

ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

На правах рукописи

Цыгвинцев Илья Павлович

**Трёхмерное моделирование коротковолнового
источника излучения на основе лазерной плазмы**

05.13.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д. ф.-м. н., проф.

Гасилов Владимир Анатольевич

Москва – 2016

Содержание

Введение	4
Обзор литературы	14
Глава 1. Физические приближения и математическая модель воз- действия лазерного импульса на вещество мишени	19
1.1. Уравнения двухтемпературной одножидкостной газодинамики	19
1.2. Уравнение состояния и коэффициенты переноса	21
1.3. Приближение среднего времени установления ионизационного рав-	
новесия	24
1.4. Уравнение переноса неравновесного излучения	28
1.5. Модель поглощения лазерного излучения с учётом рефракции	30
1.6. Выводы к первой главе	53
Глава 2. Численные методы	55
2.1. Конечно-разностная схема для уравнений газодинамики	55
2.2. Методика пересчёта величин на скорректированную сетку	63
2.3. Гибридный метод расчёта переноса лазерного излучения	73
2.4. Численные методы расчёта переноса теплового излучения	76
2.5. Интерполяция таблиц непрозрачностей и уравнений состояния	80
2.6. Выводы ко второй главе	81
Глава 3. Алгоритмы и их реализация в комплексе программ 3D- LINE	84
3.1. Алгоритм решения конечно-разностных уравнений гидродинамики	84
3.2. Тестирование решения уравнений движения	89
3.3. Тестирование решения уравнений энергии	99

3.4.	Сравнение методов расчёта переноса излучения на модельной задаче	104
3.5.	Исследование сходимости метода расчёта поглощения лазерного излучения	105
3.6.	Структура распараллеливания алгоритмов и исследование эффективности распараллеливания на гибридных вычислительных кластерах	111
3.7.	Выводы к третьей главе	114
Глава 4. Трёхмерные расчёты воздействия неоднородного лазерного импульса на мишень		115
4.1.	Сравнение различных методов расчёта переноса излучения на примере задачи о скользящем падении лазерного пучка на плоскую мишень	115
4.2.	Исследование нецентрального воздействия лазерного импульса на сферическую мишень	126
4.3.	Моделирование динамической плазменной фазовой пластины	131
4.4.	Выводы к четвёртой главе	143
Выводы		144
Литература		146

Введение

памяти моего научного руководителя,

Владимира Григорьевича Новикова

Актуальность темы исследования.

Плазма, образующаяся под воздействием лазерных импульсов, используется во многих перспективных технологиях как источник ионов и излучения, параметры которых можно менять в широких пределах их свойств путём варьирования параметров импульса и мишени. В качестве примеров здесь можно привести непрямое обжигание мишени для инерциального термоядерного синтеза («лазерный парник» [1]), использование для модификации свойств поверхности [2] и в фотолитографии [3]. Именно на фотолитографию и ориентирована настоящая работа, что не отменяет возможности приложений её результата к иным задачам. Опишем в общих чертах историю вопроса.

Что из себя представляет микросхема? Это совокупность электронных элементов, таких как диоды, транзисторы, конденсаторы и т.п., размещённых на полупроводниковой подложке. Для удовлетворения потребностей отрасли необходимо постоянное увеличение числа элементов на единицу площади, то есть постоянное уменьшение размеров этих элементов, причём скорость этого процесса до последнего времени описывалась экспоненциальным законом Мура [4]. Вот уже более 50 лет производство микросхем осуществляется посредством проекционной фотолитографии [5]. Суть этой технологии такова. Монокристалл кремния облучается потоком света, пропущенного через «маску», — заранее приготовленное увеличенное изображение схемы. При увеличении разрешения в таком подходе возникают определённые трудности, часть из которых (например, искажение изображения вследствие дифракции на маски) решается, а часть имеет принципиальный характер. В частности непреодолимым оказывается дифракционный предел [6] — принципиальное ограничение разрешающей способности из-за конечной длины волны. Именно это приводит к необходимо-

сти уменьшать длину волны.

Прогресс в этом направлении продолжается с 60-х годов XX века [7], когда типичным источником излучения для фотолитографии был рубиновый лазер, излучающий в красной области видимого спектра. Потом, в семидесятые, перешли на ртутные лампы с длиной волны ~ 400 нм. Их использовали до середины восьмидесятых, увеличивая разрешение за счёт совершенствования оптической системы. После того как был достигнут порог совершенствования оптики, последовало введение в эксплуатацию эксимерных лазеров со всё меньшей и меньшей длиной волны. И к началу XXI-го века типичный коротковолновой лазер для фотолитографии работал на длине волны ~ 150 нм. Дальнейшее поступательное развитие оказалось невозможным из-за того, что кварцевая оптика для меньших длин волн становится непрозрачной. Пришлось изобретать новую оптику, способную собирать и направлять ультрафиолет. Здесь кроется принципиальная проблема: чем меньше длина волны, тем сложнее её отразить или, тем более, преломить. Чтобы нормально работать с коротковолновым излучением приходится использовать специальным образом структурированные среды с масштабом структур порядка длины волны: многослойные интерференционные зеркала [8], [9]. Они обладают достаточно высоким коэффициентом отражения, хотя и в узком спектральном диапазоне. В частности, молибден-кремниевое зеркало отражает до 70% [10] электромагнитного излучения в диапазоне длин волн $13.5 \pm 1\%$ нм (так называемый «экстремальный ультрафиолет», EUV). Дело остаётся за источником нужного излучения.

Квант света с длиной волны 13.5 нм имеет энергию примерно в 92 электрон-вольта, что почти в восемь раз превышает потенциал ионизации водорода. Получить такой переход между возбуждёнными состояниями молекулы, как в эксимерном лазере, невозможно: молекула, получив такой квант, не возбудится, а развалится. Из этих соображений начался поиск материалов, имеющих подобные переходы в атомном спектре [11].

Первый вариант — литиевый источник. Водородоподобный ион лития, Li^{2+} ,

имеет структуру атомных уровней, подобную водороду (с поправкой на в три раза больший заряд ядра). И переход между уровнями $1s-2p$, имеет как раз требуемую энергию фотона. Особенность лития в том, что он излучает в требуемом диапазоне одной спектральной линией, то есть возможно получение спектра, где доля излучения в нужном диапазоне (спектральная чистота) исключительно велика. Ближайший переход даёт излучение с длиной волны ~ 11 нм. Расчёты показали, что наилучшее излучение из литиевой плазмы будет при температуре ~ 50 эВ. Но на практике создать литиевый источник с достаточной яркостью не удалось.

Второй вариант — оловянный источник. Ионы олова с Sn^{6+} до Sn^{13+} в своём спектре имеют массу линий, лежащих в нужном диапазоне. Спектральная чистота вследствие этого оказывается ниже, зато из-за большого количества излучающих ионов возрастает общая излучательная способность. Эксперимент показал [12], что в оптимальных условиях литий имеет коэффициент конверсии (СЕ — отношение энергии, излучённой плазмой в спектральном диапазоне $13.5 \pm 1\%$ нм в ограниченный диапазон углов ко всей вошедшей энергии лазера) в два раза ниже чем олово, поэтому в настоящее время наиболее перспективным для применения в массовом производстве является источник на оловянной плазме.

Осталось привести олово в нужное состояние: достаточно большой температуры ($\sim 30-60$ эВ [11]), чтобы излучающих в нужном диапазоне ионов было много, и достаточно малой плотности, чтобы излучение свободно выходило, не слишком задерживаясь в плазме. Для решения этой задачи также рассматриваются разные подходы [12], [13], [14].

Первый способ заключается в использовании разрядной плазмы [12], [15], [16]. В электрическом разряде за счёт омического нагрева плазменного шнура вещество можно разогреть достаточно сильно. Рассматривалось множество принципиальных схем установок, например следующая: два колеса с жидким оловом между которыми идёт разряд [15]. Колёса крутятся, олово поступает

в область разряда, испаряется, разогревается и светит. Одной из проблем этой схемы являются тепловые нагрузки на электроды, принципиально ограничивающие максимальную мощность. Другая проблема заключается в слишком большом количестве «мусора», летящего из разрядной области. В качестве «мусора» выступают как излишне высокоэнергетичные ионы олова, так и сравнительно холодные оловянные микрокапельки [17]. И то и другое, попадая в оптическую систему, предназначенную для сбора и направления EUV-излучения, портит зеркало, что существенно ограничивает срок службы печатающих установок. Поэтому разработки в этом направлении находятся исключительно в экспериментальной стадии.

Другой способ включает использование лазерной плазмы [7], и именно на нём мы и сосредоточимся. Альтернативные перспективные подходы, совмещающие лазерную плазму и разрядные неустойчивости [18], в нашей работе не рассматриваются.

Итак, наиболее разработанной и перспективной на данный момент считается схема источника на лазерной оловянной плазме. Устроена она следующим образом. Из сопла с высокой частотой (порядка нескольких десятков кГц) вылетают капли олова размером несколько десятков микрометров, по которым стреляет лазер. Капельки испаряются, образуя нагретую светящуюся плазму. В стороне лазера расположено большое коллекторное зеркало, которое собирает излучение и перенаправляет его в оптическую систему [7]. Для более эффективного поглощения энергии лазера форма капли модифицируется с помощью воздействия так называемого предимпульса — более слабого, чем основной, лазерного импульса, испаряющего малую долю вещества капли [14], [19]. Это вещество улетает с огромной скоростью ($\sim 10^7$ см/с) и из-за реактивной отдачи придаёт заметный импульс поверхности капли, которая за несколько микросекунд деформируется. В зависимости от параметров предимпульса возможен широкий спектр конечных форм мишени: от мелкого «тумана» из микрокапелек до плоского тонкого «блина» [20] или орехообразной двухкамерной структуры,

содержащей мелкодисперсную взвесь [21]. От формы мишени и параметров основного импульса зависят спектральные характеристики и размер источника, а также характеристики «мусора»: аблированная доля мишени, энергетический спектр и геометрия разлетающихся корпускулярных потоков.

Поскольку число степеней свободы достаточно велико, а контролировать все параметры в реальных установках невозможно, необходимо иметь надёжные инструменты моделирования не только для решения задачи оптимизации параметров, но и для качественного понимания физических зависимостей в протекающих процессах. На некоторые вопросы невозможно получить ответы в двумерной постановке. Например, как изменится угловое распределение потока ионов, если диск мишени окажется повёрнут вследствие нецентрального попадания предимпульса? А ведь от этого вопроса зависит, насколько жёсткие технологические требования необходимо ставить к величине допустимого промаха.

Поэтому возникла необходимость в разработке достаточно гибкого и легко модифицируемого трёхмерного радиационного газодинамического (РГД) кода. Использование сверхбольших сеток ($\sim 10^9$ ячеек) не является критическим условием, так как важно иметь качественное понимание процессов, которого можно достигнуть и на относительно грубой сетке. Что же касается требований к скорости счёта, то желательно выполнение трёхмерного расчёта на сетке среднего разрешения ($\sim 10^6 - 10^7$ ячеек) на современной ПЭВМ за несколько суток.

Цели и задачи диссертационной работы:

Основой целью настоящего диссертационного исследования являлась разработка и апробация трёхмерного РГД-кода, позволяющего проводить многопараметрические численные исследования воздействия лазерного импульса на вещество мишени с учётом очерченных выше ограничений по срокам выполнения расчёта и подробности дискретизации вычислительной области. В качестве основы для разрабатываемого кода была использована трёхмерная модификация

радиационного магнитогидродинамического (РМГД) кода в лагранжево-эйлеровых переменных РАЗРЯД [22]. Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

1. Разработана новая гибридная модель поглощения лазерной энергии в плазме и реализован соответствующий алгоритм [23].
2. Реализован алгоритм расчёта переноса излучения методом коротких характеристик, проведен анализ необходимости использования его в типовых задачах и оценка эффективности его распараллеливания [24].
3. Реализована работа кода в модели нестационарной ионизации [25].
4. Проведена модификация разностной схемы уравнений ГД, восстанавливающая её полную консервативность в трёхмерном случае.
5. Проведена адаптация кода для эффективного использования при вычислениях на гибридных кластерах (распараллеливание в рамках комбинированного MPI-OpenMP подхода, модификация работы с динамической памятью, оптимизация затрат памяти).
6. Проведено тестирование комплекса программ на ряде стандартных тестов и задач, имеющих аналитическое или автомодельное решение, на основе которого уточнены численные параметры, используемые в типовых расчётах.
7. Проведено несколько расчётов реальных задач [26], [27], [28].

Научная новизна.

В настоящей работе описана построенная автором новая гибридная модель лазерного излучения, учитывающая рефракцию лазерного излучения в плазме, корректно описывающая поглощение излучения на скачке диэлектрической проницаемости и позволяющая проводить моделирование с «холодного старта»

[23]. Несмотря на то, что отдельные элементы модели уже были описаны ранее [29], [30], в том числе и для трёхмерной постановки [31], а сама идея гибридного подхода была высказана ещё в 1982-м году [32], её реализация и исследование свойств проведены впервые.

Также в работе описывается трёхмерная реализация классической полностью консервативной лагранжевой конечно-разностной схемы для уравнений РГД [28] с консервативной по массе, внутренней энергии, кинетической энергии и импульсу перестройкой сетки [33]. На её основе построен параллельный код 3DLINE, адаптированный под круг задач, связанных с моделированием лазерной плазмы. Существенно новым здесь являются как сам код, так и модификации схемы и алгоритмов, позволившие его распараллелить в рамках гибридного MPI-OpenMP подхода.

Новыми также являются некоторые результаты, полученный в рамках моделирования конкретных задач. Так, при моделировании неосесимметричного воздействия лазерного пучка на оловянную каплю, показан эффект возникновения струи [28], могущий оказывать существенное влияние на время жизни коллекторного зеркала. При моделировании динамической плазменной пластины впервые численно показан эффект гомогенизации пучка [34], ранее наблюдавшийся в экспериментах [35].

Теоретическая и практическая значимость.

Результаты, изложенные в диссертации, могут быть использованы для создания инструмента трёхмерного моделирования воздействия лазерных импульсов умеренной мощности ($10^8 - 10^{14}$ Вт/см²) на вещество мишени, что представляет практическую значимость в проблеме разработки нового поколения фотолитографических установок.

Положения, выносимые на защиту:

1. Разработана новая гибридная модель поглощения лазерной энергии в плазме и реализован соответствующий алгоритм.

2. Разработана трёхмерная полностью консервативная конечно-разностная схема уравнений РГД с учётом нестационарности ионизации и параллельные алгоритмы решения соответствующих систем нелинейных уравнений, реализованные в виде комплекса программ 3DLINE.
3. Проведена верификация и апробация кода на модельных и прикладных задачах. Воспроизведён в расчётах и проанализирован ряд экспериментально наблюдаемых эффектов.

Степень достоверности и апробация результатов.

Основные результаты диссертации докладывались автором на следующих конференциях:

Семинар шестого отдела ИПМ РАН «Методы вычислительной физики» [36], 2012 International Workshop on EUV and Soft X-ray Sources [37], 2014 International Workshop on EUV and Soft X-ray Sources [38], XLI Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС [39], XII Международная конференция «Забабахинские научные чтения» [40], XLIII Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС [41], German-Russian conference «Supercomputing in Scientific and Industrial Problems» [42], V международная конференция «Проблемы математической и теоретической физики и математическое моделирование» [34].

Также материалы диссертации были включены в доклад В. Г. Новикова на семинаре одиннадцатого отдела ИПМ РАН «Вычислительные методы и математическое моделирование» [43].

Публикации.

Материалы диссертации опубликованы в 12 печатных работах, из них 3 статьи в рецензируемых журналах [23], [25], [28], 4 статьи в сборниках трудов конференций [39], [40], [41], [34] и 5 препринтов ИПМ [24], [26], [27], [33], [44].

Личный вклад автора.

Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы.

Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами (см. раздел «Благодарности»), причём вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

Трёхмерная модификация кода РАЗРЯД, послужившая основой для построения кода 3DLINE, была выполнена сотрудником ИПМ к. ф.-м. н. А. Ю. Круковским.

Структура и объём диссертации.

Диссертация состоит из введения, обзора литературы, четырёх глав, заключения и библиографии. Общий объём диссертации 156 страниц, из них 142 страницы текста, включая 56 рисунков, 4 блок-схемы и 5 таблиц. Библиография включает 94 наименования на 11 страницах.

Благодарности.

В первую очередь я хотел бы поблагодарить своего учителя, Новикова Владимира Григорьевича. Он принял меня студентом и определил тот круг задач, в пределах которого в дальнейшем я работал. Именно он высказал идею «гибридной» модели лазера, трёхмерная реализация которой составила мой дипломный проект и является одним из основных результатов настоящего диссертационного исследования. Владимир Григорьевич непосредственно курировал мою работу и принимал активное участие в оформлении текста диссертации. Последние замечания по первой главе он сделал за два часа до своей смерти, в пятницу, второго октября 2016 года.

После его смерти общее руководство над написанием диссертации принял Владимир Анатольевич Гасилов. Он консультировал меня по формальным вопросам, связанным с защитой диссертации, помогал в формулировке основных целей, задач и выводов, формировании введения и обзора литературы, работе над текстом диссертации в целом.

Также я хотел бы поблагодарить Александра Юрьевича Круковского, написавшего основу для комплекса программ 3DLINE. Существенная часть написанного им кода (связанная с геометрией сетки и линеаризацией системы конечно-разностных уравнений) работает без каких-либо модификаций и в последней версии программы. Он внёс немало ценных замечаний касательно численных методов и алгоритмов, описанных во второй и третьей главах диссертации.

Пакет тестовых задач был мною сформирован при участии Михаила Михайловича Баско, с ним же я обсуждал и результаты тестирования кода, описанные в третьей главе, и некоторые практические вопросы реализации «гибридной» модели лазера.

При написании части введения, касающейся экспериментальных методик, с поиском литературы мне помог Вячеслав Валерьевич Медведев.

Наконец, хотелось бы поблагодарить всех моих коллег и товарищей, вместе со мной работающих над масштабным и важным проектом: разработкой EUV-источника для нужд литографии. В их число входят и сотрудники шестого отдела ИПМ (А. Д. Соломянная, И. Ю. Вичев, А. С. Грушин), занимающиеся уточнением оптических характеристик и газодинамических свойств оловянной плазмы, и теоретики из ИСАНа (В. В. Иванов, Д. И. Астахов), занимающиеся оптимизацией параметров источника, и экспериментальные группы из ASML (А. Bratchenia, А. Yakunin, К. Tsigutkin) и ИСАНа (К. Н. Кошелев, В. М. Кривцун). Без них моя работа не имела бы шансов когда-либо получить практическое приложение в этой области.

Обзор литературы

Разрабатывая код, мы ориентируемся на диапазон параметров лазера и мишени, характерный для задач EUV-литографии [3] (см. таблицу 1). Это накладывает определённые требования к физико-математической модели процессов, протекающих в плазме.

Как известно, основное поглощение лазерной энергии происходит в области, где частота собственных колебаний плазмы становится близка к частоте лазерного импульса [45], или электронная плотность n_e сравнима с критическим значением n_c . Это условие определяет диапазон значений электронной плотности, в котором необходимо точное выполнение условий применимости выбранной физической модели плазмы: поскольку $n_c \sim 10^{19} - 10^{21} \text{ см}^{-3}$, требуется корректное описание процессов в области $n_e \gtrsim 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Это относительно плотная плазма, в которой длина свободного пробега как электронов, так и ионов, более чем на порядок меньше характерных масштабов плазмы. Ограничение на дебаевскую длину в интересующей нас области ещё сильнее, поэтому справедливо предположение квазинейтральности. Как следствие, правомерным является приближение одножидкостной гидродинамики. Но поскольку время установления одной температуры и для электронов, и для ионов больше в $\sqrt{m_i/m_e} \sim 500$ раз чем для каждого из этих сортов частиц, одотемпературное приближение вдали от критической поверхности становится неприменимо.

Параметр	Диапазон значений	Единица измерения
Длина волны	$10^{-4} - 10^{-3}$	см
Размер мишени	$10^{-3} - 10^{-2}$	см
Длительность импульса	$10^{-9} - 10^{-6}$	с
Интенсивность	$10^9 - 10^{14}$	Вт/см ²

Таблица 1. Диапазон параметров лазера и мишени.

Также в области $n_e \lesssim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ распределение частиц по степеням ионизации может существенно отличаться от равновесного, хотя полностью ионизационный состав плазмы «замораживается» лишь в области $n_e \lesssim 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Таким образом, моделирование EUV-источника должно проводиться в приближении двухтемпературной одножидкостной радиационной газовой динамики с учётом кинетики ионизации. Вопрос об требованиях к моделям переноса собственного (теплового) и лазерного излучения рассматривается далее, пока же отметим, что основными моментами здесь являются учёт (или его отсутствие) возможной анизотропии теплового излучения и отражения и преломления лазерного излучения.

В настоящее время создан ряд газодинамических кодов, позволяющих проводить моделирование в очерченной области физических параметров.

Говоря об российских кодах, применяющихся при разработке EUV-источника, стоит отметить комплекс программ RZLINE [46], разрабатываемый В. В. Ивановым из ИСАН и использующий таблицы спектральных коэффициентов, рассчитываемых по методике THERMOS [47]. Это двумерный РГД-код в цилиндрической геометрии в эйлеровых переменных, обеспечивающий неплохое согласие с экспериментом в широком диапазоне параметров лазера и для разных мишеней. К его недостаткам можно отнести отсутствие динамики жидкого вещества мишени, вследствие чего невозможен расчёт деформации капли под воздействием предимпульса. Тем не менее, это единственный газодинамический код, версия которого используется непосредственно компанией-разработчиком литографических установок для инженерных расчётов.

Для моделирования предимпульса совместно с RZLINE используется адаптация открытого трёхмерного параллельного газодинамического (ГД) кода OpenFOAM [48], выполненная И. Ю. Вичевым [49], [50]. Однако в этом подходе задача получается не самосогласованной: абляция вещества с неподвижной мишени и модификация её формы под воздействием абляционного давления рассчитываются последовательно, что в ряде случаев некорректно.

Для расчётов, в которых необходимо самосогласованно учесть и деформацию мишени, и испарение вещества, используется двумерный РГД-код с произвольной лагранжево-эйлеровой сеткой RALEF [51], созданный М. М. Баско на основе ГД-кода CAVEAT [52]. Этот комплекс программ удовлетворяет вышеозначенным требованиям к физико-математической модели (за исключением части, касающейся неравновесных процессов), но не поддерживает трёхмерной геометрии. Также из особенностей кода следует отметить высокие требования к квалификации конечного пользователя, из-за чего RALEF используется исключительно для исследовательских, а не инженерных расчётов.

Ряд результатов был получен с использованием двумерного РГД-кода Z^* (ZETA) [53], [54], адаптированного под данный круг задач С. В. Захаровым из РМГД-кода РАЗРЯД [22]. Использование смешанных лагранжево-эйлеровых переменных позволяет применять его как для моделирования основного импульса, так и для моделирования предимпульса. Из основных недостатков физической модели здесь можно отметить отсутствие рефракции.

Таким образом, двумерные РГД-коды активно и небезуспешно применяются на всех этапах решения задачи конструирования EUV-источника. Однако в трёхмерных кодах подобного изобилия не наблюдается. Как уже было упомянуто, трёхмерные ГД-коды, основанные на OpenFOAM, применяются на этапе моделирования предимпульса, а также для моделирования загрязнения коллекторного зеркала потоками олова, но для моделирования непосредственно лазерной плазмы в EUV-источнике употреблялись лишь два РГД-кода. Это код HEIGHTS [55], [56], [57], созданный группой под руководством А. Хассанейна, и код HYDRA [58], [59], разработанный в Ливерморской национальной лаборатории им. Э. Лоуренса (США).

В таблице 2 приведено сравнение вышеупомянутых кодов. Как видим, всеми качествами, предъявляемыми к коду, обладает только код HYDRA, но в связи с проприетарным характером кода использование его за пределами LLNL не является возможным. Комплекс программ 3DLINE, являющийся одним из

Код	rz -геометрия	xy -геометрия	xyz -геометрия	Адаптивность сетки	Динамика испарённого вещества мишени	Уравнение состояния плазмы	Кинетика ионизации	Отражение лазера	Рефракция в плазме	Диффузионное приближение для уравнения переноса	Решение уравнения переноса методом характеристик	Непланковский источник	Параллельность кода
RZLINE	+	-	-	-	-	+	+	+	+	=	+	+	-
RALEF	+	+	-	+	+	+	-	+	+	-	+	-	+
OpenFOAM	+	+	+	+	+	-	#	#	#	#	#	#	+
Z*	+	-	?	+	+	+	?	-	-	-	±	+	-
HEIGHTS	?	?	+	-	+	+	-	±	-	-	+	-	?
HYDRA	+	+	+	+	+	+	?	+	+	+	+	+	+
3DLINE	=	+	+	+	+	+	±	+	+	+	+	+	±

Таблица 2. Сравнение кодов, применяющихся к моделированию EUV-источника. Обозначения: + — реализовано, - — не реализовано, ± — реализовано частично либо в упрощённой постановке, = — отсутствует в текущей версии кода, но было реализовано в предыдущей, # — нерелевантно для данного кода, ? — неизвестно.

результатов настоящего диссертационного исследования, удовлетворяет требованиям к физико-математической модели и основным требованиям к производительности, за исключением возможности проводить вычисления на высокопараллельных системах — в настоящий момент предел повышения скорости счёта был достигнут на двух узлах, каждый из которых содержит 18 вычислительных ядер. Дальнейшая работа в этом направлении может состоять в оптимизации числа обменов между различными вычислительными узлами, что позволит увеличить параллелизм кода.

Кроме того возможно развитие кода 3DLINE в следующих отношениях: расширение области применимости путём введения модели квазидиффузии [60], улучшение работы с сеткой (поддержка криволинейных координат, введение адаптации сетки под решение, переход на локальноструктурированные сетки).

Глава 1

Физические приближения и математическая модель воздействия лазерного импульса на вещество мишени

В настоящей главе описана физико-математическая модель процессов, протекающих в лазерной плазме. В её основу положены уравнения двухтемпературной одножидкостной газодинамики [61] с учётом нестационарности ионизации.

В качестве уравнения состояния для ионной компоненты плазмы используется приближение идеального одноатомного газа, а для электронной — табличное уравнение состояния, рассчитанное по методике [47]. Влияние излучения на параметры плазмы учитывается методом интерполяции таблиц, рассчитанных в предположениях различного поля излучения [62]. Расчёт ионизации осуществляется либо в приближении эффективного времени релаксации для среднего заряда иона, либо в квазистационарном приближении.

Уравнение переноса теплового излучения решается в стационарном виде. При этом используется либо метод дискретных ординат [63], либо диффузионное приближение [64].

Для переноса лазерного излучения сформулирована «гибридная» модель [23], включающая в себя элементы как геометрической [29], [31], так и волновой [30] оптики.

1.1. Уравнения двухтемпературной одножидкостной газодинамики

В двухтемпературном одножидкостном газодинамическом приближении [61] плазма рассматривается как жидкость, состоящая из двух компонент —

электронной и ионной с концентрациями n_e и n_a соответственно. При этом полагается, что выполняется условия квазинейтральности $n_e = Z_0 \cdot n_a$, где Z_0 — средний заряд ионов и адиабатического приближения (электронная компонента всюду следует за движением ионной). Таким образом, движение плазмы описывается в терминах плотности $\rho = M \cdot n_a$ (M — масса иона), давления $P = P_e + P_i$ (P_e и P_i — парциальные давления электронной и ионной компонент, соответственно), средней ионизации Z_0 и одного вектора скорости $\mathbf{v} = (u, w, v)$. В системе выполняются законы сохранения массы, энергии и импульса.

Закон сохранения массы, будучи записан в дифференциальной форме, эквивалентен уравнению неразрывности:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (1.1)$$

Здесь и далее $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla$ — полная (лагранжева) производная по времени.

Закон сохранения импульса в отсутствие сторонних сил приводит к уравнениям Навье-Стокса

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla P + \mu \Delta \mathbf{v} + \left(\zeta + \frac{\mu}{3} \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}). \quad (1.2)$$

Здесь μ — динамическая вязкость, ζ — объёмная вязкость. Пренебрегая динамической вязкостью и градиентом объёмной вязкости, запишем уравнение (1.2) в форме уравнения Эйлера с эффективной вязкостью [64]

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla (P + q), \quad (1.3)$$

где $q = -\zeta (\nabla \cdot \mathbf{v})$ — давление объёмной вязкости.

Закон сохранения энергии, применённый последовательно к электронной и ионной компонентам плазмы, приводит к уравнениям

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\varepsilon_e}{dt} &= P_e (\nabla \cdot \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{W}_e + \rho (G_e + Q_{ei}), \\ \rho \frac{d\varepsilon_i}{dt} &= P_i (\nabla \cdot \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{W}_i + \rho (G_i - Q_{ei}), \end{aligned} \quad (1.4)$$

где ε_e и ε_i — удельные внутренние энергии электронов и ионов, \mathbf{W}_e и \mathbf{W}_i — потоки тепла за счёт ионной и электронной теплопроводностей, G_e и G_i — сторонние источники (стоки) энергий электронов и ионов, отнесённые к единице массы, Q_{ei} — тепло, передаваемое между ионной и электронной компонентами плазмы.

Источником энергии для электронной компоненты служит нагрев плазмы лазером. Кроме того, электронная компонента может как приобретать, так и терять энергию за счёт процессов излучения и поглощения. Таким образом, $G_e = G_e^{las} + G_e^{rad}$. Работа сил вязкого трения (ионной и искусственной вязкости) в данной модели служит источником нагрева только ионной компоненты: $\rho G_i = q(\nabla \cdot \mathbf{v})$ ([22], в других работах, например [65], [66], использован иной подход: в равной мере нагреваются обе компоненты). Выразив из уравнения (1.1) $(\nabla \cdot \mathbf{v})$, приведём уравнение (1.4) к виду

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon_e}{dt} &= -P_e \frac{d(1/\rho)}{dt} - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{W}_e + Q_{ei} + G_e^{rad} + G_e^{las}, \\ \frac{d\varepsilon_i}{dt} &= -(P_i + q) \frac{d(1/\rho)}{dt} - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{W}_i - Q_{ei}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Система уравнений газовой динамики (1.1), (1.3) и (1.5) не является замкнутой. Для её замыкания необходимо задать уравнения, связывающие между собой термодинамические величины (уравнения состояния), выражения для транспортных коэффициентов (коэффициентов теплопроводности, поглощения фотонов, диэлектрической проницаемости) и уравнения переноса излучения в плазме, как теплового, так и лазерного.

1.2. Уравнение состояния и коэффициенты переноса

В рассматриваемом приближении независимыми термодинамическими параметрами являются плотность ρ , две температуры T_e и T_i и средний заряд иона Z_0 . Кроме того, мы предполагаем ряд параметров плазмы зависящими от поля излучения и вводим параметр ξ , характеризующий эту зависимость. Мето-

дика расчёта этого параметра и его физический смысл будут конкретизированы ниже, в разделе, описывающем перенос теплового излучения.

Таким образом, необходимо выразить через эти параметры следующие величины, входящие в систему уравнений газовой динамики: P_e , P_i , ς , ε_e , ε_i , \mathbf{W}_e , \mathbf{W}_i и Q_{ei} .

Для давления и энергии ионной компоненты используется приближение идеального газа:

$$P_i = n_a k T_i,$$

$$\varepsilon_i = \frac{3 n_a k T_i}{2 \rho},$$

где k — постоянная Больцмана.

Давление и энергия электронной компоненты берётся из таблиц, рассчитанных по методике [47], как функции электронной плотности, температуры и параметра ξ :

$$P_e = P_e(n_e, T_e, \xi),$$

$$\varepsilon_e = \varepsilon_e(n_e, T_e, \xi).$$

Объёмная вязкость вычисляется по формуле [22]

$$\varsigma = 1.02 \cdot 10^{-7/2} \frac{T_i^{5/2} \sqrt{A}}{(Z_0 + 0.5)^4 (0.1 \Lambda_{ii})}, \quad (1.6)$$

где ς выражена в г/см/мкс, а T_i в кэВ, Λ_{ii} — кулоновский логарифм ион-ионных соударений — применительно к данной величине полагается равным 10.

Для потоков тепла используется формула Фурье:

$$\mathbf{W}_e = -\chi_e \nabla T_e,$$

$$\mathbf{W}_i = -\chi_i \nabla T_i,$$

где χ_e и χ_i — коэффициенты электронной и ионной теплопроводностей. Коэффициент электронной теплопроводности табулируется аналогично электронному уравнению состояния, а для коэффициента ионной теплопроводности ис-

пользуется классическое выражение [67]

$$\chi_i = 3.906 \frac{n_a \tau_i}{m_i} k T_i \cdot k,$$

$$\tau_i = \frac{3 (m_i k T_i)^{3/2}}{4 \sqrt{\pi} \Lambda e^4 Z_0^4 \rho}$$

Здесь m_i — масса иона, τ_i — время ионных соударений, e — заряд электрона, Λ — кулоновский логарифм ион-ионных соударений:

$$\Lambda = 33.75 - 1.15 \lg n_a + 3.45 \lg T_e, \quad \text{при } T_e < 0.05,$$

$$\Lambda = 32.2 - 1.15 \lg n_a + 2.3 \lg T_e, \quad \text{при } T_e > 0.05.$$

T_i здесь выражена в кэВ, а n_a — в см^{-3} .

Теплообмен между электронами и ионами на единицу массы также вычисляется согласно [67]:

$$Q_{ei} = -\frac{3 m_e n_e}{\rho m_i \tau_i} k (T_e - T_i),$$

где m_e — масса электрона.

Скорости ионизации и рекомбинации, необходимые для расчёта ионизационного состава плазмы, а также оптические коэффициенты, необходимые для расчёта переноса с теплового излучения, табулируются аналогично электронному уравнению состояния как функции электронной плотности, электронной температуры и параметра ξ .

Равновесное значение средней ионизации рассчитывается по методике [47] и табулируется как функция ионной плотности, электронной температуры и параметра ξ .

Нахождение комплексной диэлектрической проницаемости ε_ω для излучения с круговой частотой ω , необходимой для решения задачи переноса лазерного излучения, само по себе является нетривиальной физической задачей. В описываемой модели для действительной части диэлектрической проницаемости использовано выражение [68]

$$\text{Re } \varepsilon_\omega = \epsilon_\omega = 1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2 + \nu_{ei}^2}$$

Здесь $\omega_{pl} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m_e}} = 5.64 \cdot 10^4 \sqrt{n_e}$ — частота собственных колебаний плазмы в с^{-1} , $\nu_{ei} = 9 \cdot 10^{-11} Z_0 n_e T_e^{-3/2} \Lambda$ — частота электрон-ионных соударений в с^{-1} , $\Lambda = 33.4 - 1.5 \lg n_e + \lg n_i + 1.5 \lg T_e$ — кулоновский логарифм электрон-ионных соударений, T_e выражена в кэВ, n_e в см^{-3} .

Для мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости в плазме используется выражение

$$\text{Im } \varepsilon_\omega = \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2 + \nu_{ei}^2} \frac{\nu_{ei}}{\omega},$$

а в металлическом олове — выражение, полученное из низкочастотной проводимости при нормальных условиях:

$$\text{Im } \varepsilon_\omega = 5 \cdot 10^7 \lambda,$$

где $\lambda = 2\pi c/\omega$ — длина волны, выраженная в сантиметрах, c — скорость света в вакууме.

1.3. Приближение среднего времени установления ионизационного равновесия

После введения уравнений состояния и определения транспортных коэффициентов в системе (1.1), (1.3), (1.5), состоящей из шести уравнений, остаётся семь независимых переменных: три компоненты вектора скорости $\mathbf{v} = (u, w, v)$, четыре термодинамических параметра ρ , T_e , T_i и Z_0 (или, что эквивалентно, n_e) и параметр ξ , определяемый из расчёта переноса излучения. Для замыкания этой системы необходимо либо добавить ещё одно динамическое уравнение, либо ввести добавочную связь на термодинамические переменные. Классическим подходом является предположение об том, что τ_{rel} — время установления равновесного значения средней ионизации Z_0^S — много меньше характерного времени газодинамических процессов, и, вследствие этого, средняя ионизация есть функция только плотности и электронной температуры и не зависит от

предыстории:

$$Z_0 = Z_0^S(\rho, T_e, \xi) \quad (1.7)$$

В настоящей работе используется приближение эффективного времени релаксации распределения частиц по степеням ионизации [69]. Предполагая величину $\tau_{rel}(n_e, T_e, \xi)$ известной, мы будем решать динамическое уравнение

$$\frac{dZ_0}{dt} = -\frac{Z_0 - Z_0^S}{\tau_{rel}}. \quad (1.8)$$

При $\tau \rightarrow 0$ уравнение (1.8) переходит в выражение (1.7), а при $\tau \rightarrow \infty$ — в $Z_0 = \text{const}$. Последний случай отвечает ситуации «замороженной» ионизации, характерной для плазменной струи, выходящей из нагретой области [70]. Отметим, что применение (1.8) приводит к неточному описанию ионного состава в такой плазме, занижая отклонение от равновесного распределения. Ещё более общим подходом является решение системы уравнений поуровневой кинетики [71], которая применительно к концентрациям отдельных ионов приводит к системе:

$$\begin{aligned} \frac{dn_0}{dt} &= -I_0 n_0 + R_1 n_1, \\ \frac{dn_1}{dt} &= -(I_1 + R_1) \cdot n_1 + I_0 n_0 + R_2 n_2, \\ &\dots \\ \frac{dn_k}{dt} &= -(I_k + R_k) \cdot n_k + I_{k-1} n_{k-1} + R_{k+1} n_{k+1}, \\ &\dots \\ \frac{dn_Z}{dt} &= -R_Z \cdot n_Z + I_{Z-1} n_{Z-1}, \\ n_a &= \sum_{k=0}^Z n_k, \\ Z_0 &= \frac{1}{n_a} \sum_{k=0}^Z k n_k. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Здесь $I_k(n_e, T_e, \xi)$ и $R_k(n_e, T_e, \xi)$ — скорости ионизации и рекомбинации иона с зарядом k , $n_k(t, \mathbf{r})$ — концентрация иона с зарядом k , Z — атомный

k	I_k, c^{-1}	R_k, c^{-1}	$x_k^S, \%$
6	$4.58 \cdot 10^{13}$	$2.57 \cdot 10^{10}$	0.00
7	$4.10 \cdot 10^{13}$	$8.81 \cdot 10^{10}$	0.00
8	$1.67 \cdot 10^{13}$	$2.19 \cdot 10^{11}$	0.01
9	$4.64 \cdot 10^{12}$	$2.54 \cdot 10^{11}$	0.36
10	$1.68 \cdot 10^{12}$	$2.65 \cdot 10^{11}$	6.22
11	$2.75 \cdot 10^{11}$	$3.22 \cdot 10^{11}$	32.49
12	$3.62 \cdot 10^{10}$	$1.93 \cdot 10^{11}$	46.20
13	$5.25 \cdot 10^9$	$1.20 \cdot 10^{11}$	13.98
14	$3.10 \cdot 10^8$	$9.87 \cdot 10^{10}$	0.74
15	$3.28 \cdot 10^7$	$5.90 \cdot 10^{10}$	0.00
16	$9.22 \cdot 10^6$	$3.78 \cdot 10^{10}$	0.00

Таблица 1.1. Скорости ионизации и рекомбинации для плазмы олова при температуре 40 эВ и плотности вещества $1.68 \cdot 10^{-4} \text{ г/см}^3$ в корональном приближении.

номер элемента. $\tau_{rel}(n_e, T_e, \xi)$ можно оценить из этих величин через число актов ионизации/рекомбинации в равновесной плазме:

$$\frac{1}{\tau_{rel}} = \sum_{k=0}^{Z-1} I_k x_k^S = \sum_{k=1}^Z R_k x_k^S,$$

где x_k^S — относительная доля ионов с зарядом k в плазме с установившимся равновесием. Равновесный состав плазмы может быть определён исходя из равенства количества актов ионизации и рекомбинации в единицу времени $I_k x_k^S = R_{k+1} x_{k+1}^S$ и условия нормировки $\sum_{k=0}^Z x_k^S = 1$.

Различие между подходами (1.8) и (1.9) можно проиллюстрировать на конкретном примере. Рассмотрим динамику ионизации в плазме олова при температуре 40 эВ и плотности вещества $1.68 \cdot 10^{-4} \text{ г/см}^3$ в приближении прозрачной плазмы ($\xi = 0$). Равновесное значение ионизации для этих условий $Z_0^S = 11.69$, электронной плотности — 10^{19} см^{-3} . Значения I_k , R_k и x_k^S при $Z_0 = Z_0^S$ для

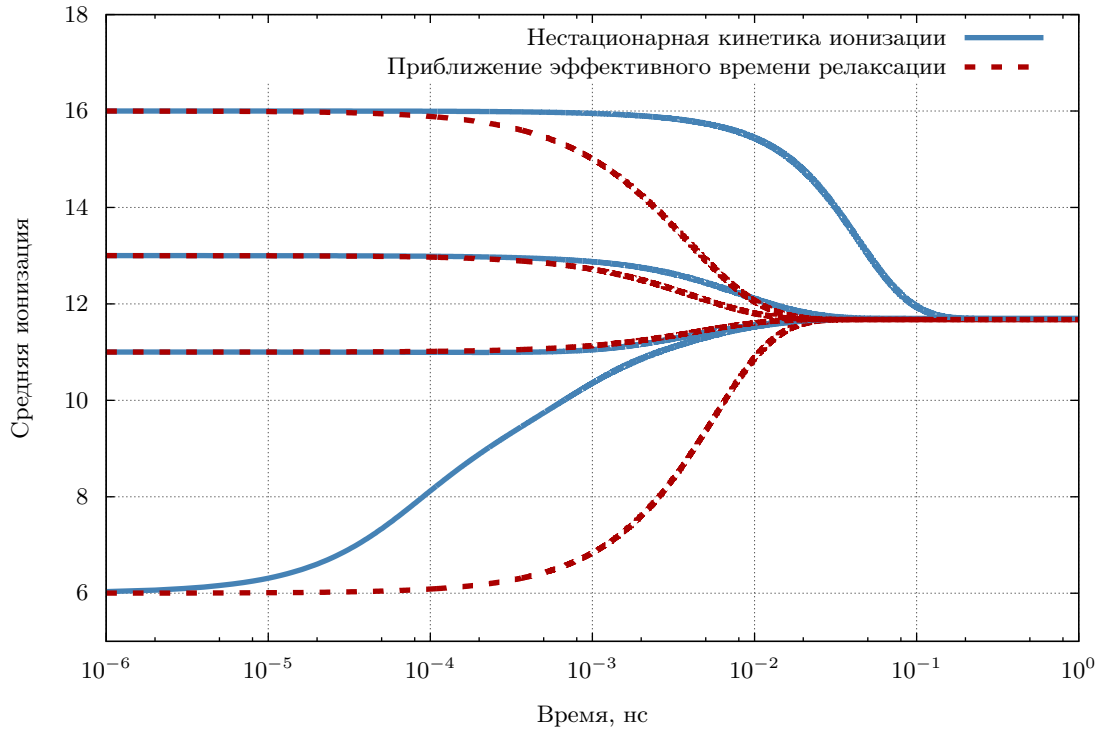


Рис. 1.1. Динамика средней ионизации в плазме олова при температуре 40 эВ и плотности вещества $1.68 \cdot 10^{-4}$ г/см³.

ионов с $x_k^S > 10^{-10}$, рассчитанные по методике [72], приведены в таблице 1.1.

На рисунке 1.1 приведена динамика средней ионизации, полученная в такой плазме по моделям (1.8) и (1.9). В начальный момент времени полагалось, что все ионы имеют одну и ту же ионизацию, соответствующую некоторому заряду иона (6, 11, 13, 16). Как видно из рисунка, применение приближения эффективного времени релаксации обеспечивает более быструю, чем следует из прямого расчёта, релаксацию для ионов с зарядом $k > Z_0^S$, и более медленную для ионов с $k < Z_0^S$. В случае $Z_0 > Z_0^S + 5$ времена релаксации в приближениях (1.8) и (1.9) могут отличаться на порядки, и корректность результатов, полученных в приближении эффективного времени релаксации, сомнительна. Квазистационарное приближение (1.7) в таком случае вообще неприменимо, так как релаксация распределения ионов по степеням ионизации к равновесному может занимать сотни наносекунд, что существенно превосходит типичные газодинамические времена.

Приближение (1.8) является приемлемым, если отклонение от равновес-

ной ионизации не слишком велико, а область его применимости существенно шире, чем область применимости квазистационарной модели (1.7). Применение более точной модели (1.9) как правило не приводит к уточнению результатов, но требует существенно больших вычислительных ресурсов.

1.4. Уравнение переноса неравновесного излучения

Наиболее общим подходом к описанию переноса собственного излучения в плазме является решение кинетического уравнения для функции распределения фотонов. При пренебрежении процессами рассеяния и эффектом Комптона, его можно свести к виду [64]

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\nu}{\partial t} + \boldsymbol{\Omega} \nabla I_\nu = j_\nu \left(1 + \frac{c^2}{2h\nu^3} I_\nu \right) - \kappa'_\nu I_\nu, \quad (1.10)$$

где $I_\nu(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$ — интенсивность излучения с частотой ν в точке с радиус-вектором \mathbf{r} в направлении единичного вектора $\boldsymbol{\Omega}$, $j_\nu(t, \mathbf{r})$ — излучательная способность вещества на данной частоте, h — постоянная Планка, $\kappa'_\nu(t, \mathbf{r})$ — коэффициент поглощения без учёта вынужденного излучения. После переобозначения $\kappa_\nu = \kappa'_\nu - j_\nu \frac{c^2}{2h\nu^3}$ уравнение (1.10) сводится к уравнению

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\nu}{\partial t} + \boldsymbol{\Omega} \nabla I_\nu = j_\nu - \kappa_\nu I_\nu, \quad (1.11)$$

в котором учтено уменьшение коэффициента поглощения κ_ν за счёт процессов вынужденного излучения. Решение данного динамического уравнения в шестимерном фазовом пространстве требует использования исключительно больших объёмов машинной памяти и потому нецелесообразно. Учитывая, что время распространения света для интересующих нас объектов много меньше характерного газодинамического времени, уравнение (1.11) можно упростить до формы

$$\boldsymbol{\Omega} \nabla I_\nu = j_\nu - \kappa_\nu I_\nu. \quad (1.12)$$

Уравнение (1.12) может напрямую применяться к описанию процессов переноса излучения в плазме [63]. В таком случае, локальный вклад в энергоба-

ланс от переноса излучения вычисляется просто как разность между интегральной (по частотам и углу) испущенной и поглощённой энергиями:

$$\rho G_e^{rad} = - \int d\nu \int d\Omega (j_\nu - \kappa_\nu I_\nu).$$

Однако в ряде случаев информация, содержащаяся в уравнении переноса (1.12), является излишней. В частности, в случае слабой зависимости I_ν от $\mathbf{\Omega}$, его можно свести к виду [64]

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{W}_\nu &= 4\pi j_\nu - c\kappa_\nu U_\nu, \\ \mathbf{W}_\nu &= -\frac{c}{3\kappa_\nu} \nabla U_\nu. \end{aligned} \tag{1.13}$$

Здесь $U_\nu = \frac{1}{c} \int d\Omega I_\nu$ — локальная плотность энергии излучения, а $\mathbf{W}_\nu = \int d\Omega \mathbf{\Omega} I_\nu$ — поток излучения.

Система (1.13) называется диффузионным приближением, её первое уравнение получается тождественным образом при интегрировании уравнения (1.12) по углам, а второе получается, если выразить второй угловой момент функции $I_\nu(t, \mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ через нулевой и воспользоваться предположением слабой анизотропии излучения. Локальный вклад в энергобаланс от переноса излучения равен

$$\rho G_e^{rad} = - \int d\nu (4\pi j_\nu - \kappa_\nu c U_\nu).$$

Параметр ξ , определяющий влияние излучения на уравнение состояния и оптические коэффициенты (см. стр. 21), определяется по формуле

$$\xi(t, \mathbf{r}) = \frac{\int_{[\nu_1, \nu_2]} d\nu \int d\Omega I_\nu(t, \mathbf{r}, \mathbf{\Omega})}{4\pi \int_{[\nu_1, \nu_2]} d\nu \frac{j_\nu(n_e, T_e, \xi = 1)}{\kappa_\nu(n_e, T_e, \xi = 1)}},$$

или, в диффузионном приближении,

$$\xi(t, \mathbf{r}) = \frac{\int_{[\nu_1, \nu_2]} d\nu c U_\nu(t, \mathbf{r})}{4\pi \int_{[\nu_1, \nu_2]} d\nu \frac{j_\nu(n_e, T_e, \xi = 1)}{\kappa_\nu(n_e, T_e, \xi = 1)}}.$$

Интегралы здесь берутся по интервалу $[\nu_1, \nu_2]$, излучение в котором определяет тип равновесия в плазме. Значение $\xi = 0$ отвечает оптически прозрачной плазме. В случае $[\nu_1, \nu_2] = [0, +\infty)$ значение $\xi = 1$ эквивалентно абсолютно непрозрачной плазме (планковскому распределению фотонов во всём диапазоне энергий), что отвечает локальному термодинамическому равновесию.

В комплексе программ 3DLINE реализовано как приближение (1.12), так и приближение (1.13). При этом излучательная способность плазмы $j_\nu(n_e, T_e, \xi)$ и коэффициент поглощения $\kappa_\nu(n_e, T_e, \xi)$ (как и остальные коэффициенты, зависящие от ξ) рассчитываются согласно [47] путём интерполяции по ξ данных двух таблиц, рассчитанных для двух предельных случаев прозрачной и непрозрачной плазмы.

1.5. Модель поглощения лазерного излучения с учётом рефракции

Для лазерного излучения существенны процессы рефракции и интерференции, которые уравнение (1.10) не описывает. С другой стороны, поскольку энергия фотона лазерного излучения как правило существенно отличается от энергии внутриатомных переходов, возможно полностью классическое описание процессов переноса лазерного излучения. Рассмотрим подробнее вопрос, ориентируясь на результаты монографий [6], [45], [73].

