



Цыгвинцев И.П., Круковский А.Ю.,
Новиков В.Г.

Сравнение различных
методов расчёта переноса
излучения для трёхмерных
задач

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Цыгвинцев И.П., Круковский А.Ю., Новиков В.Г. Сравнение различных методов расчёта переноса излучения для трёхмерных задач // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2014. № 48. 14 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2014-48>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

И.П.Цыгвинцев, А.Ю.Круковский, В.Г.Новиков

**Сравнение различных методов
расчёта переноса излучения
для трёхмерных задач**

Москва — 2014

Цыгвинцев И.П., Круковский А.Ю., Новиков В.Г.

Сравнение различных методов расчёта переноса излучения для трёхмерных задач

В работе проведено сравнение результатов трёхмерных расчётов воздействия лазерного излучения на плоскую мишень с использованием различных моделей переноса излучения.

Работа поддержана грантом РФФИ №14-11-00699

Tsygvintsev I.P., Krukovskiy A.Yu., Novikov V.G.

Comparison of different methods for radiative transfer calculation for three-dimensional problems

This paper describes several different mathematical models of radiative transfer. Results of three-dimensional calculations using them are compared.

The study was supported by RSF under Grant №14-11-00699

Оглавление

Введение	3
Диффузионное приближение	3
Метод длинных характеристик	5
Метод коротких характеристик	7
Сравнение результатов расчётов	8
Затраты процессорного времени.....	13
Список литературы.....	14

Введение

В ряде задач корректное описание физических процессов, происходящих в плазме, требует учета переноса излучения. В общем случае, перенос излучения описывается кинетическим уравнением для функции распределения фотонов, что эквивалентно следующей форме [1]:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\nu}{\partial t} + \mathbf{\Omega} \nabla I_\nu = j_\nu \left(1 + \frac{c^2}{2h\nu^3} I_\nu \right) - \kappa'_\nu I_\nu, \quad (1)$$

где $I_\nu(t, \mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ — плотность мощности излучения на частоте ν в телесный угол $\mathbf{\Omega}$ в момент времени t в точке с радиус-вектором \mathbf{r} , $\mathbf{\Omega}$ — единичный вектор в направлении $\mathbf{\Omega}$, $j_\nu(t, \mathbf{r})$ — излучательная способность вещества, $\kappa'_\nu(t, \mathbf{r})$ — коэффициент поглощения без учёта вынужденного излучения, c — скорость света в вакууме, h — постоянная Планка. Как правило, нестационарным членом $\frac{1}{c} \frac{\partial I_\nu}{\partial t}$ можно пренебречь. После переобозначения $\kappa_\nu = \kappa'_\nu \left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}} \right)$, где k — постоянная Больцмана, а T — температура, уравнение (1) можно привести к виду

$$\mathbf{\Omega} \nabla I_\nu = j_\nu - \kappa_\nu I_\nu. \quad (2)$$

Прямое решение уравнения (2) требует больших вычислительных затрат, а информация, полученная при его решении, для газодинамических уравнений является излишней, поэтому на практике используются различные приближения для уравнения переноса и приближённые методы его решения.

В данной работе рассмотрены несколько подобных методов в приложении к задаче моделирования источника ультрафиолетового излучения на основе лазерной плазмы. В качестве инструмента трёхмерного моделирования использовался код 3DLINE [2].

Диффузионное приближение

В случае, когда анизотропия излучения мала, уравнение (2) можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{S}_\nu &= 4\pi c j_\nu - c \kappa_\nu U_\nu, \\ \mathbf{S}_\nu &= -\frac{c}{3\kappa_\nu} \nabla U_\nu. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $U_\nu = \frac{1}{c} \int I_\nu d\mathbf{\Omega}$ — плотность энергии излучения, $\mathbf{S}_\nu = \int \mathbf{\Omega} I_\nu d\mathbf{\Omega}$ — поток излучения. При этом первое уравнение системы (3) тождественно следует из

уравнения (2), а второе получается после замены $\int \Omega_i \Omega_k I(\Omega) d\Omega \approx \frac{1}{3} \delta_{ik} \int I(\Omega) d\Omega$, правомочной лишь в случае слабой анизотропии.

