Bakalářská práce



České vysoké učení technické v Praze



Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská Katedra fyziky

Hydrodynamické simulace plazmatu pro realizaci rentgenového laseru

Martin Šach

Vedoucí: Ing. Milan Kuchařík, Ph.D. Konzultanti: Ing. Jan Nikl, Ing. Miroslav Krůs, Ph.D. Obor: Fyzika a technika termojaderné fúze Červenec 2019



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE FAKULTA JADERNÁ A FYZIKÁLNĚ INŽENÝRSKÁ PRAHA 1 - STARÉ MĚSTO, BŘEHOVÁ 7 - PSČ 115 19



Katedra: fyziky

Akademický rok: 2018/2019

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student:

Obor:

Martin Šach

Studijní program: Aplikace přírodních věd

Fyzika a technika termojaderné fúze

Název práce: (česky)

Hydrodynamické simulace plazmatu pro realizaci rentgenového laseru

Název práce: Hydrodynamic Plasma Simulations for X-Ray Laser Realization (anglicky)

Pokyny pro vypracování:

Náplní bakalářské práce je studium procesů při generování koherentního rentgenového záření pomocí interakce laseru s masivním pevným terčem. Vytvoření rentgenového laseru je dosaženo několikanásobným laserovým impulzem, který nejprve vytvoří plazma, poté plazma zahřeje a následně excituje.

Seznamte se s numerickými metodami pro hydrodynamické simulace interakcí laseru s terčem, včetně nezbytných metod pro absorpci laseru a vedení tepla [1,2]. Dále se seznamte s mechanizmy generování rentgenového záření v plazmatu [3]. Existující 1D hydrodynamický kód rozšiřte o model pro vícenásobný laserový pulz. Dále navrhněte a do kódu implementujte stacionární model excitace a přechodu elektronů mezi vrstvami, určující zisk (gain) plazmatu na základě hydrodynamických veličin [4]. Porovnejte výsledky simulací s daty dostupnými v literatuře [5].

Doporučená literatura:

[1] J. Šilar: Hydrodynamické modelování laserového plazmatu. Výzkumný úkol, ČVUT, FJFI, 2009

[2] J. Nikl: Hydrodynamické simulace ablace a expanze plazmatu při pulzní laserové depozici. Bakalářská práce, ČVUT, FJFI, 2015

[3] P. Jaeglé: Coherent Sources of XUV Radiation, Soft X-Ray Lasers and High-Order Harmonic Generation, Springer Series in Optical Sciences, Springer, 2006

[4] P.B. Holden, et al.: A computational investigation of the neon-like germanium collisionally pumped laser. J. Phys. B 27, 341 (1994)

[5] E. Oliva, et al.: Optimization of soft x-ray amplifier by tailoring plasma hydrodynamics. Opt. Lett. 34, 2640 (2009)

Jméno a pracoviště vedoucího bakalářské práce:

Ing. Milan Kuchařík, Ph.D., Katedra fyzikální elektroniky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze

Jména a pracoviště konzultantů:

Ing. Miroslav Krůs, Ph.D., Ústav fyziky plazmatu AV ČR

Ing. Jan Nikl, Katedra fyzikální elektroniky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze

Datum zadání bakalářské práce: 22.10.2018

Termín odevzdání bakalářské práce: 08.07.2019

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

garant oboru

vedoucí katedry



děkan

V Praze dne 22.10.2018

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci vypracoval samostatně a použil jsem pouze podklady (literaturu, projekty, SW atd...) uvedené v přiloženém seznamu.

Nemám závažný důvod proti použití tohoto školního díla ve smyslu § 60 Zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonu (autorský zákon).

V Praze d
ne 8. 7. 2019

podpis

Poděkování

Rád bych poděkoval Ing. Milanu Kuchaříkovi Ph.D. za trpělivé vedení a vstřícný přístup. Jsem vděčný za obrovské množství času který mi byl věnován. Dále bych rád poděkoval Ing. Janu Niklovi, který mi byl vždy ochotně nápomocen a neváhal mi poskytnout své znalosti a čas. Konečně děkuji Ing. Miroslavu Krůsovi Ph.D za příležitost studovat dané téma a poskytnutí znalostí odborníka v oblasti rentgenových laserů.

Název práce: Hydrodynamické simulace plazmatu pro realizaci rentgenového laseru

Autor:	Martin Šach
Obor: Druh práce:	Katedra fyziky Bakalářská práce
Vedoucí práce:	Ing. Milan Kuchařík, Ph.D. Katedra fyzikální elektroniky, Fakulta ja- derná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze
Konzultanti:	Ing. Miroslav Krůs, Ph.D., Ústav fyziky plazmatu AV ČR, Ing. Jan Nikl, Katedra fyzikální elektroniky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze

Abstrakt: Rentgenové lasery mají mnoho potenciálních aplikací napříč vědními obory, ať už se jedná o rentgenovou mikroskopii, materiálovou analýzu nebo mikrolitografii. Způsob realizace rentgenového laseru, který využívá laserem vytvořené plasma jako médium, se zdá být s ohledem na dosažitelné intenzity laserového záření velice perspektivní. V této práci jsou shrnuty metody hydrodynamických simulací interakce několika laserových pulzů s pevným terčem za účelem vytvoření optimálního plasmového média pro realizaci rentgenového laseru. Značná pozornost je věnována teoretickému odvození numerického schématu, které bylo pro tuto práci implementováno. Správnost implementace je ověřena na základě několika úloh, jejichž analytické řešení je známo. Je zde provedena simulace interakce několika pulzů s pevným železným terčem. Ta je zpracována pomocí navrženého modelu pro určení koeficientu zisku a to pro konkrétní laserující přechod v neonu podobném železe. Výsledný prostorový profil koeficientu zisku je srovnán s obdobnou simulací popsanou v literatuře.

Title:

Hydrodynamic Plasma Simulations for X-Ray Laser Realization

Author: Martin Šach

Abstract: X-ray lasers have potential applications in many fields of study, ranging from x-ray microscopy, material anlysis to microlitography. Plasma based x-ray lasers that utilize plasma as a medium do pose a great potential regarding highly intesive laser beams. In this work a hydrodynamic simulation of multiple laser pulses iteracting with a solid target is summarized. The aim of the simulation is the optimization of plasma created in this interaction as a potential laser medium. Great attention is paid to the theoretical foundations of the used numerical scheme as this was reimplemented to code. This code is then verified with multiple problems that do have anyltical solution. A simulation of solid target interacting with multiple laser pulses is then performed. It is then postprocessed with proposed model of gain coefficient estimation. This is done for a particular transition in neon-like iron. Resulting spatial gain profile is compared with similar work described in literature.

Key words: laser, simulation, hydrodynamics, gain coefficient, x-ray, plasma, neon-like iron

Klíčová slova: laser, simulace, hydrodynamika, koeficient zisku, rentgen, plasma, neonu podobné železo

Obsah

Úvod

1

Část I Úvod do hydrodynamických simulací

1 Analytické rovnice pro popis interakce laseru s pevným terčem	7
1.1 Lagrangeovské souřadnice	. 7
1.2 Eulerovy rovnice	. 8
1.3 Rozšíření systému rovnic	10
1.3.1 Dvouteplotní model	10
1.3.2 Stavová rovnice	11
1.3.3 Vedení tepla	13
1.3.4 Absorpce laseru	13
1.4 Doplňující předpoklady pro analytický model	14
1.4.1 Elektron iontová srážková frekvence	14
1.4.2 Koeficient tepelné vodivosti	15
1.4.3 Tok energie laserů	16
1.5 Shrnutí analytického modelu	17
2 Určení koeficientu zisku na základě stavových veličin plasmatu	21
2.1 Koeficient zisku	21
2.2 Veličiny nezbytné pro výpočet koeficientu zisku	21
2.2.1 Rovnice populace hladin a inverze populace	22
2.2.2 Rozšíření spektrálních čar	23
2.2.3 Einsteinovy koeficienty a atomový kód FAC	24
2.3 Shrnutí výpočtu koeficientu zisku	25
3 Diskretizace analytických rovnic pro numerický výpočet	27
3.1 Diskretizace hyperbolického systému rovnic	27
3.1.1 Prostorová diskretizace hyperbolického systému rovnic	27

3.1.2 Časová diskretizace hyperbolické části rovnic	29
3.2 Diskretizace rovnice vedení tepla	30
3.3 Metoda prediktor korektor	32
3.4 Určení časového kroku	33
3.5 Numerická viskozita	33
3.6 Shrnutí numerického schématu	35
3.6.1 Numerické schéma pro jednoteplotní případ	35
3.6.2 Numerické schéma pro dvouteplotní případ	35

Část II Výsledky simulací

4 Testovaci úlohy	39
4.1 Testování hydrodynamického kroku	39
4.1.1 Sodův problém	39
4.1.2 Nohův problém	41
4.1.3 Sedova exploze	41
4.2 Test vedení tepla	43
4.3 Test reálné interakce laseru s terčem	44
4.3.1 Test se stavovou rovnicí ideálního plynu	45
4.3.2 Test se stavovou rovnicí QEOS	46
5 Simulace laserového plasmatu pro určení koeficientu zisku	47
5 Simulace laserového plasmatu pro určení koeficientu zisku 5.1 Výpočet koeficientu zisku pro neonu podobné železo	47 47
 5 Simulace laserového plasmatu pro určení koeficientu zisku 5.1 Výpočet koeficientu zisku pro neonu podobné železo 5.2 Simulace se třemi laserovými pulzy 	47 47 49
 5 Simulace laserového plasmatu pro určení koeficientu zisku 5.1 Výpočet koeficientu zisku pro neonu podobné železo 5.2 Simulace se třemi laserovými pulzy 5.2.1 Hydrodynamické simulace a stabilita schématu 	47 47 49 49
 5 Simulace laserového plasmatu pro určení koeficientu zisku 5.1 Výpočet koeficientu zisku pro neonu podobné železo 5.2 Simulace se třemi laserovými pulzy 5.2.1 Hydrodynamické simulace a stabilita schématu 5.2.2 Výpočet koeficientu zisku z hydrodynamické simulace 	47 47 49 49 50
 5 Simulace laserového plasmatu pro určení koeficientu zisku 5.1 Výpočet koeficientu zisku pro neonu podobné železo 5.2 Simulace se třemi laserovými pulzy 5.2.1 Hydrodynamické simulace a stabilita schématu 5.2.2 Výpočet koeficientu zisku z hydrodynamické simulace 5.3 Možnosti vylepšení simulace 	47 47 49 49 50 51
 5 Simulace laserového plasmatu pro určení koeficientu zisku 5.1 Výpočet koeficientu zisku pro neonu podobné železo 5.2 Simulace se třemi laserovými pulzy 5.2.1 Hydrodynamické simulace a stabilita schématu 5.2.2 Výpočet koeficientu zisku z hydrodynamické simulace 5.3 Možnosti vylepšení simulace Závěr 	47 47 49 49 50 51 53
 5 Simulace laserového plasmatu pro určení koeficientu zisku 5.1 Výpočet koeficientu zisku pro neonu podobné železo 5.2 Simulace se třemi laserovými pulzy 5.2.1 Hydrodynamické simulace a stabilita schématu 5.2.2 Výpočet koeficientu zisku z hydrodynamické simulace 5.3 Možnosti vylepšení simulace Závěr Literatura 	 47 47 49 49 50 51 53 55

Realizace rentgenového laseru s dobrými optickými vlastnostmi je klíčová pro mnohá odvětví od biologie až po fyziku [21]. V biologii jsou rentgenové lasery potenciálně využitelné pro pořizovaní snímků vzorků se suboptickým rozlišením [2]. Další biologická aplikace spočívá v rentgenové holografické mikroskopii, která je slibnou metodou pro trojrozměrné zobrazování vzorků s vysokým rozlišením [18]. Kromě biologických aplikací nelze opomenout tzv. mikrolitografii, což je proces používaný pro realizaci nanášení vzorů na počítačové čipy. Použití záření o kratších vlnových délkách umožňuje nanášet vzory s mnohem jemnějšími detaily [15]. Mezi fyzikální aplikace patří tomografické zobrazovaní orbitalů molekul, které při použití femtosekundového rentgenového laseru umožňuje snímkovaní orbitalů během chemické reakce [14]. Tento krátký výčet není zdaleka úplný a představuje několik případů, kde rentgenové lasery představují zásadní vylepšení současných metod.

Způsobů jak realizovat rentgenový laser existuje několik. Dnes se v praxi nejčastěji používají tzv. lasery na uvolněných elektronech (FEL) a generace vyšších harmonických (HHG) [21]. Další možnost jak dosáhnout laserovaní v rentgenové části spektra je využít plasma jako laserové médium. Používá se plasma vzniklé interakcí řídícího (pumping, driving) laseru s pevným terčem. Tento způsob realizace rentgenového laseru se ukazuje jako velice slibný, protože vykazuje maximální energii pulzu až 4 mJ v pulzech o délkách v řádech 100 ps [22].

Pouze plasma jako zdroj laserového záření má několik nevýhod. Vzniklé záření není příliš koherentní a pro mnoho aplikací by bylo žádoucí realizovat kratší pulzy [21]. Jedna z možností jak se tomuto vyhnout je připravit laserový pulz pomocí HHG a ten poté zesílit pomocí plasmového média. Tento postup byl využit v [31] kde byla dosažena energie ~1 μ J a délka rentgenového pulzu ~5 ps.

Náplní této práce je 1D hydrodynamické modelování interakce laseru s

pevným terčem a následné zkoumání tohoto plasmatu jako potenciálního laserového média. Je zde modelována situace inspirovaná [21], kde je plasma vytvořeno několikanásobným laserovým pulzem řídícího laseru dopadajícího na železný terč. První pulz nejprve vytvoří plasma, další poté plasma zahřeje a následující excituje. Výsledkem této hydrodynamické simulace je časově prostorová závislost stavových veličin plasmatu. Dále je použit stacionární atomový model excitace určující zisk (gain) plasmatu na základě stavových veličin, pro konkrétní přechod v neonu podobných iontech železa. Vlnová délka $\lambda = 25,5$ nm zkoumaného laserujícího přechodu $2p_{1/2}^5 3s_{1/2}, J = 1 \rightarrow 2p_{1/2}^5 3p_{1/2}, J = 0$ zde odpovídá vlnové délce zesíleného HHG pulzu.

Práce je rozdělena na dvě části. V první kapitole rešeršní části se nejprve zabýváme analytickou formulací Eulerových diferenciálních rovnic v lagrangeovských souřadnicích popisujících hydrodynamiku modelované situace. Rovnice popisující plasma jako jednoteplotní tekutinu jsou zde rozšířeny pro tekutinu dvouteplotní. Tento přístup umožňuje zahrnout do modelu rozdílné teploty elektronů a iontů a výměnu energie mezi nimi, což lépe odpovídá fyzikální realitě. Analytický systém rovnic je zde následně uzavřen zavedením obecné stavové rovnice. Dále je zde teoreticky popsán model vedení tepla. Konečně pro popis interakce laseru s plasmatem je zde popsán model absorpce laseru, v kterém je uvažována interakce plasmatu s několika různými laserovými pulzy.