В классической электродинамике электромагнитная волна описывается уравнениями Максвелла [45]:

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{H} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \mathbf{D} &= 4\pi \rho_e, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0.\end{aligned}\tag{1.14}$$

Здесь \mathbf{E} и \mathbf{H} — вектора напряжённости электрического и магнитного по-

лей, \mathbf{D} и \mathbf{B} — вектора индукции электрического и магнитного полей, \mathbf{j} — ток, ρ_e — плотность заряда. Совместно с кинетическими уравнениями для функций распределения ионов и электронов в фазовом пространстве (\mathbf{r}, \mathbf{v}) уравнения (1.14) составляют систему уравнений Власова [74], которая используется для моделирования взаимодействия лазерного излучения с плазмой в PIC-кодах, например, [75]. Решение этой системы требует разрешения отдельных осцилляций электромагнитного поля, что накладывает жёсткие ограничения на временной шаг.

В классе задач, для которых построена описываемая в диссертации модель, такое разрешение не требуется. Характерное время изменения интенсивности лазера много больше периода осцилляций поля, и все величины f , входящие в уравнение (1.14), можно записать в форме

$$f(t, \mathbf{r}) = \tilde{f}(t, \mathbf{r})e^{-i\omega t},$$

где ω — круговая частота лазера, а \tilde{f} меняется на временах много больших, чем $1/\omega$, то есть $\partial\tilde{f}/\partial t \ll \omega\tilde{f}$. Подставляя в уравнение (1.14) величины в этой форме, получим

$$\begin{aligned}\nabla \times \tilde{\mathbf{H}} &= \frac{4\pi}{c}\tilde{\mathbf{j}} + \frac{1}{c}\left(\frac{\partial\tilde{\mathbf{D}}}{\partial t} - i\omega\tilde{\mathbf{D}}\right), \\ \nabla \times \tilde{\mathbf{E}} &= -\frac{1}{c}\left(\frac{\partial\tilde{\mathbf{B}}}{\partial t} - i\omega\tilde{\mathbf{B}}\right), \\ \nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}} &= 4\pi\tilde{\rho}_e, \\ \nabla \cdot \tilde{\mathbf{B}} &= 0.\end{aligned}\tag{1.15}$$

Членами $\frac{\partial\tilde{\mathbf{B}}}{\partial t}$ и $\frac{\partial\tilde{\mathbf{D}}}{\partial t}$ в уравнении (1.15) можно пренебречь по сравнению с членами $-i\omega\tilde{\mathbf{B}}$ и $-i\omega\tilde{\mathbf{D}}$. Кроме того, необходимо учесть что $\tilde{\rho}_e = Z_0n_a - n_e = 0$ вследствие квазинейтральности плазмы.

Рассматривая плазму без магнитоактивности и со временем отклика на изменение поля много меньшим времени изменения интенсивности лазера, можно записать материальные уравнения, связывающие индукцию и напряжённость

электрического и магнитного полей [45]

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{D}} &= \epsilon_\omega \tilde{\mathbf{E}}, \\ \tilde{\mathbf{B}} &= \tilde{\mathbf{H}},\end{aligned}$$

где ϵ_ω — действительная диэлектрическая проницаемость плазмы для частоты ω .

Используя закон Ома для среднего тока ($\tilde{\mathbf{j}} = \sigma_\omega \tilde{\mathbf{E}}$, σ_ω — проводимость плазмы) и введя обозначение для комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon_\omega = \epsilon_\omega + i \cdot 4\pi\sigma_\omega/\omega$, приводим уравнения электромагнитного поля к виду

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{H} &= -ik_L \epsilon_\omega \mathbf{E}, \\ \nabla \times \mathbf{E} &= ik_L \mathbf{H}, \\ \nabla \cdot (\epsilon_\omega \mathbf{E}) &= 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{H} &= 0.\end{aligned}\tag{1.16}$$

(мы опустили волну в обозначениях полей и ввели обозначение $k_L = \omega/c$).

Уравнения (1.16) являются основой для построения гибридной модели переноса лазерного излучения, подробно описанной в [44]. В дальнейшем для них предполагается два типа упрощений: в области, где $\omega_{pl} \ll \omega$, то есть $1 - \text{Re } \epsilon_\omega \ll 1$, диэлектрическая проницаемость плазмы слабо меняется на масштабах порядка длины волны и применимо приближение геометрической оптики. В области, где частота собственных колебаний плазмы близка к критической, уравнения (1.16) требуется решать точно. В таком случае выделяется основное направление, вдоль которого они решаются, пренебрегая поперечными градиентами, то есть сводятся к одномерному уравнению Гельмгольца.

Впервые подобный подход был предложен в работе [32], однако из-за большой вычислительной сложности использовался для задачи, обладающей сферической симметрией. Рассматривался случай, когда каплю равномерно облучают со всех сторон независимыми пучками, имеющими конечный (меньший 4π) угол фокусировки. В нашем случае никаких дополнительных предположений о при-

роде падающего пучка не требуется: в области применимости геометрической оптики задача решается точно.

1.5.1. Приближение геометрической оптики

В этом приближении компоненты поля рассматриваются в виде [6]

$$\begin{aligned}\mathbf{H} &= \mathbf{h}(t, \mathbf{r}) \exp(ik_L S(t, \mathbf{r})), \\ \mathbf{E} &= \mathbf{e}(t, \mathbf{r}) \exp(ik_L S(t, \mathbf{r})).\end{aligned}\tag{1.17}$$

Здесь $k_L = \omega/c$, $S(t, \mathbf{r})$ — комплексная фаза, а пространственный масштаб изменения функций \mathbf{e} , \mathbf{h} и S много больше длины волны. После подстановки анзаца (1.17) в уравнение (1.16) мы имеем систему

$$\begin{aligned}\nabla S \times \mathbf{h} - \varepsilon_\omega \mathbf{e} &= -\frac{i}{k_L} \nabla \times \mathbf{h}, \\ \nabla S \times \mathbf{e} + \mathbf{h} &= \frac{i}{k_L} \nabla \times \mathbf{e}, \\ \nabla S \cdot \mathbf{h} &= \frac{i}{k_L} \nabla \cdot \mathbf{h}, \\ \nabla S \cdot \mathbf{e} &= \frac{i}{k_L} (\nabla \cdot \mathbf{e} + \mathbf{e} \cdot \nabla \ln \varepsilon_\omega).\end{aligned}\tag{1.18}$$

В силу условия применимости геометрической оптики, всеми величинами, записанными в правой части системы уравнений (1.18), можно пренебречь. Выразив из второго уравнения системы \mathbf{h} и подставив его в первое, получаем

$$\left[(\nabla S)^2 - \varepsilon_\omega \right] \mathbf{e} = 0.$$

Из того, что $\mathbf{e} \neq 0$ во всём пространстве, следует основное уравнение геометрической оптики

$$(\nabla S)^2 = \varepsilon_\omega.\tag{1.19}$$

Уравнение (1.19) также можно получить исходя из формального разложения $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ по параметру малости λ [76].

Введём обозначения для мнимой и действительной частей S : $\text{Re } S = S_1$, $\text{Im } S = S_2$. Действительная часть определяет положение фазовой поверхности

и траекторию луча, мнимая — затухание амплитуды поля, связанное с диссипацией энергии в проводящей среде.

Пространственно зависимая компонента фазы S_1 , или эйконал, связана с локальным волновым вектором \mathbf{k} соотношением $\mathbf{k} = k_L \nabla S_1$. Введём обозначение $n = |\nabla S_1| = \text{Re} \sqrt{\varepsilon_\omega}$. Волновой фронт движется с фазовой скоростью $\omega/|\mathbf{k}| = c/|\nabla S_1| = c/n$, в то время как лучам, которые всюду перпендикулярны волновому фронту, то есть параллельны \mathbf{k} , можно приписать групповую скорость (скорость переноса энергии). В идеальной бесстолкновительной плазме $n = \sqrt{1 - \omega_p^2/\omega^2} = k/k_L = ck/\omega$, где ω_p — плазменная частота, определяемая концентрацией электронов. Исходя из этого, $d\omega/d\mathbf{k} = c^2 \mathbf{k}/\omega = c \nabla S_1$, и

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} = c \nabla S_1. \quad (1.20)$$

Уравнение движения луча можно получить, взяв полную (лагранжеву) производную от групповой скорости по времени [31]:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = c \frac{d(\nabla S_1)}{dt} = c \left(\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \right) \nabla S_1 = c^2 (\nabla S_1 \cdot \nabla) \nabla S_1 = \frac{c^2}{2} \nabla n^2. \quad (1.21)$$

Среднее (по времени) значение вектора Пойнтинга равняется [6]

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S} \rangle &= \frac{c}{8\pi} \text{Re} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) = \frac{c}{8\pi} \text{Re} (\mathbf{e} \times \mathbf{h}^*) \cdot e^{-2k_L S_2} = \\ &= \frac{c}{8\pi} \text{Re} (\mathbf{e} \times (\nabla S^* \times \mathbf{e}^*)) \cdot e^{-2k_L S_2} = \frac{c}{8\pi} |\mathbf{e}|^2 e^{-2k_L S_2} \cdot \nabla S_1. \end{aligned}$$

Индексом * здесь обозначена операция комплексного сопряжения.

В начале луча полагаем значение модуля вектора Пойнтинга известным. Поглощение энергии определяется множителем $\exp(-2k_L S_2)$, а уменьшение интенсивности за счёт увеличения площади сечения пучка включено в ∇S_1 . Если мы описываем пучок как совокупность лучей с заданными энергиями, для нахождения энергии, поглощённой плазмой, член ∇S_1 дифференцировать не нужно. Так как

$$\frac{dS_2}{dt} = \mathbf{v} \cdot \nabla S_2 = c \nabla S_1 \cdot \nabla S_2 = \frac{c}{2} \text{Im} \varepsilon_\omega,$$

изменение интенсивности на луче P удовлетворяет уравнению

$$\frac{dP}{dt} = P \frac{d}{dt}(-2k_L S_2) = -P\omega \operatorname{Im} \varepsilon_\omega. \quad (1.22)$$

Изменение фазы $\Psi = k_L S_1$ вдоль луча удовлетворяет уравнению

$$\frac{d\Psi}{dt} = k_L \frac{dS_1}{dt} = \omega(\nabla S_1)^2 = \omega n^2. \quad (1.23)$$

Введём обозначения $\tau = ct$, $\mu = \frac{2\omega}{c} \operatorname{Im} \sqrt{\varepsilon_\omega}$, $\mathbf{s} = \frac{\nabla S_1}{|\nabla S_1|} = \frac{\nabla S_1}{n}$. В этих обозначениях уравнения (1.20) – (1.23) принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}}{d\tau} &= n\mathbf{s}, \\ \frac{d(n\mathbf{s})}{d\tau} &= \frac{1}{2}\nabla n^2, \\ \frac{dP}{d\tau} &= -n\mu P, \\ \frac{d\Psi}{d\tau} &= k_L n^2. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Уравнения (1.24) являются основными в области применимости геометрической оптики. Поскольку время прохождения луча через область плазмы много меньше характерного времени газодинамических процессов, в эти уравнения время t входит как параметр, определяющий граничные условия и коэффициенты преломления и поглощения. Решая их относительно переменной τ — «времени на луче» — получаем траектории всех лучей $\mathbf{r}(t, \tau, \mathbf{r}_0)$ (где \mathbf{r}_0 определяет начальную координату луча) и изменение интенсивности вдоль них $P(t, \tau, \mathbf{r}_0)$. Поглощение энергии в точке с координатами \mathbf{r}' определяется по формуле

$$\rho G_e^{las}(t, \mathbf{r}') = - \sum_{\mathbf{r}_0, \tau} \nabla \cdot P(t, \tau, \mathbf{r}_0) \mathbf{s}(t, \tau, \mathbf{r}_0) \Big|_{\mathbf{r}(t, \tau, \mathbf{r}_0) = \mathbf{r}'},$$

где суммирование происходит по всем лучам, проходящим через данную точку.

1.5.2. Одномерное уравнение Гельмгольца

В области, где приближение геометрической оптики неприменимо, уравнения (1.16) решаются в одномерном приближении [6]. Представим поле на

границе области, где решается уравнение (1.16), как суперпозицию плоских волн с направлением распространения \mathbf{n} и для каждой такой плоской волны выберем систему координат так, чтобы $\varepsilon_\omega(t, \mathbf{r}) = \varepsilon_\omega(t, z)$ и $\mathbf{n} = (n_x, 0, n_z) = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$, где θ — угол падения. Такая волна может иметь две поляризации: s -поляризацию, в которой $\mathbf{E} = (0, E_y, 0)$, $\mathbf{H} = (H_x, 0, H_z)$, и p -поляризацию, в которой $\mathbf{E} = (E_x, 0, E_z)$, $\mathbf{H} = (0, H_y, 0)$.

Рассмотрим s -поляризованную волну. После подстановки векторов электрического и магнитного поля покомпонентно в уравнение (1.16), получаем систему

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} H_z &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial z} H_x - \frac{\partial}{\partial x} H_z &= -ik_L \varepsilon_\omega E_y, \\ -\frac{\partial}{\partial y} H_x &= 0, \\ -\frac{\partial}{\partial z} E_y &= ik_L H_x, \\ \frac{\partial}{\partial x} E_y &= ik_L H_z, \\ \varepsilon_\omega \frac{\partial}{\partial y} E_y &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial x} H_x + \frac{\partial}{\partial z} H_z &= 0. \end{aligned}$$

Выразив из неё $E_y(x, z)$, получаем

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} E_y + \frac{\partial^2}{\partial x^2} E_y + k_L^2 \varepsilon_\omega E_y = 0.$$

Разделим переменные, подставив E_y в форме $E_y(x, z) = C(x)f(z)$:

$$\frac{1}{f(z)} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} f(z) + k_L^2 \varepsilon_\omega f(z) \right) = -\frac{1}{C(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} C(x) = k_L^2 \alpha^2,$$

где α — некоторая константа, определяемая граничными условиями. Из второго равенства следует

$$C(x) = C_1 \exp(-ik_L \alpha x) + C_2 \exp(ik_L \alpha x).$$

Поскольку на границе области $E_y(x, z) \sim \exp(ik_L \sin \theta x)$, $\alpha = \sin \theta$ и

$$\begin{aligned} C(x) &= \text{const} \cdot \exp(ik_L \sin \theta x), \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} f(z) + k_L^2 (\varepsilon_\omega - \sin^2 \theta) f(z) &= 0. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Таким образом, компоненты поля и вектора Пойнтинга $\mathbf{S} = \frac{c}{8\pi} \text{Re} \mathbf{E} \times \mathbf{H}^* = (S_x, 0, S_z)$ имеют вид

$$\begin{aligned} E_y &= \exp(ik_L \sin \theta x) f(z), \\ H_x &= \frac{-1}{ik_L} \exp(ik_L \sin \theta x) \frac{\partial}{\partial z} f(z), \\ H_z &= \sin \theta \exp(ik_L \sin \theta x) f(z), \\ S_x &= \frac{c}{8\pi} \sin \theta |f(z)|^2, \\ S_z &= \frac{c}{8\pi} \text{Re} \left(\frac{1}{ik_L} f(z) \frac{\partial}{\partial z} f^*(z) \right). \end{aligned} \quad (1.26)$$

Дивергенция вектора Пойнтинга, определяющая поглощение в единице объёма среды, равна

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \mathbf{S} &= -\frac{\partial}{\partial z} S_z = \frac{c}{8\pi k_L} \text{Im} \left(\frac{\partial}{\partial z} \left(f(z) \frac{\partial}{\partial z} f^*(z) \right) \right) = \\ &= \frac{c}{8\pi k_L} \text{Im} \left(\left| \frac{\partial f(z)}{\partial z} \right|^2 + f(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} f^*(z) \right) = \\ &= \frac{c}{8\pi k_L} \text{Im} \left(-f(z) k_L^2 (\varepsilon_\omega^* - \sin^2 \theta) f^*(z) \right) = \frac{ck_L}{8\pi} \text{Im} \varepsilon_\omega |f(z)|^2 = \\ &= \frac{ck_L}{8\pi} \text{Im} \varepsilon_\omega |E_y|^2. \\ \rho G_e^{las} &= \frac{ck_L}{8\pi} \text{Im} \varepsilon_\omega |E_y|^2. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Заметим, что уравнения (1.25) – (1.27) верны и для ситуации, когда в среде присутствует две волны: «падающая», распространяющаяся в направлении $(\sin \theta, 0, \cos \theta)$, и «отражённая», распространяющаяся в направлении $(\sin \theta, 0, -\cos \theta)$, так как в обоих случаях зависимость $C(x)$ имеет один и тот же вид. Нормировка функции $f(z)$ определяется граничными условиями. Типичной является ситуация, когда на левой границе $z = z_1$ известен поток излучения в

«падающей» волне, а за правой границей $z = z_2$ отсутствует волна «отражённая». Если диэлектрическая проницаемость среды непрерывна на границе, то граничные условия, ставящиеся к уравнению (1.26), имеют вид

$$\begin{aligned} f(z)|_{z=z_1} &= \sqrt{\frac{8\pi}{c}} P(1 + R \exp(i\delta\phi)), \\ \left. \frac{\partial f(z)}{\partial z} \right|_{z=z_1} &= \sqrt{\frac{8\pi}{c}} P(1 - R \exp(i\delta\phi)) i k_L \sqrt{\varepsilon_\omega(z_1) - \sin^2 \theta}, \\ \left. \frac{\partial \ln f(z)}{\partial z} \right|_{z=z_2} &= i k_L \sqrt{\varepsilon_\omega(z_2) - \sin^2 \theta}, \end{aligned} \quad (1.28)$$

где P — заданная интенсивность, а R и $\delta\phi$ — неизвестные коэффициент отражения и сдвиг фазы. На разрыве диэлектрической проницаемости тангенциальные компоненты поля непрерывны, а нормальная компонента может испытывать скачок [45].

Для p -поляризации рассмотрение проводится аналогично. Уравнения Максвелла имеют вид

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial z} H_y &= -i k_L \varepsilon_\omega E_x, \\ \frac{\partial}{\partial x} H_y &= -i k_L \varepsilon_\omega E_z, \\ \frac{\partial}{\partial y} E_z &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial z} E_x - \frac{\partial}{\partial x} E_z &= i k_L H_y, \\ \frac{\partial}{\partial y} E_x &= 0, \\ \varepsilon_\omega \frac{\partial}{\partial x} E_x + \frac{\partial}{\partial z} \varepsilon_\omega E_z &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial y} H_y &= 0. \end{aligned}$$

Выразив отсюда H_y , получим

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} H_y - \frac{\partial \ln \varepsilon_\omega}{\partial z} \frac{\partial H_y}{\partial z} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} H_y + k_L^2 \varepsilon_\omega H_y = 0.$$

Разделяя переменные аналогично случаю s -поляризации, получаем уравнение на амплитуду магнитного поля $g(z)$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} g(z) - \frac{\partial \ln \varepsilon_\omega}{\partial z} \frac{\partial g}{\partial z} + k_L^2 (\varepsilon_\omega - \sin^2 \theta) g(z) = 0, \quad (1.29)$$

И КОМПОНЕНТЫ ПОЛЯ

$$\begin{aligned}
E_x &= \frac{1}{ik_L \varepsilon_\omega} \exp(ik_L \sin \theta x) \frac{\partial}{\partial z} g(z), \\
E_z &= -\frac{\sin \theta}{\varepsilon_\omega} \exp(ik_L \sin \theta x) g(z), \\
H_y &= \exp(ik_L \sin \theta x) g(z), \\
S_x &= \frac{c}{8\pi} \operatorname{Re} \frac{\sin \theta}{\varepsilon_\omega(z)} |g(z)|^2, \\
S_z &= \frac{c}{8\pi} \operatorname{Re} \left(\frac{g^*(z)}{ik_L \varepsilon_\omega(z)} \frac{\partial}{\partial z} g(z) \right).
\end{aligned} \tag{1.30}$$

Дивергенция вектора Пойнтинга равна

$$\begin{aligned}
-\nabla \cdot \mathbf{S} &= -\frac{\partial}{\partial z} S_z = -\frac{c}{8\pi k_L} \operatorname{Im} \left(\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{g^*(z)}{\varepsilon_\omega(z)} \frac{\partial}{\partial z} g(z) \right) \right) = \\
&= -\frac{c}{8\pi k_L} \operatorname{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon_\omega(z)} \left| \frac{\partial g(z)}{\partial z} \right|^2 + g^*(z) \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{\varepsilon_\omega(z)} \frac{\partial}{\partial z} g(z) \right) = \\
&= -\frac{c}{8\pi k_L} \operatorname{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon_\omega(z)} \left| \frac{\partial g(z)}{\partial z} \right|^2 - |g(z)|^2 k_L^2 \left(1 - \frac{\sin^2 \theta}{\varepsilon_\omega(z)} \right) \right) = \\
&= -\frac{c}{8\pi k_L} \left(\left| \frac{\partial g(z)}{\partial z} \right|^2 + |g(z)|^2 k_L^2 \sin^2 \theta \right) \operatorname{Im} \frac{1}{\varepsilon_\omega(z)} = \\
&= \frac{ck_L}{8\pi} \operatorname{Im} \varepsilon_\omega \left(\frac{\sin^2 \theta}{|\varepsilon_\omega|^2} |g(z)|^2 + \frac{1}{k_L^2 |\varepsilon_\omega|^2} \left| \frac{\partial g(z)}{\partial z} \right|^2 \right) = \\
&= \frac{ck_L}{8\pi} \operatorname{Im} \varepsilon_\omega (|E_x|^2 + |E_z|^2), \\
\rho G_e^{las} &= \frac{ck_L}{8\pi} \operatorname{Im} \varepsilon_\omega (|E_x|^2 + |E_z|^2).
\end{aligned} \tag{1.31}$$

как и было отмечено в работе [30]. Граничные условия ставятся аналогично (1.28).

Интересно сравнить результаты, полученные в приближениях геометрической оптики и волновой модели, на простейших плоских задачах.

1.5.3. Полубесконечная среда с постоянной диэлектрической проницаемостью

Рассмотрим полубесконечный слой с диэлектрической проницаемостью

$$\begin{aligned}\varepsilon_\omega(z) &= 1, & \text{при } z < 0, \\ \varepsilon_\omega(z) &= \varepsilon, & \text{при } z \geq 0,\end{aligned}$$

на который перпендикулярно падает волна интенсивностью $P_0 = c/8\pi$. Поскольку для $\theta = 0$ разница между s - и p -поляризациями отсутствует, будем считать её s -поляризованной. Решение уравнения (1.25) для разрывного коэффициента диэлектрической проницаемости приводит к результату:

$$\begin{aligned}E_y(z) &= C \frac{1 + \sqrt{\varepsilon}}{2} e^{ik_L z} + C \frac{1 - \sqrt{\varepsilon}}{2} e^{-ik_L z}, & \text{при } z < 0, \\ E_y(z) &= C e^{ik_L \sqrt{\varepsilon} z}, & \text{при } z > 0.\end{aligned}$$

Магнитное поле здесь

$$\begin{aligned}H_x(z) &= -C \frac{1 + \sqrt{\varepsilon}}{2} e^{ik_L z} + C \frac{1 - \sqrt{\varepsilon}}{2} e^{-ik_L z}, & \text{при } z < 0, \\ H_x(z) &= -C \sqrt{\varepsilon} e^{ik_L \sqrt{\varepsilon} z}, & \text{при } z > 0.\end{aligned}$$

Коэффициент C можно найти из известного значения интенсивности падающей волны:

$$P_0 = \frac{c}{8\pi} C^2 \left| \frac{1 + \sqrt{\varepsilon}}{2} \right|^2$$

Возвращаясь к введённым в (1.24) обозначениям для $\text{Re } \sqrt{\varepsilon}$ и $\text{Im } \sqrt{\varepsilon}$, получим следующее выражение для волны в полупространстве:

$$\begin{aligned}E_y(z) &= \frac{2}{1 + \sqrt{\varepsilon}} e^{ik_L n z - \mu z/2}, \\ H_x(z) &= -\frac{2\sqrt{\varepsilon}}{1 + \sqrt{\varepsilon}} e^{ik_L n z - \mu z/2},\end{aligned}$$

и вектор Пойнтинга

$$\mathbf{S} = \frac{c}{8\pi} \text{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) = \frac{c}{8\pi} (0, 0, -\text{Re}(E_y \cdot H_x^*)) = (0, 0, P(z)),$$

$$P(z) = -\frac{c}{8\pi} \operatorname{Re}(E_y \cdot H_x^*) = \frac{c}{8\pi} \frac{4n}{|1 + \sqrt{\varepsilon}|^2} e^{-\mu z} = P_1 e^{-\mu z},$$

$$\rho G_e^{las} = \mu P_1 e^{-\mu z}.$$

В то же время для постоянной диэлектрической проницаемости из (1.24) следует

$$\frac{dP}{dz} = \frac{dP}{d\tau} \cdot \frac{d\tau}{dz} = \frac{1}{n} \cdot \frac{dP}{d\tau} = -\mu P,$$

$$P(z) = P_0 e^{-\mu z},$$

$$\rho G_e^{las} = \mu P_0 e^{-\mu z}.$$

Заметим, что в обоих случаях мощность прошедшего излучения спадает с увеличением координаты z как $e^{-\mu z}$. Различие в предэкспоненциальном множителе объясняется тем, что в волновой модели учитывается частичное отражение волны от границы сред. Коэффициент отражения

$$R = \left| \frac{1 - \sqrt{\varepsilon}}{1 + \sqrt{\varepsilon}} \right|^2 = 1 - \frac{4n}{|1 + \sqrt{\varepsilon}|^2} = \frac{P_0 - P_1}{P_0},$$

а прошедшая энергия $(1 - R)P_0 = P_1$. Таким образом, различие между учётом эффектов поглощения по формулам (1.24) и (1.25) – (1.28) заключается в том, что в приближении геометрической оптики не учитываются эффекты частичного отражения луча от разрывной границы среды. Кроме того, геометрическая оптика не учитывает эффект интерференции проходящего и отражённого лучей (не влияющий на поглощение энергии в данной модельной задаче). Тем не менее, уравнения (1.24) позволяют корректно описать преломление (или полное внутреннее отражение) луча на разрыве диэлектрической проницаемости при корректном выполнении предельного перехода [31].

1.5.4. Полубесконечная среда с постоянным градиентом диэлектрической проницаемости

Другой модельной задачей, имеющей простое аналитическое решение, является падение s -поляризованной волны интенсивностью P_0 под углом θ на

слоем с линейно убывающей действительной и малой мнимой компонентой диэлектрической проницаемости:

$$\begin{aligned}\varepsilon_\omega(z) &= 1, & \text{при } z < 0, \\ \varepsilon_\omega(z) &= 1 - 4\alpha z + i\sqrt{1 - 4\alpha z} \frac{\mu}{k_L} - \frac{\mu}{4k_L^2}, & \text{при } z \geq 0,\end{aligned}$$

где α — размерный коэффициент, μ — коэффициент поглощения, $\mu \ll 1/\alpha$, $\mu \ll k_L$.

Решение уравнений геометрической оптики (1.24) при $n \approx \sqrt{1 - 4\alpha z}$ даёт

$$\begin{aligned}\mathbf{r}(\tau) &= (\sin \theta \cdot \tau, 0, -\alpha\tau^2 + \cos \theta \cdot \tau), \\ n\mathbf{s}(\tau) &= (\sin \theta, 0, -2\alpha\tau + \cos \theta),\end{aligned}$$

при $0 \leq \tau \leq \cos \theta / \alpha$. Отсюда следует, что траектория лучей в среде с постоянным градиентом n^2 — парабола, а излучение проходит в среду на глубину $\cos^2 \theta / 4\alpha$. Найдём энергию, поглощаемую в слое $[z; z + dz]$. Пусть его площадь dS . Вследствие параллельности пучка, через этот участок пройдут лучи, покрывающие площадь dS на границе среды и несущие общую начальную энергию $P_0 dS / \cos \theta$. Каждый луч проходит в этом слое расстояние $l = dz / |s_z(z)|$ и теряет в нём $E(\tau)\mu l$ энергии, где $E(\tau)$ — энергия на луче в момент достижения рассматриваемого слоя. В силу малости поглощения, положим $E(\tau) \approx E(0)$. Учитывая, что каждый луч проходит через этот слой дважды, получаем выражение для функции нагрева на единицу объёма:

$$\rho G_e^{las} = \frac{1}{dz dS} \frac{P_0 dS}{\cos \theta} \frac{2\mu dz}{|s_z|} = 2\mu \frac{P_0}{\cos \theta} \frac{n(z)}{\sqrt{n^2(z) - \sin^2 \theta}},$$

или, подставив $n(z)$ в явном виде,

$$\begin{aligned}\rho G_e^{las} &= 2\mu P_0 \frac{\sqrt{1 - 4\alpha z}}{\sqrt{1 - 4\alpha z / \cos^2 \theta}}, & \text{при } 0 < z < \frac{\cos^2}{4\alpha}, \\ \rho G_e^{las} &= 0, & \text{при } \frac{\cos^2}{4\alpha} < z.\end{aligned}$$

Это выражение имеет интегрируемую особенность в точке $z = \frac{\cos^2}{4\alpha}$, и

интегральная энергия, поглощаемая на единицу площади в единицу времени,

$$E_e^{las} = \int_0^{1/4\alpha} dz \rho G_e^{las}(z), \text{ конечна.}$$

Применение уравнений волновой оптики (1.25) в пренебрежении членами, содержащими μ/k_L , приводит к уравнению

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} f + k_L^2 (\cos^2 \theta - 4\alpha z) f = 0,$$

или, после замены переменных $\zeta = (4\alpha k_L^2)^{1/3}(z - \cos^2 \theta/4\alpha)$, к уравнению Эйри [77]

$$\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} f - \zeta f = 0.$$

Его решение — функции Эйри $\text{Ai}(\zeta)$ и $\text{Bi}(\zeta)$. Поскольку на правой границе $z \rightarrow +\infty$ поле должно быть конечным, $E_y = C \cdot \text{Ai}(\zeta)$. Граничные условия (1.28) приводят к уравнениям на нормировочную константу C :

$$\begin{aligned} C \text{Ai}(\zeta_0) &= \sqrt{\frac{8\pi}{c}} P_0 (1 + R \exp(i\delta\phi)), \\ C(4\alpha k_L^2)^{1/3} \frac{\partial \text{Ai}(\zeta)}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=\zeta_0} &= \sqrt{\frac{8\pi}{c}} P_0 (1 - R \exp(i\delta\phi)) i k_L \cos \theta, \end{aligned}$$

где $\zeta_0 = \zeta(z = 0) = -\left(\frac{k_L}{4\alpha}\right)^{2/3} \cos^2 \theta$. Исключая коэффициент отражения, получаем выражение для определения нормировочной константы

$$C \left(\text{Ai}(\zeta_0) + \frac{1}{i\sqrt{-\zeta_0}} \frac{\partial \text{Ai}(\zeta)}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=\zeta_0} \right) = 2\sqrt{\frac{8\pi}{c}} P_0,$$

и

$$|C|^2 = \frac{4P_0 \cdot 8\pi/c}{|\text{Ai}(\zeta_0)|^2 + \frac{1}{-\zeta_0} \left| \frac{\partial \text{Ai}(\zeta_0)}{\partial \zeta} \right|^2}.$$

Функция нагрева, следуя (1.27), равна

$$\rho G_e^{las}(z) = \frac{4\sqrt{1-4\alpha z} |\text{Ai}(\zeta)|^2}{|\text{Ai}(\zeta_0)|^2 + \frac{1}{-\zeta_0} \left| \frac{\partial \text{Ai}(\zeta_0)}{\partial \zeta} \right|^2} \mu P_0, \quad \text{при } 0 < z < \frac{1}{4\alpha}.$$

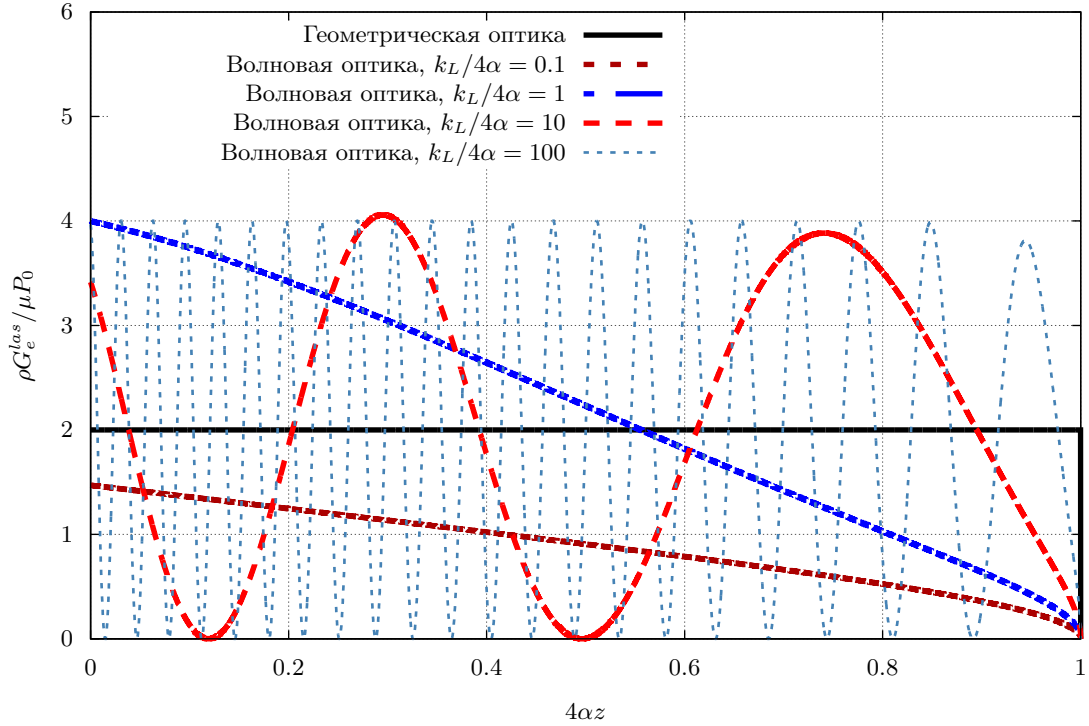


Рис. 1.2. Поглощение s -поляризованной волны в среде с постоянным градиентом $\text{Re } \varepsilon_\omega$ и малым коэффициентом поглощения. Угол падения $\theta = 0^\circ$.

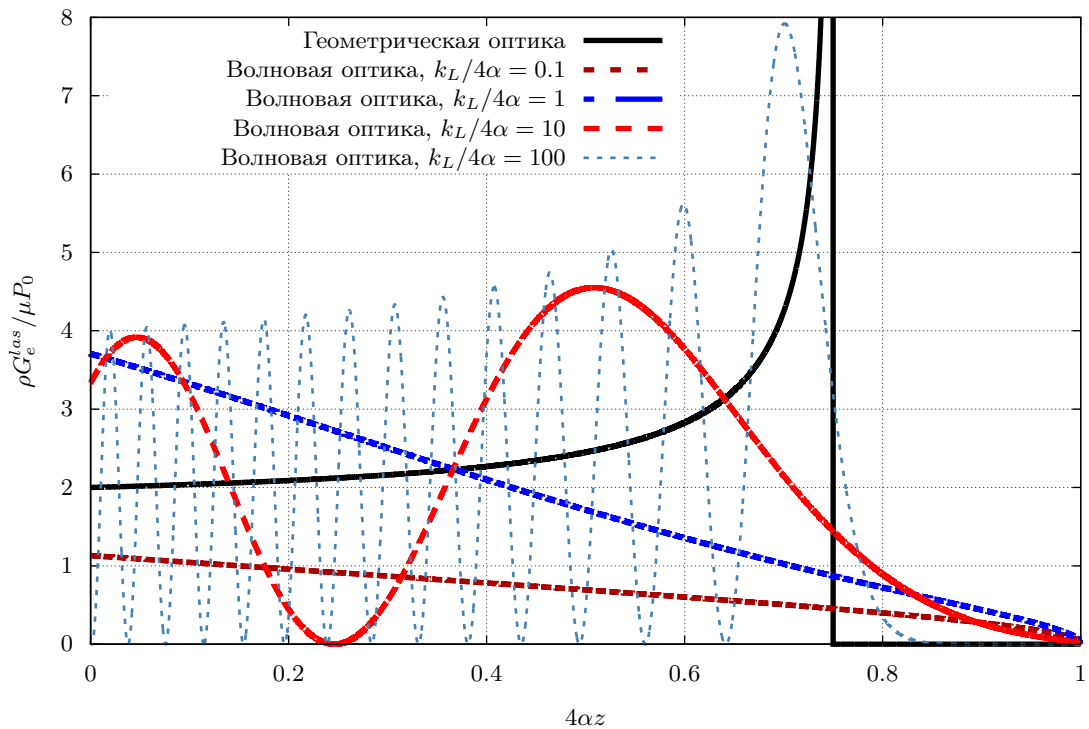


Рис. 1.3. Поглощение s -поляризованной волны в среде с постоянным градиентом $\text{Re } \varepsilon_\omega$ и малым коэффициентом поглощения. Угол падения $\theta = 30^\circ$.

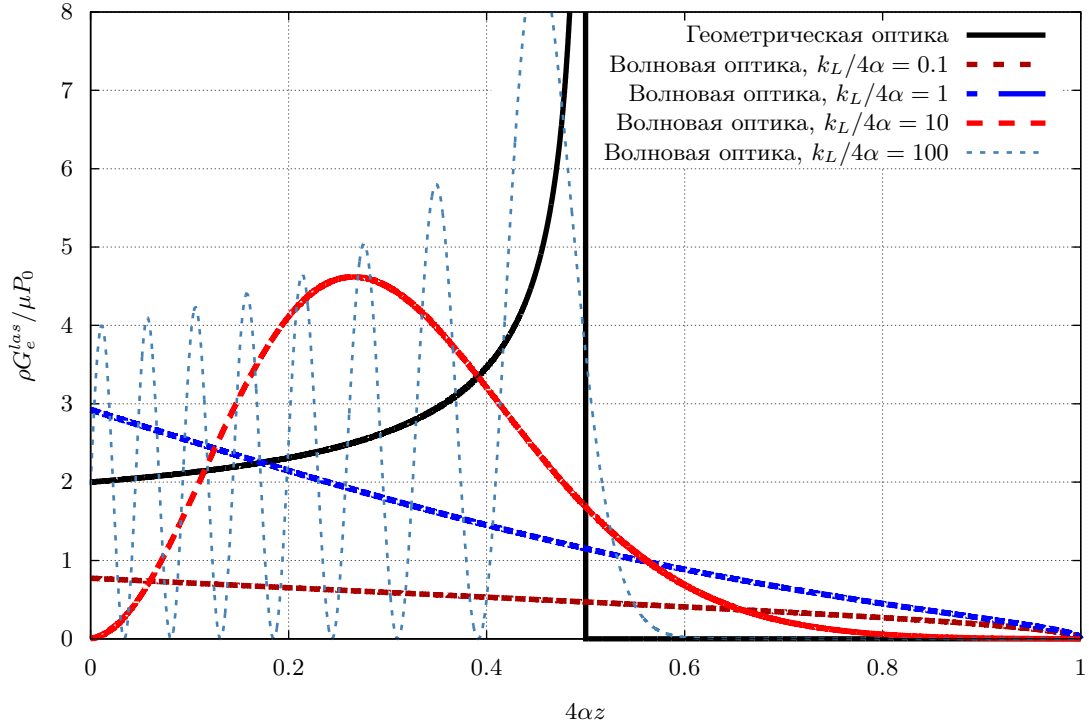


Рис. 1.4. Поглощение s -поляризованной волны в среде с постоянным градиентом $\text{Re } \epsilon_\omega$ и малым коэффициентом поглощения. Угол падения $\theta = 45^\circ$.

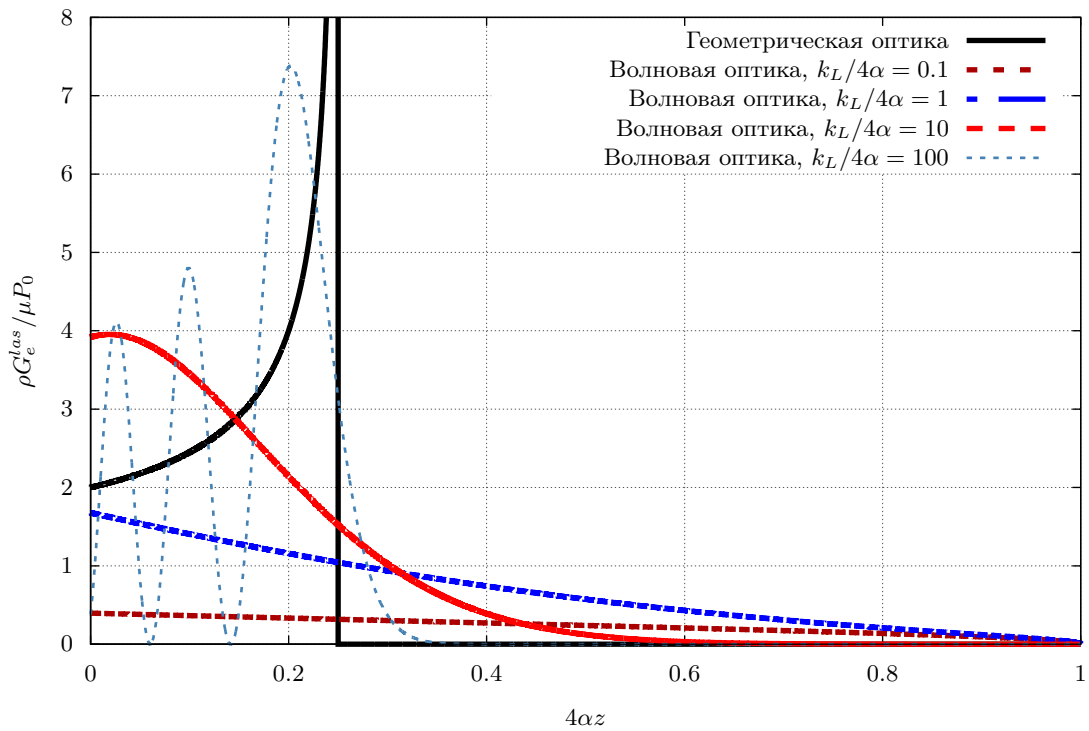


Рис. 1.5. Поглощение s -поляризованной волны в среде с постоянным градиентом $\text{Re } \epsilon_\omega$ и малым коэффициентом поглощения. Угол падения $\theta = 60^\circ$.

На графиках 1.2 – 1.5 приведено поглощение лазерной энергии, полученное по этой формуле и в приближении геометрической оптики для разных значений безразмерных параметров $\cos^2 \theta$ и $k_L/4\alpha$. По оси абсцисс отложена безразмерная координата $4\alpha z$, по оси ординат — безразмерная функция поглощения $\rho G_e^{las}/\mu P_0$.

Рассмотрим асимптотику поглощения лазера в такой среде при $k_L/\alpha \rightarrow +\infty$, что отвечает малым длинам волн. В этом пределе $\zeta_0 \rightarrow -\infty$, и

$$\begin{aligned} \text{Ai}(\zeta) &\approx \frac{\sin\left(\frac{2}{3}(-\zeta)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{\pi}(-\zeta)^{1/4}}, \\ \frac{\partial \text{Ai}(\zeta)}{\partial \zeta} &\approx \frac{-\cos\left(\frac{2}{3}(-\zeta)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{\pi}}(-\zeta)^{1/4}, \\ \frac{1}{-\zeta_0} \left| \frac{\partial \text{Ai}(\zeta_0)}{\partial \zeta} \right|^2 &\approx \frac{\left| \cos\left(\frac{2}{3}(-\zeta_0)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \right|^2}{\pi\sqrt{-\zeta_0}}, \\ |\text{Ai}(\zeta_0)|^2 + \frac{1}{-\zeta_0} \left| \frac{\partial \text{Ai}(\zeta_0)}{\partial \zeta} \right|^2 &\approx \frac{1}{\pi\sqrt{-\zeta_0}}. \end{aligned}$$

Поглощение энергии в области $-\zeta \gg 0$ имеет вид

$$\rho G_e^{las}(z) \approx 4\sqrt{1-4\alpha z} \sqrt{\frac{-\zeta_0}{-\zeta}} \sin^2\left(\frac{2}{3}(-\zeta)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \mu P_0.$$

Заменяя быстро осциллирующую функцию \sin^2 на $1/2$, получаем асимптотику, совпадающую с полученной в приближении геометрической оптики:

$$\rho G_e^{las}(z) \approx 2\sqrt{\frac{1-4\alpha z}{1-4\alpha z/\cos^2\theta}} \mu P_0.$$

На графике 1.6 приведено интегральное поглощение энергии на единицу площади в единицу времени в безразмерных единицах $E_e^{las}/4\alpha\mu P_0$. Отметим, что волновая оптика может давать заметно большее интегральное поглощение, если на глубину слоя укладывается небольшое целое число длин полуволны.

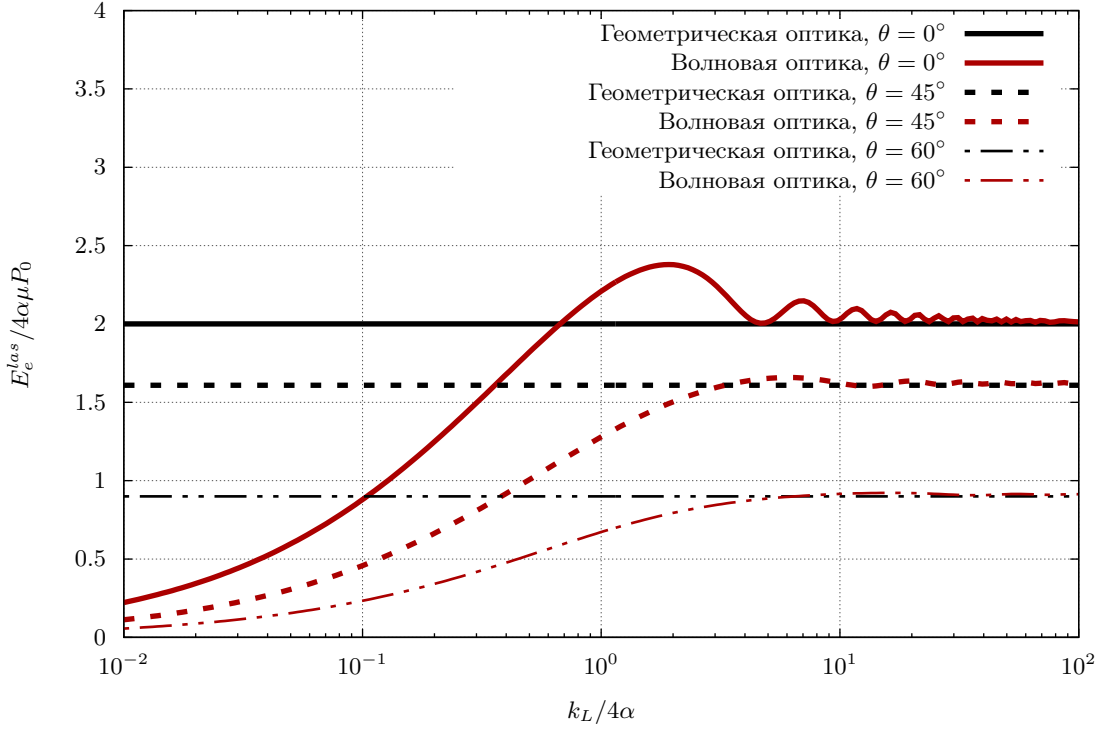


Рис. 1.6. Интегральное поглощение s -поляризованной волны в среде с постоянным градиентом $\text{Re } \varepsilon_\omega$ и малым коэффициентом поглощения.

