

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 60 за 2023 г.</u>



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Бай А.А. Моделирование взаимодействия лазерного излучения с криогенной водородной пленкой на octree-сетках блочного типа // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2023. № 60. 24 с. <u>https://doi.org/10.20948/prepr-2023-60</u> <u>https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2023-60</u>

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

А. А. Бай

Моделирование взаимодействия лазерного излучения с криогенной водородной пленкой на octree-сетках блочного типа

А. А. Бай

Моделирование взаимодействия лазерного излучения с криогенной водородной пленкой на octree-сетках блочного типа

В работе представлена методика моделирования взаимодействия лазерного излучения с веществом. Методика основана на однотемпературной модели плазмы и включает в себя схемы решения трехмерных уравнений газодинамики, нелинейного уравнения теплопроводности и метод вычисления теплового вклада лазерного излучения путем трассировки лучей через расчетную сетку. Схемы реализованы с использованием технологии локальной адаптации расчетных сеток типа octree. Представлены результаты трехмерного моделирования воздействия мощного наносекундного лазерного импульса на пленку из криогенного водорода.

Ключевые слова: лазерное излучение, лазерная плазма, локально-адаптивные сетки, численное моделирование.

A. A. Bay

Modeling of interaction of a laser radiation with a cryogenic hydrogen layer using block-type octree mesh

The paper presents a technique for simulating the laser-matter interaction. The technique is based on a single-temperature plasma model and includes schemes for solving three-dimensional gas dynamics equations, a nonlinear heat equation, and a method for calculating the thermal contribution of laser radiation by tracing rays through a computational grid. The schemes are implemented using the technology of local adaptation of computational grids of the octree type. Results of three-dimensional simulation of the effect of a high-power nanosecond laser pulse on a layer of cryogenic hydrogen are presented.

Key words: laser radiation, laser plasma, adaptive mesh refinement, numerical modeling.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проек
т $\mathbb{N}^{\underline{0}}$ 21-11-00362.

Вычисления проведены с помощью гибридного суперкомпьютера K60, установленного в Суперкомпьютерном Центре коллективного пользования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

1. Введение

Нагрев тонких образцов твердого вещества при действии на него лазерного излучения высокой интенсивности активно изучается в последние десятилетия как средство создания среды, которая служит для генерации потоков ускоренных частиц. После первых публикаций, в которых рассматривалось лазерное ускорение заряженных частиц [1,2], в данной области выполнено много исследований благодаря многообещающей перспективе приложений этого метода в материаловедении, протонной радиографии, медицине (см. [3–7] и др.).

В экспериментах, выполненных на протяжении более чем 20 последних лет, при нагреве тонких фольг и проволок лазерами наносекундного диапазона длительности наблюдались протоны и многозарядные ионы, ускоренные до энергий в несколько мегаэлектронвольт (МэВ). Установки петаваттного уровня мощности позволили в последние годы получить протоны с энергией до 100 МэВ. При дальнейшем повышении мощности лазеров соответствующие схемы ускорения протонов позволят достичь энергии на уровне гигаэлектронвольт [8].

Импульс излучения фемтосекундного лазера обычно состоит из нескольких фрагментов [9,10], длительность которых примерно равна:

- несколько предимпульсов ~ 30 фс каждый,
- пьедестал спонтанного излучения, или предимпульс ASE (Amplifier Spontaneous Emission) ~ 1 нс,
- основной импульс ~ 30 фс,
- постимпульс ~ 0.1 нс.

Амплитуда основного импульса на много порядков превосходит амплитуду предимпульса ASE, во многих упомянутых здесь экспериментах их отношение (контрастность) имеет значение около 10¹⁰. Однако при длительности предимпульса порядка наносекунды для реалистичного моделирования взаимодействия основного фемтосекундного лазерного импульса с мишенью нанометровой толщины необходимо учитывать предшествующее формирование плазмы - так называемой предплазмы. Проходя через предплазму, основной лазерный импульс отдает ей часть своей энергии. Далее лазерное излучение либо отражается от поверхности с критической плотностью, либо проходит через канал с докритической плазмой. Часть ускоренных лазерным излучением горячих электронов выходит из мишени, и на ней создается положительный потенциал, под действием которого ускоряются протоны и другие ионы.

Наличие предплазмы влияет на генерацию электронных потоков и тем самым на ускорение ионов. Действие предимпульса изучалось в ряде работ,

например [11–15]. Было показано, что при нагреве наносекундным предимпульсом плоской тонкой мишени происходят модификации плотности первоначально однородной мишени. Влияние этого эффекта зависит от интенсивности, времени действия пьедестала ASE, а также от размера пятна в фокусе лазерного пучка. Во всех случаях нагрев мишени меняет толщину и плотность фольги, мишень в окрестности фокального пятна приобретает изогнутую форму. В отличие от начального состояния фольги, в ней формируется плавно меняющийся градиент плотности. Именно с такой средой взаимодействует основной фемтосекундный импульс. Расчеты на основе модели плазменной гидродинамики, включающей лазерный нагрев мишени [16], дали уточненное количественное описание отмеченных эффектов. Было показано, что распределения по энергии ускоренных протонов и других ионов могут заметно отличаться от тех, которые возникают на мишенях с большим градиентом плотности [17].

