Метод Монте-Карло: обзор алгоритма и характеристик

Представлено на

конференцию пяти лабораторий по вычислительной гидродинамике и переносу

Николас А. Джентайл (Nicholas A. Gentile),
Richard Procassini (Ричард Прокассини)
и Ховард Скотт (Howard Scott)

(ЛНЛЛ)

21 июня 2005 г.

Данная работа выполнена при поддержке Министерства энергетики США Ливерморской национальной лабораторией им. Лоуренса Университета штата Калифорния по контракту № W-7405-Eng-48.

Адрес: Lawrence Livermore National Laboratory, P.O. Box 808, Livermore, CA 94551-0808

Содержание

- Методы Монте-Карло (МК) для расчета переноса
  - Описание общего алгоритма
- Метод Монте-Карло для расчета переноса нейтронов - Критичность
- Неявный метод Монте-Карло (IMC) для расчета переноса излучения
  - Сравнение переноса фотонов и нейтронов
  - Алгоритм метода IMC: Флекк и Каммингс (Fleck and Cummings), Журнал вычислительной физики (JCP) 8, 313 (1971)
  - Сравнение IMC и МК
- Характеристики IMC
- Задачи и направления исследований для расчета переноса излучения методом Монте-Карло

Метод Монте-Карло для расчета переноса частиц

- **Метод Монте-Карло в расчетах переноса частиц – это *статистический* подход к “решению” линеаризованных уравнений Больцмана, приведенному ниже для нейтронов:**

$$\frac{1}{v}\frac{\partial \psi(\vec{r},E,\Omega,t)}{\partial t} + \quad \text{Перенос во времени}$$

$$(\nabla\cdot\Omega)\psi(\vec{r},E,\Omega,t) + \quad \text{Перенос в пространстве}$$

$$\Sigma_a(\vec{r},E')\psi(\vec{r},E,\Omega,t) = \quad \text{Абсорбция при столкновениях}$$

$$\int_{E'}\int_{\Omega'}\Sigma_s(\vec{r},E',\Omega' \rightarrow E,\Omega)\psi(\vec{r},E,\Omega,t)d\Omega' dE' + \quad \text{Рассеяние при столкновениях}$$

$$\chi(E)\int_{E'}\nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\int_{\Omega'}\psi(\vec{r},E,\Omega,t)d\Omega' dE' + \quad \text{Источник деления при столкновениях}$$

$$S_{ext}(\vec{r},E,\Omega,t) \quad \text{Внешний источник}$$

- **Несмотря на то, что пространственная область вычислений разделяется на ячейки или участки, а энергия может быть разделена на группы, данный метод *не* использует *непрерывный* подход к решению интегро-дифференциальных уравнений в отличие от детерминированных методов переноса (с дискретной сеткой (S_N), с расширением переменных (P_N) и т.д.)**
- **Суть расчета переноса частиц методом Монте-Карло заключается в *аналоговом* следовании траектории (или *слежении за* траекторией) *отдельных* частиц через семимерное фазовое пространство.**

Метод Монте-Карло для расчета переноса частиц

- **Во время слежения частицы проходят через последовательность событий:**
  - **Движение до конца шага по времени: *событие регистрации* (Перенос во времени)**
  - **Движение до границы соседней ячейки, участка или системы: *событие пересечения грани* (Перенос в пространстве)**
    - **Движение до границы системы приводит к утечке: *событие утечки***
  - **Взаимодействие с атомом или ядром фоновой среды: *событие столкновения* (Абсорбция при столкновениях, Рассеяние при столкновениях)**
    - **Взаимодействия при столкновениях могут приводить к образованию вторичных частиц (Источник деления при столкновениях)**
  - **Движение к границе группы более низкой энергии или к тепловой энергии среды во время замедления заряженных частиц: *пересечение границ энергии или переход надтепловых нейтронов в тепловые***
- **Траектория или след каждой частицы в физическом пространстве состоит из нескольких сегментов.**
- **Каждая частица в расчетах методом Монте-Карло представляет *множество* физических частиц.**

Метод Монте-Карло для расчета переноса частиц

Слежение за частицами в методе Монте-Карло на основе сетки

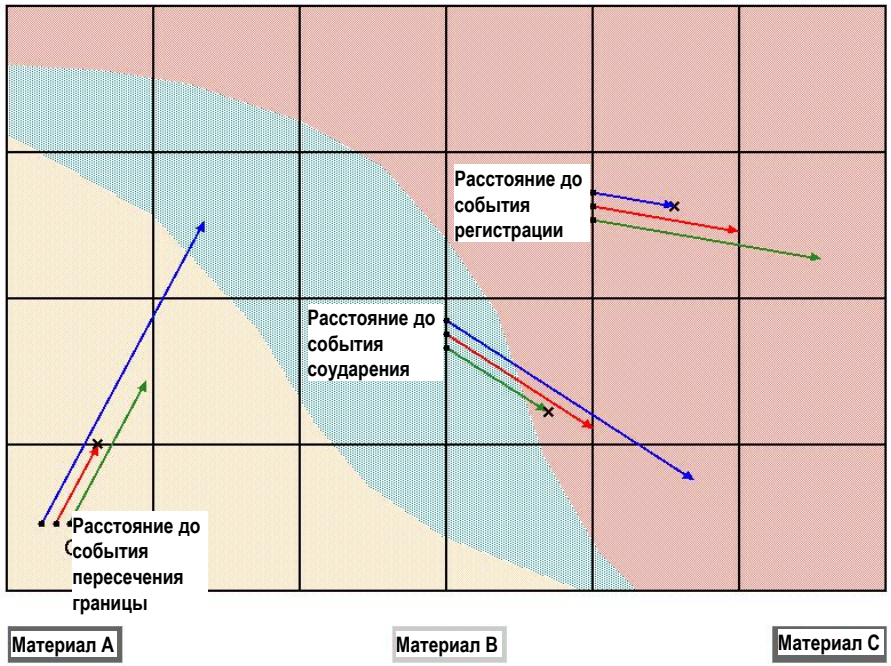
След каждой частицы состоит из нескольких отрезков

Показано по одному отрезку следов для каждой из трех частиц

Событие, выбранное для каждого отрезка, это – событие, расстояние до которого является кратчайшим

Примечание: Расстояния до событий, в действительности коллинеарны

Расстояние до события регистрации
Расстояние до события пересечения границы
Расстояние до события соударения



Метод Монте-Карло для расчета переноса частиц

- **Слежение за частицами в трехмерном декартовом пространстве не зависит от геометрии задачи или сетки: частица движется по прямой, пока она не пересечет грань или поверхность первого порядка (плоскость), второго порядка (сфера, цилиндр, конус, эллипсоид) и т.д.**
- **Хотя энергии частиц дискретны, разбиение на несколько групп энергий предполагает использование одинакового для всей группы значения энергии.**
- **Столкновения – это события, в результате которых образуются вторичные частицы:**
  - **Частицы, за которыми ведется слежение, помещаются в “хранилище” для последующего слежения.**
  - **Предполагается, что частицы, за которыми *не* ведется слежение, расположены локально.**
- **Поток в заданной ячейке *(c)* или группе энергии *(g)* является суммой длин траекторий *(l)* частиц *(i)* через объем *(V)* на заданном шаге по времени *(Δt)*:**

$$\phi_{c,g} = \sum_i \left(\frac{W_i \; L_{i,g}}{V_c \; \Delta t} \right)$$

- **Эти потоки умножаются на удельное количество фоновых изотопов и соответствующие поперечные сечения для получения скоростей вклада энергии и сгорания изотопов.**

Метод Монте-Карло для расчета переноса частиц

- Каждая частица в методе Монте-Карло определяется следующими характеристиками:
  - Пространственные координаты: (x, y, z)
  - Скорости или косинусы углов направления: (v_x, v_y, v_z) или (cos(α), cos(β), cos(γ))
  - Кинетическая энергия: E
  - Вес: $W = (N_{phys} / N_{sim})$
  - Время до регистрации: t_{cens}
  - Количество длин свободного пробега до столкновения: N_{mfp}
  - Случайные начальные значения: R_{seed}
  - Различные характеристики: количество соударений, последнее событие, вид, область, ячейка, грань и т.д.
- Слежение за этими частицами обычно ведется в семимерном фазовом пространстве, образованном тремя пространственными координатами (x, y, z), тремя скоростями (v_x, v_y, v_z), энергией (E) и временем (t).