1.5.5. Переход между различными средами с постоянным градиентом диэлектрической проницаемости

Для построения гибридной модели, совмещающей приближение геометрической оптики с волновым уравнением, рассмотрим модельную задачу, близкую к реальной ситуации. Пусть между средами с диэлектрическими проницаемостями ε_1 и ε_2 есть слой конечной толщины L с постоянным градиентом $\varepsilon_\omega(z)$, то есть

$$\begin{aligned} \varepsilon_\omega(z) &= \varepsilon_1, & \text{при } z < 0, \\ \varepsilon_\omega(z) &= \varepsilon_1 + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{L}z, & \text{при } 0 \leq z \leq L, \\ \varepsilon_\omega(z) &= \varepsilon_2, & \text{при } z > L. \end{aligned}$$

Для s -поляризованной волны замена переменных в уравнении (1.25), сводящая его к уравнению Эйри в области $0 \leq z \leq L$, имеет вид

$$\zeta = - \left(\frac{k_L L}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} \right)^{2/3} \left(\varepsilon_1 - \sin^2 \theta + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{L}z \right),$$

и решением этого уравнения является линейная комбинация функций Эйри $\text{Ai}(\zeta)$ и $\text{Bi}(\zeta)$. Напряжённость поля во всём пространстве имеет вид

$$\begin{aligned} E_y(z) &= C_0 \exp\left(ik_L \sqrt{\varepsilon_1 - \sin^2 \theta} z\right) + \\ &\quad + R \exp\left(-ik_L \sqrt{\varepsilon_1 - \sin^2 \theta} z\right), \quad \text{при } z < 0, \\ E_y(z) &= C_1 \text{Ai}(\zeta) + C_2 \text{Bi}(\zeta), \quad \text{при } 0 \leq z \leq L, \\ E_y(z) &= C_3 \exp\left(ik_L \sqrt{\varepsilon_2 - \sin^2 \theta} (z - L)\right), \quad \text{при } z > L. \end{aligned}$$

Требование непрерывности функции $E_y(z)$ и её производной приводит к системе

$$\begin{aligned} C_1 (\text{Ai}(\zeta_1) + i\alpha_1 \text{Ai}'(\zeta_1)) + C_2 (\text{Bi}(\zeta_1) + i\alpha_1 \text{Bi}'(\zeta_1)) &= 2C_0, \\ C_1 (\text{Ai}(\zeta_2) - i\alpha_2 \text{Ai}'(\zeta_2)) + C_2 (\text{Bi}(\zeta_2) - i\alpha_2 \text{Bi}'(\zeta_2)) &= 0, \end{aligned}$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} \zeta_i &= -\left(\frac{k_L L}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}\right)^{2/3} (\varepsilon_i - \sin^2 \theta), \\ \alpha_i &= \left(\frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{k_L L}\right)^{1/3} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon_i - \sin^2 \theta}}, \\ f'(\zeta_i) &= \left.\frac{df}{d\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_i}, \quad i = 1, 2. \end{aligned}$$

Интегральный коэффициент отражения s -поляризованной волны определяется выражением

$$R_{wave} = \left|\frac{R}{C_0}\right|^2 = \left|\frac{C_1}{C_0} \text{Ai}(\zeta_1) + \frac{C_2}{C_0} \text{Bi}(\zeta_1) - 1\right|^2.$$

Нетрудно видеть, что в случае $\varepsilon_1 = 1$, $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/L = -4\alpha$, $L \rightarrow +\infty$ эта задача сводится к предыдущей. Рассмотрим предельный случай $L \rightarrow 0$. Поскольку $\zeta_i \sim L^{2/3}$, воспользуемся асимптотикой

$$\begin{aligned} \text{Ai}(\zeta) &\approx \frac{3^{-2/3}}{\Gamma(2/3)} - \frac{3^{-1/3}}{\Gamma(1/3)} \zeta = a - b\zeta, \\ \text{Bi}(\zeta) &\approx \sqrt{3} \frac{3^{-2/3}}{\Gamma(2/3)} + \sqrt{3} \frac{3^{-1/3}}{\Gamma(1/3)} \zeta = \sqrt{3}(a + b\zeta), \end{aligned}$$

и, учитывая что $\alpha_i \sim L^{-1/3}$, удержим в уравнениях два старших по $1/L$ члена:

$$C_1 (a - ib\alpha_1) + \sqrt{3}C_2 (a + ib\alpha_1) \approx 2C_0,$$

$$C_1 (a + ib\alpha_2) + \sqrt{3}C_2 (a - ib\alpha_2) \approx 0.$$

Отсюда

$$C_2\sqrt{3} = C_1 \frac{ib\alpha_2 + a}{ib\alpha_2 - a} \approx C_1 \left(1 - i \frac{2a}{b\alpha_2}\right).$$

и

$$\begin{aligned} 2C_0 &\approx C_1 (a - ib\alpha_1) + C_1 \left(1 - i \frac{2a}{b\alpha_2}\right) (a + ib\alpha_1) \approx \\ &\approx C_1 \left(a - ib\alpha_1 + a + ib\alpha_1 + 2a \frac{\alpha_1}{\alpha_2}\right) = 2aC_1 \left(1 + \sqrt{\frac{\varepsilon_2 - \sin^2 \theta}{\varepsilon_1 - \sin^2 \theta}}\right). \end{aligned}$$

В свою очередь,

$$C_0 + R = C_1 \text{Ai}(\zeta_1) + C_2 \text{Bi}(\zeta_1) \approx 2aC_1$$

и

$$R = C_0 \frac{\sqrt{\varepsilon_1 - \sin^2 \theta} - \sqrt{\varepsilon_2 - \sin^2 \theta}}{\sqrt{\varepsilon_1 - \sin^2 \theta} + \sqrt{\varepsilon_2 - \sin^2 \theta}}.$$

Для амплитуды прошедшей волны выполняется соотношение

$$C_3 = C_1 \text{Ai}(\zeta_2) + C_2 \text{Bi}(\zeta_2) \approx 2aC_1 = C_0 + R$$

и, следовательно,

$$ik\sqrt{\varepsilon_2 - \sin^2 \theta} C_3 = ik\sqrt{\varepsilon_1 - \sin^2 \theta} (C_0 - R).$$

Как и ожидалось, на разрыве диэлектрической проницаемости в s -поляризованной волне напряжённость поля E_y и её производная $\frac{dE_y}{dz}$ остаются непрерывны. Рассмотрим однородную плоскую волну, удовлетворяющую уравнениям (1.26), распространяющуюся в среде с диэлектрической проницаемостью ε_1 . Поскольку, согласно (1.26), $E_y \sim \exp(ik_L \sin \theta x)$, она распространяется под углом ϑ , определяемом соотношением $\sin \theta = \sqrt{\varepsilon_1} \sin \vartheta$. Тогда при отражении её от

границы со средой с диэлектрической проницаемостью ε_2 верны соотношения Френеля [45]:

$$R = C_0 \frac{\sqrt{\varepsilon_1} \cos \vartheta - \sqrt{\varepsilon_2 - \varepsilon_1 \sin^2 \vartheta}}{\sqrt{\varepsilon_1} \cos \vartheta + \sqrt{\varepsilon_2 - \varepsilon_1 \sin^2 \vartheta}}.$$

Константа C_0 связана с I_0 — интенсивностью падающей волны в точке $z = 0$ — соотношением

$$C_0 = \sqrt{\frac{8\pi}{c}} I_0,$$

и поглощение в единице объёма, согласно (1.27), имеет вид

$$\rho G_e^{las} = \frac{ck_L}{8\pi} \text{Im} \varepsilon_\omega(z) |C_1 \text{Ai}(\zeta) + C_2 \text{Bi}(\zeta)|^2.$$

Аналогичная замена переменных в уравнении для p -поляризованной волны (1.29) даёт

$$g''(\zeta) - \frac{1}{\zeta - \zeta_0} g'(\zeta) - \zeta g(\zeta) = 0,$$

где $\zeta_0 = \left(\frac{k_L L}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} \right)^{2/3} \sin^2 \theta$ — точка, в которой $\varepsilon_\omega(\zeta)$ обращается в ноль. После замены $f = g \sqrt{\zeta - \zeta_0}$ приходим к уравнению

$$f'' - \left(\zeta + \frac{3}{4(\zeta - \zeta_0)^2} \right) f = 0.$$

В квазиклассическом приближении членом $\frac{3}{4(\zeta - \zeta_0)^2}$ можно пренебречь в сравнении с ζ . Оценим область применимости этого приближения. Примем $|\varepsilon_2| \gg |\varepsilon_1| \sim 1$. Тогда

$$|\zeta - \zeta_0| = \left| - \left(\frac{k_L L}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} \right)^{2/3} \left(\varepsilon_1 + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{L} z \right) \right| \approx (k_L L)^{2/3} |\varepsilon_2|^{1/3},$$

$$|\zeta| \approx \left(\frac{k_L L}{|\varepsilon_2|} \right)^{2/3} \left| \varepsilon_1 - \sin^2 \theta + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{L} z \right| \gg \frac{3}{4(k_L L)^{4/3} |\varepsilon_2|^{2/3}},$$

и критерий применимости квазиклассического приближения имеет вид, аналогичный условию применимости геометрической оптики:

$$(k_L L)^2 |\varepsilon_1 - \sin^2 \theta| \gg 1.$$

Таким образом, квазиклассическое приближение в нашей модели неприменимо, так как мы переходим к уравнению Гельмгольца в области, где это условие нарушается.

Для трассировки лучей в приближении геометрической оптики (1.24) необходимо найти градиент квадрата коэффициента преломления $\nabla \left(\operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon_\omega(z)} \right)^2$, который в этом случае имеет довольно громоздкий вид. На практике оказывается целесообразно использовать градиент действительной части диэлектрической проницаемости $\nabla \operatorname{Re} \varepsilon_\omega(z)$ — такой подход обеспечивает более стабильные численные результаты [29], [31]. В области применимости геометрической оптики, как правило, $\operatorname{Im} \varepsilon_\omega \ll \operatorname{Re} \varepsilon_\omega$, и эти величины эквивалентны.

Рассмотрим типичный случай отражения от поверхности металла: $\varepsilon_1 = 1$, $\operatorname{Re} \varepsilon_2 < 0$, $\operatorname{Im} \varepsilon_2 > 0$. При таком подходе в область $\operatorname{Re} \varepsilon_\omega(z) < 0$ луч попасть не может, и его траектория вычисляется аналогично предыдущему случаю. Отличие при вычислении поглощённой энергии заключается в том, что коэффициент поглощения не является константой, а поглощение энергии может быть достаточно велико. Положим в момент вхождения луча в слой $0 < z$ значение «времени на луче» $\tau = 0$. Тогда траектория луча определяется формулами

$$\begin{aligned} x(\tau) &= \sin \theta \cdot \tau, \\ z(\tau) &= -\frac{\operatorname{Re}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{4L} \tau^2 + \cos \theta \cdot \tau, \end{aligned}$$

а в момент выхода из слоя

$$\tau = \tau_{out} = \frac{4L \cos \theta}{\operatorname{Re}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}.$$

В соответствии с уравнениями (1.24) уменьшение энергии на луче в слое $0 < z < L$ определяется уравнением

$$\frac{dP}{d\tau} = -P \cdot k_L \operatorname{Im} \varepsilon_\omega(z) = -P \cdot k_L \operatorname{Im} \varepsilon_2 \frac{z(\tau)}{L},$$

а интегральный коэффициент отражения

$$\begin{aligned} R_{GO} &= \frac{P(\tau_{out})}{P(0)} = \exp \left(-k_L \operatorname{Im} \varepsilon_2 \int_0^{\tau_{out}} \frac{z(\tau)}{L} d\tau \right) = \exp \left(-k_L \operatorname{Im} \varepsilon_2 \frac{\tau_{out}^2 \cos \theta}{6L} \right) = \\ &= \exp \left(-\frac{8k_L \cos^3 \theta \operatorname{Im} \varepsilon_2}{3 \operatorname{Re}^2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} L \right). \end{aligned}$$

Таким образом, в приближении геометрической оптики R_{GO} стремится к единице при $L \rightarrow 0$.

Исследуем влияние толщины переходного слоя L на результаты в конкретном случае: наклонное падение s -поляризованного пучка с длиной волны $\lambda = 1.064$ мкм из вакуума ($\varepsilon_1 = 1$) на поверхность металла с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_2 = (4.0 + 8.4 \cdot i)^2$, соответствующей экспериментальному значению диэлектрической проницаемости олова для данной длины волны [78]. На рис. 1.7 изображена зависимость коэффициента отражения от толщины переходного слоя для различных значений угла падения. Как и следовало из аналитического рассмотрения предельного перехода, при устремлении L к нулю R_{wave} стремится к значению, соответствующему соотношениям Френеля, а R_{GO} стремится к единице. Отметим, что выход на формулы Френеля происходит лишь на весьма малых значениях ширины переходного слоя: так, для перпендикулярного падения это происходит на значениях $L/\lambda \lesssim 2 \cdot 10^{-2}$. Геометрическая оптика в данном случае ни в каком диапазоне значений L не выходит на результаты волновой, из чего следует, что моделирование мишени с «холодного старта» в рамках исключительно геометрической оптики некорректно.

Рассмотрим результаты, которые даёт на данной модельной задаче наша «гибридная» модель. Для начала следует определить критерий перехода между моделями. В первых работах по этой методике ([23], [44]) рассматривался простейший критерий применимости геометрической оптики

$$n_e < \alpha n_c,$$

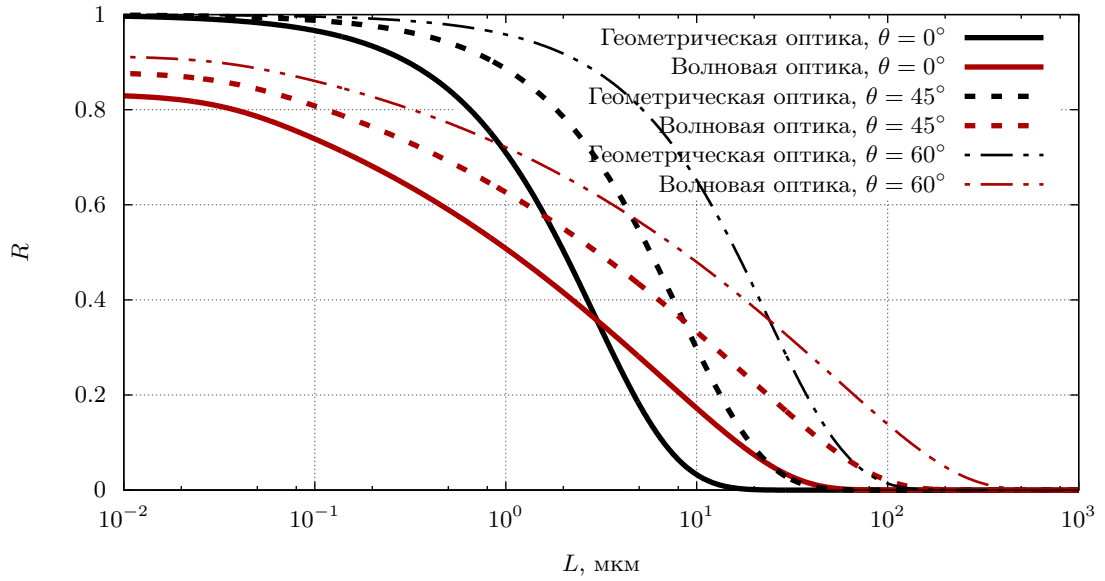


Рис. 1.7. Интегральный коэффициент отражения s -поляризованной волны длиной 1.064 мкм в зависимости от ширины перехода L между вакуумом и металлом.

или, в терминах диэлектрической проницаемости,

$$1 - \operatorname{Re} \varepsilon_\omega > \alpha,$$

где $\alpha \sim 0.5$ — численный коэффициент. Такой подход удовлетворительно работает на сравнительно грубых сетках, не разрешающих переход металл-вакуум. Поскольку мы рассматриваем аналитическую задачу не привязываясь к конкретной разностной сетке, следует использовать более точный критерий, предложенный в [79]:

$$1 - \operatorname{Re} \varepsilon_\omega + \beta \lambda |\nabla \operatorname{Re} \varepsilon_\omega| > \alpha.$$

Результаты для $\beta = 1$, $\alpha = 0.8$ представлены на рис. 1.8. Как видно из этого графика, гибридная модель адекватно описывает выход на предельный случай разрывного коэффициента преломления.

1.6. Выводы к первой главе

В первой главе сформулирована физико-математическая модель, описывающая процессы, протекающие в лазерной плазме. В основу модели положено

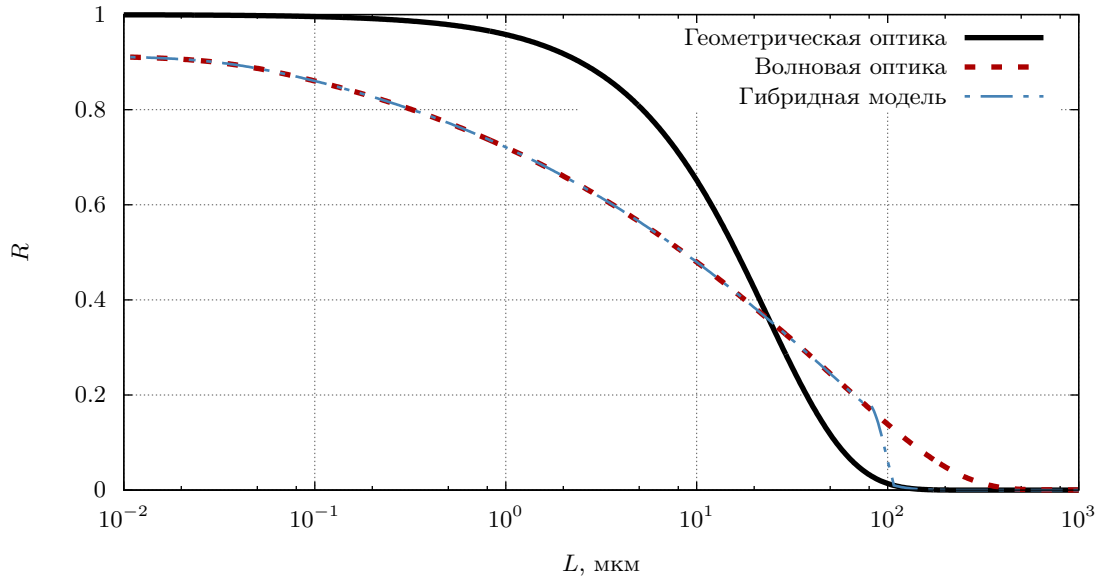


Рис. 1.8. Зависимость интегрального коэффициента отражения от ширины перехода между вакуумом и металлом для падающей под углом 60° s -поляризованной волны длиной 1.064 мкм.

приближение одножидкостной двухтемпературной квазинейтральной плазмы. Модель учитывает как отклонение ионного состава плазмы от равновесного, так и влияние излучения на термодинамические и оптические характеристики плазмы. Рассмотрен вопрос о границах применимости приближения эффективного времени релаксации средней ионизации, показано, что при относительно малом отклонении среднего заряда иона от равновесного значения ($Z_0 - Z_0^S < 5$), это приближение адекватно описывает динамику ионизации.

Построена гибридная модель переноса лазерного излучения, совмещающая геометрическую оптику и одномерное волновое уравнение Гельмгольца. Исследовано поведение данной модели на различных простых модельных случаях. Показано, что она учитывает рефракцию и обеспечивает корректный выход на формулы Френеля для разрывной диэлектрической проницаемости, что позволяет проводить моделирование с «холодного старта».

Глава 2

Численные методы

В настоящей главе описана дискретизация физико-математической модели, построенной выше. Исследованы свойства полученной системы конечно-разностных уравнений газодинамики, показана её полная консервативность. Отдельно рассмотрен вопрос о методике пересчёта величин на скорректированную сетку [33], для которой в линейном приближении получено условие устойчивости. Также описаны методы расчёта переноса теплового [24] и лазерного [23] излучения в плазме.

2.1. Конечно-разностная схема для уравнений газодинамики

Уравнения газодинамики (1.1), (1.3) и (1.5) решаются методом конечных разностей в лагранжево-эйлеровых переменных. Используется двухэтапная схема [80]: на первом этапе движение вещества рассчитывается в лагранжевых переменных, при этом разностная сетка смещается вслед за веществом. На втором этапе осуществляется перерасчёт всех величин на другую сетку, слабо отличающуюся от имеющейся. В простейшем варианте («эйлеров расчёт») сетка просто возвращается в положение, которое она имела до осуществления первого этапа. Общая схема алгоритма представлена на рис. 2.1.

Для аппроксимации первых производных по времени, входящих в рассматриваемые уравнения, используется двухслойная схема. Вся временная ось делится на конечные отрезки $[t_n, t_{n+1}]$, где n — номер шага по времени, и на любом шаге величины с n -ого слоя считаются известными, а со слоя $n + 1$ — вычисляются путём решения дискретизованной системы уравнений. Для производной по времени используется разностная аппроксимация вида $\frac{df}{dt} = \frac{\hat{f} - f}{\Delta t}$, где f

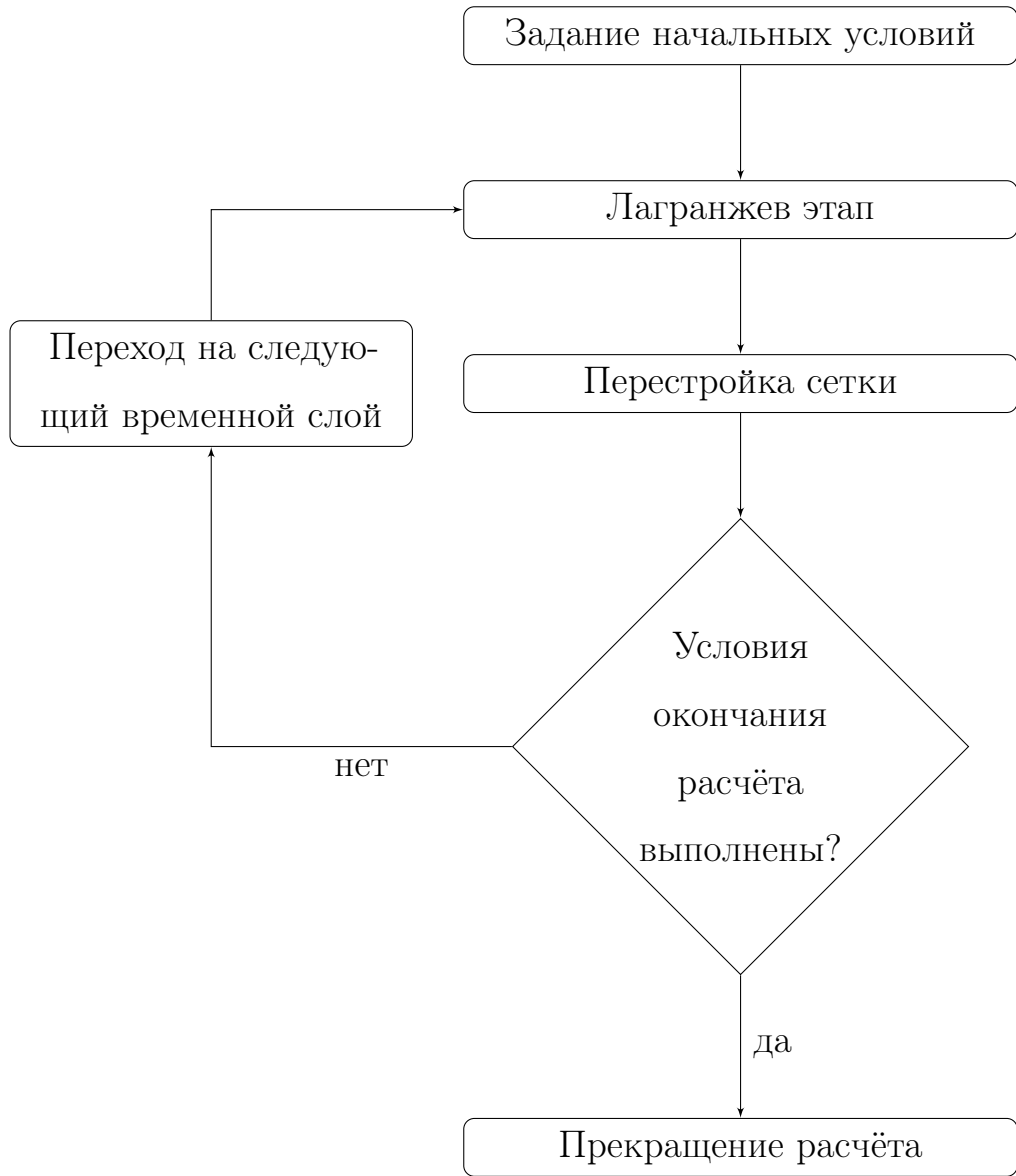


Рис. 2.1. Блок-схема алгоритма.

— значение переменной на слое n , \hat{f} — значение переменной на слое $n + 1$, а $\Delta t = t_{n+1} - t_n$. Далее также используются обозначения [81]: $f^{(\alpha)} = (1 - \alpha)f + \alpha\hat{f}$ ($0 \leq \alpha \leq 1$). В случае производных соответствующие обозначения пишутся только для числителя, то есть запись $\frac{\partial \hat{f}}{\partial g}$ следует понимать как $\left(\frac{\partial f}{\partial g}\right)^{(1)} = \frac{\partial f}{\partial g} \Big|_{t=t_{n+1}}$.

Для дискретизации по пространству вводится структурированная сетка D , состоящая в общем случае из шестигранных ячеек, индексируемых $(m, l, n) \in D$, $m = \overline{1, N_m}$, $l = \overline{1, N_l}$, $n = \overline{1, N_n}$. Для указания граничных ячеек далее используется обозначение $(m, l, n) \in \partial D$, для ячеек внутренней области —

$(m, l, n) \in \bar{D}$. Каждая ячейка внутренней области смежна с шестью другими, один из индексов которых отличается на единицу от соответствующего индекса рассматриваемой ячейки. Узлы разностной сетки индексируются $(i, j, k) \in D$, где индексы пробегает значения $i = \overline{1, N_i}$, $j = \overline{1, N_j}$, $k = \overline{1, N_k}$. Каждая ячейка инцидентна восьми узлам, являющимся её вершинами, а каждый узел (за исключением граничных) инцидентен восьми ячейкам.

Для численного решения системы уравнений (1.1), (1.3), (1.5) на лагранжевом этапе используется неявная полностью консервативная конечно-разностная схема, описанная в [26], [27], [28] и являющаяся трёхмерным обобщением схемы, реализованной в коде РАЗРЯД [22]. Она имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{x}_{ijk} - x_{ijk}}{\Delta t} &= u_{ijk}^{(0.5)}, \\
\frac{\hat{y}_{ijk} - y_{ijk}}{\Delta t} &= w_{ijk}^{(0.5)}, \\
\frac{\hat{z}_{ijk} - z_{ijk}}{\Delta t} &= v_{ijk}^{(0.5)}, \\
\hat{M}_{mln} &= M_{mln}, \\
\hat{M}_{ijk}^* \frac{\hat{u}_{ijk} - u_{ijk}}{\Delta t} &= \sum_{mln \in \mathbb{I}_2(ijk)} \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial x_{ijk}} \hat{P}_{mln}, \\
\hat{M}_{ijk}^* \frac{\hat{w}_{ijk} - w_{ijk}}{\Delta t} &= \sum_{mln \in \mathbb{I}_2(ijk)} \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial y_{ijk}} \hat{P}_{mln}, \\
\hat{M}_{ijk}^* \frac{\hat{v}_{ijk} - v_{ijk}}{\Delta t} &= \sum_{mln \in \mathbb{I}_2(ijk)} \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial z_{ijk}} \hat{P}_{mln}, \\
\hat{P}_{mln} &= (\hat{P}_e)_{mln} + (\hat{P}_i)_{mln} + \hat{q}_{mln}, \\
\frac{(\hat{\varepsilon}_e)_{mln} - (\varepsilon_e)_{mln}}{\Delta t} &= - \frac{(\hat{P}_e)_{mln}}{\hat{M}_{mln}} \sum_{ijk \in \mathbb{I}_1(mln)} \mathbf{v}_{ijk}^{(0.5)} \cdot \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial \mathbf{r}_{ijk}} + (\hat{G}_e^{rad})_{mln} + \\
&\quad + (\hat{G}_e^{las})_{mln} + (\hat{Q}_{ei})_{mln} + \frac{1}{\hat{M}_{mln}} \sum_{g \in \mathbb{I}_3(mln)} (\hat{\mathbf{W}}_e)_g \cdot (\pm \hat{\mathbf{S}})_g, \\
\frac{(\hat{\varepsilon}_i)_{mln} - (\varepsilon_i)_{mln}}{\Delta t} &= - \frac{(\hat{P}_i)_{mln} + (\hat{q})_{mln}}{\hat{M}_{mln}} \sum_{ijk \in \mathbb{I}_1(mln)} \mathbf{v}_{ijk}^{(0.5)} \cdot \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial \mathbf{r}_{ijk}} -
\end{aligned} \tag{2.1}$$

$$- (\hat{Q}_{ei})_{mln} + \frac{1}{\hat{M}_{mln}} \sum_{g \in \mathbb{Ш}_3(mln)} (\hat{\mathbf{W}}_i)_g \cdot (\pm \hat{\mathbf{S}})_g.$$

Здесь в первых четырёх уравнениях индексы пробегают по всей сетке, а в остальных — только по внутренним ячейкам или узлам, поскольку значения физических величин в граничных ячейках или узлах определяются из соответствующих граничных условий к уравнениям (1.1), (1.3) и (1.5). Знак \pm в уравнениях для энергии меняет значение в зависимости от того, является ли вектор $\hat{\mathbf{S}}_g$, определённый на грани g , внешней или внутренней нормалью для ячейки (m, l, n) . Для внешней нормали берётся знак « $-$ », для внутренней — « $+$ ».

Обозначение $ijk \in \mathbb{Ш}_1(mln)$ определяет узлы (i, j, k) , инцидентные ячейке (m, l, n) . Обозначение $mln \in \mathbb{Ш}_2(ijk)$ определяет ячейки (m, l, n) , инцидентные узлу (i, j, k) . Обозначение $g \in \mathbb{Ш}_3(mln)$ определяет грани g , инцидентные ячейке (m, l, n) . Обозначение $mln \in \mathbb{Ш}_4(g)$ определяет ячейки, инцидентные грани g .

В уравнение (2.1) кроме физических величин (скорости, плотности, потоков тепла, источников (стоков) энергии), определённых в главе 1, входят также и величины, определяемые дискретизацией по пространству и времени: $x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk}$ — координаты узла сетки (i, j, k) , V_{mln} — объём ячейки (m, l, n) , $M_{mln} = \rho_{mln} V_{mln}$ — масса ячейки (m, l, n) , $M_{ijk}^* = \frac{1}{8} \sum_{mln \in \mathbb{Ш}_2(ijk)} M_{mln}$ — масса узла (i, j, k) , \mathbf{S}_g — нормаль к грани g , равная по модулю её площади и определяемая по формуле:

$$\begin{aligned} S_g^x &= \frac{1}{2} [(y_1 - y_3)(z_2 - z_4) + (y_2 - y_4)(z_3 - z_1)], \\ S_g^y &= \frac{1}{2} [(z_1 - z_3)(x_2 - x_4) + (z_2 - z_4)(x_3 - x_1)], \\ S_g^z &= \frac{1}{2} [(x_1 - x_3)(y_2 - y_4) + (x_2 - x_4)(y_3 - y_1)]. \end{aligned}$$

Эта формула эквивалентна разбиению грани на четыре треугольника с вершинами на ребрах и в центре грани, а индексы 1, 2, 3, 4 определяют узлы, инцидентные рассматриваемой грани (см. рис. 2.2). Их порядок выбирается таким

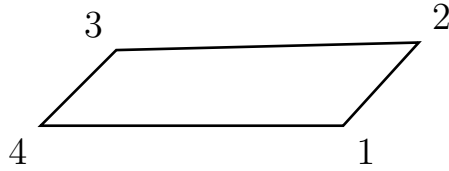


Рис. 2.2. Нумерация узлов грани.

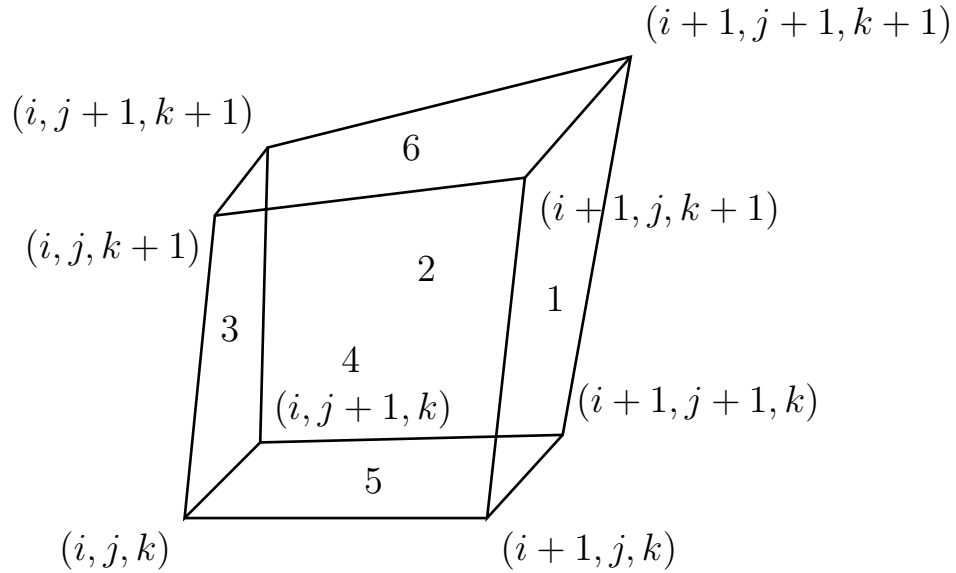


Рис. 2.3. Нумерация граней ячейки.

образом, чтобы нормаль \mathbf{S}_g смотрела в направлении возрастания того индекса, в плоскости которого грань g лежит. Так, если рассматривать ячейку, изображённую на рис. 2.3, то \mathbf{S}_1 и \mathbf{S}_3 будут направлены в направлении возрастания индекса i , \mathbf{S}_2 и \mathbf{S}_4 будут направлены в направлении возрастания индекса j , а \mathbf{S}_5 и \mathbf{S}_6 будут направлены в направлении возрастания индекса k . Таким образом, для граней 1, 2 и 6 вектор \mathbf{S}_g будет являться вектором внешней нормали, а для граней 3, 4 и 5 — вектором внутренней нормали.

Объём ячейки (m, l, n) определяется как сумма объёмов 24 тетраэдров, каждый из которых имеет две вершины на ребре, одну в центре грани и одну в центре ячейки. В использованных на рис. 2.3 обозначениях это можно записать как

$$V_{mln} = \frac{1}{6} ((\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) \cdot (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_3) + (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4) \cdot (\mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_4) + (\mathbf{r}_6 - \mathbf{r}_5) \cdot (\mathbf{S}_5 + \mathbf{S}_6)),$$

где \mathbf{r}_g — радиус-вектор центра грани g .

Поток тепла от ячейки 2 в соседствующую с ней по грани ячейку 1 определяется по формуле:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{W}}_e \cdot (\pm \hat{\mathbf{S}}) &= -\frac{(\hat{\kappa}_e)_1 + (\hat{\kappa}_e)_2}{2} \frac{(\hat{T}_e)_1 - (\hat{T}_e)_2}{|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|} |\hat{\mathbf{S}}|, \\ \hat{\mathbf{W}}_i \cdot (\pm \hat{\mathbf{S}}) &= -\frac{(\hat{\kappa}_i)_1 + (\hat{\kappa}_i)_2}{2} \frac{(\hat{T}_i)_1 - (\hat{T}_i)_2}{|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|} |\hat{\mathbf{S}}|,\end{aligned}$$

где \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 — радиус-векторы центров ячеек 1 и 2. Нетрудно заметить, что величина потока тепла из ячейки 1 в ячейку 2 имеет то же значение, взятое с обратным знаком.

Покажем полную консервативность системы (2.1). Для этого введём сеточные функционалы массы

$$m_{tot} = \sum_{mln \in D} M_{mln},$$

кинетической энергии

$$E_{kin} = \sum_{ijk \in D} M_{ijk}^* \frac{\mathbf{v}_{ijk}^2}{2},$$

внутренней энергии

$$E_{int} = \sum_{mln \in D} M_{mln} ((\varepsilon_e)_{mln} + (\varepsilon_i)_{mln})$$

и импульса

$$\mathbf{p} = \sum_{ijk \in D} M_{ijk}^* \mathbf{v}_{ijk}.$$

В соответствии с уравнениями (2.1),

$$\hat{m}_{tot} - m_{tot} = \sum_{mln \in D} (\hat{M}_{mln} - M_{mln}) = 0,$$

то есть полная масса системы на лагранжевом этапе не меняется.

Положим массы граничных ячеек (а, следовательно, и узлов) равными

нулю, а их геометрию — вырожденной, то есть

$$\mathbf{r}_{1,j,k} = \mathbf{r}_{2,j,k},$$

$$\mathbf{r}_{i,1,k} = \mathbf{r}_{i,2,k},$$

$$\mathbf{r}_{i,j,1} = \mathbf{r}_{i,j,2},$$

$$\mathbf{r}_{N_i,j,k} = \mathbf{r}_{(N_i-1),j,k},$$

$$\mathbf{r}_{i,N_j,k} = \mathbf{r}_{i,(N_j-1),k},$$

$$\mathbf{r}_{i,j,N_k} = \mathbf{r}_{i,j,(N_k-1)}.$$

Найдём изменение полного импульса. Рассмотрим одну его компоненту:

$$\begin{aligned} \hat{p}_x - p_x &= \sum_{ijk \in \bar{D}} M_{ijk}^* (\hat{u}_{ijk} - u_{ijk}) = \Delta t \sum_{ijk \in \bar{D}} \sum_{mln \in \text{III}_2(ijk)} \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial x_{ijk}} \hat{P}_{mln} = \\ &= \Delta t \sum_{mln \in \bar{D}} \hat{P}_{mln} \sum_{ijk \in \text{III}_1(mln)} \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial x_{ijk}} + \Delta t \sum_{mln \in \partial D} \hat{P}_{mln} \sum_{ijk \in \text{III}_1(mln) \setminus \partial D} \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial x_{ijk}} = \\ &= -\Delta t \sum_{mln \in \partial D} \hat{P}_{mln} \sum_{ijk \in \text{III}_1(mln) \setminus \partial D} \left(-\frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial x_{ijk}} \right). \end{aligned}$$

Здесь использовано тождество

$$\sum_{ijk \in \text{III}_1(mln)} \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial x_{ijk}} = 0,$$

вытекающее из постоянства объёма ячейки при смещении всех её вершин на один вектор. Величина $\sum_{ijk \in \text{III}_1(mln) \setminus \partial D} \left(-\frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial x_{ijk}} \right)$ в силу геометрии граничных ячеек равна x -компоненте внутренней нормали грани между граничной ячейкой и областью \bar{D} , то есть внешней нормали области \bar{D} или области D . Таким образом, выполняется разностный аналог интегрального закона сохранения импульса

$$\frac{d}{dt} \int_G \rho \mathbf{v} dV = - \int_{\partial G} P d\mathbf{S},$$

где G — физическая область, ∂G — её граница, а \mathbf{S} — вектор внешней нормали области G .

Осталось показать выполнение закона сохранения энергии. Рассмотрим изменение внутренней энергий плазмы на шаге интегрирования по времени:

$$\begin{aligned}
\hat{E}_{int} - E_{int} &= \sum_{mln \in \bar{D}} M_{mln} ((\hat{\varepsilon}_e)_{mln} + (\hat{\varepsilon}_i)_{mln} - (\varepsilon_e)_{mln} - (\varepsilon_i)_{mln}) = \\
&= \Delta t \sum_{mln \in \bar{D}} M_{mln} \left((\hat{G}_e^{rad})_{mln} + (\hat{G}_e^{las})_{mln} \right) + \\
&+ \Delta t \sum_{mln \in \bar{D}} \sum_{g \in \text{III}_3(mln)} \left((\hat{\mathbf{W}}_i)_g + (\hat{\mathbf{W}}_e)_g \right) \cdot (\pm \hat{\mathbf{S}})_g - \\
&- \Delta t \sum_{mln \in \bar{D}} \hat{P}_{mln} \sum_{ijk \in \text{III}_1(mln)} \mathbf{v}_{ijk}^{(0.5)} \cdot \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial \mathbf{r}_{ijk}} = \\
&= \Delta t \sum_{mln \in \bar{D}} M_{mln} \left((\hat{G}_e^{rad})_{mln} + (\hat{G}_e^{las})_{mln} \right) + \\
&+ \Delta t \sum_{g \in \partial \bar{D}} \left((\hat{\mathbf{W}}_i)_g + (\hat{\mathbf{W}}_e)_g \right) \cdot (\pm \hat{\mathbf{S}})_g - \\
&- \Delta t \sum_{mln \in \bar{D}} \hat{P}_{mln} \sum_{ijk \in \text{III}_1(mln)} \mathbf{v}_{ijk}^{(0.5)} \cdot \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial \mathbf{r}_{ijk}}.
\end{aligned}$$

Первый член в правой части отвечает интегральному изменению энергии системы за счёт нагрева лазером и потерь на излучение. Во втором члене мы учли, что в соседние ячейки потоковые члены входят с разными знаками, и из всей суммы остаётся только поток через граничные для области \bar{D} грани. Из рассмотрения изменения кинетической энергии видно, что последний член отвечает работе сил газодинамического давления:

$$\begin{aligned}
\hat{E}_{kin} - E_{kin} &= \sum_{ijk \in \bar{D}} M_{ijk}^* \frac{\hat{\mathbf{v}}_{ijk}^2 - \mathbf{v}_{ijk}^2}{2} = \sum_{ijk \in \bar{D}} M_{ijk}^* (\hat{\mathbf{v}}_{ijk} - \mathbf{v}_{ijk}) \mathbf{v}_{ijk}^{(0.5)} = \\
&= \sum_{ijk \in \bar{D}} (\hat{\mathbf{r}}_{ijk} - \mathbf{r}_{ijk}) \cdot \sum_{mln \in \text{III}_2(ijk)} \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial \mathbf{r}_{ijk}} \hat{P}_{mln} = \\
&= \Delta t \sum_{mln \in \bar{D}} \hat{P}_{mln} \sum_{ijk \in \text{III}_1(mln)} \mathbf{v}_{ijk}^{(0.5)} \cdot \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial \mathbf{r}_{ijk}} + \\
&+ \Delta t \sum_{mln \in \partial D} \hat{P}_{mln} \sum_{ijk \in \text{III}_1(mln) \setminus \partial D} \mathbf{v}_{ijk}^{(0.5)} \cdot \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial \mathbf{r}_{ijk}}.
\end{aligned}$$

Таким образом изменение полной энергии обусловлено только физическими процессами, а именно: нагревом системы лазером, охлаждением её из-за испускания собственного излучения, потоками тепла через её границу и работой сил внешнего давления. Фиктивные члены в используемой конечно-разностной схеме отсутствуют.

2.2. Методика пересчёта величин на скорректированную сетку

Разностная аппроксимация пространственных производных, использованная в уравнениях (2.1), налагает на ячейки сетки условие выпуклости [82]. В задачах моделирования лазерной плазмы, когда имеется быстро разлетающийся факел, это условие неизбежно нарушается: ячейки «ломаются», что приводит к дроблению шага и остановке расчёта. Поэтому для данного класса задач приходится производить корректировку сетки, то есть выбор нового положения узлов $\tilde{\mathbf{r}}$ и перерасчёт всех величин на новую сетку.

В качестве иллюстрации здесь можно привести сетку, возникающую в тестовом расчёте разлёта газовой сферы с гауссовым начальным распределением плотности и температуры. В отсутствие перестройки (рис. 2.4, $\tilde{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}$), то есть при лагранжевом расчёте, проблемы с качеством сетки возникают уже в 3 нс. При полном возвращении сетки на изначальную позицию (рис. 2.5, $\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$, эйлеров расчёт), возникает заметная численная диффузия, на рисунке она проявляется в увеличении области перехода между плотным веществом и вакуумом, отображённой зелёным цветом. В «смешанном» расчёте присутствуют оба эти недостатка, но регулируя алгоритм перестройки сетки, можно в достаточной степени уменьшить численную диффузию на качественной сетке (рис. 2.6) [80].

Независимо от конкретной методики перестройки сетки, перерасчёт физических величин на новую сетку происходит следующим образом [33]. Для перерасчёта массы, числа свободных электронов, внутренних энергий электро-

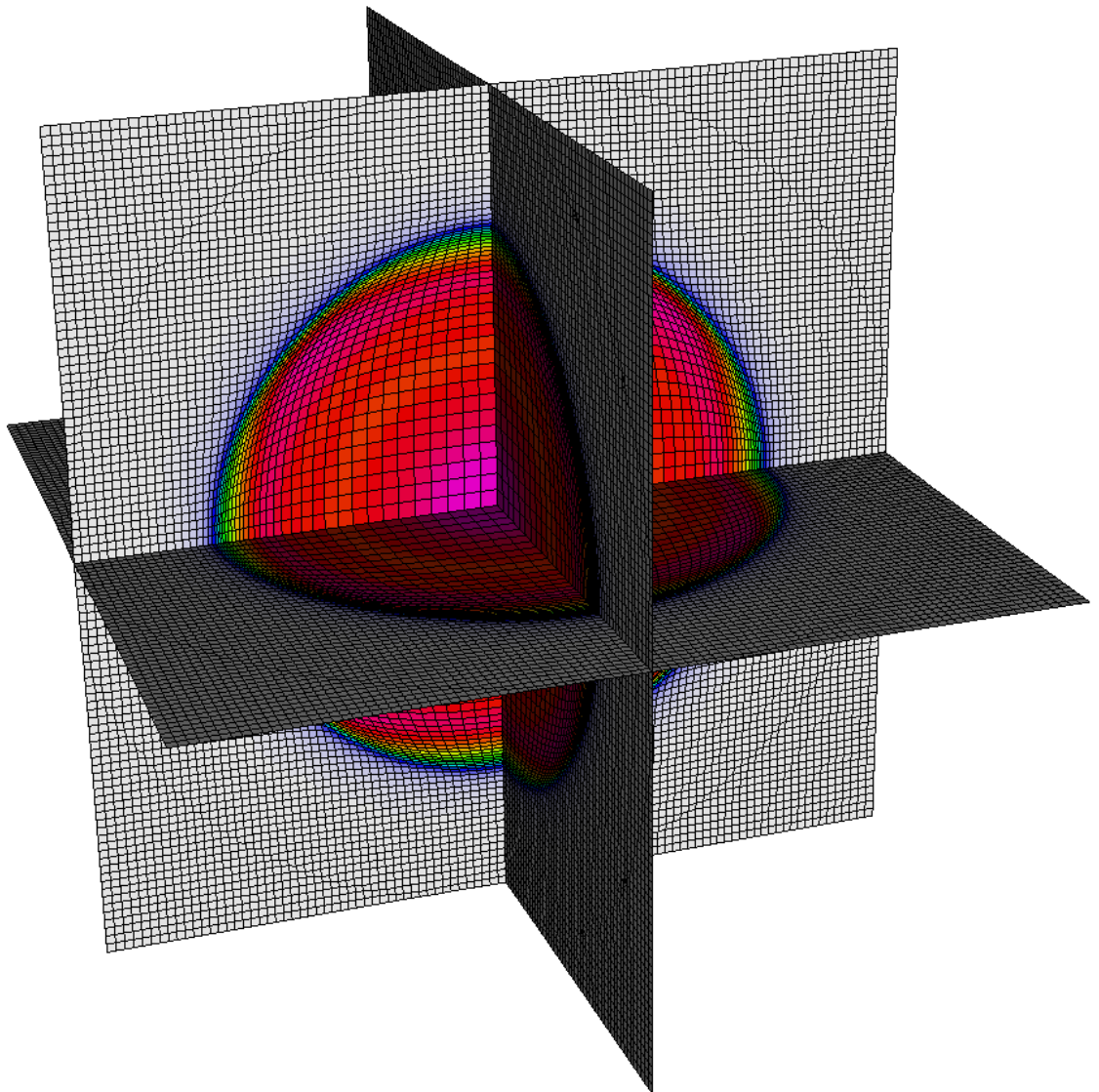


Рис. 2.4. Распределение плотности и сетка в расчёте разлёта газовой сферы на момент 3 нс при лагранжевом расчёте.

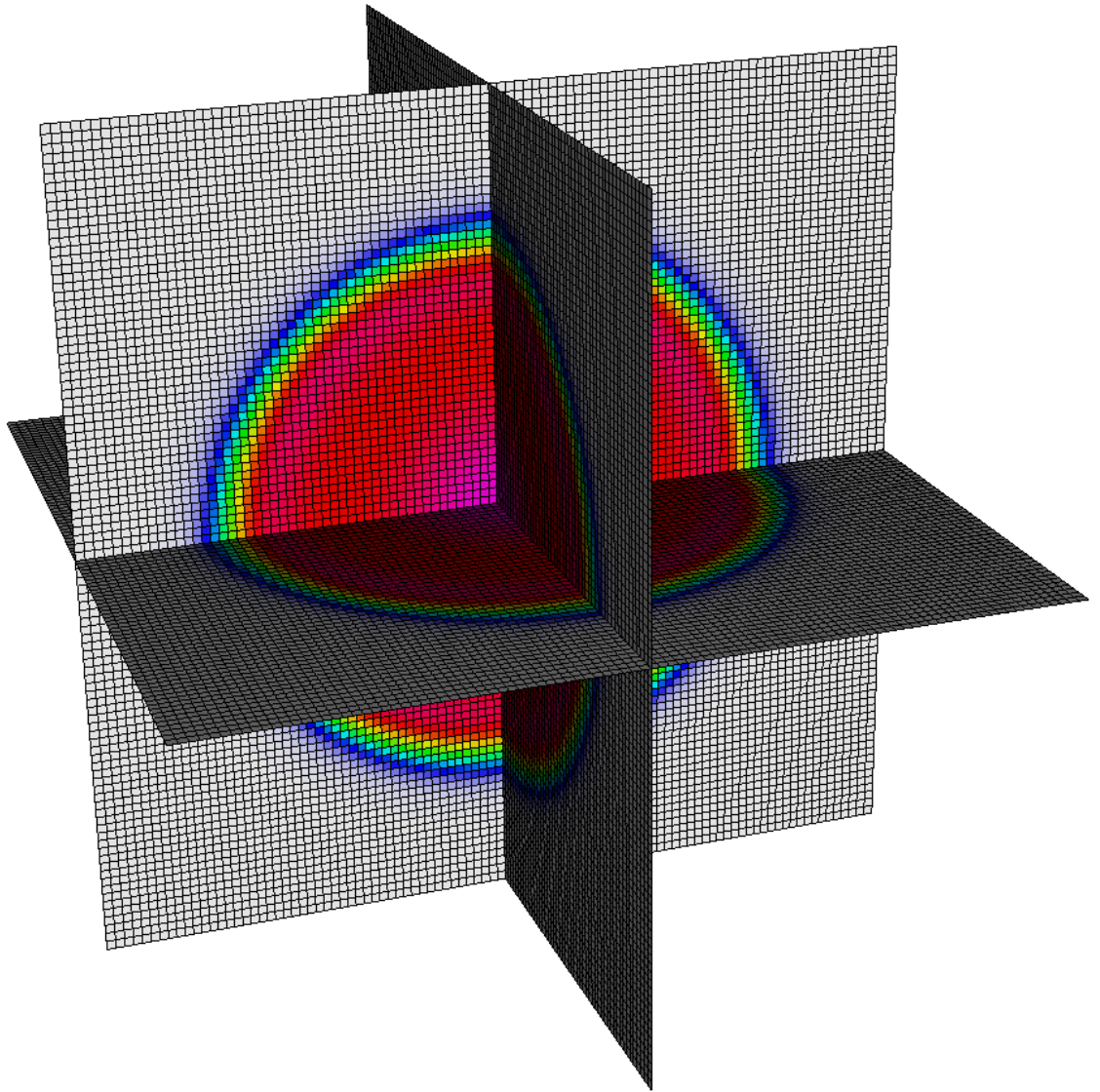


Рис. 2.5. Распределение плотности и сетка в расчёте разлёта газовой сферы на момент 3 нс при эйлеровом расчёте.