В расчетах [12] не учитывалось действие короткого предимпульса длительностью ~ 30 фс, которое, согласно предварительным оценкам, мало влияет на динамику вещества сравнительно с наносекундным ASE. Длительность времени действия импульса ASE ~ 1 нс позволяет в гидродинамическом приближении изучить влияние пьедестала ASE на динамику лазерной плазмы и модификацию плотности лазерной мишени. Рассчитанное таким способом распределение материала мишени далее можно использовать в исходных данных для моделирования ускорения ионов в плазме под действием основного импульса. На этом этапе расчет обычно выполняется с помощью метода частиц в ячейках (PIC).

В данной работе рассматривается первый этап комплексного вычислительного эксперимента, состоящий в моделировании формирования плазмы наносекундным предимпульсом ASE.

Моделирование производится с использованием технологии локальной адаптации расчетных сеток, и одной из целей работы ставится исследование эффективности применения AMR (Adaptive mesh refinement) для решения задач о взаимодействии лазерного излучения с различными мишенями.

Структура препринта следующая. В первом разделе представлено краткое описание локально-адаптивных сеток типа octree. Во втором и третьем разделах излагаются физическая модель и используемые численные методики соответственно. В четвертом разделе описывается постановка задачи и производится обсуждение результатов численного моделирования.

2. Локально-адаптивные сетки

Технология локальной адаптации расчетных сеток заключается в том, чтобы изменять точность сетки в различных ее областях в зависимости от

текущих параметров моделируемого вещества. Это позволяет уменьшить вычислительную трудоемкость задачи без существенных потерь в точности решения. Использование сеток типа octree было предложено для задач газодинамики более 30 лет назад [18] и в настоящее время успешно применяется для задач математической физики [21,22].

Сущность octree сеток заключается в следующем. В расчетной области строится начальная сетка, являющаяся регулярной декартовой. Далее в зависимости от выбранных критериев и параметров решения строится измельченная, более точная сетка, путем разбиения исходных ячеек на 8 одинаковых, подобных им. Разделенная ячейка называется родительской, ячейки, полученные в результате разбиения, называются дочерними. Ячейки начальной сетки называются ячейками 0-го уровня, ячейки, полученные при разбиении, называются ячейками 1-го уровня. Далее при необходимости ячейки 1-го уровня могут быть разделены на ячейки 2-го, 3-го уровней и т. д.



Рис. 1: Измельчение ячеек.



Рис. 2: Пример octree-сетки с адаптацией до 3-го уровня.

Существует два основных подхода к реализации octree-сеток: листовой и блочный. В листовом подходе структура сетки представляется в виде множества восьмеричных деревьев. Каждый узел каждого дерева сопоставлен ячейке сетки, корневым узлом каждого дерева является ячейка изначальной сетки, ребро между узлами означает, что соответствующие им ячейки являются дочерней и родительской. Листовые узлы в таких деревьях будут соответствовать нераздробленным ячейкам сетки. Примером реализации octree-сеток листового типа является p4est [24].

Недостаток подобного подхода в том, что для поиска соседних ячеек необходимо проходить вверх и вниз по дереву для каждого соседа, не имеющего того же родителя, что приводит к снижению скорости обхода сетки. Проблему можно решить, если в каждой ячейке явно задавать информацию о ее соседях, но в таком случае, учитывая необходимость хранить информацию о родительских и дочерних ячейках, описание всей сетки будет требовать большого количества памяти.



Рис. 3: Структура сетки листового типа.

Для расчетов в статье была выбрана реализация octree-cetok блочного типа AMReX [23]. Под octree-cetkamu блочного типа понимается следующее. Сетка представляется в виде множества блоков, расположенных таким образом, чтобы блоки более высокого уровня были наложены на блоки на один уровень ниже. Каждый блок имеет форму прямоугольного параллелепипеда и представляет собой декартову регулярную сетку. Ячейки из одного блока не имеют прямого доступа к ячейкам другого и их данным. Каждый блок имеет несколько дополнительных слоев граничных ячеек, через которые происходит коммуникация между блоками. Кроме AMReX подобный подход используется в библиотеках PARAMESH [27], ENZO [26], Chombo [25], SAMRAI [28,29].

Подобный подход используется по нескольким причинам. Во-первых, для определения структуры всей сетки достаточно задать параметры всех блоков, количество которых гораздо меньше, чем количество всех ячеек сетки, что значительно ускоряет процессы построения и перестроения сеток по сравнению с листовым подходом. Во-вторых, представление всей сетки в виде набора декартовых сеток позволяет использовать более простые структуры данных, что приводит к ускорению вычислений.



Рис. 4: Адаптивная octree-сетка блочного типа.

Из недостатков можно выделить следующие. Во-первых, по сравнению с листовым подходом, при расчете на блочных сетках размер сетки будет больше. Для того чтобы адаптировать нужные области, получив при этом сравнительно малое количество блоков, придется раздробить больше ячеек, чем требует критерий адаптации. Также число используемых в расчете ячеек увеличивается за счет необходимости использовать слои граничных ячеек, которые в данном подходе есть у каждого блока. Во-вторых, поля обменов между MPI процессами зачастую будут больше, чем в сетках листового типа.