Алгоритм вычисления собственных чисел методом Монте-Карло для расчета критичности

- **Для определения критичности системы используются две формы уравнения Больцмана в виде задачи на собственные числа:**
  - **Статическая форма (ν/k_{eff}) описывает равновесие между образованием нейтронов и их удалением в умножающей среде без источников:**

$$(\nabla\cdot\Omega)\psi(\vec{r},E,\Omega,t) + \Sigma_a\psi(\vec{r},E,\Omega,t) =$$
$$\int_{E'}\int_{\Omega'}\Sigma_s(\vec{r},E',\Omega' \rightarrow E,\Omega)\psi(\vec{r},E,\Omega,t)d\Omega' dE' +$$
$$(\chi(E)/k_{eff})\int_{E'}\nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\int_{\Omega'}\psi(\vec{r},E,\Omega,t)d\Omega' dE'$$

  - **"Статическая" форма (α/v) получена на основе разделения (анзаца) переменных $\psi(\vec{r},E,\Omega,t)=\varphi(\vec{r},E,\Omega)\,\zeta(t)$ и предположения о том, что система находится в основном собственном состоянии $\zeta(t)=\zeta(0)e^{\alpha t}$, в результате чего получаем:**

$$(\nabla\cdot\Omega)\psi(\vec{r},E,\Omega,t) + (\Sigma_a+(\alpha/v))\psi(\vec{r},E,\Omega,t) =$$
$$\int_{E'}\int_{\Omega'}\Sigma_s(\vec{r},E',\Omega' \rightarrow E,\Omega)\psi(\vec{r},E,\Omega,t)d\Omega' dE' +$$
$$\chi(E)\int_{E'}\nu(E')\Sigma_f(\vec{r},E')\int_{\Omega'}\psi(\vec{r},E,\Omega,t)d\Omega' dE'$$

Алгоритм вычисления собственных чисел методом Монте-Карло для расчета критичности

- **В число некоторых *статических* алгоритмов для расчета k_{eff} или собственных значений α системы входят:**
  - ***Статический k-алгоритм*: “Решается” форма (ν/k_{eff}) уравнения Больцмана итерациями до сходимости за много “поколений”**
  - ***Статический α-алгоритм*: “Решается” форма (α/ν) уравнения Больцмана добавлением “времени поглощения” (“времени образования”) нейтронов в закритических (докритических) системах и проведения итераций вплоть до сходимости**
  - ***Псевдодинамический α-алгоритм*: “Решается” уравнение Больцмана для фиксированной фоновой среды, распределение нейтронов изменяется *по времени* до сходимости в течение многих *установившихся* циклов**
- **Эти статические собственные числа k_{eff} или α рассчитываются на основе осредненных по итерации или циклу значений скорости формирования (*P*), поглощения (*A*) и утечки (*L*) нейтронов, а также времени их удаления по окончании срока их жизни (τ_{rem}):**

$$k_{eff} = \frac{\langle P \rangle}{\langle A \rangle + \langle L \rangle} \quad \text{и} \quad \alpha = \left(\frac{1}{\langle \tau_{rem} \rangle}\right)\left(\frac{\langle P \rangle}{\langle A \rangle + \langle L \rangle} - 1\right) = \left(\frac{1}{\langle \tau_{rem} \rangle}\right)\left(k_{eff} - 1\right)$$

Алгоритм вычисления собственных чисел методом Монте-Карло для расчета критичности

- ***Динамический*** **алгоритм для расчета собственного числа α системы заключается в следующем:**
  - ***Динамический α-алгоритм*****: Используется разделение переменных и анзац основной гармоники для получения α в цикле *n*:**

$$\alpha^n = \left(\frac{1}{\Delta t^n}\right) \ln\left(\frac{N(t^n)}{N(t^{n-1})}\right)$$

Здесь *N(t^n)* – количество частиц в конце цикла *n*

- **Для снижения стохастического шума путем осреднения по многим установившимся итерациям или циклам используются осредненные значения статических собственных чисел k_{eff} или α.**
- **Использование логарифма отношения населенности энергетических уровней в расчетах *динамического* собственного числа α может привести к возрастанию стохастического шума. Это происходит при $\Delta t \to 0$, что приводит к $N(t^n) \to N(t^{n-1})$ и $\ln(N(t^n)/N(t^{n-1})) \to 0$**

Соображения, связанные с точностью расчетов методом Монте-Карло

- Поскольку метод Монте-Карло не используется для решения уравнения Больцмана путем использования численных разностей и интегралов, на него не распространяются многие ограничения точности и устойчивости, с которыми сталкиваются такие детерминистические методы как методы дискретных координат (S_N) и расширения функций (P_N).
- Однако, необходимо рассмотреть несколько вопросов при моделировании переноса частиц методом Монте-Карло:
  - *При рассмотрении достаточного количества частиц* метод Монте-Карло может покрыть выборками все семимерное фазовое пространство
    (x , y , z , $\cos(\alpha)$, $\cos(\beta)$, $\cos(\gamma)$, E , t)
    (В этой связи, такого понятия как “достаточное количество частиц” не существует!)
  - Точное моделирование взаимодействия при столкновениях и ослаблениях потока требует выбора размеров зон, которые либо сравнимы со средней длиной свободного пробега, либо меньше нее: $\Delta x \leq \lambda_{mfp}$
  - Рассмотрение энергии путем разбиения ее на группы ограничивает разрешение резонансов сечений столкновения, что ведет к неточностям при расчетах самоэкранирования резонансов.
  - При формировании выборок для энергий и углов вторичных частиц, образующихся при столкновениях, могут использоваться приближения.

Соображения, связанные с точностью расчетов методом Монте-Карло

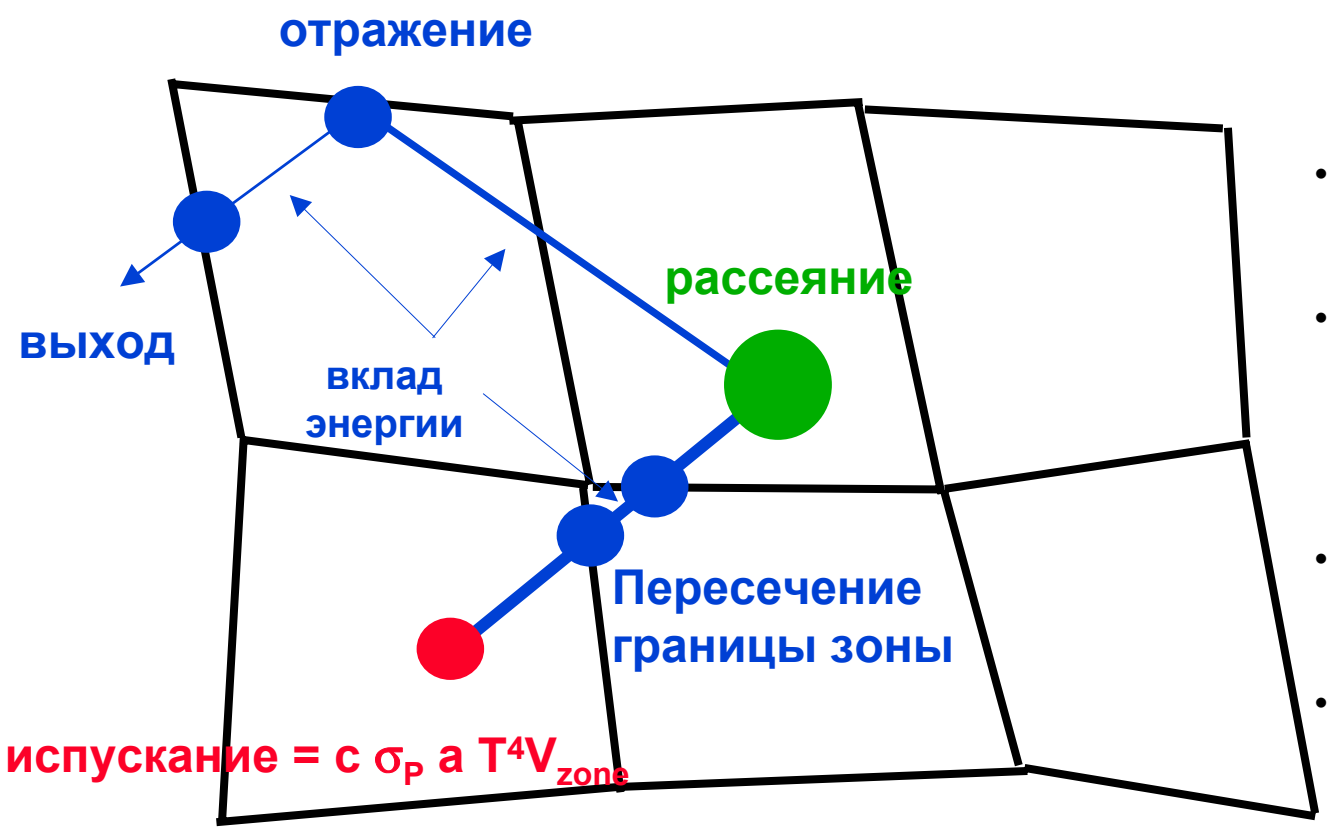
- Количество используемых для расчетов (N_{sim}) частиц, требуемых для расчетов статических собственных чисел k_{eff} или α, может быть достигать порядка 10^3 - 10^5, так как:
  - члены, описывающие формирование, удаление и время жизни нейтронов, используемые при расчетах собственных значений, являются осредненными по многим установившимся итерациям или циклам;
  - статические собственные числа являются *глобальными* величинами, для расчета которых *не* требуется использовать большое количество частиц на одну зону.
- Количество используемых для расчетов (N_{sim}) частиц, требуемых для расчетов уменьшающегося со временем числа нейтронов (например, расчетов уменьшающегося со временем числа нейтронов в реакторе), *должно быть намного больше*, порядка 10^5 - 10^9, поскольку:
  - При расчете вклада энергии и разрушения или образования изотопов требуется использовать достаточное количество частиц в зоне, порядка от 10 до 1000, для снижения стохастических флуктуаций этих величин.