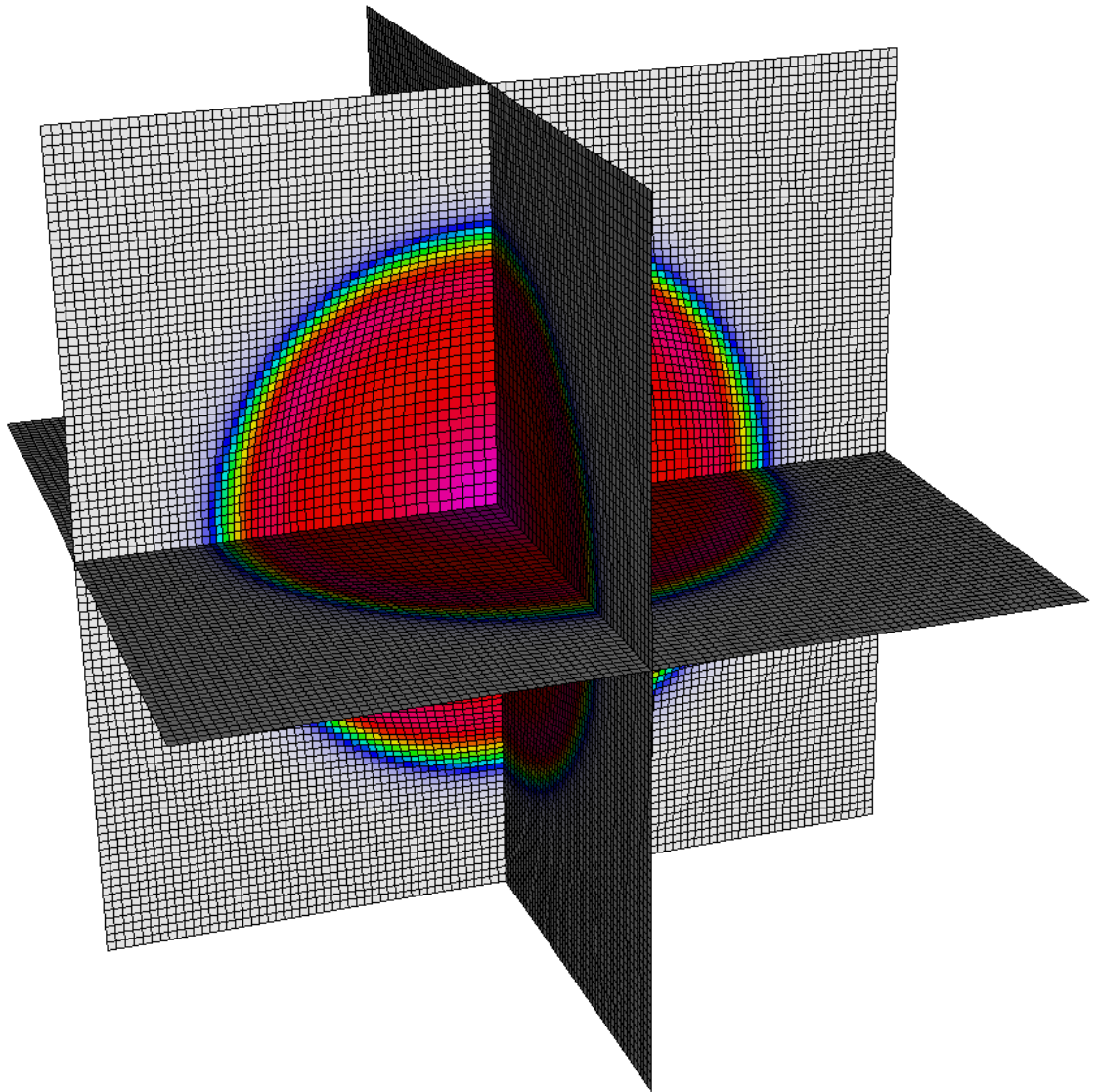


Рис. 2.6. Распределение плотности и сетка в расчёте разлёта газовой сферы на момент 3 нс при расчёте с промежуточной перестройкой сетки.

нов и ионов, определённых в ячейках, используется потоковая схема первого порядка с аппроксимацией против потока. Рассмотрим грань g , изображённую на рис. 2.7. В процессе перестройки сетки нам необходимо сместить все её узлы из положения $\hat{\mathbf{r}}$ в положение $\tilde{\mathbf{r}}$. Мы рассчитываем на каждой грани перетоки по формулам

$$\begin{aligned} F_g^M &= \hat{\rho}_* \frac{1}{4} \left| \sum_i (\tilde{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_i) \hat{\mathbf{S}}_g \right|, \\ F_g^e &= (\hat{Z}_0)_* \hat{\rho}_* \frac{1}{4} \left| \sum_i (\tilde{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_i) \hat{\mathbf{S}}_g \right|, \\ F_g^{E_e} &= (\hat{\varepsilon}_e)_* \hat{\rho}_* \frac{1}{4} \left| \sum_i (\tilde{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_i) \hat{\mathbf{S}}_g \right|, \\ F_g^{E_i} &= (\hat{\varepsilon}_i)_* \hat{\rho}_* \frac{1}{4} \left| \sum_i (\tilde{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_i) \hat{\mathbf{S}}_g \right|, \end{aligned}$$

где сумма берётся по всем вершинам рассматриваемой грани. Величины, отмеченные индексом $*$, берутся из «донорной» ячейки [83], то есть из ячейки, объём которой при перестройке грани g уменьшается, что обеспечивает транспортность используемой схемы [84]. Например, для грани, изображённой на рис. 2.7, поток направлен из ячейки 1 в ячейку 2, а значения плотности, ионизации и удельной энергии в формулах (2.2) берутся из ячейки 1.

После расчёта перетоков, значения $\tilde{\rho}$, \tilde{Z}_0 , $\tilde{\varepsilon}_e$ и $\tilde{\varepsilon}_i$ пересчитываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho} &= \frac{1}{\tilde{V}} \left(\hat{\rho} \hat{V} + \sum_{g \in \mathbb{I}_3} \pm F_g^M \right), \\ \tilde{Z}_0 &= \frac{1}{\tilde{\rho} \tilde{V}} \left(\hat{\rho} \hat{V} \hat{Z}_0 + \sum_{g \in \mathbb{I}_3} \pm F_g^e \right), \\ \tilde{\varepsilon}_e &= \frac{1}{\tilde{\rho} \tilde{V}} \left(\hat{\rho} \hat{V} \hat{\varepsilon}_e + \sum_{g \in \mathbb{I}_3} \pm F_g^{E_e} \right), \\ \tilde{\varepsilon}_i &= \frac{1}{\tilde{\rho} \tilde{V}} \left(\hat{\rho} \hat{V} \hat{\varepsilon}_i + \sum_{g \in \mathbb{I}_3} \pm F_g^{E_i} \right). \end{aligned}$$

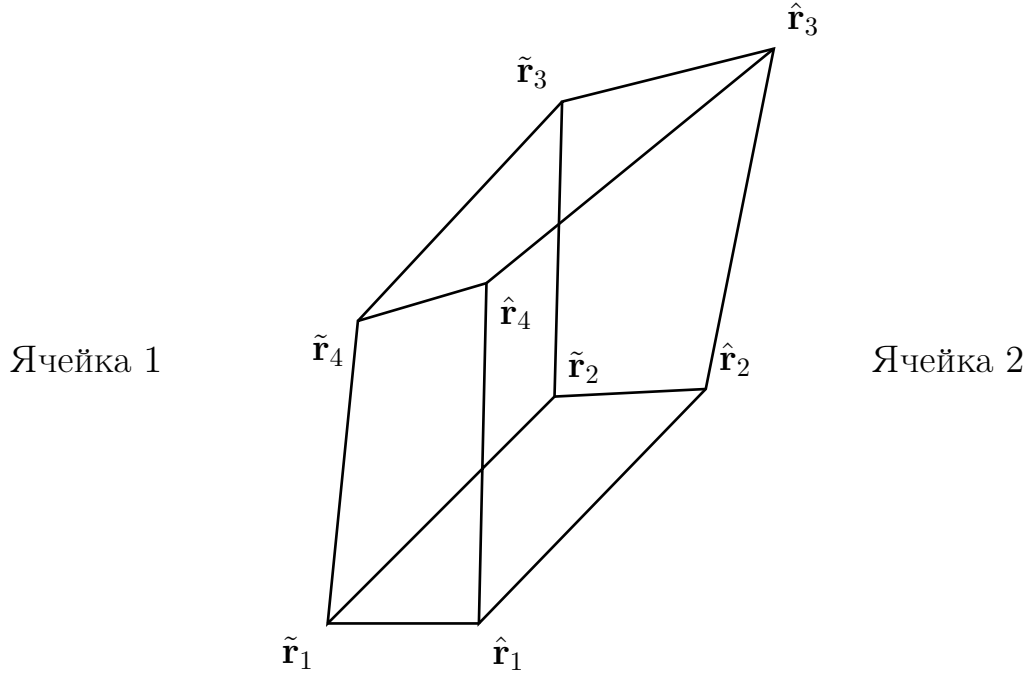


Рис. 2.7. К вычислению потока между ячейками.

В ячейку * перетоки для данной грани входят со знаком «−», а в соседнюю — со знаком «+». В силу этого, интегральное изменение свободного заряда, массы и внутренней энергии электронной и ионной подсистемы обусловлено только потоками через границу расчётной области.

Для пересчёта скоростей, определённых в узлах разностной сетки, используется либо линейная (билинейная) интерполяция в тетраэдре, либо методика, описанная в работе [33].

Идея этой методики состоит в следующем. Предположим, что для всех граней определены перетоки массы F^M . Тогда изменение массы узла описывается формулой

$$\delta M_{ijk}^* = \tilde{M}_{ijk}^* - \hat{M}_{ijk}^* = \frac{1}{8} \sum_{mln \in \Pi_2} (\tilde{M}_{mln} - \hat{M}_{mln}) = \frac{1}{8} \sum_{mln \in \Pi_2} \sum_{g \in \Pi_3(mln)} (\pm)_{g,mln} F_g^M.$$

Введём понятие контрольного объёма узла (приузлового объёма) — многогранника, построенного на центрах ячеек, инцидентных данному узлу (см. рис. 2.8). Определим поток массы через грань q приузлового объёма как

$$F_q^M = \frac{1}{8} \sum_g F_g^M,$$

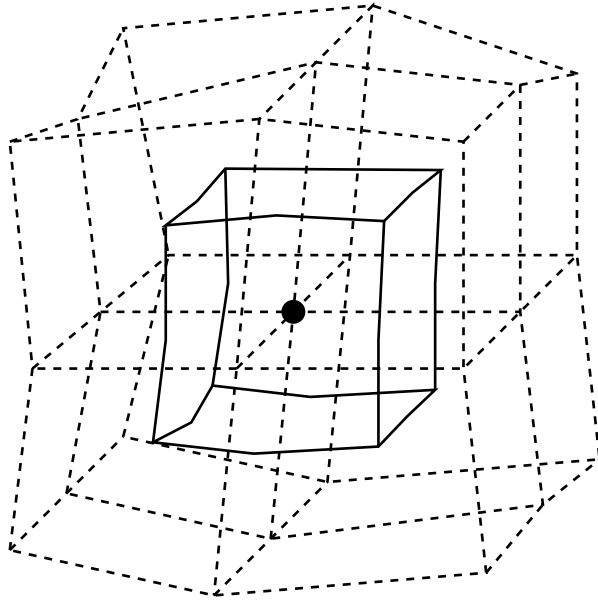


Рис. 2.8. Контрольный объём узла. Пунктиром отмечены рёбра инцидентных узлу ячеек.

где g индексирует грани ячеек «соседние» для грани q , то есть параллельные ей в индексном пространстве и инцидентные ячейкам, на центрах которых грань q построена. В этих обозначениях изменение массы узла (то есть массы, сосредоточенной в приузловом объёме) можно записать как

$$\delta M_{ijk}^* = \sum_{q \in \mathbb{Ш}_5(ijk)} (\pm)_{q,ijk} F_q^M.$$

Запись $q \in \mathbb{Ш}_5(ijk)$ обозначает инцидентность грани q приузловому объёму узла (i, j, k) , а $ijk \in \mathbb{Ш}_6(q)$ — инцидентность приузлового объёма узла (i, j, k) грани q .

Нам необходимо определить значения $\tilde{\mathbf{v}}_{ijk}$ таким образом, чтобы сохранялись сеточные функционалы \mathbf{p} и E_{kin} . Запишем изменение импульса в узле как

$$\delta(M^* \mathbf{v})_{ijk} = \tilde{M}_{ijk}^* \tilde{\mathbf{v}}_{ijk} - \hat{M}_{ijk}^* \hat{\mathbf{v}}_{ijk} = \sum_{q \in \mathbb{Ш}_5(ijk)} (\pm)_{q,ijk} F_q^{M\mathbf{v}}, \quad (2.2)$$

где знак \pm принимает разные значения для соседних объёмов. Запись в такой форме заведомо сохраняет полный импульс. Осталось определить перетоки импульса $F_q^{M\mathbf{v}}$ так, чтобы сохранялась и полная кинетическая энергия для каждой компоненты скорости. Для определённости, далее будем рассматривать компоненту скорости, направленную по оси x , остальные компоненты рассматрива-

ются аналогично.

Мы хотим добиться выполнения условия

$$\sum_{ijk \in \bar{D}} \tilde{M}_{ijk}^* \frac{\tilde{u}_{ijk}^2}{2} = \sum_{ijk \in \bar{D}} \hat{M}_{ijk}^* \frac{\hat{u}_{ijk}^2}{2}.$$

Изменение соответствующей компоненты кинетической энергии приузлового объёма имеет вид

$$\begin{aligned} \delta \left(M^* \frac{u^2}{2} \right) &= \tilde{M}^* \frac{\tilde{u}^2}{2} - \hat{M}^* \frac{\hat{u}^2}{2} = \tilde{M}^* \tilde{u} \frac{\tilde{u}}{2} - \hat{M}^* \hat{u} \frac{\hat{u}}{2} + \tilde{M}^* \tilde{u} \frac{\hat{u}}{2} - \\ &\quad - \hat{M}^* \hat{u} \frac{\tilde{u}}{2} - \tilde{M}^* \tilde{u} \frac{\hat{u}}{2} + \hat{M}^* \hat{u} \frac{\tilde{u}}{2} = \frac{\hat{u} + \tilde{u}}{2} \delta(M^* u) - \frac{\hat{u} \tilde{u}}{2} \delta M^*. \end{aligned}$$

Просуммируем это выражение по всем узлам $ijk \in \bar{D}$. В силу вырожденности граничных ячеек, скорости в граничных узлах совпадают со скоростями в приграничных узлах и на баланс кинетической энергии не влияют, а ненулевые потоки массы и импульса имеются только через грани, инцидентные невырожденным ячейкам. Через грани между двумя вырожденными ячейками потоков нет, хотя потоки из невырожденной ячейки в вырожденную допустимы. Это позволяет поменять порядок суммирования:

$$\begin{aligned} \delta E_{kin}^u &= \tilde{E}_{kin}^u - \hat{E}_{kin}^u = \sum_{ijk \in \bar{D}} \delta \left(M^* \frac{u^2}{2} \right)_{ijk} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ijk \in \bar{D}} \sum_{q \in \text{III}_5(ijk)} (\pm)_{q,ijk} [(\hat{u}_{ijk} + \tilde{u}_{ijk}) F_q^{Mu} - \hat{u}_{ijk} \tilde{u}_{ijk} F_q^M] = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{q \in \bar{D}} \sum_{ijk \in \text{III}_6(q)} (\pm)_{q,ijk} [(\hat{u}_{ijk} + \tilde{u}_{ijk}) F_q^{Mu} - \hat{u}_{ijk} \tilde{u}_{ijk} F_q^M]. \end{aligned}$$

Для обеспечения сохранения кинетической энергии достаточно потребовать для каждой грани q выполнения условия

$$\sum_{ijk \in \text{III}_6(q)} (\pm)_{q,ijk} [(\hat{u}_{ijk} + \tilde{u}_{ijk}) F_q^{Mu} - \hat{u}_{ijk} \tilde{u}_{ijk} F_q^M] = 0.$$

Поскольку для соседних узлов знак \pm принимает разные значения, получаем условие на F_q^{Mu} :

$$F_q^{Mu} = F_q^M \frac{\hat{u}_1 \tilde{u}_1 - \hat{u}_2 \tilde{u}_2}{(\hat{u}_1 + \tilde{u}_1) - (\hat{u}_2 + \tilde{u}_2)}, \quad (2.3)$$

где 1 и 2 отмечают узлы, инцидентные грани q . В случае, когда знаменатель дроби близок к нулю, используется аппроксимация против потока:

$$F_q^{Mu} = F_q^M \hat{u}_*, \quad (2.4)$$

где индекс * отмечает узел, поток массы из которого через грань q положителен. Эта аппроксимация не обеспечивает консервативности по кинетической энергии, но удовлетворяет условиям транспортности и сохранения импульса.

Поскольку в выражения (2.2) уже входят значения F^{Mu} , мы получаем нелинейную систему уравнений для определения потоков и скоростей. Она решается итерационным методом: сначала полагается $\tilde{u} = \hat{u}$ и находятся перетоки F^{Mu} , далее рассчитываются уточнённые значения \tilde{u} и по ним уточнённые значения F^{Mu} и так далее, пока итерации не сойдутся с заданной точностью.

Найдём условия сходимости этой итерационной схемы для стационарного одномерного течения с «эйлеровой» перестройкой сетки. Положим известными скорости \hat{u}_i и перетоки масс F_q^M . Согласуем нумерацию граней и узлов так, чтобы грань q лежала между узлами i и $i + 1$. Тогда уравнения (2.2)–(2.3) имеют вид

$$\tilde{u}_i = \frac{\hat{M}_i \hat{u}_i + F_q^{Mu} - F_{q-1}^{Mu}}{\hat{M}_i + F_q^M - F_{q-1}^M},$$

$$F_q^{Mu} = F_q^M \frac{\hat{u}_{i+1} \tilde{u}_{i+1} - \hat{u}_i \tilde{u}_i}{(\hat{u}_{i+1} + \tilde{u}_{i+1}) - (\hat{u}_i + \tilde{u}_i)},$$

В стационарном течении $F_q^M = F_{q-1}^M = F^M$, и используемая итерационная схема принимает вид

$$(F_q^{Mu})^s = F^M \frac{\hat{u}_{i+1} u_{i+1}^s - \hat{u}_i u_i^s}{(\hat{u}_{i+1} + u_{i+1}^s) - (\hat{u}_i + u_i^s)},$$

$$u_i^{s+1} = \hat{u}_i + \frac{(F_q^{Mu})^s - (F_{q-1}^{Mu})^s}{\hat{M}_i},$$

где u^s и $(F^{Mu})^s$ — значения \tilde{u} и F^{Mu} , полученные на итерации s , а начальное приближение $u^0 = \hat{u}$. Выразив значение скорости, получим

$$u_i^{s+1} = \hat{u}_i + \frac{F^M}{\hat{M}_i} \left(\frac{\hat{u}_{i+1} u_{i+1}^s - \hat{u}_i u_i^s}{(\hat{u}_{i+1} + u_{i+1}^s) - (\hat{u}_i + u_i^s)} - \frac{\hat{u}_i u_i^s - \hat{u}_{i-1} u_{i-1}^s}{(\hat{u}_i + u_i^s) - (\hat{u}_{i-1} + u_{i-1}^s)} \right).$$

Для изменения скорости от итерации к итерации введём обозначение $\delta u_i^{s+1} = u_i^{s+1} - u_i^s$. Выпишем выражение для δu_i^{s+1} :

$$\delta u_i^{s+1} = \frac{F^M}{\hat{M}_i} \left(\frac{\hat{u}_{i+1} u_{i+1}^s - \hat{u}_i u_i^s}{(\hat{u}_{i+1} + u_{i+1}^s) - (\hat{u}_i + u_i^s)} - \frac{\hat{u}_i u_i^s - \hat{u}_{i-1} u_{i-1}^s}{(\hat{u}_i + u_i^s) - (\hat{u}_{i-1} + u_{i-1}^s)} \right) - \frac{F^M}{\hat{M}_i} \left(\frac{\hat{u}_{i+1} u_{i+1}^{s-1} - \hat{u}_i u_i^{s-1}}{(\hat{u}_{i+1} + u_{i+1}^{s-1}) - (\hat{u}_i + u_i^{s-1})} - \frac{\hat{u}_i u_i^{s-1} - \hat{u}_{i-1} u_{i-1}^{s-1}}{(\hat{u}_i + u_i^{s-1}) - (\hat{u}_{i-1} + u_{i-1}^{s-1})} \right).$$

Подставим $u^{s-1} = u^s - \delta u^s$:

$$\delta u_i^{s+1} = \frac{F^M}{\hat{M}_i} \left(\frac{\hat{u}_{i+1} u_{i+1}^s - \hat{u}_i u_i^s}{(\hat{u}_{i+1} + u_{i+1}^s) - (\hat{u}_i + u_i^s)} - \frac{\hat{u}_i u_i^s - \hat{u}_{i-1} u_{i-1}^s}{(\hat{u}_i + u_i^s) - (\hat{u}_{i-1} + u_{i-1}^s)} \right) - \frac{F^M}{\hat{M}_i} \left(\frac{\hat{u}_{i+1}(u_{i+1}^s - \delta u_{i+1}^s) - \hat{u}_i(u_i^s - \delta u_i^s)}{(\hat{u}_{i+1} + u_{i+1}^s - \delta u_{i+1}^s) - (\hat{u}_i + u_i^s - \delta u_i^s)} - \frac{\hat{u}_i(u_i^s - \delta u_i^s) - \hat{u}_{i-1}(u_{i-1}^s - \delta u_{i-1}^s)}{(\hat{u}_i + u_i^s - \delta u_i^s) - (\hat{u}_{i-1} + u_{i-1}^s - \delta u_{i-1}^s)} \right).$$

Предполагая $|\delta u_i^s| \ll |u_i^s|$ (что должно достигаться при сходимости итераций, если $|u_i^s| \neq 0$), разложим правую часть в ряд Тейлора по δu до первого члена.

$$\begin{aligned} \delta u_i^{s+1} &= \frac{F^M}{\hat{M}_i} \left(\frac{(\hat{u}_{i+1} - \hat{u}_i)(\delta u_i^s(u_{i+1}^s - \hat{u}_i) + \delta u_{i+1}^s(\hat{u}_{i+1} - u_i^s))}{(\hat{u}_{i+1} + u_{i+1}^s - \hat{u}_i - u_i^s)^2} - \frac{(\hat{u}_{i-1} - \hat{u}_i)(\delta u_i^s(u_{i-1}^s - \hat{u}_i) + \delta u_{i-1}^s(\hat{u}_{i-1} - u_i^s))}{(\hat{u}_{i-1} + u_{i-1}^s - \hat{u}_i - u_i^s)^2} \right) = \\ &= \frac{F^M}{\hat{M}_i} \left(\delta u_{i+1}^s \frac{(\hat{u}_{i+1} - \hat{u}_i)(\hat{u}_{i+1} - u_i^s)}{(\hat{u}_{i+1} + u_{i+1}^s - \hat{u}_i - u_i^s)^2} - \delta u_{i-1}^s \frac{(\hat{u}_{i-1} - \hat{u}_i)(\hat{u}_{i-1} - u_i^s)}{(\hat{u}_{i-1} + u_{i-1}^s - \hat{u}_i - u_i^s)^2} + \right. \\ &\quad \left. + \delta u_i^s \left[\frac{(\hat{u}_{i+1} - \hat{u}_i)(u_{i+1}^s - \hat{u}_i)}{(\hat{u}_{i+1} + u_{i+1}^s - \hat{u}_i - u_i^s)^2} - \frac{(\hat{u}_{i-1} - \hat{u}_i)(u_{i-1}^s - \hat{u}_i)}{(\hat{u}_{i-1} + u_{i-1}^s - \hat{u}_i - u_i^s)^2} \right] \right). \end{aligned}$$

Предполагая $u_{i+1}^s - u_i^s \sim \hat{u}_{i+1} - \hat{u}_i$, получаем

$$\delta u_i^{s+1} \approx \frac{F^M}{4\hat{M}_i} (\delta u_{i+1}^s - \delta u_{i-1}^s),$$

и условие устойчивости итераций для данного примера имеет вид

$$F^M < 2\hat{M}_i.$$

Это условие заведомо сильнее ограничений, возникающих в трёхмерном нестационарном случае. Оно выполняется везде, кроме граничных узлов и, возможно, узлов сетки в околывакуумной области. Поэтому уравнения (2.2)–(2.3)

решаются только в области, где плотность вещества существенно выше «вакуумной плотности», а вблизи вакуума поток импульса F^{Mv} не согласовывается с потоком массы F^M , а вычисляется по формуле (2.4).

2.3. Гибридный метод расчёта переноса лазерного излучения

Для моделирования поглощения во всём пространстве используется гибридная модель [23]. Аналогично классической методике (см., например, [31], [29]), основанной на приближении геометрической оптики, вводится некоторая сетка по лучам, каждый из которых далее трассируется в соответствии с уравнениями (1.24). По достижению области, в которой приближение геометрической оптики неприменимо, осуществляется расчёт поглощения в этой области по модели (1.25)–(1.31), причём слои формируются вдоль градиента n^2 в точке сшивки моделей. После расчёта поглощения по одномерной модели луч теряет энергию и отражается.

Остановимся подробнее на трассировке луча. Она осуществляется в приближении постоянных градиентов n^2 и $n\mu$ в ячейке. Положим, что в момент входа луча в ячейку нам известны его координата \mathbf{r}_i , направление распространения \mathbf{s}_i и энергия на луче P_i . Из известных градиентов однозначно вычисляются $n_i = n(\mathbf{r}_i)$ и $\mu_i = \mu(\mathbf{r}_i)$. Решение уравнений (1.24) в указанных приближениях приводит к зависимостям

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(\tau) &= \mathbf{r}_i + n_i \mathbf{s}_i \tau + \frac{1}{2} \nabla n^2 \frac{\tau^2}{4}, \\ n\mathbf{s}(\tau) &= n_i \mathbf{s}_i + \frac{1}{2} \nabla n^2 \tau, \\ P(\tau) &= P_i \exp \left(-n_i \mu_i \tau - \nabla(n\mu) \cdot n_i \mathbf{s}_i \frac{\tau^2}{2} - \nabla(n\mu) \cdot \nabla n^2 \frac{\tau^3}{12} \right). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Для нахождения точки выхода луча из ячейки необходимо найти точку пересечения кривой $\mathbf{r}(\tau)$ с границей ячейки. Точка пересечения кривой с плос-

костью ищется исходя из условия

$$\det A(\tau) = \det \begin{vmatrix} x(\tau) - x_1 & y(\tau) - y_1 & z(\tau) - z_1 \\ x_2 - x_1 & y_2 - y_1 & z_2 - z_1 \\ x_3 - x_1 & y_3 - y_1 & z_3 - z_1 \end{vmatrix} = 0,$$

где \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 и \mathbf{r}_3 — координаты трёх произвольных точек, принадлежащих данной плоскости. После подстановки траектории луча (2.5) получаем квадратное уравнение, которое решается для всех граней ячейки. Из полученных корней выбирается наименьший положительный, отвечающий первой точке пересечения траектории луча с границей ячейки. Расчёт направления луча в этой точке и энергии на нём осуществляется по формулам (2.5), а нагрев ячейки данным лучом как изменение энергии на нём:

$$\rho G_e^{las} = P_{i+1} - P_i.$$

Следует отметить, что полностью последовательное применение этой модели требует непрерывности n^2 на границе ячеек, в противном случае при переходе луча из ячейки в ячейку рекомендуется применять закон преломления [31]. Для обеспечения непрерывности на используемой сетке необходимо разбиение ячейки на тетраэдры и триангуляция луча в них. Однако практика показывает, что такой подход существенно увеличивает время расчёта, не приводя к увеличению глобальной точности вычисления траектории луча [44]. Применение же закона Снеллиуса приводит к численным неустойчивостям: лучи запутываются и теряются. Возможно это связано с степенью гладкости граней ячеек: в работе [31] для поверхности грани используется билинейная функция, в то время, как в нашей работе — разбиение на треугольники или (когда это допустимо) аппроксимация одной плоскостью, содержащей центр грани, нормаль к которой совпадает с вектором \mathbf{S}_g . Последний подход оптимален по вычислительной сложности (вместо 24 квадратных уравнений достаточно решить 6), но может приводить к ошибкам в ячейках с существенно непланарными гранями.

Уравнения одномерной модели (1.25)–(1.31) решаются конечно-аналитическим методом [30]. Диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_\omega(z)$ представляется в виде совокупности слоёв ε_m . Решение в слое m представляет собой линейную комбинацию прошедшей и отражённой волны:

$$f_m(z) = C_m^+ \exp(ik_m(z - z_m)) + C_m^- \exp(-ik_m(z - z_m)), \quad (2.6)$$

где в слое m координата имеет значения $z_m \leq z \leq z_{m+1}$, $k_m = k_L \sqrt{\varepsilon_m - \sin^2 \theta}$, а постоянные C_m^\pm находятся из условий сшивки [45]:

$$\begin{aligned} f_m(z_{m+1}) &= f_{m+1}(z_{m+1}), \\ \left. \frac{df_m(z)}{dz} \right|_{z=z_{m+1}} &= \left. \frac{df_{m+1}(z)}{dz} \right|_{z=z_{m+1}} \end{aligned} \quad (2.7)$$

для s -поляризации и

$$\begin{aligned} f_m(z_{m+1}) &= f_{m+1}(z_{m+1}), \\ \frac{1}{\varepsilon_m} \left. \frac{df_m(z)}{dz} \right|_{z=z_{m+1}} &= \frac{1}{\varepsilon_{m+1}} \left. \frac{df_{m+1}(z)}{dz} \right|_{z=z_{m+1}} \end{aligned} \quad (2.8)$$

для p -поляризации. Система алгебраических уравнений на коэффициенты C_m^\pm замыкается с помощью граничных условий. Граничным условиям (1.28) отвечает следующее замыкание:

$$\begin{aligned} C_1^+ &= \sqrt{\frac{8\pi}{c}} P, \\ C_{N_m}^- &= 0. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Коэффициент отражения, необходимый для определения энергии, оставшейся на луче, рассчитывается как $R = |C_1^-/C_1^+|$. Энергия, поглощённая в слое m , находится из интегралов (1.27) и (1.31), при этом осредняется осциллирующий перекрестный член, то есть осуществляется замена

$$\int_{z_m}^{z_{m+1}} dz \left| C_m^+ e^{ik_m(z-z_m)} + C_m^- e^{-ik_m(z-z_m)} \right|^2 \approx \frac{|C_m^+|^2 - |C_m^-|^2}{2\text{Im } k_m} \left(1 - e^{-2\text{Im } k_m(z_{m+1}-z_m)} \right),$$

а поглощённая энергия перенормируется с учётом точно определяемого коэффициента отражения R .

Эти искажения точного решения необходимы для того, чтобы шивка происходила гладко, а общий вид решения не сильно зависел от точки шивки. В настоящее время в программе используется следующий простой критерий смены модели: $n_e > \alpha n_c$, где $\alpha = 0.5$ — численный коэффициент. В [23] было показано, что выбор коэффициента $\alpha = 0.1$ приводит к полному пренебрежению эффектами рефракции, а между $\alpha = 0.5$ и $\alpha = 0.9$ однозначного выбора сделать нельзя. Вместе с тем, М. М. Баско в [79] было высказано соображение, что более физически обоснованным является учитывающий градиентный член критерий $n_e + \beta \lambda |\nabla n_e| > \alpha n_c$. В этом подходе выбор параметров $\alpha = 0.8$, $\beta = 1$ позволяет корректно описать переход к волновой оптике в случае пологого градиента и большой длины волны.

2.4. Численные методы расчёта переноса теплового излучения

Для дискретизации уравнения переноса по спектру используется многогрупповое приближение [47]. Весь спектр разбивается на отдельные участки (спектральные группы), по которым проводится интегрирование. При этом излучательная способность, поток излучения и плотность энергии излучения интегрируются по спектральной группе, а коэффициенты поглощения в спектральной группе усредняются по Планку и Росселанду [47]:

$$\begin{aligned}
 j_i &= \int_{\nu_i}^{\nu_{i+1}} j_\nu d\nu, & U_i &= \int_{\nu_i}^{\nu_{i+1}} U_\nu d\nu, & \mathbf{S}_i &= \int_{\nu_i}^{\nu_{i+1}} \mathbf{S}_\nu d\nu, \\
 \varkappa_i^P &= \frac{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \varkappa_\nu \frac{x^3}{e^x - 1} dx}{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx}, & \varkappa_i^R &= \frac{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{x^4 e^x}{e^x - 1} dx}{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{\varkappa_\nu} \frac{x^4 e^x}{e^x - 1} dx}, \\
 \rho G_e^{\text{rad}} &= - \sum_i (4\pi j_i - \varkappa_i^P c U_i).
 \end{aligned}$$

Индекс i здесь отмечает спектральную группу $\nu \in [\nu_i, \nu_{i+1}]$, а переменная интегрирования x связана с частотой соотношением $x = \frac{h\nu}{kT_e}$.

Далее уравнения диффузионного приближения (1.13) для каждой группы аппроксимируются аналогично уравнениям энергии (1.5):

$$c\hat{\chi}_{mln}^P \hat{U}_{mln} \hat{V}_{mln} + \sum_{g \in \mathbb{Ш}_3(mln)} \sum_{\overline{mln} \in \mathbb{Ш}_4(g)} \frac{c}{3} \frac{\hat{\chi}_{mln}^R + \hat{\chi}_{\overline{mln}}^R}{2\hat{\chi}_{mln}^R \hat{\chi}_{\overline{mln}}^R} \frac{\hat{U}_{mln} - \hat{U}_{\overline{mln}}}{|\hat{\mathbf{r}}_{mln} - \hat{\mathbf{r}}_{\overline{mln}}|} |\hat{\mathbf{S}}_g| =$$

$$= 4\pi \hat{j}_{mln} \hat{V}_{mln}. \quad (2.10)$$

Индекс спектральной группы здесь опущен, а \mathbf{r}_{mln} , как и ранее, обозначает радиус-вектор центра ячейки (m, l, n) .

Уравнения (2.10) решаются для ячеек внутренней области. Для ячеек граничной области задаётся либо условие отсутствия потока

$$\hat{U}_{\overline{mln}} = \hat{U}_{mln},$$

когда предполагается отражение излучения от границы (например, в расчётах с редуцированной геометрией: в секторе, в полупространстве, в плоской геометрии), либо условие Маршака

$$\frac{c}{3\hat{\chi}_{mln}^R} \frac{\hat{U}_{mln} - \hat{U}_{\overline{mln}}}{|\hat{\mathbf{r}}_{mln} - \hat{\mathbf{r}}_{\overline{mln}}|} = \frac{c\hat{U}_{mln}}{2},$$

когда предполагается свободный выход излучения из расчётной области.

Таким образом, для нахождения плотности излучения в каждой ячейке необходимо для каждой группы решить систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида

$$\sum_{\overline{mln}} A_{mln}^{\overline{mln}} c\hat{U}_{\overline{mln}} = F_{mln}, \quad (2.11)$$

где A — семидиагональная положительно определённая симметричная матрица. Явный вид элементов матрицы A и правой части F нетрудно восстановить из уравнения (2.10). Стоит отметить, что поскольку значение cU с предыдущего временного шага, как правило, является достаточно хорошим начальным

приближением для нахождения $c\hat{U}$, нет необходимости использовать быстросходящиеся итерационные методы (например, метод сопряжённых градиентов [85]). В программе уравнение (2.10) решается методом простых итераций Якоби:

$$cU_{mln}^{s+1} = \frac{1}{A_{mln}} \left(F_{mln} - \sum_{\overline{mln} \neq mln} A_{mln}^{\overline{mln}} cU_{\overline{mln}}^s \right).$$

Здесь U^s — значение \hat{U} , полученное на итерации s . Сходимость итераций определяется по вариации полного вклада в энергобаланс:

$$\sum_{mln \in \bar{G}} c|U_{mln}^{s+2} - U_{mln}^s| \hat{\chi}_{mln}^P \hat{V}_{mln} < \varepsilon_{rel}^{rad} \sum_{mln \in \bar{G}} \hat{j}_{mln} \hat{V}_{mln} + \varepsilon_{abs}^{rad} \sum_{mln \in \bar{G}} \hat{\chi}_{mln}^P \hat{V}_{mln}.$$

Для ускорения расчёта, итерации прекращаются в ячейках, в которых выполнено локальное условие сходимости

$$c|U_{mln}^{s+2} - U_{mln}^s| \hat{\chi}_{mln}^P < 0.1 \left(\varepsilon_{rel}^{rad} \hat{j}_{mln} + \varepsilon_{abs}^{rad} \hat{\chi}_{mln}^P \right).$$

Безразмерный коэффициент ε_{rel}^{rad} и коэффициент с размерностью потока энергии ε_{abs}^{rad} определяют относительную и абсолютную погрешности вычисления $c\hat{U}$.

В практических расчётах хорошо себя зарекомендовали значения $\varepsilon_{rel}^{rad} = 10^{-8}$ и $\varepsilon_{abs}^{rad} = 10^{-4}$ Вт/см² [24].

Решение уравнения переноса (1.12) вдоль длинных характеристик, проходящих через всю расчётную область, использовалось в качестве пост-обработки расчётных распределений плазмы для получения детальной картины спектрального и углового распределения излучения, выходящего из плазмы [28]. Вместе с тем, в методических целях было реализовано решение уравнения переноса методом коротких характеристик [63]. Корректная реализация метода коротких характеристик, обеспечивающая выход на диффузионный предел, описана, например, в [51], но в настоящей работе использовался упрощённый подход, дающий, тем не менее, интегральные зависимости, согласующиеся с полученными после трассировки по длинным характеристикам [24].

Ключевой особенностью метода коротких характеристик является его локальность: для получения значения интенсивности на данном элементе сетки (узле, грани, ячейке) в данном направлении, используются только значения интенсивности со смежных элементов сетки, которые интерполируются в точку, лежащую на луче, в то время, как метод длинных характеристик предполагает трассировку луча от границ расчётной области. Мы относили значения интенсивности к узлам газодинамической разностной сетки, причём значение интенсивности в узле (i, j, k) определялось по формуле

$$I_{ijk} = I_g^* \exp(-\chi_{mln}^P \Delta_{mln}) + \frac{j_{mln}}{\chi_{mln}^P} (1 - \exp(-\chi_{mln}^P \Delta_{mln})), \quad (2.12)$$

где (m, l, n) — ячейка, в которой лежит характеристика, входящая в узел (i, j, k) в данном направлении, $\Delta_{mln} = |\mathbf{r}_{ijk} - \mathbf{r}_*|$ — путь характеристики в ячейке (m, l, n) , I_g^* — значение интенсивности в точке \mathbf{r}_* , лежащей на грани g , где характеристика выходит из ячейки (m, l, n) . Использовалась интерполяция:

$$I_g^* = \frac{\sum_{ijk} I_{ijk} / |\mathbf{r}_{ijk} - \mathbf{r}_*|}{\sum_{ijk} 1 / |\mathbf{r}_{ijk} - \mathbf{r}_*|},$$

где сумма берётся по всем узлам, инцидентным грани g .

В качестве угловой сетки использовалась симметричная S_6 квадратура, включающая 48 направлений [86].

В дальнейшем возможно развитие кода в направлении метода квазидиффузии [60]. Это потребует незначительную модификацию уже реализованных алгоритмов.

2.5. Интерполяция таблиц непрозрачностей и уравнений состояния

Для всех величин используется линейная интерполяция по параметру ξ [62], [72]:

$$f(\xi) = \xi f^0 + (1 - \xi) f^1, \quad (2.13)$$

где f^0 — значение величины f , полученное в приближении оптически прозрачной плазмы, а f^1 — значение величины f , полученное в приближении оптически плотной в заданном спектральном диапазоне плазмы. Эти значения получаются путём интерполяции по электронной температуре и плотности заранее рассчитанных таблиц.

Для коэффициента электронной теплопроводности, групповой излучательной способности, группового коэффициента непрозрачности, усреднённого по Планку и Росселанду, и скорости релаксации ионизационного состояния используется билинейная интерполяция логарифма по $\ln n_e$ и $\ln T_e$. То есть, они вычисляются по формуле вида

$$\begin{aligned} f(n_e, T_e) = \exp \left(\ln f(n_e^0, T_e^0) \frac{\ln(T_e^1/T_e) \ln(n_e^1/n_e)}{\ln(T_e^1/T_e^0) \ln(n_e^1/n_e^0)} + \right. \\ \left. + \ln f(n_e^0, T_e^1) \frac{\ln(T_e/T_e^0) \ln(n_e^1/n_e)}{\ln(T_e^1/T_e^0) \ln(n_e^1/n_e^0)} + \right. \\ \left. + \ln f(n_e^1, T_e^0) \frac{\ln(T_e^1/T_e) \ln(n_e/n_e^0)}{\ln(T_e^1/T_e^0) \ln(n_e^1/n_e^0)} + \right. \\ \left. + \ln f(n_e^1, T_e^1) \frac{\ln(T_e/T_e^0) \ln(n_e/n_e^0)}{\ln(T_e^1/T_e^0) \ln(n_e^1/n_e^0)} \right), \end{aligned} \quad (2.14)$$

где $n_e^0 \leq n_e \leq n_e^1$, $T_e^0 \leq T_e \leq T_e^1$, а значения в точках (n_e^0, T_e^0) , (n_e^1, T_e^0) , (n_e^0, T_e^1) и (n_e^1, T_e^1) берутся из таблиц.

Равновесное значение средней ионизации вычисляется аналогично, но интерполяция идёт по $\ln \rho$ (или $\ln n_a$, что эквивалентно) и $\ln T_e$.

Текущее значение ионизации вычисляется из неявной аппроксимации урав-

нения (1.8):

$$\frac{\hat{Z}_0 - Z_0}{\Delta t} = -\frac{\hat{Z}_0 - \hat{Z}_0^S}{\hat{\tau}_{rel}}. \quad (2.15)$$

Индекс ячейки здесь опущен, так как все величины, входящие в уравнение (2.15) задаются в одной и той же ячейке.

Для давления электронной компоненты используется интерполяция вида (2.14), но в качестве интерполируемой величины выступает не $\ln P_e$, а $\ln(1 + P_e/P_0)$, где P_0 — некоторое характерное давление плазмы. Эта формула обеспечивает гладкую сшивку линейной интерполяции в области $P_e \ll P_0$ и логарифмической интерполяцией в области $P_e \gg P_0$.

Для удельной внутренней энергии электронной компоненты используется билинейная интерполяция по n_e и T_e .

Поскольку процедуры линейной интерполяции в обычном и логарифмическом масштабе не коммутируют, следует отметить, что сначала происходит интерполяция табличных значений по ξ , а уже после это — интерполяция по температуре и плотности между полученными значениями. Также стоит отметить, что в области применимости однотемпературного приближения интерполируется по $\ln T_e$ и ρ сразу значение полного давления, без разбиения на электронную и ионную компоненту. Это необходимо ввиду того, что при использовании двухфазного уравнения состояния на переходе между фазами $\frac{dP}{d\rho} = 0$, и из-за различной интерполяции P_i и P_e возможно получения физически бессмысленных значений $\frac{dP}{d\rho} < 0$. Описание области фазового перехода в двухтемпературной модели требует существенной модификации методики расчёта таблиц [47].

2.6. Выводы ко второй главе

Построена трёхмерная полностью консервативная аппроксимация уравнений радиационной газовой динамики, на равномерных сетках обладающая вторым порядком аппроксимации по шагу пространственной сетки. Несмотря на то, что аналогичные схемы уже строились для двумерного случая ранее (см., на-

пример, [22]), при обобщении на трёхмерный случай для сохранения полной консервативности потребовалась некоторая модификация схемы. Так, например, в одномерном плоском случае работу сил давления можно записать в форме [81]

$$-\hat{P} \frac{1/\hat{\rho} - 1/\rho}{\Delta t}, \quad (2.16)$$

и требование консервативности не накладывает никаких дополнительных ограничений на аппроксимацию $\frac{\partial V^{(\alpha)}}{\partial \mathbf{r}}$ в уравнении движения. В двумерном плоском случае запись в форме (2.16) возможна, но накладывает требование $\alpha = 0.5$ [22]. Нетрудно показать, что в трёхмерном случае для изотропно расширяющейся ячейки требуется $\alpha = 5/12$. Поскольку двумерная задача есть частный случай трёхмерной, получаем, что никакое фиксированное значение α в уравнении движения не позволяет удовлетворить условию полной консервативности при записи соответствующего члена в уравнении энергии в форме (2.16). Чтобы схема стала консервативной для произвольного значения α , этот член должен быть записан в виде

$$-\hat{P}_{mln} \sum_{ijk \in \Pi_1(mln)} \frac{\hat{\mathbf{r}}_{ijk} - \mathbf{r}_{ijk}}{\Delta t} \cdot \left(\frac{\partial(1/\rho_{mln})}{\partial \mathbf{r}_{ijk}} \right)^{(\alpha)},$$

что для случая $\alpha = 1$ эквивалентно выражению

$$-\frac{\hat{P}_{mln}}{\hat{M}_{mln}} \sum_{ijk \in \Pi_1(mln)} \mathbf{v}_{ijk}^{(0.5)} \cdot \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial \mathbf{r}_{ijk}}.$$

В одномерном приближении исследован на устойчивость ранее описанный консервативный по импульсу и кинетической энергии алгоритм пересчёта скоростей на модифицированную сетку. Найдено его условие устойчивости в линейном приближении: $F^M < 2\hat{M}_i$, где \hat{M}_i — масса узла до перестройки сетки, а F^M — переток массы в узел.

Описаны методики численного расчёта переноса лазерного и теплового излучения в плазме. Для расчёта переноса лазерного излучения в области применимости геометрической оптики использована схема второго порядка аналогичная [31], для решения уравнения Гельмгольца — конечно-аналитическая схема

[30]. Уравнение переноса излучения в многогрупповом диффузионном приближении решается методом конечных объёмов с использованием гармонического среднего для интерполяции коэффициента поглощения из ячейки на грань. Для расчёта переноса излучения без использования диффузионного приближения используется метод дискретных ординат, в котором уравнение переноса решается вдоль длинных или коротких характеристик, испущенных в соответствии с заданным набором направлений.

Также в настоящей главе описывается методика интерполяции таблиц с уравнениями состояния. Для большинства величин используется логарифмическая интерполяция по плотности (электронной плотности) и температуре и линейная по параметру ξ , характеризующему тип равновесия излучения с веществом.

Алгоритмы и их реализация в комплексе программ 3DLINE

В третьей главе описан алгоритм решения полученных выше конечно-разностных уравнений. Особое внимание уделено тестированию отдельных физических модулей на задачах, имеющих известное аналитическое или автомодельное решение. Кратко описана методика распараллеливания кода в рамках гибридного подхода (MPI-OpenMP) [87].

3.1. Алгоритм решения конечно-разностных уравнений гидродинамики

Система уравнений (2.1) представляет собою систему нелинейных алгебраических уравнений, для решения которой используется метод разделения по физическим процессам [81], а именно, все уравнения, входящие в (2.1), разбиваются на две группы: уравнения движения

$$\begin{aligned}
 \frac{\hat{\mathbf{r}}_{ijk} - \mathbf{r}_{ijk}}{\Delta t} &= \mathbf{v}_{ijk}^{(0.5)}, \\
 \hat{M}_{mln} &= M_{mln}, \\
 \hat{M}_{ijk}^* \frac{\hat{\mathbf{v}}_{ijk} - \mathbf{v}_{ijk}}{\Delta t} &= \sum_{mln \in \mathbb{I}_2(ijk)} \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial \mathbf{r}_{ijk}} \hat{P}_{mln},
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

и уравнения энергии

$$\begin{aligned}
\frac{(\hat{\varepsilon}_e)_{mln} - (\varepsilon_e)_{mln}}{\Delta t} &= - \frac{(\hat{P}_e)_{mln}}{\hat{M}_{mln}} \sum_{ijk \in \text{III}_1(mln)} \mathbf{v}_{ijk}^{(0.5)} \cdot \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial \mathbf{r}_{ijk}} + (\hat{G}_e^{rad})_{mln} + \\
&+ (\hat{G}_e^{las})_{mln} + (\hat{Q}_{ei})_{mln} + \frac{1}{\hat{M}_{mln}} \sum_{g \in \text{III}_3(mln)} (\hat{\mathbf{W}}_e)_g \cdot (\pm \hat{\mathbf{S}})_g, \\
\frac{(\hat{\varepsilon}_i)_{mln} - (\varepsilon_i)_{mln}}{\Delta t} &= - \frac{(\hat{P}_i)_{mln} + (\hat{q})_{mln}}{\hat{M}_{mln}} \sum_{ijk \in \text{III}_1(mln)} \mathbf{v}_{ijk}^{(0.5)} \cdot \frac{\partial \hat{V}_{mln}}{\partial \mathbf{r}_{ijk}} - \\
&- (\hat{Q}_{ei})_{mln} + \frac{1}{\hat{M}_{mln}} \sum_{g \in \text{III}_3(mln)} (\hat{\mathbf{W}}_i)_g \cdot (\pm \hat{\mathbf{S}})_g.
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Уравнения состояния связывают между собой уравнения первой и второй группы

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{Z}_0 - Z_0}{\Delta t} &= - \frac{\hat{Z}_0 - Z_0^S(\hat{\rho}, \hat{T}_e)}{\tau_{rel}(\hat{\rho}, \hat{T}_e)}, \\
\hat{P} &= P_e(\hat{\rho}, \hat{T}_e) + P_i(\hat{\rho}, \hat{T}_i) + q(\hat{\rho}, \hat{T}_i), \\
\hat{\varepsilon}_i &= \varepsilon_i(\hat{\rho}, \hat{T}_i), \\
\hat{\varepsilon}_e &= \varepsilon_e(\hat{\rho}, \hat{T}_e).
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Для краткости записи в уравнении (3.3) опущены индексы [81], а в уравнениях (3.1) и (3.2) использованы векторные обозначения.