В уравнения газовой динамики все величины, характеризующие взаимодействие излучения с веществом, входят в интегральном по спектру виде. После соответствующего усреднения уравнение переноса излучения в диффузионном многогрупповом приближении записывается в виде

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{S}_g &= 4\pi c j_g - c \kappa_g^P U_g, \\ \mathbf{S}_g &= -\frac{c}{3\kappa_g^R} \nabla U_g. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь индекс g определяет спектральную группу $[\nu_g, \nu_{g+1}]$, а групповые усреднённые величины (по Планку и Росселанду) связаны со спектральными коэффициентами следующими соотношениями [3]:

$$\begin{aligned} U_g &= \int_{\nu_g}^{\nu_{g+1}} U_\nu d\nu, \quad \mathbf{S}_g = \int_{\nu_g}^{\nu_{g+1}} \mathbf{S}_\nu d\nu, \quad j_g = \int_{\nu_g}^{\nu_{g+1}} j_\nu d\nu, \\ \kappa_g^P &= \frac{\int_{x_g}^{x_{g+1}} \kappa_\nu \frac{x^3}{e^x - 1} dx}{\int_{x_g}^{x_{g+1}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx}, \quad \kappa_g^R = \frac{\int_{x_g}^{x_{g+1}} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx}{\int_{x_g}^{x_{g+1}} \frac{1}{\kappa_\nu} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx}. \end{aligned}$$

В формулах для усреднения коэффициента поглощения введено обозначение $x = \frac{h\nu}{kT}$.

В качестве граничных условий к уравнению (3) ставятся граничные условия Маршака:

$$\mathbf{S}_g \Big|_{\partial D} = \frac{cU_g}{2} \mathbf{n}, \quad (4)$$

где ∂D — граница области, \mathbf{n} — внешняя нормаль к границе.

Уравнения (3) решались с использованием неявной схемы. Итерации в каждой группе велись до выполнения критерия сходимости

$$c \int |U_g^{s+1} - U_g^s| \kappa_g^P dV < \varepsilon_1 \cdot 4\pi \int j_g dV + \varepsilon_2 \int \kappa_g^P dV,$$

где s — номер итерации.

Использовались следующие значения относительной и абсолютной погрешностей: $\varepsilon_1 = 10^{-8}$, $\varepsilon_2 = 10^{-4} \text{ Bm/cm}^2$.

Метод длинных характеристик

Одним из слабых мест диффузионного метода является предположение слабой анизотропии, которое часто не выполняется на практике. Простейшим (хотя и вычислительно сложным) методом, решающим уравнение (2) с учётом зависимости интенсивности от направления, является метод длинных характеристик [4]. К сожалению, консервативная методика, реализующая данный подход, требует слишком больших вычислительных мощностей, поэтому в данной работе метод длинных характеристик использовался лишь для получения интегральных величин после основного расчёта, основанного на методе диффузии или коротких характеристик.

В квазистационарном случае, уравнение (2) имеет вид (для удобства записи будем опускать ν):

$$(\mathbf{\Omega}\nabla)I = j - \kappa I.$$

В случае постоянства коэффициентов j и κ , решением этого уравнения является

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \frac{j}{\kappa}(1 - e^{-\kappa l}) + I(\mathbf{r} - \mathbf{\Omega}l, \mathbf{\Omega})e^{-\kappa l},$$

где l — расстояние от точки \mathbf{r} в направлении $-\mathbf{\Omega}$.

Положим коэффициенты j и κ постоянными в пределах одной ячейки. Пройдём вдоль луча в направлении $-\mathbf{\Omega}$ от точки выхода луча из расчётной области, нумеруя ячейки, через которые прошёл луч так, чтобы ячейка, в которой луч выходит из расчётной области, имела номер 1. Обозначим I_i интенсивность на луче в момент входа в ячейку i , τ_i — расстояние, пройденное лучем в этой ячейке, j_i и κ_i — оптические коэффициенты в данной ячейке. Тогда интенсивность на выходе из ячейки 1 (т.е. из расчётной области) равна

$$I_0 = \frac{j_1}{\kappa_1}(1 - e^{-\kappa_1 \tau_1}) + I_1 e^{-\kappa_1 \tau_1},$$

а для каждой ячейки верно соотношение

$$I_{i-1} = \frac{j_i}{\kappa_i}(1 - e^{-\kappa_i \tau_i}) + I_i e^{-\kappa_i \tau_i}.$$

После подстановки получаем выражение для I_0 :

$$I_0 = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{j_i}{\kappa_i} (1 - e^{-\kappa_i \tau_i}) \cdot e^{-\sum_{j=1}^{i-1} \kappa_j \tau_j} + I_N \cdot e^{-\sum_{j=1}^{N-1} \kappa_j \tau_j}.$$

На практике расчёт для данного луча останавливается либо по достижению луча границы расчётной области (т.е. реальной точки входа луча в расчётную

область, где $I_N=0$), либо по достижению достаточно большого значения оптической толщины $\sum_{i=1}^{N-1} \kappa_i l_i$.

Общая мощность, излучаемая плазмой из расчётной области, определяется интегралом

$$P(t) = \int dv \int_{\Omega} d\Omega \int_{\partial D} dS I_v(t, \mathbf{r}, \Omega).$$

Здесь $d\mathbf{S} = \mathbf{n}dS$ — элемент площади dS границы области ∂D с внешней нормалью \mathbf{n} .