Уравнения переноса решаются методом Монте-Карло путем слежения за частицами, ведущими себя как фотоны

- Задача переносится на сетку, как в гидродинамических расчетах
- Частицы формируются в зонах тепловыми или прочими источниками
  - Выборка первоначальных положений, времен и направлений производится с использованием случайных чисел
- Частицы отслеживаются по всей сетке
- Частицы дают вклад в энергию материи с интенсивностью $\exp(-\sigma_a d_{path})$
- Рассеяние частиц после пробега $d = -\ln(random\,number \in [0,1])/\sigma_s$
  - Новый угол и частота определяются выборкой из ядра рассеяния

При расчетах положения и рассеяния фотонов используются случайные числа

Иллюстрация к расчетам методом Монте-Карло



Случайные числа используются для испускания и рассеяния

- Фотоны при образовании характеризуются положением, энергией и направлением.
- Они отслеживаются до границ зоны, где свойства материала изменяются.
- Они переходят в новую зону в том же направлении, если не происходит рассеяния или отражения.
- Они приносят энергию в зоны, находящиеся на их пути.
- Они отслеживаются до тех пор, пока их энергия не достигает нижнего предела, или они не выходят за пределы сетки.

Наибольшее различие между фотонами и нейтронами при расчетах методом Монте-Карло заключено во взаимодействии с материей

- Материя обычно взаимодействует с излучением сильнее чем с нейтронами
  - Материя испускает излучение приблизительно пропорционально члену с источником теплового излучения T^4
    - член T^4 весьма нелинеен
  - Излучение поглощается материей и нагревает ее $\sim\sigma_a$
    - Средняя длина свободного пробега фотонов обычно намного короче средней длины свободного пробега нейтронов
- Взаимодействие материи с излучением приводит к
  - Нарушениям устойчивости, вызванным членом источника T^4
  - Увеличению объема численных расчетов за счет многочисленных коротких траекторий фотонов
- Фотоны движутся только со скоростью c, а не с различными скоростями в некотором диапазоне
  - Это неважно; слежение по сетке ведется только за эффектами

Наиболее важные различия между программами для расчета фотонов и нейтронов связаны с методами учета взаимодействия материи и излучения

Наличие взаимодействия T^4 затрудняет получение явного решения для I

- Из-за наличия члена источника T^4 уравнения переноса фотонов делаются жесткими:
  - Если мы используем значение T в момент времени *n* в зоне, где быстро происходят изменения, могут возникнуть колебания.
- Мы, в действительности, хотим использовать в уравнении переноса будущую температуру материи.
- У нас есть 3 возможности:
  - Использовать малые Δt, чтобы T сильно не менялась (Монте-Карло)
  - Решить уравнение неявно: нелинейная система (символический неявный метод Монте-Карло (SIMC))
  - “Обман” – сделать предположение о будущем значении температуры материи (неявный метод Монте-Карло (IMC))
- Неявный метод Монте-Карло (IMC) – это “обман”
  - Уравнение энергии используется для получения предположения о T в момент времени n+1

Неявный метод Монте-Карло (IMC) – это способ избежать решения многих линейных систем уравнений, сохранив при этом устойчивость

Задачи переноса излучения требуют решения 2-х сопряженных уравнений для I и ε

- $I(x,\Omega,t,\nu)$ = удельная мощность излучения - эрг/(см^2 Гц стер с) в ед. СГС
- $\varepsilon(x,t)$ = плотность энергии материи - эрг/(см^3) в ед. СГС

Рассеяние в направлении Ω и от него

$$\frac{1}{c}\frac{\partial I}{\partial t} + \Omega \bullet \nabla I = -(\sigma_s + \sigma_a)I + \frac{1}{4\pi} c\sigma_a a T^4 b(\nu,T) + \int \sigma_s I \, d\nu \, d\Omega + S_I$$

Поток фотонов в направлении Ω со скоростью c

Фотоны поглощаются материей и нагревают ее

Материя излучает фотоны и теряет энергию

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \int \sigma_a I \, d\nu \, d\Omega - \sigma c a T^4 + S_\varepsilon$$

- $\sigma_a(x,t,\nu)$ = поглощающая способность - см$^{-1}$ в ед. СГС; σ_s = рассеивающая способность; σ_P = среднее планковское поглощение; $b(\nu,T)$ = нормализованная функция Планка; S_I = источники фотонов (напр., лазеры); S_ε = тепловые источники (напр., химические реакции)

Сопряжение между I и ε вызывается членами T^4 и σ_a

IMC использует определения будущей T из уравнения для ε с целью оценки члена T^4 в уравнении переноса

- Эта процедура включает 3 шага:
  1. Уравнение энергии материи преобразуется для получения производной T^4 по времени
  2. Эта производная аппроксимируется для получения выражения для T^4 в конце шага по времени как функции текущей температуры, поглощения и т.д.
     - Обратите внимание: – «выражение», а не значение
  3. Это выражение для T^4 подставляется в уравнение переноса и в уравнение энергии материи
     - Мы получаем исправленные уравнения для *I* и ε, а не то же самое уравнение с другими значениями T
- Конечным результатом являются новые уравнения, в которых некоторая доля поглощения заменена рассеянием, называемым “эффективным рассеянием”

Новые уравнения для *I* и ε (обычно) более устойчивы

1. Решение уравнения для производной ε по времени для получения производной aT^4

- **Вначале определяем** $\varepsilon_r \equiv aT^4$
- **Используем правило дифференцирования сложной функции для расчета производной**

$$\frac{\partial \varepsilon_r}{\partial t} = \frac{\partial \varepsilon_r}{\partial \varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}$$

- **Снова используем правило дифференцирования сложной функции**

$$\frac{\partial \varepsilon_r}{\partial \varepsilon} = \frac{4aT^3\dfrac{\partial T}{\partial t}}{\rho c_V \dfrac{\partial T}{\partial t}} = \frac{4aT^3}{\rho c_V} \equiv \beta$$

- **Получаем уравнение для производной по времени величины $\varepsilon_r = aT^4$:**

$$\frac{\partial \varepsilon_r}{\partial t} = \beta\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \beta\int \sigma_a I\, d\Omega\, d\nu - c\sigma_P \varepsilon_r + \beta S_\varepsilon$$

2. Использование приближения для производной ε_r для аппроксимации aT^4 по окончании шага по времени

- **Оценка производной ε_r :**

$$\frac{\varepsilon_r^{n+1} - \varepsilon_r^n}{\Delta t} \approx \beta \int \sigma_a I \, d\Omega \, d\nu - \beta c \sigma_P \varepsilon_r^{n+1} + \beta S_\varepsilon$$

- **Нахождение ε_r в момент времени n+1 из уравнения**

$$\varepsilon_r^{n+1} = \frac{1}{1+\beta c \sigma_P \Delta t} \varepsilon_r^n + \frac{\beta c \Delta t}{1+\beta c \sigma_P \Delta t} \int \sigma_a I \, d\Omega \, d\nu + \frac{1}{1+\beta c \sigma_P \Delta t} \beta \Delta t S_\varepsilon$$