3. Физическая модель

3.1. Модель динамики плазмы

Для описания динамики плотной импульсной плазмы в программе используется гидродинамическая модель. Движение вещества описывается системой уравнений Эйлера, которую приведем в форме законов сохранения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v}) &= 0\\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial z} &= 0\\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial(\rho vu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2 + p)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial z} &= 0\\ \frac{\partial \rho w}{\partial t} + \frac{\partial(\rho wu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho wv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w^2 + p)}{\partial z} &= 0\\ \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla(\vec{v}(E + p)) &= -\nabla(\kappa \nabla T) + Q_l \end{aligned}$$
(1)

где ρ - плотность вещества, p - давление, $\vec{v} = (u, v, w)$ - вектор скорости, $E = \rho \left(\varepsilon + \frac{\vec{v}^2}{2}\right)$ - полная энергия, $\kappa(\rho, T)$ - коэффициент теплопроводности, Q_l - источник тепла, обусловленный лазерным излучением.

Система (1) замыкается уравнениями состояния в форме

$$p = p(\rho, \varepsilon).$$

Используемая нами модель не учитывает собственное излучение плазмы. Им можно пренебречь, поскольку решается задача нагрева водорода, в котором потери энергии за счет теплового излучения малы сравнительно с энергией, поступающей от лазера.

3.2. Модель поглощения лазерного излучения

Для моделирования процессов распространения и поглощения лазерного излучения использована модель, в которой лазерный пучок представлен набором лучей. Вдоль луча переносится и поглощается некоторая доля энергии лазерного пучка.

В области, где плотность электронов меньше критической $n_e < n_c = \frac{m_e \omega^2}{4\pi e^2}$ (здесь m_e и e - масса и заряд электрона соответственно), $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda} (\omega$ - круговая частота лазерного излучения, λ - длина волны), траектория луча считается прямой линией. Поглощение энергии вдоль луча рассчитывается по формуле

$$\frac{\partial Q}{\partial l} = -\mu Q \tag{2}$$

где l - расстояние вдоль луча, n - показатель преломления среды, μ - коэффициент поглощения, который может быть найден из следующих соотношений [30]

$$\mu = \frac{\omega_p^2 \nu_{ei}}{c(\omega^2 + \nu_{ei}^2)} \tag{3}$$

$$\nu_{ei} = 9 \cdot 10^{-11} \frac{Z_0 n_e}{T^{3/2}} ln\Lambda, \, \omega_p = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m_e}} \tag{4}$$

Здесь ω_p - плазменная частота, ν_{ei} - частота электрон-ионных столкновений, $Z_0 = Z_0(\rho, T)$ - степень ионизации, которая в однотемпературной модели вычисляется как табличная функция плотности и температуры, $ln\Lambda$ кулоновский логарифм.

Поглощение энергии лазерного излучения при его прохождении сквозь среду учитывается в уравнении энергобаланса плазмы как ее нагрев, выражающийся в виде источника Q_l для уравнения баланса энергии. В данной работе используется алгоритм расчета конверсии энергии лазерного пучка, в котором трассировка луча происходит либо до выхода из расчетной области, либо до момента, когда вся его энергия будет поглощена средой. Если луч достигает области, в которой плотность электронов больше критической, то считается, что он должен полностью поглотиться.

4. Методика расчета

Для моделирования разлета лазерной плазмы используется метод расщепления по физическим процессам, поэтому численное моделирование происходит в три этапа:

- интегрирование уравнений газовой динамики, без учета диссипативных процессов;
- определение теплового вклада лазерного излучения методом трассировки лучей;
- определение диффузионного потока тепла путем численного интегрирования уравнения теплопроводности;

Уравнения баланса энергии динамики плазмы могут быть записаны в виде законов сохранения, поэтому имеет смысл производить их решение с помощью схем, построенных методом конечных объемов. Подобные схемы можно записать следующим образом:

$$y_i^{n+1} = y_i^n - \frac{\tau}{V_i} \sum_{k \in Nb_i} f_{ik}^n S_{ik},$$
$$f_{ik}^n = F(y_i^n, y_k^n)$$

где f_{ik} - потоки через грань между ячейками i и k, вычисляемые на основании значений в этих ячейках, S_{ik} - площадь грани, Nb_i - множество ячеек, имеющих общую грань с ячейкой i.

Для численного моделирования на системах с распределенной памятью написана программа с использованием MPI и библиотеки AMReX, реализующей octree-сетки. Остановимся подробнее на устройстве блочных octree-сеток и особенностях реализации конечно объемных схем на них.

Пусть расчетная область представляет собой прямоугольный параллелепипед, и пусть задана начальная декартова регулярная сетка, т.е. задано количество ячеек сетки по каждому направлению (N_x, N_y, N_z) . Начальная сетка делится на блоки в соответствии с заданными максимальными возможными размерами блоков и количеством MPI процессов. Далее поверх блоков нулевого уровня (блоков начальной сетки) могут быть построены блоки первого уровня с уменьшенными в два раза линейными размерами ячеек таким образом, чтобы границы блока проходили по граням ячеек нулевого уровня.

Каждый блок в такой сетке можно описать двумя целочисленными векторами $(i_{low}, j_{low}, k_{low}), (i_{high}, j_{high}, k_{high})$ - трехмерными индексами крайних ячеек и двумя скалярами - уровнем блока и количеством слоев теневых ячеек

 n_{ghost} на границе. Также к блоку прикреплены трехмерные массивы размерности $(i_{high} - i_{low} + 2n_{ghost}) \times (j_{high} - j_{low} + 2n_{ghost}) \times (k_{high} - k_{low} + 2n_{ghost}),$ содержащие значения параметров вещества в соответствующих ячейках.