Сначала в ячейках с $\Delta t \cdot (\tau_{rel})_{mln} < 10$ решается уравнение ионизации (3.3) (в остальных ячейках используем квазистационарное приближение (1.7), и изменение ионизации происходит на этапе решения уравнения энергии (3.2)) и во всей области рассчитывается параметр ξ . По известным ε_e , ρ , Z_0 и ξ восстанавливаются значения T_e , и, полагая значения температур фиксированными, решаются уравнения движения (3.1). Далее при фиксированной плотности решаются уравнения энергии (3.2). Проверяется критерий сходимости итераций, и, при необходимости, происходит возвращение на этап вычисления ионизации. Блок-схема лагранжева этапа представлена на рис. 3.1. Критерием сходимости служит малость дисбаланса по энергии, вызванного тем, что в формулы для изменения кинетической и внутренней энергий давление входит с разных итераций: $|\delta E| \leq \varepsilon_{rel}^{it.} \cdot (|\hat{E}_{kin} - E_{kin}| + |\hat{E}_{int} - E_{int}|) + \varepsilon_{abs}^{it.} \cdot (\hat{E}_{kin} + \hat{E}_{int})$, где $\varepsilon_{rel}^{it.}$ и $\varepsilon_{abs}^{it.}$



Рис. 3.1. Блок-схема лагранжева этапа алгоритма.

— относительные допустимые погрешности сходимости итераций, с типичными значениями 10^{-6} и 10^{-9} .

Для решения уравнений (3.1) используются ньютоновские итерации. Приращение скорости от итерации к итерации $\delta \mathbf{v}^s$ во внутренних узлах расчётной области находится из решения СЛАУ, полученной линеаризацией уравнений движения относительно приращения скорости

$$\sum_{\beta, \bar{i} \bar{j} \bar{k}} A_{\alpha, \bar{i} \bar{j} \bar{k}}^{\beta, \bar{i} \bar{j} \bar{k}} \delta \mathbf{v}_{\beta, \bar{i} \bar{j} \bar{k}}^s = F_{\alpha, \bar{i} \bar{j} \bar{k}}, \quad (3.4)$$

где индексы α и β пробегает значения x, y, z . Матрица A положительно опре-

делена и имеет 243 диагонали: $A_{\alpha,ijk}^{\beta,\bar{i}\bar{j}\bar{k}}$ может являться ненулевым только тогда, когда узлы (i, j, k) и $(\bar{i}, \bar{j}, \bar{k})$ инцидентны одной ячейке. Уравнение (3.4) решается простыми итерациями Якоби аналогично уравнению (2.10), но с критерием сходимости в норме L_1 . Блок-схема алгоритма решения уравнений движения представлена на рис. 3.2. Критерием сходимости итераций служит малость приращения скорости от итерации к итерации, то есть выполнение в каждой точке условия $|\delta \mathbf{v}^s| < \varepsilon_{rel}^{\mathbf{v}} |\mathbf{v}^{s+1}| + \varepsilon_{abs}^{\mathbf{v}}$, где $\varepsilon_{abs}^{\mathbf{v}}$ и $\varepsilon_{rel}^{\mathbf{v}}$ — абсолютные и относительные погрешности вычисления скорости.

Для обеспечения сквозного счёта на течениях с разрывами к физической вязкости добавляется искусственная [88], отличная от нуля только в области волн сжатия, и полная вязкость имеет вид

$$\hat{q} = \frac{\hat{\zeta}}{\Delta t} \left(\frac{\hat{\rho}}{\rho} - 1 \right) + \hat{\rho} \left(\mu_1 \sqrt{\frac{\hat{P}_i + \hat{P}_e}{\hat{\rho}}} \Delta U + \mu_2 (\Delta U)^2 \right),$$

где $\hat{\zeta}$ вычисляется по формуле (1.6), а

$$\Delta U = \frac{\Delta l}{\Delta t} \left(1 - \frac{\rho}{\hat{\rho}} \right),$$

при $\hat{\rho} > \rho$ и

$$\Delta U = 0$$

в противном случае. Δl здесь — характерный размер ячейки, берущийся с предыдущего временного слоя и вычисляемый как среднее арифметическое длин четырёх больших диагоналей ячейки, μ_1 и μ_2 — безразмерные численные параметры.

Уравнения энергии (3.2) решаются аналогичным образом. Существенное отличие состоит в том, что в силу нелокальности процессов переноса произвести линеаризацию источниковых членов относительно приращения температуры в точке нецелесообразно, хотя и возможно для G_e^{rad} [51], и квадратичная сходимость ньютоновских итераций в общем случае не достигается. Кроме того, в уравнении, получаемом после линеаризации уравнения (3.2) относительно



Рис. 3.2. Блок-схема решения уравнений движения.

приращения температур, матрица имеет меньшее число диагоналей:

$$\sum_{\beta, \bar{m}\bar{l}\bar{n}} A_{\alpha, mln}^{\beta, \bar{m}\bar{l}\bar{n}} \delta T_{\beta, \bar{m}\bar{l}\bar{n}}^s = F_{\alpha, mln}. \quad (3.5)$$

В уравнении (3.5) индексы α и β пробегает значения e и i , а ненулевыми являются лишь элементы, для которых (m, l, n) и $(\bar{m}, \bar{l}, \bar{n})$ определяют соседние по грани ячейки (схема «крест» [81]), то есть матрица A имеет не более чем 28 ненулевых диагоналей. G_e^{las} и G_e^{grad} в зависимости от решаемой задачи можно либо вычислять по значению температуры, полученному с предыдущей итерации, либо вычислять один раз на первой итерации. Одна из возможных блок-схем алгоритма представлена на рис. 3.3. Критерием сходимости итераций служит малость изменения приращения обеих температур от итерации к итерации, то есть выполнение в каждой точке условий $|\delta T_{e,i}| < \varepsilon_{rel}^{e,i} T_{e,i} + \varepsilon_{abs}^{e,i}$, где $\varepsilon_{abs}^{e,i}$ и $\varepsilon_{rel}^{e,i}$ — абсолютные и относительные погрешности вычисления электронной и ионной температур.

3.2. Тестирование решения уравнений движения

Для выявления особенностей используемой конечно-разностной схемы и алгоритма решения уравнений движения было проведено несколько тестов на задачах с известным аналитическим решением. Во всех случаях использовалось уравнение состояния идеального газа с постоянным показателем адиабаты γ . Теплопроводность и перенос излучения в этих тестах не учитывались.

3.2.1. Проблема Римана

Проблема Римана представляет собой задачу о распаде произвольного разрыва. В начальный момент времени в двух областях, разделённых плоскостью, задаются постоянные значения плотности, температуры и скорости. Дальнейшая динамика газа определяется автомодельным решением, которое, в случае идеального газа, находится аналитически [64].

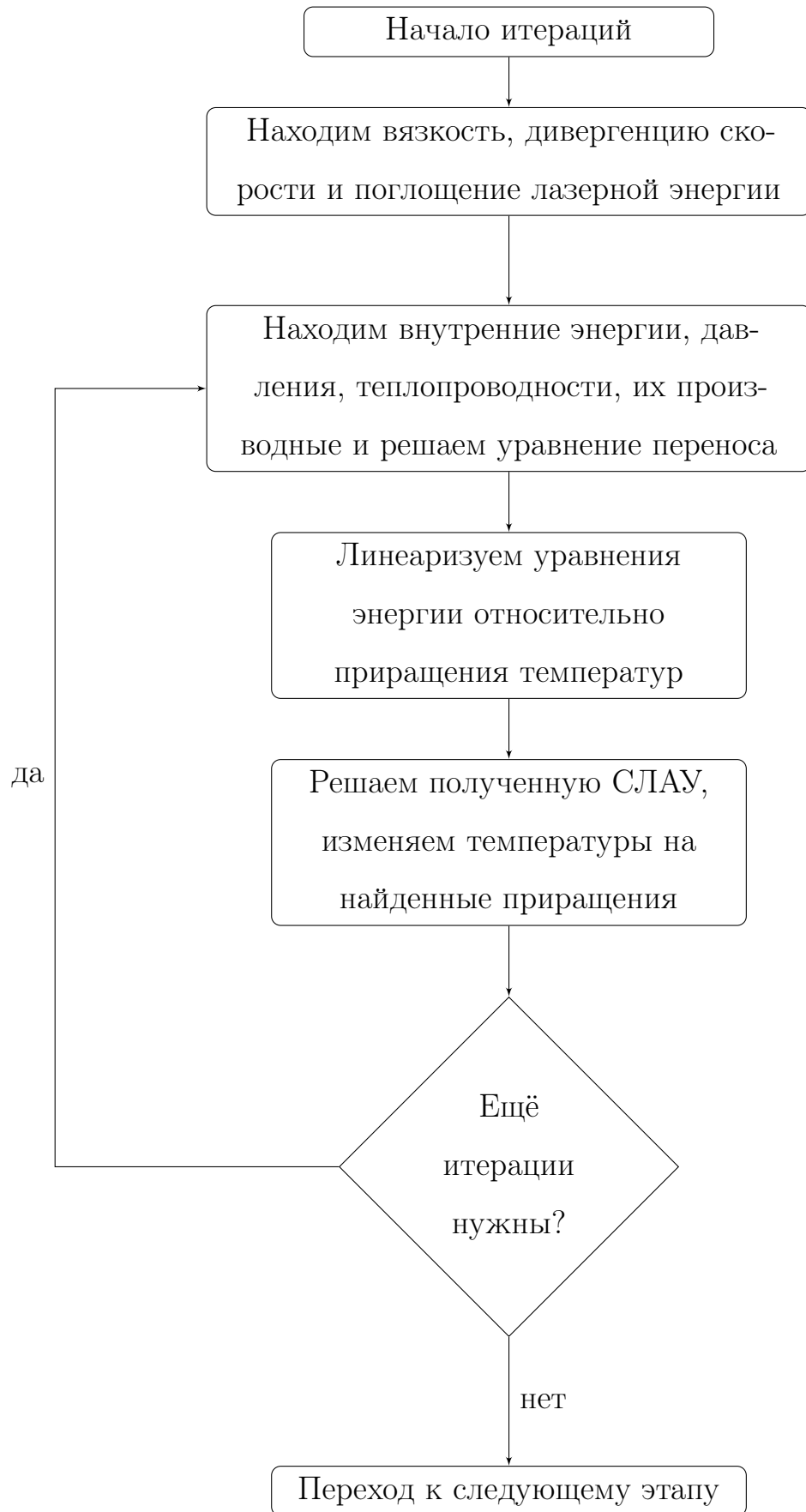


Рис. 3.3. Блок-схема решения уравнений энергии.

Расчёт проводился в одномерном приближении без перестройки сетки. Полагалось $\gamma = 5/3$, в начальный момент граница областей лежала в плоскости $x = 0.025$ см, а значения начальных параметров газа в них $\rho_1 = 0.1$ г/см³, $\rho_2 = 0.1\rho_1$, $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2 = 0$, $T_1 = T_2 = 400$ эВ. Начальный шаг сетки составлял 10^{-4} см в области 1 и 10^{-3} см в области 2. На рис. 3.4 приведено сравнение численного решения с аналитическим на момент 5 нс.

Включение искусственной вязкости приводит к изменению решения: ударная волна размазывается на несколько ячеек, осцилляции за фронтом ударной волны сглаживаются, а на контактном разрыве генерируется энтропия. Для искусственной вязкости в данном расчёте использовались параметры, отвечающие рекомендациям из классической работы [88]: $\mu_1 = 0$, $\mu_2 = 4$. Ширина ячейки по осям y и z составляла 10^{-8} см и практически не давала вклада в величину искусственной вязкости.

Из этого теста можно сделать вывод, что программа адекватно воспроизводит как волну разряжения так и ударную волну, не генерируя избыточной энтропии на фронте ударной волны. Кроме того, как видно из рис. 3.4, даже в отсутствие искусственной вязкости, возмущения плотности за фронтом ударной волны быстро затухают, что свидетельствует о наличии схемной вязкости.

3.2.2. Тест Зальцмана

Тест Зальцмана [89] представляет собой задачу о движении поршня в холодный покоящийся газ, решаемую на изначально неортогональной лагранжевой сетке (см. рис. 3.5, сверху). Поршень вдвигается слева с постоянной скоростью 1 см/мкс, начальная плотность газа 1 г/см³, температура — 10^{-6} эВ, показатель адиабаты 5/3. Аналитическим решением является ударная волна, бегущая направо со скоростью 4/3 см/мкс.

Без использования искусственной вязкости алгоритм ломает сетку уже к моменту 0.05 мкс из-за возникновения неустойчивостей типа «песочные часы» [89]. С учётом квадратичной вязкости ($\mu_1 = 0$, $\mu_2 = 0.4$, ширина ячейки по оси

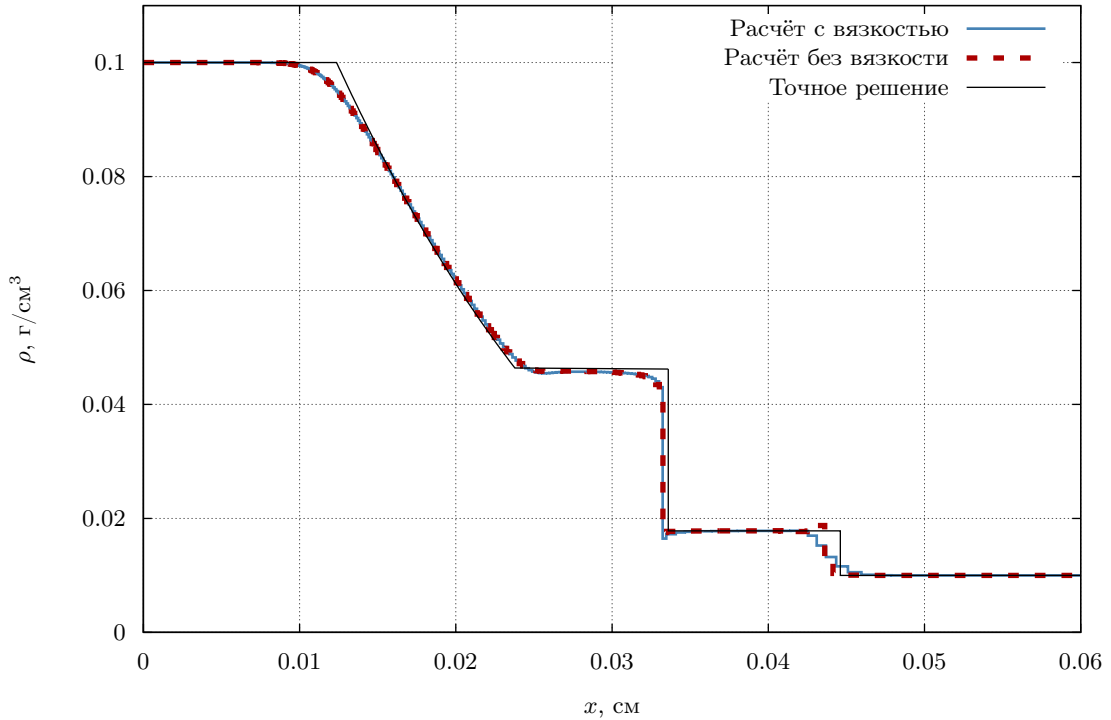


Рис. 3.4. Сравнение численного решения задачи Римана с аналитическим.

$z = 10^{-8}$ см) перехлест сетки возникает лишь после 0.87 мкс, потеря точности из-за дефектов сетки — к моменту 0.94 мкс. Расчётная сетка и распределение плотности на момент 0.6 мкс приведены на рис. 3.5 снизу. Увеличение численной вязкости в 10 раз незначительно увеличивает время до самопересечения сетки, существенно уменьшает разброс плотности относительно аналитического решения, но при этом вызывает заметное увеличение пристеночной зоны.

В целом программа проходит этот тест успешно. Относительно небольшая искусственная вязкость позволяет преодолеть сложности, вызванные неконформностью сетки по отношению к фронту ударной волны.

3.2.3. Сильный точечный взрыв

Задача Седова о сильном точечном взрыве является широко используемым тестом для газодинамических программ. В настоящей работе использовалась следующая её постановка: в начальный момент в некоторую точку однородного идеального газа с показателем адиабаты $\gamma = 7/5$, плотностью $\rho_0 = 1$ г/см³

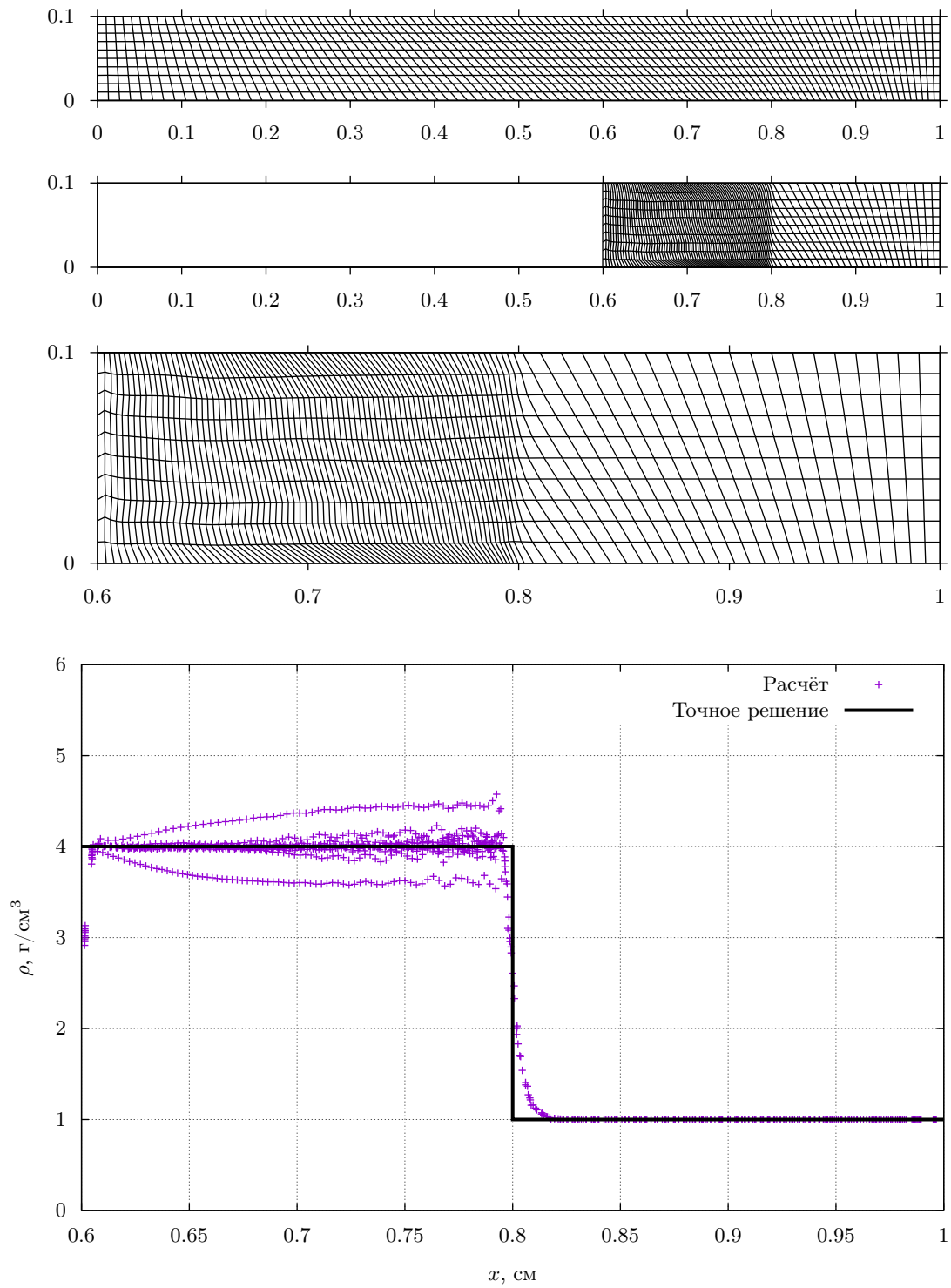


Рис. 3.5. Тест Зальцмана: сверху начальная расчётная сетка, далее — расчётная сетка и распределение плотности на момент 0.6 мкс.

и пренебрежимо малой температурой (10^{-9} эВ) было вложено фиксированное количество энергии $E = 85$ кДж. Дальнейшая эволюция распределений температуры и плотности описывается автомодельным решением [90], причём расстояние от эпицентра до фронта ударной волны изменяется по закону

$$R(t) = 1.033 \cdot \left(\frac{Et^2}{\rho_0} \right)^{1/5} = 1 \text{ см} \cdot \left(\frac{t}{1 \text{ мкс}} \right)^{2/5}.$$

В расчёте энергия равномерно вкладывалась в куб $3 \times 3 \times 3$ ячейки в центре области $1.2 \times 1.2 \times 1.2$ см, покрытой равномерной сеткой $51 \times 51 \times 51$ ячеек. На рис. 3.6 и 3.7 для двух вариантов расчёта отображены распределения плотности и разностной сетки на момент 1 мкс в срезе через эпицентр плоскостью $y = \text{const}$, и представлено сравнение расчётной зависимости плотности от расстояния до эпицентра с точным решением.

Из-за численной диффузии в эйлеровом расчёте (рис. 3.6) фронт ударной волны существенно размывается, а максимальная степень сжатия меньше в два раза, чем следует из точного решения. В лагранжевом расчёте (рис. 3.7) численная диффузия отсутствует, размытие фронта ударной волны вызвано искусственной вязкостью, а его смещение относительно аналитического решения — конечным размером области энерговложения. Точки, выбивающиеся из общей зависимости, получены в ячейках с сильно (вплоть до перехлёста) деформированной сеткой. Увеличение искусственной вязкости несколько улучшает качество сетки, но при этом приводит к менее точным результатам в области, где распространение ударной волны конформно сетке, и заметно замедляет расчёт из-за увеличения числа обусловленности матрицы в системе уравнений (3.4).

На рис. 3.8 показаны результаты расчёта со следующей перестройкой сетки:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{r}} &= \mathbf{r}_0 \left(\frac{R(t) + h}{|\mathbf{r}_0|} \right)^{5/6}, & \text{при } |\mathbf{r}_0| < R(t) + h, \\ \tilde{\mathbf{r}} &= \mathbf{r}_0, & \text{при } |\mathbf{r}_0| \geq R(t) + h, \end{aligned}$$

где \mathbf{r}_0 — положение узла в момент времени 0, а h — начальный шаг сетки.

Заметно, что нарушение сферической симметрии в этом варианте сильнее, чем в обоих предыдущих.

Из результатов этого теста можно сделать вывод, что и в «эйлеровом», и «лагранжевом» вариантах программа хорошо держит симметрию, а скорость распространения ударной волны согласуется с точным решением и не зависит от конфигурации сетки. В «смешанном» варианте сферическая симметрия сохраняется несколько хуже, что вызвано наличием на неортогональной сетке заметных диагональных перетоков массы, энергии и импульса, которые в настоящей методике не учитываются. Стоит отметить, что применение линейной интерполяции для вычисления скоростей после перестройки сетки не только приводит к дисбалансу кинетической энергии, но и вызывает намного более существенные нарушения симметрии, чем используемая методика [33].

3.2.4. Неустойчивость Рэля-Тейлора

Моделирование неустойчивость Рэля-Тейлора, то есть неустойчивости границы раздела двух сред разной плотности в постоянном поле тяжести, проводилось в двумерной постановке. Основные расчётные параметры были взяты из [91], но, в отличие от этой статьи, сила тяжести была не имитирована нестационарным нагревом, а добавлена явным образом в правую часть уравнения (3.1). Моделирование велось в двумерной плоской области 1×2 см с граничными условиями отражения на изначально равномерной сетке 40×90 ячеек. Граница раздела сред с начальными плотностями 0.1 и 1 г/см³ находилась по середине области. Ускорение свободного падения g равнялось 1 см/мкс² и было направлено противоположно оси z . Показатель адиабаты в уравнений состояния вещества был взят равным 2 , а начальная температура выбиралась исходя из критерия равновесия $\frac{\partial P}{\partial z} = -g$. Начальное возмущение компонент скорости зада-

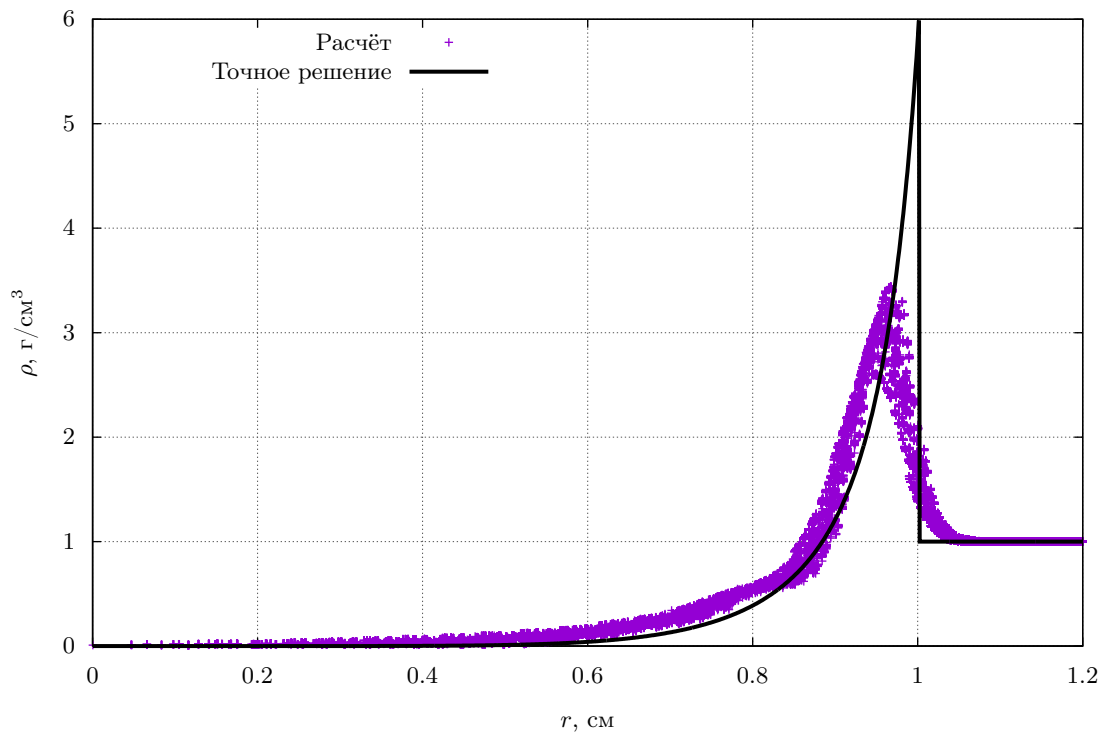
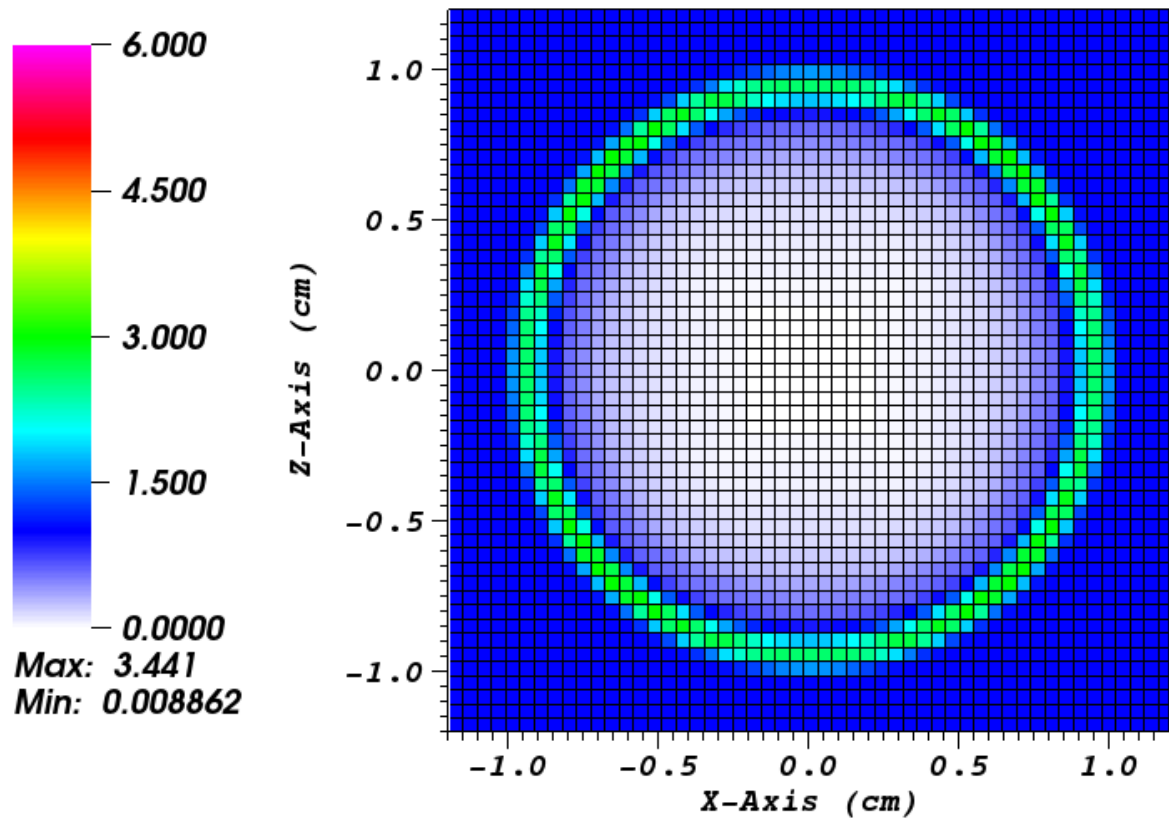


Рис. 3.6. Расчётное распределение плотности в задаче о точечном взрыве на момент 1 мкс. Эйлерав расчёт без искусственной вязкости.

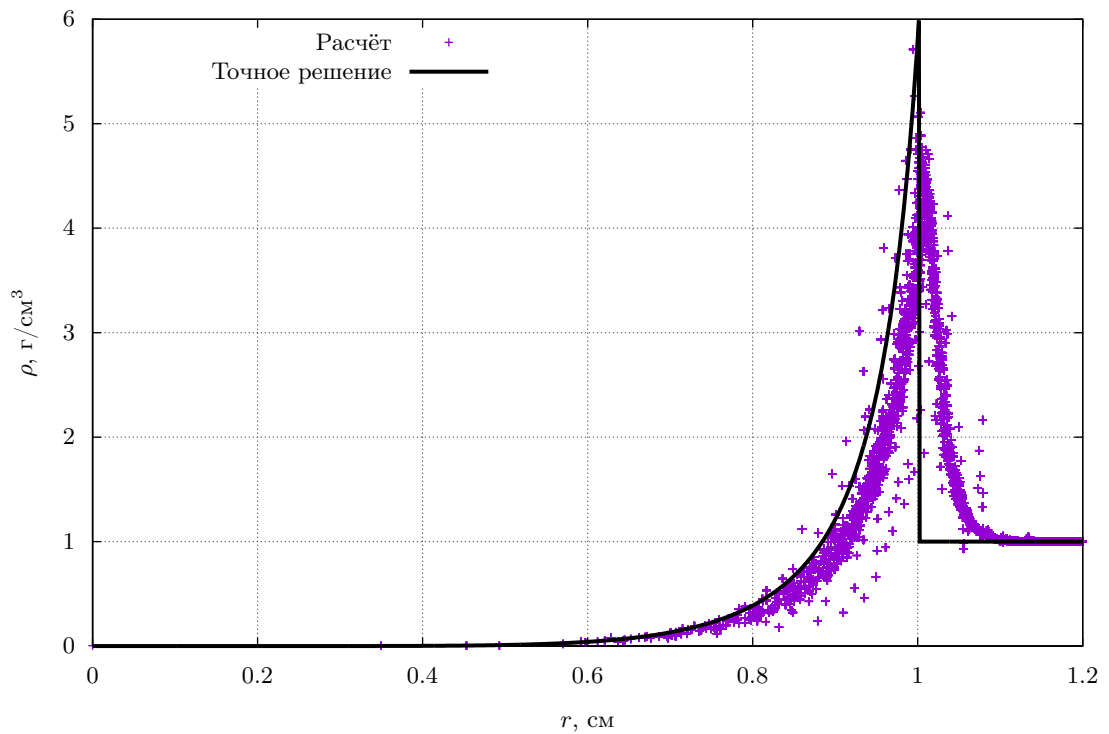
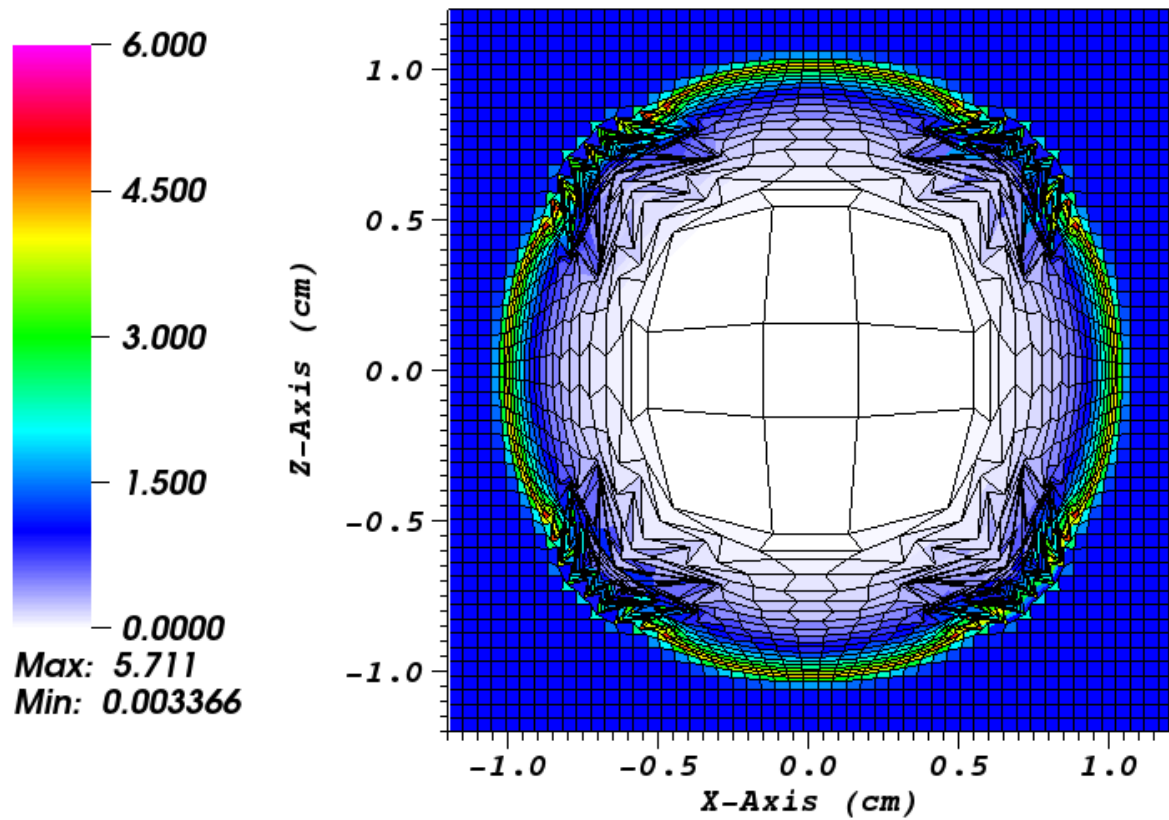


Рис. 3.7. Расчётное распределение плотности в задаче о точечном взрыве на момент 1 мкс. Лагранжев расчёт, $\mu_1 = 0$, $\mu_2 = 0.2$.

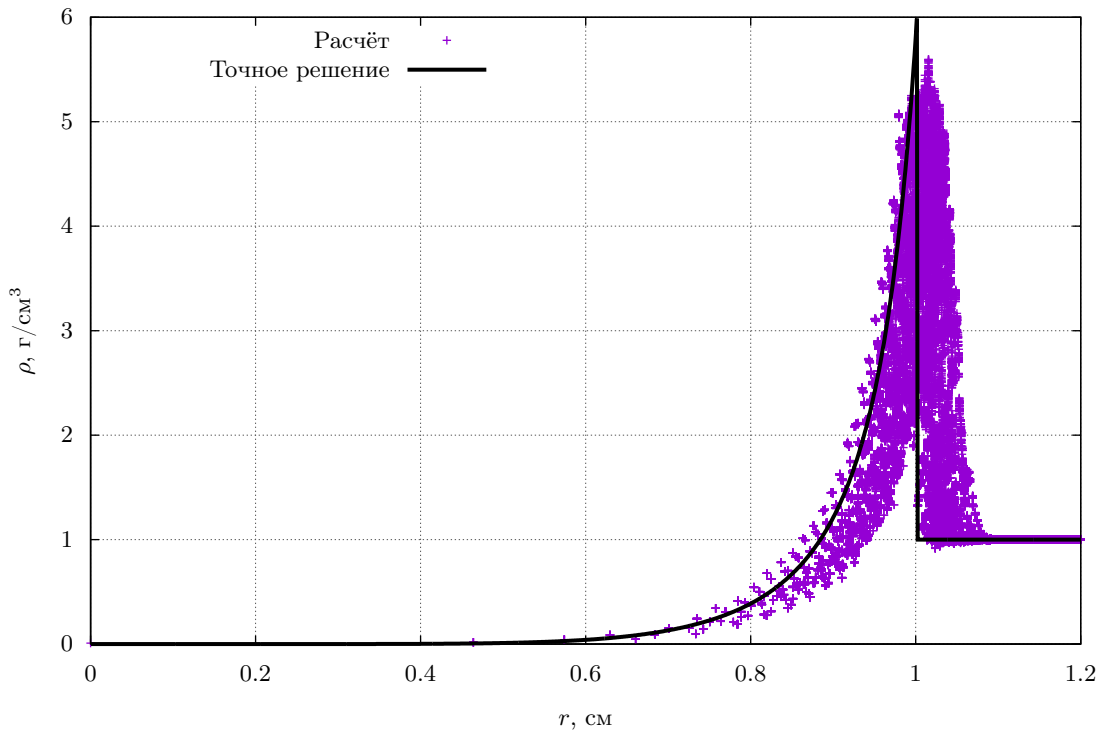
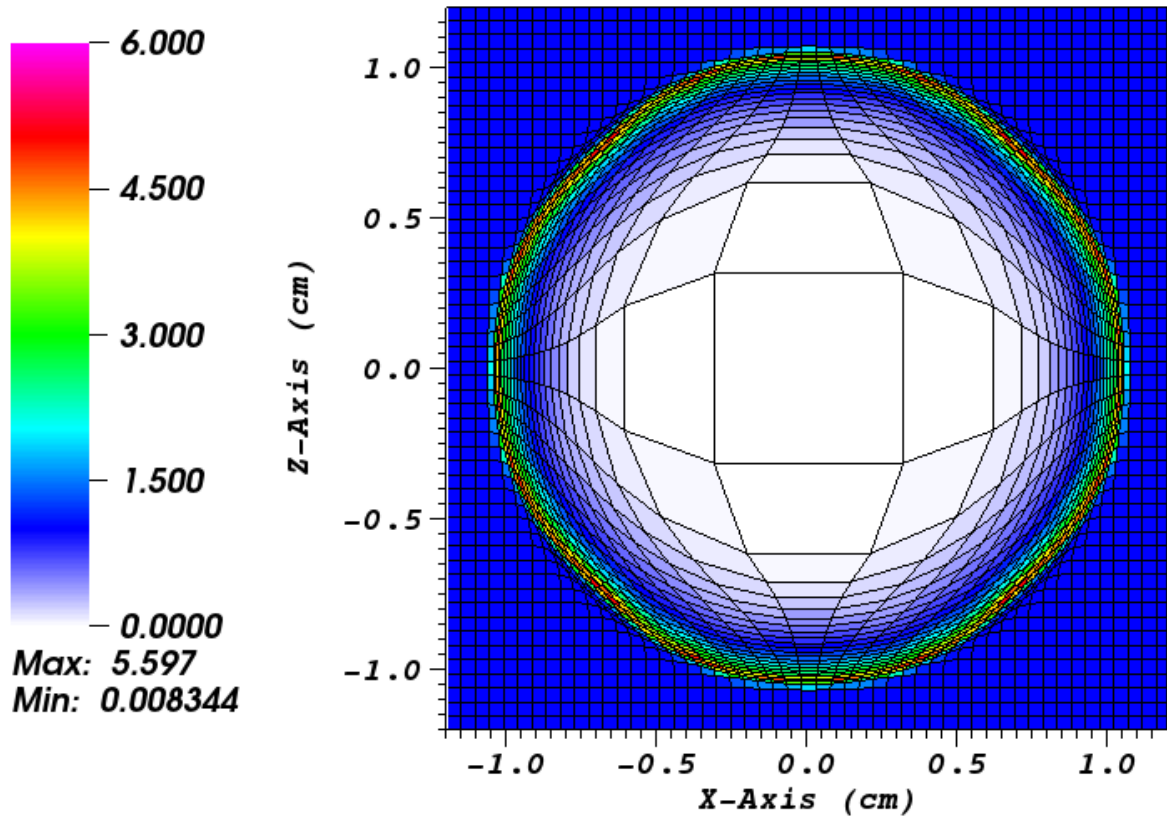


Рис. 3.8. Расчётное распределение плотности в задаче о точечном взрыве на момент 1 мкс. Расчёт с заданной перестройкой сетки, $\mu_1 = 0$, $\mu_2 = 0.2$.

валось выражениями

$$u(t = 0, x, z) = a_0 \cos(kx) \exp(-k|z|),$$

$$v(t = 0, x, z) = a_0 \sin(kx) \operatorname{sgn}(z) \exp(-k|z|),$$

где $a_0 = 10^{-3}$ см/мкс — амплитуда, а $k = 2\pi$ см $^{-1}$ — пространственная частота возмущения.

Аналогично [91] рассматривалась зависимость от времени инкремента нарастания основной моды неустойчивости по следующим Фурье-компонентам скорости и координаты границы сред:

$$a_z(t) = 2 \int_0^1 z(t, x) \cos(kx) dx,$$

$$a_v(t) = 2 \int_0^1 v(t, x) \cos(kx) dx.$$

Интегралы здесь берутся кусочно-аналитически вдоль границы раздела сред, поэтому нет необходимости в центрировании, использованном в [91]. На рис. 3.9 представлены графики $\frac{d \ln a_z}{dt}$ и $\frac{d \ln a_v}{dt}$. Аналитическое значение инкремента неустойчивости на линейной стадии $\omega_{RT} = \sqrt{\frac{9}{11} gk} = 2.2673$ мкс $^{-1}$ отличается от расчётного на 8%.

Сравнивая результаты расчёта с данными [91], где в лагранжевом расчёте на той же сетке удалось достигнуть согласия с аналитическим значением в пределах 3%, можно сделать вывод, что программный комплекс 3DLINE моделирует неустойчивость Рэлея-Тейлора качественно и количественно верно, хотя и с несколько меньшей точностью, чем CAVEAT [52] или созданный на его основе RALEF [51].

3.3. Тестирование решения уравнений энергии

Качество используемой схемы для решения уравнения теплопроводности исследовалось на примере задачи распространения тепловой волны по холодно-

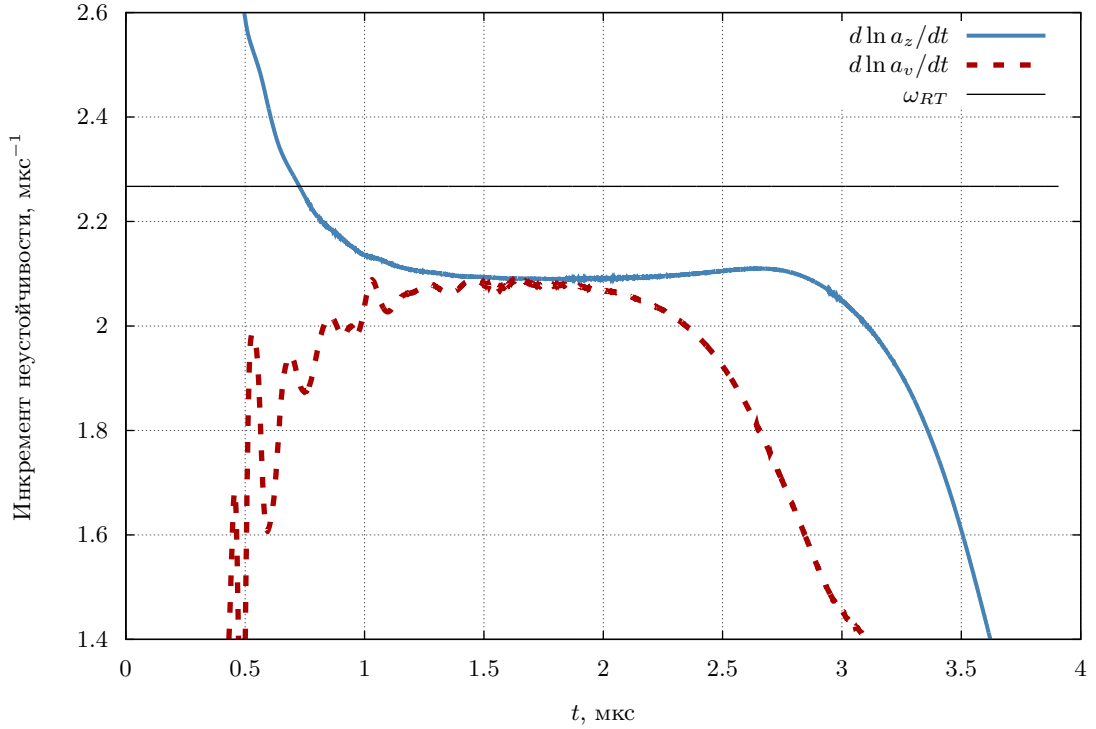


Рис. 3.9. Зависимость инкремента нарастания неустойчивости от времени.

му покоящемуся веществу с коэффициентом теплопроводности, зависящим от температуры степенным образом: $\kappa(T) = \kappa_0(T/T_0)^n$. В этих тестах движение вещества не учитывалось, решалось только уравнение энергии (3.2) в однотемпературном приближении. Значение плотности ρ во всей области полагалось фиксированным, а удельная энергия — прямо пропорциональной температуре: $\varepsilon = c_V T$. Также полагалось $T_0 = \rho = c_V = \kappa_0 = 1$, значение n выбиралось в каждом конкретном тесте своё. Начальная температура во всей области бралась равной нулю.

3.3.1. Нелинейная плоская тепловая волна

В плоском одномерном тесте на границе $z = 0$ задавалась фиксированная температура $T_0 = 1$, на остальных границах полагался равным нулю поток тепла. В такой постановке уравнение теплопроводности заменой

$$\xi = \sqrt{\frac{\rho c_V}{\kappa_0}} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \frac{z}{\sqrt{t}},$$

$$\tau = T/T_0$$

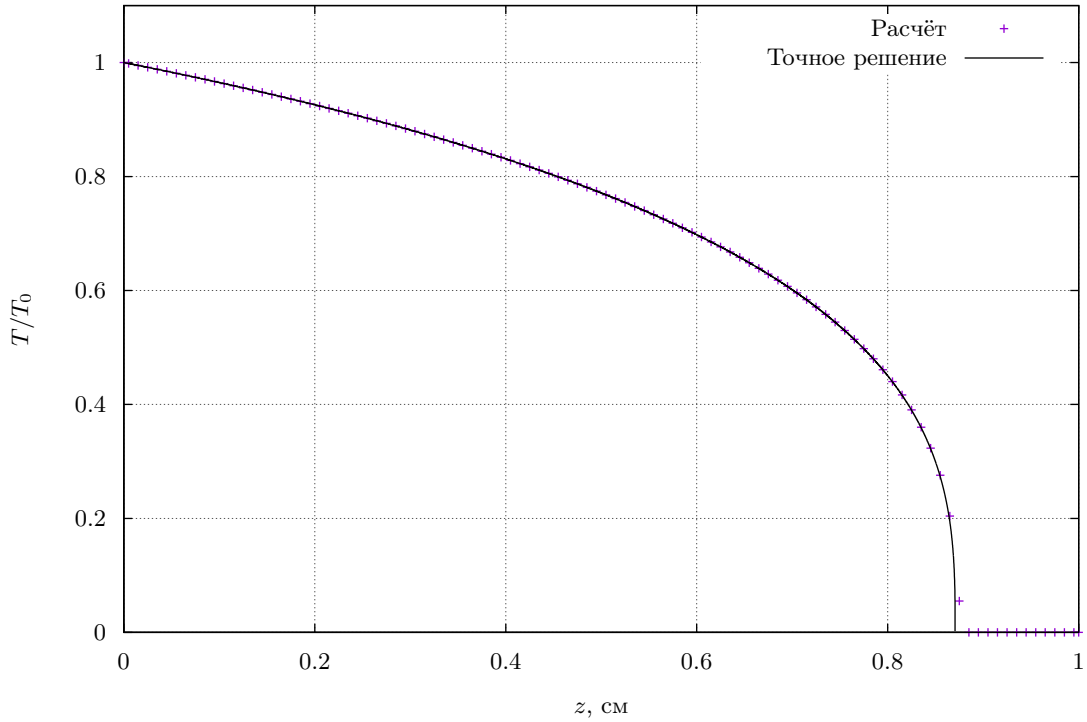


Рис. 3.10. Распределение температуры в плоской нелинейной волне.

приводится к автомодельному виду [92]:

$$\frac{d^2\tau^{n+1}}{d\xi^2} + \xi \frac{d\tau}{d\xi} = 0$$

с граничными условиями $\tau(0) = 1$ на левой границе и $\tau = \tau^n \frac{d\tau}{d\xi} = 0$ на правой, положение которой определяется при решении уравнения. Сравнение распределения температуры, полученного в расчёте, с точным решением, полученным из автомодельного уравнения, приведено на рис. 3.10. В расчёте полагалось $n = 3$, график приведен на момент $t = 1$. Использовалась сетка из 100 ячеек, равномерно покрывающая область $0 \leq z \leq 1$ см. Результат получен за 9583 шага по времени, что несколько меньше, чем в [92] (11821), при сравнимой погрешности.

Таким образом, программа воспроизводит автомодельное решение, но сделать однозначного вывода о преимуществе неявной схемы по сравнению с полуявной методикой нельзя.

3.3.2. Нелинейная тепловая волна от мгновенного точечного источника

Этот тест проводился на трёхмерной регулярной сетке $40 \times 40 \times 40$ ячеек в кубе $1 \times 1 \times 1$ см, аналогично [92]. На всех границах области ставились условия нулевого потока, в начальный момент времени в одну (угловую) ячейку была вложена фиксированная энергия $E_0 = 0.125$. Задача распространения нелинейной тепловой волны в такой постановке имеет аналитическое решение:

$$T(r, t) = T_c(t) \left(1 - \frac{r^2}{R(t)^2} \right)^{1/n},$$

где r — расстояние до точки вложения температуры. Аналитические выражения для температуры в центре $T_c(t)$ и радиуса фронта тепловой волны $R(t)$ приведены в [64].

На рис. 3.11 приведено сравнение с точным решением распределения температуры, полученного в расчёте для $n = 2$ на момент $t = 0.3$. Результат получен за 313 шагов, что существенно меньше, чем в методике [92], где для сохранения устойчивости при изменении температуры на семь порядков полуявной схеме потребовалось 5558 шагов.

По результатам тестов можно заключить, что схема адекватно описывает распространение тепла в среде с коэффициентом теплопроводности, зависящим от температуры нелинейно. Сферическая симметрия решения хорошо воспроизводится даже на ортогональной сетке. Число шагов, требуемых для достижения желаемой точности, существенно меньше, чем требуется в полуявной методике [92]. В реальных задачах использование неявной схемы целесообразно, если ограничение на шаг, вызванное требованием устойчивости алгоритма решения уравнения теплопроводности, существенно жёстче, чем накладываемое требованиями к точности аппроксимации.

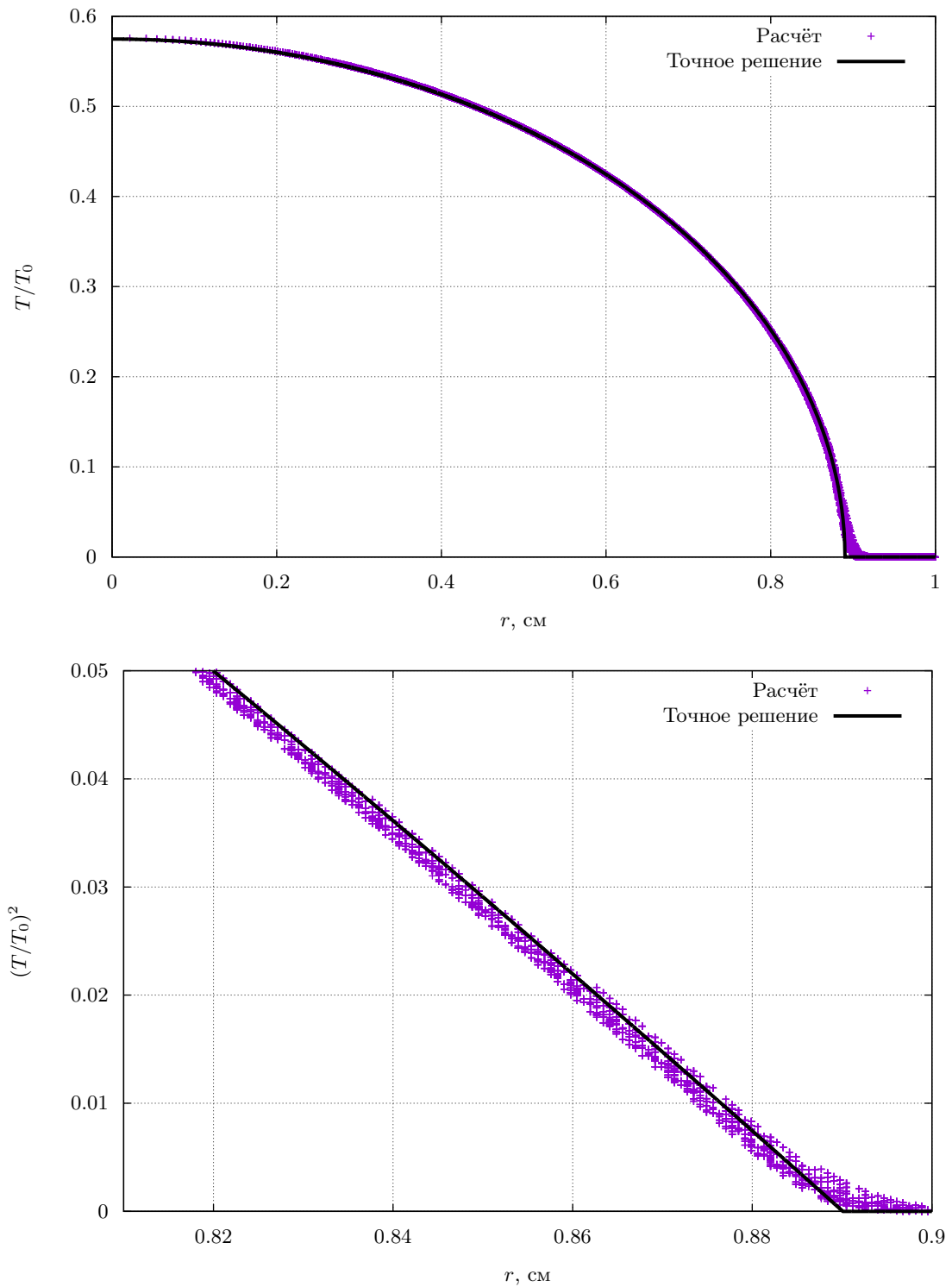


Рис. 3.11. Распределение температуры в сферической нелинейной волне. Сверху — во всей области, снизу — радиальная зависимость квадрата температуры вблизи фронта.

3.4. Сравнение методов расчёта переноса излучения на модельной задаче

Рассматривалась задача о распространении тепловой волны от стенки, нагретой до температуры $T_0 = 100$ эВ, в холодном веществе плотностью $\rho = 10^{-4}$ г/см³ с уравнением состояния идеального газа без учёта затрат на ионизацию: $c_V = \frac{3}{2}R\frac{Z_0 + 1}{A}$, где $R = 8.31$ Дж·моль⁻¹·К — газовая постоянная, $Z_0 = 13$ — средняя ионизация, $A = 119$ г·моль⁻¹ — атомная масса. Параметры этой задачи близки к типичным параметрам оловянной лазерной плазмы. Данная задача моделировалась в нескольких различных физических приближениях на равномерной сетке из 100 ячеек с шагом 3 мкм.

В приближении лучистой теплопроводности перенос излучения непосредственно не моделировался, но учитывался за счёт коэффициента теплопроводности $\kappa = \frac{16}{3}\sigma lT^3$, где $\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8}$ Вт·м⁻²·К⁻⁴ — постоянная Стефана-Больцмана, l — пробег излучения, который варьировался [64].

В другой постановке теплопроводность была отключена, но при этом рассчитывался перенос излучения в одногрупповом приближении с оптическими коэффициентами $\chi^R = \chi^P = 1/l$ и $j = 4\sigma\chi^P T^4$. На границе $z = 0$ полагалась известная температура (вернее, эквивалентные ей равновесные поле или поток излучения), на остальных границах ставилось условие полного отражения излучения.

В приближении лучистой теплопроводности согласие с аналитическим решением не хуже, чем для расчёта с модельными параметрами (см. рис. 3.10). Интересно сравнить распределения температуры, полученные в различных приближениях для различных величин пробегов (рис. 3.12 – 3.14). Как и ожидалось, учёт переноса излучения за счёт пролётных фотонов приводит к появлению экспоненциально спадающего хвоста перед фронтом тепловой волны [64], но за фронтом распределения температуры, полученные в приближениях лучистой теплопроводности и диффузионного переноса, близки. Расчёт излучения

по характеристикам хорошо согласуется с диффузионным приближением лишь для среднего значения пробега ($l = 10$ мкм, рис. 3.13), но для двух крайних согласие существенно хуже. Для $l = 100$ мкм (рис. 3.12) это объясняется физическими причинами: пока расстояние от нагретой стенки до фронта тепловой волны сравнимо с пробегами фотонов, излучение существенно анизотропно, и диффузионное приближение неприменимо. Для $l = 1$ мкм (рис. 3.14) причина заключается в том, что использованная простейшая реализация характеристического метода обладает первым порядком точности по пространству и не обеспечивает выхода на диффузионный предел на сетке, содержащей оптически толстые ячейки. Чтобы показать, что источник проблемы заключается именно в этом, было проведено моделирование с переносом по характеристикам на более подробной сетке с шагом 0.3 мкм, результаты которого (чёрная кривая на рис. 3.14) отлично согласуются с результатами, полученными в диффузионном приближении на грубой сетке. Численная методика решения уравнения переноса для плоской задачи, обеспечивающая выход на диффузионный предел даже на сетке, содержащей оптически толстые ячейки, описана в классической работе [93], но уже для двумерной сетки произвольного вида подобные схемы не построены.

Таким образом, в случае, когда сетка содержит оптически толстые ячейки, диффузионное приближение описывает интегральный поток тепла более адекватно, чем использованная реализация характеристического метода.

3.5. Исследование сходимости метода расчёта поглощения лазерного излучения

Для уточнения свойств используемого метода расчёта поглощения лазерного излучения и выяснения его порядка сходимости по шагу пространственной сетки было проведено несколько тестов.

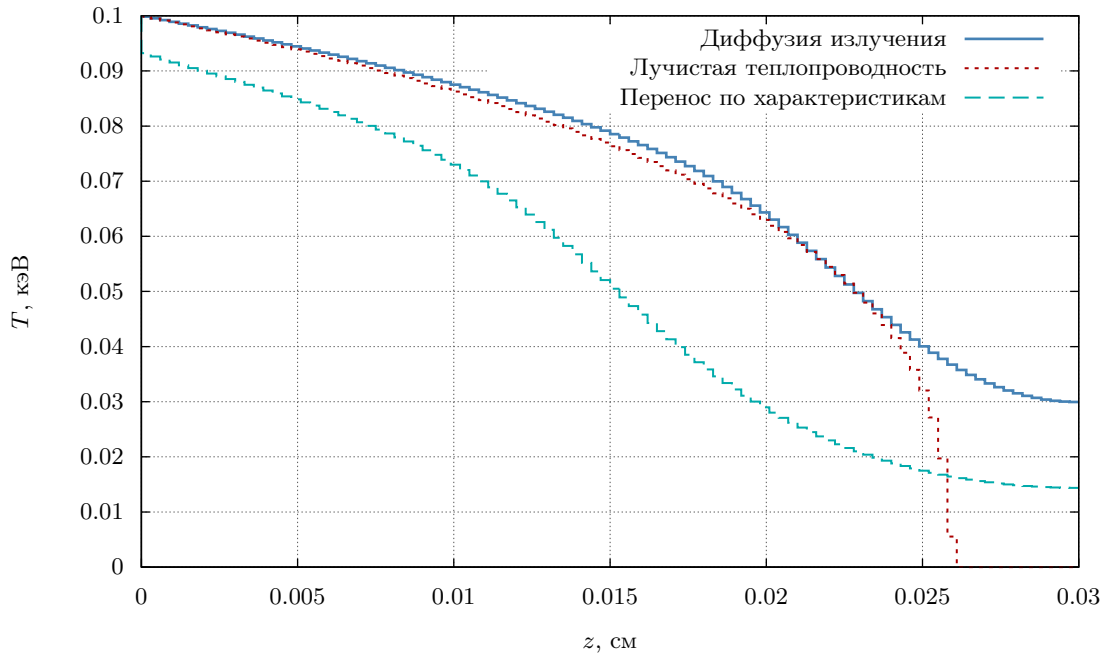


Рис. 3.12. Распределение температуры на момент 270 фс, полученное в различных приближениях для пробега $l = 100$ мкм. Различие результатов обусловлено неприменимостью диффузионного приближения.

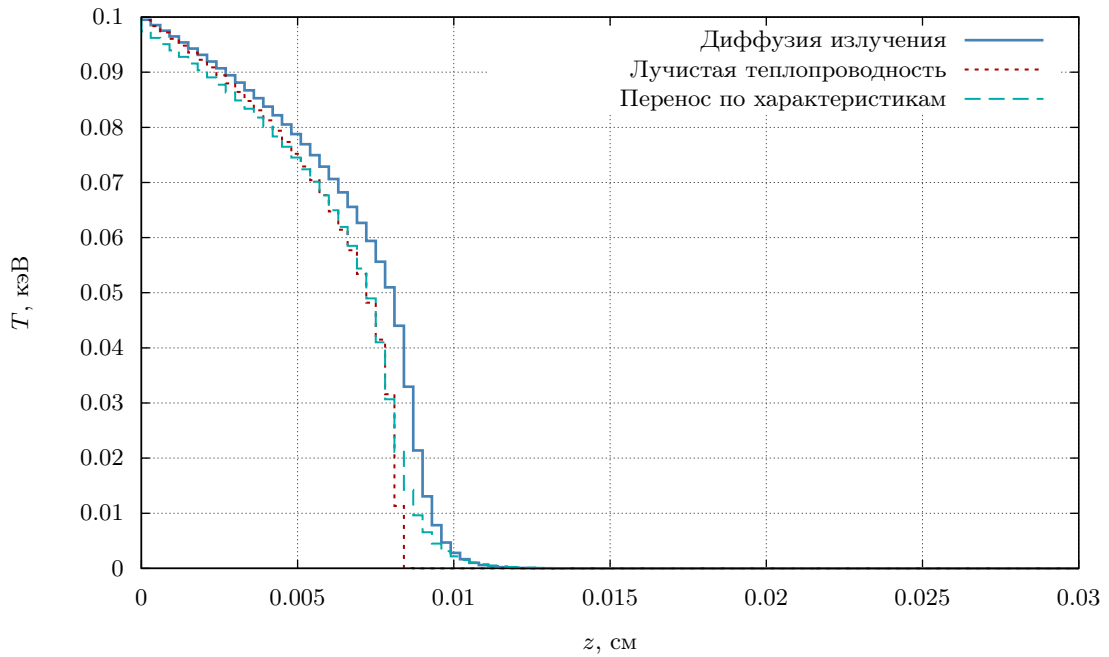


Рис. 3.13. Распределение температуры на момент 270 фс, полученное в различных приближениях для пробега $l = 10$ мкм. Результаты хорошо согласуются между собой.

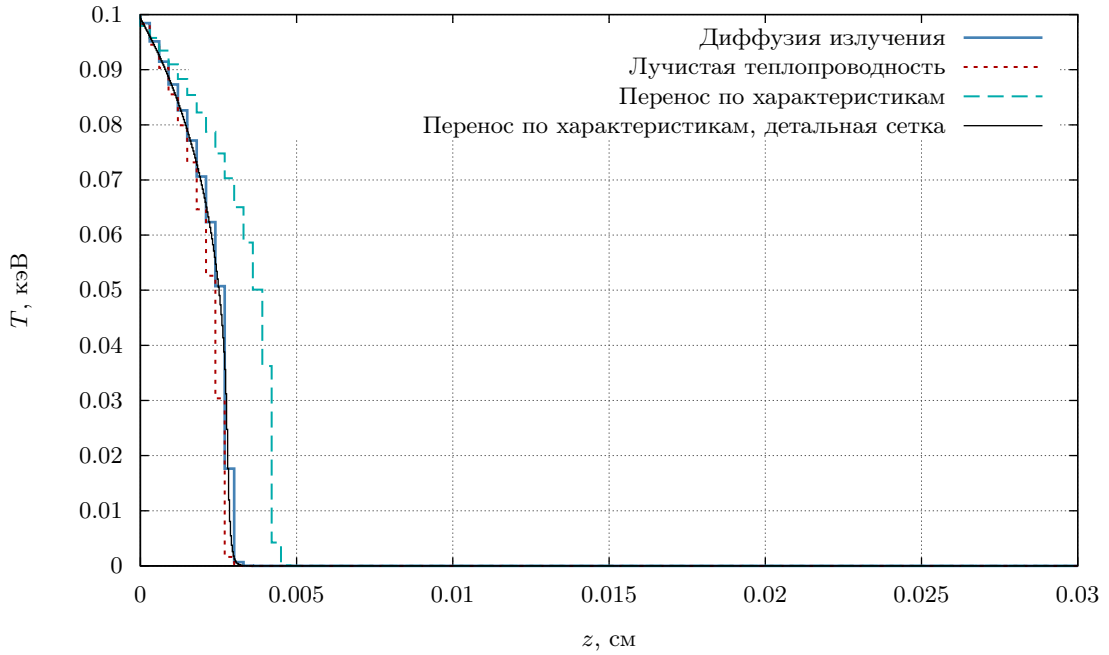


Рис. 3.14. Распределение температуры на момент 270 фс, полученное в различных приближениях для пробег $l = 1$ мкм. Различие результатов обусловлено отсутствием сходимости использованного алгоритма расчёта переноса излучения методом характеристик на сетке, содержащей оптически толстые ячейки.

3.5.1. Рефракция на сфере

Этот тест позволяет определить порядок точности вычисления траектории луча в использованной модели геометрической оптики. Было задано сферически симметричное распределение показателя преломления

$$n^2 = \max\left(\frac{\mathbf{r}^2}{r_0^2}, 1\right),$$

где $r_0 = 1$ см — радиус сферы. На это распределение из $z = +\infty$ падает параллельный пучок лучей. Вывод аналитического решения для траектории луча в такой постановке приведён в [44]. В цилиндрических координатах (ϱ, φ, z) для лучей, проходящих через сферу $|\mathbf{r}| = r_0$, оно имеет вид

$$\begin{aligned}\varrho(\tau) &= \varrho_0 \operatorname{ch}\left(\frac{\tau}{r_0}\right), \\ z(\tau) &= z_0 \operatorname{ch}\left(\frac{\tau}{r_0}\right) - r_0 \operatorname{sh}\left(\frac{\tau}{r_0}\right), \\ \varphi(\tau) &= \varphi_0,\end{aligned}$$

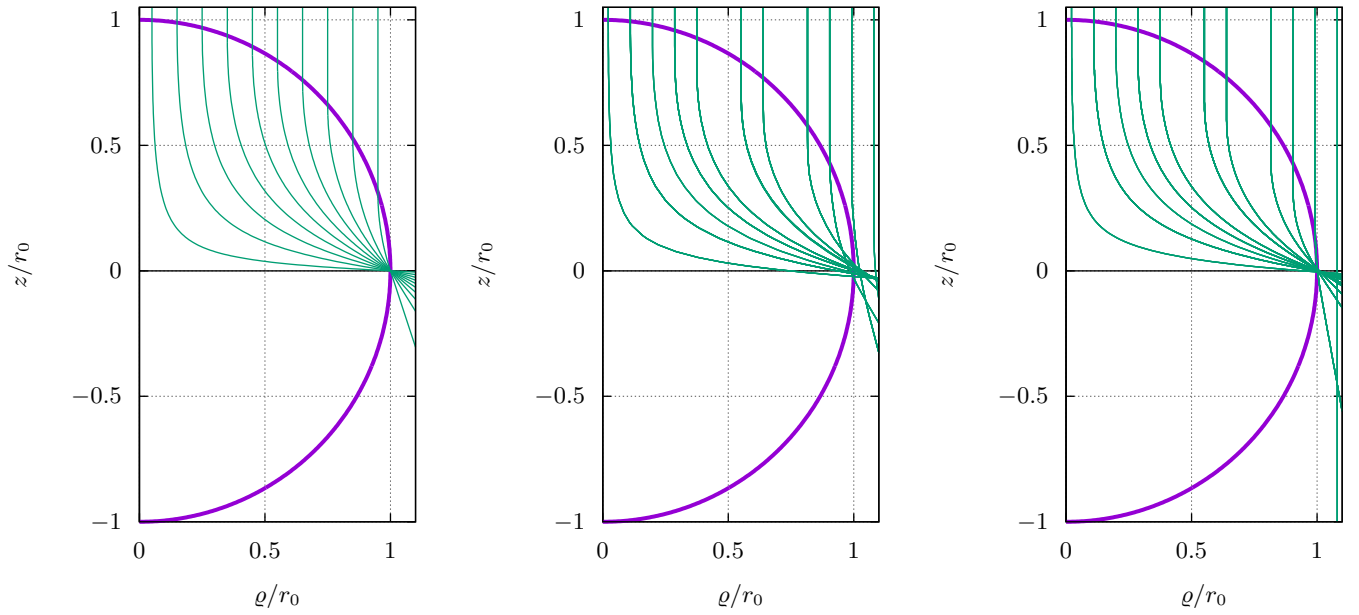


Рис. 3.15. Решение задачи рефракции на сфере в приближении геометрической оптики: аналитическое и численное для $N = 41$ и $N = 201$. Траектории в численном решении нарисованы жирно из-за слияния на графике лучей с различными φ_0 .

где $(\varrho_0, \varphi_0, z_0)$ — координаты точки входа луча в сферу, а параметр τ — «время на луче» из системы 1.24 равно нулю в момент входа луча в сферу и равно τ_{out} в момент выхода луча из сферы. В момент выхода луча из сферы

$$\tau_{out} = r_0 \operatorname{arcch} \left(\frac{r_0}{\varrho_0} \right) = r_0 \operatorname{arsch} \left(\frac{z_0}{\varrho_0} \right) = r_0 \ln \left(\frac{z_0 + r_0}{\varrho_0} \right)$$

луч проходит через точку $(r_0, \varphi_0, 0)$ независимо от значения ϱ_0 : в задаче наблюдается фокусировка параллельного пучка в кольцо (см. рис. 3.15).

Моделирование проводилось в области $-1.1 \leq x, y, z \leq 1.1$, покрытой ортогональной сеткой $N \times N \times N$ ячеек (N изменяется от 11 до 401). Значения градиентов вычислялись по центрам ячеек. В целях исследования сходимости, сетка по лучам использовалась фиксированная: 10×10 лучей, равномерно покрывающих верхнюю грань расчётной области.

Отклонение расчётной траектории каждого луча от аналитической изме-

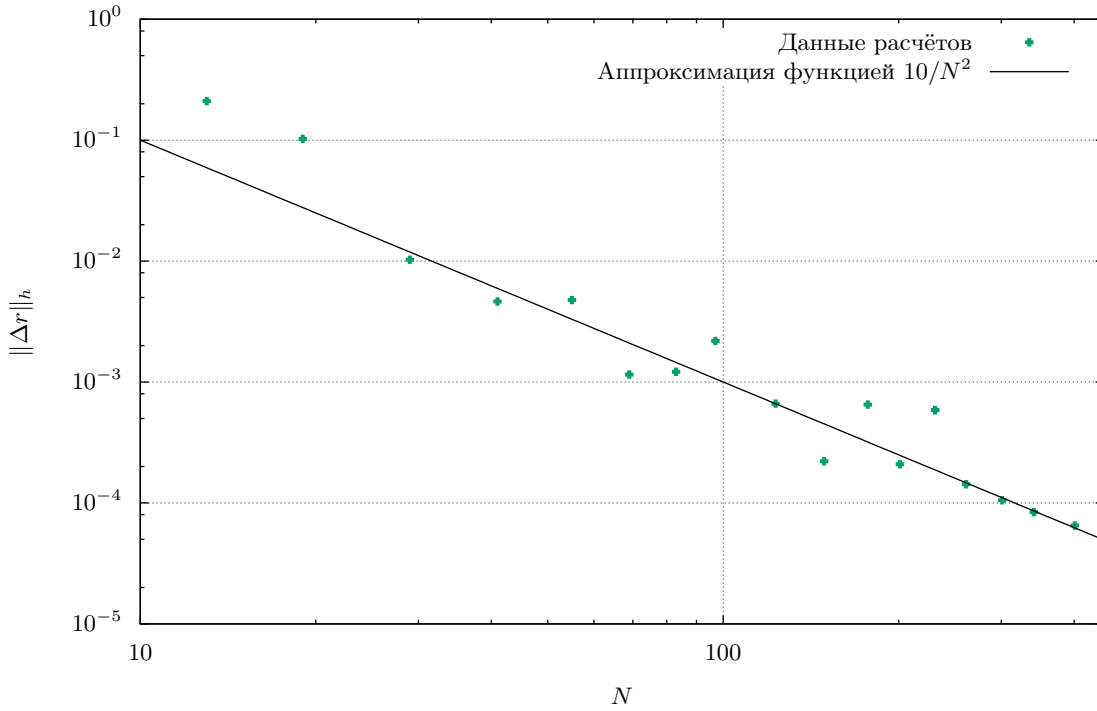


Рис. 3.16. Интегральная невязка решения задачи рефракции на сфере в приближении геометрической оптики.

рялось в норме

$$\|\Delta r\|_h = \sqrt{\frac{1}{\tau_{out}} \sum_i \Delta \tau_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{analit}(\tau_i))^2}.$$

Здесь $\Delta \tau_i = \tau_i - \tau_{i-1}$ — изменение τ в ячейке, \mathbf{r}_i — координата выхода луча из ячейки, \mathbf{r}_{analit} — аналитически вычисленная траектория, i нумерует ячейки вдоль луча. Сумма берётся только в ячейках, для которых $n^2 < 1$.

Результаты, представленные на рис. 3.16, свидетельствуют о квадратичной сходимости. Это соответствует результатам работ [31], [29], в которых описывался метод, аналогичный нашему в области применимости геометрической оптики. Немонотонность сходимости на малых N в настоящих расчётах объясняется эффектом муара. Некорректный вывод о линейной сходимости в работе [44] был сделан вследствие погрешности вычисления τ_i : условие $\tau = 0$ ставилось в момент вхождения луча в ячейку с $n^2 < 1$, при этом точка вхождения в сферу $|\mathbf{r}| = r_0$ устанавливалась лишь с точностью порядка шага сетки. Как следствие, при вычислении \mathbf{r}_{analit} имелась погрешность порядка $O(1/N)$, на фоне которой

погрешность вычисления траектории луча терялась. В настоящей работе на луче в начальной точке (x_s, y_s, z_s) ставилось условие $\tau = \sqrt{r_0^2 - x_s^2 - y_s^2} - z_s$, обеспечивающее равенство τ нулю при пересечении со сферой с погрешностью порядка $O(1/N^3)$.

3.5.2. Отражение от поверхности металла

Основным достоинством гибридной модели лазерного излучения является возможность моделирования с «холодного старта», то есть с твёрдой или жидкой мишени, имеющей поверхность, на которой диэлектрическая проницаемость испытывает скачок. Коэффициент отражения от такой поверхности определяется формулами Френеля. Покажем, что наша модель выходит на эти формулы на сетке, корректно описывающей поверхность мишени.

Для этого проведём расчёт наклонного падения s -поляризованного пучка с длиной волны $\lambda = 1.064$ мкм из вакуума на поверхность металла с диэлектрической проницаемостью

$$\varepsilon_\omega = (4.0 + 8.4 \cdot i)^2,$$

соответствующей экспериментальной диэлектрической проницаемости олова [78]. Расчёт проводится в кубе $10 \times 10 \times 10$ мкм, покрытом сеткой $100 \times 100 \times 100$ ячеек. Половина куба заполнена металлом, вторая половина — вакуум. Проводится трассировка квадратного пучка из 40×40 лучей, падающего на квадрат 4×4 мкм под углом θ . Расчёт проводится в двух вариантах: на регулярной сетке и на сетке, x и z координаты узлов которой случайным образом смещены на $\pm 20\%$ шага регулярной сетки. Типичное распределение лазерной интенсивности приведено на графиках 3.17.

На ортогональной сетке программа точно воспроизводит соотношения Френеля для доли отражённого и поглощённого излучения, в то время как на случайным образом возмущённой сетке наблюдается некоторое отклонение от точного результата в интегральной поглощённой энергии и существенное откло-

нение в траекториях лучей (диффузное рассеяние пучка). Причина этого заключается в том, что из-за искажения сетки численно найденный градиент диэлектрической проницаемости не ортогонален поверхности металла. Изменение методики вычисления градиента может подавить или усилить этот эффект, но в практических расчётах рецепт один — следить за тем, чтобы сетка правильно описывала структуру вещества вблизи разрыва диэлектрической проницаемости.

3.6. Структура распараллеливания алгоритмов и исследование эффективности распараллеливания на гибридных вычислительных кластерах

В качестве основного способа обеспечения работы кода в параллельном режим был реализован гибридный подход (MPI-OpenMP) [87]. При этом в рамках модели с общей памятью посредством OpenMP ускорились все вычисления, в том числе заполнение матриц и решение матричных уравнений (2.11), (3.4) и (3.5). Поскольку в выбранных методах обращения матриц используются явные итерации, возможность их параллельного вычисления ограничивается лишь техническими особенностями используемой ЭВМ. Так, посредством использования 16 вычислительных ядер на одном узле удалось добиться ускорения вычислений в 7 раз (см. рис. 3.18), при этом дальнейшего увеличения скорости счёта при увеличении числа ядер не происходило из-за ограничений на скорость передачи информации от оперативной памяти вычислительному узлу. Рассмотрение графика загрузки процессоров 3.19 показывает, что все процедуры, за исключением процедур ввода и вывода информации, были распараллелены достаточно эффективно: в течение 60% все выделенные процессоры были загружены полностью, 40% — на 95%. Неполная загрузка объясняется различной вычислительной сложностью витков цикла по координате в итера-

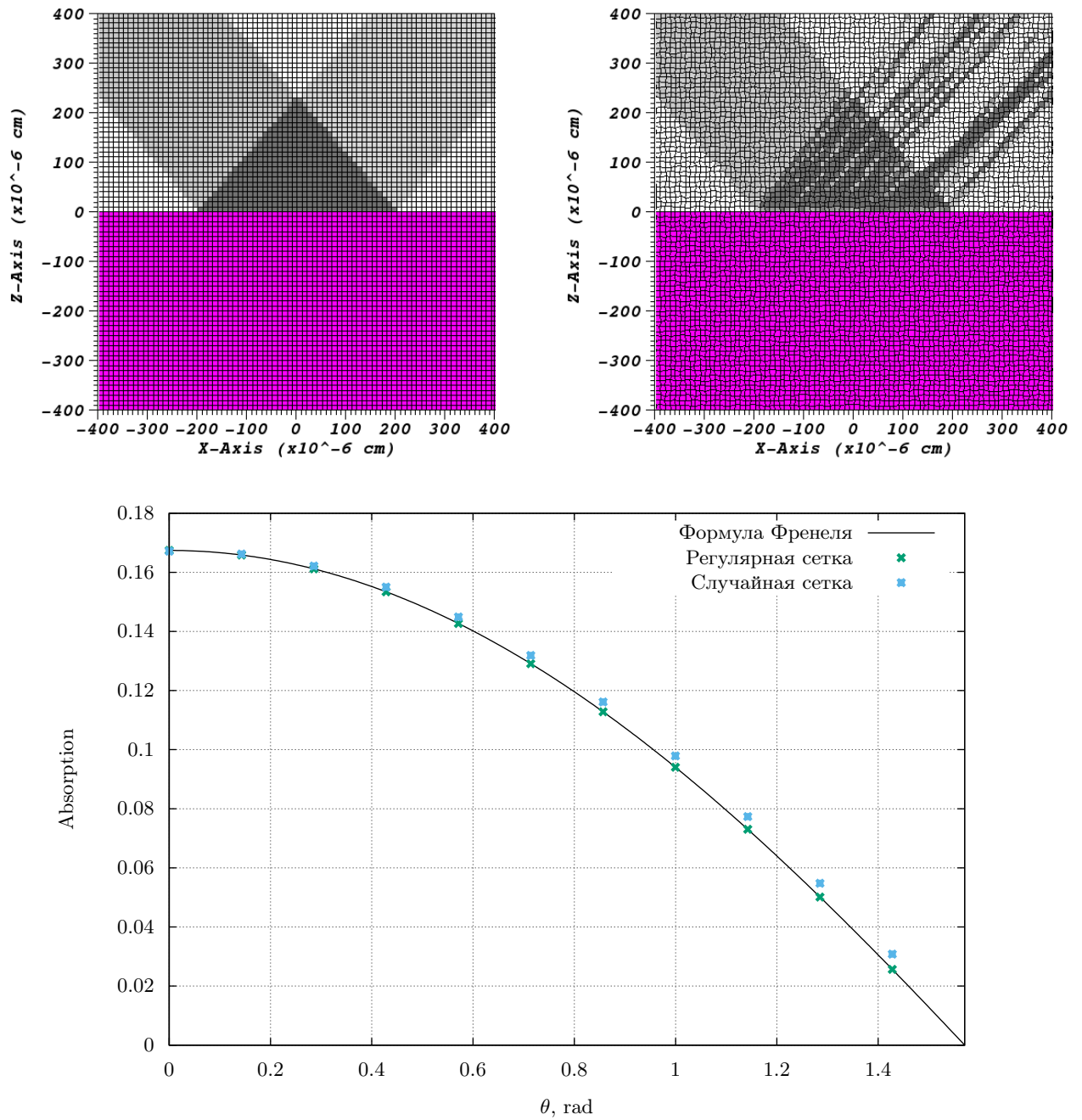


Рис. 3.17. Пространственное распределение интенсивности и интегральный коэффициент поглощения лазерного излучения падающего на плоскую мишень, рассчитанные на равномерной и случайным образом деформированной сетке.

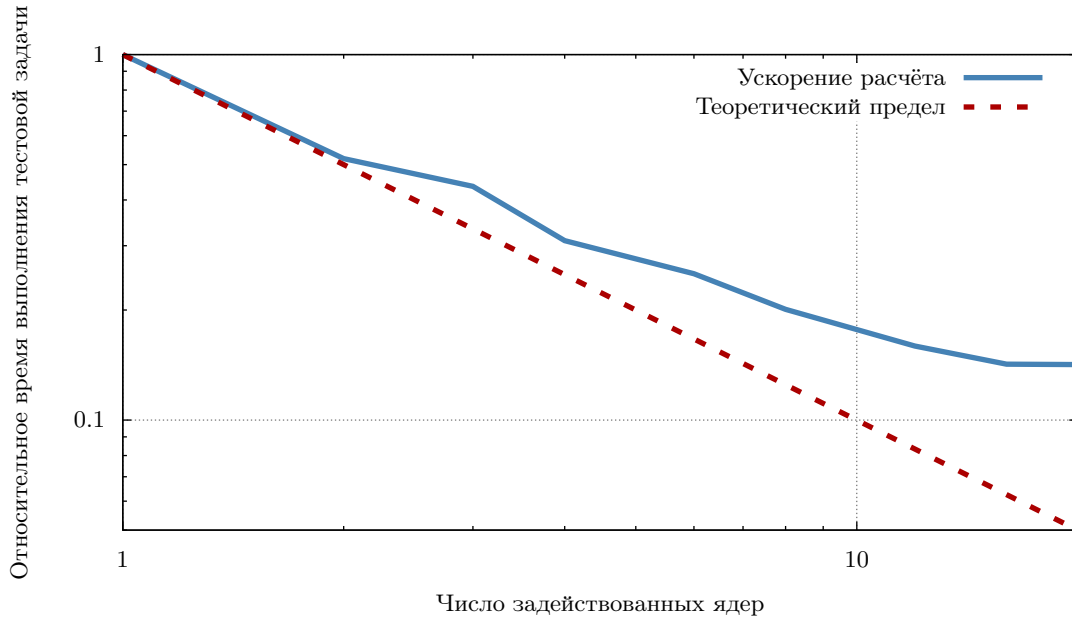


Рис. 3.18. Ускорение расчёта при увеличении числа задействованных ядер.

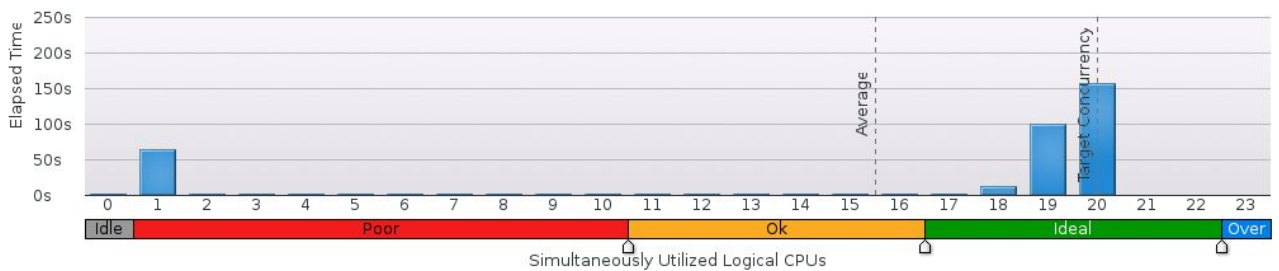


Рис. 3.19. Время, в течении которого одновременно были задействованы 1–20 ядер.

циях Якоби, возникающей за счёт отключения итераций в узлах или ячейках, где итерации сошлись.

Распараллеливание в рамках подхода с распределённой памятью было осуществлено путём разбиения вычислительной сетки. В пределах каждой под-области решались все уравнения модели, а на границах осуществлялся обмен посредством библиотеки MPI. Большое число обменов (после каждой итерации Якоби) привело к относительному уменьшению производительности (см. график 3.18), но основной причиной для использования этого подхода было желание увеличить общую расчётную сетку.

3.7. Выводы к третьей главе

Построены итерационные алгоритмы решения как системы уравнений РГД в целом, так и отдельных подсистем, сохраняющие полную энергию системы с заданной точностью.

Проведено тестирование алгоритмов ГД на стандартных тестах и задачах, имеющих аналитическое решение. Показано, что программа адекватно воспроизводит распространение ударной и нелинейной тепловой волны под произвольными углами к сетке. При этом в расчётах на полностью лагранжевой и фиксированной ортогональной сетке сферический характер ударной волны от точечного взрыва воспроизводился точнее, чем в расчёте с перестройкой сетки по заданному алгоритму. Сеточная неустойчивость типа «песочные часы» эффективно подавляется использованной в модели искусственной вязкостью. Вместе с тем, алгоритм адекватно воспроизводит развитие неустойчивости Релея-Тейлора вплоть до нелинейной фазы, при этом инкремент развития самой медленной моды отличается от аналитического менее, чем на 8%, а самые быстрые моды (связанные с сеточными возмущениями) не развиваются.

Показан квадратичный характер сходимости используемого алгоритма расчёта поглощения лазерного излучения к точному решению.

Показано, что используемая простейшая реализация метода коротких характеристик корректно выходит на диффузионный предел лишь на сетке, не содержащей оптически толстых ячеек. Это существенно ограничивает её применимость к практическим задачам.

Описано распараллеливание посредством OpenMP алгоритмов решения СЛАУ, полученных путём линеаризации уравнений движения, энергии и переноса излучения. Для распределения вычислений на несколько вычислительных узлов с отдельной памятью реализовано разбиение сетки и процедуры обмена посредством библиотеки MPI. Показано семикратное ускорение кода на одном узле, содержащем 16 вычислительных ядер.

Трёхмерные расчёты воздействия неоднородного лазерного импульса на мишень

Четвёртая глава целиком посвящена приложению комплекса программ 3DLINE к практическим задачам.

На примере задачи о скользящем падении лазерного пучка на плоскую мишень анализируется влияние метода расчёта переноса теплового излучения в плазме [24]. Сделан вывод о целесообразности использования в типовых расчётах диффузионного приближения с последующей трассировкой методом коротких или длинных характеристик для получения интегральных спектров.

Проведено моделирование центрального и нецентрального воздействия лазерного пучка на оловянную каплю [28]. Показано, что, не смотря на близость полученных интегральных коэффициентов конверсии, угловое распределение кинетической энергии плазмы во втором случае имеет ярко выраженный пик в направлении, зеркальном относительно смещения, вызванный эффектом образования струи.

Проведено моделирование динамической плазменной фазовой пластины [34], показан экспериментально наблюдаемый [35] эффект сглаживания неоднородного импульса за счёт динамики дифракционной картины.

4.1. Сравнение различных методов расчёта переноса излучения на примере задачи о скользящем падении лазерного пучка на плоскую мишень

Целью описанных в данной части расчётов было определение необходимости использования в моделировании EUV-источника характеристической моде-

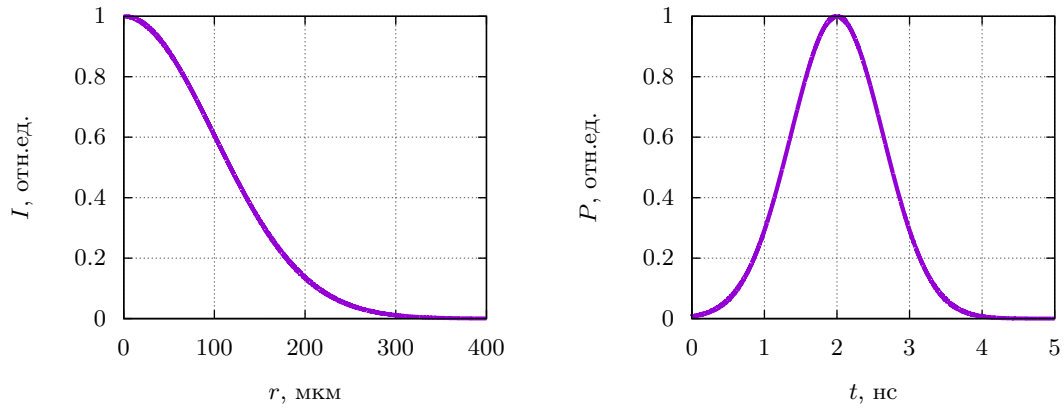


Рис. 4.1. Радиальная зависимость интенсивности (слева) и временная зависимость мощности (справа).

ли переноса излучения и определение приоритетов в распараллеливании кода. Расчёты проводились на сравнительно грубой сетке, и поток испарённой массы определялся через поглощённый поток излучения (см. [26] или [25]), то есть гидродинамика плотного вещества мишени отсутствовала. Тем не менее, эти расчёты позволили принять ряд решений о дальнейшем развитии комплекса программ и методик, по их результатам был опубликован препринт [24] и сделаны доклады на конференциях [39] и [40]. Опишем постановку задачи.

Моделировалось воздействия лазерного импульса с длиной волны 1.064 мкм и энергией 100 мДж, падающего на плоскую оловянную мишень под углом 60° . Использовался гауссов по пространству и времени пучок с длительностью на полувысоте 1.5 нс и диаметром на e^2 400 мкм (см. рис. 4.1). Расчёты проводились в области размером $1200 \times 1200 \times 1000$ мкм на изначально ортогональной сетке $50 \times 50 \times 50$ ячеек, равномерной по осям x и y и разбегающейся с постоянным инкрементом по оси z . Размер ячейки у поверхности мишени составлял $12.5 \times 12.5 \times 2$ мкм.

Были проведены следующие расчёты и использованы средства обработки:

Расчёт в одногрупповом диффузионном приближении (для краткости 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). Обработ-

ка: 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.

Интегральные результаты приведены в таблице 4.1.

Во всех расчётах наблюдается близкая картина разлёта плазмы. На рис. 4.2 – 4.5 изображены распределения электронной температуры (контурами) и плотности (цветом) на момент 3 нс для этих расчётов в поперечных срезах.

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. 4.6 и 4.7. Из этих графиков видно, что максимум температуры во всех расчётах пришёлся на момент времени ~ 2.5 нс, а максимум интегральной по спектру мощности излучения — $\sim 2.7 - 2.8$ нс. Наибольший выход EUV в диапазоне in-band в расчёте d20 достиг максимума ко времени $\sim 2.6 - 2.7$ нс, в sc20 мощность EUV вышла на плато и держалась на максимуме в интервале $\sim 2.7 - 3.2$ нс.

Также на рис. 4.2 – 4.5 заметно различие в распределении температуры в области прозрачной горячей плазмы. Как видно из сравнения рис. 4.4 и 4.5 с рис. 4.2 и 4.3, поведение изотерм хорошо согласуется лишь при плотности $\rho > 10^{-4}$ г/см³, то есть в оптически плотной плазме. В менее плотной плазме в диффузионном приближении остывание происходит медленнее, при этом образуется высокотемпературный «язык», что особенно заметно на изотермах с $T_e \approx 70$ эВ. Это вполне естественно, поскольку в области прозрачной плазмы применение диффузионного приближения неоправданно.

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 использования диффузионного

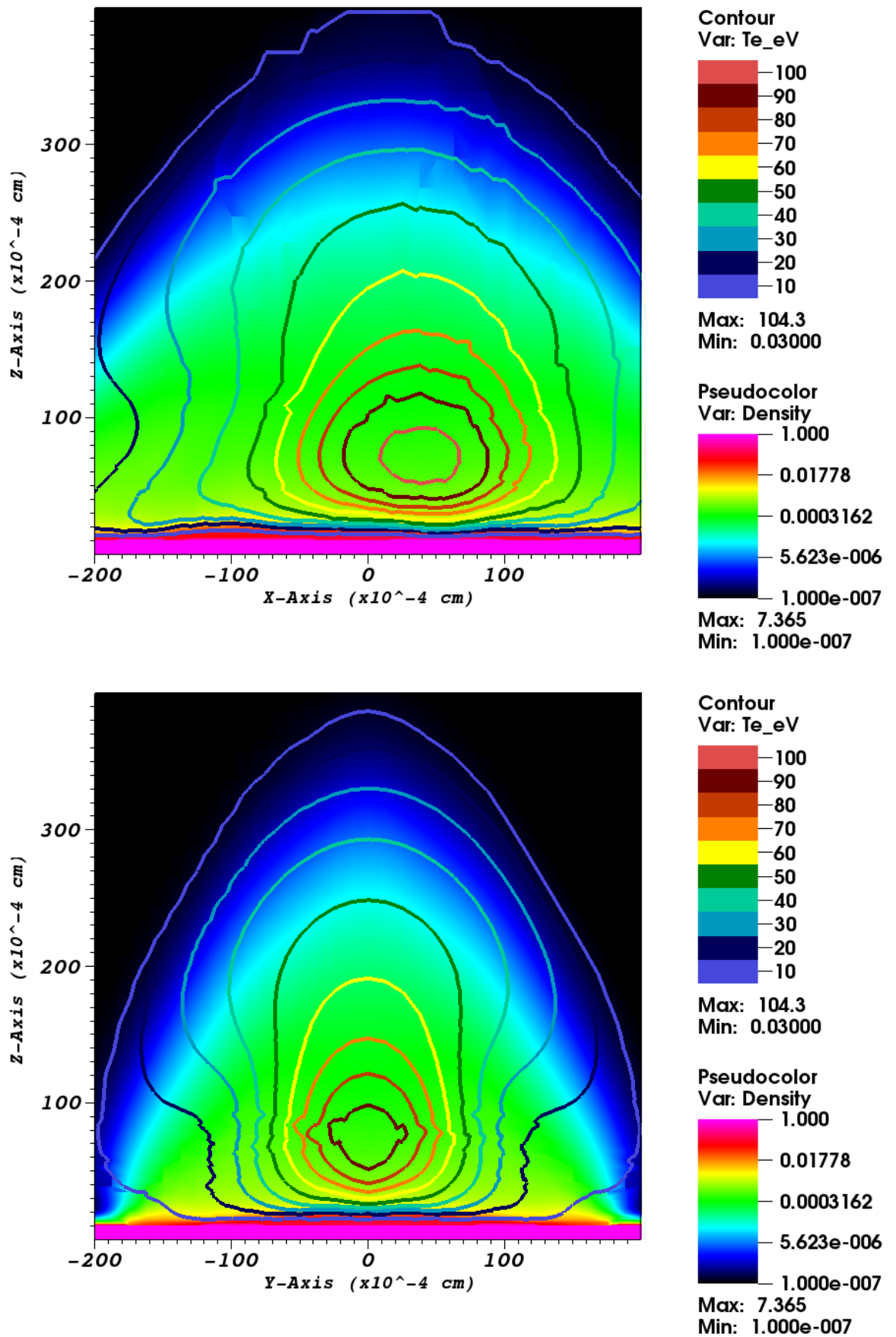


Рис. 4.2. Распределение плотности и температуры в срезах xz - и yz - в расчёте d1 на момент 3 нс.

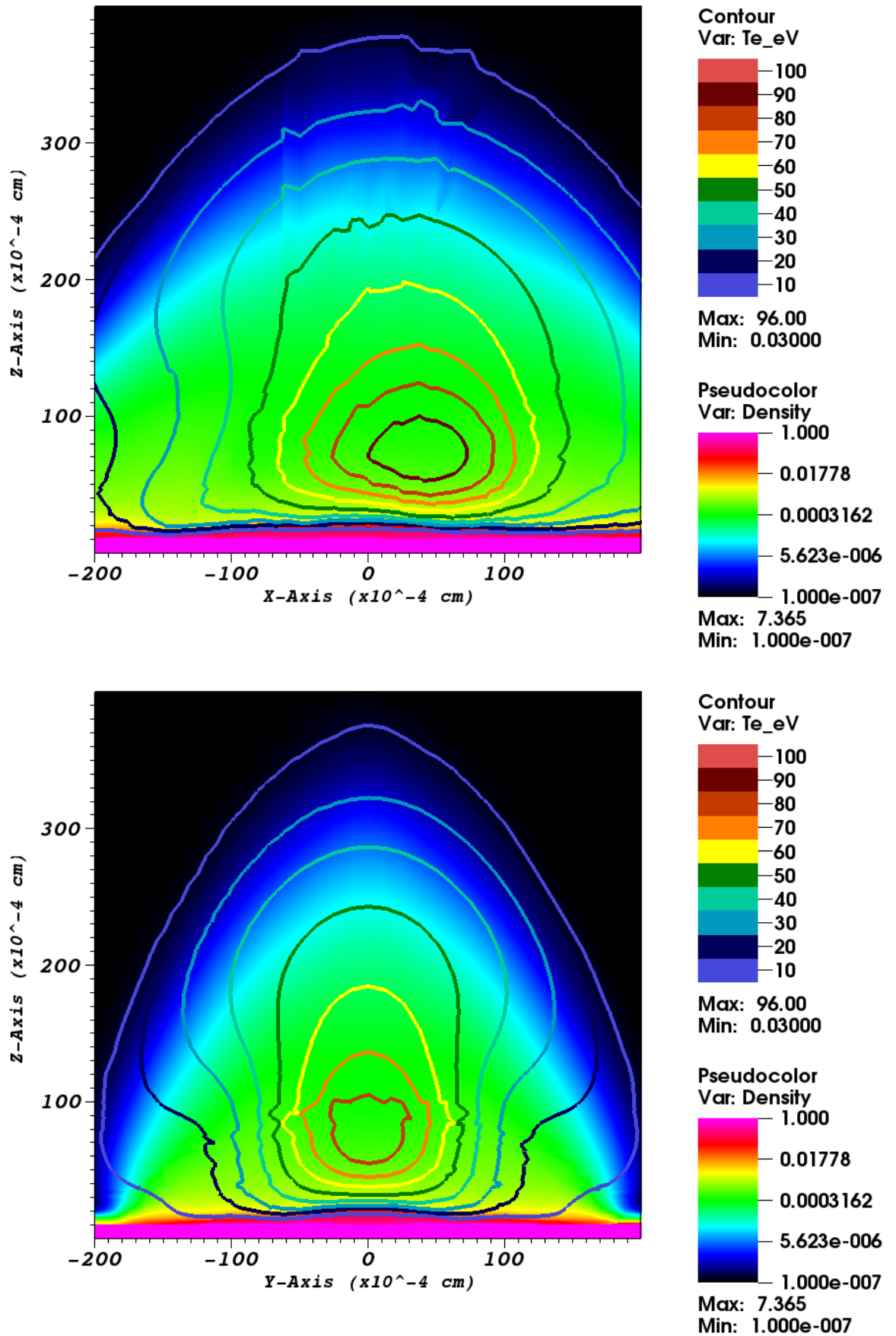


Рис. 4.3. Распределение плотности и температуры в срезах xz - и yz - в расчёте d20 на момент 3 нс.

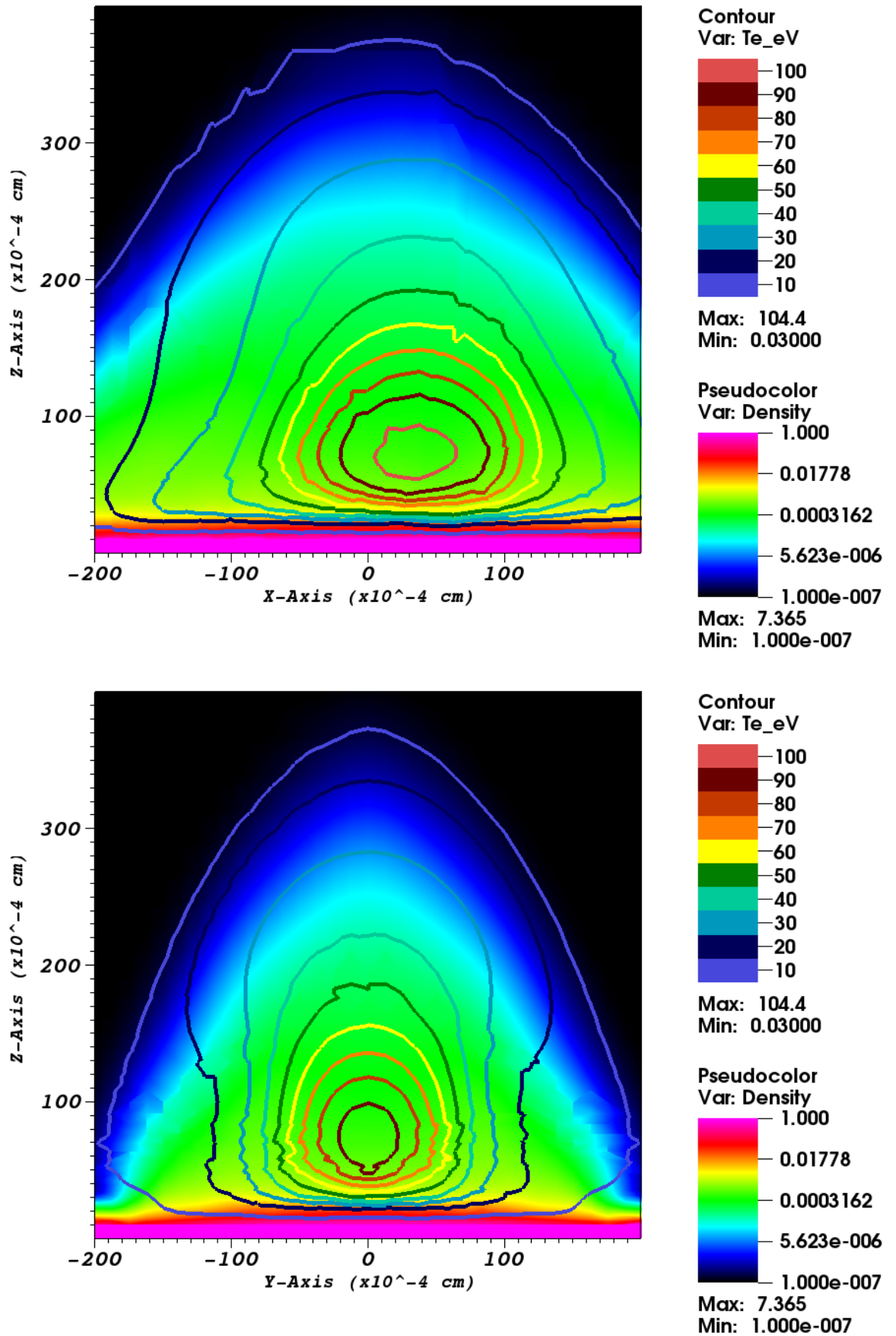


Рис. 4.4. Распределение плотности и температуры в срезах xz - и yz - в расчёте sc1 на момент 3 нс.

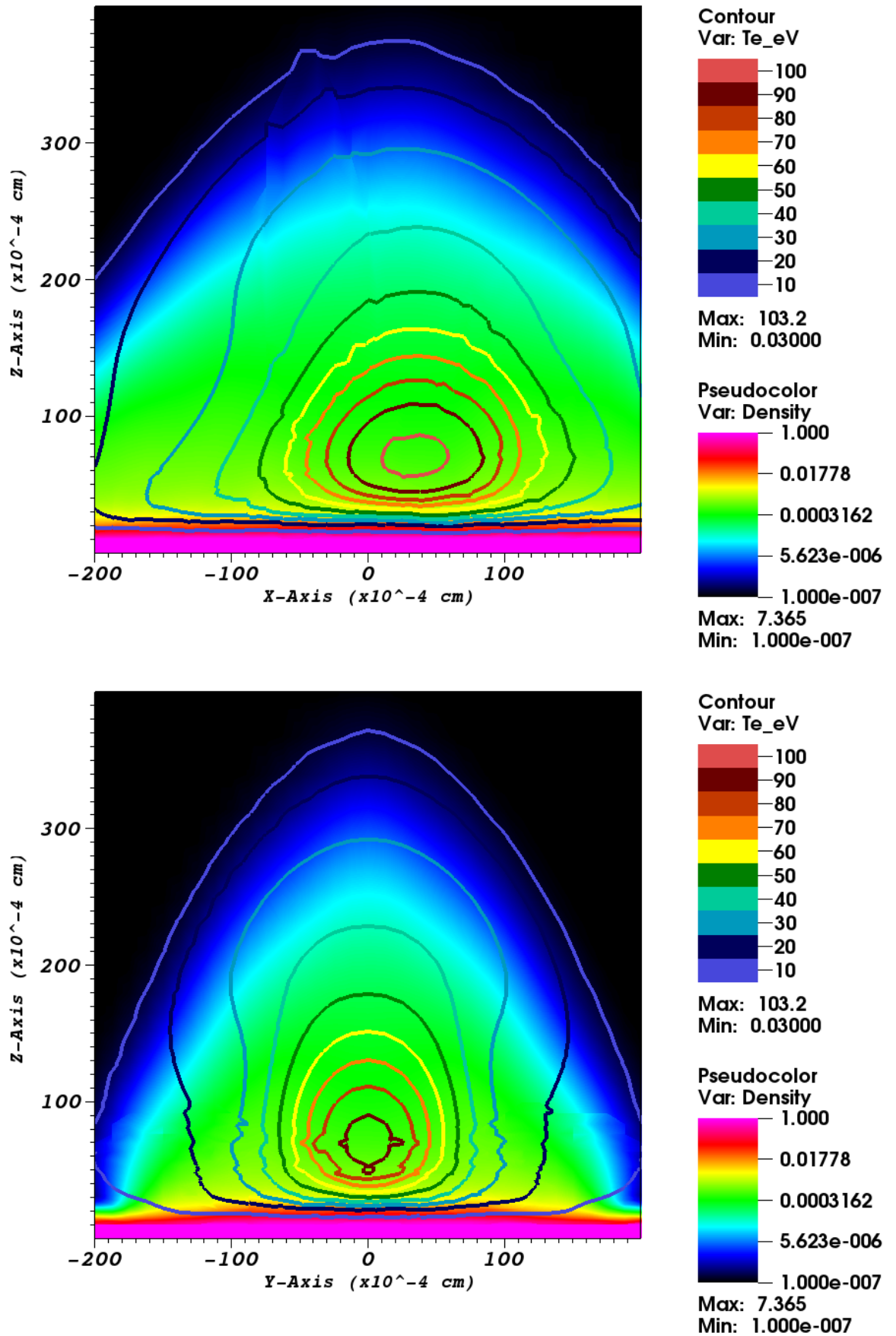


Рис. 4.5. Распределение плотности и температуры в срезах xz - и yz - в расчёте sc20 на момент 3 нс.

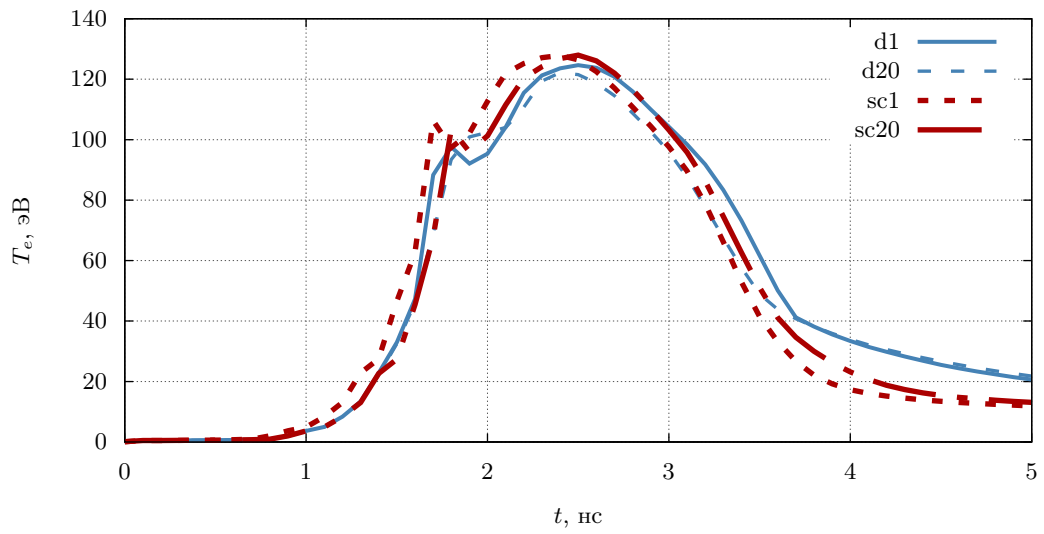


Рис. 4.6. Динамика максимальной температуры в расчёте наклонного падения на плоскую мишень.

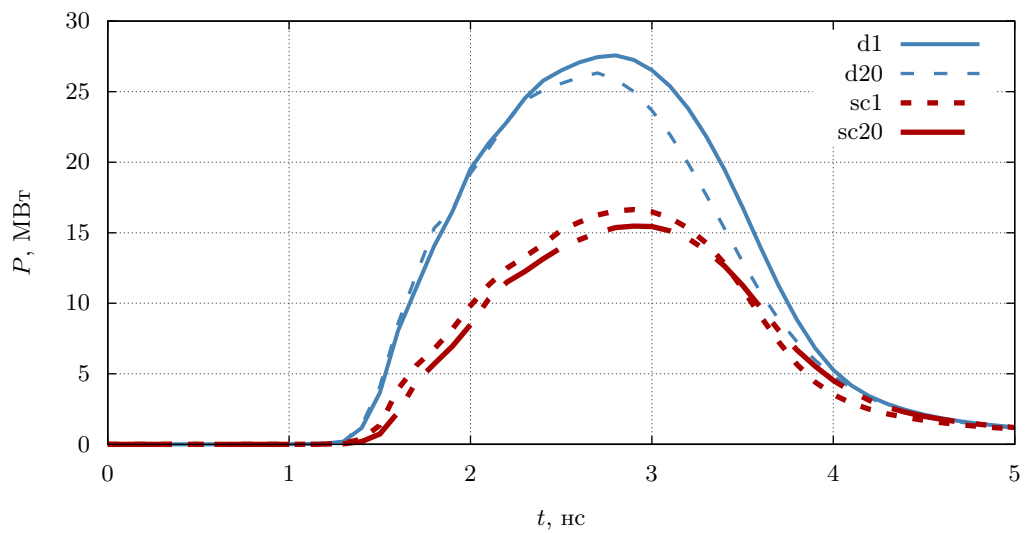


Рис. 4.7. Динамика интегральных потерь плазмой энергии на излучение в расчёте наклонного падения на плоскую мишень.

приближения. А вот на выход излучения влияние существенное (см. таблицу 4.1 и рис. 4.7). 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 практически 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. Отметим, что при $t > 4$ нс все методы расчёта дают практически одинаковый выход излучения, хотя температуры при этом заметно отличаются.

Подводя итог, стоит отметить, что все характеристические методы неплохо согласуются как друг с другом так и с экспериментальными данными, в то время, как применение исключительно диффузионного приближения хотя и обеспечивает разумную динамику плазмы, но даёт несколько завышенный коэффициент конверсии: экспериментальное значение для подобного лазерного импульса лежит в диапазоне 1 – 3 % [3]. Это можно объяснить тем, что в области наибольших температур пробеги фотонов с нужной длиной волны становятся достаточно большие, и диффузионное приближение является слишком грубым. Для определения разумного компромисса между скоростью счёта и качеством полученных результатов, была использована пост-обработка полученных распределений плазмы различными алгоритмами расчёта вышедшего излучения. Результаты представлены в таблице 4.1.

Трассировка результатов, полученных в диффузионном приближении, обеспечивает разумное, хотя и несколько заниженное, значение коэффициента конверсии. В качестве рабочего варианта в дальнейших расчётах трассировка ис-

пользуется для получения углового и спектрального распределения излучения, а общая доля излучённой энергии нормируется на результаты расчёта в диффузионном приближении. Такой подход не является внутренне противоречивым, в отличие от использования результатов трассировки без учёта различия полных потерь энергии на излучение.

В расчётах не проводился мониторинг полного процессорного времени, затраченного на всю задачу, поскольку расчёты осуществлялись на гибридном вычислительном кластере К-100 [94], оснащённом системой запуска задач, ограничивающей максимально доступное для непрерывное расчёта время. 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. 4.3) с различным числом процессоров. Распараллеливание программы алгоритма переноса излучения на тот момент осуществлялось по группам посредством использования библиотеки MPI, газодинамика рассчитывалась последовательно. В таблице 4.2 приведены число шагов, осуществлённых за это время, и пройденное расчётное газодинамическое время при использовании одного и двенадцати процессоров.

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 существенно больше.

Для решения уравнения переноса в диффузионном приближении использовалась неявная схема с достаточно жёстким критерием сходимости, вопрос об

Расчёт	Метод обработки	Доля излучённой энергии, %	Доля энергии, излучённой в диапазоне $13.5 \pm 1\%$ нм, %
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

Таблица 4.1. Вышедшая с излучением энергия при использовании различных методов расчёта излучения in-line и post-process.

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

Таблица 4.2. Оценка производительности в расчёте длительностью 120 минут с распараллеливанием излучения по группам.

правомерности которого исследовался отдельно. Поэтому различие в затратах на расчёт переноса излучения от группы к группе может достигать четырёх порядков, и простая логика, описанная выше, не работает: скорость расчёта определяется не числом групп на одном процессоре, а максимальным числом итераций, осуществлённых на одном из процессоров. Таким образом, для диффузионного приближения выгода от распараллеливания по группам существенно меньше, чем для метода коротких характеристик.

Исходя из этого было принято решение распараллеливать посредством OpenMP решение СЛАУ для каждой группы, чтобы равномерно распределить нагрузку на вычислительные ядра. MPI-распараллеливание было возвращено позднее, и уже не по спектральным группам для переноса излучения, а по пространству для всего алгоритма в целом.

4.2. Исследование нецентрального воздействия лазерного импульса на сферическую мишень

Эта задача моделировалась с учётом динамики мишени на существенно более подробной сетке. Целью её была апробация распараллеленного посредством OpenMP кода на задаче расчёта потоков излучения и вещества, образующихся

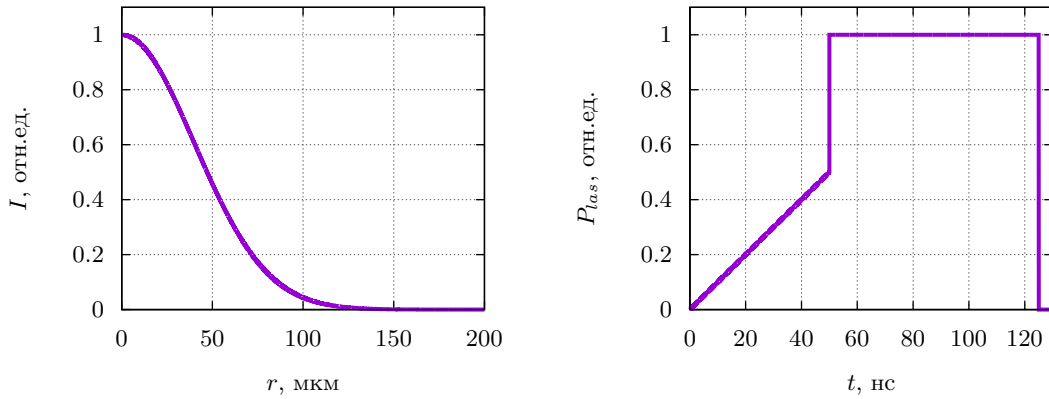


Рис. 4.8. Радиальная зависимость интенсивности (слева) и временная зависимость мощности (справа) в расчётах деформации капли под воздействием прямого и смещённого лазерных импульсов.

под воздействием нецентрального лазерного импульса, имеющей важное прикладное значение. Результаты докладывались в работах [27], [28], [38].

В качестве мишени была взята сферическая оловянная капля радиусом $r_0 = 50$ мкм с начальной температурой 1000 К и плотностью $\rho_0 = 7.3$ г/см³. Начальное пространственное распределение плотности задавалось выражением, обеспечивающим сферическую форму мишени с резкой границей:

$$\rho(r) = \rho_0 \exp\left(-\frac{r^{18}}{r_0^{18}}\right).$$

Ось симметрии лазерного пучка в одном расчёте проходила сквозь центр капли, в другом — была смещена на 16 мкм вдоль оси y . Полная энергия в импульсе Nd:YAG-лазера с длиной волны 1.064 мкм составила 2.625 Дж, пиковая мощность — 30 МВт, максимальная интенсивность — $3.4 \cdot 10^{10}$ Вт/см². Временная зависимость мощности и профиль пучка приведены на рис. 4.8, ширина гауссова пучка на e^2 равна 160 мкм.

Моделирование проводилось на изначально ортогональной сетке $100 \times 100 \times 100$ ячеек, центральная область которой ($46 \times 46 \times 46$ ячеек) была регулярной с шагом 3 мкм, а остальная часть — разбегающаяся с постоянным инкрементом, чтобы полностью покрыть расчётную область $500 \times 500 \times 700$ мкм. Расчёт проводился в одногрупповом диффузионном приближении с последующей трассировкой.

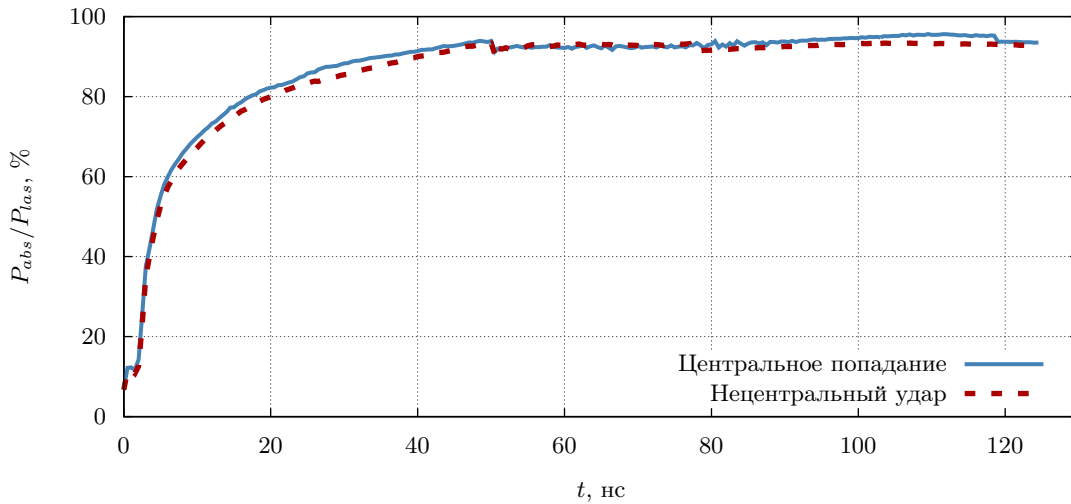


Рис. 4.9. Динамика коэффициента поглощения лазерного излучения.

Расчётная временная зависимость коэффициента поглощения приведена на рис. 4.9. Как видно из рисунка, за время ~ 5 нс успевает наработаться достаточно плазмы для эффективного поглощения лазерного излучения. В дальнейшем коэффициент поглощения остаётся высоким. Интегральное значение поглощённой лазерной энергии составило 2.45 Дж или 93 % входящей лазерной энергии в обоих расчётах. Подобное высокое поглощение является характерным для Nd:YAG-лазера с длительностью импульса в десятки наносекунд.

На рис. 4.10 представлена временная зависимость отношения излучаемой в единицу времени плазмой энергии к поглощаемой. На протяжении основной части импульса она составляет ~ 70 % и практически не меняется, что свидетельствует о квазистационарном режиме динамики плазмы. Скачок в момент времени 50 нс связан со скачком лазерной интенсивности в 2 раза (см. рис. 4.8). Как следует из рис. 4.10, за время ~ 3 нс плазма успевает вернуться в квазистационарный режим.

Последующая трассировка расчётного распределения плазмы длинными характеристиками позволяет получить долю излучения, вышедшего в верхнюю полусферу в диапазоне $13.5 \pm 1\%$ нм, изображённую на рис. 4.11, и, в итоге, коэффициент конверсии лазерной мощности в EUV-излучение (см. рис. 4.12). За весь импульс в обоих расчётах в верхнюю полусферу в EUV-диапазоне вышло с

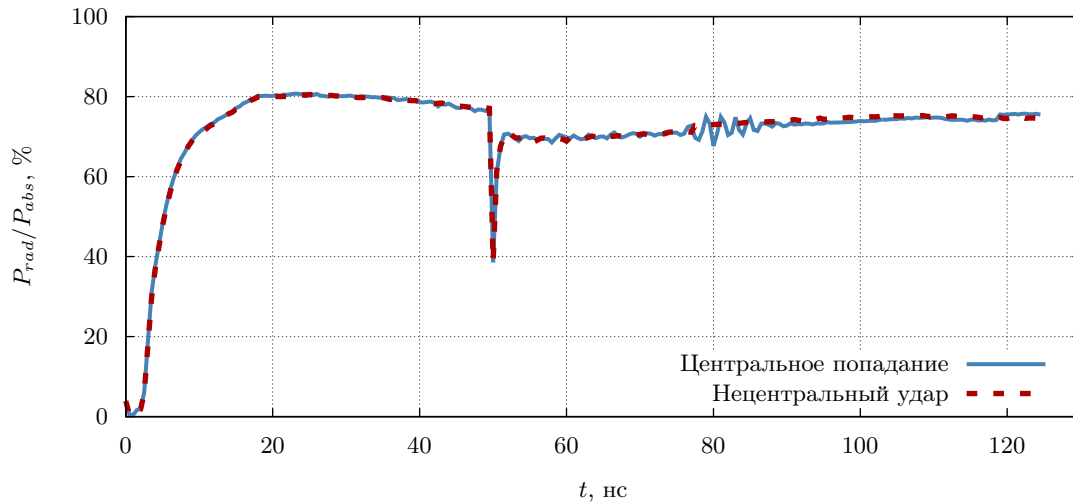


Рис. 4.10. Отношение энергии, излучаемой плазмой во всём спектре, к поглощаемой лазерной мощности.

излучением 86 мДж в случае центрального удара и 82 мДж для нецентрального импульса, то есть 3.3 % и 3.1 % входящей лазерной энергии.

Из вышеприведенных графиков видно, что смещение пучка практически не влияет на конверсию лазерной мощности в излучение. Это легко объясняется тем, что величина сдвига оси симметрии лазерного импульса относительно центра капли (16 мкм) много меньше как характерного размера пучка (160 мкм), так и диаметра капли (100 мкм). Тем не менее, в гидродинамике жидкого вещества капли в этих двух случаях развиваются существенные отличия (см. рис. 4.14 – 4.18), которые приводят к существенно отличающемуся угловому распределению ионов. Из-за эффекта «расплющивания» капли абляционным давлением, часть мишени вышла из лазерного пятна и приобрела существенную скорость — образовалась струя, идущая под углом к направлению лазерного пучка. Интересно отметить, что хотя наиболее быстрые ионы летят «в лазер», струя, несущая в разы большую кинетическую энергию, отклонена в противоположном направлении — см. рис. 4.13.

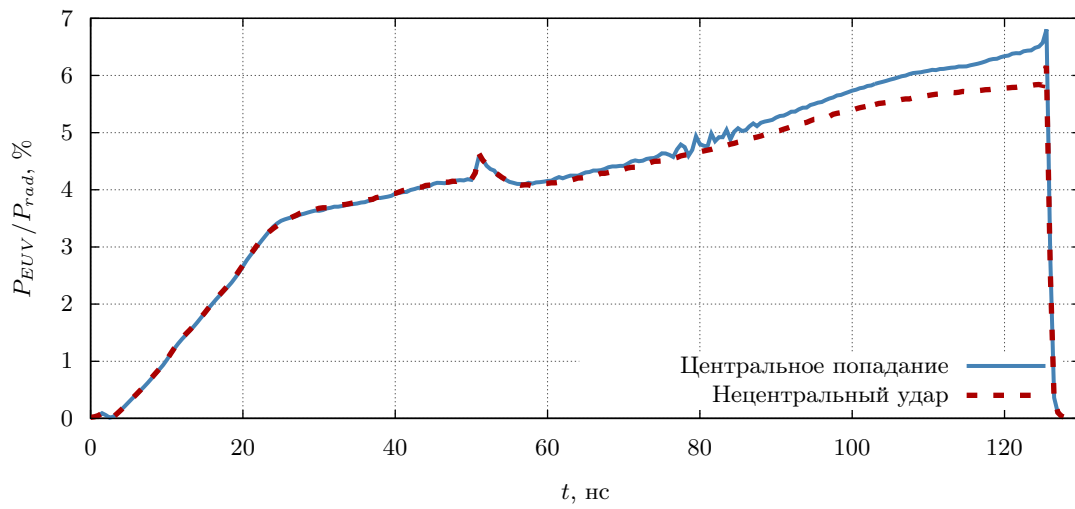


Рис. 4.11. Отношение энергии, вышедшей с излучением в верхнюю полусферу в диапазоне $13.5 \pm 1\%$ нм во всём спектре, к полным потерям энергии на излучение.

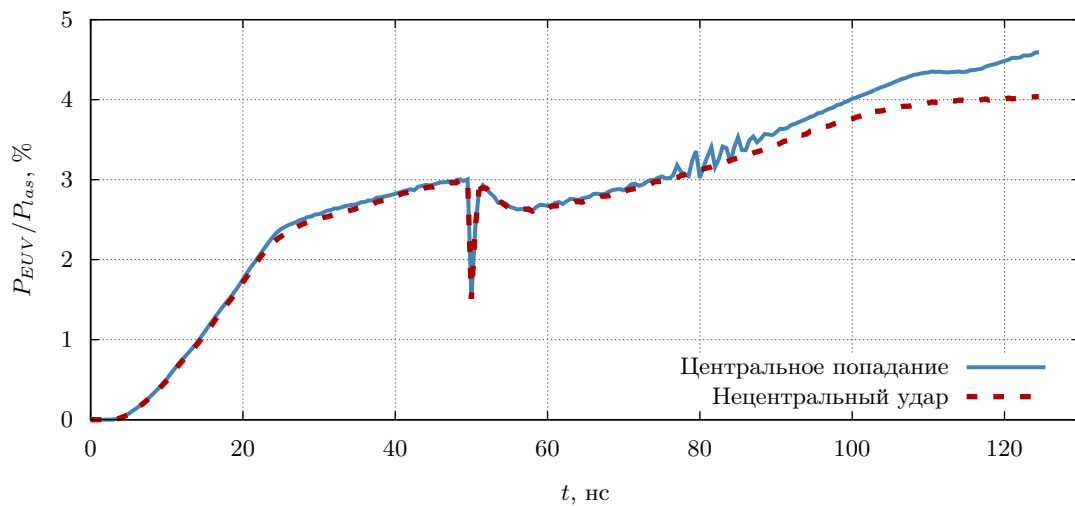


Рис. 4.12. Динамика коэффициента конверсии.

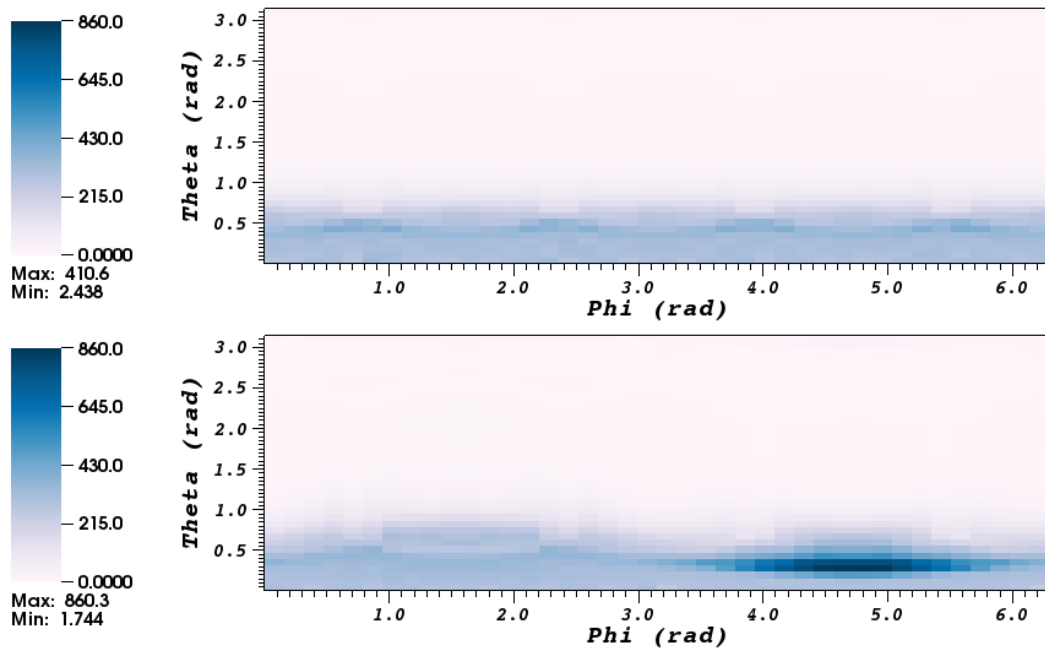


Рис. 4.13. Зависимость удельной кинетической энергии плазмы (в мДж/стр) от направления. Вверху — для центрального попадания, внизу — для удара со смещением.

4.3. Моделирование динамической плазменной фазовой пластины

Одной из заметных трудностей, возникающих в различных приложениях лазерной технологии, является проблема сильной неоднородности лазерного пучка, приводящая к развитию различных неустойчивостей и нежелательным потерям энергии. В работе [35] в качестве перспективного способа сглаживания пучка предлагается метод динамической плазменной фазовой пластины (ДПФП). Суть этого метода такова. На пути лазерного пучка ставится неоднородная мишень, которая испаряется этим пучком. Плазма, образуемая из мишени, обладает достаточной плотностью, чтобы заметно изменить фазу проходящего пучка. Это приводит к возникновению сложной интерференционной картины в прошедшем пучке. Из-за динамики плазмы эта интерференционная картина быстро меняется, и, как следствие, на характерных газодинамических временах мишени пространственная форма пучка сглаживается.

Задача моделирования всего этого процесса задача была разбита на несколь-

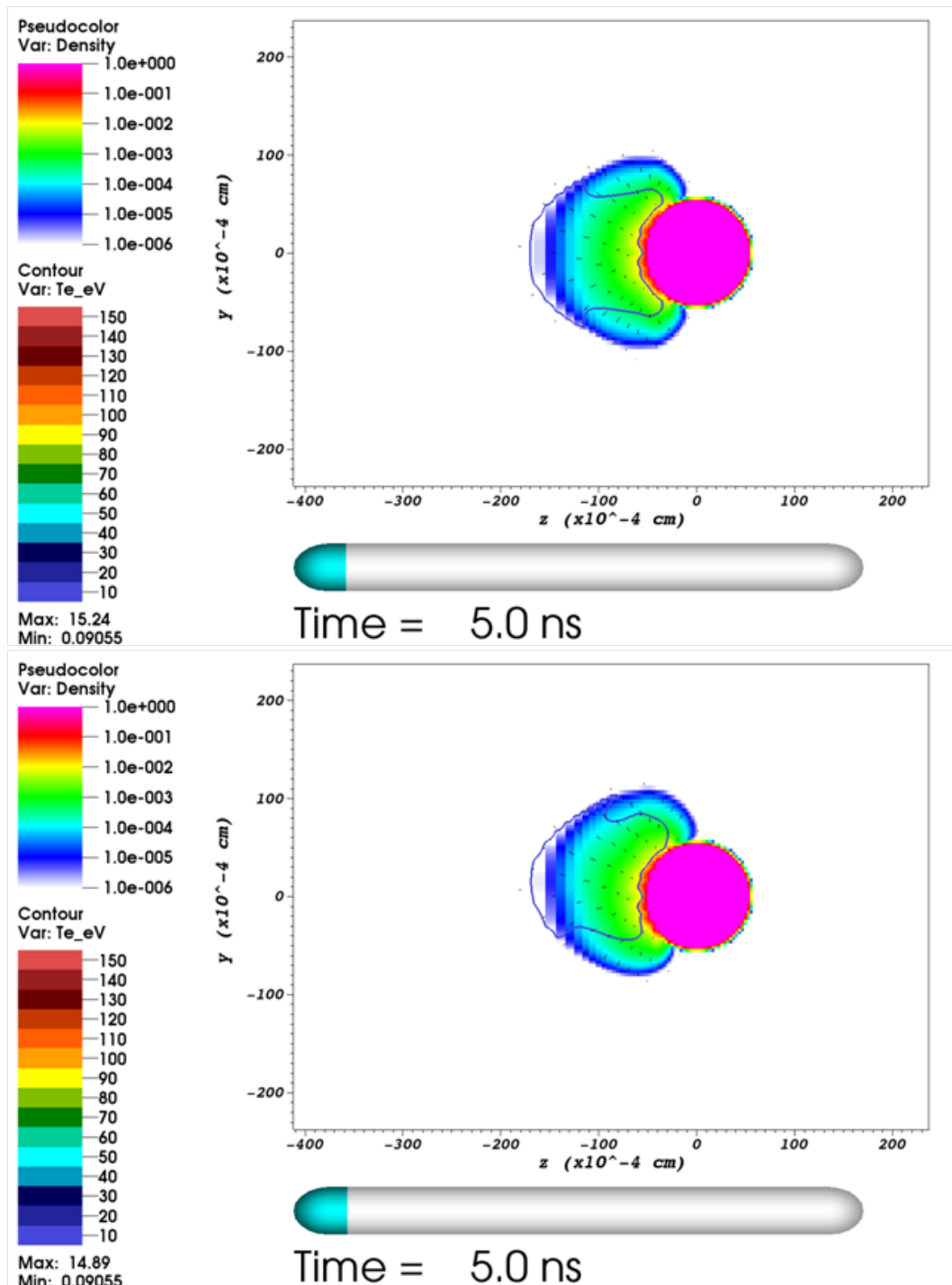


Рис. 4.14. Распределение плотности и температуры в срезе yz – в расчётах центрального и нецентрального воздействия гауссова пучка на крупную каплю. 5 нс: сформировалась плазменная корона, эффективно поглощающая лазерное излучение.

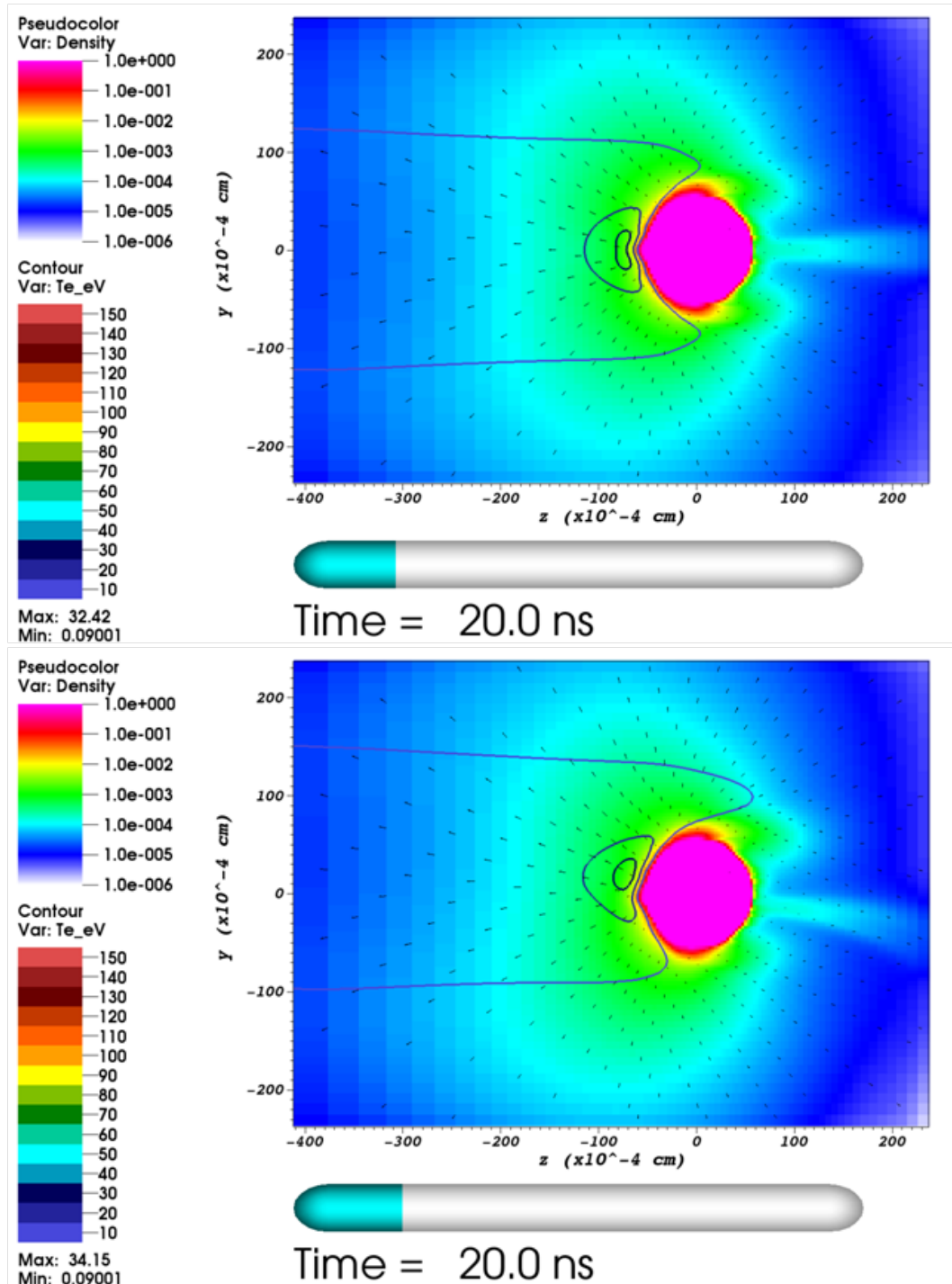


Рис. 4.15. Распределение плотности и температуры в срезе yz – в расчётах центрального и нецентрального воздействия гауссова пучка на крупную каплю. 20 нс: плазма обошла каплю и кумулировала за ней.

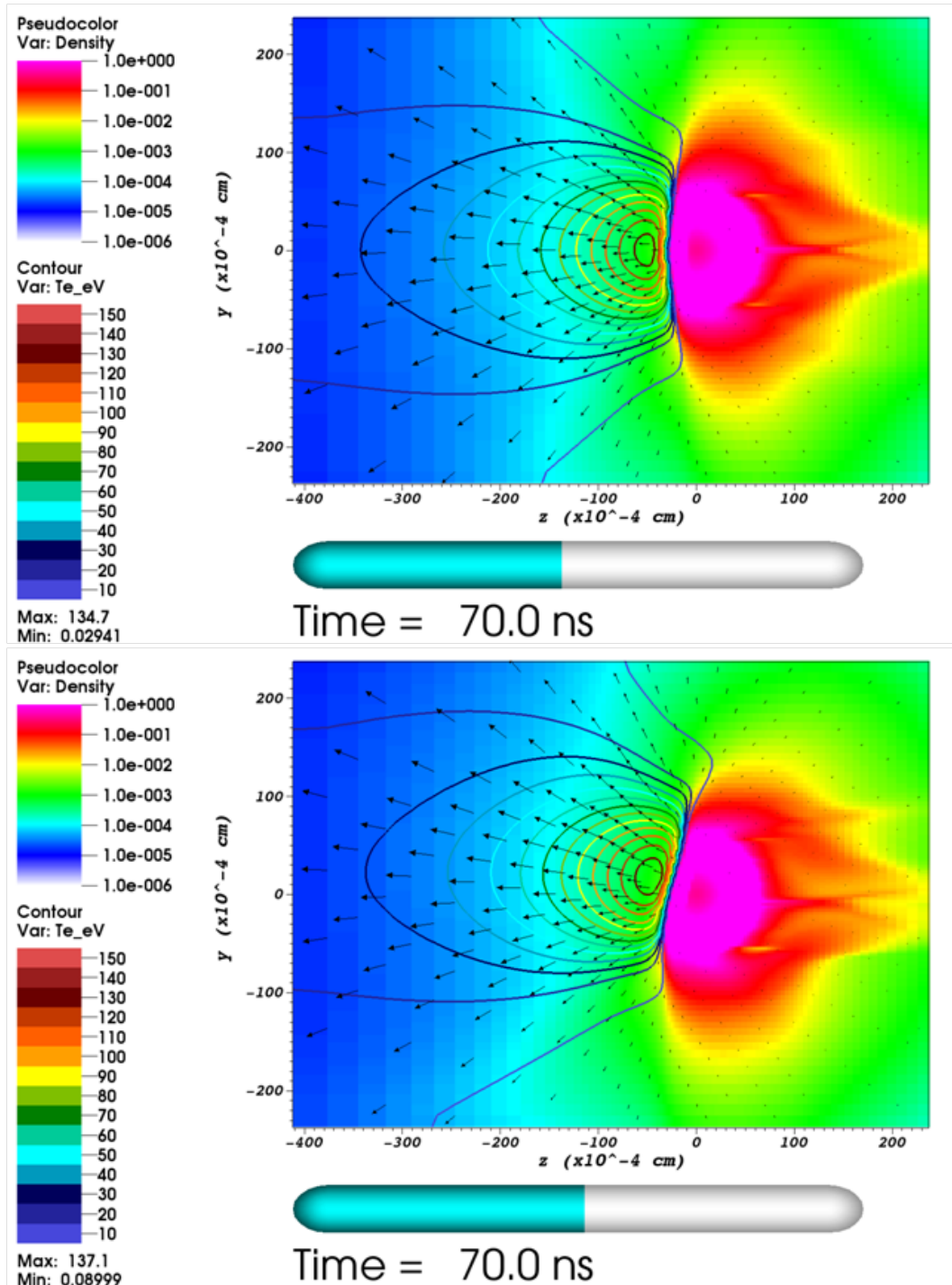


Рис. 4.16. Распределение плотности и температуры в срезе yz — в расчётах центрального и нецентрального воздействия гауссова пучка на крупную каплю. 70 нс: лазерная мощность вышла на максимум, а динамика плазмы перешла в квазистационарный режим.

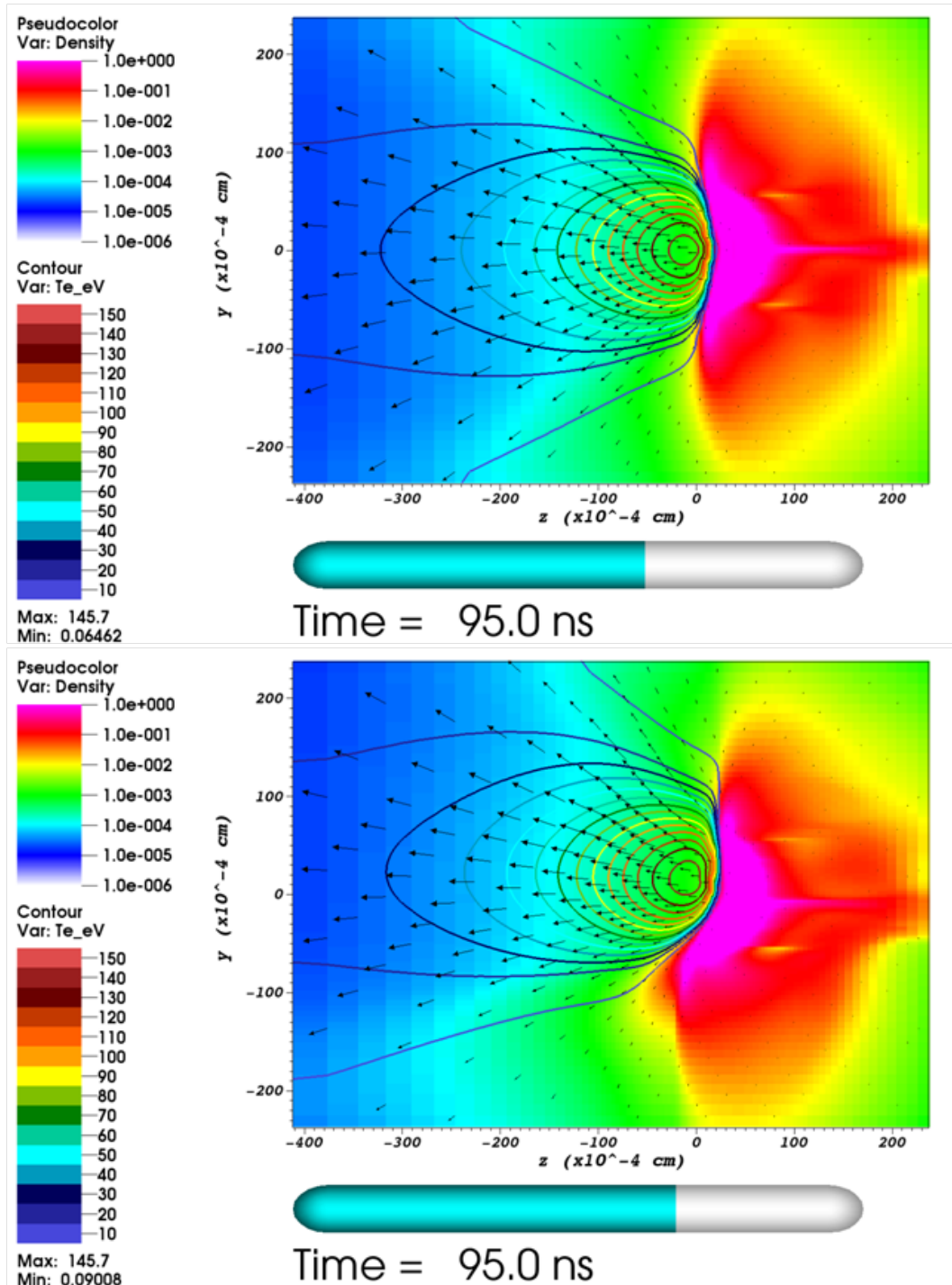


Рис. 4.17. Распределение плотности и температуры в срезе yz – в расчётах центрального и нецентрального воздействия гауссова пучка на крупную каплю. 95 нс: в расчёте со смещённым импульсом начинается рождение струи.

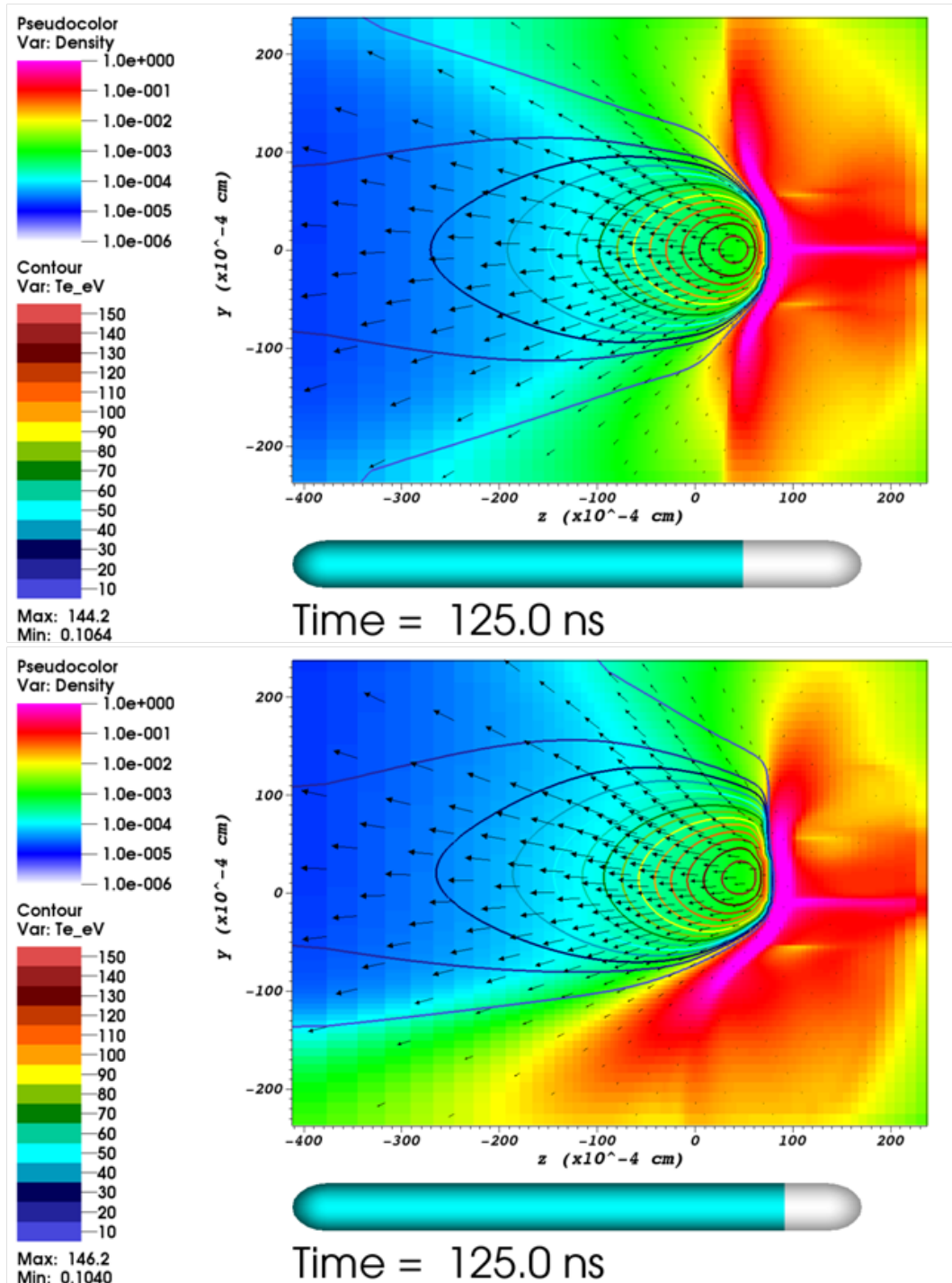


Рис. 4.18. Распределение плотности и температуры в срезе yz – в расчётах центрального и нецентрального воздействия гауссова пучка на крупную каплю. 125 нс: конец лазерного импульса. В расчёте со смещённым импульсом наблюдается сформировавшаяся струя плотной относительно холодной плазмы, идущая в направлении, противоположном смещению центра пучка.

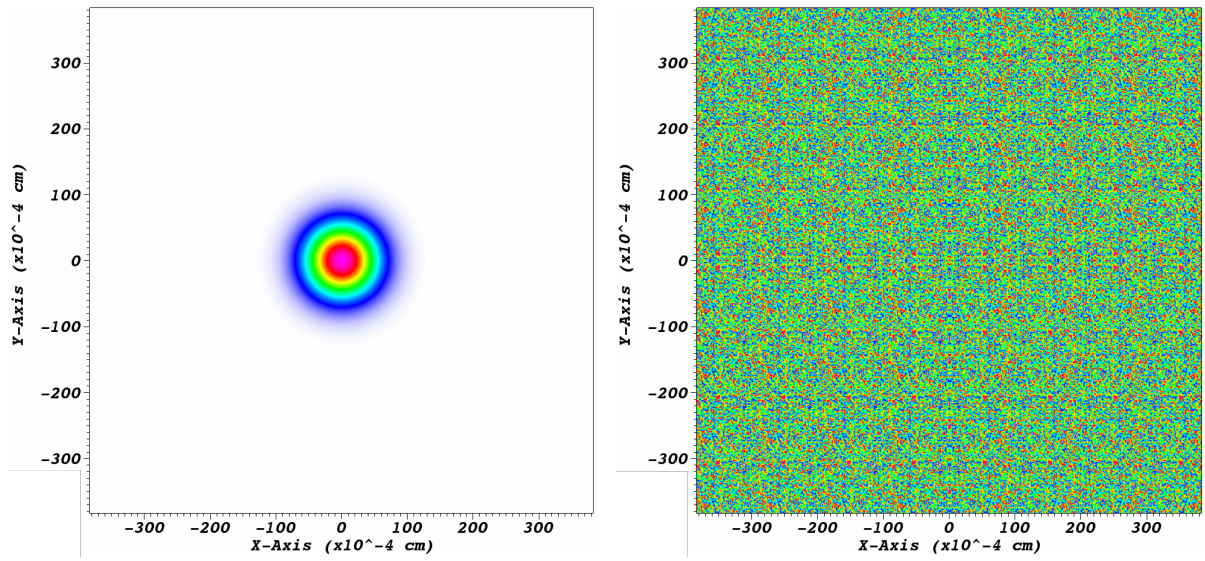


Рис. 4.19. Исходный гауссов пучок и фазовая маска.

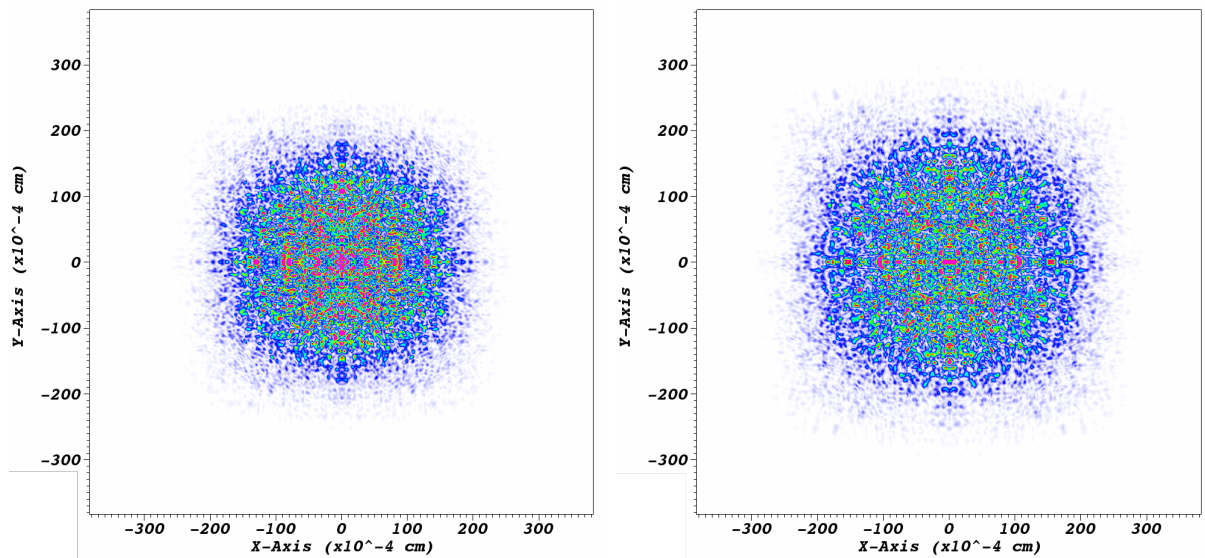


Рис. 4.20. Пучок в плоскости мишени и в диагностической плоскости на расстоянии 200 мкм за мишенью.

ко этапов. На первом этапе приготавливался неоднородный лазерный пучок с длиной волны $\lambda = 0.657$ мкм. Для этого фаза гауссова пучка сбивалась с помощью фазовой маски (см. рис. 4.19), симметричной относительно отражения от осей x и y , и в результате в плоскости мишени получалось сильно неоднородное распределение интенсивности (рис. 4.20). Интеграл дифракции Френеля при этом брался путём преобразования Фурье.

Далее осуществлялось собственно моделирование газодинамики мишени под воздействием полученного лазерного пучка. Использовалась гауссова временная зависимость мощности пучка с пиковой мощностью 35 ГВт в момент 400 пс и шириной на полувысоте 300 пс — эти параметры отвечают пиковой интенсивности 10^{14} Вт/см² для гауссова пучка диаметром 300 мкм. Моделирование проводилось в области $100 \times 100 \times 50$ мкм, покрытой равномерной разностной сеткой $200 \times 200 \times 100$ ячеек и содержащей две перпендикулярные пары углеродных нитей мишени. Расстояние между нитями составляло 50 мкм, масса на единицу длины — 10 нг/см. При этом на границах области по x и y ставились граничные условия отражения. Таким образом, из-за зеркальной симметрии пучка и мишени, фактическая область, в которой описывалась динамика плазмы, превышала расчётную область в 4 раза. На границах по z ставились условия свободного истечения в вакуум. Расчётные распределения плазмы в различные моменты времени представлены на рис. 4.21 – 4.23.

Для расчёта дифракции пучка на мишени из полученного пространственного распределения $\varepsilon_\omega(x, y, z, t)$ извлекались относительный набег фазы и коэффициент поглощения:

$$\Delta\phi(x, y, t) = k_L \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left(\operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon_\omega(x, y, z, t)} - 1 \right),$$

$$T(x, y, t) = \exp \left(-2k_L \int_{-\infty}^{+\infty} dz \operatorname{Im} \sqrt{\varepsilon_\omega(x, y, z, t)} \right),$$

DB: 000000.vtk
Cycle: 0 Time:0.1

Contour
Var: Density
— 0.0001000
— 0.0010000
Max: 1.000
Min: 1.000e-008

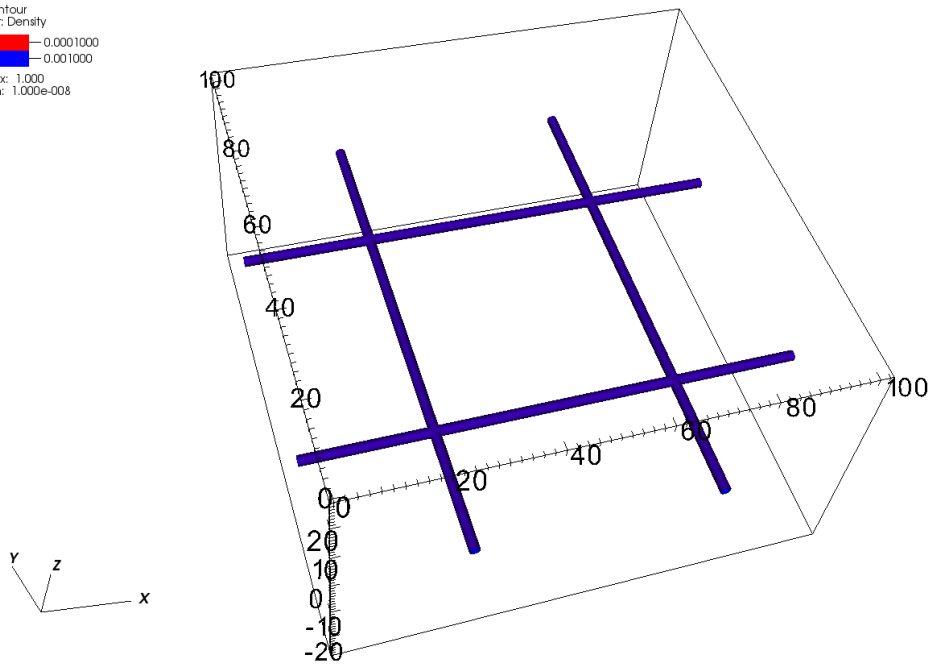


Рис. 4.21. Изоповерхности постоянной плотности в начальный момент времени.

DB: 000014.vtk
Cycle: 14 Time:140.007

Contour
Var: Density
— 0.0001000
— 0.0010000
Max: 0.9465
Min: 1.000e-008

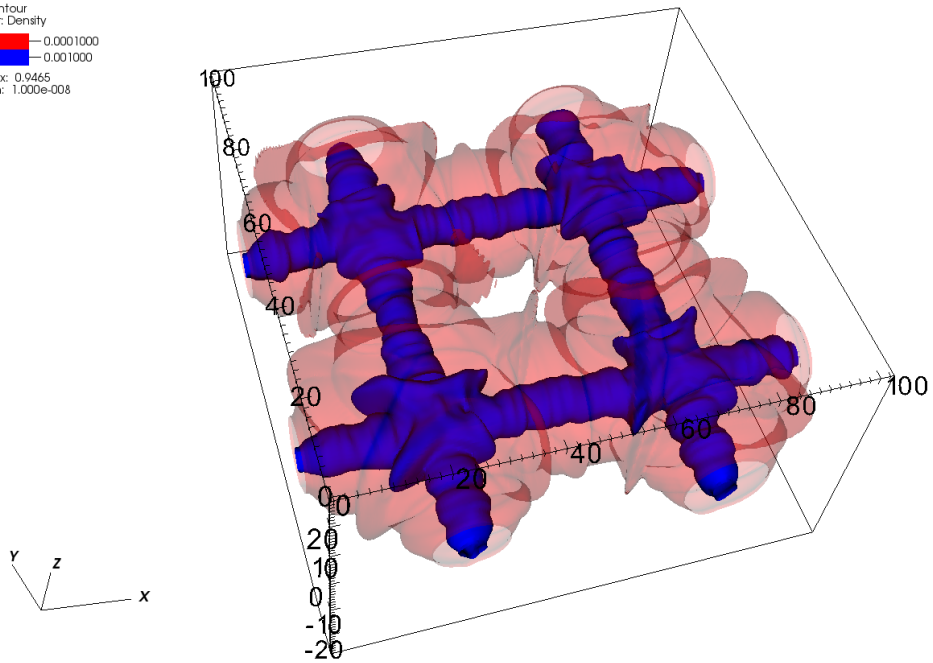


Рис. 4.22. Изоповерхности постоянной плотности в момент времени 140 пс. Заметно существенное расширение плазмы из-за испарения.

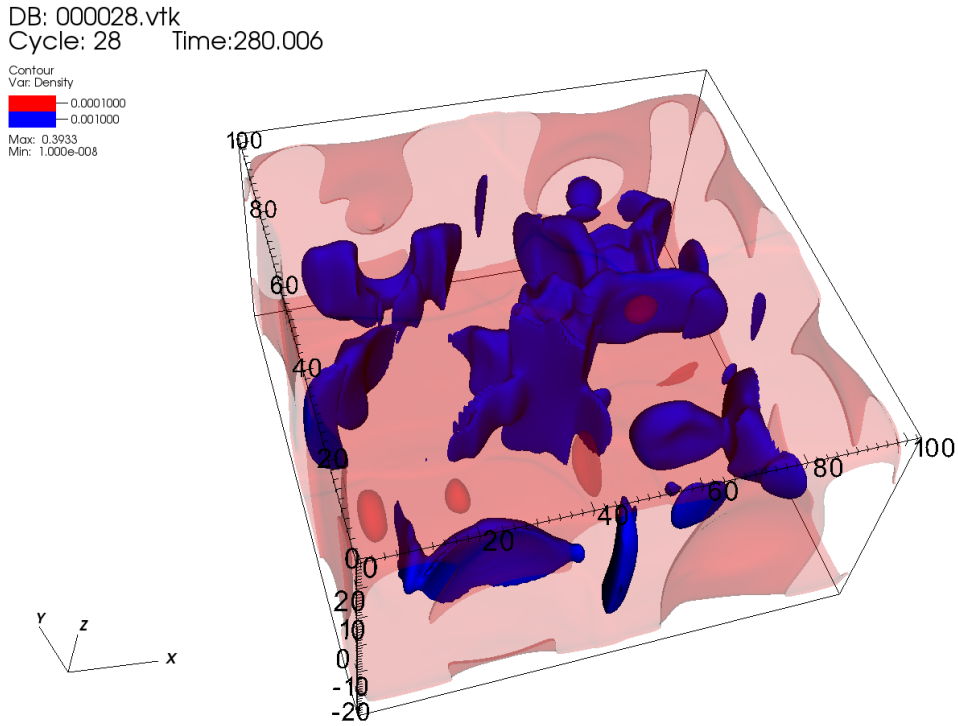


Рис. 4.23. Изоповерхности постоянной плотности в момент времени 280 пс. Плазма из начального положения мишени почти везде разлетелась, максимум плотности наблюдается в промежутках между нитями.

которые затем подставлялись в интеграл дифракции Френеля:

$$\varphi(x, y, L, t) = \frac{-ik_L e^{ik_L L}}{2\pi L} \iint dx' dy' \varphi(x', y', 0, t) \sqrt{T(x', y', t)} \times \\ \times \exp\left(\frac{ik_L}{2L}(x - x')^2 + \frac{ik_L}{2L}(y - y')^2 + \Delta\phi(x', y', t)\right),$$

где $L = 0.02$ см — расстояние от плоскости ДПФП до диагностической плоскости.

Интенсивность в диагностической плоскости определяется как квадрат модуля скалярного поля:

$$I(x, y, L, t) = |\varphi(x, y, L, t)|^2.$$

После нахождения $I(x, y, L, t)$ проводилось усреднение по времени с характерным масштабом $\tau = 20$ пс:

$$\overline{I(x, y, L, t)} = \int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\tau} I(x, y, L, t') \exp\left(\frac{t - t'}{\tau}\right).$$

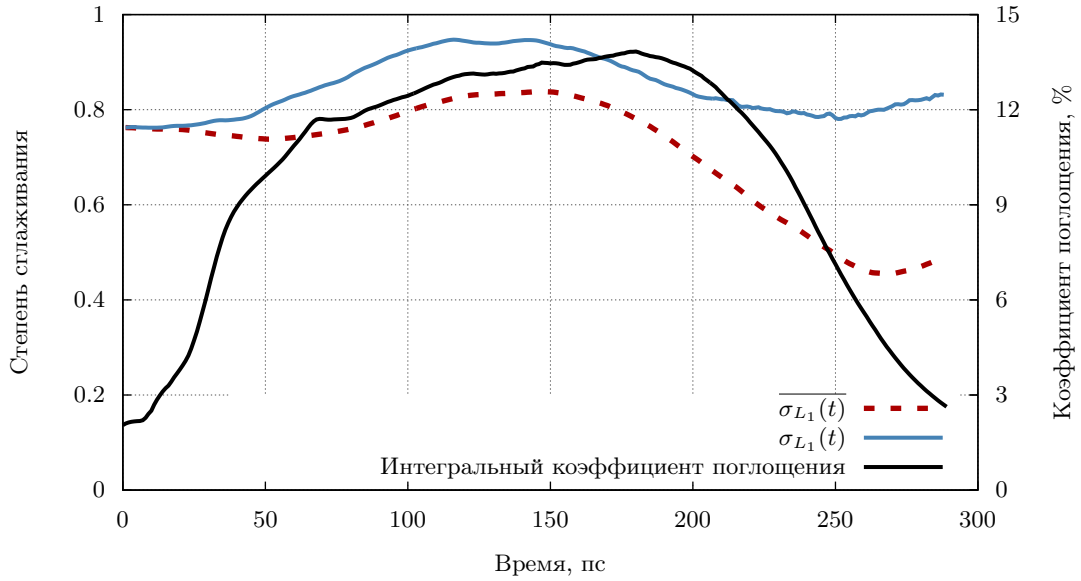


Рис. 4.24. Динамика степени сглаживания и коэффициента поглощения в расчёте динамической плазменной фазовой пластины.

Далее в норме L_1 определялось относительное отклонение найденного распределения от гауссовой огибающей:

$$\sigma_{L_1}(t) = \iint dx dy \left| \frac{I(x, y, L, t)}{P(t)} - \frac{2}{\pi R^2} \exp\left(-2\frac{x^2 + y^2}{R^2}\right) \right|,$$

$$\overline{\sigma_{L_1}(t)} = \iint dx dy \left| \frac{\overline{I(x, y, L, t)}}{\overline{P(t)}} - \frac{2}{\pi R^2} \exp\left(-2\frac{x^2 + y^2}{R^2}\right) \right|,$$

где

$$P(t) = \iint dx dy I(x, y, L, t), \quad \overline{P(t)} = \iint dx dy \overline{I(x, y, L, t)},$$

а ширина огибающей $R = 400$ мкм определялась из требования минимума $\overline{\sigma_{L_1}(t=0)}$. Результаты для $\overline{\sigma_{L_1}(t)}$ и $\sigma_{L_1}(t)$ представлены на рис. 4.24. Из графиков видно, что усреднение динамики дифракционной картины на масштабе 20 пс приводит к существенному сглаживанию распределения интенсивности в момент $t \sim 260$ нс (см. рис. 4.25). Варьирование параметров мишени (массы нитей, расстояния между ними, вещества мишени) позволит влиять как на момент наступления сглаживания, так и на коэффициент поглощения.

Расчёт на более грубой сетке ($100 \times 100 \times 50$ с шагом 1 мкм) привёл к аналогичным результатам, хотя из-за большей численной диффузии испарение шло чуть более активно и момент наилучшего сглаживания наступил на

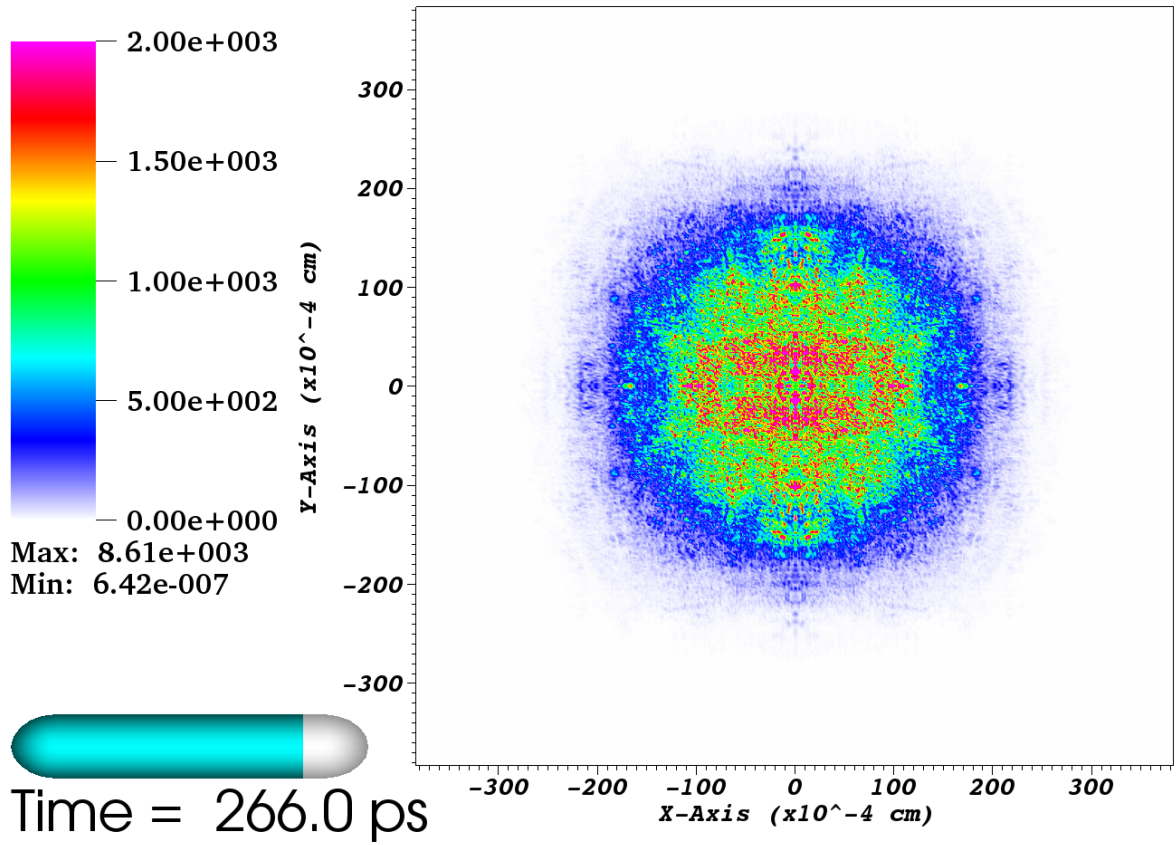


Рис. 4.25. Усреднённое на масштабе 20 пс распределение интенсивности за мишенью в момент наилучшего сглаживания. Построена величина $\overline{I(x, y, L, t)} / \overline{P(t)}$, шкала приведена в см^{-2} .

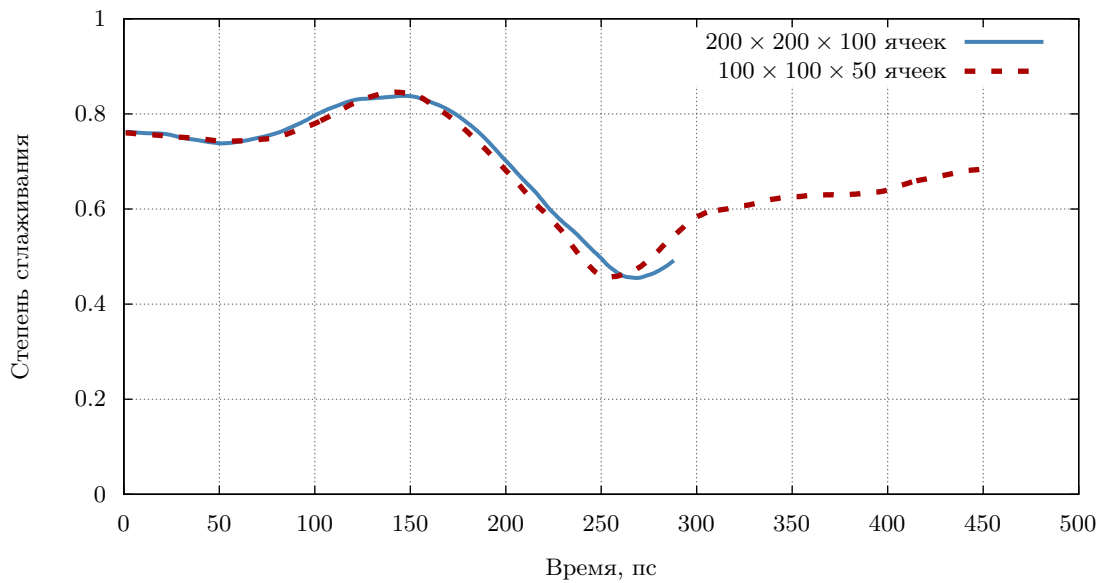


Рис. 4.26. Сравнение степени сглаживания, полученной в расчётах на сетках $0.5 \cdot 10^6$ и $4 \cdot 10^6$ ячеек.

~ 10 пс раньше (рис. 4.26). Достижение в данной задаче сходимости по пространственному разрешению сетки уже с шагом 1 мкм позволит в дальнейшем существенно уменьшить время моделирования и увеличить физическую область до 400×400 мкм, то есть не прибегая к периодическому продолжению охватить весь пучок.

Результаты этого исследования докладывались на конференции [34].

4.4. Выводы к четвёртой главе

Проведён ряд расчётов взаимодействия лазерного импульса с веществом, результаты которых хорошо согласуются с экспериментальными данными. Исходя из оценки скорости счёта для моделей с различными методиками расчёта переноса излучения было принято решение об использовании в типовых расчётах коротковолнового источника излучения на основе лазерной плазмы диффузионного приближения с последующим расчётом спектрального состава и анизотропии посредством трассировки длинными характеристиками. Показаны экспериментально наблюдаемые эффекты образования струи при нецентральной воздействии симметричного лазерного импульса на сферическую мишень и сглаживания сильно спеклованного импульса при прохождении через динамическую фазовую пластину.

По результатам исследований опубликована статья [28], препринты [24], [27] и сделаны доклады на конференциях [38], [39], [40], [34].

Выводы

Построена физико-математическая модель, описывающая ряд процессов, протекающих в лазерной плазме, ключевых для моделирования источника коротковолнового излучения. В её основу положена однотемпературная двухжидкостная модель квазинейтральной плазмы с нестационарной ионизацией. Для расчёта переноса лазерного излучения сформулирована «гибридная» модель, учитывающая как рефракцию так и влияние волновых эффектов. Для расчёта переноса излучения использовано стационарное многогрупповое приближение, в рамках которого уравнение переноса решается либо методом дискретных ординат, либо с использованием диффузионного приближения.

Построена трёхмерная полностью консервативная конечно-разностная схема в произвольных лагранжево-эйлеровых переменных, обладающая вторым порядком аппроксимации на равномерных сетках.

Разработан алгоритм решения уравнений модели, сохраняющих баланс энергии с заданной точностью, и создан параллельный комплекс программ 3DLINE, позволяющий проводить широкомасштабный вычислительный эксперимент.

Проведено тестирование комплекса программ как на стандартных задачах ГД, имеющих аналитическое решение, так и на физических проблемах, близких к специфике предполагаемого приложения кода. Показано, что в расчёте адекватно воспроизводятся такие важные для приложений кода эффекты, как распространение ударной и тепловой волн под произвольными углами к сетке и развитие неустойчивости Релея-Тейлора.

Проведено моделирование для нескольких различных параметров импульса и мишени. Показано, что хотя наилучшее согласие с экспериментальными данными по доле лазерной энергии, конвертированной в EUV-излучение в верхнюю полусферу, достигается при решении уравнения переноса вдоль коротких характеристик на подробной спектральной сетке, оптимальным для практиче-

ских расчётов является применение одногруппового диффузионного приближения с последующей трассировкой вдоль длинных характеристик для уточнения угловой анизотропии и спектральной структуры излучения. Также в расчётах впервые показаны экспериментально наблюдаемые эффекты образования струи при воздействии смещённого симметричного пучка на сферическую мишень и гомогенизации сильно неоднородного пучка при прохождении через динамическую плазменную фазовую пластину. Последний факт может иметь приложения также и в области управляемого термоядерного синтеза.

Литература

1. Belkov S. A., Bondarenko S. V., Vergunova G. A. et al. Thermonuclear targets for direct-drive ignition by a megajoule laser pulse // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2015. Vol. 121, no. 4. P. 686–698.
2. Eason R. Pulsed laser deposition of thin films: applications-led growth of functional materials. John Wiley & Sons, 2007.
3. Bakshi V. EUV Sources for Lithography. Bellingham, WA: SPIE Press, 2005.
4. Moore G. E. Cramming More Components Onto Integrated Circuits // *Proceedings of the IEEE*. 1998. — Jan. Vol. 86, no. 1. P. 82–85.
5. Levinson H. J. Principles of Lithography. Bellingham, Washington USA: SPIE Press, 2010.
6. Борн Ю., Вольф Э. Основы оптики. Москва: Наука, 1973.
7. Wagner C., Harned N. EUV lithography: Lithography gets extreme // *Nature Photonics*. 2010. Vol. 4, no. 1. P. 24–26.
8. Vinogradov A. V. Multilayer X-ray optics // *Quantum Electronics*. 2002. Vol. 32, no. 12. P. 11–13. URL: <http://stacks.iop.org/1063-7818/32/i=12/a=A10>.
9. Барышева М. М., Пестов А. Е., Салащенко Н. Н. и др. Прецизионная изображающая многослойная оптика для мягкого рентгеновского и экстремального ультрафиолетового диапазонов // *Успехи физических наук*. 2012. Т. 182, № 7. С. 727–747. URL: <http://ufn.ru/ru/articles/2012/7/c/>.
10. Louis E., Yakshin A., Tsarfati T., Bijkerk F. Nanometer interface and materials control for multilayer EUV-optical applications // *Progress in Surface Science*. 2011. Vol. 86, no. 11 - 12. P. 255 – 294. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0079681611000323>.
11. Banine V. Y., Koshelev K. N., Swinkels G. H. P. M. Physical processes in EUV sources for microlithography // *Journal of Physics D: Applied Physic*. 2011. Vol. 44, no. 25.

12. George S. A., Silfvast W. T., Takenoshita K. et al. Comparative extreme ultraviolet emission measurements for lithium and tin laser plasmas // *Opt. Lett.* 2007. — Apr. Vol. 32, no. 8. P. 997–999. URL: <http://ol.osa.org/abstract.cfm?URI=ol-32-8-997>.
13. Fomenkov I. V., La Fontaine B., Brown D. et al. Development of stable extreme-ultraviolet sources for use in lithography exposure systems // *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS*. 2012. Vol. 11, no. 2. P. 021110–1–021110–8.
14. Fujimoto J., Abe T., Tanaka S. et al. Laser-produced plasma-based extreme-ultraviolet light source technology for high-volume manufacturing extreme-ultraviolet lithography // *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS*. 2012. Vol. 11, no. 2. P. 021111–1–021111–14.
15. Wagenaars E., Küpper F., Klein J. et al. Power scaling of an extreme ultraviolet light source for future lithography // *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 92, no. 18. URL: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/92/18/10.1063/1.2924299>.
16. Benk M., Bergmann K. Brilliance scaling of discharge sources for extreme-ultraviolet and soft x-ray radiation for metrology applications // *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS*. 2012. Vol. 11, no. 2. P. 021106–1–021106–7.
17. Gielissen K. The nature and characteristics of particles produced by EUV sources: exploration, prevention and mitigation: Ph. D. thesis / Eindhoven University of Technology. 2009. URL: <https://pure.tue.nl/ws/files/3313154/653353.pdf>.
18. Koshelev K., Krivtsun V., Ivanov V. et al. New type of discharge-produced plasma source for extreme ultraviolet based on liquid tin jet electrodes // *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS*. 2012. Vol. 11, no. 2. P. 021103–1–021103–6.
19. Endo A. Extendibility Evaluation of Industrial EUV Source Technologies for

- kW Average Power and 6.x nm Wavelength Operation // Journal of Modern Physics. 2014. Vol. 5, no. 5.
20. Kurilovich D., Klein A. L., Lassise A. et al. Plasma Propulsion of a Metallic Micro-droplet and its Deformation up on Laser Impact. Manuscript in preparation.
 21. Krivokorytov M. S., Vinokhodov A. Y., Sidelnikov Y. V. et al. Droplet deformation and fragmentation by ultra-short laser pulses. Submitted.
 22. Гасилов В. А., Захаров С. В., Круковский А. Ю., Оточин А. А. Расчёт двумерных нестационарных магнитогидродинамических течений // отчёт ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР (ДСП). 1990. Т. 317.
 23. Цыгвинцев И. П., Круковский А. Ю., Новиков В. Г., Попов И. В. Сеточно-лучевая модель и методика расчёта поглощения лазерного излучения // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, № 12. С. 96–108.
 24. 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. Т. 48. URL: http://keldysh.ru/papers/2014/prep2014_48.pdf.
 25. Цыгвинцев И. П., Круковский А. Ю., Гасилов В. А. и др. Моделирование формирования пинча в вакуумном диоде с лазерным поджигом // Математическое моделирование. 2016. Т. 28, № 2. С. 146–160.
 26. 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. 2014. Т. 20. URL: http://keldysh.ru/papers/2013/prep2013_20.pdf.
 27. Круковский А. Ю., Новиков В. Г., Цыгвинцев И. П. Программа 3DLINE: моделирование воздействия несоосного лазерного импульса на оловянную каплю // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2015. Т. 63. URL: http://keldysh.ru/papers/2015/prep2015_63.pdf.
 28. Цыгвинцев И. П., Круковский А. Ю., Новиков В. Г. Трёхмерное численное

- моделирование воздействия нецентрального лазерного импульса на сферическую оловянную мишень // Математическое моделирование. 2016. Т. в печати.
29. Лебо И. Г., Тишкин В. Ф. Исследование гидродинамической неустойчивости в задачах лазерного термоядерного синтеза. Москва: Физматлит, 2006.
 30. Povarnitsyn M. E., Andreev N. E., Levashov P. R. et al. Dynamics of thin metal foils irradiated by moderate-contrast high-intensity laser beams // Physics of Plasmas. 2012. Vol. 19, no. 2. URL: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pop/19/2/10.1063/1.3683687>.
 31. Kaiser T. B. Laser ray tracing and power deposition on an unstructured three-dimensional grid // Physical Review E. 2000. Vol. 61, no. 1. P. 895–905.
 32. Афанасьев Ю. В., Гамалий Е. Г., Демченко Н. Н., Розанов В. Б. Поглощение лазерного излучения сферической мишенью с учётом рефракции и развитой гидродинамики // Труды ФИАН / Под ред. Н. Г. Басова. М.: Наука, 1982. Т. 134. С. 32–41.
 33. Гасилов В. А., Круковский А. Ю., Повещенко Ю. А., Цыгвинцев И. П. Неявная эйлерово-лагранжева разностная схема трёхмерной газовой динамики на основе согласованных аппроксимаций уравнений балансов массы и импульса // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2016. Т. 5. URL: http://keldysh.ru/papers/2016/prep2016_05.pdf.
 34. Цыгвинцев И. П. Трёхмерное моделирование динамической плазменной фазовой пластины // Трёхмерное моделирование динамической плазменной фазовой пластины. V международная конференция «Проблемы математической и теоретической физики и математическое моделирование», 2016. — 5 – 7 апреля. URL: <https://mpmm.xyz/frontend/programs/last.pdf>.
 35. Voronich I. N., Garanin S. G., Derkach V. N. et al. Control of Laser Radiation Parameters: Spatiotemporal smoothing of a laser beam employing a dynamic plasma phase plate // Quantum Electronics. 2001. Vol. 31. P. 970–972.
 36. Цыгвинцев И. П. Моделирование поглощения лазерного излучения в при-

- ближении геометрической оптики // Моделирование поглощения лазерного излучения в приближении геометрической оптики. Семинар 6 отдела ИПМ «Методы вычислительной физики», 2012. — 23 октября. URL: <http://www.keldysh.ru/seminars/seminar.xhtm?src=seminar6.xml&filter=past>.
37. Grushin A. S., Tsygvintsev I. P., Novikov V. G., Ivanov V. V. Modeling of Absorption and Scattering of IR Laser Radiation by LPP // Modeling of Absorption and Scattering of IR Laser Radiation by LPP. 2012 International Workshop on EUV and Soft X-ray Sources, 2012. — October 8 – 11. URL: <http://www.euvlitho.com/2012/S53.pdf>.
38. Tsygvintsev I. P., Krukovskiy A. Y., Novikov V. G. 3D simulation of shifted laser pulse coupling to tin target // 3D simulation of shifted laser pulse coupling to tin target. 2014 International Workshop on EUV and Soft X-ray Sources, 2014. — November 3 – 6. URL: <http://www.euvlitho.com/2014/S40.pdf>.
39. Цыгвинцев И. П., Круковский А. Ю., Новиков В. Г. Трёхмерное моделирование процессов взаимодействия лазерного излучения с веществом мишени // Трёхмерное моделирование процессов взаимодействия лазерного излучения с веществом мишени. XLI Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС, 2014. — 10 – 14 февраля. URL: <http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/XLI/It/ru/EP-Tsygvintsev.docx>.
40. Цыгвинцев И. П., Круковский А. Ю., Новиков В. Г. Трёхмерное моделирование воздействия на мишень лазерного импульса умеренной мощности // Трёхмерное моделирование воздействия на мишень лазерного импульса умеренной мощности. XII Международная конференция «Забабахинские научные чтения», 2014. — 2 – 6 июня. URL: <http://www.vniitf.ru/images/zst/2014/TezisZNCH-2014.pdf>.
41. Романов И. В., Паперный В. Л., Рупасов А. и др. Формирование микропинчевых структур в плазме вакуумного разряда с лазерным поджигом (эксперимент и результаты численного моделирования) // Формирование микропинчевых структур в плазме вакуумного разряда с лазерным поджи-

- гом (эксперимент и результаты численного моделирования). XLIII Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС, 2016. — 9 – 12 февраля. URL: <http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/XLIII/It/ru/ER-Romanov.docx>.
42. Tsygvintsev I. Three-dimensional code for LPP EUV source modeling // Three-dimensional code for LPP EUV source modeling. German-Russian conference «Supercomputing in Scientific and Industrial Problems», 2016. — 9 – 11 марта. URL: <http://www.kiam.ru/SSIP/program.html>.
43. Новиков В. Г. Моделирование коротковолнового источника излучения на основе лазерной плазмы олова // Моделирование коротковолнового источника излучения на основе лазерной плазмы олова. Семинар 11 отдела ИПМ «Вычислительные методы и математическое моделирование», 2016. — 19 января. URL: <http://www.keldysh.ru/seminars/seminar.xhtml?src=seminar11.xml&filter=past>.
44. Цыгвинцев И. П., Круковский А. Ю., Новиков В. Г., Попов И. В. Трёхмерное моделирование поглощения лазерного излучения в приближении геометрической оптики // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2012. Т. 41. URL: http://www.keldysh.ru/papers/2012/prep2012_41.pdf.
45. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. Москва: Наука, 1982.
46. Koshelev K. N., Ivanov V. V., Novikov V. G. et al. RZLINE code modeling of distributed tin targets for laser-produced plasma sources of extreme ultraviolet radiation // Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS. 2012. Vol. 11, no. 2. P. 021112–1–021112–6.
47. Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчёта росселандовых пробегов и уравнений состояния. Москва: Физматлит, 2000.
48. OpenCFD Ltd. OpenFOAM. <http://www.openfoam.com>. Accessed: 2016-02-25.

49. Vichev I. Y., Novikov V. G., Ivanov V. V. et al. Hydrodynamics modeling of liquid droplet deformation with laser pulses // 2013 International Workshop on Extreme Ultraviolet and Soft X-Ray Sources. Ireland, Dublin: 2013. — nov. URL: <http://www.euvlitho.com/2013/S44.pdf>.
50. Vichev I. Y., Novikov V. G., Basko M. M. et al. Modeling of target deformations due to pre-pulse with debris analysis // 2014 International Workshop on Extreme Ultraviolet and Soft X-Ray Sources. Ireland, Dublin: 2014. — nov. URL: <http://www.euvlitho.com/2014/S32.pdf>.
51. Basko M. M., Maruhn J. A., Tauschwitz A. Development of a 2D Radiation-Hydrodynamics Code RALEF for Laser Plasma Simulations. GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH, 2010. GSI Report. URL: <http://www.basko.net/mm/ralef/ralef.pdf>.
52. Addessio F. L., Baumgardner J. R., Dukowicz J. K. et al. CAVEAT: A Computer Code for fluid dynamics problems with large distortion and internal slip, 1992. LA-10613-MS-REV.1, LA-10613-MS.
53. Zakharov S. V., Novikov V. G., Choi P. Z* Code for DPP and LPP Source Modeling // EUV Sources for Lithography / Ed. by V. Bakshi. Bellingham, WA: SPIE Press, 2005. P. 223–275.
54. Zakharov S. V., Zakharov V. S., Novikov V. G. et al. Plasma dynamics in a hollow cathode triggered discharge with the influence of fast electrons on ionization phenomena and EUV emission // Plasma Sources Science and Technology. 2008. Vol. 17, no. 2. P. 17–24. URL: <http://stacks.iop.org/0963-0252/17/i=2/a=024017>.
55. Sizyuk V., Hassanein A., Sizyuk T. Hollow laser self-confined plasma for extreme ultraviolet lithography and other applications // Laser and Particle Beams. 2007. — 3. Vol. 25. P. 143–154. URL: http://journals.cambridge.org/article_S026303460707019X.
56. Hassanein A., Sizyuk V., Sizyuk T., Harilal S. Effects of plasma spatial profile on conversion efficiency of laser-produced plasma sources for EUV lithography //

- Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS. 2009. Vol. 8, no. 4. P. 041503–041503–6.
57. Hassanein A., Sizyuk V., Harilal S. S., Sizyuk T. Analysis, simulation, and experimental studies of YAG and CO₂ laser-produced plasma for EUV lithography sources // Proc. SPIE. 2010. Vol. 7636. P. 76360A–76360A–7.
58. Marinak M. M., Tipton R. E., Landen O. L. et al. Three-dimensional simulations of Nova high growth factor capsule implosion experiments // Physics of Plasmas. 1996. Vol. 3, no. 5. P. 2070–2076.
59. Purvis M. A., Schafgans A., Brown D. J. W. et al. Advancements in predictive plasma formation modeling // Proc. SPIE. 2016. Vol. 9776. P. 97760K–97760K–12.
60. Гольдин В. Я., Четверушкин Б. Н. Методы решения одномерных задач радиационной газовой динамики // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1972. Т. 12, № 4. С. 990–1000. URL: <http://mi.mathnet.ru/zvmmf6661>.
61. Дюдерштадт Д., Мозес Г. Инерциальный термоядерный синтез. Москва: Энергоатомиздат, 1984.
62. Соломянная А. Д., Новиков В. Г. Спектральные характеристики плазмы, согласованные с излучением // Теплофизика высоких температур. 1998. Т. 36, № 6. С. 858–864.
63. Четверушкин Б. Н. Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. Москва: Наука, 1985.
64. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. Москва: Наука, 1966.
65. Самарский А. А., Гайфулин С. А., Захаров А. В. и др. Программа DIANA расчета одномерных задач лазерного термоядерного синтеза // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1983. № 2. С. 38–42.
66. Lebo I. G., Demchenko N. N., Iskakov A. V. et al. Simulation of high-intensity

- laser-plasma interactions by use of the 2D Lagrangian code «ATLANT-HE» // Laser and Particle Beams. 2004. Vol. 22, no. 3. P. 267–273.
67. Брагинский С. И. Явления переноса в плазме // Вопросы теории плазмы / Под ред. М. А. Леонтовича. М.: Атомиздат, 1964. Т. 1. С. 183–272.
68. Гинзбург В. Л., Рухадзе А. А. Волны в магнитоактивной плазме. Москва: Наука, 1975.
69. Семиохин И. А. Элементарные процессы в низкотемпературной плазме. Москва: Издательство МГУ, 1988.
70. Криенберг И. А., Зверев У. А. Пространственная структура катодных плазменных струй в вакуумной дуге // Физика плазмы. 1999. Т. 25, № 1. С. 88–95. URL: <http://mi.mathnet.ru/mm3421>.
71. Ким Д. А., Новиков В. Г., Долголева Г. В. и др. Моделирование источников EUV-излучения с учетом детальной кинетики, включенной in-line в программу радиационной газодинамики // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2012. Т. 51. URL: http://keldysh.ru/papers/2012/prep2012_51.pdf.
72. Novikov V. G. Average Atom Approximation in Non-LTE Level Kinetics // Modern Methods in Collisional-Radiative Modeling of Plasmas / Ed. by Y. Ralchenko. Springer. Vol. 90 of Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics. P. 105–126. URL: <http://gen.lib.rus.ec/scimag/index.php?s=10.1007/978-3-319-27514-7>.
73. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Теория поля. ФИЗМАТЛИТ: Наука, 2003.
74. Власов А. А. О вибрационных свойствах электронного газа // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1938. Т. 8. С. 291. URL: <http://ufn.ru/ru/articles/1967/11/f/>.
75. Перепёлкина А. Ю., Левченко В. Д., Горячев И. А. Трехмерный кинетический код CFHall для моделирования замагниченной плазмы // Математическое моделирование. 2013. Т. 25, № 11. С. 98–110. URL: <http://mi.mathnet.ru/mm3421>.
76. Кравцов Ю. А., Орлов Ю. И. Геометрическая оптика неоднородных сред,

- Москва: Наука, 1980.
77. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. Москва: Наука, 1979.
 78. Cisneros G., Helman J. S., Wagner C. N. J. Dielectric function of liquid tin between 250 and 1100°C // *Physical Review B*. 1982. Vol. 25. P. 4248–4251.
 79. Basko M. M. Testing the laser deposition model in RALEF. Отчёт.
 80. Hirt C., Amsden A., Cook J. An Arbitrary Lagrangian-Eulerian Computing Method for All Flow Speeds // *Journal of Computational Physics*. 1974. Vol. 14, no. 3. P. 227–253.
 81. Самарский А. А., Попов Ю. П. Разностные методы решения задач газовой динамики. Москва: Наука, 1992.
 82. Головизнин В. М., Самарский А. А., Фаворский А. П. Вариационный подход к построению конечно-разностных математических моделей в гидродинамике // *ДАН СССР*. 1977. Т. 235, № 6. С. 1285–1288.
 83. Gentry R. A., Martin R. E., Daly B. J. An Eulerian differencing method for unsteady compressible flow problems // *Journal of Computational Physics*. 1966. Vol. 1, no. 1. P. 87–118.
 84. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. Москва: Мир, 1980.
 85. Shapira Y. *Matrix-Based Multigrid: Theory and Applications*. 2 edition. New York: Springer Publishing Company, 2008.
 86. Карлсон Б. Г., Латроп К. Д. Теория переноса. Метод дискретных ординат // *Вычислительные методы в физике реакторов* / Под ред. Х. Гринпсена, К. Келбера, Д. Окрента. М.: Атомиздат, 1972. С. 102–157.
 87. Rabenseifner R., Hager G., Jost G. Hybrid MPI/OpenMP Parallel Programming on Clusters of Multi-Core SMP Nodes // *Parallel, Distributed and Network-based Processing, 2009 17th Euromicro International Conference on*. 2009. — Feb. P. 427–436.
 88. Рихмайер Р., Мортон К. Разностные методы решения краевых задач. Москва: Мир, 1972.

89. Dukowicz J. K., Meltz B. J. Vorticity errors in multidimensional Lagrangian codes // *Journal of Computational Physics*. 1992. Vol. 99, no. 1. P. 115–134.
90. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Гидродинамика. ФИЗМАТЛИТ: Наука, 2000.
91. Basko M. M., Maruhn J. A., Schlegel T. Hydrodynamic instability of shells accelerated by direct ion beam heating // *Physics of Plasmas*. 2002. Vol. 9, no. 4. P. 1348–1356.
92. Basko M. M., Maruhn J. A., Schlegel T. An efficient cell-centered diffusion scheme for quadrilateral grids // *Journal of Computational Physics*. 2009. Vol. 228, no. 6. P. 2175–2193.
93. Larsen E. W., Morel J. E., Miller W. F. Asymptotic Solutions of Numerical Transport Problems in Optically Thick, Diffusive Regimes // *Journal of Computational Physics*. 1987. Vol. 69, no. 2. P. 283–324.
94. ИПМ им. М. В. Келдыша РАН. Гибридный вычислительный кластер К-100. <http://www.kiam.ru/MVS/resources/k100.html>. Accessed: 2016-01-29.