В расчёте проводится дискретизация по частотам, пространственному распределению лучей и угловым ординатам. При этом интеграл заменяется дискретной суммой вида

$$P(t) = \sum_{n_\Omega} \sum_{n_r} \sum_g I_g(\mathbf{r}_{n_r}, \Omega_{n_\Omega}) \Delta\Omega_{n_\Omega} \Delta S_{n_r} \mathbf{n}_{n_r} \cdot \Omega_{n_\Omega},$$

где индекс g определяет спектральную группу $[v_g, v_{g+1}]$, индекс n_r — точку выхода луча из расчётной области \mathbf{r}_{n_r} , направление внешней нормали \mathbf{n}_{n_r} и величину площадки, приписываемой лучу ΔS_{n_r} , а индекс n_Ω — направление луча Ω_{n_Ω} .

При переходе к многогрупповому по частотам приближению коэффициент поглощения усредняется по Планку, а величина $\frac{j_v}{\kappa_v}$ (в равновесном случае равная планковской интенсивности) интегрируется по частоте:

$$I_g = \int_{v_g}^{v_{g+1}} I_v dv, \quad \kappa_g = \frac{\int_{x_g}^{x_{g+1}} \kappa_v \frac{x^3}{e^x - 1} dx}{\int_{x_g}^{x_{g+1}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx}, \quad \frac{j_g}{\kappa_g} = \int_{v_g}^{v_{g+1}} \frac{j_v}{\kappa_v} dv.$$

В качестве угловой сетки в расчётах использовалась полностью симметричная S_6 квадратура [5], включающая 48 направлений.

Сетка по пространственному распределению лучей определяет начальную точку входа луча в расчётную область для данного направления. Для повышения точности трассировки желательно, чтобы через область, более активно излучающую, проходило больше лучей. Поэтому на практике пространственное распределение лучей для каждого угла оказывается привязано к некоторой «опорной» сетке, имеющей сгущение в области, где ожидается наиболее излучающая плазма. В качестве «опорной» сетки бралась начальная сетка газодинамического расчёта.

Метод коротких характеристик

Ключевое отличие метода коротких характеристик [6] от метода длинных характеристик заключается в его локальности: для определения значения интенсивности в данном элементе сетки (узле, ячейке, грани) используются только величины, определённые в смежных элементах. Достоинством этого метода является простота распараллеливания путём разбиения разностной сетки, недостатком — наличие численной диффузии.

Корректная реализация метода коротких характеристик описана в [7]. В данной работе в методических целях использовалась более простая реализация метода коротких характеристик, не обеспечивающая корректной асимптотики, но описывающая эффекты, связанные с анизотропией излучения, и дающая интегральные величины, согласующиеся с полученными после трассировки результатов расчёта по длинным характеристикам.

Значения интенсивности приписывались узлам сетки. При этом значение в узле ijk определялось по формуле

$$I_{ijk} = \frac{j_{mln}}{\kappa_{mln}} (1 - e^{-\kappa_{mln}d}) + I_0 e^{-\kappa_{mln}d},$$

где mln — ячейка, через которую проходит характеристика, j_{mln} и κ_{mln} — излучательная способность и коэффициент поглощения в этой ячейке, d — длина характеристики. Значение I_0 определялось с помощью следующей интерполяции на грани:

$$I_0 = \frac{\sum_k I_k / l_k}{\sum_k 1 / l_k}.$$

Здесь индекс k нумерует узлы, лежащие на грани, в которую попадает характеристика, а l_k — расстояние от узла k до точки пересечения характеристики с гранью.

После нахождения значений интенсивности во всех узлах, определяются источники и стоки энергии плазмы, связанные с переносом излучения. Значение вклада в ячейке определялось через потоки излучения на её границах с ограничениями на общие потери и поглощение в ячейке. Предполагалось, что ячейка не может излучить больше, чем $4\pi j_n \Delta V$ и поглотить больше, чем $4\pi \kappa_n^p I_{mln} \Delta V$, где ΔV — объём ячейки, I_{mln} — средняя интенсивность излучения в ней.

В дальнейшем, при выполнении газодинамических расчётов наряду с методом коротких характеристик использовался метод диффузии. После проведения расчёта результаты обрабатывались с помощью метода коротких и длинных характеристик с различным числом спектральных групп.

Сравнение результатов расчётов

Сравнение методик проводилось применительно к задаче моделирования воздействия лазерного импульса, падающего на плоскую оловянную мишень под углом. Интерес для практических приложений представляет излучение образующейся лазерной плазмы в узком спектральном диапазоне ($13.5 \pm 1\%$ нм, так называемое in-band EUV-излучение). Как известно из литературы [8], коэффициент конверсии (CE, conversion efficiency), то есть отношение излученной в желаемом диапазоне энергии к вложенной энергии лазера, на плоской мишени может достигать 6% для CO₂ лазера [9], однако для использованных параметров Nd-лазера характерны значения 1 – 3%.

