



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 56 за 2020 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Вичев И.Ю., Ким Д.А.,
Соломянная А.Д., Грушин А.С.

THERMOS: Согласованное
решение уравнения
переноса излучения с
поуровневой кинетикой в
простейших геометриях

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: THERMOS: Согласованное решение уравнения переноса излучения с поуровневой кинетикой в простейших геометриях / И.Ю.Вичев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 56. 30 с.
<http://doi.org/10.20948/prepr-2020-56>
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-56>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук

**И.Ю. Вичев, Д.А. Ким, А.Д. Соломянная,
А.С. Грушин**

**THERMOS: Согласованное решение
уравнения переноса излучения с
поуровневой кинетикой в простейших
геометриях**

Москва — 2020

Вичев И.Ю., Ким Д.А., Соломянная А.Д., Грушин А.С.

THERMOS: Согласованное решение уравнения переноса излучения с поуровневой кинетикой в простейших геометриях

При исследовании лабораторной плазмы характерной наблюдаемой величиной является спектральный поток энергии излучения. Часто экспериментальная плазма может быть описана с помощью плоской, либо цилиндрической, либо сферической геометрии. Для численного моделирования такой плазмы в комплекс программ THERMOS была добавлена возможность согласованного решения системы уравнений поуровневой кинетики в приближении столкновительно-излучательного равновесия с уравнением переноса излучения. Проведена верификация программы на предельных случаях оптически прозрачной и оптически плотной плазмы.

Ключевые слова: неоднородная плазма, перенос излучения, одномерная геометрия, столкновительно-излучательное равновесие

*Ilya Yurievich Vichev, Dmitrii Andreevich Kim,
Anna Dmitrievna Solomyannaya, Alexander Sergeevich Grushin*

THERMOS: Consistent solution of the radiation transport equation with level kinetics in simple geometries

In the study of laboratory plasma, the characteristic observed quantity is the spectral flux of radiation energy. Usually, the experimentally obtained plasma has a plane, either cylindrical or spherical geometry. For the numerical simulation of such plasma, into the THERMOS toolkit there was added the possibility of a consistent solution of the system of rate equations in the collisional-radiative equilibrium approximation with the radiation transfer equation. The code was verified on the limiting cases of optically thin and thick plasmas.

Key words: inhomogeneous plasma, radiation transfer, one-dimensional geometry, collisional-radiative equilibrium

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-01-00485. Расчёты производились на суперкомпьютерах “МВС-10П” (МСЦ РАН) и “К-100” (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН).

Введение

Разработка программного комплекса THERMOS [1] была начата в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН в начале 2000-х годов. В основу комплекса легли работы А.Ф. Никифорова, В.Б. Уварова и В.Г. Новикова в области квантово-статистических моделей и итерационных методов решения нелинейных систем уравнений [2].

Программный комплекс THERMOS включает в себя набор кодов для расчёта термодинамических и радиационных свойств как равновесной, так и неравновесной плазмы (см. рис. 1).

Расчёты равновесной плазмы проводятся “из первых принципов” на основе приближения среднего атома [2]. На текущий момент доступны три варианта: модель Томаса-Ферми (THERMOS_TF), модифицированная модель Хартри-Фока-Слэтера (THERMOS_HFS) и квазизонная модель (THERMOS_QZM) [3]. Кроме того, для малоплотной равновесной плазмы может быть использовано приближение Саха-Больцмана (THERMOS_SB).

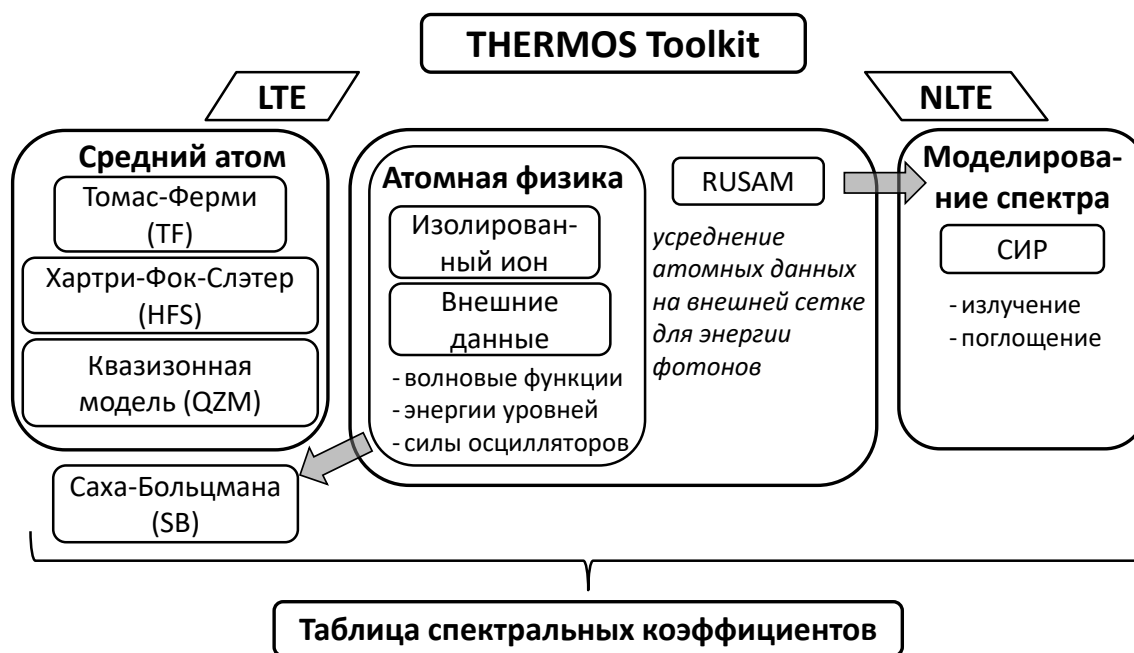


Рис. 1. Структура программного комплекса THERMOS

При моделировании неравновесной плазмы применяется код THERMOS_CRE, основанный на модели столкновительно-излучательного равновесия, где решается система поуровневой кинетики в квазистационарном приближении с фиксированным полем излучения [1]. Коды THERMOS_SB и THERMOS_CRE используют заранее подготовленную базу атомных данных.

Расчёт базы атомных данных для вещества проводится на основе модели изолированного иона с автоперебором нерелятивистских конфигураций внутри иона [4]. Комплекс включает в себя модуль, который позволяет уточнить положение спектральных линий и сил осцилляторов, используя данные из детальных атомных

кодов (RCG [5], FAC [6], HULLAC [7]), экспериментов или из других известных источников (NIST [8], Spectr-W3 [9] и др.). В дополнение к этому была разработана специальная методика усреднения атомных данных на заданной сетке по энергии фотонов – Radiative Unresolved Spectra Atomic Model (RUSAM) [10], позволяющая сократить время расчёта без ущерба для точности.

Получаемые с помощью комплекса THERMOS таблицы термодинамических и радиационных свойств используются различными научными организациями РФ – ФИАН, РНЦ Курчатовский институт, ВНИИЭФ, ВНИИТФ, ИСАН, ТРИНИТИ – для полномасштабного моделирования экспериментов [11, 12, 13, 14, 15].

В последние несколько лет практически всё ядро комплекса было переписано на современном варианте языка FORTRAN с применением методов объектно-ориентированного программирования и эффективного распараллеливания вычислений. Модель столкновительно-излучательного равновесия была расширена и теперь позволяет вычислять радиационные характеристики плазмы в различных вариантах с любым заданным полем излучения, включая предельные случаи локального термодинамического равновесия, прозрачной плазмы и коронального равновесия. Для учёта плотностных эффектов в программы комплекса THERMOS были включены модели снижения потенциалов ионизации Стюарта-Пьятта [16] и Экера-Кролла [17].

Спектр излучения плазмы является одним из основных источников знаний о её свойствах. В большинстве случаев измеренные спектры излучения или прохождения имеют довольно сложный вид из-за большого числа спектральных линий. Требуются надежные методы интерпретации спектроскопических данных. Один из наиболее общих подходов к расчёту кинетики населённостей в плазме и её спектров – численное моделирование в приближении столкновительно-излучательного равновесия. Кроме того, для более точного описания экспериментальных результатов в модель приходится включать размеры плазмы и эффекты непрозрачности [18, 19]. Для расширения возможностей комплекса программ THERMOS в него была добавлена программа THERMOS_Layer, в которой согласованно решается система уравнений поуровневой кинетики с уравнением переноса излучения в одномерной геометрии (бесконечный плоский слой, бесконечный цилиндр и шар).

Формальное решение уравнения переноса излучения

Рассмотрим уравнение переноса излучения в виде

$$\frac{dI_\omega}{ds} = j_\omega - \kappa_\omega I_\omega, \quad (1)$$

где I_ω – спектральная интенсивность энергии излучения, j_ω и κ_ω – спектральные коэффициенты излучения и поглощения. Коэффициенты излучения и поглощения зависят как от температуры и плотности вещества, так и от поля излучения [4].

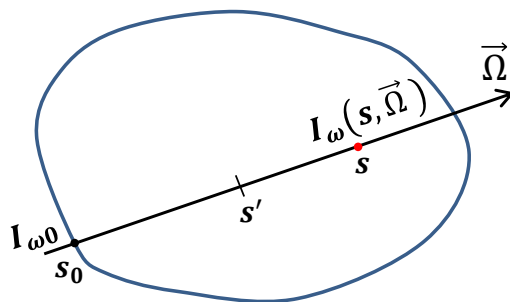


Рис. 2. Схематическое изображение рассматриваемой задачи

Произведём формальное интегрирование уравнения (1) вдоль луча s в направлении $\vec{\Omega}$ для граничного условия [20]

$$I_{\omega}(s = s_0, \vec{\Omega}) = I_{\omega 0}.$$

На рис. 2 схематически изображены координаты, используемые при формальном интегрировании уравнения переноса излучения. Запишем решение уравнения (1) для интенсивности излучения в интегральной форме

$$I_{\omega}(s) = I_{\omega 0} \exp \left[- \int_{s_0}^s \kappa_{\omega} ds' \right] + \int_{s_0}^s \kappa_{\omega} S_{\omega} \exp \left[- \int_{s'}^s \kappa_{\omega} ds'' \right] ds',$$

где $S_{\omega}(s) = \frac{j_{\omega}(s)}{\kappa_{\omega}(s)}$ – функция источников вдоль луча s .