- **Определение “коэффициента Флекка (Fleck)”**

$$f = \frac{1}{1+\beta c \sigma_P \Delta t}$$

Это – коэффициент, на который умножается поглощающая способность в новом уравнении переноса

3. В члене источника уравнения переноса, aT^4, используется уравнение для $\varepsilon_r = T^4$ в конце шага по времени

Уравнение переноса принимает следующую форму:

$$\frac{1}{c}\frac{\partial I}{\partial t} + \Omega \bullet \nabla I = -(\sigma_s + \sigma_a)I + \frac{1}{4\pi} fc\sigma_a b_\nu aT^4 b(\nu,T)\Big|^n$$

$$+\frac{1}{4\pi}(1-f)\sigma_a b(\nu,T)\int \sigma_a I\, d\nu\, d\Omega +$$

$$+\int \sigma_s I\, d\nu\, d\Omega + \frac{1}{4\pi}(1-f)\frac{\sigma_a b(\nu,T)}{\sigma_P} S_\varepsilon + S_I$$

Испускание снижается за счет f

Величина $(1\text{-}f)\ \sigma_a$ прибавляется к рассеянию

Доля (1-f) источника, связанного с материей, представляется в виде фотонов на шаге по времени.

3. (продолжение) В уравнении переноса используется уравнение для $\varepsilon_r = T^4$ в конце шага по времени

Уравнение энергии материи принимает следующую форму

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} = \int f\sigma_a I \, d\nu \, d\Omega - fc\sigma_a b_\nu a T^4 b(\nu, T)\Big|^n + fS_\varepsilon$$

Поглощение снижается в f раз

Испускание снижается в f раз

Источник энергии материи снижается в f раз

Каков результат всех этих алгебраических преобразований?

- Члены уравнения переноса, описывающие поглощение и тепловое испускание, умножаются на коэффициент *f*, находящийся в пределах [0,1].
- Добавляется эффективное рассеяние с коэффициентом рассеяния (1-*f*)σ_a.
- Члены уравнения энергии, описывающие поглощение и испускание, также уменьшаются.
- Доля (1-*f*) источника энергии материала представляется в виде фотонов.

- В результате
  - Доля (1-*f*) поглощения и испускания заменяется рассеянием
  - Доля (1-*f*) источника энергии материала переходит в излучение

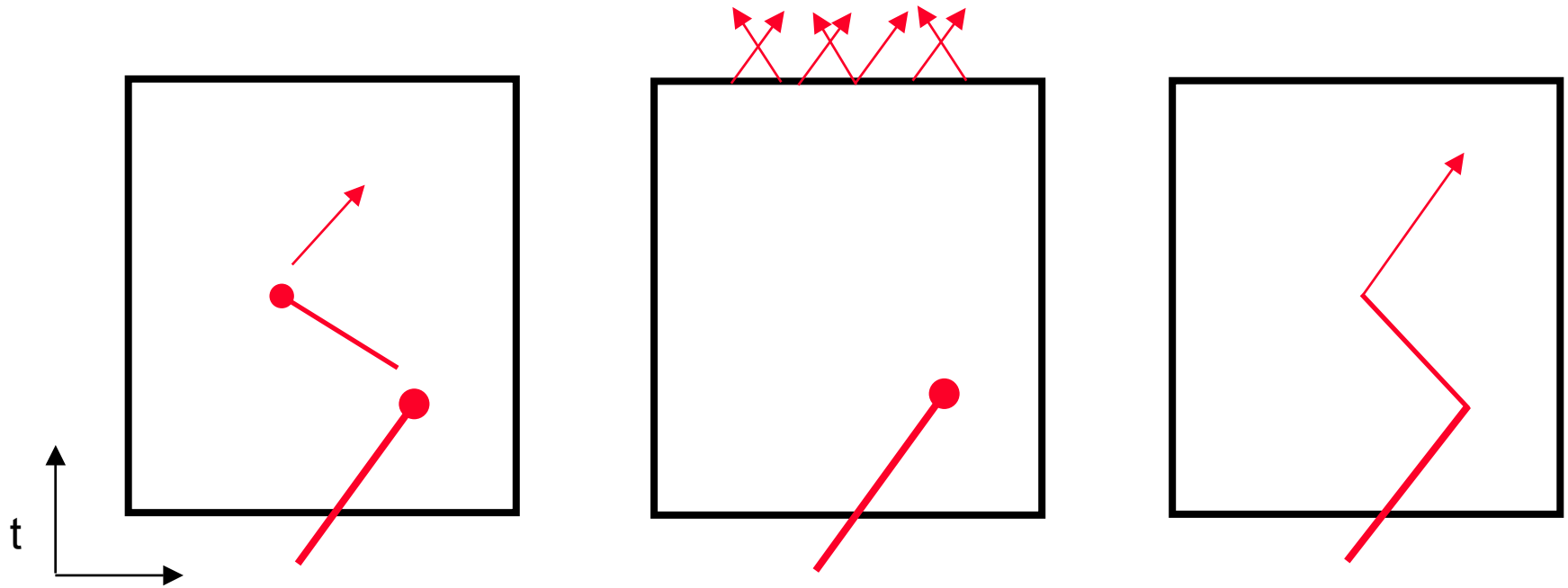
Чему это физически соответствует?

- В действительности, материал при поглощении нагревается, а затем повторно излучает и остывает.
- Нам неизвестно будущее значение T, при которой испускается энергия, поэтому мы недооцениваем величину испускаемой энергии.
- Замещая некоторую часть поглощения рассеянием, мы моделируем повторное испускание, несмотря на то, что нам еще неизвестно будущее значение T.

- Источник энергии в материи нагревает материал, который должен излучать.
- Мы не можем моделировать это до следующего шага, на котором T меняется.
- Направляя некоторую часть этой энергии непосредственно в фотоны, мы можем моделировать это испускание на текущем шаге по времени.

Эффективное поглощение моделирует физический процесс поглощения и происходящего поблизости переизлучения во время шага по времени.

Эффективное рассеяние аппроксимирует фактическое испускание и происходящее поблизости поглощение во время шага по времени



Физические явления:
- Фотоны входят в холодную зону и нагревают ее
- Горячая материя вблизи события поглощения испускает новые фотоны
- Температура в зоне растет непрерывно и плавно

Метод Монте-Карло:
- Фотоны входят в холодную зону и нагревают ее
- Зона не излучает до следующего шага по времени
- Температура в зоне растет слишком сильно
- Возможна неустойчивость

Неявный метод Монте-Карло:
- Фотоны входят в холодную зону и нагревают ее
- Фактическое излучение, испускаемое горячей материей, моделируется рассеянием существующих фотонов
- Температура в зоне меняется более плавно

Метод IMC ведет себя по-другому в предельных случаях больших и малых *f*

- При $f \cong 1$ метод IMC сходится к методу Монте-Карло (МК)
  - При больших c_v: $f \cong 1$ при медленном изменении T
  - При малых σ_P: $f \cong 1$ когда поглощается очень мало излучения
  - При малых Δt $f \cong 1$ и IMC становится МК
- $f \cong 0$ предполагает множество эффективных рассеяний
  - $f \cong 0$ при малых c_v и/или больших σ_P и/или больших Δt
  - фотоны теряют мало энергии, поскольку величина $f\sigma_a$ мала
  - Объем вычислений возрастает, поскольку фотоны движутся по траекториям, объем расчетов для которых значителен, поскольку с ними происходит много событий эффективного рассеяния, но они не дают большого вклада энергии

За “устойчивость” метода IMC приходится платить ростом времени выполнения циклов в задачах с $f \cong 0$ (обычно при больших σ)