Теневые ячейки у блоков необходимы для того, чтобы внутри цикла по ячейкам одного из блоков не приходилось обращаться к данным внутри другого блока, что уменьшило бы скорость расчета, особенно в случаях, когда блоки принадлежат разным MPI процессам. Механизм обновления данных внутри теневых ячеек зависит от типа границы. В подобных сетках могут встретиться три типа: граница между блоками одинакового уровня, граница между блоками разных уровней и граница, соответствующая границе расчетной области. В случае границы между блоками одного уровня в граничные ячейки записываются значения их прообразов из другого блока. В случае границы между блоками разных уровней данные в граничных ячейках "верхнего" блока получаются интерполяцией по данным нижнего блока, а данные в граничных ячейках "нижнего" - осреднением данных с "верхнего". Если граница является границей расчетной области, то данные заполняются в соответствии с граничными условиями задачи.

При расчете по схеме каждый блок можно считать декартовой регулярной сеткой. Схему на ней можно записать в следующем виде:

$$y_{(i,j,k)}^{n+1} = y_{(i,j,k)}^n - \frac{1}{h_x} \left(f_{(i+\frac{1}{2},j,k)}^n - f_{(i-\frac{1}{2},j,k)}^n \right) + \frac{1}{h_y} \left(f_{(i,j+\frac{1}{2},k)}^n - f_{(i,j-\frac{1}{2},k)}^n \right) + \frac{1}{h_z} \left(f_{(i,j,k+\frac{1}{2})}^n - f_{(i,j,k-\frac{1}{2})}^n \right)$$
(5)

$$\begin{aligned}
f_{(i+\frac{1}{2},j,k)}^{n} &= F(y_{(i,j,k)}^{n}, y_{(i+1,j,k)}^{n}), f_{(i,j+\frac{1}{2},k)}^{n} = F(y_{(i,j,k)}^{n}, y_{(i,j+1,k)}^{n}), \\
f_{(i,j,k+\frac{1}{2})}^{n} &= F(y_{(i,j,k)}^{n}, y_{(i,j,k+1)}^{n}) \\
i &= i_{low}, \dots, i_{high}, \ j = j_{low}, \dots, j_{high}, \ k = k_{low}, \dots, k_{high}
\end{aligned} \tag{6}$$

Для использования этой схемы нужно решить одну важную проблему. В случае, когда блок уровня l частично или полностью покрыт блоками уровня l + 1, вычисление потоков через одну и ту же поверхность внутри блоков разного уровня может дать разные результаты, что может привести к потере консервативности схемы на границе между ячейками разных уровней. Для избежания этого необходимо скорректировать потоки в областях блоков, покрытых блоками более высоких уровней.

Таким образом, конечно объемная схема реализуется следующими 4 операциями:

1) Актуализация значений в граничных ячейках каждого блока. Применение граничных условий задачи, обмен данными между MPI процессами. 2) Проход по всем граням внутри блока, вычисление потоков через грани по формулам (6).

3) Коррекция потоков в ячейках, покрытых блоками более высокого уровня. Для каждого блока ищется его пересечение с блоками на один уровень выше, на каждом таком пересечении производится суммирование потоков с граней "верхнего" блока и запись на грани "нижнего". Эта операция в общем случае также содержит обмены между процессами, так как пересекающиеся блоки могут принадлежать разным MPI процессам.

(4) Вычисление значений на новом временном слое по формуле (5).

4.1. Решение уравнений газовой динамики

Левая часть системы уравнений газовой динамики аппроксимируется по методу конечных объемов, в котором потоки вычисляются по схеме годуновского типа. Расчет шага по времени выполняется по схеме предиктор-корректор. Разностные уравнения на прямоугольной сетке записываются следующим образом:

$$U_{(i,j,k)}^{n+\frac{1}{2}} = U_{(i,j,k)}^{n} - \frac{\tau}{2} \left[\frac{f_{(i+\frac{1}{2},j,k)}^{n} - f_{(i-\frac{1}{2},j,k)}^{n}}{h_{x}} + \frac{f_{(i,j+\frac{1}{2},k)}^{n} - f_{(i,j-\frac{1}{2},k)}^{n}}{h_{y}} + \frac{f_{(i,j,k+\frac{1}{2})}^{n} - f_{(i,j,k-\frac{1}{2})}^{n}}{h_{z}} \right]$$
(7)

$$U_{(i,j,k)}^{n+1} = U_{(i,j,k)}^n - \tau \left[\frac{f_{(i+\frac{1}{2},j,k)}^{n+\frac{1}{2}} - f_{(i-\frac{1}{2},j,k)}^{n+\frac{1}{2}}}{h_x} + \frac{f_{(i,j+\frac{1}{2},k)}^{n+\frac{1}{2}} - f_{(i,j-\frac{1}{2},k)}^{n+\frac{1}{2}}}{h_y} + \frac{f_{(i,j,k+\frac{1}{2})}^{n+\frac{1}{2}} - f_{(i,j,k-\frac{1}{2})}^{n+\frac{1}{2}}}{h_z} \right]$$
(8)

где $U_{(i,j,k)}^n = (\rho, u, v, w, E)^T$ - вектор параметров вещества в ячейке (i, j, k) на п-м слое по времени, $f_{(i+\frac{1}{2},j,k))}^n$ - вектор потока параметров вещества из ячейки (i, j, k) в ячейку (i + 1, j, k).