Модель столкновительно-излучательного равновесия

Модель столкновительно-излучательного равновесия позволяет определить населённости основных и возбужденных состояний атомов и ионов в плазме [21]. Концентрация иона $x_{k\xi}$ кратности k в квантовом состоянии ξ зависит от населённостей других состояний ионов и вероятностей переходов между ними. Для определения населённостей всех рассматриваемых состояний ионов необходимо решить систему уравнений:

$$\frac{dx_{k\xi}}{dt} = -x_{k\xi} \left(\sum_{\xi'} \alpha_{k\xi \rightarrow k-1, \xi'} + \sum_{\xi'} \alpha_{k\xi \rightarrow k+1, \xi'} + \sum_{\xi'} \alpha_{k\xi \rightarrow k\xi'} \right) + \sum_{\xi'} x_{k+1, \xi'} \alpha_{k+1, \xi' \rightarrow k\xi} + \sum_{\xi'} x_{k-1, \xi'} \alpha_{k-1, \xi' \rightarrow k\xi} + \sum_{\xi'} x_{k\xi'} \alpha_{k\xi' \rightarrow k\xi}, \quad (2)$$

или в матричной форме:

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{X}, \quad (3)$$

$$\sum_{k\xi} x_{k\xi} = 1, \quad \sum_{k\xi} kx_{k\xi} = Z_0, \quad k = 0..Z, \quad (4)$$

где $\mathbf{X} \equiv \{x_{k\xi}\}$ – вектор населённостей, Z_0 – средний заряд, Z – атомный номер. \mathbf{A} – матрица скоростей процессов – может быть представлена в виде:

$$\begin{bmatrix} A_{00} & R_{01} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ I_{01} & A_{11} & R_{12} & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & I_{k-2,k-1} & A_{k-1,k-1} & R_{k-1,k} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & I_{k-1,k} & A_{k,k} & R_{k,k+1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & I_{k,k+1} & A_{k+1,k+1} & R_{k+1,k+2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & I_{Z-2,Z-1} & A_{Z-1,Z-1} & R_{Z-1,Z} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & I_{Z-1,Z} & A_{Z,Z} \end{bmatrix} \quad (5)$$

При этом диагональные блоки матрицы (5) строятся следующим образом:

$$A_{kk} = \begin{bmatrix} a_{k0,k0} & \dots & a_{k0,k\xi} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k\xi,k0} & \dots & a_{k\xi,k\xi} \end{bmatrix}. \quad (6)$$

Диагональные элементы матрицы (6) включают в себя скорости ухода из состояния $k\xi$ за счёт процессов ионизации/рекомбинации, возбуждения/тушения, поглощения/излучения в другие возможные состояния

$$a_{k\xi,k\xi} = - \sum_{\xi'} \alpha_{k\xi \rightarrow k+1,\xi'} - \sum_{\xi'} \alpha_{k\xi \rightarrow k-1,\xi'} - \sum_{\xi'} \alpha_{k\xi \rightarrow k\xi'}. \quad (7)$$

Недиагональные элементы матрицы (6) включают в себя скорости прихода из всех состояний $k\xi'$ за счёт процессов возбуждения/тушения, поглощения/излучения

$$a_{k\xi,k\xi'} = \sum_{\xi'} \alpha_{k\xi' \rightarrow k\xi}. \quad (8)$$

Под- и наддиагональные блоки матрицы (5) формируются за счёт скоростей процессов ионизации и рекомбинации соответственно:

$$I_{k-1,k} = [\alpha_{k-1,\xi' \rightarrow k\xi}], R_{k,k+1} = [\alpha_{k+1,\xi' \rightarrow k\xi}]. \quad (9)$$

Скорость рекомбинации $R_{k-1,k}$ иона из состояния $k\xi$ в состояние $k-1, \xi'$ выражается суммой скоростей трёхчастичной рекомбинации $\alpha_{k\xi \rightarrow k-1,\xi'}^{ir}$, фоторекомбинации $\alpha_{k\xi \rightarrow k-1,\xi'}^{phr}$ и диэлектронной рекомбинации $\alpha_{k\xi \rightarrow k-1,\xi'}^{dc}$ с переходом электрона из непрерывного спектра на одноэлектронный уровень с квантовыми числами $n\ell$, при этом число электронов на уровне $n\ell$ до и после связаны соотношением: $N_{n\ell}^{k-1,\xi'} = N_{n\ell}^{k\xi} + 1$

$$\alpha_{k\xi \rightarrow k-1,\xi'} = \alpha_{k\xi \rightarrow k-1,\xi'}^{ir} + \alpha_{k\xi \rightarrow k-1,\xi'}^{phr} + \alpha_{k\xi \rightarrow k-1,\xi'}^{dc}. \quad (10)$$

Скорость ионизации $I_{k,k+1}$ иона из состояния $k\xi$ в состояние $k+1, \xi'$ выражается суммой скоростей столкновительной ионизации $\alpha_{k\xi \rightarrow k+1,\xi'}^{ci}$, фотоионизации $\alpha_{k\xi \rightarrow k+1,\xi'}^{phi}$ и автоионизации $\alpha_{k\xi \rightarrow k+1,\xi'}^{ai}$, при которых происходит ионизация уровня с квантовыми числами $n\ell$, при этом $N_{n\ell}^{k+1,\xi'} = N_{n\ell}^{k\xi} - 1$

$$\alpha_{k\xi \rightarrow k+1,\xi'} = \alpha_{k\xi \rightarrow k+1,\xi'}^{ci} + \alpha_{k\xi \rightarrow k+1,\xi'}^{phi} + \alpha_{k\xi \rightarrow k+1,\xi'}^{ai}. \quad (11)$$

Скорости переходов из состояния $k\xi$ в $k\xi'$ без изменения ионизации имеют вид

$$\alpha_{k\xi \rightarrow k,\xi'} = \begin{cases} \alpha_{k\xi \rightarrow k,\xi'}^{ce} + \alpha_{k\xi \rightarrow k,\xi'}^{abs}, & \text{если } E_{k\xi} < E_{k\xi'}, \\ \alpha_{k\xi \rightarrow k,\xi'}^{cd} + \alpha_{k\xi \rightarrow k,\xi'}^{em}, & \text{если } E_{k\xi} > E_{k\xi'}, \end{cases} \quad (12)$$

где $E_{k\xi}$ – энергия состояния $k\xi$, $\alpha_{k\xi \rightarrow k,\xi'}^{ce}$ и $\alpha_{k\xi \rightarrow k,\xi'}^{cd}$ – скорости возбуждения и гашения электронным ударом, а $\alpha_{k\xi \rightarrow k,\xi'}^{abs}$ и $\alpha_{k\xi \rightarrow k,\xi'}^{em}$ – скорости радиационного возбуждения (поглощения фотона) и излучения соответственно, с переходом электрона $n\ell \rightarrow n'\ell'$ (учитываются одноэлектронные дипольные переходы $\Delta\ell = 1$, причём $N_{n\ell}^{k\xi'} = N_{n\ell}^{k\xi} - 1$; $N_{n'\ell'}^{k\xi'} = N_{n'\ell'}^{k\xi} + 1$).

Населённости основных и возбужденных состояний ионов зависят от интенсивности излучения через скорости радиационных процессов [4]. При этом интенсивность излучения определяется коэффициентами поглощения κ_ω и излучательной способности j_ω , которые, в свою очередь, зависят от населённостей. Таким образом, в общем случае необходимо решать самосогласованно уравнение переноса излучения (1) и систему уравнений поуровневой кинетики (2).

Для многих задач, где термодинамические параметры меняются медленно по сравнению со скоростями элементарных процессов, можно использовать квазистационарное приближение, полагая $d\mathbf{X}/dt = 0$. Это упрощение может быть критически важным для уменьшения времени расчёта в случаях, когда число учитываемых конфигураций очень велико и размерность матрицы \mathbf{A} достигает, например, $10^6 \times 10^6$. В программе THERMOS_Layer реализовано квазистационарное приближение для решения системы уравнений поуровневой кинетики.

Спектральная плотность фотонов

При расчёте скорости фотоионизации требуется знать спектральную плотность фотонов, поэтому воспользуемся следующим выражением:

$$I_\omega = \frac{15}{\pi^5} \sigma \omega^3 W(\omega),$$

где σ – постоянная Стефана-Больцмана, $W(\omega)$ – спектральная плотность фотонов. В случае локального термодинамического равновесия спектральная плотность фотонов описывается функцией

$$W_P(\omega, T) = \frac{1}{\exp(\omega/T) - 1}.$$

Для плотности энергии излучения можно записать

$$U_\omega = \frac{4\pi}{c} \frac{15}{\pi^5} \sigma \omega^3 W(\omega).$$

Отсюда для спектральной плотности фотонов имеем

$$W(\omega) = \frac{U_\omega}{\frac{4\pi}{c} \frac{15}{\pi^5} \sigma \omega^3}.$$

Бесконечный плоский слой

Решение для однородного плоского слоя

Уравнение переноса излучения для плоского бесконечного слоя имеет вид

$$\mu \frac{dI_\omega(z, \theta)}{dz} + \kappa_\omega(z) I_\omega(z, \theta) = j_\omega(z), \quad (13)$$

где I_ω – спектральная интенсивность энергии излучения в направлении $\vec{\Omega}$, $\mu = \cos \theta$. Найдём решение уравнения переноса излучения для однородного плоского слоя, где коэффициент поглощения κ_ω и излучательная способность j_ω постоянны по z (см. рис. 3).

Решение однородного уравнения

$$\mu \frac{dI_\omega(z, \theta)}{dz} + \kappa_\omega I_\omega(z, \theta) = 0$$

имеет вид $I_\omega(z, \mu) = C \exp\left(-\frac{\kappa_\omega z}{\mu}\right)$. Подставим в (13) и определим коэффициент C :

$$C = \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left[\exp\left(\frac{\kappa_\omega z}{\mu}\right) + A \right].$$

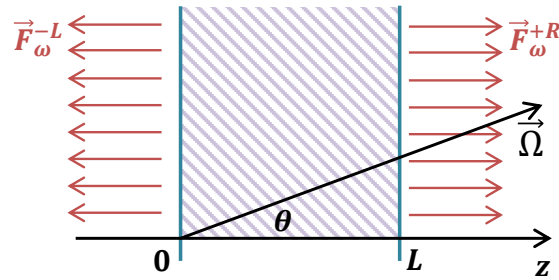


Рис. 3. Плоский слой плазмы толщины L

Получаем решение уравнения переноса (13)

$$I_{\omega}(z, \mu) = \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} \left[1 + A \exp\left(-\frac{\kappa_{\omega} z}{\mu}\right) \right],$$

где коэффициент A определяется в зависимости от граничных условий.