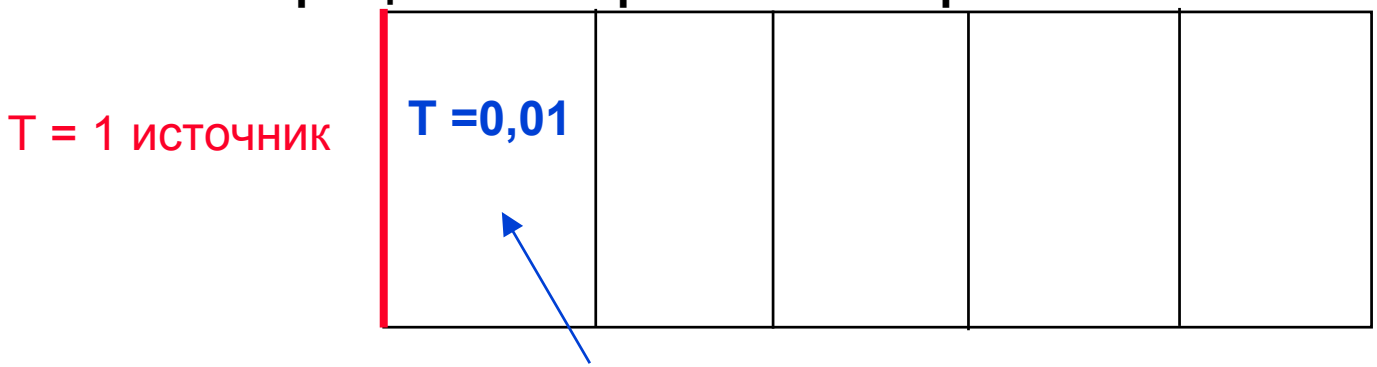
В каких случаях метод IMC работает хорошо, и в каких случаях он не работает

- Метод IMC полезен для задач, в которых, по большей части, $f \cong 1$
  - Это происходит когда большинство материала прозрачно
  - Даже малая непрозрачная область требует малых Δt в МК
  - Метод IMC работает медленно в непрозрачных областях, но Δt может быть больше всюду
- Метод IMC требует больших объемов вычислений для задач, в которых, по большей части, $f \cong 0$
  - Когда большинство материала непрозрачно или c_v мала
  - Почти все поглощение заменяется эффективным рассеянием
  - Фотоны, которые были бы поглощены, вместо этого рассеиваются
  - Фотоны движутся по траекториям, объем расчетов для многих из которых значителен

За “устойчивость” метода IMC приходится платить ростом времени выполнения циклов в задачах с большими количествами непрозрачного материала

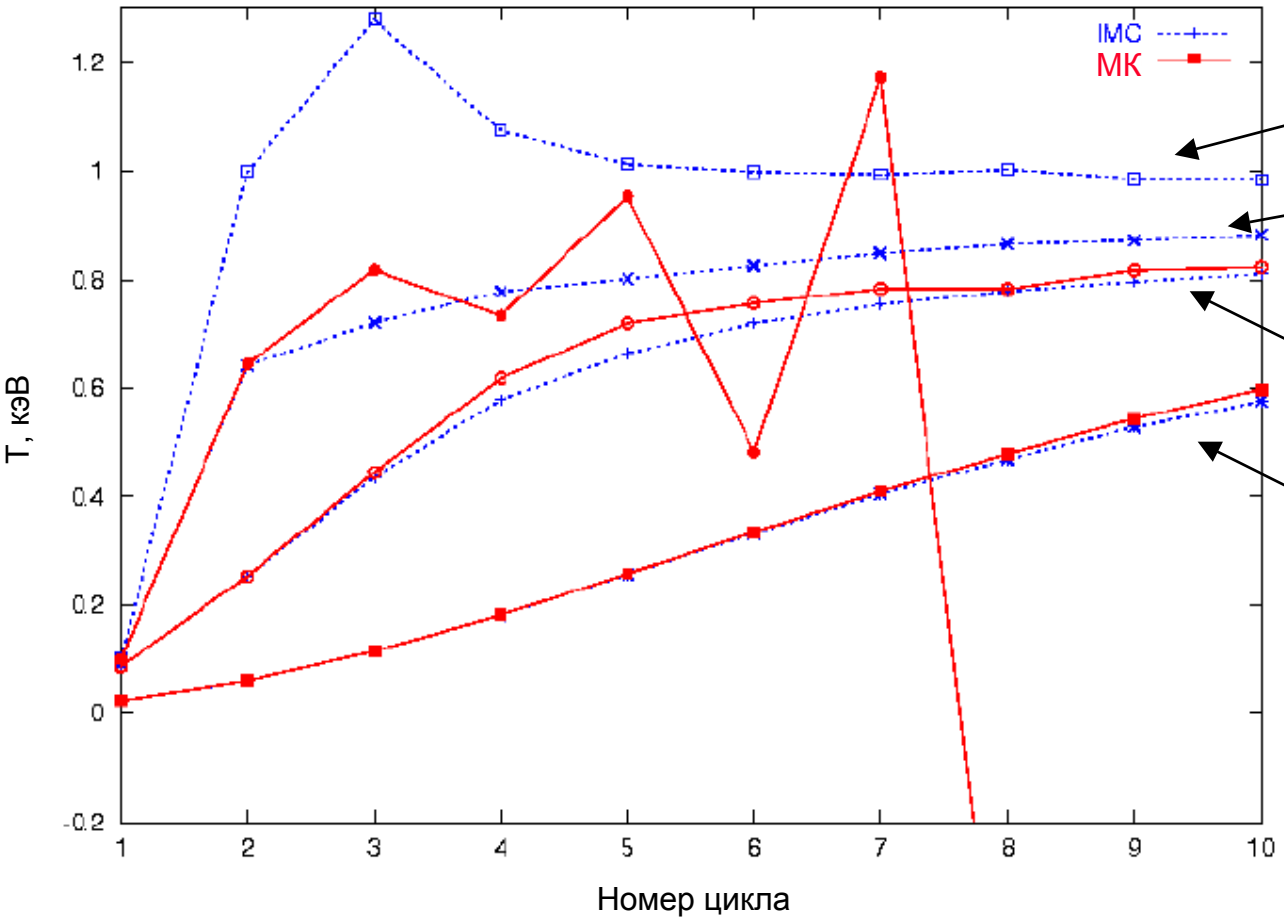
Холодная материя, нагреваемая источником температуры, иллюстрирует разницу в работе методов IMC и МК

- Материал с начальным значением T = 0,01 кэВ нагревается источником с температурой T = 1,0 кэВ
- Уравнение состояния - идеальный газ с $c_v = 10^{14}$ эрг см$^{-3}$ кэВ$^{-1}$, σ = 100 см$^{-1}$
- 200 зон с $\Delta x = 0{,}01$ см
- Используются 10000 фотонов с IMC и МК
- Диагностика заключается в слежении за зависимостью T от номера цикла в первой зоне на различных шагах по времени



Рассматривается изменение T со временем в первой зоне

В этой задаче с непрозрачным материалом неявный метод Монте-Карло (IMC) позволяет совершать намного более крупные шаги по времени, чем МК



$\Delta t = 1{,}0 \times 10^{-1}$ нс

$\Delta t = 5{,}0 \times 10^{-4}$ нс

$\Delta t = 2{,}5 \times 10^{-4}$ нс

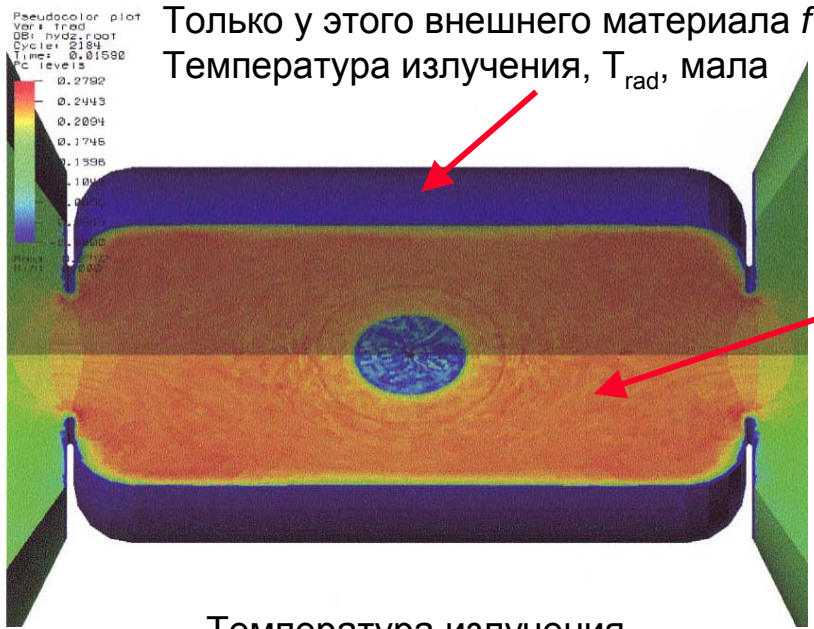
$\Delta t = 1{,}0 \times 10^{-4}$ нс

Метод МК неустойчив при $\Delta t = 5 \times 10^{-4}$ нс
Метод IMC устойчив (с временной пристрелкой) при $\Delta t = 1 \times 10^{-1}$ нс и $f = 6{,}1 \times 10^{-4}$