Для вычисления потока через грань $(i + \frac{1}{2}, j, k)$ сначала производится линейная интерполяция значений на грань с двух сторон.

$$U_{-} = U_{(i,j,k)} + \frac{h_x}{2} v_{x(i,j,k)}, U_{+} = U_{(i+1,j,k)} - \frac{h_x}{2} v_{x(i+1,j,k)}$$

$$v_{x(i,j,k)} = \begin{cases} \min(\frac{U_{(i+1,j,k)} - U_{(i,j,k)}}{h_x}, \frac{U_{(i,j,k)} - U_{(i-1,j,k)}}{h_x}), \text{ при } U_{(i,j,k)} \in [U_{(i+1,j,k)}, U_{(i-1,j,k)}] \\ 0, \text{ при } U_{(i,j,k)} \notin [U_{(i+1,j,k)}, U_{(i-1,j,k)}] \end{cases}$$
(9)

Сам поток вычислялся путем приближенного решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва на соответствующей грани методом HLL (Harten-Lax-van Leer) [31]

$$f_{(i+\frac{1}{2},j,k)} = F_{HLL}(U_{-},U_{+}).$$

Для потоков через остальные грани ячейки производилась аналогичная операция.

4.2. Вычисление теплового вклада лазерного излучения

На каждом шаге по времени в расчетную область запускается определенное количество лучей, каждый из которых несет некоторое количество энергии, зависящее от распределения интенсивности лазерного излучения и шага по времени. Каждому из лучей сопоставлены следующие параметры: \vec{r} - радиус-вектор текущего положения луча, \vec{s} - единичный вектор вдоль текущего направления луча, E - энергия, оставшаяся в луче. Далее для каждого отдельного луча выполняется следующий алгоритм:

1) По вектору r находится ячейка, к которой луч принадлежит в данный момент.

2) Происходит трассировка луча через ячейку: определяется длина пути луча по ячейке и грань, через которую луч выходит. Обновляются параметры Q и \vec{r} .

$$\vec{r}_1 = \vec{r}_0 + l\vec{s}$$

 $Q_1 = Q_0(1 - e^{-\mu l})$

3) Если луч вышел за пределы расчетной области или оставшаяся в луче энергия меньше определенного значения, то расчет луча на этой итерации по времени прекращается.

4) Активная ячейка для луча меняется на соседнюю по грани, через которую луч вышел. Если новая активная ячейка является граничной для данного блока или существует блок с более высоким уровнем дробления, покрывающий данную ячейку, то дальнейший расчет луча передается на процесс, отвечающий за новый блок. Далее повторяются п.2-4 для новой ячейки.

4.3. Решение уравнения теплопроводности

Для моделирования процессов диффузионного переноса тепла решается следующее уравнение:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla(\kappa \nabla T) + Q_l, \qquad (10)$$

где коэффициент теплопроводности $\kappa(\rho, T)$ и удельная теплоемкость $c(\rho, T)$ в общем случае являются функциями температуры и плотности.

Уравнение может быть аппроксимировано неявной схемой

$$c\rho_i \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} = -L_h T_i^{n+1} + f_i, \qquad (11)$$

$$(L_h T)_i = \sum_{k \in \mathrm{III}_i} l_k^i T_k.$$
(12)

В случае аппроксимации на octree-сетке блочного типа оператор L_h выглядит так:

$$L_{h}T_{(i,j,k)} = \frac{1}{h_{x}} \left(f_{(i+\frac{1}{2},j,k)} - f_{(i-\frac{1}{2},j,k)} \right) + \frac{1}{h_{y}} \left(f_{(i,j+\frac{1}{2},k)} - f_{(i,j-\frac{1}{2},k)} \right) + \frac{1}{h_{z}} \left(f_{(i,j,k+\frac{1}{2})} - f_{(i,j,k-\frac{1}{2})} \right)$$
(13)

где

$$f_{(i+\frac{1}{2},j,k)} = \kappa_{(i+\frac{1}{2},j,k)} \frac{T_{(i+1,j,k)} - T_{(i,j,k)}}{h_x}, \ f_{(i,j+\frac{1}{2},k)} = \kappa_{(i,j+\frac{1}{2},k)} \frac{T_{(i,j+1,k)} - T_{(i,j,k)}}{h_y},$$

$$f_{(i,j,k+\frac{1}{2})} = \kappa_{(i,j,k+\frac{1}{2})} \frac{T_{(i,j,k+1)} - T_{(i,j,k)}}{h_z}$$
(14)