В отсутствие внешних источников излучения граничное условие на левой границе плоского слоя ($z = 0$) может быть записано в виде

$$I_{\omega}(z = 0, \mu > 0) = 0,$$

тогда получим, что коэффициент $A = -1$.

В итоге решение уравнения переноса излучения (13) для однородного плоского слоя в отсутствие внешних источников излучения может быть представлено в виде

$$I_{\omega}(z = L, \mu > 0) = \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right) \right],$$

где $\tau = \kappa_{\omega} L$ – оптическая толщина слоя.

Запишем выражение для определения спектрального потока энергии излучения

$$\vec{F}_{\omega} = \int I_{\omega} \vec{\Omega} d\Omega, \quad (14)$$

где $d\Omega$ – элемент телесного угла.

Найдём проекцию векторной величины F_{ω} на ось Oz для однородного слоя

толщины L

$$\begin{aligned}
F_{\omega z}(z = L, \mu > 0) &= \int_0^{\pi/2} I_{\omega} \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \\
&= 2\pi \int_0^{\pi/2} \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\cos \theta}\right) \right] \cos \theta \sin \theta d\theta = \\
&= \pi \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} [1 - 2E_3(\tau)] = \\
&= \pi \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} [1 - e^{-\tau} + \tau e^{-\tau} - \tau^2 E_1(\tau)].
\end{aligned} \tag{15}$$

При выводе использовались определение и рекуррентное соотношение для интегральной экспоненты:

$$E_n(x) = \int_1^{\infty} t^{-n} e^{-xt} dt, \quad nE_{n+1}(x) = e^{-x} - xE_n(x). \tag{16}$$

Запишем выражение для определения спектральной плотности энергии излучения

$$U_{\omega} = \frac{1}{c} \int I_{\omega} d\Omega, \tag{17}$$

где c – скорость света.

Найдём значение величины U_{ω} в центре однородного слоя толщины L

$$\begin{aligned}
U_{\omega} &= \frac{1}{c} \int_0^{\pi} I_{\omega} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \\
&= \frac{2\pi}{c} \int_0^{\pi/2} (I_{\omega}^{+R} + I_{\omega}^{-L}) \sin \theta d\theta = \\
&= \frac{4\pi}{c} \int_0^{\pi/2} \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau/2}{\cos \theta}\right) \right] \sin \theta d\theta = \\
&= \frac{4\pi}{c} \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} [1 - E_2(\tau/2)] = \\
&= \frac{4\pi}{c} \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} \left[1 - e^{-\tau/2} + \frac{\tau}{2} E_1(\tau/2) \right],
\end{aligned}$$

где I_{ω}^{+R} – спектральная интенсивность энергии излучения, определяемая фотонами, пришедшими слева от центра слоя, I_{ω}^{-L} – спектральная интенсивность энергии излучения, определяемая фотонами, пришедшими справа от центра слоя.

Решение для неоднородного плоского слоя

Пусть задан плоский слой плазмы толщины L , состоящий из N подслоёв $[z_{i-1}, z_i]$, $i = 1 \dots N$, $z_0 = 0$, каждый из которых имеет заданную температуру T_i и плотность электронов $n_{e,i}$. В данном разделе для сокращения записи в формулах

опустим символ ω (энергия фотонов). В каждом из слоёв коэффициенты излучения j_i и поглощения κ_i будем считать постоянными. Введём определение функции источника для i -го слоя в виде

$$S_i = \frac{j_i}{\kappa_i}$$

и оптическую толщину

$$\tau_i = \kappa_i(z_i - z_{i-1}).$$

Спектральную интенсивность энергии излучения в центре i -го слоя можно представить в виде

$$I_i = \begin{cases} I_i^{+R}, & \text{если } \mu > 0, \\ I_i^{-L}, & \text{если } \mu < 0, \end{cases}$$

где I_i^{+R} – спектральная интенсивность энергии излучения, определяемая фотонами, пришедшими от слоёв, расположенных слева от центра i -го слоя, I_i^{-L} – спектральная интенсивность энергии излучения, определяемая фотонами, пришедшими от слоёв, расположенных справа от центра i -го слоя:

$$\begin{aligned} I_i^{+R} &= S_i \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_i/2}{\mu}\right) \right] + \\ &+ \sum_{j=1}^{i-1} S_j \left[\exp\left(-\frac{\sum_{j'=j+1}^i \tau_{j'}}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{\sum_{j'=j}^i \tau_{j'}}{\mu}\right) \right], \\ I_i^{-L} &= S_i \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_i/2}{\mu}\right) \right] + \\ &+ \sum_{j=i+1}^N S_j \left[\exp\left(-\frac{\sum_{j'=i}^{j-1} \tau_{j'}}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{\sum_{j'=i}^j \tau_{j'}}{\mu}\right) \right], \end{aligned}$$

если $j' = i$, то $\tau_{j'}|_{j'=i} = \tau_i/2$.

Выпишем выражение для определения проекции спектрального потока энергии излучения, выходящего с левой поверхности слоя ($z = z_0 = 0$):

$$\begin{aligned} F_z^{-L}(z = z_0, \mu < 0) &= \int_0^{\pi/2} \left(I_1^{-L}(z = z_0) \right) \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \\ &= 2\pi S_1 \int_0^1 \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_1}{\mu}\right) \right] \mu d\mu + \\ &+ 2\pi \sum_{j=2}^N S_j \int_0^1 \left[\exp\left(-\frac{\sum_{j'=1}^{j-1} \tau_{j'}}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{\sum_{j'=1}^j \tau_{j'}}{\mu}\right) \right] \mu d\mu. \end{aligned}$$

Аналогичным образом определим проекцию спектрального потока энергии

излучения, выходящего с правой поверхности слоя ($z = z_N = L$):

$$\begin{aligned}
F_z^{+R}(z = z_N, \mu > 0) &= \int_0^{\pi/2} \left(I_N^{+R}(z_N = L) \right) \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \\
&= 2\pi S_N \int_0^1 \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_N}{\mu}\right) \right] \mu d\mu + \\
&+ 2\pi \sum_{j=1}^{N-1} S_j \int_0^1 \left[\exp\left(-\frac{\sum_{j'=j+1}^N \tau_{j'}}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{\sum_{j'=j}^N \tau_{j'}}{\mu}\right) \right] \mu d\mu.
\end{aligned}$$

Введём обозначения

$$\zeta_j^L = \sum_{j'=1}^j \tau_{j'}, \quad \zeta_j^R = \sum_{j'=j}^N \tau_{j'} \quad (18)$$

и воспользуемся рекуррентным соотношением для интегральной экспоненты (16), тогда можно записать

$$\begin{aligned}
F_z^{-L} &= \pi S_1 [1 - 2E_3(\tau_1)] + \pi \sum_{j=2}^N S_j \left[2E_3(\zeta_{j-1}^L) - 2E_3(\zeta_j^L) \right] = \\
&= \pi S_1 [1 - e^{-\tau_1} + \tau_1 e^{-\tau_1} - \tau_1^2 E_1(\tau_1)] + \\
&+ \pi \sum_{j=2}^N S_j \left\{ e^{-\zeta_{j-1}^L} - \zeta_{j-1}^L e^{-\zeta_{j-1}^L} + (\zeta_{j-1}^L)^2 E_1(\zeta_{j-1}^L) - \right. \\
&\left. - \left[e^{-\zeta_j^L} - \zeta_j^L e^{-\zeta_j^L} + (\zeta_j^L)^2 E_1(\zeta_j^L) \right] \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_z^{+R} &= \pi S_N [1 - 2E_3(\tau_N)] + \pi \sum_{j=1}^{N-1} S_j \left[2E_3(\zeta_{j+1}^R) - 2E_3(\zeta_j^R) \right] = \\
&= \pi S_N [1 - e^{-\tau_N} + \tau_N e^{-\tau_N} - \tau_N^2 E_1(\tau_N)] + \\
&+ \pi \sum_{j=1}^{N-1} S_j \left\{ e^{-\zeta_{j+1}^R} - \zeta_{j+1}^R e^{-\zeta_{j+1}^R} + (\zeta_{j+1}^R)^2 E_1(\zeta_{j+1}^R) - \right. \\
&\left. - \left[e^{-\zeta_j^R} - \zeta_j^R e^{-\zeta_j^R} + (\zeta_j^R)^2 E_1(\zeta_j^R) \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Для вычисления спектральных коэффициентов внутри слоя необходимо знать спектральную плотность энергии излучения в этом слое. Спектральную плотность энергии излучения будем вычислять в центрах слоёв, тогда для i -го слоя имеем

$$U_i = U_i^{+R} + U_i^{-L},$$

где U_i^{+R} – вклад в плотность энергии за счёт фотонов с $\mu > 0$, U_i^{-L} – вклад в плотность энергии за счёт фотонов с $\mu < 0$:

$$U_i^{+R} = \frac{2\pi}{c} S_i \int_0^1 \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_i/2}{\mu}\right) \right] d\mu + \\ + \frac{2\pi}{c} \sum_{j=1}^{i-1} S_j \int_0^1 \left[\exp\left(-\frac{\sum_{j'=j+1}^i \tau_{j'}}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{\sum_{j'=j}^i \tau_{j'}}{\mu}\right) \right] d\mu,$$

$$U_i^{-L} = \frac{2\pi}{c} S_i \int_0^1 \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_i/2}{\mu}\right) \right] d\mu + \\ + \frac{2\pi}{c} \sum_{j=i+1}^N S_j \int_0^1 \left[\exp\left(-\frac{\sum_{j'=1}^{j-1} \tau_{j'}}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{\sum_{j'=1}^j \tau_{j'}}{\mu}\right) \right] d\mu,$$

если $j' = i$, то $\tau_{j'}|_{j'=i} = \tau_i/2$.