Метод IMC работает с Δt, в 500 раз большим, чем в методе МК для той же задачи

Метод IMC полезен для расчетов ядерного синтеза с инерционным удержанием плазмы

- **Большая длина свободного пробега в большей части задачи делает диффузионное приближение неточным.**
- **Плотная непрозрачная материя составляет малую часть, поэтому эффективное рассеяние в большинстве мест мало**



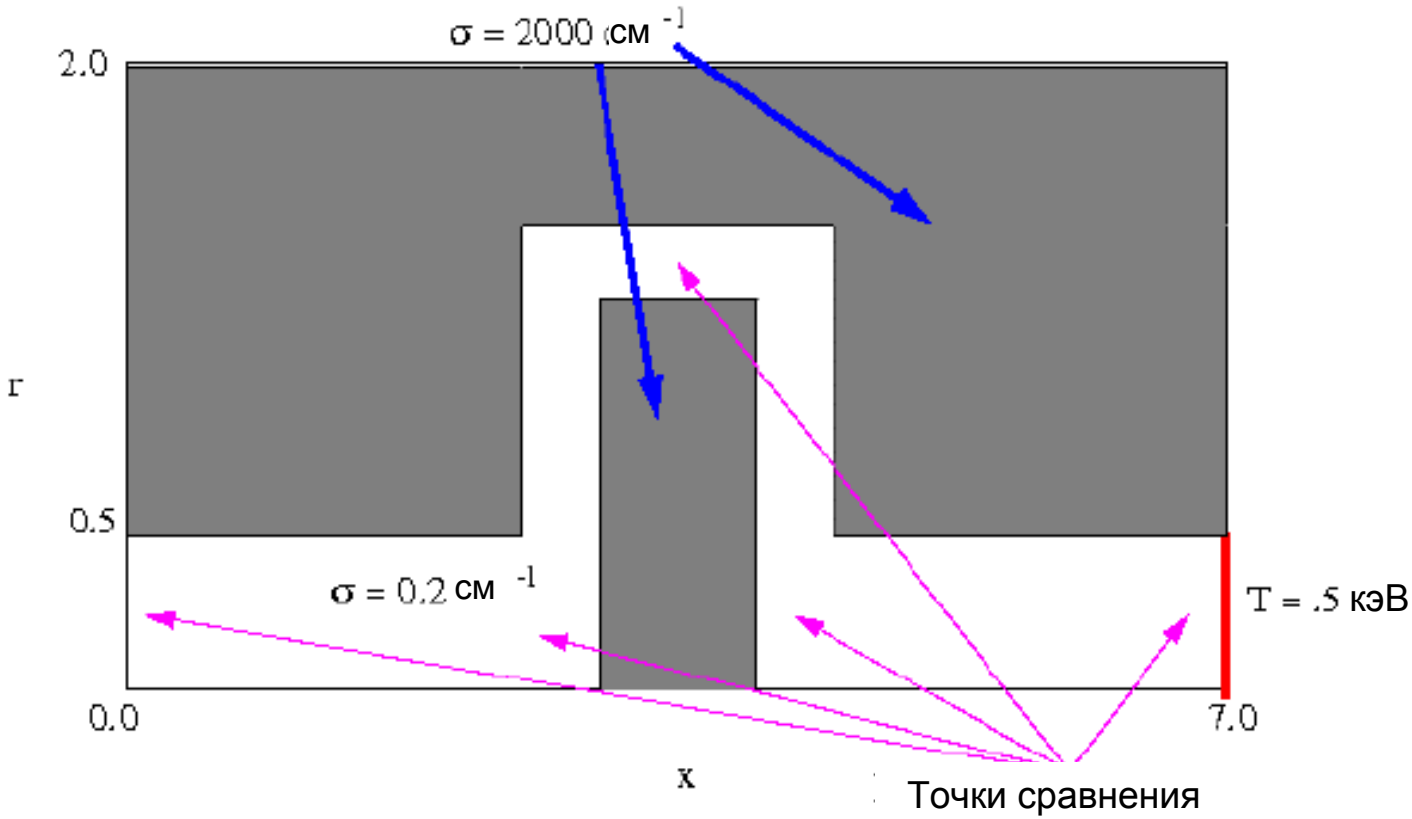
Температура излучения

Расчеты неявным методом Монте-Карло отличаются точностью и быстротой при большой длине свободного пробега в большинстве зон

Тест на изогнутой трубе с непрозрачными участками около источника и большими Δt, в результате чего *f* ~0 в большей части материала

Граниани и ЛеБланк

- Graziani and LeBlanc, UCRL-MI-143393 (2000)

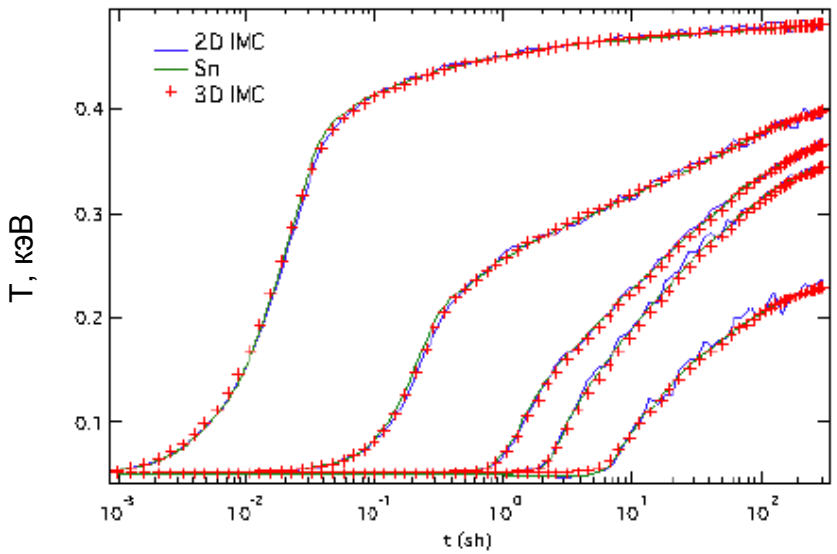


Тепло огибает углы через оптически прозрачные участки

В тесте с изогнутой трубой время проведения расчетов методом IMC оказалось большим

- Методом IMC получен правильный результат
- Время проведения расчетов велико:
  - 6 дней на одном процессоре
- Это произошло по следующим причинам:
  - Большие количества непрозрачного материала нагреваются
  - Δt велико, поскольку задача решается до t > 100
- Из-за этого *f* ~ 0 во многих зонах

Зависимость температуры от времени в 5 точках в изогнутой трубе



2D IMC – двумерный метод IMC
S_n – детерминированный метод с дискретными координатами
3D IMC – трехмерный метод IMC

Метод IMC дал точный результат, но вычисления длительны, если большая часть области вычислений горяча и непрозрачна (*f* ~ 0)

Время вычислений методом IMC может быть снижено за счет использования диффузионного уравнения

- Если в зоне имеется много объектов с сильным рассеянием, фотоны движутся случайным образом, теряя всю угловую информацию
- В этом случае диффузионное уравнение является хорошей аппроксимацией для уравнения переноса
- Для ускорения действия метода IMC мы можем использовать решения диффузионного уравнения
- “Случайное движение” – Флекк и Кэнфилд, Журнал вычислительной физики (Fleck and Canfield, J. Comput. Phys) 54, 508 (1984)
  - Шаг по времени для избранных частиц внутри зоны производится посредством локального решения диффузионного уравнения.
- Смешанные методы
  - В непрозрачных областях задачи решается диффузионное уравнение, а в остальных – применяется метод IMC (см. краткое описание: Дж. Джентайл, Журнал вычислительной физики (Gentile, J. Comput. Phys) 172, 543)

Диффузия используется на участках, где метод IMC работает медленно, а метод IMC используется там, где уравнения переноса не обязательно дают правильный ответ (где метод IMC достаточно быстр)

Процедура “случайного движения” предусматривает выполнение шага по времени для отдельных частиц внутри зоны

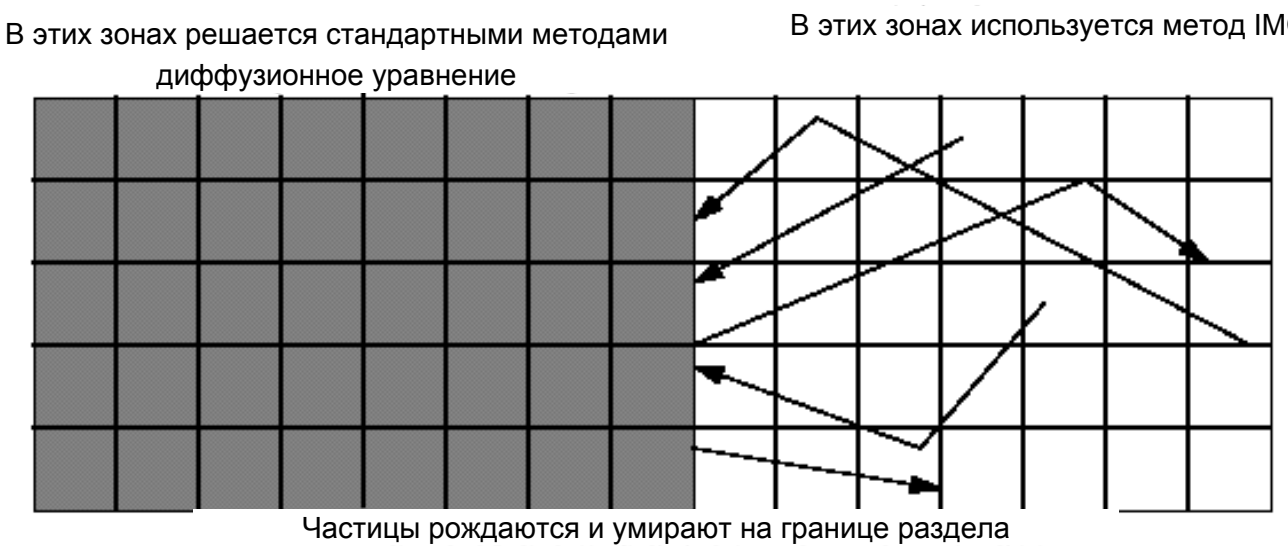
- Описывается сфера с центром в частице, находящейся в зоне
- Для получения вероятности нового положения частицы используется аналитическое решение для сферы в виде рядов
- Это позволяет свести многие события рассеяния к одному прыжку
- Но объем вычислений возрастает по сравнению с расчетом траектории частицы, поэтому эту процедуру имеет смысл применять только в задачах с сильным рассеянием

Метод IMC

Случайное движение

Смешанные методы разделяют задачу на участки диффузии и применения метода IMC

- **Смешанные методы используют диффузионное уравнение в некоторых областях задачи, где эффективная интенсивность рассеяния велика**
- **Энергия от частиц метода IMC, входящих в диффузионную область, превращается в приблизительный поток на границе в диффузионных граничных условиях**
- **Решение диффузионного уравнения дает поток частиц в область применения метода IMC**
- **Сопряжение приближенно, и могут возникнуть неустойчивости**



Трудности с методом IMC

- У метода случайного движения и у смешанного метода имеются недостатки
  - Метод случайного движения ускоряет только частицы, расположенные далеко от границ зон в очень непрозрачных зонах
  - Смешанные методы трудны в реализации и иногда неточны, поскольку граничные условия по-разному рассматриваются методом IMC и при решении уравнения диффузии
- Ошибка “телепортации” – фотоны нагревают один конец зоны, но член источника aT^4 создает тепловые фотоны в других местах той же зоны.
  - Может вызвать слишком быстрый перенос энергии через зоны, не соответствующий реальной физике
- Разбиение области вычислений для проведения параллельных вычислений связано с неравномерным распределением объема вычислений
  - Если температура в какой-то части задачи высока, то там выполняется вся работа
  - Остальные процессоры ничего не дают
  - См. доклад Бруннера, Урбатша, Эванса и Джентайла (Brunner, Urbatsch, Evans, Gentile) на этой конференции

Ведутся активные исследования в области IMC

Символический метод IMC (SIMC) дает неявное решение для температур

- Измененные температуры T_i остаются неопределенными
- Фотоны, испускаемые в зоне *i* во время шага по времени, отслеживаются, используя неизвестные (символические) веса, пропорциональные T_i^4
- Получается система нелинейных уравнений, связывающая все зоны
  - Производительность определяется $c\Delta t$ и τ_ν

Преимущества

- Нет погрешности линеаризации
- (Почти) полностью неявный метод => очень устойчив

Недостатки

- Требует решения полной (NxN) матрицы

Е. Д. Брукс 3-й, Журнал вычислительной физики (E.D. Brooks III, JCP) 83 (1989) 433
Т. Нкауа, Журнал научного статистического программирования Общества промышленной и прикладной математики (T. N'kaoua, SIAM J. Sci. Stat. Comput.) 12 (1991) 505

Формулировка разности для уравнения переноса излучения

- **Уравнение переноса (без рассеяния)**

$$\frac{1}{c}\frac{\partial I}{\partial t}+\Omega\bullet\nabla I=-\sigma_a\left(I-B\right) \qquad \frac{\partial \varepsilon}{\partial t}=\int \sigma_a\left(I-B\right)d\nu\, d\Omega+S_\varepsilon$$

- **Определяется интенсивность разности**

$$D(\mathbf{x},t;\nu,\Omega)\equiv I(\mathbf{x},t;\nu,\Omega)-B\left(\nu,T(\mathbf{x},t)\right)$$

- **Уравнение переноса для интенсивности разности**

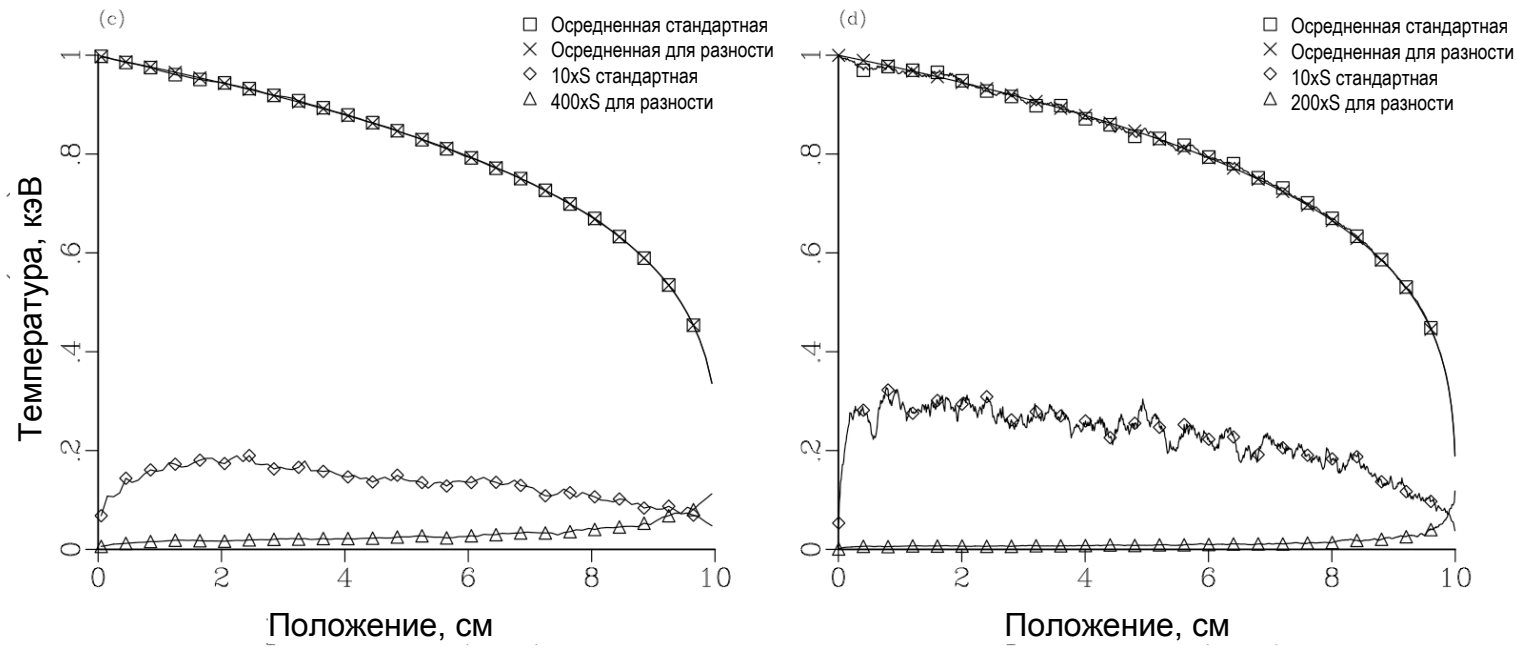
$$\frac{1}{c}\frac{\partial D}{\partial t}+\Omega\bullet\nabla D=-\sigma_a D-\frac{1}{c}\frac{\partial B}{\partial t}+\Omega\bullet\nabla B \qquad \frac{\partial \varepsilon}{\partial t}=\int \sigma_a D d\nu\, d\Omega+S_\varepsilon$$

- **В «густой» системе, где нейтроны замедлены до тепловых скоростей, $D\rightarrow 0$**

Преобразованное уравнение содержит только малые члены, медленно изменяющиеся в толстой среде

Формулировка уравнения для разности очень сильно снижает шум в толстых областях

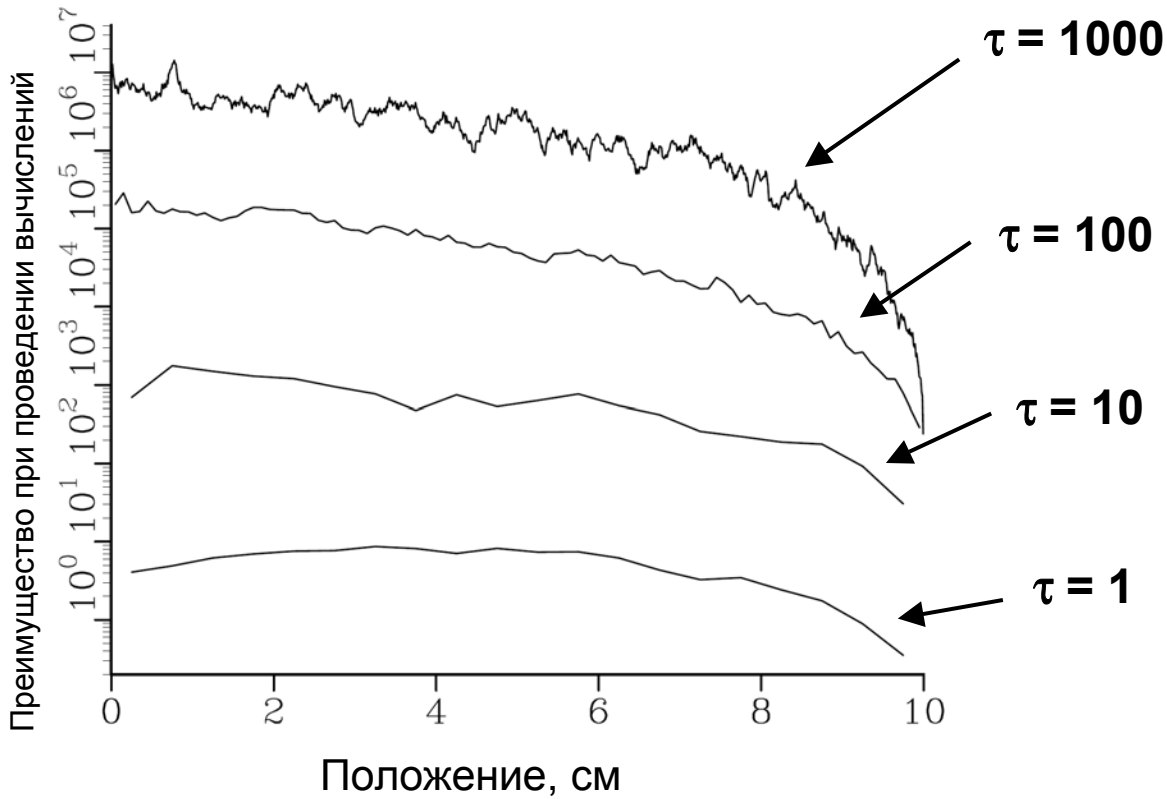
- Тестовая задача: плита нагревается с одной стороны
- Решена с помощью метода SIMC для переноса
- Сравнение температур и стандартных отклонений



τ=100 τ=1000

Преимущество при проведении вычислений при τ=1, 10, 100, 1000

$$PA = \sqrt{\sigma(\text{стандартн.}) / \sigma(\text{для разности})}$$



Замечание к формулировке разности

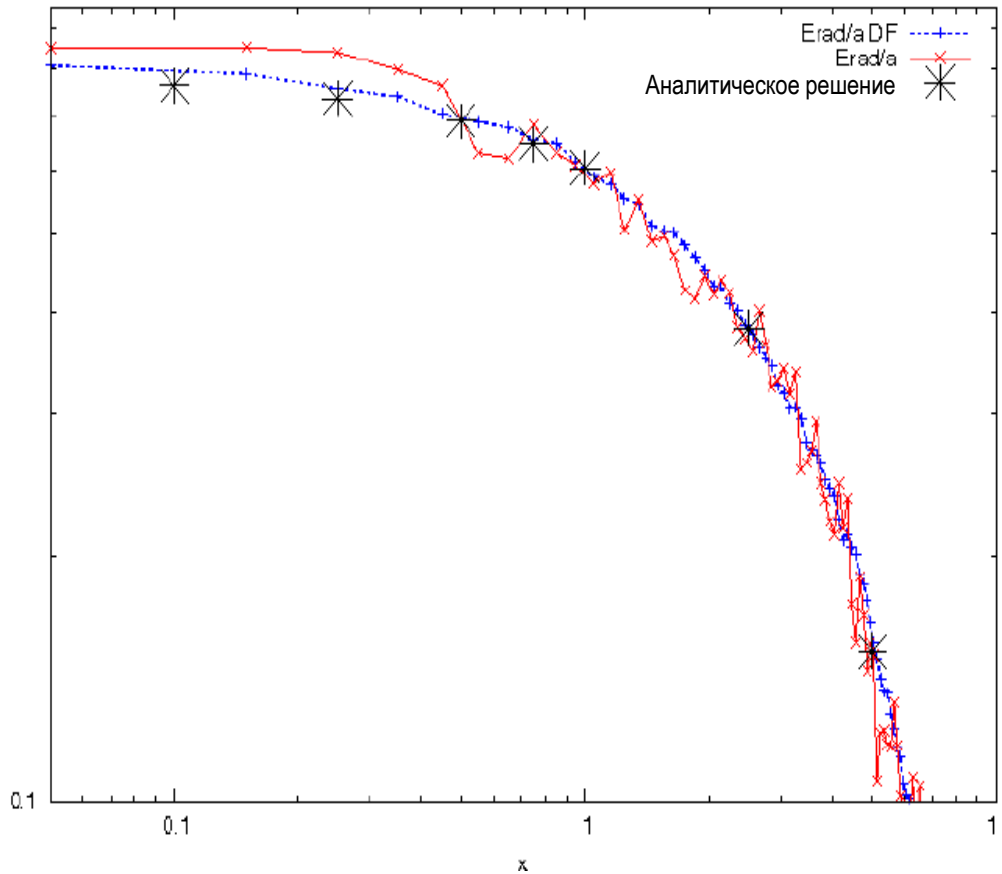
- **Абсолютно эквивалентна стандартной формулировке**
  - **Аналогичные граничные условия**
  - **Включает рассеяние**
- **Высокочастотные изменения возникают только с непрозрачностью, а не с членами источников**
- **Формулировалась как система, не находящаяся в локальном термодинамическом равновесии (с 2 уровнями)**
- **Подвержена тем же погрешностям дискретизации, что и стандартная формулировка, напр., “телепортация”**
- **Разработана в версии для метода SIMC с нелинейным решением для сглаживания температур**
  - **Версия для метода IMC разрабатывается с использованием минимальной из начальных температур окружающих зон для расчета T, используемой в источнике производной B(T)**

А. Зук и Е. Д. Брукс 3-й, Журнал количественной спектроскопии и переноса излучения (A. Szoke and E.D. Brooks III, JQSRT) 91 (2005) 95
Е. Д. Брукс 3-й и др., Журнал вычислительной физики (E.D. Brooks III *et al*, JCP) 205 (2005) 734

Формулировка для разности с помощью метода IMC

- **Менее точна, но не приходится решать нелинейную систему уравнений, как в методе SIMC**
  - **Решение более гладкое, чем в методе IMC при одном и том же числе частиц**

Плотность энергии излучения /aT_{source}^4



Су и Олсон. Тест для волны Маршака, Журнал количественной спектроскопии и переноса излучения (Su Olson Marshak wave test - JQSRT) 56 337-351 (1996)