Для нахождения значений на верхнем слое по такой схеме необходимо решить систему линейных уравнений, для чего используется метод чебышевских итераций [19]

$$y^0 = T^n \tag{15}$$

$$y^{j} = \frac{1}{1 + \tau \alpha_{j}} (y^{0} + \tau \alpha_{j} y^{j-1} - \tau L_{h} y^{j-1} + \tau f), j = 1, ..., 2p - 1$$
(16)

$$T^{n+1} = y^{2p-1} \tag{17}$$

где

$$\alpha_j = \frac{\lambda_\infty}{1+\beta_1} (\beta_1 - \beta_j), j = 1, \dots, p \tag{18}$$

$$\alpha_j = \frac{\lambda_\infty}{1+\beta_1} (\beta_1 - \beta_{j-p+1}), j = p+1, ..., 2p-1$$
(19)

$$\lambda_{\infty} = \max_{i \in \Omega_h} \sum_{k \in \mathrm{III}_i} |l_k^i| \tag{20}$$

$$\beta_j \in \{\cos\frac{2i-1}{2p}\pi, i=1,...,p\}, \ \beta_1 = \cos\frac{\pi}{2p}$$
(21)

Стоит отметить, что для устойчивости расчета необходимо, чтобы корни были упорядочены в соответствии с [20]. Также из условия устойчивости явной схемы расширенного шаблона получается формула для определения необходимого количества итераций *p*:

$$p = \left\lceil \frac{\pi}{4} \sqrt{\tau \lambda_{\infty} + 1} \right\rceil.$$
(22)

Алгоритм, реализующий схему на блочных octree-сетках, будет выглядеть следующим образом:

1) Вычисление λ_{∞} путем обхода всех ячеек и вычисления по формуле (20).

2) Определение параметра p по формуле (22).

3) Определение последовательности корней $\{\beta_j\}$ многочлена Чебышева.

4) Цикл по j от 1 до 2p - 1:

4.1) Вычисление потоков по формулам (14).

4.2) Коррекция потоков на границе между ячейками разных уровней (Поток через родительскую грань приравнивается к сумме потоков через дочерние).

4.3) Вычисление y^{j} по формуле (16).

5. Расчет взаимодействия лазера с криогенной водородной мишенью

5.1. Постановка задачи

Вычислительный эксперимент выполнен при следующих условиях. Область, в которой рассчитывается разлет лазерной плазмы, имеет размеры 0.012см × 0.012см × 0.009см. В нижней части области($z \leq 0.003$ см) расположена пленка из твердого водорода при температуре 10^{-6} КэВ. В точку с координатами (0.006см, 0.006см, 0.003см) падает лазерный луч под углом 45°

к поверхности пленки.



Параметры мишени:

- Материал: твердый водород.
- Начальная температура: 10^{-6} КэВ.
- Начальная плотность: $0.086 \ r/cm^3$.

Параметры лазера:

- Длина волны: 0.8 мкм ($n_{ecr} = 1.7 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$).
- Пространственное распределение: Равномерное распределение в круге радиуса r = 2.5 мкм.
- Временное распределение: Равномерный импульс длиной 1 нс.
- Энергия импульса: 0.02 мДж.

Параметры сеток:

- Сетка: Адаптивная octree-сетка 160 \times 160 \times 120 с двумя уровнями адаптации.
- Критерий адаптации сетки: Для данной задачи оказался весьма эффективным простой способ адаптации по величинам плотности и температуры. Адаптируются ячейки, в которых температура выше 10⁻⁴ КэВ и плотность выше 10⁻⁵ г/см³.

5.2. Результаты расчетов

Ниже на Рис. 5-8 представлены распределения плотности плазмы вблизи области прожига водородной пленки в различные моменты времени.



Рис. 5: Распределение плотности в момент времен
иt=0.25нс на плоскостях x=0.006
иy=0.006



Рис. 6: Распределение плотности в момент времен
иt=0.50нс на плоскостях x=0.006
иy=0.006



Рис. 7: Распределение плотности в момент времен
иt=0.75нс на плоскостях x=0.006
иy=0.006



Рис. 8: Распределение плотности в момент времен
иt=1.0нс на плоскостях x=0.006
иy=0.006

Во время расчета было проведено 9768 шагов по времени, сетка была адаптирована 1000 раз. На рисунках ниже можно видеть, как менялось количество ячеек сетки во время расчета и как выглядела структура сетки.



Рис. 9: Изменение общего числа ячеек во время расчета.



Рис. 10: Структура сетки на плоскости y=0.006в моменты времен
и $t=0.25 {\rm hc}$ и $t=0.50 {\rm hc}.$



Рис. 11: Структура сетки на плоскости y=0.006в моменты времен
и $t=0.75 {\rm hc}$ и $t=1.00 {\rm hc}.$



Рис. 12: Структура сетки в момент времени t = 0.25нс.



Рис. 13: Структура сетки в момент времени t = 0.50нс.



Рис. 14: Структура сетки в момент времени t = 0.75нс.



Рис. 15: Структура сетки в момент времени t = 1.0нс.

Для сравнения расчет первых 100 шагов по времени был также проведен на регулярной сетке, шаг по пространству которой соответствовал второму уровню адаптивной сетки, т.е. на сетке размерами 640×640×480. Сравнивались средние времена выполнения итерации гидродинамического солвера (с учетом межпроцессорных обменов данными). Все расчеты проводились на кластере К60 ЦКП ИПМ им. Келдыша с использованием 140 MPI процессов.

Сетка	Количество ячеек	Среднее время на итерацию
Регулярная	196 млн	13.7 с
Адаптивная при $t = 0.25$	5.4 млн	0.97 c
Адаптивная при $t = 0.5$	7.6 млн	1.33 с
Адаптивная при $t = 0.75$	10.1 млн	1.82 с

Таблица 1: Сравнение скорости расчета на регулярной и адаптивной сетках.

6. Заключение

Проведено трехмерное моделирование воздействия предимпульса ASE на пленку из криогенного водорода на адаптивных сетках. Представлены использовавшиеся модели и методики. Из результатов можно заключить, что использование octree-ceток дает, даже при использовании сравнительно простого критерия адаптации по величине плотности или температуры вещества, ощутимую прибавку в скорости численного решения подобных задач при существенном (на один-два порядка величины) расширении линейных масштабов воспроизводимых деталей структуры разлетающегося плазменного облака.

Стоит подчеркнуть, что моделирование происходило с использованием упрощенной модели преломления лазерного излучения, в которой не учитывается отражение лучей от поверхности пленки. Развитие кода в первую очередь предполагает уточнение модели распространения и поглощения излучения в областях с плотностью вещества, близкой к критической.

Автор благодарит В.А. Гасилова, С.К. Григорьева, И.П. Цыгвинцева и О.Г. Ольховскую за полезные дискуссии о постановке задачи и методах моделирования.

Список литературы

 Ya. B. Fainberg, in Proc. CERN Symp. on High-Energy Accelerator and Pion Physics (Geneva: CERN,1956), 11 - 23 June 1956, Vol. 1, p. 84

- [2] T. Tajima, J. M. Dawson, Laser Electron Accelerator, Phys. Rev. Lett. 43, 267, (1979).
- [3] E. Esarey, C. B. Schroeder, W. P. Leemans, Physics of laser-driven plasma-based electron accelerators, Rev. Mod. Phys. 81 1229.(2009).
- [4] A. Maksimchuk, S. Gu, K. Flippo, D. Umstadter, V. Y. Bychenkov, Forward Ion Acceleration in Thin Films Driven by a High-Intensity Laser, Phys. Rev. Lett. 84, 4108 (2000).
- [5] S. V. Bulanov and V. S. Khoroshkov, Feasibility of using laser ion accelerators in proton therapy, Plasma Phys. Rep. 28, 453–456 (2002).
- [6] P. Mulser, D. Bauer, and H. Ruhl, Collisionless Laser-Energy Conversion by Anharmonic Resonance, Phys. Rev. Lett. 101, 225002 (2008).
- [7] T. V. Liseykina, S. Pirner, and D. Bauer, Relativistic Attosecond Electron Bunches from Laser-Illuminated Droplets, Phys. Rev. Lett. 104, 095002 (2010).
- [8] S. S. Bulanov, E. Esarey, C. B. Schroeder, S. V. Bulanov, T. Z. Esirkepov, M. Kando, F. Pegoraro, and W. P. Leemans, Radiation pressure acceleration: The factors limiting maximum attainable ion energy. Phys. Plasmas 23, 056703 (2016).
- [9] G. A. Mourou, T. Tajima, and S. V. Bulanov, Optics in the relativistic regime, Rev. Mod. Phys. 78, 309–371 (2006).
- [10] A. Levy, T. Ceccotti, P. D'Oliveira, F. Reau, M. Perdrix, F. Quere, P. Monot, M.Bougeard, H. Lagadec, P. Martin, J.-P. Geindre, and P. Audebert, Double plasma mirror for ultrahigh temporal contrast ultraintense laser pulses, Opt. Lett. 32, 310–312 (2007).
- [11] T. Utsumi, K. Matsukado, H. Daido, T. Esirkepov, and S. Bulanov, Numerical simulation of melting and evaporation of a cold foil target irradiated by a prepulse, Appl. Phys. A 79, 1185–1187 (2004).
- [12] A. Yogo, H. Daido, S. V. Bulanov, K. Nemoto, Y. Oishi, T. Nayuki, T. Fujii, K.Ogura, S. Orimo, A. Sagisaka, J.-L. Ma, M. Esirkepov, T. Zh. Esirkepov, M. Mori, M. Nishiuchi, A. S. Pirozhkov, S. Nakamura, A. Noda, H. Nagatomo, T.Kimura, and T. Tajima, Laser ion acceleration via control of the near-critical density target, Phys. Rev. E 77, 016401 (2008).
- [13] K. Matsukado, T. Esirkepov, K. Kinoshita, H. Daido, T. Utsumi, Z. Li, A. Fukumi, Y. Hayashi, S. Orimo, M. Nishiuchi, S. V. Bulanov, T. Tajima, A.

Noda, Y. Iwashita, T. Shirai, T. Takeuchi, S. Nakamura, A. Yamazaki, M. Ikegami, T. Mihara, A. Morita, M. Uesaka, K. Yoshii, T. Watanabe, T. Hosokai, A. Zhidkov, A. Ogata, Y.Wada, and T. Kubota, Energetic protons from a few-micron metallic foil evaporated by an intense laser pulse, Phys. Rev. Lett. 91, 215001 (2003).

- [14] T. Z. Esirkepov, J. K. Koga, A. Sunahara, T. Morita, M. Nishikino, K. Kageyama, H. Nagatomo, K. Nishihara, A. Sagisaka, H. Kotaki, T. Nakamura, Y. Fukuda, H. Okada, A. S. Pirozhkov, A. Yogo, M. Nishiuchi, H. Kiriyama, K. Kondo, M. Kando, and S. V. Bulanov. "Prepulse and amplified spontaneous emission effects on the interaction of a petawatt class laser with thin solid targets," Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A 745, 150–163 (2014).
- [15] K. Ogura, M. Nishiuchi, A. S. Pirozhkov, T. Tanimoto, A. Sagisaka, T. Z. Esirkepov, M. Kando, T. Shizuma, T. Hayakawa, H. Kiriyama, T. Shimomura, S. Kondo, S. Kanazawa, Y. Nakai, H. Sasao, F. Sasao, Y. Fukuda, H. Sakaki, M. Kanasaki, A. Yogo, S. V. Bulanov, P. R. Bolton, and K. Kondo, "Proton acceleration to 40 MeV using a high intensity, high contrast optical parametric chirped-pulse amplification/Ti:sapphire hybrid laser system," Opt. Lett. 37, 2868–2870 (2012).
- P. Hadjisolomou, I. P. Tsygvintsev, P. Sasorov, V. Gasilov, G. Korn; S. V. Bulanov. Preplasma effects on laser ion generation from thin foil targets. Phys. Plasmas 27, 013107 (2020). https://doi.org/10.1063/1.5124457
- [17] Chuan S. Liu; Xi Shao; Bengt Eliasson; T. C. Liu; Galina Dudnikova; Roald Z. Sagdeev. Laser Acceleration of Quasi-Monoenergetic Protons via Radiation Pressure Driven Thin Foil. AIP Conf. Proc. 1320, 104–110 (2011)
- M. J. Berger, P. Colella, Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics, Comput. Phys. 82, 64–84 (1989)
 https://doi.org/10.1016/0021-9991(89)90035-1
- [19] В. Т. Жуков, О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений, Математическое моделирование, 2010, том 22, номер 10, стр. 127–158 https://doi.org/10.1134/S2070048211030136
- [20] В. И. Лебедев, С. А. Финогенов, О порядке выбора итерационных параметров в чебышевском циклическом итерационном методе, Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 11:2 (1971), 425–438; U.S.S.R. Comput. Math. Math. Phys., 11:2 (1971), 155–170
- [21] M. Zingale et al 2020 J. Phys.: Conf. Ser. 1623 012021

- [22] Peraire J., Patera A.T. Bounds for linear-functional outputs of coercive partial differential equations: local indicators and adaptive refinement. In: Advances in Adaptive Computational Methods in Mechanics 47 Studies in Applied Mechanics, pp. 199–216 (1998)
- [23] Zhang et al., (2019). AMReX: a framework for block-structured adaptive mesh refinement. Journal of Open Source Software, 4(37), 1370, https://doi.org/10.21105/joss.01370
- [24] Carsten Burstedde, Lucas C. Wilcox, and Omar Ghattas, p4est: Scalable Algorithms for Parallel Adaptive Mesh Refinement on Forests of Octrees. SIAM Journal on Scientific Computing 33 no. 3 (2011), pages 1103-1133
- [25] M. Adams, P. Colella, D. T. Graves, J.N. Johnson, N.D. Keen, T. J. Ligocki, D. F. Martin, P.W. McCorquodale, D. Modiano, P.O. Schwartz, T.D. Sternberg and B. Van Straalen, Chombo Software Package for AMR Applications - Design Document, Lawrence Berkeley National Laboratory Technical Report LBNL-6616E.
- [26] G. L. Bryan, M. L. Norman, B. W. O'Shea, T. Abel, J. H. Wise, M. J. Turk, D. R. Reynolds, D. C. Collins, P. Wang, S. W. Skillman, et al., Enzo: An adaptive mesh refinement code for astrophysics, Astrophys. J. 211 (2) (2014) 19
- [27] Peter MacNeice, Kevin M. Olson, Clark Mobarry, Rosalinda de Fainchtein, Charles Packer, PARAMESH: A parallel adaptive mesh refinement community toolkit, Computer Physics Communications, Volume 126, Issue 3, 2000, Pages 330-354, ISSN 0010-4655, https://doi.org/10.1016/S0010-4655(99)00501-9
- [28] SAMRAI, https://computation.llnl.gov/projects/samrai, 2017
- [29] R. D. Hornung, S. R. Kohn, Managing application complexity in the SAMRAI object-oriented framework, Concurr. Comput. 14 (5).
- [30] Трёхмерное моделирование поглощения лазерного излучения в приближении геометрической оптики / И.П.Цыгвинцев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 41. 20 с. http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-41
- [31] Eleuterio F. Toro, Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction, Springer Science Business Media, 2009.

Содержание

1.	Введение	3
2.	Локально-адаптивные сетки	4
3.	Физическая модель	7
	3.1. Модель динамики плазмы	7
	3.2. Модель поглощения лазерного излучения	8
4.	Методика расчета	9
	4.1. Решение уравнений газовой динамики	11
	4.2. Вычисление теплового вклада лазерного излучения	12
	4.3. Решение уравнения теплопроводности	13
5.	Расчет взаимодействия лазера с криогенной водородной мише	;-
	нью	14
	5.1. Постановка задачи	14
	5.2. Результаты расчетов	16
6.	Заключение	20
Сг	писок литературы	20