V druhé kapitole je navržen stacionární model excitace a přechodu elektronů mezi energetickými hladinami. Následně je zde teoreticky popsán způsob jak na základě tohoto a stavových veličin plasmatu určit koeficient zisku. Ten je zde určen obecně pro daný laserující přechod atomu v daném ionizačním stavu.

Třetí kapitola shrnuje diskrétní formulaci analytických rovnic pro numerický výpočet. Pro to použijeme metodu rozdělení diferenciálních operátorů (operator splitting). Postup diskretizace je zde odvozen pro jednoteplotní případ. Nejprve se zabýváme diskretizací hyperbolické části systému. Následně provedeme diskretizaci rovnice vedení tepla. Pokračujeme popisem adaptivního časového kroku. Nakonec je v této kapitole zavedena numerická viskozita a celé schéma je zobecněné pro dvouteplotní případ.

Na základě odvozeného numerického schématu jsme implementovali nový hydrodynamický kód. V druhé části práce jsou shrnuty prováděné simulace a jejich výsledky. Výhoda nové implementace oproti předchozím [19], [25] je možnost simulovat několik laserových pulzů s různými parametry najednou.

Ve čtvrté kapitole se zabýváme testováním implementace vyvinutého kódu. Je zde provedeno několik testovacích úloh, které mají známé analytické řešení. Dále jsou výsledky srovnány s predikcemi existujících hydrodynamických

kódů [19], [25].

Konečně v páté kapitole je nejprve proveden obecný postup výpočtu koeficientu zisku pro konkrétní přechod v neonu podobném železe. Na základě tohoto je předpovězena závislost koeficientu zisku na stavových veličinách. Následně je provedena hydrodynamická simulace interakce laseru se třemi laserovými svazky obdobně jako v [21]. Výsledky simulace jsou použity pro určení prostorového koeficientu zisku a srovnány s referenčními výsledky E. Olivy et al.

Část l

Úvod do hydrodynamických simulací

Kapitola 1 Analytické rovnice pro popis interakce laseru s pevným terčem

1.1 Lagrangeovské souřadnice

Pro popis dynamiky kontinua se v této práci uvažují tzv. lagrangeovské souřadnice [7]. Jedná se o popis kdy od eulerovských souřadnic (x, t), kde nezávislé proměnné jsou 1D prostorová souřadnice x a čas, přejdeme k novým souřadnicím (X, t). Zde X je lagrangeovská souřadnice, která jednoznačně určuje právě jeden infinitesimální element kontinua. Podmínku na právě jeden fluidní element lze splnit tak, že se trajektorie jednotlivých elementů v kartézských souřadnicí neprotínají. Tato podmínka tedy zaručí, že transformace souřadnic definovaná následovně

$$\psi: (X,t) \to (x,t), \tag{1.1}$$

je bijektivní a existuje k ní zobrazení inverzní. Pro lepší představu je dobré poznamenat, že běžná volba souřadnice X je například počáteční poloha fluidního elementu $x(t = 0) = x_0$, tj. $X = x_0$.

Je-li dána funkce f(x,t) definovaná v eulerovských souřadnicích. Její vyjádření v souřadnicích lagrangeovských je pak $f(\psi(X,t))$. Podle pravidla pro derivaci složené funkce pak lze derivaci zapsat následovně

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial \psi},\tag{1.2}$$

kde $\frac{\partial f}{\partial \psi} = \frac{\partial f}{\partial x}$ v eulerovských souřadnicích a $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ označujeme \vec{u} , které v eulerovských souřadnicích odpovídá rychlosti fluidního elementu daného lagrangeovskou souřadnicí X. To implikuje následující vztah derivací

$$\frac{d}{dt}\tilde{f}(X,t) = \frac{\partial}{\partial t}f(x,t) + \vec{u}(x,t)\frac{\partial}{\partial x}f(x,t), \qquad (1.3)$$

kde $\tilde{f}(X,t)$ je funkce f vyjádřená v lagrangeovských souřadnicích. Aby toto bylo platné pro libovolnou ψ a dobře definovanou f, požadujeme aby ψ byl difeomorfismus.

Vztah (1.3) lze ještě zjednodušit definicí diferenciálního operátoru materiálové derivace v eulerovských souřadnicích

$$\frac{D}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x},\tag{1.4}$$

a to do tvaru

$$\frac{d}{dt}\tilde{f}(X,t) = \frac{D}{Dt}f(x,t).$$
(1.5)

1.2 Eulerovy rovnice

Pro simulaci hydrodynamicky plasmatu při interakci laseru s terčíkem se vychází z Eulerových rovnic [6] pro tekutinu, které jsou zde nejprve vyjádřeny ve 3D v eulerovských souřadnicích. Všechny proměnné jsou tedy funkcemi (x, t)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla (\rho \cdot \vec{u}) = 0, \qquad (1.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) + \nabla p = \vec{F}, \qquad (1.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \nabla \cdot (\rho \vec{u}\varepsilon) + p\nabla \vec{u} = \rho Q.$$
(1.8)

První rovnice vyjadřuje zákon zachování hmotnosti, ρ zde vyjadřuje hustotu tekutiny a \vec{u} je rychlost tekutiny. Druhá rovnice reprezentuje zákon zachování hybnosti, kde je p tlak tekutiny a \vec{F} jsou vnější síly působící na systém. Konečně třetí rovnice vyjadřuje vztah pro specifickou vnitřní energii ε a práci danou tlakem p, Q je specifické teplo dodané vnějšími zdroji. Často se jako třetí rovnice uvádí zákon zachování specifické celkové energie E, zde je uveden pro specifickou vnitřní energii ε .

Dále pro libovolnou funkci f platí identita [6]

$$\rho \frac{Df}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} (\rho f) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} f), \qquad (1.9)$$

kterou lze aplikovat na rovnici pro energii a rovnici pro hybnost a v první

rovnici použít definici (1.4)

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \vec{u}, \qquad (1.10)$$

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = -\nabla p + \vec{F}, \qquad (1.11)$$

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = -p\nabla \vec{u} + \rho Q. \tag{1.12}$$

Pro zjednodušení výpočtů budeme popisovat systém jen v jedné dimenzi. Omezíme se tedy na rychlost $\vec{u} = (u, v, w), v = 0, w = 0$ a závislost proměnných pouze na (x, t). Dále nebudeme uvažovat vnější zdroje tepla ani vnější síly Q = 0 a $\vec{F} = \vec{0}$, čímž se rovnice zjednoduší na

$$\frac{D}{Dt}\rho(x,t) = -\rho(x,t)\nabla \cdot u(x,t), \qquad (1.13)$$

$$\rho(x,t)\frac{D}{Dt}u(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}p(x,t), \qquad (1.14)$$

$$\rho(x,t)\frac{D}{Dt}\varepsilon(x,t) = -p(x,t)\frac{\partial}{\partial x}u(x,t).$$
(1.15)

Pro přechod do lagrageovských souřadnic v prostoru využijeme jakobián [7], který v 1D plyne z rovnosti $\rho(x,t)dx = \rho(X,t)dX$

$$\frac{\partial X}{\partial x} = \frac{\rho(x,t)}{\rho(X,t)} \tag{1.16}$$

a tedy pro libovolnou funkci g(x,t) dává předpis pro transformaci prostorové derivace

$$\frac{\partial g(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial \tilde{g}(X,t)}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial x} = \frac{\partial \tilde{g}(X,t)}{\partial X} \frac{\rho(x,t)}{\rho(X,t)}.$$
(1.17)

Přechodem do lagrangeovských souřadnic (1.5) tedy získáváme výsledný tvar rovnic, které použijeme pro popis systému

$$\rho(X,t)\frac{d}{dt}u(X,t) = -\frac{d}{dX}p(X,t), \qquad (1.18)$$

$$\rho(X,t)\frac{d}{dt}\varepsilon(X,t) = -p(X,t)\frac{d}{dX}u(X,t).$$
(1.19)

První z rovnic zde není uvedena, protože je v lagrangeovských souřadnicích splněna automaticky [19].

Pro úplnost zde uvedeme užitečné vztahy platné v lagrange
ovských souřadnicích. První je vztah pro hustotu $\rho(X,t)$

$$\rho(X,t) = \frac{m(X,t)}{V(X,t)} = \frac{m_0(X)}{V(X,t)},$$
(1.20)

kde $m_0(X)$ je v čase konstantní hmotnost pomyslného fluidního elementu a V(X,t) je objem tohoto elementu. Nezávislost $m_0(X)$ na čase je základní vlastnost lagrangeovských souřadnic [3]. Další je vztah pro objem V(X) v závislosti na vývoji rychlosti

$$\frac{1}{V(X,t)}\frac{d}{dt}V(X,t) = \frac{d}{dX}u(X,t),$$
(1.21)

který plyne přímo z dosazení (1.20) do zákona zachování hmotnosti [3].

1.3 Rozšíření systému rovnic

V předchozí sekci zavedené rovnice (1.18) a (1.19) obecně popisují hydrodynamiku tekutin. Tento sytém dvou rovnic však není uzavřený a je třeba ho uzavřít volbou stavové rovnice. Pro simulaci interakce laseru s pevným terčem nestačí jen hydrodynamický popis a je třeba jej rozšířit o další fyzikální modely. Dále bude zavedena rovnice vedení tepla, model absorpce laseru a budou uvažovány rozdílné teploty elektronů a iontů (dvouteplotní model). Rovnice na následujících řádcích budou uvedeny výhradně v lagrangeovských souřadnicích, nebude-li řečeno jinak. Pro přehlednost zápisu zde již nebudou uvedeny explicitní závislosti proměnných na X a t.

1.3.1 Dvouteplotní model

Rovnice (1.18), (1.19) popisují hydrodynamiku jedné tekutiny. Pro popis interakce laseru s plasmatem je však vhodné uvážit model tekutin dvou a to tekutiny elektronové a iontové. Důvod zavedení této aproximace oproti jednoteplotnímu modelu, plyne z faktu, že ionty jsou zahřívány hlavně skrze výměnu tepla s elektrony [20]. V reálném systému tak může být značný rozdíl mezi teplotou elektronů T_e a teplotou iontů T_i . Zde uvažujeme, že všechny ionty v daných ionizačních stavech mají stejnou teplotu, to zcela neodpovídá reálnému plasmatu, kde se teploty různě ionizovaných iontů liší.

Tlak p tedy rozdělíme na příspěvek od elektronů a iontů $p = p_i + p_e$ a stejně tak vnitřní energii $e = e_e + e_i$. Tuto změnu zohledníme v rovnici (1.18) a rovnici energie (1.19) rozdělíme následujícím způsobem

$$\rho \frac{du}{dt} = -\frac{dp_i}{dX} - \frac{dp_e}{dX},\tag{1.22}$$

$$\rho \frac{d\varepsilon_e}{dt} = -p_e \frac{du}{dX} + G_{ei}(T_i - T_e), \qquad (1.23)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon_i}{dt} = -p_i \frac{du}{dX} + G_{ie}(T_e - T_i).$$
(1.24)

Zde přibyly zdrojové členy s koeficienty G_{ei} a G_{ei} , které vyjadřují výměnu energie mezi elektrony a ionty. Tyto členy obsahují rozdíl teplot $T_e - T_i$ a směřují systém do lokální rovnováhy $T_e = T_i$. Teploty lze určit ze specifických vnitřních energií ε_e , ε_i , ze stavové rovnice, viz sekce 1.3.2. Pro koeficienty G_{ei} , G_{ie} platí v této formulaci následující [20]

$$G_{ei} = \rho \left(\frac{\partial \varepsilon_e}{\partial T_e}\right)_{\rho} \nu_{ei}^{\epsilon}, \qquad (1.25)$$

$$G_{ie} = \rho \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial T_i}\right)_{\rho} Z \nu_{ei}^{\epsilon}, \qquad (1.26)$$

$$\nu_{ei}^{\epsilon} = \frac{2m_e}{Am_u}\nu_{ei},\tag{1.27}$$

kde ρ je hustota, $\left(\frac{\partial \varepsilon_e}{\partial T_e}\right)_{\rho}$ a $\left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial T_i}\right)_{\rho}$ je dáno stavovou rovnicí a to buď numericky nebo analyticky, m_u je atomová hmotnostní konstanta, m_e je hmotnost elektronu, Z absolutní ionizace a ν_{ei} je elektron-iontová kolizní frekvence, která bude dále určena.

Aby byla zachována energie je nezbytné aby platilo: $G_{ei} = G_{ie}$. To ale není zaručeno pro obecnou stavovou rovnici, jak plyne z rovnic (1.25), (1.26), v důsledku nekonzistence při numerickém výpočtu derivace energie. Tento problém vyřešíme tak, že vzhledem k tomu, že příspěvky do rovnice energie jsou od těchto členů malé [20], vypočteme pouze koeficient G_{ei} a koeficient G_{ie} mu položíme roven. Takto se dopustíme jen drobné chyby v již velmi malém příspěvku.

1.3.2 Stavová rovnice

Stavovou rovnici zde popíšeme jak pro jednoteplotní tak pro dvouteplotní model uvedený v sekci 1.3.1. Pomocí modelu uzavřeme systém rovnic a provážeme jednotlivé stavové veličiny. Jednoteplotní model použité stavové rovnice nám zde poskytne následující závislosti pro tlak p, specifickou vnitřní energii ε a rychlost zvuku v_s

$$p(\varepsilon, \rho), T(\varepsilon), v_s(\varepsilon),$$
 (1.28)

zatímco dvouteplotní model pro tlak elektronů p_e , tlak i
ontů p_i , teplotu elektronů T_e , teplotu i
ontů T_i a rychlost zvuku v_s

$$p_e(\varepsilon_e, \rho), \ p_i(\varepsilon_i, \rho), \ T_e(\varepsilon_e), \ T_i(\varepsilon_i), \ v_s(\varepsilon_i).$$
 (1.29)

Tyto závislosti nemusí být pro realistickou stavovou rovnici dány explicitně. Používají se empirické aproximace jako například QEOS, které je věnována pozornost na konci této podkapitoly.