В расчётах использовался наносекундный импульс Nd-лазера: длина волны 1,064 мкм, энергия 100 мДж, временная зависимость гауссова с шириной на полувысоте 1,5 нс, пространственная форма гауссова с диаметром на $1/e^2$ 200 мкм. Угол падения составлял 60°.

Расчёт проводился в области размером 1200 мкм по осям x и y и 1000 мкм по оси z . Мишень располагалась в плоскости $z < 10$ мкм. Использовалась регулярная изначально ортогональная сетка размером $50 \times 50 \times 50$ ячеек, размер ячейки в области воздействия лазерного импульса составлял $12.5 \times 12.5 \times 2$ мкм.

Проведены следующие расчёты и использованы средства обработки:

Расчёт в однокрупном диффузионном приближении (далее будем обозначать этот расчёт d1). Обработка: короткие и длинные характеристики на 1 и 20 группах (далее lc1, lc20, sc1, sc20).

Расчёт в диффузионном приближении на 20 группах (далее d20). Обработка: lc1, lc20, sc1, sc20.

Расчёт с использованием коротких характеристик на 1 группе (далее sc1). Обработка: lc1, lc20, sc20.

Расчёт с использованием коротких характеристик на 20 группах (далее sc20). Обработка: lc1, lc20, sc1.

Во всех расчётах картина разлёта плазмы отличалась несильно. На рис. 1 – 4, изображены распределения электронной температуры (контурами) и плотности (цветом) на момент 3 нс для этих трёх расчётов в поперечных срезах. Лазер фокусировался в точку (0,0,0), максимум лазерной мощности приходился на момент 2 нс.

Отличия в максимальной температуре на данных графиках объясняются различной динамикой излучения. Временные зависимости максимальной температуры плазмы и мощности излучения, выходящего из плазмы, приведены на рис. 5 и 6. Из этих графиков видно, что максимум температуры во всех расчётах пришёлся на момент времени 2.5 нс, а максимум интегральной по спектру мощности излучения — 2.7 – 2.8 нс. Наибольший выход EUV в диапазоне in-band в расчёте d20 достиг максимума ко времени 2.6 – 2.7 нс, в sc20 мощность EUV вышла на плато и держалась на максимуме в интервале 2.7 – 3.2 нс.

Также на рис. 1 – 4 заметно различие в распределении температуры в области прозрачной горячей плазмы. Из сравнения рис. 3 и 4 с рис. 1 и 2, видно что поведение изотерм хорошо согласуется лишь при $\rho > 10^{-4}$ г/см³. В менее плотной плазме в диффузионном приближении остывание происходит медленнее, и образуется высокотемпературный «язык», что особенно заметно на изотермах с $T_e < 70$ эВ. Это вполне естественно: в области низкоплотной плазмы пробеги большие, анизотропия сильная и применение диффузионного приближения неоправдано.

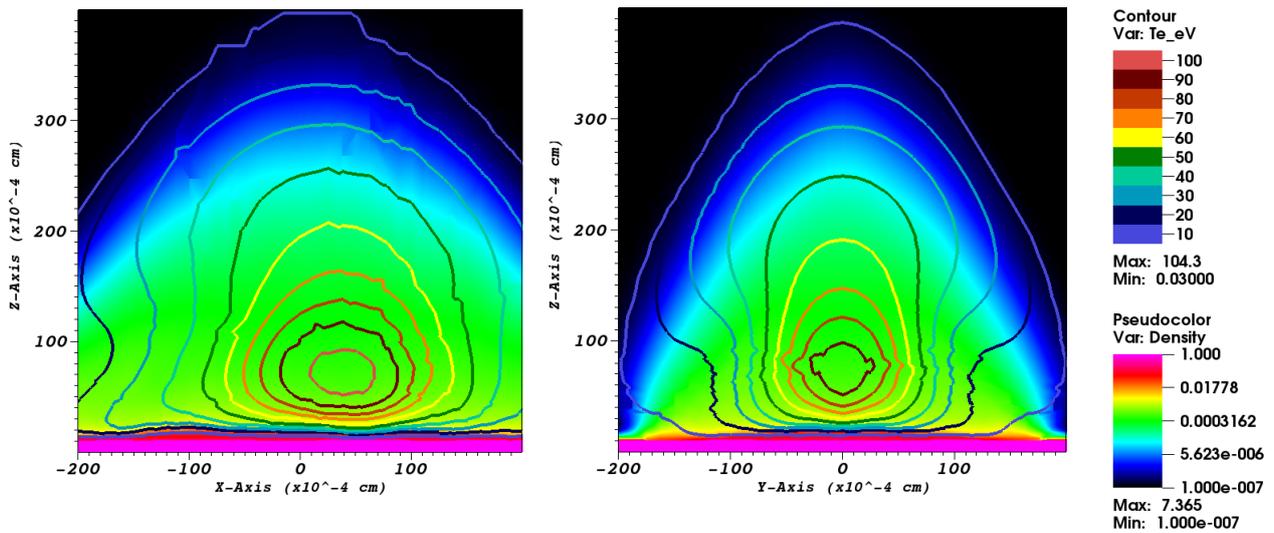


Рис. 1. Распределение плазмы в расчёте d1.

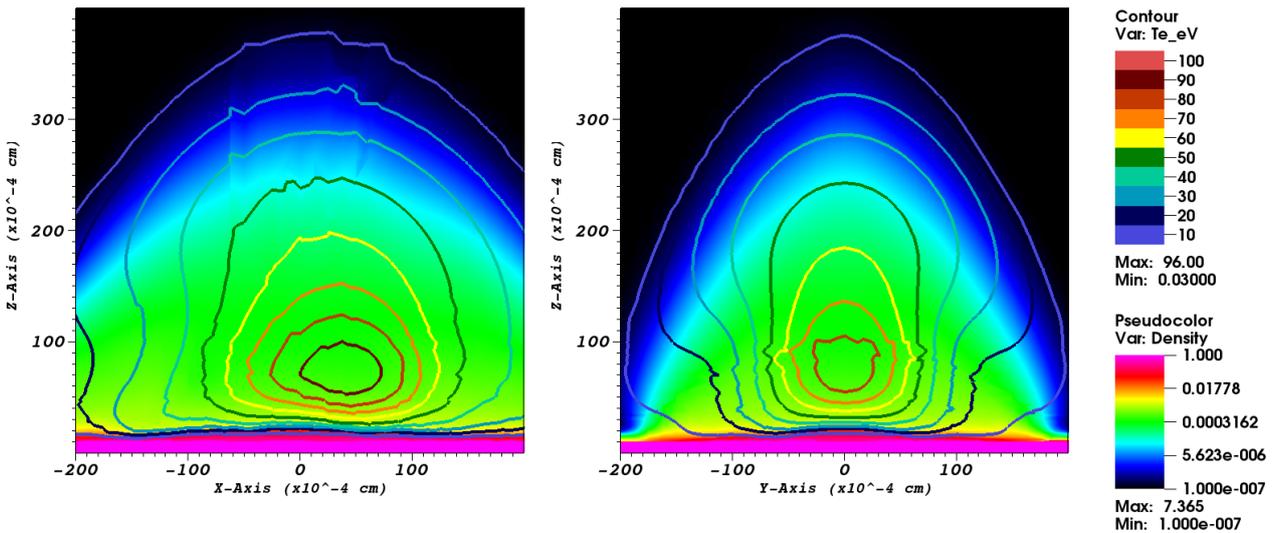


Рис. 2. Распределение плазмы в расчёте d20.

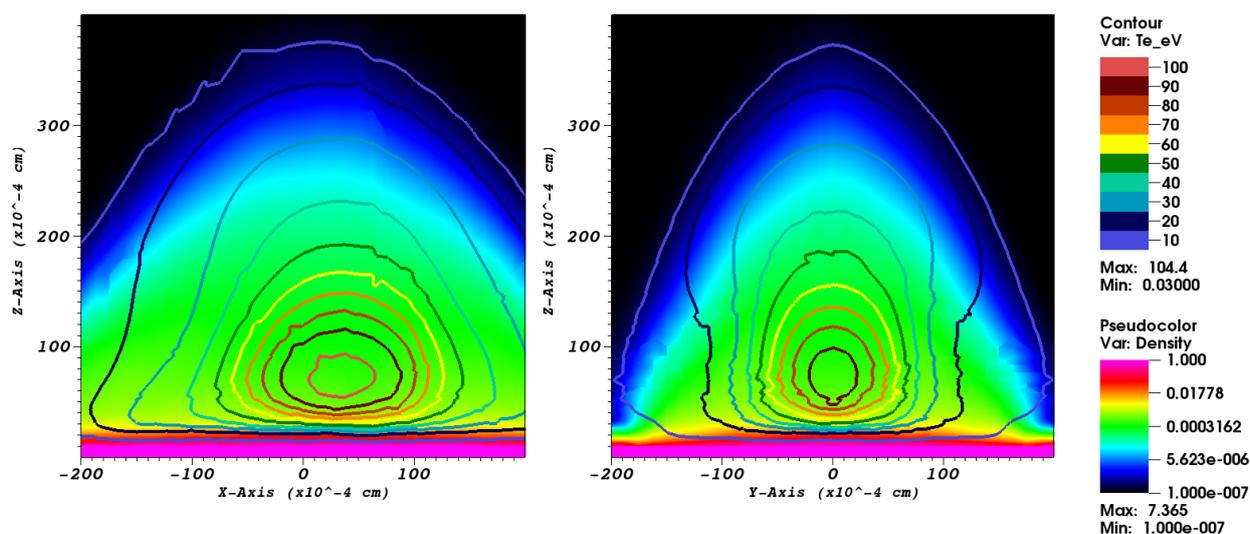


Рис. 3. Распределение плазмы в расчёте sc1.

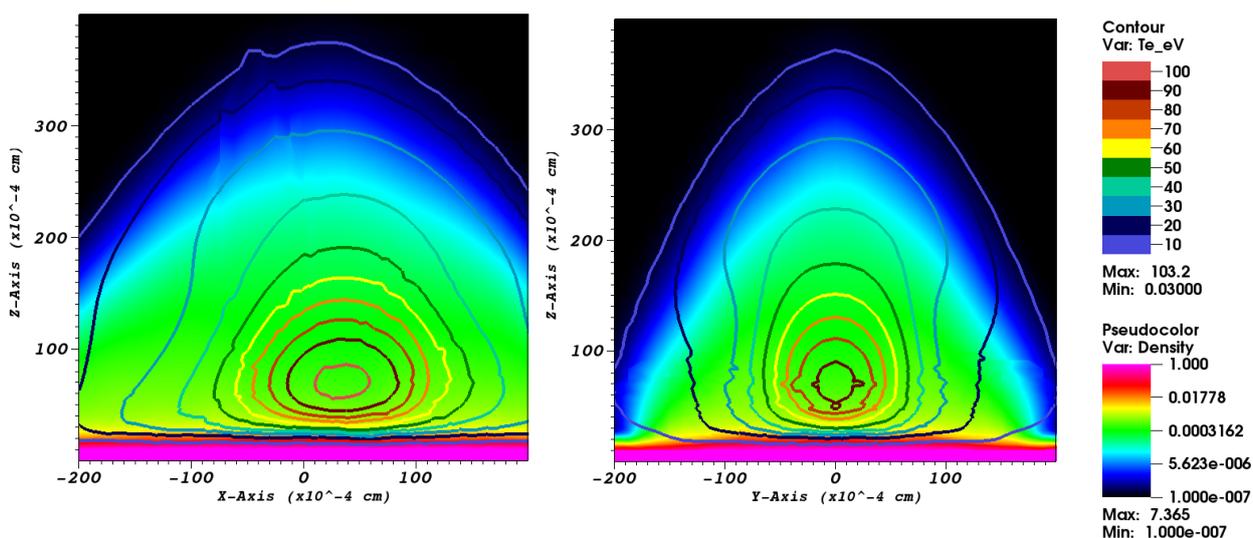


Рис. 4. Распределение плазмы в расчёте sc20.

Таким образом, используемый метод расчёта переноса излучения на динамику плазмы влияет слабо, причём при расчёте переноса излучения по характеристикам влияние числа групп слабее, чем при использовании диффузионного приближения.

А вот на выход излучения влияние существенное (см. таблицу 1 и рис. 5). Заметно меньший выход излучения в расчётах по характеристическому методу (при практически той же температуре горячей плазмы) можно связать с тем, что вышедшее из плазмы в нижнюю полусферу излучение поглощается в металле и до границы расчётной области не доходит.

Заметное падение максимальной температуры в момент времени 1.7 нс во всех расчётах вызвано изменением механизма поглощения лазерной энергии: до этого момента критическая поверхность находилась вблизи поверхности

металла, и основное поглощение происходило в первой приповерхностной ячейке, после — слой плазмы стал достаточно толстым, чтобы лазерное излучение не доходило до поверхности металла. Любопытно, что этот эффект оказался заметно смазан в расчёте d20.

Также интересно отметить, что при $t > 4$ нс все методы расчёта дают одинаковый выход излучения, хотя температура при этом заметно отличается.

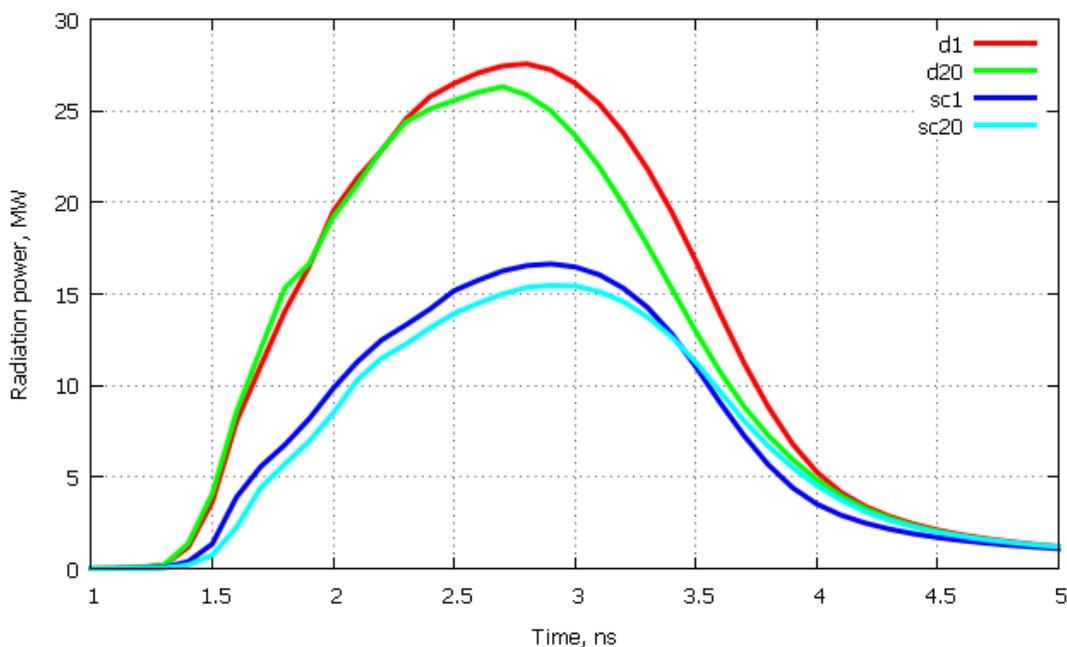


Рис. 5. Динамика мощности излучения, выходящего из расчётной области.

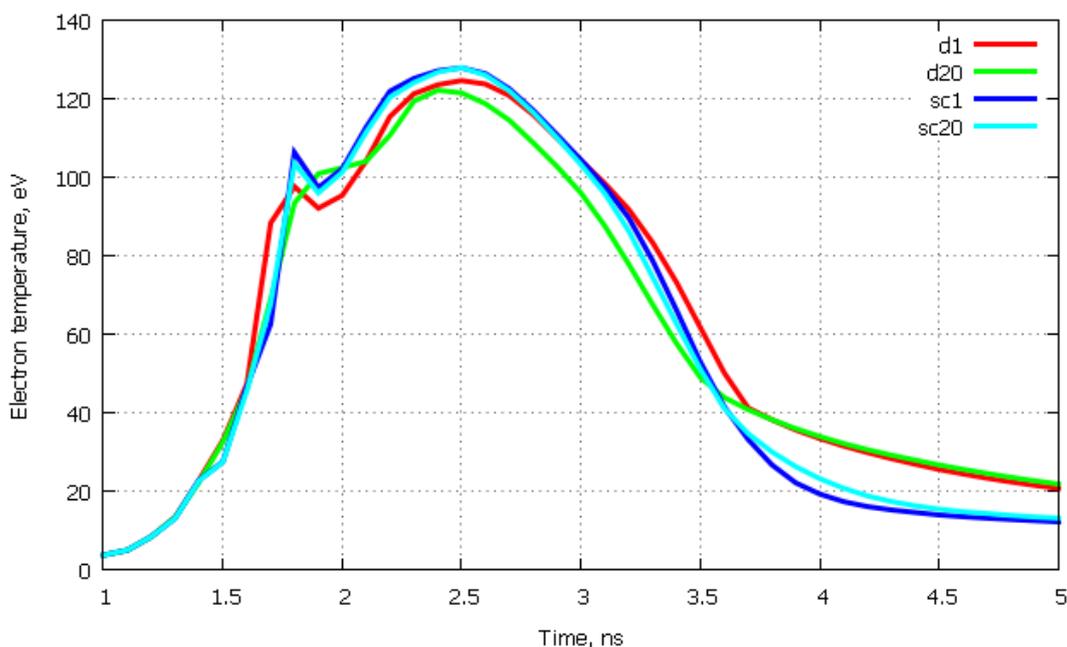


Рис. 6. Динамика максимальной температуры плазмы.

Результаты расчётов.

Расчёт	Метод обработки	Доля энергии, вышедшей с излучением, %	Доля энергии, вышедшей с излучением in-band, %
d1	—	52.0	—
d1	lc1	23.6	—
d1	sc1	26.8	—
d1	lc20	21.5	1.15
d1	sc20	24.4	1.33
d20	—	48.3	3.58
d20	lc1	23.0	—
d20	sc1	26.2	—
d20	lc20	20.3	1.12
d20	sc20	22.9	1.30
sc1	—	31.4	—
sc1	lc1	30.6	—
sc1	lc20	25.2	1.34
sc1	sc20	28.5	1.55
sc20	—	30.2	1.89
sc20	sc1	43.1	—
sc20	lc1	37.0	—
sc20	lc20	29.4	1.79

Подводя итог, стоит отметить, что все характеристические методы неплохо согласуются друг с другом и с экспериментальными данными, в то время, как применение исключительно диффузионного приближения хотя и обеспечивает разумную динамику плазмы, но даёт несколько завышенный коэффициент конверсии. Это можно объяснить тем, что в области наибольших температур пробеги фотонов с нужной длиной волны становятся достаточно большие, и диффузионное приближение является слишком грубым.

Трассировка результатов, полученных в диффузионном приближении, обеспечивает разумное значение коэффициента конверсии, хотя самосогласованный расчёт показывает, что оно несколько занижено.

Затраты процессорного времени

В расчётах не проводился мониторинг полного процессорного времени, затраченного на всю задачу. Для оценки скорости расчёта по разным методикам оказалось удобнее использовать следующий тест. По моделям d1, d20, sc1 и sc20 расчёты запускались на 120 минут процессорного времени с одного и того же начального распределения плазмы (соответствующего представленному на рис. 2) с различным числом процессоров на гибридном вычислительном кластере K-100 [10]. Распараллеливание программы [2] осуществлялось посредством использования библиотеки MPI. Распараллеливание проводилось по группам и только в части, касающейся расчёта переноса излучения, газодинамика считалась последовательно. В таблице 2 приведены число шагов, осуществлённых за это время, и пройденное расчётное газодинамическое время при использовании одного и двенадцати процессоров.

Таблица 2.

Оценка производительности в расчёте длительностью 120 минут.

Расчёт	1 процессор		12 процессоров	
	Число шагов	Время, пс.	Число шагов	Время, пс.
d1	872	315.0	589	205.0
d20	193	57.4	239	71.9
sc1	334	118.9	278	96.9
sc20	27	8.4	147	49.1

Важной особенностью метода коротких характеристик является то, что перенос излучения осуществляется по явной схеме, и время, требуемое на расчёт переноса излучения в одной спектральной группе, практически не зависит от номера группы: для каждой группы надо построить равное количество характеристик. Поэтому число шагов, пройденных за одно и то же время в расчётах sc1 и sc20 на двенадцати процессорах, отличается примерно в два раза: в расчёте sc1 самый загруженный процессор обрабатывал одну группу, а в расчёте sc20 — две. А вот в строго последовательном расчёте разница в скорости колоссальна.

Для решения уравнения переноса в диффузионном приближении использовалась неявная схема с достаточно жёстким критерием сходимости, вопрос об правомочности которого исследовался отдельно. Поэтому затраты на

расчёт переноса излучения от группы к группе могут отличаться на четыре порядка, и простая логика, описанная выше, не работает: скорость расчёта определяется не числом групп на одном процессоре, а максимальным числом итераций, осуществлённых на одном процессоре. Таким образом, выгода от распараллеливания существенно меньше, чем для метода коротких характеристик.

Список литературы

1. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. // М.: Наука, 1966, 688 с.
2. Круковский А.Ю., Новиков В.Г., Цыгвинцев И.П. Программа 3DLINE: численное моделирование трёхмерных нестационарных задач радиационной газовой динамики. // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, 2013, № 20. 24 с. URL: http://www.keldysh.ru/papers/2013/prep2013_20.pdf
3. Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. // М.: Физматлит, 2000, 400 с.
4. Spencer G.H., Murty M.V.R.K. General ray tracing Procedure. // J. Opt. Soc. Am., Vol. 52, No. 6, 1962, p. 672–678.
5. Карлсон Б.Г., Латроп К.Д. Теория переноса. Метод дискретных ординат. В сб.: Вычислительные методы в физике реакторов. Под ред. Х. Гринпсена, К. Келбера и Д. Окрента. // М., Атомиздат, 1972, стр. 102–157.
6. Четверушкин Б.Н. Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. // М.: Наука, 1985, 304 с.
7. Баско М.М. Описание кода RALEF-2D. // URL: <http://www.basko.net/mm/ralef/ralef.pdf>, стр. 26–41.
8. Bakshi V. EUV Sources for Lithography. // SPIE Press, Bellingham, WA (2005).
9. I. V. Fomenkov et al. Laser-Produced Plasma Light Source for EUVL. // Proceedings of SPIE, Alternative Lithographic Technologies, 7271 727138 727131-13, 978-0-81947-524-4 San Jose, CA, February, 2009, SPIE.
10. Гибридный вычислительный кластер K-100 // URL: <http://www.kiam.ru/MVS/resources/k100.html>