Воспользуемся обозначением (18) и рекуррентным соотношением для интегральной экспоненты (16), тогда имеем

$$U_i^{+R} = \frac{2\pi}{c} S_i \left[1 - E_2\left(\frac{\tau_i}{2}\right) \right] + \\ + \frac{2\pi}{c} \sum_{j=1}^{i-1} S_j \left[E_2\left(\zeta_{j+1}^R\right) - E_2\left(\zeta_j^R\right) \right] = \\ = \frac{2\pi}{c} S_i \left[1 - \exp\left(\frac{\tau_i}{2}\right) + \frac{\tau_i}{2} E_1\left(\frac{\tau_i}{2}\right) \right] + \\ + \frac{2\pi}{c} \sum_{j=1}^{i-1} S_j \left\{ \exp\left(\zeta_{j+1}^R\right) - \zeta_{j+1}^R E_1\left(\zeta_{j+1}^R\right) - \left[\exp\left(\zeta_j^R\right) - \zeta_j^R E_1\left(\zeta_j^R\right) \right] \right\},$$

$$U_i^{-L} = \frac{2\pi}{c} S_i \left[1 - E_2\left(\frac{\tau_i}{2}\right) \right] + \\ + \frac{2\pi}{c} \sum_{j=i+1}^N S_j \left[E_2\left(\zeta_{j-1}^L\right) - E_2\left(\zeta_j^L\right) \right] = \\ = \frac{2\pi}{c} S_i \left[1 - \exp\left(\frac{\tau_i}{2}\right) + \frac{\tau_i}{2} E_1\left(\frac{\tau_i}{2}\right) \right] + \\ + \frac{2\pi}{c} \sum_{j=i+1}^N S_j \left\{ \exp\left(\zeta_{j-1}^L\right) - \zeta_{j-1}^L E_1\left(\zeta_{j-1}^L\right) - \left[\exp\left(\zeta_j^L\right) - \zeta_j^L E_1\left(\zeta_j^L\right) \right] \right\},$$

где дополнительно отметим, что в ζ^L и ζ^R при $j' = i$ используется $\tau_{j'}|_{j'=i} = \tau_i/2$.

Сферическая геометрия

Решение для слоя будем искать методом непосредственного численного интегрирования [22] уравнения (1). Чтобы найти интенсивность энергии излучения

в заданной точке расчётной области, проведём через эту точку лучи в различных направлениях. Для каждого из лучей будем использовать формальное решение уравнения переноса при отсутствии внешних источников излучения.

$$I(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_0^{s_{\max}} \kappa(s) S(s) e^{-\tau(s)} ds, \quad (19)$$

$$\tau(s) = \int_0^s \kappa(s') ds'. \quad (20)$$

Здесь s – расстояние, отсчитываемое вдоль луча в сторону, противоположную направлению распространения фотонов $\vec{\Omega}$, так что $s = 0$ соответствует радиус-вектору \vec{r} , а s_{\max} – пересечению луча с границей излучающего тела.

Это формальное решение, при отсутствии рассеяния, является точным решением уравнения переноса вдоль луча, выраженным в интегральном виде. Выбор пространственных направлений, в которых испускаются лучи, должен производиться с учётом решаемой задачи и особенностей интегрирования на оптически толстых расчётных интервалах. При увеличении числа лучей, испускаемых из каждой пространственной расчётной точки, решение должно сходиться к точному значению интеграла по угловым переменным. Данный метод получил название метода дискретных направлений.

Рассмотрим неоднородный слой радиуса R , обладающий сферической симметрией. Так как коэффициент поглощения κ и функция источника S зависят только от модуля радиус-вектора, то формулы (19) – (20) можно переписать в виде

$$I(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_0^{s_{\max}} \kappa(r') S(r') e^{-\tau(s)} ds, \quad (21)$$

$$\tau(s) = \int_0^s \kappa(r'') ds'. \quad (22)$$

Чтобы упростить геометрические построения, введём систему координат особым образом. Пусть плоскость Oxy проходит через векторы \vec{r} и $\vec{\Omega}$, при этом направление оси Oy совпадает с направлением радиус-вектора \vec{r} (см. рис. 4). Тогда координаты x и y связаны с переменной s соотношениями

$$x = -s \sin \varphi, \quad y = r - s \cos \varphi.$$

Обозначим $\mu = \cos \varphi$, тогда

$$r'(s) = \sqrt{x^2 + y^2} = \sqrt{s^2 + r^2 - 2rs\mu}, \quad (23)$$

$$r''(s') = \sqrt{(s')^2 + r^2 - 2rs'\mu}. \quad (24)$$

Верхний предел интегрирования s_{\max} определяется из условия $r' = R$:

$$s_{\max} = r\mu + \sqrt{R^2 - r^2(1 - \mu^2)}. \quad (25)$$

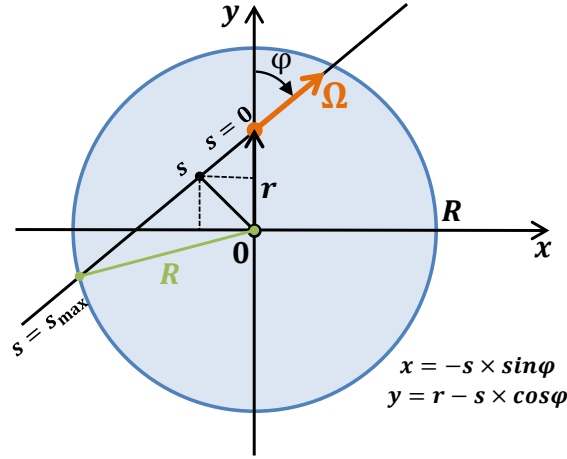


Рис. 4. Система координат

Выражения (21), (22) и (23) – (25) полностью определяют решение уравнения переноса излучения (1) и справедливы во всём интервале значений $\varphi = [0, \pi]$ ($\mu = [-1, 1]$).

Будем искать решение для слоя плазмы, обладающего сферической симметрией, состоящего из N_r подслоёв $[r_{i-1}, r_i]$, $i = 1 \dots N_r$, $r_0 = 0$, каждый из которых имеет заданную температуру T_i и плотность электронов $n_{e,i}$. В каждом из подслоёв коэффициенты излучения j_i и поглощения κ_i будем считать постоянными.

Путь, вдоль которого проводится интегрирование, пересекает границы слоёв в точках

$$s_j = r\mu \pm \sqrt{r_i^2 - r^2(1 - \mu^2)}.$$

Для каждой границы пересечения луча с i -м слоем должно выполняться условие

$$0 \leq s_j \leq s_{\max},$$

отсюда определяется общее количество пересечений N_s . Полученные значения s_j сортируются в порядке возрастания. Тогда интегралы в выражениях (21), (22) могут быть представлены в виде суммы по интервалам $[s_{j-1}, s_j]$, $j = 1 \dots N_s$, $s_0 = 0$, $\tau_0 = 0$.

$$I_{j-1}(r, \varphi) = \int_0^{s_{j-1}} \kappa(r') S(r') e^{-\tau(s)} ds,$$

$$\tau_{j-1} = \int_0^{s_{j-1}} \kappa(r'') ds' = \sum_{m=1}^{j-1} \kappa_m (s_m - s_{m-1}).$$

Тогда на интервале $s_{j-1} \leq s \leq s_j$ имеем

$$\tau(s) = \tau_{j-1} + \kappa_j (s - s_{j-1}),$$

$$\begin{aligned} I_j(r, \varphi) &= I_{j-1}(r, \varphi) + \kappa_j S_j e^{-\tau_{j-1}} \int_{s_{j-1}}^{s_j} e^{-\kappa_j (s - s_{j-1})} ds = \\ &= I_{j-1}(r, \varphi) + S_j e^{-\tau_{j-1}} (1 - e^{-\kappa_j (s_j - s_{j-1})}). \end{aligned}$$

Спектральная интенсивность энергии излучения на границе i -го слоя имеет вид

$$I(r = r_i, \varphi) = \sum_{j=1}^{N_s} S_j \exp \left(- \sum_{j'=0}^{j-1} \Delta\tau_{j'} \right) [1 - e^{-\Delta\tau_j}],$$

$$\Delta\tau_j = \kappa_j(s_j - s_{j-1}), \quad \Delta\tau_0 = 0.$$

Так как интенсивность энергии излучения зависит от модуля радиус-вектора r и угла φ между радиус-вектором и направлением распространения фотонов $\vec{\Omega}$ (см. рис. 5), разобьём пространство по углу $\varphi = [0, \pi]$ на N_φ секторов $[\varphi_{n-1}, \varphi_n]$,

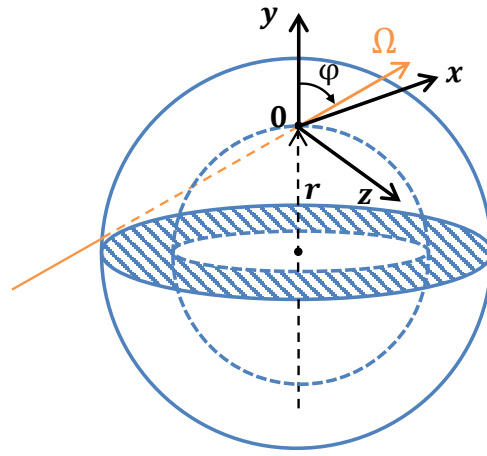


Рис. 5. Сферический слой

$n = 1 \dots N_\varphi$. Тогда спектральные проекция потока на направление радиус-вектора \vec{r} и плотность энергии излучения определяются из выражений

$$\begin{aligned} F_r(r) &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\pi I(r, \varphi) \cos \varphi \sin \varphi d\varphi = \\ &= 2\pi \int_{-1}^1 I(r, \mu) \mu d\mu = \\ &= 2\pi \sum_{n=1}^{N_\varphi} \left(\frac{\mu_{n-1}^2 - \mu_n^2}{2} \right) \sum_{j=1}^{N_s} S_j \exp \left(- \sum_{j'=0}^{j-1} \Delta\tau_{j'} \right) [1 - e^{-\Delta\tau_j}], \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} U(r) &= \frac{1}{c} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\pi I(r, \varphi) \sin \varphi d\varphi = \\ &= \frac{2\pi}{c} \int_{-1}^1 I(r, \mu) d\mu = \\ &= \frac{2\pi}{c} \sum_{n=1}^{N_\varphi} (\mu_{n-1} - \mu_n) \sum_{j=1}^{N_s} S_j \exp \left(- \sum_{j'=0}^{j-1} \Delta\tau_{j'} \right) [1 - e^{-\Delta\tau_j}]. \end{aligned}$$

Цилиндрическая геометрия

В случае осевой симметрии интенсивность энергии излучения зависит от модуля радиус-вектора r и направления распространения фотонов $\vec{\Omega}$, которое можно задать с помощью азимутального угла φ между проекцией $\vec{\Omega}$ на плоскость $0xy$, перпендикулярную оси $0z$, и радиус-вектором \vec{r} (лежит в плоскости $0xy$), и полярного угла θ между $\vec{\Omega}$ и осью $0z$ (см. рис. 6). Тогда спектральные проекция потока

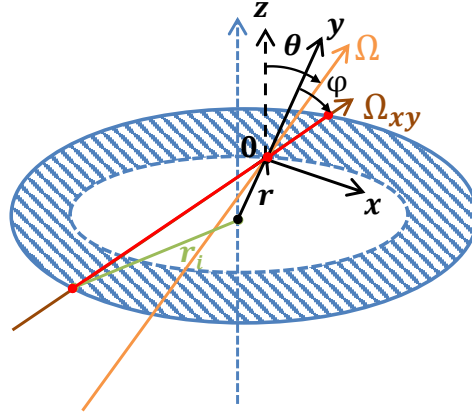


Рис. 6. Цилиндрический слой

на направление радиус-вектора \vec{r} и плотность энергии излучения определяются из выражений

$$\begin{aligned} F_r(r) &= \int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi \int_0^\pi I(r, \varphi, \theta) \sin^2 \theta d\theta = \\ &= 4 \int_0^\pi \cos \varphi d\varphi \int_0^{\pi/2} I(r, \varphi, \theta) \sin^2 \theta d\theta, \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} U(r) &= \frac{1}{c} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi I(r, \varphi, \theta) \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{4}{c} \int_0^\pi d\varphi \int_0^{\pi/2} I(r, \varphi, \theta) \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь было учтено, что ввиду симметрии $I(r, \varphi, \pi - \theta) = I(r, -\varphi, \theta) = I(r, \varphi, \theta)$. Так как κ и S не зависят от z , то интегрирование вдоль направления в формулах (21) и (22) сводится к интегрированию вдоль проекции $\vec{\Omega}$ на плоскость $0xy$, которое выполняется аналогично случаю сферической симметрии с единственным отличием – коэффициент поглощения $\kappa(r)$ заменяется на $\kappa(r, \theta) = \frac{\kappa(r)}{\sin \theta}$.

Тогда для спектральной интенсивности энергии излучения на границе i -го слоя имеем

$$I(r = r_i, \varphi, \theta) = \sum_{j=1}^{N_s} S_j \exp \left(-\frac{1}{\sin \theta} \sum_{j'=0}^{j-1} \Delta \tau_{j'} \right) \left[1 - \exp \left(-\frac{\Delta \tau_j}{\sin \theta} \right) \right].$$

$$\Delta\tau_j = \kappa_j(s_j - s_{j-1}), \quad \Delta\tau_0 = 0.$$

Произведём замену переменных $t = \sin^{-1} \theta$ и введём обозначение для интеграла

$$A_m(z) = \int_1^\infty \frac{\exp(-zt)}{t^m \sqrt{t^2 - 1}} dt, \quad (29)$$

тогда формулы (27) и (28) примут вид

$$F_r(r) = 4 \sum_{n=1}^{N_\varphi} (\sin \varphi_n - \sin \varphi_{n-1}) \sum_{j=1}^{N_s} S_j \left[A_3 \left(\sum_{j'=0}^{j-1} \Delta\tau_{j'} \right) - A_3 \left(\sum_{j'=1}^j \Delta\tau_{j'} \right) \right],$$

$$U(r) = \frac{4}{c} \sum_{n=1}^{N_\varphi} (\varphi_n - \varphi_{n-1}) \sum_{j=1}^{N_s} S_j \left[A_2 \left(\sum_{j'=0}^{j-1} \Delta\tau_{j'} \right) - A_2 \left(\sum_{j'=1}^j \Delta\tau_{j'} \right) \right].$$

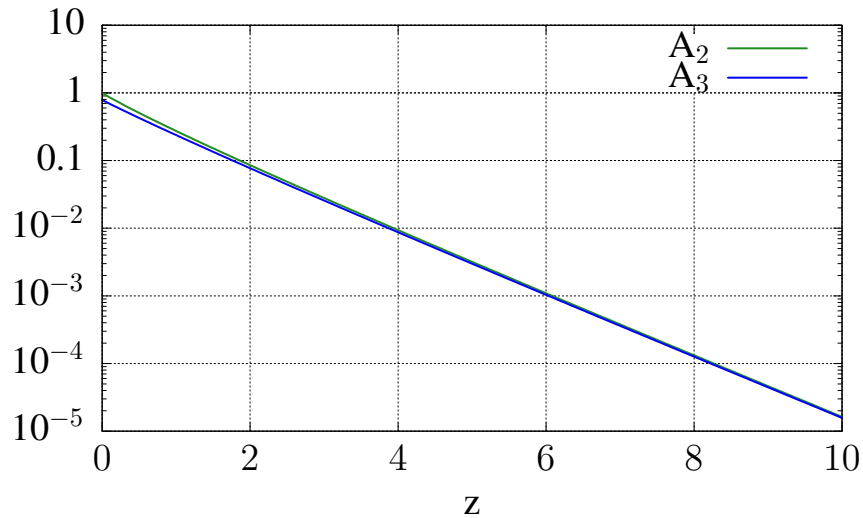


Рис. 7. Интегралы $A_m(z)$, $m=2,3$ в зависимости от аргумента z

Интегралы (29) возьмём численно для $m=2,3$. На рис. 7 представлены значения интегралов в зависимости от z . Чтобы не брать эти интегралы во время расчёта, сохраним их значения на сетке по $z = [0, 10]$ с шагом 0,005. Для нахождения значения интеграла $A_m(z)$ в требуемой точке z воспользуемся линейной интерполяцией.

Исследование плазмы в предельных случаях

Оптически плотная и оптически прозрачная плазма

Код THERMOS_Layer позволяет численно исследовать излучающую плазму в широком диапазоне параметров. Чтобы убедиться в корректности проводимых вычислений, прежде всего необходимо проверить, воспроизводит ли данный код

известные зависимости, полученные в приближениях оптически плотной ($\tau \gg 1$) и оптически прозрачной ($\tau \ll 1$) плазмы.

В качестве оптически плотной плазмы рассмотрим ионизованное вещество в состоянии локального термодинамического равновесия (ЛТР). В данном случае условие ($\tau \gg 1$) выполняется для фотонов с любой энергией. При этом спектральный поток излучения, вне зависимости от геометрии источника, имеет вид планковской функции

$$F_\omega = \pi B_\omega, \quad (30)$$

где

$$B_\omega = \frac{15}{\pi^5} \sigma \omega^3 \frac{1}{\exp(\omega/T) - 1},$$

σ – постоянная Стефана-Больцмана.

Действительно, если в выражении для потока с правой границы бесконечного плоского слоя толщины L (15) положить ($\tau \gg 1$), получим:

$$F_\omega(z = L, \mu > 0)|_{\tau \rightarrow \infty} = \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega}. \quad (31)$$

Такое же выражение можно получить для сферы и бесконечного цилиндра, проведя интегрирование по углам в (26) и (27) по внешней полусфере и полагая для случая ЛТР $I_\omega(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{j_\omega}{\kappa_\omega}$. Тогда получим для сферы

$$F_\omega(r = R) = \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left[2\pi \int_0^1 \mu d\mu \right] = \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega}, \quad (32)$$

для цилиндра

$$F_\omega(r = R) = \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left[4 \int_0^{\pi/2} \cos \varphi d\varphi \int_0^{\pi/2} \sin^2 \theta d\theta \right] = \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega}. \quad (33)$$

В случае ЛТР имеет место закон Кирхгофа $\frac{j_\omega}{\kappa_\omega} = B_\omega$, и выражения (31), (32) и (33) приобретают вид (30). Для неоднородной плазмы, при условии выполнения ЛТР в каждой точке пространства, выходящий поток определяется температурой поверхности T_{surf} :

$$F_\omega = \pi \frac{j_\omega(T = T_{surf})}{\kappa_\omega(T = T_{surf})} = \pi B_\omega(T = T_{surf}). \quad (34)$$

Теперь рассмотрим противоположный предельный случай оптически прозрачной плазмы. Полагая ($\tau \ll 1$) в (15) для бесконечного однородного плоского слоя толщины L , имеем

$$F_\omega(z = L, \mu > 0)|_{\tau \rightarrow 0} = 2\pi j_\omega L. \quad (35)$$

Чтобы получить выражения для потока в случаях цилиндрической и сферической геометрий, проинтегрируем уравнение переноса излучения по углам

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} d\Omega : \quad (\vec{\Omega} \vec{\nabla}) I_{\omega} &= j_{\omega} - \kappa_{\omega} I_{\omega} \quad \Rightarrow \\ \Rightarrow \quad \text{div } \vec{F}_{\omega} &= 4\pi j_{\omega} - c\kappa_{\omega} U_{\omega}. \end{aligned}$$

Для оптически прозрачной плазмы поглощением можно пренебречь:

$$\text{div } \vec{F}_{\omega} = 4\pi j_{\omega}.$$

Воспользуемся формулой Остроградского-Гаусса для вектора \vec{F}_{ω} :

$$\oint_V \text{div } \vec{F}_{\omega} dV = \oint_S (\vec{F}_{\omega} \vec{n}) d\vec{S},$$

где \vec{n} – единичный вектор нормали к поверхности S .

Тогда для сферы радиуса R получим:

$$F_{\omega}(r = R) = \frac{4\pi}{3} j_{\omega} R, \quad (36)$$

а для бесконечного цилиндра радиуса R :

$$F_{\omega}(r = R) = 2\pi j_{\omega} R. \quad (37)$$

С помощью аналогичных рассуждений можно получить выражения для спектрального потока излучения с поверхности неоднородной оптически прозрачной плазмы, в частности: для плоского слоя

$$F_{\omega}(z = L, \mu > 0) = 2\pi \sum_{i=1}^N j_{\omega}^{(i)} (z_i - z_{i-1}), \quad (38)$$

для сферы

$$F_{\omega}(r = R) = \frac{4\pi}{3} \frac{1}{R^2} \sum_{i=1}^N j_{\omega}^{(i)} (r_i^3 - r_{i-1}^3), \quad (39)$$

для цилиндра

$$F_{\omega}(r = R) = 2\pi \frac{1}{R} \sum_{i=1}^N j_{\omega}^{(i)} (r_i^2 - r_{i-1}^2), \quad (40)$$

где N — число подслоёв.

Результаты расчётов для предельных случаев

Для проведения тестовых расчётов выберем плазму кремния. Разобьём слой толщины R (плоский, сферический или цилиндрический) на $N = 5$ подслоёв одинаковой ширины $\Delta r = \frac{R}{N}$. Каждый из подслоёв имеет свою температуру T_i , плотность ρ_i , коэффициент поглощения $\kappa_\omega^{(i)}$ и излучательную способность $j_\omega^{(i)}$. Заметим также, что сфера и цилиндр не имеют внутренних полостей ($r_0 = 0, r_N = R$), и поток в центре равен нулю. В случае плоского слоя поток на левой границе отличается от нуля и равен по модулю потоку с правой границы в случае, если слой однородный или неоднородный, но симметричный.

Сначала рассмотрим однородную плазму с температурой $T_i = 40$ эВ, $i = 1, \dots, N$. Чтобы определить параметры, при которых удовлетворяются условия оптически плотной и оптически прозрачной плазмы, проведём предварительный расчёт изотерм среднего заряда Z_0 для выбранной температуры $T = 40$ эВ в отсутствие поля излучения $W(\omega, T) = 0$ и с планковским полем излучения $W(\omega, T) = W_P(\omega, T)$ (см. рис. 8). На рисунке серыми вертикальными линиями отмечены значения плотностей, которые были выбраны для проверки решения в пределе оптически прозрачной плазмы $\rho = 10^{-6}$ г/см³ (существенное отличие от ЛТР) и в пределе оптически плотной плазмы $\rho = 0,03$ г/см³ (выполняются условия ЛТР). Помимо выбора плотностей, также требуется подобрать размеры слоя, исходя из величины свободного пробега фотонов $l_\omega = \kappa_\omega^{-1}$. В случае оптически прозрачной плазмы размер слоя должен быть меньше величины свободного пробега фотонов с любой энергией в исследуемом диапазоне $R < l_\omega, \forall \omega$, а в случае оптически плотной плазмы все фотоны должны поглощаться внутри любого из подслоёв, то есть $\Delta r > l_\omega, \forall \omega$. На рис. 9 приведены расчёты свободных пробегов фотонов в плазме кремния с температурой $T = 40$ эВ и выбранными значениями плотностей, $\rho = 10^{-6}$ г/см³ и $\rho = 0,03$ г/см³. Исходя из этих данных, можно выбрать размеры для тестовых расчётов в приближении оптически прозрачной плазмы: $\Delta r = 0,02$ см, $R = 0,1$ см, и оптически плотной плазмы: $\Delta r = 0,2$ см, $R = 1$ см.

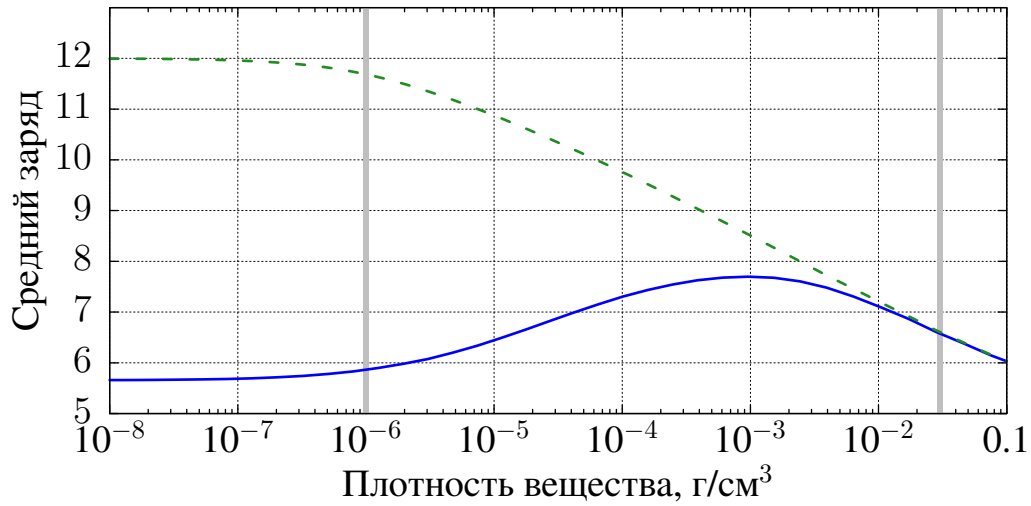


Рис. 8. Изотермы среднего заряда плазмы кремния при температуре электронов $T = 40$ эВ для оптически прозрачной плазмы $W(\omega, T) = 0$ (синяя кривая) и с планковским полем излучения $W(\omega, T) = W_P(\omega, T)$ (зелёная кривая)

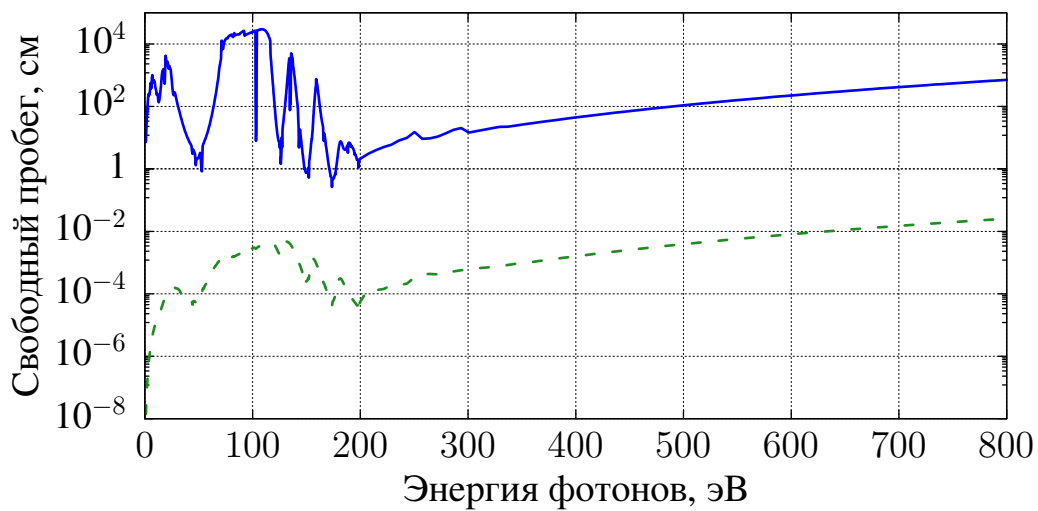


Рис. 9. Свободный пробег фотонов в плазме кремния при температуре электронов $T = 40$ эВ и плотности $\rho = 10^{-6}$ г/см³ (синяя кривая) и $\rho = 0,03$ г/см³ (зелёная кривая)

На рис. 10 приведено сравнение спектрального потока энергии излучения, рассчитанного по программе THERMOS_Layer в случае однородной оптически прозрачной плазмы для бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, со значениями, вычисленными по формулам (35), (36), (37) (чёрные кривые) соответственно. На рис. 11 приведены кривые для спектрального потока энергии излучения в случае однородной оптически плотной плазмы для бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, полученные по программе THERMOS_Layer, а также значения потока, вычисленные по формулам (31), (32), (33) (чёрные кривые), и поток энергии излучения от абсолютно чёрного тела с температурой $T = 40$ эВ (серая кривая).

Для рассмотрения вариантов неоднородной плазмы выберем следующие значения температуры в подслоях: $T_1 = 100$ эВ, $T_2 = 70$ эВ, $T_3 = 60$ эВ, $T_4 = 40$ эВ, $T_5 = 30$ эВ. Анализ длин пробегов фотонов для самой низкой температуры $T = 30$ эВ и самой высокой $T = 100$ эВ позволяет сохранить плотности и размеры слоёв, выбранные ранее для расчётов однородной плазмы. На рис. 12 приведены кривые для спектрального потока энергии излучения в случае неоднородной оптически прозрачной плазмы для бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, рассчитанные по программе THERMOS_Layer и вычисленные по формулам (38), (39), (40) (чёрные кривые) соответственно. На рис. 13 приведены кривые для спектрального потока энергии излучения в случае неоднородной оптически плотной плазмы для бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, полученные по программе THERMOS_Layer, и значения потока, вычисленные по формуле (34) (чёрные кривые). Также на графике представлен для сравнения поток энергии излучения от абсолютно чёрного тела (серая кривая) с температурой $T = 30$ эВ, соответствующей температуре поверхности $T_{surf} = T_5 = 30$ эВ.

В случае оптически прозрачной плазмы результаты расчётов совпадают с высокой точностью с теоретически предсказанными значениями. В случае ЛТР наблюдается некоторое расхождение между рассчитанными значениями потока и функцией $\pi B_\omega(T_{surf})$. Это обусловлено тем, что используемые в комплексе THERMOS атомные модели не позволяют добиться идеального выполнения закона Кирхгофа из-за невозможности составления полной системы квантовых состояний ионизированных атомов и приближённого учёта профилей линий.

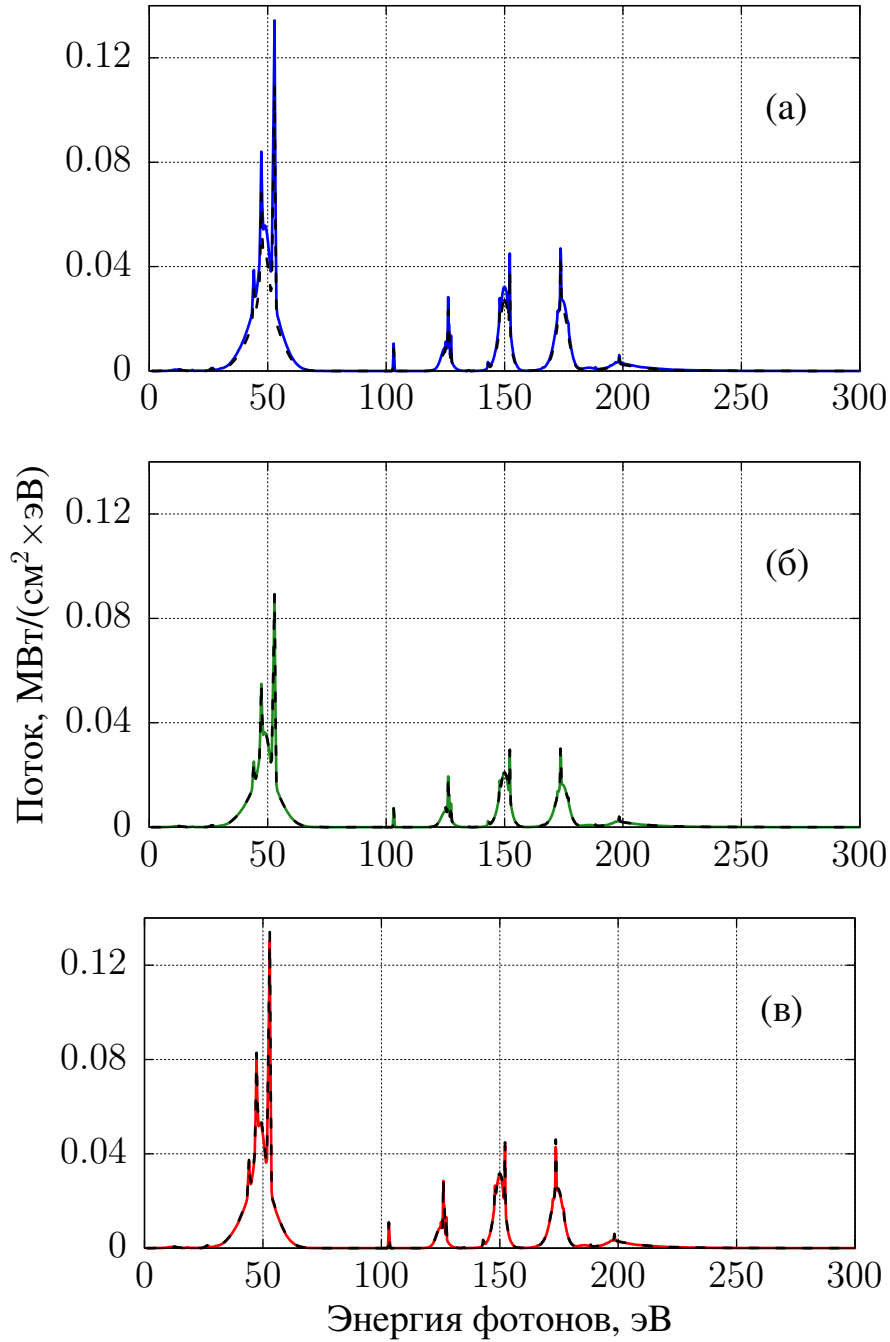


Рис. 10. Спектральный поток энергии излучения в случае оптически прозрачной плазмы для бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, полученный с помощью программы THERMOS_Layer и вычисленный по формулам (35) (а), (36) (б), (37) (в) (чёрные кривые)

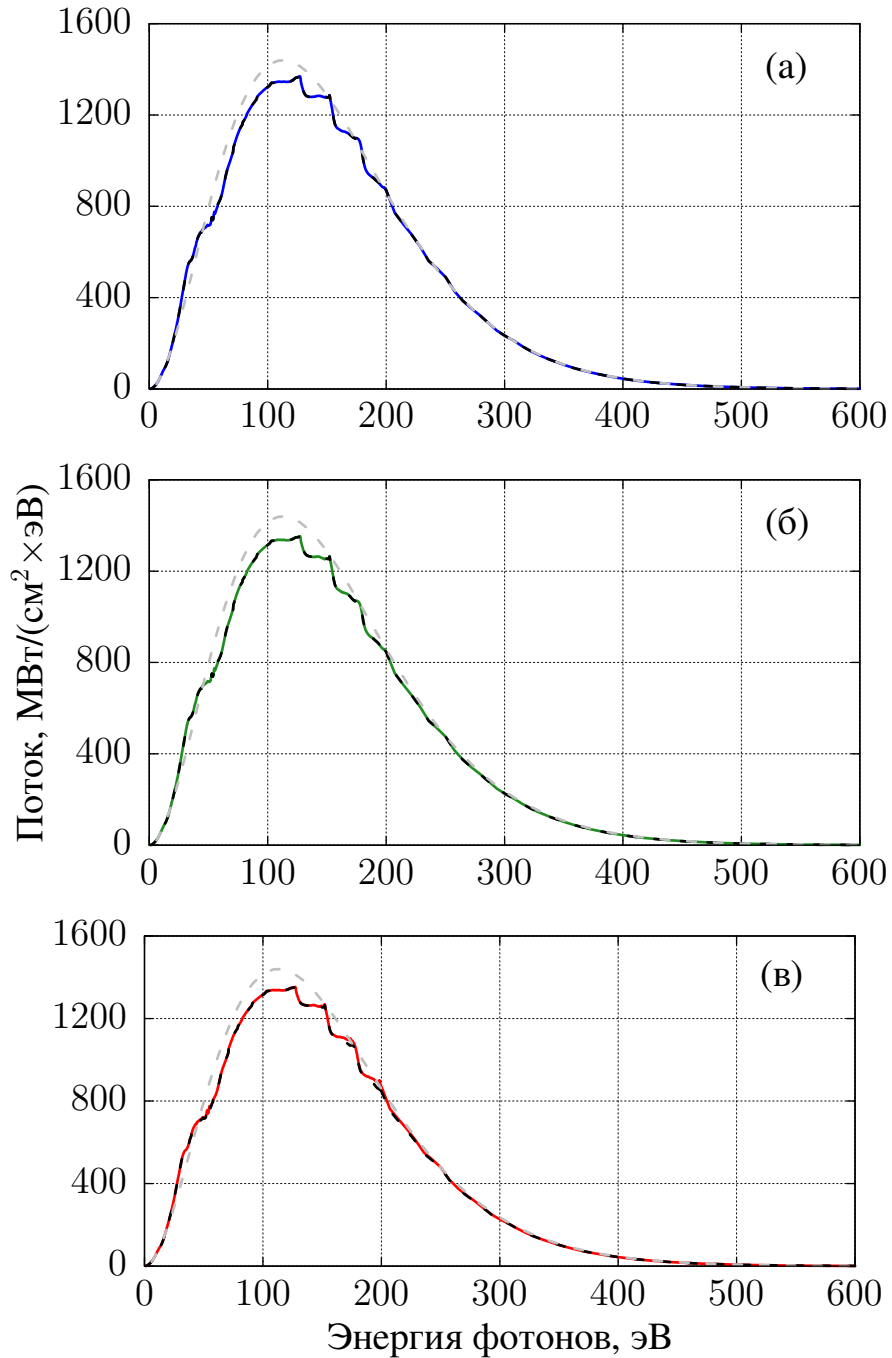


Рис. 11. Спектральный поток энергии излучения в случае оптически плотной плазмы для бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, полученный с помощью программы THERMOS_Layer и вычисленный по формулам (31) (а), (32) (б), (33) (в) (чёрные кривые), а также поток энергии излучения от абсолютно чёрного тела (серая кривая)

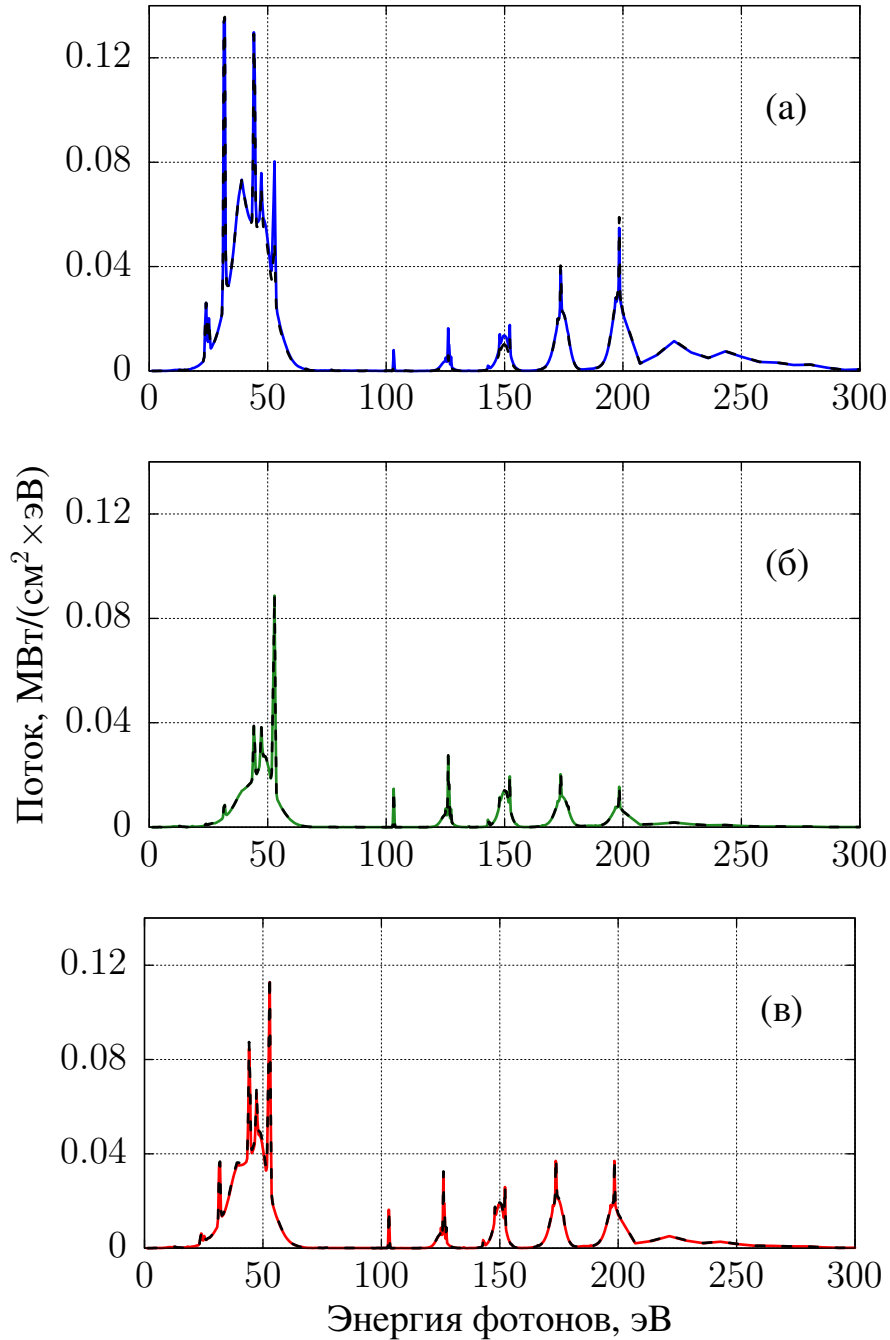


Рис. 12. Спектральный поток энергии излучения в случае оптически прозрачной плазмы для неоднородного бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, полученный с помощью программы THERMOS_Layer и вычисленный по формулам (38) (а), (39) (б) и (40) (в) (чёрные кривые)

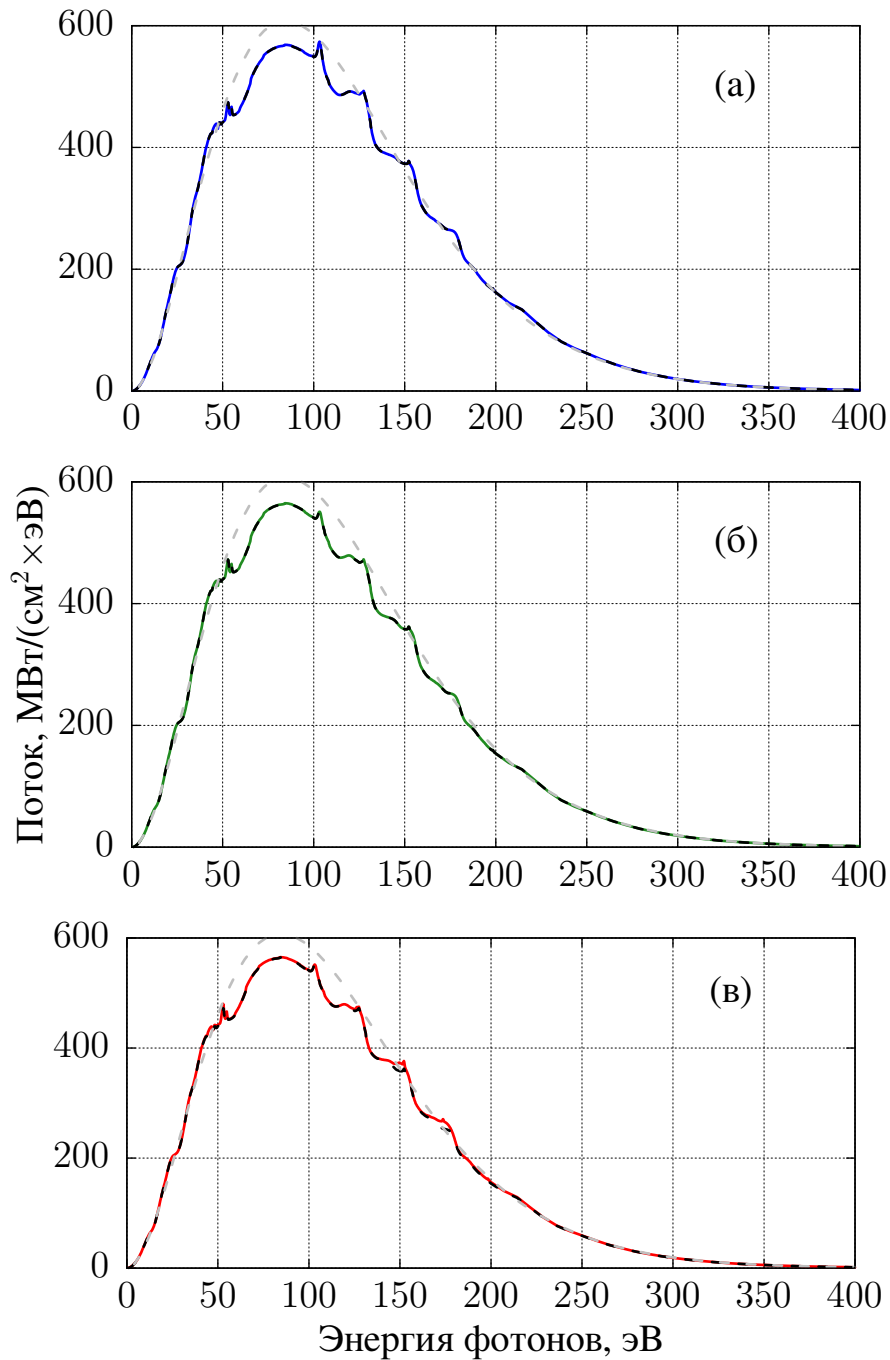


Рис. 13. Спектральный поток энергии излучения в случае оптически плотной плазмы для неоднородного бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, полученный с помощью программы THERMOS_Layer и вычисленный по формуле (34) (чёрная кривая), а также поток энергии излучения от абсолютно чёрного тела (серая кривая)

Заключение

В комплекс программ THERMOS была добавлена возможность согласованного решения системы уравнений поуровневой кинетики в приближении столкновительно-излучательного равновесия с уравнением переноса излучения и расчёта выхода излучения для заданной конфигурации плазмы в одномерной геометрии (бесконечный плоский слой, бесконечный цилиндр и шар). Для этого был написан отдельный модуль THERMOS_Layer.

Для проведения тестирования кода была поставлена задача о нахождении спектра излучения плазмы кремния в предельных случаях оптически плотной и оптически прозрачной плазмы. Получено согласие результатов расчётов по программе THERMOS_Layer для спектрального потока энергии излучения с теоретически предсказанными значениями. Это позволяет сделать вывод о корректной работе данного модуля и предложить его для использования при интерпретации экспериментальных данных с установок для исследования свойств излучающей плазмы.

Библиографический список

1. Novikov V.G. *Average Atom Approximation in Non-LTE Level Kinetics* // *Modern Methods in Collisional-Radiative Modeling of Plasmas* / Ed. by Y. Ralchenko. Switzerland: Springer International Publishing, 2016. P. 105–126.
2. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б., Новиков В.Г. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчёта росселандовых пробегов и уравнений состояния. М.: Физматлит, 2000. С. 400. ISBN: 978-5-9221-0052-6.
3. Voropinov A.I., Gandel'man G.M., Podval'nyi V.G. Electronic energy spectra and the equation of state of solids at high pressures and temperatures // *Soviet Physics Uspekhi*. 1970. Vol. 13, no. 1. P. 56–72.
4. Вичев И.Ю., Грушин А.С., Новиков В.Г., Соломянная А.Д. KIAM_DB: база атомных данных для расчётов спектральных свойств плазмы. ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. URL: <http://keldysh.ru/e-biblio/vichev>.
5. Cowan R. D. *The theory of atomic structure and spectra* / Ed. by R. D. Cowan. 1981.
6. Gu M.F. The flexible atomic code // *Canadian Journal of Physics*. 2008. Vol. 86, no 5. P. 675–689.
7. Bar-Shalom A., Klapisch M., Oreg J. HULLAC, an integrated computer package for atomic processes in plasmas // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2001. Vol. 71, no. 2-6. P. 169–188.

8. Ralchenko Yu., Kramida A.E., Reader J., Team NIST ASD. NIST Atomic Spectra Database (version 4.0). [Online]. 2011. URL: <http://physics.nist.gov/asd>.
9. Skobelev Yu.I., Loboda P.A., Faenov A.Ya. et al. Spectr-W 3 online database on atomic properties of multicharged ions // *J. Phys.: Conf. Ser.* Vol. 653.
10. Novikov V.G., Koshelev K.N., Solomyannaya A.D. Radiative unresolved spectra atomic model // 16th International Conference on Atomic Processes in Plasmas. Monterey, CA: 2009.
11. 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.
12. Faik S., Tauschwitz A., Basko M.M. et al. Creation of a homogeneous plasma column by means of hohlraum radiation for ion-stopping measurements // *High Energy Density Physics*. 2014. Vol. 10, no. 1. P. 47–55. 1304.7027.
13. Ольховская О.Г., Гасилов В.А., Баско М.М. и др. О расчётах выходной мощности и спектра рентгеновского излучения Z-пинчей на основе многопроволочных сборок // *Матем. моделирование*. 2016. Т. 28, № 1. С. 3–22.
14. Абраменко Д.Б., Анциферов П.С., Астахов Д.И. и др. Плазменные источники экстремального ультрафиолетового излучения для литографии и сопутствующих технологических процессов (к 50-летию Института спектроскопии РАН) // *Усп. физ. наук*. 2019. Т. 189, № 3. С. 323–334.
15. Romanov I.V., Tsygvintsev I.P., Kologrivov A.A. et al. Study of the possibility for increasing the emission of soft x-rays from the plasma of a low-energy vacuum discharge triggered by a laser // *Plasma Physics and Controlled Fusion*. 2019. Vol. 61, no. 9. P. 095011.
16. Stewart J.C., Pyatt K.D. Lowering of Ionization Potentials in Plasmas // *The Astrophysical Journal*. 1966. Vol. 144. P. 1203.
17. Ecker G., Kröll W. Lowering of the Ionization Energy for a Plasma in Thermodynamic Equilibrium // *Physics of Fluids*. 1963. Vol. 6, no. 1. P. 62.
18. Vichev I.Yu., Solomyannaya A.D., Grushin A.S., Kim D.A. On certain aspects of the THERMOS toolkit for modeling experiments // *High Energy Density Physics*. 2019. P. 100713. 1903.04914.
19. Pérez-Callejo G., Jarrott L. C., Liedahl D. A. et al. Laboratory measurements of geometrical effects in the x-ray emission of optically thick lines for ICF diagnostics // *Physics of Plasmas*. 2019. Vol. 26, no. 6. P. 063302.

20. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. С. 686.
21. Bates D. R., Kingston A. E., McWhirter R. W. P. Recombination Between Electrons and Atomic Ions. I. Optically Thin Plasmas // *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1962. Vol. 267, no. 1330. P. 297–312.
22. Суржиков С.Т. Тепловое излучение газов и плазмы. МГТУ, 2004. ISBN: 5703826055.

Оглавление

Введение	3
Формальное решение уравнения переноса излучения	4
Модель столкновительно-излучательного равновесия	5
Спектральная плотность фотонов	8
Бесконечный плоский слой.	8
Сферическая геометрия	13
Цилиндрическая геометрия	17
Исследование плазмы в предельных случаях	18
Заключение	28
Библиографический список	28