Dále je zde pro ilustraci uvedena stavová rovnice pro ideální plyn [19], protože ji lze pro konkrétní plyn explicitně analyticky vyjádřit a to jak pro jednoteplotní model

$$p(\varepsilon, \rho) = \varepsilon \rho(\gamma - 1), \tag{1.30}$$

$$T(\varepsilon) = \frac{A}{Z+1} \frac{m_u}{k_b} \varepsilon(\gamma - 1), \qquad (1.31)$$

$$v_s(\varepsilon) = \sqrt{(\gamma - 1)\gamma\varepsilon} \tag{1.32}$$

tak pro dvouteplotní model

$$p_e(\varepsilon_e, \rho) = \varepsilon_e \rho(\gamma - 1),$$
 (1.33)

$$p_i(\varepsilon_i, \rho) = \varepsilon_i \rho(\gamma - 1),$$
 (1.34)

$$T_e(\varepsilon_e) = \frac{A}{Z} \frac{m_u}{k_b} \varepsilon_e(\gamma - 1), \qquad (1.35)$$

$$T_i(\varepsilon_i) = A \frac{m_u}{k_b} \varepsilon_i(\gamma - 1), \qquad (1.36)$$

$$v_s(\varepsilon_i) = \sqrt{(\gamma - 1)\gamma\varepsilon_i},\tag{1.37}$$

kde γ je Poissonova konstanta závislá na konkrétním plynu, A nukleonové číslo, Z absolutní průměrná ionizace, která zde vystupuje jako konstantní parametr, m_u je atomová hmotnostní jednotka a k_b Boltzmannova konstanta. Při simulacích interakcí laseru s plasmatem použijeme Quotidian Equation of State, dále QEOS [17]. Ta byla přímo vyvinuta pro hydrodynamické simulace s ohledem na vysoké tlaky. Predikce QEOS jsou dostatečně hladké pro výpočty numerických derivací nezbytných pro určení tepelných kapacit

$$a = \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial T}, \quad a_e = \rho \frac{\partial \varepsilon_e}{\partial T_e}, \quad a_i = \rho \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial T_i}.$$
 (1.38)

Navíc byla vytvořena přímo pro dvouteplotní model a nehrozí, že by byla nekonzistentní pro různé teploty elektronů a iontů.

1.3.3 Vedení tepla

Pro interakci laseru s pevným terčem je nezbytné uvažovat vedení tepla. Použijeme model převzatý z [24], [23]. Budeme uvažovat, že k předávání kinetické energie částic dochází hlavně mezi elektrony. Iontové vedení tepla tedy zanedbáme. V modelu tento fakt zohledníme přidáním divergence toku tepla W do rovnice energie, tj. do rovnice (1.19) pro jednoteplotní model a do rovnice pro energii elektronů ve dvouteplotním modelu (1.23) a to

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = -p(X,t)\frac{du}{dX} - \frac{dW}{dX},$$
(1.39)

respektive

$$o\frac{d\varepsilon_e}{dt} = -p_e\frac{du}{dX} + G_{ei}(T_i - T_e) - \frac{dW}{dX}.$$
(1.40)

Tok W(X, t) určíme z Fourierova zákona [28], převedeného do lagrageovských souřadnic pomocí vztahu (1.16)

$$W(X,t) = -\kappa(T)\frac{dT}{dX}\frac{\rho(x,t)}{\rho(X,t)},$$
(1.41)

kde $\kappa(T)$ je koeficient tepelné vodivosti a jeho výpočtem se zabýváme v sekci 1.4.2. Hustota $\rho(x,t)$ se zde nezkrátí tak jak to bylo v případě členů, které závisely na první derivaci podle X. Numerický výpočet toku W tedy provedeme v souřadnicích eulerovských. K tomu vyjádříme vztah pro vývoj specifické vnitřní energie ε v závislosti na divergenci toku tepla $\frac{dW}{dx}$ v teplotách T [24]

$$\rho(x,t)\frac{\partial\varepsilon}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial W}{\partial x}$$
(1.42)

a použijeme Fourierův zákon vyjádřený v eulerovských souřadnicích

$$W(x,t) = -\kappa(T)\frac{\partial T}{\partial x}.$$
(1.43)

Funkce $\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}$ je měrná tepelná kapacita a je dána stavovou rovnicí (1.28).

Protože jsme zanedbali vedení tepla i
ontů, analogické vztahy platí i pro dvouteplotní model. Stačí položi
t $T = T_e$ a odvození zůstává v platnosti.

1.3.4 Absorpce laseru

Absorpci laseru zohledníme opět v rovnici energie. Explicitně budeme uvažovat, že terčík interaguje s N obecně různými jednodimenzionálními laserovými pulzy. Celkem můžeme jejich efekt shrnout do jednoho zdrojového členu a to

do divergence toku energi
e $\frac{dL}{dX}$ [19]. Rovnice energie v jednoteplotním modelu tak bude mít tvar

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = -p \frac{du}{dX} - \frac{dW}{dX} - \frac{dL}{dX}.$$
(1.44)

V dvouteplotním případě pak budeme uvažovat, že se energie laseru předává výhradně elektronům. Rovnice energie elektronů má tedy tvar

$$\rho \frac{d\varepsilon_e}{dt} = -p_e \frac{du}{dX} + G_{ei}(T_i - T_e) - \frac{dW}{dX} - \frac{dL}{dX}.$$
(1.45)

Zde uvažujeme, že lasery přicházející zprava a záporný tok energie značí, že energie se šíří zprava doleva. Tok energie L je třeba dále určit na základě parametrů přicházejících laserů a bude upřesněn v kapitole 1.4.3.

1.4 Doplňující předpoklady pro analytický model

V rovnicích (1.27), (1.41) a (1.44) respektive (1.45) se vyskytují členy, které nebyly určeny. Jsou jimi elektron-iontová srážková frekvence ν_{ei} , koeficient tepelné vodivosti κ a tok energie laserů L. Analytické vyjádření těchto jevů není jednoznačné a záleží na konkrétním fyzikálním modelu.

1.4.1 Elektron iontová srážková frekvence

Prvním zde zmíněným modelem je Spitzer-Härmova aproximace elektroniontové srážková frekvence [27]

$$\nu_{SH} = \frac{4}{3}\sqrt{2\pi} \frac{Ze^4 m_e n_e}{(m_e k_b T_e)^{3/2}} \ln(\Lambda), \qquad (1.46)$$

kde Z je absolutní střední ionizace, e náboj elektronu, m_e hmotnost elektronu, n_e hustota elektronů, k_b Boltzmannova konstanta, T_e teplota elektronů a $\ln(A)$ je Coulombův logaritmus. Tato aproximace je dobrá pro plasma limitně blízké ideálnímu plasmatu. Pro získaní alespoň částečně fyzikálních výsledků i pro neideální plasma je omezen Coulombův logaritmus $\ln(\Lambda)$ následujícím způsobem [9]

$$\ln(\Lambda) = \ln(\max(10, \min(\lambda_1, \lambda_2))), \qquad (1.47)$$

$$\lambda_1 = 1,5526 \cdot 10^{10} \frac{T_e^{3/2}}{\sqrt{n_e}},\tag{1.48}$$

$$\lambda_2 = 8.7 \cdot 10^{10} \frac{T_e}{\sqrt{n_e}}.$$
(1.49)

Hustota elektronů n_e je úměrná hustotě plasmatu a je používán vztah

$$n_e = \frac{Z\rho}{Am_u},\tag{1.50}$$

kdeA je počet nukleonů daného prvku
a m_u je atomová hmotnostní konstanta.

Druhý model, který zde budeme nazývat Eidmannova aproximace [10], zpřesňuje Spitzer-Härmovu aproximaci pro nízké teploty. Nejprve zavedeme srážkovou frekvenci mezi elektrony a fonony (vibrace mřížky), která dobře aproximuje srážkovou frekvenci pro pevné látky při pokojové teplotě

$$\nu_{ef} = 2k_S \frac{e^2 k_b T_i}{\hbar^2 v_F},\tag{1.51}$$

$$\nu_F = \frac{\hbar \sqrt[3]{3\pi^2 n_e}}{m_e},\tag{1.52}$$

zde k_S je empirická konstanta, v tomto případě volená 9,4, T_i teplota iontů, v_F Fermiho rychlost a \hbar redukovaná Planckova konstanta. Eidmannovu kolizní frekvenci zvolíme jako harmonický průměr Spitzer-Härmovy a elektron fononové frekvence

$$\nu_E = \frac{\nu_{SH}\nu_{ef}}{\nu_{SH} + \nu_{ef}}.$$
(1.53)

1.4.2 Koeficient tepelné vodivosti

Ve Fourierově zákoně (1.41) vystupuje na teplotě závislý koeficient tepelné vodivosti. Ten lze určit na základě stavových veličin a kolizní frekvence následujícím způsobem [20]

$$\kappa(T_e) = \kappa_0 \frac{n_e k_b^2 T_e}{m_e \tilde{\nu}_e},\tag{1.54}$$

kde κ_0 je empirická konstanta, n_e je hustota elektronů vypočtená pomocí (1.50), k_b je Boltzmannova konstanta, T_e je elektronová teplota, m_e hmotnost elektronu a $\tilde{\nu}_e$ je elektron-elektronová srážková frekvence. Elektron-elektronovou frekvenci lze z elektron-iontové frekvence zavedené v předchozí sekci 1.4.1 určit zavedením faktoru g(Z) [20]

$$g(Z) = \frac{1+0.24Z}{0.24(Z+0.24)} \tag{1.55}$$

a to následujícím způsobem

$$\tilde{\nu}_e = g(Z)\nu_{ei}.\tag{1.56}$$

1.4.3 Tok energie laserů

Úvod

V rovnici (1.44) respektive (1.45) je třeba blíže určit tok energie laserů. Ten kromě vlastností plasmatu závisí na intenzitě dopadajících laserových svazků a jejich vlnové délce. Zde uvažujeme lasery zaostřené na plochu o obsahu S kolmou na laserový svazek.

Intenzitun-téholaserového svazku zde budeme v závislosti na čase uvažovat následující

$$I^n(t) = C_p^n I_{max}^n \Phi^n(t), \qquad (1.57)$$

 C_p je koeficient, kterým zde zohledňujeme prostorový profil laseru. Například v případě Gaussovského prostorového profilu uvažujeme, že 80% energie celého svazku je obsaženo v ploše S a koeficient C_p^n je tedy 0,8. Dále zde vystupuje maximální intenzita svazku I_{max}^n a na jedničku integrálně normovaný časový profil $\Phi^n(t)$. Konkrétně pak lze intenzitu laseru zadat i pomocí celkové energie svazku E_n . V dříve zmíněné 1D geometrii platí

$$C_p^n E^n = \int_{-\infty}^{\infty} I^n(t) dt S.$$
(1.58)

Odtud lze pak vyvodit vztah mezi E^n
a I_{max}^n . Například pro Gaussovský časový profil o FWHM rovné
 τ platí [19]

$$I_{max} = \frac{2\sqrt{\ln(2)}}{\sqrt{\pi\tau}} \frac{E^n}{S}.$$
(1.59)

Celkový tok energie Lpak rozdělíme na příspěvky od jednotlivých laserových svazků s různými parametry

$$L = \sum_{n=1}^{N} l^n,$$
 (1.60)

kde l_n je tok energie *n*-tého laseru. Ten poté závisí na použitém modelu interakce laseru s plasmatem. Pro ilustraci je zde nejprve uveden model absorpce laserového záření na kritické hustotě. V tomto případě uvažujeme, že se v daný okamžik část energie laseru absorbuje v jednom bodě v plasmatu. Tento bod je pak jednoznačně dán tzv. kritickou hustotou. Uvažujeme tedy, že se laserový svazek šíří plasmatem zprava doleva, aniž by s ním interagoval. V místě, kde je hustota ρ vyšší, než kritická hustota ρ_c se část energie daná absorpčním koeficientem C_a^n svazku pohltí a zbylá energie se odrazí. Koeficient C_a^n je parametr simulace.

K matematickému popisu této situace je třeba zavést vztah intenzity laserového svazku a toku energie. Tok energie *n*-tého neabsorbovaného laserového svazku je ve směru podélném k laserovému svazku dán

$$l^n = SI^n(t), \tag{1.61}$$

kde I(t) je časový profil intenzity *n*-tého svazku. V modelu absorpce laseru na kritické hustotě lze pak tok energie definovat analyticky

$$l^{n}(X) = \begin{cases} C_{a}^{n}SI^{n}(t), & \text{pro } X \text{ vpravo od } X_{c}^{n}(t) \\ 0, & \text{jinak,} \end{cases}$$
(1.62)

 $X_c^n(t)$ je pak souřadnice zprava prvního fluidního elementu, v kterém je v daný okamžik hustota ρ větší než kritická hustota ρ_c^n . Kritická hustota je pak dána vztahem v systému jednotek CGS [19]

$$\rho_c^n = 1,86 \cdot 10^{-3} \frac{A}{Z\lambda^n},\tag{1.63}$$

kdeA je nukleonové číslo daného prvku, Z je absolutní ionizace a λ^n je vlnová délka n-tého dopadajícího svazku.

Dále zde vystupuje koeficient C_a^n , který určuje jak velká část energie svazku se pohltí. Tok energie svazku je tedy snížen faktorem $1 - C_a^n$ a to právě kvůli toku energie odraženého svazku.

Kromě jednoduchého modelu absorpce na kritice používáme model absorpce laseru, který vychází z řešení stacionárních Maxwellových rovnic. Ten je teoreticky popsán v [1]. Tento model již nemá analytický tvar a je použit ve formě numerické aproximace. Realističtěji však modeluje absorpci, ke které již nedochází v jednom místě, ale naopak na okolí kritické hustoty. Vede tak na hladší profil toku energie l^n a lépe odpovídá fyzikální realitě. Implementace konkrétního schématu je popsána zde [29]. V této numerické aproximaci je použita Eidmannova kolizní frekvence (1.53).

1.5 Shrnutí analytického modelu

Celkem jsem tedy odvodili systém rovnic, který popisuje interakci laserů s pevným terčem. Tento systém je rozšířený o doplňující předpoklady, které obecně nemají analytickou podobu.

Navíc zde využijeme metody rozdělení diferenciálních operátorů (operator splitting) a rovnici energie rozdělíme na tři rovnice, které odpovídají jednotlivým popisovaným jevům. Rovnice pro jednoteplotní případ (1.18), (1.21), (1.30), (1.31), (1.44) tak napíšeme ve tvaru

7

$$\rho \frac{du}{dt} = -\frac{dp}{dX}, \quad (1.64) \quad T = T(\varepsilon), \quad (1.68) \\
\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = -p \frac{du}{dX}, \quad (1.65) \quad p = p(\varepsilon, \rho), \quad (1.69) \\
\frac{1}{dV} \frac{dV}{du} \quad (1.70)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = -\frac{dW}{dX}, \qquad (1.66) \qquad \overline{V} \frac{dt}{dt} = \frac{dX}{dX}, \qquad (1.70)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = -\frac{dL}{dX}, \qquad (1.67) \qquad \rho = \frac{m_0}{V}, \qquad (1.71)$$

 $m_0 = m_0(X)$ je zde dáno počáteční podmínkou, L a κ bylo diskutováno v sekci 1.4. Celkem tedy máme systém šesti provázaných diferenciálních rovnic pro šest neznámých funkcí ρ , u, p, ε , T, V. S tím, že rovnicemi (1.65), (1.66), (1.67) se myslí postupná aplikace diferenciálních operátorů na vnitřní energii ε podle metody rozdělení diferenciálních operátorů.

Obdobnou úpravu provedeme i v rovnicích uvažujících rozdílnou teplotu elektronů a iontů (1.21), (1.22), (1.24), (1.33), (1.34), (1.35), (1.37), (1.45) a převedeme je tedy do tvaru

$$\rho \frac{du}{dt} = -\frac{dp_i}{dX} - \frac{dp_e}{dX}, \quad (1.72)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon_i}{dt} = -p_i \frac{du}{dX}, \quad (1.73) \quad \frac{d\varepsilon_i}{dt} = \frac{d\varepsilon_i}{dt} + \frac{d\varepsilon_i}{dt}, \quad (1.79)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = G_{ie}(T_e - T_i), \quad (1.74) \qquad T_e = T_e(\varepsilon_e), \quad (1.80)$$
$$T_i = T_i(\varepsilon_i), \quad (1.81)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon_e}{dt} = -p_e \frac{du}{dX}, \qquad (1.75) \qquad p_e = p_e(\varepsilon_e, \rho), \qquad (1.82)$$

$$p_i = p_i(\varepsilon_i, \rho), \qquad (1.83)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon_e}{dt} = -\frac{dW}{dX}, \qquad (1.76) \qquad \qquad \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = \frac{du}{dX}, \qquad (1.84)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon_e}{dt} = -\frac{dL}{dX}, \qquad (1.77) \qquad \qquad \rho = \frac{m_0}{V}. \qquad (1.85)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon_e}{dt} = G_{ei}(T_e - T_i), \qquad (1.78)$$

dtStejně jako v jednoteplotním případě byly členy s κ aLdiskutovány v sekci 1.4. Koeficienty G_{ei} a G_{ie} jsou blíže určeny v sekci 1.3.1. Celkem se tedy jedná o soustavu devíti provázaných diferenciálních rovnic pro devět funkcí $u, p_i, p_e, \varepsilon_i, \varepsilon_e, T_i, T_e, \rho, V$, kde rovnice (1.24), (1.45) byly rozděleny na pět rovnic rozdělením diferenciálního operátoru a znázorňují zde postupnou aplikaci diferenciálních operátorů.

Rozdělení operátorů na jednotlivé příspěvky zde navyšuje řešený počet rovnic v jednoteplotním případě z šesti na devět a ve dvouteplotním případě z devíti na patnáct. Toto zdánlivé zesložitění rovnic se projeví jako užitečné

při diskretizaci rovnic pro numerické řešení. Dovolí nám totiž rozdělit jeden časový krok na několik menších numericky nezávislých kroků, které budou odpovídat řešení jednotlivých rovnic.

Kapitola 2

Určení koeficientu zisku na základě stavových veličin plasmatu

2.1 Koeficient zisku

Uvažujeme tenkou homogenní vrstvu plasmatu o délce l, na kterou dopadá laserový svazek o intenzitě I_0 a frekvenci ν . Naším cílem je určení intenzity svazku po průchodu touto vrstvou $I_1(\nu)$. Lze ukázat [15], že pro $I_1(\nu)$ platí:

$$I_1(\nu) = \frac{j(\nu)}{g(\nu)} \left(e^{g(\nu)l} - 1 \right) + I_0 e^{g(\nu)l}, \qquad (2.1)$$

kde $g(\nu)$ je takzvaný koeficient zisku (gain coefficient) a $j(\nu)$ je koeficient vyzařování (emissivity coefficient).

V této práci se zaměříme na koeficient zisku jako funkci stavových veličin, které dostaneme z modelu popsaného v minulé sekci numerickým výpočtem. Na základě tohoto pak odhadneme koeficient zisku plasmatu vytvořeného pomocí interakce laseru s pevným terčem.

Stavové veličiny použijeme nepřímo k určení populací hladin atomů na různých energetických hladinách. Ty pak již přímo využijeme na odhad koeficientu zisku.

2.2 Veličiny nezbytné pro výpočet koeficientu zisku

Koeficient zisku pro jeden konkrétní přechod mezi dvěma energetickými hladinami daný frekvencí ν lze určit z rovnice [15]:

$$g(\nu) = \frac{h\nu}{c} g_2 B_{2,1} \left(\frac{N_2}{g_2} - \frac{N_1}{g_1}\right) \Phi(\nu), \qquad (2.2)$$

zde h je Planckova konstanta, c rychlost světla, $B_{2,1}$ je Einsteinův koeficient stimulované emise, g_1 degenerace spodní energetické hladiny, g_2 degenerace horní energetické hladiny, N_1 hustota populace spodní hladiny a N_2 hustota populace horní hladiny. Funkce $\Phi(\nu)$ je profil spektrální čáry. Ve shodě s [13], [15] budeme určovat profil spektrální čáry pomocí:

$$\Phi(\nu) = \Phi = \frac{1}{\Delta\nu}.$$
(2.3)

To efektivně odpovídá obdélníkovému profilu o šířce $\Delta \nu$. Zde uvedené rozšíření spektrální čáry $\Delta \nu$ bude blíže popsáno v sekci 2.2.2.

Koeficient $B_{2,1}$ lze vyjádřit pomocí tzv. síly oscilátoru (oscillator strength) $f_{1,2}$ v systému jednotek cgs následujícím způsobem [12]

$$B_{2,1} = \frac{\pi e^2}{m_e h \nu} \frac{g_1}{g_2} f_{1,2}.$$
 (2.4)

Tabelované hodnoty vážené síly oscilátoru (weighted oscillator strength) tj. součinu $g_1 f_{1,2}$ lze nalézt v [8]. Známé konstanty vystupující ve vzorci jsou e náboj elektronu, m_e hmotnost elektronu a h Planckova konstanta.

Po dosazení lze vzorec (2.2) s použitím (2.3) a (2.4) upravit do následujícího tvaru v systému jednotek cgs:

$$g = \frac{\pi e^2}{cm_e} g_1 f_{1,2} \left(\frac{N_2}{g_2} - \frac{N_1}{g_1} \right) \frac{1}{\Delta \nu}$$
(2.5)

Pro určení koeficientu zisku pro danou spektrální čáru je tedy nezbytné určit rozšíření spektrální hladiny $\Delta \nu$, degenerace hladin g_1 , g_2 , hustoty populací hladin N_1 , N_2 a váženou sílu oscilátoru $f_{1,2}$.

2.2.1 Rovnice populace hladin a inverze populace

Centrem zájmu v případě laserového přechodu je nerovnovážný stav populací hladin tak, aby mohla být nastolena inverze. Vzhledem k tomuto faktu nelze pro výpočet populací hladin použít Boltzmannův zákon, který platí v rovnováze. Je tedy třeba řešit míru populace/depopulace v důsledku různých procesů každé hladiny zvlášť. Rovnice vyjadřující tento proces se nazývají rychlostní rovnice (rate equations) [15].

Zde se omezíme na model založený na jednoduchém tří-hladinovém systému [13] popisujícím přechody v neonu podobných iontech. Energetické hladiny v tomto systému budeme označovat indexy 1, 2, 3 v pořadí: základní, spodní a horní. Předpokládáme, že laserující přechod je mezi horní a spodní hladinou.

Mezi horní a základní hladinou je zakázaný radiační přechod. Uvažujeme jediný čerpací (pumping) mechanismus a to monopólovou excitaci ze základní hladiny.

Hladiny jsou propojeny kolizními přechody mezi stavy i, j danými $n_eC_{i,j}$ a radiačními přechody danými $A_{i,j}$. Zde $C_{i,j}$ a $A_{i,j}$ jsou Einsteinovy koeficienty, které jsou blíže určeny v sekci 2.2.3 a n_e je elektronová hustota. S těmito předpoklady a předpokladem kvazi-rovnovážného stavu (quasi steady state) [15] lze dospět k následujícím rychlostním rovnicím popisujícím tří-hladinový systém:

$$C_{1,3}n_e = P_3(A_{3,2} + C_{3,1}n_e + C_{3,2}n_e), (2.6)$$

$$C_{1,2}n_e + P_3(A_{3,2} + C_{3,2}n_e) = P_2A_{2,1}, (2.7)$$

zde P_2 a P_3 jsou relativní populace hladin. Ty splňují následující normalizační podmínku:

$$P_1 + P_2 + P_3 = 1. (2.8)$$

Vyřešením těchto rovnic lze pak určit relativní inverzi populace definovanou následujícím způsobem:

$$\Delta P = \frac{P_3}{g_3} - \frac{P_2}{g_2},\tag{2.9}$$

kde g_3 je degenerace horní hladiny a g_2 je degenerace spodní hladiny.

Pro určení absolutní hustoty populace hladin, respektive absolutní hustoty inverze ΔN je třeba uvážit hustotu neonu podobných iontů v plasmatu. Tu lze určit z hustoty iontů n_i známe-li podíl výskytu (fractional abundance) f_a daných iontů následujícím způsobem:

$$\Delta N = f_a n_i \Delta P. \tag{2.10}$$

Hustotu iontů určíme na základě hmotnostní hustoty plasmatu ρ následovně:

$$n_i = \frac{\rho}{Am_u},\tag{2.11}$$

kde A je počet nukleonů daného prvku
a m_u je atomová hmotnostní konstanta.

2.2.2 Rozšíření spektrálních čar

V rovnici (2.5) vystupuje rozšíření spektrální čáry $\Delta \nu$. Zde budeme zjednodušeně uvažovat, že se jedná o rozšíření v důsledku dvou procesů a to Dopplerovské rozšíření plynoucí z náhodného tepelného pohybu částic a v důsledku vysokých hustot, které vedou k pertrubaci atomových potenciálů a tedy ke koliznímu a Starkovu rozšíření [15].

Dopplerovské rozšíření je charakterizováno profilem, který odpovídá Gaussově křivce. Druhý typ rozšíření je charakterizován Lorenzovou křivkou. Zde zjednodušeně uvažujeme obdélníkový profil, jehož šířku budeme uvažovat

$$\Delta \nu = \Delta \nu_{FWHM}^L + \Delta \nu_{FWHM}^D, \qquad (2.12)$$

kde $\Delta\nu^L_{FWHM}$ je šířka Lorenzovy křivky
a $\Delta\nu^D_{FWHM}$ šířka Gaussovy křivky Dopplerova profilu.

Dále platí [15]

$$\Delta \nu_{FWHM}^D = \frac{1}{2\sqrt{\ln 2}} \nu \sqrt{\frac{2kT_i}{m_u c^2}},\tag{2.13}$$

kde T_i je teplota iontů, k Boltzmannova konstanta,
 ν frekvence přechodu a m_u atomová hmotnostní konstanta. Pr
o $\Delta\nu^L_{FWHM}$ použijeme:

$$\Delta \nu_{FWHM}^L = \alpha n_e^2 T_e^{-1/2}, \qquad (2.14)$$

zde T_e je teplota elektronů a n_e je hustota elektronů. Konstantu úměrnosti α volíme empiricky tak, aby předpověď byla v souladu s [13]. Hustotu elektronů určíme z hustoty iontů následujícím způsobem:

$$n_e = Z n_i, \tag{2.15}$$

kde Z je absolutní střední ionizace.

2.2.3 Einsteinovy koeficienty a atomový kód FAC

Pro výpočet koeficientu zisku jsou nezbytné Einsteinovy koeficienty $A_{i,j}$ a $C_{i,j}$, kde *i* a *j* značí energetické hladiny. Dále je nezbytná konkrétní hodnota $g_1 f_{1,2}$, která supluje roli koeficientu $B_{2,1}$. Tyto jsou určeny s pomocí atomového kódu FAC (Flexible atomic code) [11].

Předpovědi FAC jsou plně relativistické na základě Diracovy rovnice, což umožňuje jeho aplikaci na ionty s vysokým nábojem. Při výpočtu pak FAC bere v potaz radiační přechody, přímou kolizní excitaci a ionizaci, nerezenonanční fotoionizaci a radiační rekombinaci, autoionizaci a dielektrickou rekombinaci.

Konkrétně pomocí FAC určíme přímo koeficient $A_{i,j}$ a hodnotu součinu $g_1 f_{1,2}$. Koeficient kolizní excitace $C_{i,j}$ určíme na základě tzv. síly kolize (collision strength) $\Omega_{i,j}(E)$. Uvažujeme-li Maxwellovské rozdělení rychlostí elektronů, platí pro koeficient $C_{i,j}$ v jednotkách CGS s teplotou v elektron-voltech [8]

$$C_{i,j} = 8,010 \cdot 10^{-8} \frac{1}{g_i \sqrt{T_e}} \int_y^\infty \Omega_{i,j}(E) e^{-u} du, \qquad (2.16)$$

• • • • • • • • • • • • Úvod

kde $u=E/T_e$ a $y=\Delta E_{i,j}/T_e,\,\Delta E_{i,j}$ je energie přechodu a T_e je elektronová teplota.

Koeficient kolizní deexcitace $C_{j,i}$ pak určíme na základě koeficientu kolizní excitace $C_{i,j}$ takto:

$$C_{j,i} = \frac{C_{i,j}}{g_2} e^{\frac{\Delta E_{i,j}}{T_e}}.$$
 (2.17)

2.3 Shrnutí výpočtu koeficientu zisku

Konkrétně pak vypočítáme koeficient zisku v simulovaném plasmatu na základě hodnot z hydrodynamické simulace, tj. elektronové teploty T_e , iontové teploty T_i , absolutní ionizace Z a hustoty ρ . To provedeme pomocí vzorce (2.5). Zde využijme relativní inverzi vypočítanou pomocí (2.6). Dále při výpočtu použijeme koeficienty získané pomocí FAC. Absolutní inverzi určíme s pomocí (2.11) na základě podílu výskytu těchto iontů f_a též z pomocí FAC a hustoty plasmatu ρ , kterou přepočteme na hustotu iontů vzorcem (2.11). Konečně pak ve výpočtu využijeme hodnotu $g_1 f_{1,2}$, též získanou na základě FAC.

Kapitola 3

Diskretizace analytických rovnic pro numerický výpočet

V sekci 1.5 jsou uvedeny analytické systémy pro jednoteplotní a dvouteplotní případ. Při diskretizaci kteréhokoli z nich budeme postupovat obdobným způsobem. Nejprve si na základě metody rozdělení operátorů systém rovnic rozdělíme na dvě části a to na rovnice hyperbolické a parabolické. V jednoteplotním i dvouteplotním případě se vyskytuje pouze jedna parabolická rovnice a to rovnice vedení tepla (1.66), (1.76). Ta má navíc v obou případech stejný matematický tvar. Rovnici vedení tepla tedy budeme diskretizovat zvlášť.

Hyperbolickou část systému pak budeme diskretizovat nahrazením derivací konečnými diferencemi. Postup zde bude uveden pro jednoteplotní případ, který nakonec zobecníme pro případ dvouteplotní. Nejprve provedeme prostorovou diskretizaci v proměnné X a dostaneme tak semi-diskrétní systém rovnic. Pro úplnou diskretizaci pak budeme uvažovat konečné diference i v časové proměnné t.

3.1 Diskretizace hyperbolického systému rovnic

3.1.1 Prostorová diskretizace hyperbolického systému rovnic

Kompatibilní mimetické schéma, podle kterého budeme hyperbolické rovnice prostorově diskretizovat, je převzaté z [3]. Výhoda tohoto schématu je, že z konstrukce zachovává celkovou energii.

Podle tohoto schématu rozdělíme výpočetní oblast takzvaně střídavým (staggered) způsobem. Budeme uvažovat, že výpočetní oblast je rozdělena na N úseků, které budeme nazývat buňky (cells). Rozhraní těchto buněk budeme nazývat uzly (nodes). K celé výpočetní oblasti pak přidáme ještě jednu buňku zprava a jednu buňku zleva. Tyto fiktivní buňky (ghost cells)

budou zprostředkovávat okrajové podmínky na koncích výpočetní oblasti. Se započítáním rozhraní mezi fiktivními buňkami máme tedy N + 1 uzlů.

Nyní diskretizujeme funkce vystupující jako proměnné v systému rovnic následujícím způsobem: rychlost a obecně ve více dimenzích vektorové veličiny budeme definovat pouze v uzlech a budeme je značit pomocí indexu j daného uzlu. To jest například rychlost v j-tém uzlu označíme u_j . Naopak stavové, obecně ve 3D skalární, veličiny budeme definovat pouze v buňkách a budeme je značit poločíselným indexem. Například hustotu v buňce vpravo od j-tého uzlu budeme značit $\rho_{i+1/2}$ a vlevo od *j*-tého uzlu $\rho_{i-1/2}$.

Pro převedení rovnic do diskrétního tvaru je poté zapotřebí definovat pojem rohu buňky (corner). Ten udává spojitost mezi buňkami a uzly. Je definován jako oblast mezi středem buňky a daným uzlem. Tato oblast má nenulový objem a hmotnost. Na základě tohoto pak přiřazujeme buňce hmotnost $M_{i+1/2}$ dvou vnitřních rohů a uzlu duální hmotnost M_i dvou přilehlých rohů. Analogicky pro objem V_i .

Dále je nezbytné si uvědomit, že popisujeme plasma pouze v jedné dimenzi, ve směru souřadné osy x. To znamená, že uvažujeme plasma jako hranol, jehož průřez kolmý na osu x je S a plasma je v rovině průřezu homogenní.

Na základě těchto definic lze integrací (1.64) přes duální objem (tuto oblast značíme Ω_i) a vynásobením plochou S odvodit semi-diskrétní vztah reprezentující zákon zachování hybnosti

$$\rho S \int_{\Omega_j} \frac{du_j}{dt} dX = \rho S D_j \frac{du_j}{dt} = -S \int_{\Omega_j} \frac{dp}{dX} dX, \qquad (3.1)$$

$$M_j \frac{du_j}{dt} = -S(p_{j+1/2} - p_{j-1/2}), \qquad (3.2)$$

 D_i zde značí délku oblasti Ω_j a bylo využito faktu, že $\frac{du_j}{dt}$ je na Ω_j konstantní.

Podobným způsobem, integrací přes $\Omega_{j+1/2}$ částečně diskretizujeme rovnici, která reprezentuje transformaci mechanické práce na vnitřní energii (1.65)

$$\rho S \int_{\Omega_{j+1/2}} \frac{d\varepsilon_{j+1/2}}{dt} dX = -p_{j+1/2} S \int_{\Omega_{j+1/2}} \frac{du}{dX} dX, \qquad (3.3)$$

$$M_{j+1/2}\frac{d\varepsilon_{j+1/2}}{dt} = -p_{j+1/2}S(u_{j+1} - u_j).$$
(3.4)

Zde jsme předpokládali, že $\frac{d\varepsilon_{j+1/2}}{dt}$ je na $\Omega_{j+1/2}$ konstantní. Zcela analogicky pak také částečně diskretizujeme rovnici pro absorpci laserů, zde je již uveden jen výsledek:

$$M_{j+1/2} \frac{d\varepsilon_{j+1/2}}{dt} = -S(L_{j+1} - L_j).$$
(3.5)

Poslední hyperbolická rovnice v jednoteplotním případě, která je třeba prostorově diskretizovat je rovnice (1.70). K tomuto účelu zavedeme novou diskrétní proměnou ξ_j . Ta efektivně odpovídá souřadnici x uzlu j v eulerovských souřadnicích. Dále platí, že $V_{j+1/2} = S(\xi_{j+1} - \xi_j)$ a $(\xi_{j+1} - \xi_j) = D_{j+1/2}$. Integrací rovnice (1.70) pak dostaneme následující vztah

$$\int_{\Omega_{j+1/2}} \frac{1}{V_{j+1/2}} \frac{dV_{j+1/2}}{dt} dX = \int_{\Omega_{j+1/2}} \frac{du}{dX} dX, \qquad (3.6)$$

$$D_{j+1/2} \frac{1}{SD_{j+1/2}} \frac{Sd(\xi_{j+1} - \xi_j)}{dt} = u_{j+1} - u_j,$$
(3.7)

$$\frac{d\xi_{j+1} - d\xi_j}{dt} = u_{j+1} - u_j. \tag{3.8}$$

Separujeme-li výsledek pro jeden uzel, získáváme definici rychlosti v eulerovských souřadnicích:

$$\frac{d\xi_j}{dt} = u_j. \tag{3.9}$$

Prakticky pak numerický výpočet bude probíhat tak, že si budeme uchovávat informaci o poloze jednotlivých uzlů ξ_j a z nich dopočítávat objem $V_{j+1/2} = S(\xi_{j+1} - \xi_j)$. To je užitečné i pro prezentaci výsledků v eulerovských souřadicích a v diskretizaci rovnice vedení tepla.

3.1.2 Časová diskretizace hyperbolické části rovnic

Pro úplnost schématu zbývá tedy zavést časovou diskretizaci do odvozených semi-diskrétních rovnic. Toto provedeme opět analogicky jako [3]. Zvláštní pozornost budeme věnovat časové diskretizaci semi-diskrétního zákona zachování energie (3.4), kde provedeme časové středování rychlostí pro zaručení vyššího řádu metody.

Po nahrazení časové derivace konečnou diferencí má semi-diskrétní zákon zachovaní hybnosti (3.2), následující tvar

$$M_j \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = -S(p_{j+1/2}^n - p_{j-1/2}^n), \qquad (3.10)$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - S(p_{j+1/2}^n - p_{j-1/2}^n) \frac{\Delta t}{M_j}.$$
(3.11)

Zden+1značí proměnné na nové časové hladině
an proměnné na předchozí časové hladině.

Obdobným způsobem budeme diskretizovat i odvozenou rovnici pro polohu uzlu v eulerovských souřadicích (3.9):

$$\xi_j^{n+1} = \xi_j^n + u_j^{n+1/2} \Delta t.$$
(3.12)

Semi-diskrétní rovnici absorpce laseru (3.5) budeme diskretizovat následujícím způsobem:

$$\varepsilon_{j+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{j+1/2}^n - S(L_{j+1}^n - L_j^n) \frac{\Delta t}{M_{j+1/2}},$$
(3.13)

kde tok energie L_j^n dostaneme vyčíslením daného modelu absorpce laseru v j-tém uzlu v čase odpovídajícím n-té časové hladině.

Konečně diskretizaci semi-diskrétního zákona zachování energie (3.4) provedeme následujícím způsobem

$$\varepsilon_{j+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{j+1/2}^n - p_{j+1/2}^n S(u_{j+1}^{n+1/2} - u_j^{n+1/2}) \frac{\Delta t}{M_{j+1/2}}, \qquad (3.14)$$

$$u_j^{n+1/2} = \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2},\tag{3.15}$$

kde je klíčové časové středování rychlosti, které společně s metodou prediktor korektor uvedenou v sekci 3.3 zaručí druhý řád konvergence metody.

3.2 Diskretizace rovnice vedení tepla

V sekci1.3.3jsme odvodili rovnice pro vedení tepla, které budeme diskretizovat v eulerovských souřadnicích

$$a\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial W}{\partial x} \quad a = \rho(x,t)\frac{\partial\varepsilon}{\partial T},\tag{3.16}$$

$$W(x,t) = -\kappa(T)\frac{\partial T}{\partial x}.$$
(3.17)

Pro to převezmeme schéma z [23]. Dále je třeba uvážit konkrétní tvar koeficientu tepelné vodivosti $\kappa(T)$. Ten volíme z rovnice (1.54) se Spitzer-Härmovou aproximací kolizní frekvence (1.46), tedy

$$c = \frac{3}{4} \frac{\kappa_0 k_b^{7/2}}{\sqrt{2\pi m_e} e^4} \frac{0.24(Z+0.24)}{1+0.24Z} \frac{1}{Z \ln(\Lambda)},$$
(3.18)

$$\kappa(T) = cT^{5/2},$$
 (3.19)

kde κ_0 je empirická konstanta volená na 13,6 [20], k_b je Boltzmanova konstanta, m_e je hmotnost elektronu, e je náboj elektronu, Z je absolutní ionizace a $\ln(\Lambda)$ je Coulombův logaritmus.

S takto zvoleným κ je rovnice (3.17) silně nelineární v teplotě. Pro snazší numerické řešení je tak soustava rovnic (3.16), (3.17) transformována substitucí $\Theta = T^{7/2}$. To vede na soustavu rovnic ve tvaru

$$\bar{a}\frac{\partial\Theta}{\partial t} = -\frac{\partial W}{\partial x}, \quad \bar{a} = \frac{2}{7}\frac{\rho\frac{\partial\varepsilon}{\partial T}}{\Theta^{5/7}},$$
(3.20)

$$W = -\bar{\kappa} \frac{\partial \Theta}{\partial x}, \quad \bar{\kappa} = \frac{2}{7}c.$$
 (3.21)

Tuto soustavu řešíme pomocí převzatého schématu vedoucího na tridiagonální soustavu N-1 rovnic [24], pomocí které vyčíslíme toky W_j^n na n+1 časové hladině v bodech ξ_j

$$\beta_1 W_1^{n+1} + \gamma_1 W_2^{n+1} = \Theta_{1/2}^n - \Theta_{3/2}^n + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_1 \bar{a}_{1/2}^n} W_l,$$

$$\alpha_j W_{j-1}^{n+1} + \beta_j W_j^{n+1} + \gamma_j W_{j+1}^{n+1} = \Theta_{j-1/2}^n - \Theta_{j+3/2}^n,$$

$$\alpha_{N-1} W_{N-2}^{n+1} + \beta_{N-1} W_{N-1}^{n+1} = \Theta_{N-3/2}^n - \Theta_{N-1/2}^n + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_{N-1} \bar{a}_{N-3/2}^n} W_p,$$

(3.22)

Body ξ_j efektivně odpovídají polohám uzlů v eulerovských souřadnicích a W_l , W_p jsou tepelné toky na okrajích výpočetní oblasti a $j \in \{2, 3, ..., N-2\}$ a platí

$$\Delta \xi_j = \xi_j - \xi_{j-1},$$

$$\alpha_j = -\frac{\Delta t}{\Delta \xi_j \bar{a}_{j-1/2}^n},$$

$$\beta_j = \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta \xi_{j+1}}{\bar{\kappa}_{j+1/2}} + \frac{\Delta \xi_j}{\bar{\kappa}_{j-1/2}} \right) + \Delta t \left(\frac{1}{\Delta \xi_j \bar{a}_{j-1/2}^n} + \frac{1}{\Delta \xi_{j+1} \bar{a}_{j+1/2}^n} \right),$$

$$\gamma_j = -\frac{\Delta t}{\Delta \xi_{j+1} \bar{a}_{j+1/2}^n},$$
(3.23)

zde $\Delta \xi_i$ je zavedeno pouze pro přehlednost zápisu.

Pomocí schématu vypočtené tepelné toky pak použijeme pro výpočet teplot $T_{j+1/2}$ na n+1 časové hladině a to pomocí diskretizované rovnice (3.16):

$$T_{j+1/2}^{n+1} = T_{j+1/2}^n - \frac{\Delta t}{a_{j+1/2}^n} \frac{W_{j+1}^{n+1} - W_j^{n+1}}{\Delta \xi_{j+1}}.$$
(3.24)

Tímto postupem jsme efektivně diskretizovali rovnici (1.66), protože z teplot na časové hladině n + 1 vypočteme pomocí stavové rovnice specifické energie ε .

Omezení toku tepla

Toky tepla W^* určené pomocí schématu (3.22) mohou být až nereálně velké [19]. Tento nedostatek vyřešíme tak, že vypočteme maximální fyzikálně možné toky W^{max} a na základě těchto upravíme koeficient $\bar{\kappa}$ vystupující ve schématu. Výpočet tepelných toků poté zopakujeme s novými koeficienty. Maximální tepelný tok je dán

$$W_j^{max} = \min(W_{j-1/2}^{max}, W_{j+1/2}^{max}), \qquad (3.25)$$

$$W_{j+1/2}^{max} = f \frac{k_b}{m_u} \sqrt{\frac{k_b}{m_e}} \frac{Z_{j+1/2}}{A} \rho_{j+1/2} T_{j+1/2}^{3/2}, \qquad (3.26)$$

kde k_b je Boltzmanova konstanta, m_e hmotnost elektronu, Z absolutní ionizace, A nukleonové číslo daného prvku, ρ hustota a f je empirický faktor, který by fyzikálně měl být jedna, ale v praxi se používá menší hodnota řádově 0,05 až 0,3 [25].

Nové $\bar{\kappa}^*$ pak vypočteme následujícím způsobem:

$$\bar{\kappa}_{j+1/2}^* = \bar{\kappa}_{j+1/2} \min\left(1,0; \ \frac{W_j^{max}}{W_j^*}; \ \frac{W_{j+1}^{max}}{W_{j+1}^*}\right). \tag{3.27}$$

S tímto $\bar{\kappa}^*$ tedy vypočítáme finální toky a z nich poté teploty a energii.

3.3 Metoda prediktor korektor

Celý časový krok je uzavřen výpočtem nových tlaků v buňkách z energie a hustoty na nové časové hladině pomocí stavové rovnice. Hustota je dána vztahem (1.71) a objem lze vypočítat z poloh uzlů. Metoda prediktor korektor zaručí, že schéma bude kompletně druhého řádu, protože kromě časového středování rychlostí budeme provádět i časové středování tlaků [3].

Pro provedení kroku si nejprve uložíme informaci o stavových veličinách na počátku kroku. Dále provedeme jeden celý časový krok a zaznamenáme si tlaky v buňkách $p_{j+1/2}^*$. Z těch vypočítáme průměrnou časovou hodnotu tlaku použitím uložených hodnot:

$$p_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{p_{j+1/2}^n + p_{j+1/2}^*}{2}$$
(3.28)

Nakonec celý časový krok provedeme znovu s tlaky $p_{j+1/2}^{n+1/2}$. Výsledek tohoto kroku už bereme jako novou časovou hladinu pro další výpočet.

3.4 Určení časového kroku

Zatím jsme nepopsali jak určit časový krok Δt . Ten lze v některých konkrétních případech volit jako konstantní v průběhu simulace. Toto však nezaručuje stabilitu schématu, pokud bychom nevolili časový krok extrémně malý, což by ale naopak vedlo ke zbytečně dlouhému běhu simulace.

Pro zaručení stability schematu musí být splněna tzv. CFL podmínka (Courant-Friedrichs-Lewyho)

$$\Delta t < C_{CFL} \frac{V_{j+1/2}}{v_{s,j+1/2}}, \quad \forall j, \tag{3.29}$$

kde $v_{s,j+1/2}$ je rychlost zvuku v dané buňce a $C_{CFL} \leq \frac{1}{4}$ pro zajištění stability schématu [3]. Tato podmínka omezuje délku časového kroku tak, aby nedocházelo k posunu uzlu z duální buňky v jednom časovém kroku.

Navíc se ukazuje výhodné k rychlosti zvuku v plasmatu, připočíst rychlost uzlů u_j [19]. Na základě tohoto pak tedy určíme časový krok při každé iteraci následujícím způsobem [19]

$$\Delta t = C_{CFL} \min_{\forall j} \left(\frac{V_{j+1/2}}{v_{s,j+1/2} + \max(|u_j|; |u_{j+1}|)} \right).$$
(3.30)

Dále uvažujeme další omezení časového kroku a to:

$$\Delta t^{n+1} < C_k \Delta t^n, \tag{3.31}$$

to zaručí, že časové kroky se nebudou řádově měnit a nebude docházet k nestabilitám vlivem velmi se měnícího časového kroku. Empirický koeficient C_k často volíme roven 1,2.

3.5 Numerická viskozita

Dalším zcela nezbytným prvkem ve schématu je 1D numerická viskozita $q_{j+1/2}$, kterou přičteme k tlakům vystupujícím ve schématu. Je úměrná divergenci rychlosti a působí tedy disipativně v oblastech silné komprese. To má značný pozitivní vliv na stabilitu schématu [4]. Do diskrétní rovnice zákona zachování hybnosti (3.11) ji tedy zaneseme následujícím způsobem

$$u_j^{n+1} = u_j^n - S(p_{j+1/2}^n + q_{j+1/2}^n - p_{j-1/2}^n - q_{j-1/2}^n)\frac{\Delta t}{M_j}$$
(3.32)

a v diskrétní rovnici zákona zachování energie (3.14) se projeví takto

$$\varepsilon_{j+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{j+1/2}^n - S(p_{j+1/2}^n + q_{j+1/2}^n)(u_{j+1}^{n+1/2} - u_j^{n+1/2})\frac{\Delta t}{M_{j+1/2}}.$$
 (3.33)

Konkrétně pak pro $q_{j+1/2}$ použijeme jeden z modelů numerické viskozity a to buď Kurapatěnkovu viskozitu[16]

$$q_{j+1/2}^{n} = \begin{cases} q_{j+1/2}^{Kur}, & \text{pro } \Delta u_{i+1/2} < 0\\ 0 & \text{jinak}, \end{cases}$$
(3.34)

$$\Delta u_{j+1/2} = u_{j+1}^n - u_j^n, \tag{3.35}$$

$$q_{j+1/2}^{Kur} = \rho \left(\eta + \sqrt{\eta^2 + c_1^2 v_s^2} \right) |\Delta u_{i+1/2}|, \qquad (3.36)$$

$$\eta = c_2 \frac{\gamma + 1}{4} |\Delta u_{i+1/2}|, \qquad (3.37)$$

kde ρ je hustota buňky s indexem j+1/2, γ je Posissonova konstanta pro daný plyn, v_s je rychlost zvuku v buňce j+1/2 a c_1 , c_2 jsou konkrétní konstanty pro danou simulaci. Nebo model viskozity lineárně-kvadratický [4]

$$q_{j+1/2}^{n} = \begin{cases} q_{j+1/2}^{lk}, & \text{pro } \Delta u_{i+1/2} < 0\\ 0 & \text{jinak}, \end{cases}$$
(3.38)

$$\Delta u_{j+1/2} = u_{j+1}^n - u_j^n, \tag{3.39}$$

$$q_{j+1/2}^{lk} = c_1 \rho |\Delta u_{j+1/2}| v_s + c_2 \rho \Delta u_{j+1/2}^2, \qquad (3.40)$$

kde veličiny mají stejný význam jako v modelu Kurapatěnkovy viskozity.

3.6 Shrnutí numerického schématu

3.6.1 Numerické schéma pro jednoteplotní případ

Celkem tedy pro jednoteplotní případ dostáváme shrnutím hyperbolických rovnic (3.12), (3.13), (3.32), (3.33)

$$u_j^{n+1} = u_j^n - S(p_{j+1/2}^n + q_{j+1/2}^n - p_{j-1/2}^n - q_{j-1/2}^n) \frac{\Delta t}{M_j},$$
(3.41)

$$\xi_j^{n+1} = \xi_j^n + u_j^n \Delta t \quad V_{j+1/2} = S(\xi_{j+1} - \xi_j), \quad \rho_{j+1/2} = \frac{M_{j+1/2}}{V_{j+1/2}}, \quad (3.42)$$

$$\varepsilon_{j+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{j+1/2}^n - S(L_{j+1}^n - L_j^n) \frac{\Delta t}{M_{j+1/2}},$$
(3.43)

$$\varepsilon_{j+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{j+1/2}^n - S(p_{j+1/2}^n + q_{j+1/2}^n)(u_{j+1}^{n+1/2} - u_j^{n+1/2})\frac{\Delta t}{M_{j+1/2}}, \qquad (3.44)$$

$$u_j^{n+1/2} = \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2}.$$
(3.45)

Vnitřní energie je v jednom kroku počítána metodou rozdělení operátorů. Energie vypočítaná pomocí rovnice (3.43) je zde tedy použitá jako výchozí hodnota v rovnici (3.44).

Jeden časový krok se pak skládá z hyperbolického kroku podle uvedeného schématu a parabolického kroku podle schématu (3.22), (3.24). Při tomto je navíc využit model stavové rovnice diskutovaný v sekci 1.3.2 a doplňující modely uvedené v sekci 1.4.

3.6.2 Numerické schéma pro dvouteplotní případ

Obdobné hyperbolické schéma lze odvodit i pro dvouteplotní případ. Toto je analogické jednoteplotnímu až na rovnici energie, kde je třeba zahrnout výměnu energie mezi elektrony a ionty. Pomocí metody rozdělení operátorů toto vyjádříme přidáním dalších dvou rovnic pro změnu energie elektronů a iontů v jednom časovém kroku. Diskretizaci rovnic (1.74), (1.78) pak provedeme

na základě převzatého schématu [20] následovně

$$\varepsilon_{e,j+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{e,j+1/2}^n - a_{e,i}\delta T_{e,i}\left(1 - \exp\left(-\frac{G_{ei,j+1/2}}{a_{e,i}}\Delta t\right)\right),\tag{3.46}$$

$$\varepsilon_{i,j+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{i,j+1/2}^n + a_{e,i}\delta T_{e,i}\left(1 - \exp\left(-\frac{G_{ei,j+1/2}}{a_{e,i}}\Delta t\right)\right),\tag{3.47}$$

$$\delta Te, i = (T_{e,j+1/2} - T_{i,j+1/2}), \tag{3.48}$$

$$a_{e,i} = \frac{1}{\frac{1}{a_e} + \frac{1}{a_i}} \quad a_e = \left(\frac{\partial \varepsilon_e}{\partial T_e}\right)_{\rho} \quad a_i = \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial T_i}\right)_{\rho}.$$
(3.49)

Zde $G_{ei,j+1/2}$ je koeficient výměny energie blíže diskutovaný v sekci 1.3.1. Celkem má tedy numerické schéma pro dvouteplotní případ následující tvar

$$u_{j}^{n+1} = u_{j}^{n} - S(p_{e,j+1/2}^{n} + p_{i,j+1/2}^{n} + q_{j+1/2}^{n} - p_{e,j-1/2}^{n} - p_{i,j-1/2}^{n} - q_{j-1/2}^{n}) \frac{\Delta t}{M_{j}},$$
(3.50)

$$\xi_j^{n+1} = \xi_j^n + u_j^n \Delta t \quad V_{j+1/2} = S(\xi_{j+1} - \xi_j), \quad \rho_{j+1/2} = \frac{M_{j+1/2}}{V_{j+1/2}}, \tag{3.51}$$

$$\varepsilon_{e,j+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{e,j+1/2}^n - S(L_{j+1}^n - L_j^n) \frac{\Delta t}{M_{j+1/2}},$$
(3.52)

$$\varepsilon_{e,j+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{e,j+1/2}^n - Sp_{e,j+1/2}^n (u_{j+1}^{n+1/2} - u_j^{n+1/2}) \frac{\Delta t}{M_{j+1/2}},$$
(3.53)

$$\varepsilon_{i,j+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{i,j+1/2}^n - S(p_{i,j+1/2}^n + q_{j+1/2}^n)(u_{j+1}^{n+1/2} - u_j^{n+1/2})\frac{\Delta t}{M_{j+1/2}}, \qquad (3.54)$$

$$\varepsilon_{e,j+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{e,j+1/2}^n - a_{e,i}\delta T_{e,i}\left(1 - \exp\left(-\frac{G_{ei,j+1/2}}{a_{e,i}}\Delta t\right)\right),\tag{3.55}$$

$$\varepsilon_{i,j+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{i,j+1/2}^n + a_{e,i}\delta T_{e,i}\left(1 - \exp\left(-\frac{G_{ei,j+1/2}}{a_{e,i}}\Delta t\right)\right),\tag{3.56}$$

$$u_j^{n+1/2} = \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2}.$$
(3.57)

Navazující parabolický krok vedení tepla je pak uvažován jen pro elektrony. Schéma tohoto je stejné jako v jednoteplotním případě, pouze jsou uvažovány teploty a specifické vnitřní energie elektronů. Stavovou rovnici je v tomto případě nutné uvažovat jak pro elektrony tak pro ionty.

Část II

Výsledky simulací

Kapitola 4

Testovací úlohy

Pro ověření správnosti implementace odvozeného numerického schématu do kódu bylo provedeno několik simulací počátečních úloh, jejichž analytické řešení je známo. Tyto úlohy jsou cílené na ověření funkcionality jednotlivých mezikroků pro výpočet celého časového kroku. Omezíme se zde na srovnání výsledků s předchozími pracemi na obdobné téma [19], [25].

Hydrodynamickým krokem označujeme hyperbolickou část odvozeného schématu bez absorpce laseru (3.43). Krokem vedení tepla označujeme řešení parabolické části systému.

4.1 Testování hydrodynamického kroku

Při testování hydrodynamického kroku se omezíme na jednoteplotní případ. Pro dané počáteční a okrajové podmínky známého problému pak necháme simulaci běžet pouze s hydrodynamickým krokem až do určitého časového bodu. Výsledné řešení pak srovnáme s analytickým řešení.

4.1.1 Sodův problém

Sodův problém [26] je klasický Riemannův problém zadaný okrajovou podmínkou na nulovou rychlost. Počáteční podmínka je dána po částech konstantními hodnotami stavových veličin a nulovou rychlostí. Stavové veličiny jsou konstantní ve dvou oblastech, jejichž rozhraní je v bodě x_0 . Konkrétně zde použijeme počáteční velikost oblasti 1 a $x_0 = 0.5$. Toto provádíme obdobně jako v [28], pro referenční srovnání výsledků.

Stavové veličiny jednoznačně zadáme hustotou, tlakem a charakteristikou plynu. Výpočet byl proveden s modelem stavové rovnice ideálního plynu, takže vlastnosti plynu jsou zde jednoznačně reprezentovány Poissonovou konstantou,

Úvod 🔹

zde volenou $\gamma = 1,4$. Počáteční podmínky následovně:

oblast	(0,0;0,5)	(0,5;1,0)
ρ	1	$0,\!125$
p	1	0,100

Navíc jsme v simulaci uvažovali lineárně-kvadratický model viskozity s konstantami $C_1 = 1,0$ a $C_2 = 0,1$. Simulace byla provedena na rovnoměrné sítce o 400 buňkách s počátečním časem t = 0 a koncovým t = 0,2 s. Výsledné hodnoty stavových veličin a rychlosti v koncovém čase jsou uvedeny v grafech na Obr. 4.1.



Obrázek 4.1: Srovnání numerického (plná čára, modrá) a analytického (tečkovaná čára, černá) řešení Sodova problému v čase t = 0,2 s. Absolutní odchylka těchto dvou je zde vyznačena čárkovaně červenou barvou

Numerické řešení je identické s [19] a dobře souhlasí s analytickým řešením. Řešení Sodova problému zde demonstruje schopnost simulovat rázové vlny, které při interakci laseru s pevným terčem vznikají.

4.1.2 Nohův problém

Další úloha, která testuje hydrodynamický krok je Nohův problém. Zde je okrajová podmínka na levém okraji dána nulovou rychlostí. Celá oblast kromě okraje se na počátku pohybuje rychlostí $u_0 = -1$ směrem k levému okraji. To znamená, že pravá okrajová podmínka je dána rychlostí u_0 . Počáteční podmínky volíme v celé oblasti homogenní. Opět pro simulaci využijeme stavovou rovnici ideálního plynu. Konkrétně pak stavové veličiny volíme obdobně jako v [19] následujícím způsobem: $\rho_0 = 1, p = 1 \cdot 10^{-6}, \gamma = \frac{5}{3}$ a jak již bylo zmíněno $u_0 = -1$. Výpočet proběhl na síťce o 100 buňkách s numerickou viskozitou volenou stejně jako v případě Sodova problému. Počáteční čas byl volen t = 0 a koncový t = 0,6 s. Výsledek simulace je uveden v grafech na Obr. 4.2.

Výsledný rozdíl od analytického řešení opět vychází stejně jako v [19]. Chyba u levého okraje výpočetní oblasti je tzv. wall-heating efekt. V případě zde použitého střídavého numerického schématu je to běžný jev.

Tento test demonstruje schopnost postihnout v simulaci konverzi kinetické energie na vnitřní a to i v oblastech silné komprese. Dále je ověřena rychlost šíření vzniklé rázové vlny. Oscilacím v řešení zde zabraňuje numerická viskozita.

4.1.3 Sedova exploze

Sedova exploze je problém, který demonstruje schopnost hydrodynamické části simulace postihnout konverzi vnitřní energie na kinetickou. Konkrétně zde explozi budeme simulovat v souladu s [19] tak, že nastavíme do první buňky výpočetní oblasti velký tlak a naopak v ostatních buňkách tlak velmi malý. To efektivně odpovídá umístění výbušniny do první buňky.

Simulaci provádíme s modelem stavové rovnice ideálního plynu daného $\gamma = \frac{5}{3}$. Počáteční hustotu volíme $\rho_0 = 1$. Rychlost volíme na počátku v celé oblasti nulovou. Okrajové podmínky jsou shodně dány nulovou rychlostí. Výpočetní oblast je na počátku rozdělena na 100 buněk, kde první má šířku 0,2 a zbylé buňky jsou rovnoměrně rozmístěny v oblasti od 0,2 do 12,0. Tlak v první buňce volíme 10^6 a v ostatních 10^{-6} .

S těmito počátečními a okrajovými podmínkami byl simulován vývoj systému odt=0až dot=0,028a to s lineárně kvadratickou numerickou



Obrázek 4.2: Srovnání numerického (plná čára, modrá) a analytického (tečkovaná čára, černá) řešení Nohova problému v čase t = 0.6 s. Absolutní odchylka těchto dvou je zde vyznačena čárkovaně červenou barvou

viskozitou danou konstantami $C_1 = 1,0$ a $C_2 = 1,0$. Numerická viskozita je zde volena silnější než v předchozích testech, aby bylo zabráněno oscilacím na čele vzniklé rázové vlny. Stav simulace srovnaný s analytickým řešením je uveden v grafech na Obr. 4.3.

Chyba simulace je řádově stejná jako v [19]. Velký rozdíl od analytického řešení specifické vnitřní energie ε se nachází v levé části výpočetní oblasti. To je způsobeno malým počtem buněk v důsledku expanze lagrangeovské síťky.



Obrázek 4.3: Srovnání numerického (plná čára, modrá) a analytického (tečkovaná čára, černá) řešení Sedovy exploze v čase t = 0,028 s. Absolutní odchylka těchto dvou je zde vyznačena čárkovaně červenou barvou

4.2 Test vedení tepla

Pro test kroku vedení tepla použijeme analytické řešení systému rovnic (3.16) a (3.17). Volíme řešení v podobě nelineární tepelné vlny stejně jako v [25], abychom tyto následně mohli porovnat:

$$T(x,t) = \begin{cases} \left(\frac{\alpha D}{k}(Dt + s + x - x_m)\right)^{\frac{1}{\alpha}} & \text{pro } x > x_m - Dt - s \\ 0 & \text{jinak,} \end{cases}$$
(4.1)

kde parametry jsou zde volen
y $\alpha=\frac{2}{5},\,D=5,\,s=1,\,k=10^{-3},\,x\in(0,x_m)$ a $x_m=6,2.$ Konečný ča
stje volen0,8s.

Prostorovou derivací (4.1) získáme analytické vyjádření toků W(x,t). Ty použijeme na zadaní okrajové podmínky nezbytné pro řešení kroku vedení tepla ($W(0,t), W(x_m,t)$). Počáteční podmínku dostaneme přímo vyčíslením (4.1) pro t = 0.

Celý test se pak skládá z opakovaného řešení rovnice vedení tepla v každém časovém kroku a to podle schématu (3.22). Celý výpočet probíhá na 100 rovnoměrně rozmístěných buňkách, které jsou v tomto případě nehybné. Časový krok je volen konstantní $\Delta t = 10^{-7}$ s. Výsledek simulace srovnaný s analytickým řešením je v grafu na Obr. 4.4.



Obrázek 4.4: Srovnání numerického $f_n(x)$ a analytického $f_a(x)$ řešení šíření tepelné vlny v čase t = 0.8s. Dále je zde zanesena absolutní odchylka těchto dvou $\Delta f(x)$.

Numericky vypočítaná vlna se šíří v souladu s analytickým řešením. Malá chyba na čele vlny je zde způsobena rozlišením mřížky. Rychlost šíření nelineární vlny tedy odpovídá analytickému řešení.

4.3 Test reálné interakce laseru s terčem

Průběh simulace interakce laseru s pevným terčem srovnáme s předchozími výsledky v [25]. Simulace budeme provádět pro dvouteplotní případ. Jeden časový krok se skládá z výpočtu toku energie laseru pomocí převzatého kódu [29], hydrodynamického kroku, kroku vedení tepla a konečně kroku výměny energie mezi elektrony a ionty podle (3.55), (3.56). V simulaci je použita Eidmannova kolizní frekvence (1.53) v modelu absorpce laseru a modelu výměny energie. Spitzer-Härmova frekvence je použita v modelu vedení tepla (1.46). Zde je použito omezení teplného toku s koeficientem f = 0,1. Dále

je uvažována lineárně kvadratická numerická viskozita (3.38) s koeficienty $C_1 = 1,0$ a $C_2 = 0,1$.

Následně budeme uvažovat laser o vlnové délce 1315 nm přicházející zprava zadaný celkovou energií E = 390 J a poloměrem fokusu $r = 100 \,\mu\text{m}$. Maximum intenzity tohoto laseru je v čase t = 400 ps a pološířka pulzu je též 400 ps. Pevný terč je v tomto případě hliníkový s počáteční hustotou $\rho = 2.7 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ nukleonovým číslem A = 27.

Počáteční podmínka je dána pokojovou teplotou $T_e = T_i = 0.03$ eV. Pravá okrajová podmínka je na tlak vakua $p_r = 1 \cdot 10^{-1}$ Pa. Levá okrajová podmínka je dána nulovou rychlostí.

Simulace budou probíhat na síťce o 400 buňkách, jejíchž velikost D_j geometricky klesá směrem k pravému okraji

$$D_j = q_g \cdot D_{j-1} \tag{4.2}$$

Velikost výpočetní oblasti je 40 µm. Koeficient geometrického poklesu q_g je dán podmínkou na velikost poslední buňky 10^{-6} µm a počtem buněk. Konečný čas simulace volíme t = 600 ps.

4.3.1 Test se stavovou rovnicí ideálního plynu

Parametry simulace se stavovou rovnicí ideálního plynu jsou $\gamma = \frac{5}{3}$ a Z = 13. Výsledný profil teploty a jeho detail je v grafu na Obr. 4.5.



Obrázek 4.5: Profil teploty v čase t = 600 ps v simulaci interakce laseru s pevným terčem při použití stavové rovnice ideálního plynu. Zde T_e je teplota elektronů a T_i teplota iontů

Výsledný profil elektronové teploty T_e velmi dobře odpovídá předchozím výsledkům v [25]. Iontová teplota T_i je v terči lehce odlišná. V této práci je

totiž použit jiný model výměny energie mezi elektrony i
onty. Průběh však shodně odpovídá tomu, že v koroně je nízký ko
eficient výměny tepelné energie G_{ei} vzhledem k nízké hustotě a vysoké teplotě je zd
e nízká srážková frekvence. Naopak v terčíku je tomu naopak. Detail teploty v terčíku je ve velmi dobré shodě se zmiňovanými referenčními výsledky. I
ontová teplota je zde shodná s teplotou elektronovou, právě díky zmiňovanému vysokému ko
eficientu výměny tepelné energie.

4.3.2 Test se stavovou rovnicí QEOS

Dále jsme provedli zcela totožnou simulaci se stavovou rovnicí QEOS, výsledky jsou uvedeny v grafech na Obr. 4.6.



Obrázek 4.6: Profil teploty v čase t = 600 ps v simulaci interakce laseru s pevným terčem při použití QEOS srovnaný s výsledkem pro ideální plyn. Zde T_e je teplota elektronů a T_i teplota iontů.

Jak je patrné z tohoto grafu, kde je také vykreslen i výsledek simulace s ideálním plynem, v koroně volba stavové rovnice nehraje zásadní roli. Největší rozdíl je v detailu terče, kde jsou teploty o něco vyšší při použití QEOS. Stavová rovnice ideálního plynu selhává v oblastech s nízkou teplou, což je v souladu s referenčními výsledky.

Kapitola 5

Simulace laserového plasmatu pro určení koeficientu zisku

5.1 Výpočet koeficientu zisku pro neonu podobné železo

Pro výpočet koeficientu zisku pomocí postupu popsaného v sekci (2.3) je zapotřebí určit konkrétní hodnoty Einsteinových koeficientů pro daný laserující přechod. Zde uvažujeme laserující přechod mezi hladinami neonu podobného železa $2p_{1/2}^5 3s_{1/2}, J = 1 \rightarrow 2p_{1/2}^5 3p_{1/2}, J = 0$. Jeho energie odpovídá vlnové délce 25,5 nm. K určení populací atomů je zde použit jednoduchý tří-hladinový systém 2.6, kde laserový přechod je mezi horní a spodní hladinou. Úplná elektronová konfigurace základní hladiny tohoto systému je $1s^2 2s^2 2p^6, J = 0$. Tyto hladiny značíme v pořadí základní, spodní, horní indexy 1, 2, 3.

Einsteinovy koeficienty spontánní emise $A_{2,1}$, $A_{3,2}$ jsou určeny pomocí kódu FAC přímo. Obdobně je také přímo určena hodnota $g_2 f_{2,3}$. Konkrétní hodnoty pro daný přechod jsou uvedeny v Tab. 5.1. Einsteinovy koeficienty kolizní excitace $C_{1,2}$, $C_{1,3}$ jsou vypočteny z deseti hodnot síly kolize v rozmezí energií od 10 eV do 20000 eV získaných pomocí kódu FAC. Výpočet je proveden podle vzorce (2.16). Deset hodnot síly kolize je zde proloženo kubickým splinem a integrál je následně vyčíslen analyticky z této aproximace. S pomocí koeficientů kolizní excitace jsou vyčísleny i koeficienty kolizní deexcitace $C_{3,1}$, $C_{3,2}$ využitím vzorce (2.17).

Pro referenční srovnání s [13] jsme tento výpočet navíc provedli pro přechod $2p_{1/2}^5 3s_{1/2}, J = 1 \rightarrow 2p_{1/2}^5 3p_{3/2}, J = 2$ v neonu podobném germániu, který odpovídá vlnové délce 23,6 nm. Konkrétní hodnoty koeficientů jsou určeny pro typické teploty 900 eV a shrnuty v Tab. 5.1 včetně referenčních hodnot. Koeficienty si řádově odpovídají. Rozdíly jsou pravděpodobně způsobeny

různou metodou výpočtu koeficientů $C_{i,j}$. Dále se pak liší atomový model, v tomto případě je použito řešení Diracovy rovnice pomocí kódu FAC [11].

Tato práce	Holden et al.
$A_{32} = 1,21 \cdot 10^{10}$	$A_{32} = 1,24 \cdot 10^{10}$
$A_{21} = 1,32 \cdot 10^{12}$	$A_{21} = 2,06 \cdot 10^{12}$
$C_{31} = 1.03 \cdot 10^{-12}$	$C_{31} = 3,24 \cdot 10^{-13}$
$C_{32} = 1,26 \cdot 10^{-9}$	$C_{32} = 3,84 \cdot 10^{-10}$
$C_{13} = 1,18 \cdot 10^{-12}$	$C_{13} = 3,56 \cdot 10^{-13}$
$C_{12} = 8,84 \cdot 10^{-13}$	$C_{12} = 5,96 \cdot 10^{-13}$

Tabulka 5.1: Srovnání Einsteinových koeficientů vypočítaných pomocí FAC [11] s výsledky P. B. Holdena et. al. [13] pro daný přechod o vlnové délce 23,6 nm v neonu podobném germániu při teplotě 900 eV.

Na základě obdobně vypočtených koeficientů a tří-hladinového modelu (2.6) je vypočítán koeficient zisku jako funkce teploty T a hustoty elektronů n_e . Pro tento výpočet je uvažována konstantní celková ionizace 25, která slouží jako parametr pro výpočet podílu výskytu neonu podobných iontů f_a . Volba celkové ionizace plyne z hydrodynamických simulací provedených se stavovou rovnicí QEOS, které jsou popsány v sekci 5.2. Teplotu elektronů a iontů volíme pro určení průběhu koeficientu zisku v závislosti na hustotě a teplotě stejnou. Určený koeficient zisku jako funkce stavových veličin je v grafu na Obr. 5.1.



Obrázek 5.1: Závislost koeficientu zisku na teplotě $T = T_e = T_i$ a hustotě elektronů n_e .

Volba teploty i
ontů T_i je klíčová pro dopplerovské rozšíření spektrální čáry

(2.13). Reálně bývá teplota iontů v koroně i řádově menší než teplota elektronů. Pro odhad koeficientu zisku má vliv na absolutní hodnotu. Nezmění se tím však závislost na hustotě elektronů n_e a teplotě elektronů $T = T_e$. Tento fakt je třeba brát v potaz při interpretaci hodnot uvedených v grafu. Maximálního koeficientu zisku je v popsaném modelu dosaženo pro teplotu T = 521 eV a hustotu elektronů $n_e = 0.36 \cdot 10^{21}$ cm⁻³.

5.2 Simulace se třemi laserovými pulzy

Provedli jsme hydrodynamickou simulaci experimentu popsaného v [21]. Jedná se o interakci pevného železného terče se třemi po sobě přicházejícími pulzy. Všechny tři laserové pulzy jsou zprostředkovány řídícím laserem o vlnové délce 800 nm. U těchto pulzů jsme uvažovali gaussovský časový profil intenzity zadaný časem příchodu τ , délkou pulzu Δ_{FWHM} a maximální intenzitou I. Tyto parametry jsou pro jednotlivé pulzy shrnuty v Tab. 5.2.

První pulz	Druhý pulz	Třetí pulz
$\tau = 1.5 \text{ ns}$	$\tau = 2.0 \text{ ns}$	$\tau = 2,51$ ns
$\Delta_{FWHM} = 1.0 \text{ ns}$	$\Delta_{FWHM} = 0.1 \text{ ns}$	$\Delta_{FWHM} = 0.5 \text{ ps}$
$I = 1,25 \cdot 10^{11} \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$	$I = 1,25 \cdot 10^{12} \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$	$I = 1,16 \cdot 10^{15} \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$

Tabulka 5.2: Parametry laserových pulzů v experimentu E. Olivy et al. [21]. τ je čas maximální intenzity, Δ_{FWHM} je šířka pulzu a I je maximální intenzita.

Počáteční podmínky jsou dány pro železo při pokojové teplotě $T_e = T_i = 0,03$ eV hustotou $\rho = 7,87$ g·cm⁻³. Levá okrajová podmínka je dána nulovou rychlostí. Pravá okrajová podmínka je dána tlakem p = 0,1 Pa, což odpovídá vakuu. Tloušťka terče v simulaci je volena 52 nm, aby v terči na konci simulace zůstalo jen několik málo výpočetních buněk v pevném skupenství. Efektivně se tedy spíše jedná o hloubku, do které se laserové pulzy do terče propálí.

V simulacích je vždy použit model lineárně-kvadratické numerické viskozity (3.38) s konstantami $C_1 = 1$ a $C_2 = 1$. Omezení toku tepla je dáno koeficientem f = 0,1. Ukazuje se, že ionizace Z hraje zásadní roli pro určení podílu výskytu neonu podobných iontů. Nelze tedy použít stavovou rovnici ideálního plynu, kde je tato volena konstantní. Všechny simulace jsou tedy prováděny s QEOS.

5.2.1 Hydrodynamické simulace a stabilita schématu

Simulaci jsme postupně provedli na rovnoměrně rozdělené síťce o 200, 400 a 800 buňkách. Výsledné hodnoty teplot, hustoty elektronů a ionizace jsou pro

různá rozlišení srovnány v grafech na Obr. 5.2.

Úvod

Výsledky na síťkách s různým rozlišením si velice dobře odpovídají. To poukazuje na konvergenci řešení schématu, které je málo závislé na volbě síťky. Nesrovnalost se nachází v teplotě iontů, kde poslední velice intenzivní pulz způsobí zákmit této hodnoty. Ten je způsoben prudkým nárůstem numerické viskozity v dané oblasti. Pravděpodobně se jedná o nefyzikální efekt způsoben diskrétním numerickým výpočtem. Zákmit se nachází mimo oblast s pozitivním koeficientem zisku a není mu tak věnována další pozornost při zpracování výsledků.

Profil hustoty v koroně je obdobný jako v [21]. Vypočítané hodnoty elektronové hustoty v této práci jsou nižší. Při porovnávaní je třeba mít na paměti rozdílnou geometrii. Simulace popsaná E. Olivou et al. uvažuje i prostorový profil plasmatu a zahrnuje tedy jevy, z toho plynoucí. Nesrovnalost se nachází v oblasti terče, kde autoři uvádějí hustotu elektronů v řádu 10^{22} . Tato hodnota však není v souladu s hustotou elektronů železa při pokojové teplotě. V této práci hustota elektronů v oblasti terče odpovídá hustotě elektronů pevné látky.

5.2.2 Výpočet koeficientu zisku z hydrodynamické simulace

Na základě výsledků hydrodynamické simulace na 800 buňkách jsme následně určili v každé buňce koeficient zisku. Toto jsme provedli pro přechod $2p_{1/2}^5 3s_{1/2}, J = 1 \rightarrow 2p_{1/2}^5 3p_{1/2}, J = 0$ v neonu podobném železe. Použili jsme postup popsaný v sekci 5.1. Získaný profil koeficientu zisku je uveden v grafu na Obr. 5.3.

V oblasti terče je odříznuta oblast, kde je koeficient zisku záporný. Zde je příliš velká hustota n_e a příliš nízký podíl výskytu neonu podobných iontů, pro to aby zde mohl být koeficient zisku kladný. Při výpočtu koeficientu zisku zde dochází k numerickým oscilacím.

Maximální hodnota koeficientu zisku je v této simulaci 199 cm⁻¹. Článek [21] se zabývá maximálním koeficientem zisku v závislosti na prostorové depozici laseru s použitím 2D modelu interakce. Jimi uvedený maximální zisk pro plasma širší než 150 µm činí 126 cm⁻¹. Námi získané hodnoty koeficientu zisku jsou tedy vůči těmto nadhodnocené. To může být způsobeno několika faktory. V našem modelu nejsou uvažovány radiační ztráty. Dále zásadní roli hraje právě rozdíl mezi 1D a 2D geometrií simulace [5].

Tvar závislosti koeficientu zisku na vzdálenosti od terče je obdobný jako v [21]. Maximum se nachází přibližně ve vzdálenosti 40 µm od levého okraje pevného terče. To přibližně odpovídá referenčním výsledkům. V našem případě je však závislost na oblasti vlevo od maxima o mnoho pozvolnější. Délka oblasti,




(d) : Teplota iontů T_i

Obrázek 5.2: Výsledné hodnoty stavových veličin v simulaci interakce železného terče s třemi laserovými pulzy na síťkách o 200, 400 a 800 buňkách.

kde se nachází maximum je přibližně 10 µm. Závislost je v tomto intervalu téměř konstantní. Následuje oblast lineárního poklesu o délce asi 50 µm. Toto také přibližně odpovídá výsledkům [21]. Na konci korony pozorujeme drobný nárůst a následný prudký pokles koeficientu zisku. V literatuře [21] toto není patrné. Na pravou část výpočetní oblasti není při simulaci kladen důraz a výpočet zde probíhá jen na několika buňkách, to může byt příčinou této nesrovnalosti.

5.3 Možnosti vylepšení simulace

V této práci je simulace provedena v 1D. V této geometrii nelze pozorovat jevy spojené s řídícím laserem dopadajícím pod určitým úhlem na pevný terč





Obrázek 5.3: Koeficient zisku g v závislosti na poloze x. Simulace se stejnou konfigurací jako popsaná E. Olivou et al. [21]

(grazing incidence), jak je tomu například v experimentu popsaném v [30]. Obecně reálnější výsledky by bylo možné získat rozšířením implementace do 2D/3D.

Dále ve schématu není zahrnut vliv radiačních ztrát. Ten může mít zásadní vliv na výsledný profil koeficientu zisku. Zahrnutím modelu radiačních ztrát bychom mohli dosáhnout reálnějších výsledků.

Prostor pro vylepšení je i v modelu populací hladin pro určení koeficientu zisku. Zde není nutné omezovat se pouze na tři hladiny. Obecně lze řešit soustavu n rychlostních rovnic, kde n odpovídá počtu zahrnutých energetických hladin v atomu jak je tomu například ve složitějším modelu popsaném v [13]. To by vedlo na přesnější určení inverze populace a z toho plynoucího koeficientu zisku.

Perspektivní je použití 2D/3D simulace pro určení koeficientu zisku (v záporném případě nazývaného tzv. koeficient absorpce) a koeficientu vyzařování [15] v celé oblasti plasmatu. To umožní sledovaní průběhu paprsku plasmatem (ray-tracing) a přímé určování zesilování intenzity rentgenového paprsku.

Závěr

Zabývali jsme se hydrodynamickými simulacemi laseru a jejich následným zpracováním pro určení koeficientu zisku v laserem vytvořeném plasmatu. Konkrétně jsme studovali interakci železného terče se třemi laserovými pulzy.

Shrnuli jsme analytické Eulerovy rovnice v lagrangeovských souřadnicích, které popisují hydrodynamiku plasmatu v jedné dimenzi. Systém jsme uzavřeli stavovou rovnicí. Uvedli jsme jak stavovou rovnici ideálního plynu tak realističtější model stavové rovnice QEOS [17]. Uvažovali jsme tzv. dvouteplotní model, který umožňuje do simulace zahrnout rozdílné teploty elektronů a iontů. Dále jsme zobecnili model absorpce laseru, který zahrnuje N obecně různých laserových svazků. Diskutovali jsme další předpoklady pro fyzikální modely, kterými jsou kolizní frekvence, tok energie laserů a koeficient tepelné vodivosti.

Navrhli jsme model pro určení koeficientu zisku na základě stavových veličin plasmatu. Jehož základem je tří-hladinový model excitačních stavů v neonu podobných atomech [13]. Obecně jsme popsali jak určit koeficient zisku pro konkrétní laserující přechod. Při výpočtu jsme se pak zabývali přechodem $2p_{1/2}^5 3s_{1/2}, J = 1 \rightarrow 2p_{1/2}^5 3p_{1/2}, J = 0$ v neonu podobném železe. Nezbytné koeficienty vystupující v modelu jsme určili pomocí atomového kódu FAC [11].

Uvedli jsme postup diskretizace analytických rovnic. Tu jsme v prostoru prováděli na základě mimetického střídavého (staggered) schématu [3]. Při diskretizaci jsme využili metodu rozdělení diferenciálních operátorů (operator splitting). Časové derivace jsme nahradili konečnou diferencí a časový vývoj jsme řešili metodou prediktor korektor. Časový krok jsme určovali adaptivně v průběhu simulace. Pro zajištění stability schématu jsme použili model numerické viskozity.

Celé popsané schéma jsme naimplementovali do nově vyvinutého simulačního kódu. Tímto jsme získali lepší kontrolu nad prováděnými simulacemi.

Závěr

Implementace navíc již od samého počátku probíhala s ohledem na interakci pevného terče s N obecně různými laserovými pulzy. Správnost implementace jsme ověřili na několika úlohách jejichž analytické řešení je známo. Výsledky jsme porovnali s předchozími pracemi [19], [25].

Na základě navrženého modelu jsme určili ko
eficient zisku pro přechod $2p_{1/2}^53s_{1/2}, J=1 \rightarrow 2p_{1/2}^53p_{1/2}, J=0$ v ne
onu podobném železe s vlnovou délkou 25,5 nm jako funkci elektronové hustoty a teploty.

Dále jsme provedli hydrodynamickou simulaci inspirovanou [21]. Na základě které jsme určili průběh koeficientu zisku ve směru osy laseru. Porovnali jsme námi získaný profil s referenčním a diskutovali jsme jejich vzájemné rozdílnosti.

Literatura

- Stefano Atzeni and Jürgen Meyer-ter Vehn. The Physics of Inertial Fusion. Oxford University Press, jun 2004.
- [2] R. E. Burge, C. L. S. Lewis, D. Neely, M. T. Browne, P. Charalambous, G. E. Slark, and P. J. Smith. Suboptical x-ray imaging using the Vulcan x-ray laser. *Optics Letters*, 18(8):661, 1993.
- [3] E.J. Caramana, D.E. Burton, M.J. Shashkov, and P.P. Whalen. The Construction of Compatible Hydrodynamics Algorithms Utilizing Conservation of Total Energy. *Journal of Computational Physics*, 146(1):227– 262, oct 1998.
- [4] E.J. Caramana, M.J. Shashkov, and P.P. Whalen. Formulations of Artificial Viscosity for Multi-dimensional Shock Wave Computations. *Journal of Computational Physics*, 144(1):70–97, jul 1998.
- [5] K. Cassou, Ph Zeitoun, P. Velarde, F. Roy, F. Ogando, M. Fajardo, G. Faivre, and D. Ros. Transverse spatial improvement of a transiently pumped soft-x-ray amplifier. *Physical Review A - Atomic, Molecular,* and Optical Physics, 74(4):3–6, 2006.
- [6] John I. Castor. *Radiation Hydrodynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [7] S. Childress. An introduction to theoretical fluid dynamics. New York University, page 201, 2009.
- [8] M. Cornille, J. Dubau, and S. Jacquemot. Radiative and Collisional Atomic Data for Neon-Like Ions. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 58(1):1–66, sep 1994.

- [9] A Djaoui and S J Rose. Calculation of the time-dependent excitation and ionization in a laser-produced plasma. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 25(11):2745–2762, jun 1992.
- [10] K. Eidmann, J. Meyer-Ter-Vehn, T. Schlegel, and S. Hüller. Hydrodynamic simulation of subpicosecond laser interaction with solid-density matter. *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, 62(1B):1202–1214, 2000.
- [11] M F Gu. The flexible atomic code. Canadian Journal of Physics, 86(5):675–689, 2008.
- [12] Robert C. Hilborn. Einstein coefficients, cross sections, f values, dipole moments, and all that. American Journal of Physics, 50(11):982–986, nov 1982.
- [13] P. B. Holden, S. B. Healy, M. T. Lightbody, G. J. Pert, J. A. Plowes, A. E. Kingston, E. Robertson, C. L. Slewis, and D. Neely. A computational investigation of the neon-like germanium collisionally pumped laser. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 27(2):341–367, 1994.
- [14] J. Itatani, J. Lavesque, D. Zeidler, Hiromichi Niikura, H. Pépin, J. C. Kieffer, P. B. Corkum, and D. M. Villeneuve. Tomographic imaging of molecular orbitals. *Nature*, 432(7019):867–871, 2004.
- [15] Pierre Jaeglé. Coherent Sources of XUV Radiation, volume 106 of Optical Sciences. Springer New York, New York, NY, 2006.
- [16] V.F. Kuropatenko. On a difference method for the calculation of shock waves. USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics, 3(1):268–273, jan 1963.
- [17] R. M. More, K. H. Warren, D. A. Young, and G. B. Zimmerman. A new quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter. *Physics of Fluids*, 31(10):3059–3078, 1988.
- [18] Anne-Sophie Morlens, Julien Gautier, Gilles Rey, Philippe Zeitoun, Sophie Kazamias, Kevin Cassou, Jean-Pascal Caumes, Marylène Kos-Rosset, Hamed Merdji, and Marta Fajardo. Submicrometer digital in-line holographic microscopy at 32nm with high-order harmonics. *Optics Letters*, 31(21):3095–3097, 2006.

Literatura

- [19] Jan Nikl. Hydrodynamické simulace ablace a expanze plazmatu při pulzní laserové depozici. Bakalářská práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, 2015.
- [20] Jan Nikl. Some aspects of numerical methods for laser plasma hydrodynamics. Diplomová práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, 2017.
- [21] E. Oliva, Ph. Zeitoun, S. Sebban, M. Fajardo, P. Velarde, K. Cassou, and D. Ros. Optimization of soft x-ray amplifier by tailoring plasma hydrodynamics. *Optics Letters*, 34(17):2640, sep 2009.
- [22] B. Rus, T. Mocek, A. R. Präg, M. Kozlová, G. Jamelot, A. Carillon, D. Ros, D. Joyeux, and D. Phalippou. Multimillijoule, highly coherent x-ray laser at 21 nm operating in deep saturation through double-pass amplification. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 66(6):12, 2002.
- [23] Mikhail Shashkov and Stanly Steinberg. Solving diffusion equations with rough coefficients in rough grids. *Journal of Computational Physics*, 129(2):383–405, 1996.
- [24] Jan Šilar. Hydrodynamické modelování laserového plazmatu. Bakalářská práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, 2008.
- [25] Jan Šilar. Hydrodynamické modelování laserového plazmatu. Výzkumný úkol, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, 2009.
- [26] Gary A Sod. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 27(1):1–31, apr 1978.
- [27] Lyman Spitzer and Richard Härm. Transport Phenomena in a Completely Ionized Gas. *Physical Review*, 89(5):977–981, mar 1953.
- [28] Eleuterio F. Toro. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. 2009.
- [29] Jan Velechovský. Modelování absorpce laserového záření v plazmatu. Bakalářská práce, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, 2009.
- [30] Y. Wang, E. Granados, F. Pedaci, D. Alessi, B. Luther, M. Berrill, and J. J. Rocca. Phase-coherent, injection-seeded, table-top soft-X-ray lasers at 18.9nm and 13.9nm. *Nature Photonics*, 2(2):94–98, 2008.

Literatura

[31] Ph. Zeitoun, G. Faivre, S. Sebban, T. Mocek, A. Hallou, M. Fajardo, D. Aubert, Ph. Balcou, F. Burgy, D. Douillet, S. Kazamias, G. de Lachèze-Murel, T. Lefrou, S. le Pape, P. Mercère, H. