞬移误差。遗憾的是，该方案是显式的，因此在涉及光学厚区域时必须采用较小的时间步长。

最近，在一项开创性工作中，Po¨ette 和 Valentin 提出了 SMC 的一种隐式版本 ISMC，使得可以使用足够大的时间步长 [28]。这种新方法提供了一种新的隐式化技术，使辐射输运方程和物质能量方程关于辐射比强度和物质能量均呈线性形式，并且可以通过使用光子和物质粒子的蒙特卡罗技术进行建模。该方法已

通过涉及不透明介质的一维灰色基准算例进行了验证，所得结果未受到传送误差的影响。随后，ISMC方法被推广到频率相关问题，在许多一维和二维几何（包括 XY 和 RZ 对称性）的灰色及频率相关基准测试中均取得了出色的结果 [29]。

Po¨ette、Valentin 和 Bernede 最近发表了另一项重要工作，在传统（灰色）IMC代码框架内消除了传送误差，该方法称为 nssIMC（即无源采样IMC） [23]。这项工作介绍了对传统IMC代码所需进行的极少修改：取消经典的源采样，并将源事件作为“碰撞事件”处理，从而避免瞬移。然而，与 ISMC 相比，nssIMC 在空间分辨率和有限时间步长方面的收敛速度都更慢（请参见 [23] 中的图3）。此外，在给定分辨率下，与 ISMC 相比，nssIMC 产生的结果噪声更大（ [23] 中的图4），且鲁棒性较低。因此，在允许进行 ISMC 修改的情况下，作者建议优先选择 ISMC，而不是 nssIMC。

然而，由于对吸收和黑体发射过程进行了离散处理，SMC 和 ISMC 得到的结果都比 IMC 噪声更大。此外，由于粒子的总数（包括光子和物质粒子）保持不变，对于辐射与物质热容量差异较大的问题，需要较大的统计样本才能收敛。最近，有人提出了一种称为离散隐式蒙特卡罗（DIMC） [31] 的新算法：一方面，该算法采用两类粒子的思想，从而得到无瞬移的结果；另一方面，它采用连续（隐式）吸收算法，因此能够像 IMC 一样产生平滑结果。这得益于一种既能避免粒子数量爆炸、又能保持正确角分布和空间分布的算法。DIMC 是基于 IMC线性化推导的，但这并非必然选择；同样也可以通过 ISMC线性化和隐式化来推导。该算法已针对多个灰色基准算例进行了测试，包括一维算例（含或不含流体动力学）和二维算例。在本文中，我们将 DIMC方法扩展到频率相关问题。新的频率相关DIMC方法将与 [29] 中采用 ISMC 测试过的所有频率相关基准算例进行比较。我们重新进行 [29], 中的频率相关基准测试，并在每幅图中加入相应的 DIMC 结果。

本文结构如下：在第二节中，我们介绍频率相关版本的 DIMC。在第三节中，我们介绍几个一维频率相关基准测试，而在第四节中

我们介绍一个二维频率相关基准测试。最后，我们在第五节中用简短的结论部分作总结。

II. 频率相关DIMC

基本推导采用经典的 IMC隐式化和线性化推导。对于弹性（汤姆孙）散射情况，辐射输运方程和材料能量的耦合能量平衡方程为 [1]:

$$\frac{1}{c}\frac{\partial I(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\Omega},\nu,t)}{\partial t}+\boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{\nabla}I(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\Omega},\nu,t)=-(\sigma_a(\nu,T)+\sigma_s(\nu,T))I(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\Omega},\nu,t)+\sigma_a(\nu,T)B(\nu,T)+\sigma_s(\nu,T)\int_{4\pi}\frac{I_\nu(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\Omega}',t)}{4\pi}\boldsymbol{d\Omega}' \tag{1a}$$

$$\frac{\partial e(T)}{\partial t}=c\int_0^\infty\left[\sigma_a(\nu',T)\left(\int_{4\pi}I(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\Omega}',\nu',t)\boldsymbol{d\Omega}'-4\pi B(\nu',T)\right)d\nu'\right], \tag{1b}$$

其中， $I(\boldsymbol{r},\Omega\ \nu,t)$ 是单位空间 $\boldsymbol{r}$、单位方向 Ω 和单位频率 ν 在时刻 t 的辐射比强度； $\sigma_a(\nu,T)$ 是吸收截面（不透明度），它是材料温度 T 和频率的函数； $\sigma_s(\nu,T)$ 是散射截面； $e(T)$ 是介质单位体积的热能； c 是光速； $B(\nu,T)=\frac{2h\nu^3}{c^2}(\exp\{(h\nu/k_BT)\}-1)^{-1}$ 是普朗克函数（h 是普朗克常数， k_B 是玻尔兹曼常数）。

注意，对 $B(\nu,T)$ 进行的频率积分称为频率积分普朗克函数，其等于 $B(T)=aT^4/4\pi$，而 a 是辐射常数。我们定义一个便捷函数，即普朗克函数与频率积分普朗克函数的比值 $b(\nu,T)\equiv B(\nu,T)/B(T)=4\pi B(\nu,T)/aT^4$。

IMC 背后的基本思想是定义弗莱克参数,

$$f=\frac{1}{1+\beta\sigma_{a,P}(T)c\Delta t} \tag{2}$$

其中， $\beta\equiv\partial aT^4/\partial e$ 是辐射热容与物质热容之比， [8] （取自时间步开始时）， Δt 是离散时间步长， $\sigma_{a,\ p}(T)$ 是普朗克不透明度$\sigma_{a,\ p}(T)\equiv\int_0^\infty\sigma_a(\nu,T)b_\nu d\nu$（同样取自时间步开始时）。事实上，在时间步开始时取热容和不透明度，会使 IMC 的经典实现无法成为全隐式算法 [16, 18]。

对方程 1b 进行有限差分，并使用 β 的定义可得（其中，索引 n 表示前一个时间步，$n+1$ 表示当前时间步）：

$$B^{n+1}(T) = B^n(T)f + (1-f)\int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{\sigma_{a,\nu'}}{\sigma_{a,p}(T)} \frac{I(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\Omega}', \nu', t)}{4\pi} \boldsymbol{d\Omega}' d\nu' \tag{3}$$

即 $B^n(T) = a(T^n)^4/4\pi$和 $b^n(\nu, T) \equiv B^n(\nu, T)/B^n(T) = 4\pi B^n(\nu, T)/a(T^n)^4$。

将公式 3 代入公式 1，可得最终的频率相关 IMC 方程:

$$\frac{1}{c}\frac{\partial I(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t)}{\partial t} + \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\nabla} I(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t) = -(\sigma_a(\nu, T) + \sigma_s(\nu, T))I(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\Omega}, \nu, t) \tag{4a}$$
$$+ f\sigma_a(\nu, T)b^n(\nu, T)B^n(T) + \sigma_s(\nu, T)\int_{4\pi} \frac{I_\nu(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\Omega}', \nu', t)}{4\pi} \boldsymbol{d\Omega}' +$$
$$(1-f)\frac{\sigma_a(\nu, T)b^n(\nu, T)}{\sigma_{a,p}(T)} \int_0^\infty \int_{4\pi} \frac{I(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\Omega}', \nu', t)\sigma_a(\nu', T)}{4\pi} \boldsymbol{d\Omega}' d\nu'$$

$$\frac{\partial e(T)}{\partial t} = cf\left(\int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma_a(\nu', T)I(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\Omega}', \nu', t)\boldsymbol{d\Omega}' d\nu' - \sigma_{a,p}(T)aT^4\right). \tag{4b}$$

这些是基本的频率相关 IMC 方程，其中除了物理散射项（其与频率积分比强度成正比）之外，还有一个额外的“有效”散射项，其与 $1-f$ 成正比。该有效散射项取代了吸收和黑体发射的显式过程，从而能够使用较大的时间步长，同时 $f < 1$。

DIMC的隐式化和线性化方式与经典 IMC相同，即仅对 I 线性化（不同于对 I 和 e [28, 29]均进行线性化的ISMC），物质能量通过公式4b处理。与经典 IMC的区别在于，材料能量也由物质粒子表示，其中数值单元内物质粒子的能量总和恰好等于该单元中物质的总能量。光子只能在物质粒子所在的位置生成，并以连续方式被吸收，从而生成新的物质粒子。为防止粒子数爆炸，研究人员推导出了一种按能量加权合并物质粒子的算法，将时间步结束时每个单元中的物质粒子数限制在约10–30个。关于DIMC算法、光子生成算法、单光子传播以及物质粒子合并算法的更完整描述，见 [31]。频率相关算法唯一的区别在于，当生成新的辐射光子或发生有效散射事件时，光子的新频率以与频率相关IMC和ISMC中发射情况下相同的方式进行采样。传播过程

由不透明度的频率依赖性确定。需要注意的是，与经典 IMC一样，表示光子的蒙特卡洛粒子本身并不是光子，而是“能量包”，代表大量光子（计算实际光子数并不现实）。因此，能量包的频率与其能量之间不存在直接关系，因为一个能量包可能代表许多低能量（或高能量）光子。

DIMC方案中每次时间推进的主要子步骤如下：

- 根据 e 计算单元的温度（其值等于给定单元内所有物质粒子的能量总和）。

- 使用时间步开始时的值计算 f 和 β 的值。

- 生成指定数量的新光子 $N_{\text{光子}}$（能量包），该数量由用户设定；光子的总能量由黑体发射决定 $V\Delta t f \int \sigma_{a,\ p}(T) cB(\nu,T) d\nu$（$V$是单元的体积），与经典 IMC 相同。根据能量对单元内物质粒子的位置进行加权，并从中随机抽样，得到光子的新位置。每个能量包具有相同的能量，随后从单元的能量以及被抽中的物质粒子的能量中扣除该能量。光子的频率按照 IMC 的方法，通过随机抽样分布 $\int \sigma_a(\nu,T) b(\nu,T) d\nu / \sigma_{a,\ P}(T)$ 得到。由于发射显式地取决于不透明度 σ_a，我们构建上述积分的（数值）累积光谱分布，并从不透明度-普朗克加权积分分布中均匀抽样（详情请参阅 [8] 中的 IVA 节）。关于光子生成的详细算法，请参阅 [31] 附录中的算法1。

- 如果存在外部辐射源/边界条件，则会根据其相应的频率分布产生新的辐射光子。

- 辐射光子以速度 c 传播，并计算发生碰撞$d_{\text{碰撞}}$、移动到相邻单元 $d_{\text{网格}}$ 或自由飞行 $d_{\text{时间}}$ 所对应的距离。随后取最小距离，并通过 $\Delta E =$连续计算光子能量的减少量（如前文所述，光子是一个能量包）

$E_{\text{photon}}(1 - \exp(-f\sigma_a(\nu)d))$）。随后，这一能量差会在创建新的物质粒子时保存下来。

• 如果发生碰撞，光子会发生散射，并以（$1-f$）$\sigma_a(\nu)/((1-f)\sigma_a(\nu) + \sigma_s(\nu))$ 的概率从之前相同的分布中采样一个新的频率（即仅针对有效散射）。

• 当光子离开单元或到达时间步末尾时，通过对光子能量损失轨迹进行平均来确定新物质粒子的位置（参见 [31] 附录中的算法2）。在该位置创建一个新的物质粒子，其能量等于光子沉积能量之和。当光子穿过单元边界时，新物质粒子的位置不一定正好位于边界处，而是由光子在旧单元中的轨迹长度决定的，这是由于光子在旧单元内沉积了能量。

• 由于每个光子在每个时间步中至少会创建一个物质粒子，因此会对物质粒子进行合并，直到达到所需的物质粒子数量 $N_{\text{单元中的物质粒子}}$。合并过程会保留物质粒子能量的“质心”（此处的质量指能量）（参见 [31] 附录中的算法3）。我们再次指出，DIMC与经典 IMC之间的主要区别在于源采样；单元的总能量是一个全局量。因此，DIMC至少应与经典 IMC保持一致，并且在避免瞬移误差方面表现更好。

需要指出的是，我们尚未给出DIMC算法无偏的理论证明。然而，从上述数值算例中，我们没有发现任何偏差的证据。我们主要担心的偏差来源是物质粒子的合并算法。我们采用不同的物质粒子合并方法进行了广泛的数值检验。在所有测试方法中，我们提出的算法偏差最小；除我们的方法外，测试方法还包括俄罗斯轮盘赌和梳排序算法。

III. 一维测试

在 [29] 中，我们收集了文献中出现的众所周知的频率相关辐射输运基准测试，并使用这些基准测试了ISMC算法。在本

节中，我们使用这些基准测试来检验一维频率相关场景下的新DIMC方案，其中包括 Olson [32] 以及Densmore等人 [14, 27],最近针对多个光学厚度提出的频率相关基准测试。

A. Olson2020一维

频率相关Olson一维基准测试 [32] 是此前在 [33]中介绍的光学薄源灰体测试的频率相关扩展设置。源项为温度为0.5 keV的黑体，其空间范围由 $Q(x) = B(0.5\text{ keV})\exp\{(-693\cdot x^3)\}$给出，并在时间 $t = 0$ 开启、时间 $ct = 2$关闭。区域中的初始温度 $0 \leqslant x \leqslant 4.8$ (cm)设为$T(t = 0) = 0.01T_{\text{keV}}$ (T_{keV} 表示以keV为单位的温度)，我们使用两端的反射边界条件，将模拟运行至时间 $ct = 4$ 。

材料由碳氢泡沫组成，其频率相关不透明度（单位为cm^2g^{-1}）为:

$$\kappa_a(\nu,T) = \begin{cases} \min(10^7, 10^9(T/T_{\text{keV}})^2) & h\nu < 0.008\text{ keV} \\ \frac{3\cdot10^6(0.008\text{ keV}/h\nu)^2}{(1+200\cdot(T/T_{\text{keV}})^{1.5})} & 0.008\text{ keV} < h\nu < 0.3\text{ keV} \\ \frac{3\cdot10^6(0.008\text{ keV}/h\nu)^2\sqrt{0.3\text{ keV}/h\nu}}{(1+200\cdot(T/T_{\text{keV}})^{1.5})} + \frac{4\cdot10^4(0.3\text{ keV}/h\nu)^{2.5}}{1+8000(T/T_{\text{keV}})^2} & h\nu > 0.3\text{ keV}. \end{cases} \tag{5}$$

宏观吸收截面由 $\sigma_a(\nu,T) = \rho\kappa_a(\nu,T)$ 给出，其中 $\rho = 0.001\text{g/cm}^3$。热容由下式给出:

$$\rho C_V = aT_{\text{keV}}^3 H\left(1+\alpha+(T+\chi)\frac{\partial\alpha}{\partial T}\right) \tag{6a}$$

$$\alpha = \frac{1}{2}e^{-\chi/T}\left(\sqrt{1+4e^{\chi/T}}-1\right) \tag{6b}$$

$$\frac{\partial\alpha}{\partial T} = \frac{\chi}{T^2}\left(\alpha - 1/\sqrt{1+4e^{\chi/T}}\right) \tag{6c}$$

其中 $\chi = 0.1T_{\text{keV}}$ 和 $H = 0.1$。对于所有方案，我们均采用空间分辨率为 128 个等间距网格单元，并将时间步设为常数 $\Delta t = 10^{-13}$。我们尝试使 IMC、ISMC 和 DIMC 中材料温度场的噪声水平保持可比。在 IMC 和 DIMC 情况下，我们每个时间步创建 500 个新光子，并将总数限制为 $4\cdot10^3$；而在 ISMC 情况下，我们每个时间步创建 $5\cdot10^3$ 个新光子

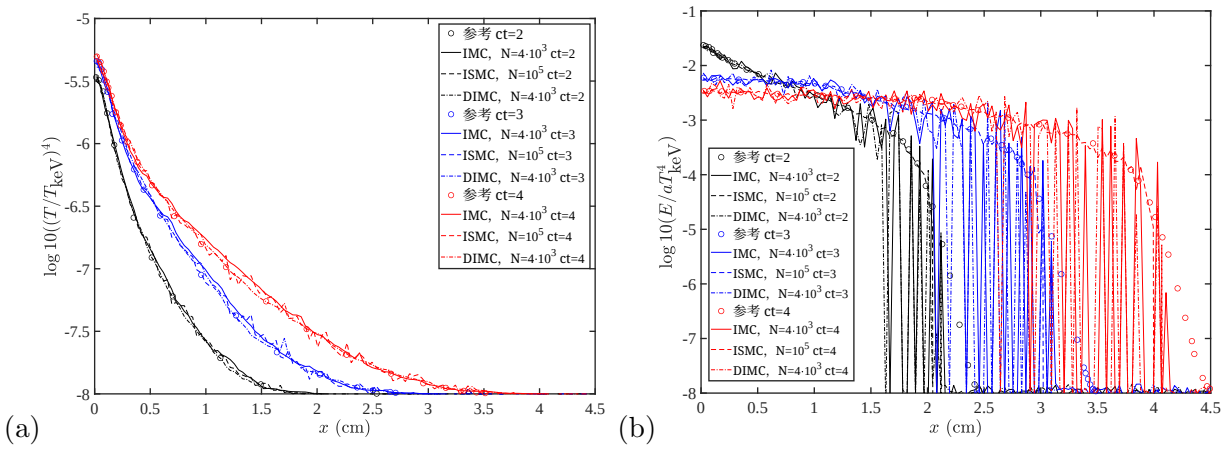


图1. 低统计量 IMC 和 DIMC 运行结果与高统计量 ISMC 运行结果的比较：（a）1D Olson [32] 测试问题在不同时间的材料温度。（b）1D Olson [32] 测试问题在不同时间的辐射能量密度。

并将粒子总数限制为 10^5。对于参考解，我们采用使用 P_N 方案计算得到的解，该方案见于 [32]。

图1(a)展示了不同时间的材料温度，并与参考解进行了比较；辐射能量密度如图1(b)所示。频率相关DIMC方法得出了正确结果，与IMC和ISMC解以及参考解均吻合良好。与ISMC结果一样，在分布尾部附近，辐射强度下降了几个数量级，不同蒙特卡罗格式的离散结果与 P_N的光滑曲线之间存在差异。由于三个方法在粒子数趋于无穷时都会收敛到同一解，因此，为比较不同方案的效率，我们选择达到相近物质能量噪声水平所需的粒子数（因为在大多数情况下，该量比辐射能量更具信息量）。因此，三种方法的材料温度噪声水平几乎相当；而在辐射场中，ISMC的噪声水平低于IMC和DIMC，这符合预期。然而，ISMC运行所需的粒子总数比另外两种方法高出两个数量级。这是因为IMC和DIMC只需相对较低的统计量即可得到平滑的材料分布，而在ISMC中，辐射和物质的噪声水平相近。这意味着对于给定的统计量，ISMC的噪声远高于IMC或DIMC。若要使用ISMC达到相近的噪声水平，总运行时间需要增加至原来的

比 IMC 运行时间长 9.5 倍。

B. Densmore等人 2012

Densmore等人 [27] （Cleveland等人 [14]也进行了相关研究）提出了一维频率相关基准测试，其中光学厚度各不相同：光学薄材料、中等水平（中等）不透明度以及光学厚材料。此外，他们还引入了由两种不同材料或区域组成的组合问题，即热波最初在光学薄材料中传播，随后“撞击”光学厚的“壁”。光学厚介质问题突出了IMC与其他方法之间的差异：IMC会出现瞬移误差，而ISMC和DIMC应当能够在较低的空间分辨率下实现空间收敛，即使在频率相关问题中也不会产生瞬移误差。

首先，在单不透明度 Densmore等人基准测试中，不透明度具有以下形式：

$$\sigma(x,\nu,T)=\frac{\sigma_0(x)}{(h\nu)^3\sqrt{k_BT}} \tag{7}$$

其中，对于光学薄介质， $\sigma_0(x)=10\text{keV}^{7/2}$ ；对于光学中等介质， $\sigma_0(x)=100\text{keV}^{7/2}$ ；对于光学厚介质， $\sigma_0(x)=1000\text{keV}^{7/2}$ 。热容设为 $C_V=10^{15}\text{erg}/T_{\text{keV}}/\text{cm}^3$。区域 $0\leqslant x\leqslant 5$ (cm)内的初始温度为 1 eV，左边界为温度为 1keV 的黑体浴源，右边界为反射壁。空间分辨率取为较小值，即 64 个均匀间隔的单元（用于展示 IMC 中不透明问题的瞬移现象）。测试运行至 $t=1$ ns，时间步恒定为 $\Delta t=0.01$ ns。对于所有运行，我们每个时间步生成 10^5 个光子，并将光子总数限制为10^6。用于比较的参考解取自 Densmore等人 [27]。

图2展示了三种方法在 $t=1$ 纳秒时的材料温度剖面以及参考解。可以看出，对于前两个测试（光学薄和中等不透明度问题），三种方法与参考解之间吻合良好；而在第三个测试（光学厚）中，IMC需要256个单元的空间分辨率才能避免瞬移误差，相比之下，ISMC或DIMC即使使用64个单元也能得到良好的结果。事实上，与参考解相比，DIMC所得结果甚至优于ISMC。再次强调，当粒子数和空间分辨率趋于无穷时，三种方法都会收敛到相同的解。因此，

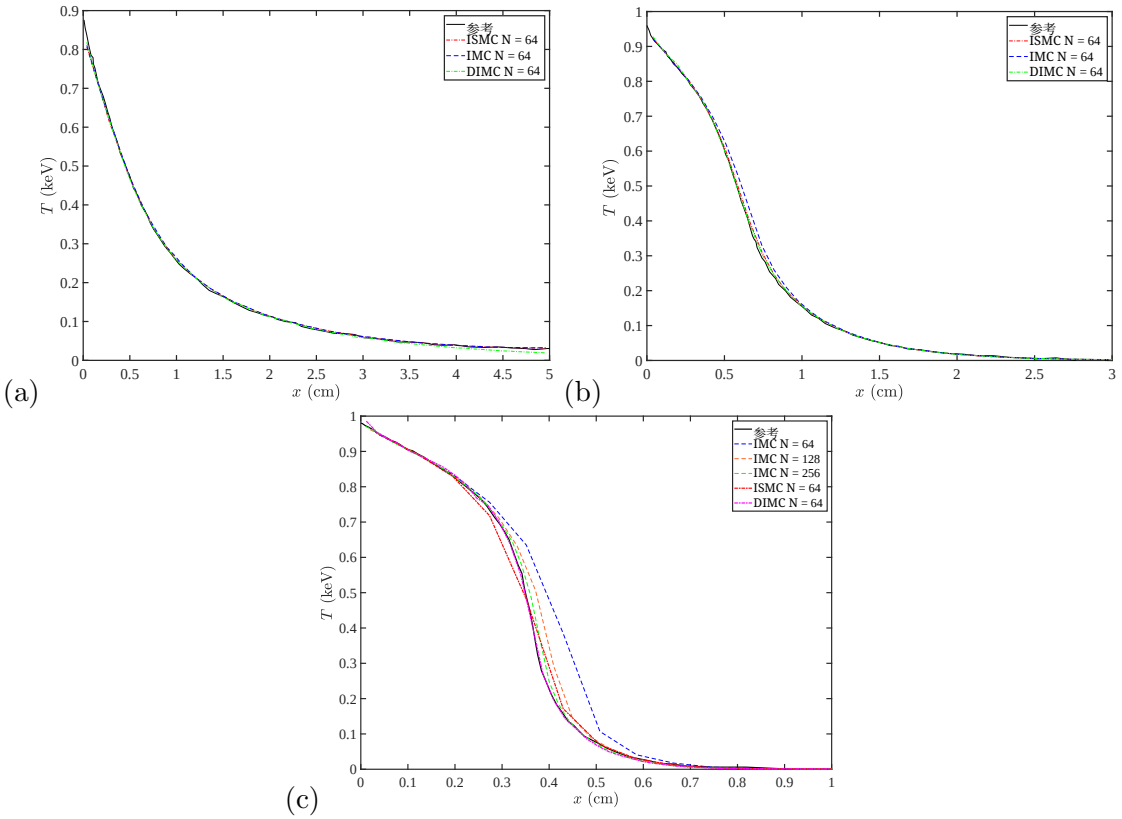


图2. 首三个Densmore等人 [27] 基准测试在时间 $t = 1$ ns时的材料温度。（a） $\sigma_0\,(x) = 10$ keV$^{7/2}$/cm，（b） $\sigma_0\,(x) = 100$ keV$^{7/2}$/cm，以及（c） $\sigma_0\,(x) = 1000$ keV$^{7/2}$/cm。

在这个问题中，我们选择收敛所需的空间分辨率来比较不同方案的效率。在这一指标下，IMC需要高四倍的分辨率，才能达到与ISMC和DIMC相同的精度。

接下来，Densmore等人提出了一个双介质基准测试，用于测试对从光学薄状态到光学厚状态的突变的处理能力。该区域（其中的单元均为等间距网格单元）设定为 $0 \leqslant x \leqslant 3$ (cm)，其不透明度为

$$\sigma_0(x) = \begin{cases} 10 \text{ keV}^{7/2}/\text{cm} & x < 2 \text{ cm}, \\ 1000 \text{ keV}^{7/2}/\text{cm} & x \geq 2 \text{ cm}. \end{cases} \tag{8}$$

图3展示了双介质基准测试中的材料温度（图3(b)放大显示了界面区域）。与光学厚单介质基准测试一样，我们看到，当存在光学厚材料时，新的扩散隐式蒙特卡罗算法（以及ISMC算法）相比IMC需要更低的空间分辨率即可实现收敛，这是由于在IMC模拟中空间分辨率较低时会向不透明材料发生瞬移。

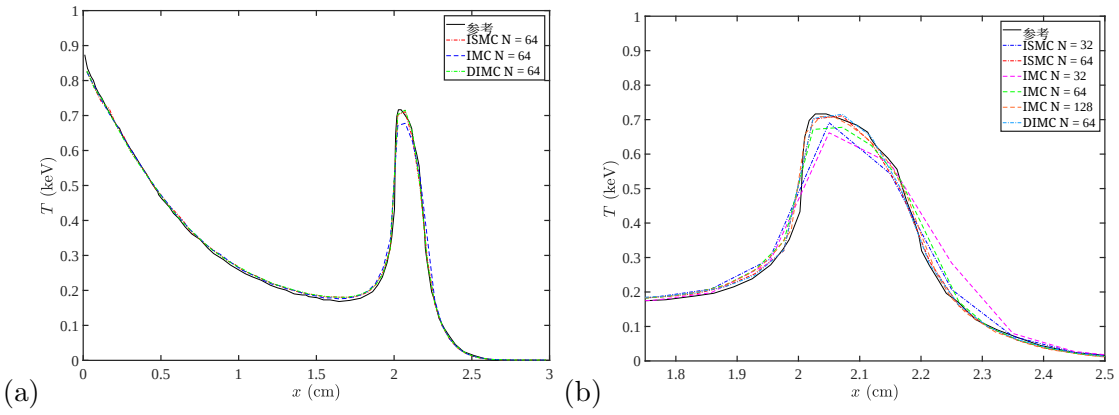


图3. 材料 Densmore等人双介质基准测试在时间 $t = 1$ ns 时的温度测试。(a) 显示整个区域的缩略图，(b) 放大显示位于 $x = 2$ cm 处的光学薄材料与光学厚材料之间的界面。

同样，DIMC与参考解相比能够获得比ISMC更高的精度。

IV. OLSON2020 二维测试

本节针对一个完整的二维问题，介绍新 DIMC方案的频率相关实现，所采用的是 Olson [32]中提出的最复杂二维问题。在该问题中，一个每边长为 3.8 cm 的复杂几何正方形由中等不透明的铝块组成（因此，IMC模拟中不应出现瞬移误差），其周围环绕着与先前 Olson 一维基准问题中相同的泡沫。精确设置如图4所示。铝块的密度与泡沫相同，其热容具有与泡沫相同的函数形式（公式 6），但 $H = 0.5$ 和 $\chi = 0.3T_{\text{keV}}$。铝块的不透明度为：

$$\kappa_a(\nu, T) = \begin{cases} \min(10^7, 10^8 T/T_{\text{keV}}) & h\nu < 0.01 \text{ keV} \\ \frac{10^7 (0.01 \text{ keV}/h\nu)^2}{(1+20\cdot(T/T_{\text{keV}})^{1.5})} & 0.01 \text{ keV} < h\nu < 0.1 \text{ keV} \\ \frac{10^7 (0.01 \text{ keV}/h\nu)^2}{(1+20\cdot(T/T_{\text{keV}})^{1.5})} + \frac{10^6 (0.1 \text{ keV}/h\nu)^2}{1+200\cdot(T/T_{\text{keV}})^2} & 0.1 \text{ keV} < h\nu < 1.5 \text{ keV} \\ \frac{10^7 (0.01 \text{ keV}/h\nu)^2 \sqrt{1.5 \text{ keV}/h\nu}}{(1+20\cdot(T/T_{\text{keV}})^{1.5})} + \frac{10^5 (1.5 \text{ keV}/h\nu)^{2.5}}{1+1000\cdot(T/T_{\text{keV}})^2} & h\nu > 1.5 \text{ keV}. \end{cases} \tag{9}$$

计算区域在每个轴向上划分为 380 个等间距网格单元，并采用反射边界。黑体源 $Q(r) = B(0.5 \text{ keV}) \exp\{(-18.7 \cdot r^3)\}$ 被开启

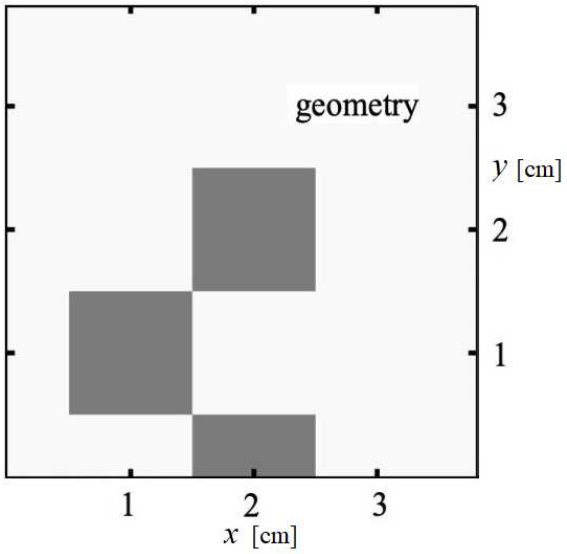


图4。Olson [32]二维频率相关基准测试的几何设置。灰色方块表示不透明区域。

于时间 $t = 0$，并在整个模拟期间保持开启。采用固定时间步 $\Delta t = 10^{-13}$ s，每个时间步创建 $2 \cdot 10^6$ 个新粒子，并将所有方案中的粒子总数限制为 $2.5 \cdot 10^7$ 。

首先，在图5(b-d)中，我们展示了整个区域内辐射能量密度的伪彩色图，以及来自 [32] 的参考结果（图5(a)）。所有蒙特卡罗方法、IMC、ISMC和DIMC在整个计算域内均高度一致，并且与 P_N 参考数据具有良好的定性一致性，包括所有几何图样。

接下来，图6展示了沿对角线的切片结果，包括（a）材料温度和（b）辐射能量密度，以及来自 [32]的参考 P_N 数据。同样，在范围$0 \leqslant r \leqslant \sqrt{0.5}$内，所有方法之间均具有良好的一致性。远离原点后，物质属性中的尖锐不连续性导致蒙特卡罗方法与参考解之间出现小的差异。

V. 结论

在本文中，我们提出了最近引入的离散隐式蒙特卡罗（DIMC）方案的一种频率相关（能量相关）推广 [31]。DIMC 一方面是经典隐式蒙特卡罗实现，但另一方面使用了

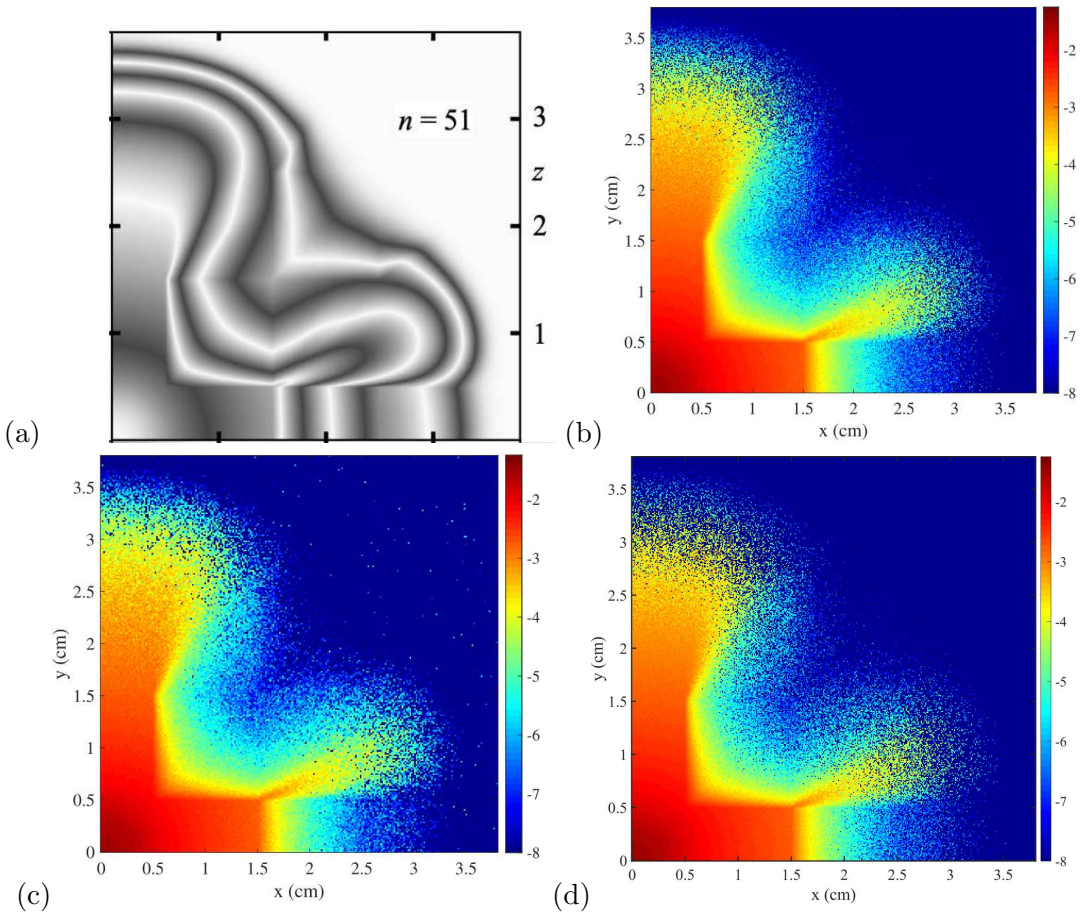


图5。（a）使用 P_{51} 近似时 $ct = 3$ 处辐射能量密度对数的等高线。图（a）取自 [32]。（b）使用IMC方法时 $ct = 3$ 处的辐射能量密度。（c）ISMC方法的结果相同。（d）DIMC方法的结果相同。

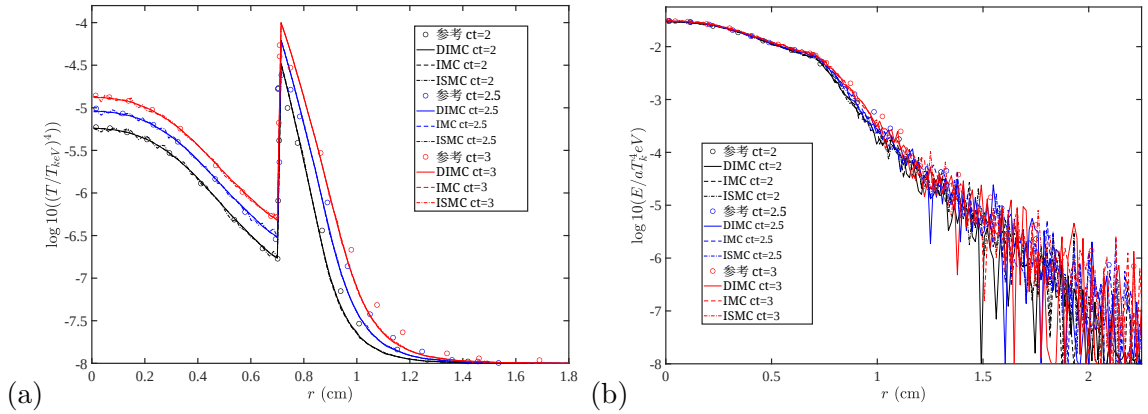


图6。（a）Olson [32] 2D 测试问题在不同时刻的材料温度。（b）Olson [32] 2D 测试问题在不同时刻的辐射能量密度。

Ahrens 和 Larsen [30] 以及之后的 Po¨ette 和 Valentin [28]所引入的用于避免瞬移误差的两类粒子概念。其主要思想是，当光子因吸收而持续损失能量时，会生成一个静止的物质粒子。由黑体辐射产生的新光子仅从物质粒子所在的位置进行采样，从而避免瞬移误差。DIMC 此前已在灰不透明度情形下进行了检验 [31], ，而本工作完成了向频率相关不透明度问题的推广和测试。我们发现，在光学薄问题中，无论是一维还是二维问题，与参考解相比，DIMC 都能得到良好的结果，并且结果比 ISMC 更平滑，同时具有与 IMC 相当的噪声水平。另一方面，为了在相同的噪声水平下收敛，ISMC 需要多出两个数量级的粒子。在光学厚基准算例中，DIMC 得到的结果最佳：即使空间分辨率非常低，也不会产生瞬移误差，这与 ISMC 的结果相同；而 IMC 需要高四倍的空间分辨率才能达到类似结果。数值算例的结果没有显示出 DIMC算法存在偏差的理由，不过，对无偏性的严格证明将留待今后工作。此外，这些基准测试采用了连续的频率依赖性，但结果也应适用于有限数量的群，即多群问题；这可能是未来工作的另一个方向。

附录 A：附录：基本 DIMC算法

在本附录中，我们介绍此前灰色 DIMC 论文 [31] 中所述的 DIMC 基本算法。算法1给出了光子生成过程的概要。算法2展示了完整的光子传播算法。算法3介绍了物质粒子的合并算法。

[1] G. C. Pomraning，《辐射流体力学方程》。培格曼出版社，1973 年。[2] J. I. Castor，《辐射流体力学》。剑桥大学出版社，2004 年。[3] L. Dessart、D. J. Hillier、R. Waldman、E. Livne 和 S. Blondin，“超亮超新星：^{56}镍能量与磁星辐射”，《皇家天文学会月刊》，第 426 卷，第 L76–L80 页，2012 年 10 月。

算法1：光子生成

对所有单元执行 Nphoton $=$ 在单元中生成的光子数；V $=$ 单元的体积；Ephoton $= f\sigma_a cB(T)\Delta t$ V / Nphoton；MaterialParticlesInCell $=$ 单元中所有物质粒子的数组；对 $i = 1$ 到 Nphoton 执行 photon $=$ new Photon()；idx $=$ 根据 MaterialParticlesInCell.energy 加权，从 MaterialParticlesInCell 中随机抽取一个索引；photon.location $=$ MaterialParticlesInCell[idx].location；photon.direction $=$ 采样一个新方向；photon.frequency $=$ 采样一个新频率；photon.energy $=$ Ephoton；MaterialParticlesInCell[idx].energy $-=$ Ephoton；从单元能量中扣除 Ephoton；// 光子的其余属性（即角度、时间）按照 IMC 中的方式确定 结束 结束

[4] B. Katz、R. Budnik 和 E. Waxman，《快速辐射介导激波与超新星激波突破》，《天体物理学杂志》，第716卷，第781–791页，2010年6月。[5] H. Abu-Shawareb 等，《惯性聚变实验中超过点火劳森判据》，《物理评论快报》，第129卷，第075001页，2022年8月。[6] B. Y. Zel'dovich 和 P. Y. Raizer，《激波与高温流体动力学现象物理学》。Dover Publications Inc.，2002年。[7] J. J. Duderstadt 和 W. R. Martin，《输运理论》。Wiley New York，1979年。[8] J. Fleck 和 J. Cummings，《用于计算时间和频率相关的非线性辐射输运的隐式蒙特卡罗方案》，《计算物理学杂志》，第8卷，第3期，第313–342页，1971年。

算法2：单光子传播

x = 光子.位置;

新材料粒子能量 = 0;

当 光子.时间 < 时间 + Δt 时

r =随机数[0, 1];

$d_{\text{collision}} = -\frac{\text{对数}\ (1-r)}{(1-f)\sigma_a(\nu)+\sigma_s(\nu)}$;

d_{mesh} =光子到达单元边界的距离;

d_{time} = 光速 · (时间 + Δt- 光子.time);

d = 最小值($d_{\text{collision}}$, d_{mesh}, d_{time});

ΔE = 光子.能量(1 − 指数{($-f\sigma_a(\nu)d$)});

r =随机数[0, 1];

指数随机数 = − 对数 (1 + r(指数{($-f\sigma_a(\nu)d$)} − 1))/$f\sigma_a(\nu)d$;

x_{create} = 光子.位置 + 指数随机数·Ω · d;

光子.位置 + = Ω · d;

x = (新材料粒子能量 · x + $\Delta E \cdot x_{\text{create}}$) /

(新材料粒子能量 + ΔE);

新材料粒子能量 += ΔE;

光子.能量 − = ΔE;

如果 $d_{\text{collision}} = d$ 则

// 与 IMC 中相同（即更新光子时间、绘制新角度、更新单元能量）

else

创建能量为新材料粒子能量、位置为 x 的新物质粒子;

新材料粒子能量 = 0;

// 其余部分与 IMC 中相同（即更新光子时间、更新单元能量）

end

end

[9] A. B. Wollaber, 《隐式蒙特卡罗的四十年发展》, 《计算与理论输运杂志》, 第45卷, 第1–2期, 第1–70页, 2016年。

[10] T. J. Urbatsch 和 T. M. Evans, 《Milagro Version 2——用于热辐射传输的隐式蒙特卡罗代码：功能、开发与使用》, LA-14195-MS。新墨西哥州：Los-

算法3：物质粒子合并

对所有单元执行

MaterialParticlesInCell = 单元中所有物质粒子的数组；

ParticlesToKeep =长度为 N^{keep} 的物质粒子数组，随机选取

根据其能量从 MaterialParticlesInCell 中加权选取；

对所有 m = MaterialParticlesInCell 中但不在 ParticlesToKeep 内的物质粒子执行

idx = 保留粒子中最近粒子的索引；

保留粒子[idx]。位置 =

（保留粒子[idx].位置 ·保留粒子[idx].能量+ m.位置 ·m.能量）/

（保留粒子[idx].能量 +m.能量）；

保留粒子[idx]。能量 += m.能量；

删除 m；

end

end

阿拉莫斯国家实验室，2006年2月。[11] N. Gentile，“隐式蒙特卡罗扩散——蒙特卡罗时变辐射输运模拟的一种加速方法”，《计算物理学杂志》，第172卷，第2期，第543–571页，2001年。[12] J. D. Densmore，“隐式蒙特卡罗中辐射吸收与再发射空间离散化的渐近分析”，《计算物理学杂志》，第230卷，第4期，第1116–1133页，2011年。[13] A. G. Irvine、I. D. Boyd 和 N. A. Gentile，“降低隐式蒙特卡罗模拟中热发射的空间离散化误差”，Journal of Computational and Theoretical Transport，第45卷，第1-2期，第99–122页，2016年。[14] M. A. Cleveland 和 N. Gentile，“减小依赖频率的混合隐式蒙特卡罗扩散方法中的传送误差”，Journal of Computational and Theoretical Transport，第43卷，第1-7期，第6–37页，2014年。[15] M. A. Cleveland、N. A. Gentile 和 T. S. Palmer，“隐式蒙特卡罗扩散的扩展：多群与差分形式”，《计算物理学杂志》，

第229卷，第16期，第5707–5723页，2010年。[16] N. Gentile，“在隐式蒙特卡罗算法中纳入温度相关不透明度的影响”，《计算物理学杂志》，第230卷，第12期，第5100–5114页，2011年。[17] T. J. Trahan和N. A. Gentile，“源光子发射时间的解析处理：降低隐式蒙特卡罗计算中的噪声”，《输运理论与统计物理》，第41卷，第3–4期，第265–283页，2012年。[18] A. Long、N. Gentile和T. Palmer，“迭代热发射方法：对IMC的更隐式改进”，《计算物理学杂志》，第277卷，第228–247页，2014年。[19] R. G. McClarren和T. J. Urbatsch，“一种用于具有自适应材料耦合的时间相关辐射输运的改进隐式蒙特卡罗方法”，《计算物理学杂志》，第228卷，第16期，第5669–5686页，2009年。[20] Y. Shi、P. Song和W. Sun，“一种用于辐射输运方程的渐近保持统一气体动理学粒子方法”，《计算物理学杂志》，第420卷，第109687页，2020年。[21] Y. Shi、X. Han、W. Sun和P. Song，“隐式蒙特卡罗中辐射输运方程的连续源倾斜方案”，Journal of Computational and Theoretical Transport，第0卷，第0期，第1–26页，2020年。[22] Y. Shi、S. Li、H. Yong和P. Song，“一种用于辐射输运方程的本质隐式蒙特卡罗方法”，Journal of Computational and Theoretical Transport，第48卷，第5期，第180–199页，2019年。[23] G. Po¨ette、X. Valentin和A. Bernede，“光子学旧版IMC代码中的传送误差消除（无倾斜，仅需简单的最小修改）”，Journal of Computational and Theoretical Transport，第49卷，第4期，第162–194页，2020年。[24] R. T. Wollaeger、T. J. Urbatsch、A. B. Wollaber和J. D. Densmore，《IMC中的源倾斜与子单元不透明度采样分析》。LA-UR-12-23258，洛斯阿拉莫斯国家实验室，2012年。[25] R. T. Wollaeger、A. B. Wollaber、T. J. Urbatsch和J. D. Densmore，“采用线性不连续有限元材料求解和分段非恒定不透明度的隐式蒙特卡罗”，Journal of Computational and Theoretical Transport，第45卷，第1–2期，第123–157页，2016年。[26] R. P. Smedley-Stevenson和R. G. McClarren，“热辐射输运中单元温度离散格式的渐近扩散极限”，《计算物理学杂志》，

第286卷，第214–235页，2015年。[27] J. D. Densmore、K. G. Thompson和T. J. Urbatsch，“一种用于频率相关辐射输运模拟的混合输运–扩散蒙特卡罗方法”，《计算物理学杂志》，第231卷，第20期，第6924–6934页，2012年。[28] G. Po¨ette和X. Valentin，“一种用于光子学的新型隐式蒙特卡罗方案（无传送误差且无倾斜）”，《计算物理学杂志》，第412卷，第109405页，2020年。[29] E. Steinberg和S. I. Heizler，“多频隐式半模拟蒙特卡罗（ISMC）二维辐射输运求解器（无瞬移）”，《计算物理学杂志》，第450卷，第110806页，2022年。[30] C. Ahrens和E. Larsen，《灰色辐射输运问题的半模拟蒙特卡罗方法》。盐湖城：ANS数学与计算（M&C）专题会议，2001年9月。[31] E. Steinberg和S. I. Heizler，“一种用于模拟辐射输运问题的新型离散隐式蒙特卡罗方案”，《天体物理学杂志增刊》，第258卷，第14页，2022年1月。[32] G. L. Olson，“用于改善正性和精度的拉伸滤波多群pn输运”，Journal of Computational and Theoretical Transport，第0卷，第0期，第1–18页，2020年。[33] G. L. Olson，“对pn输运方程的正性增强”，Journal of Computational and Theoretical Transport，第48卷，第5期，第159–179页，2019年。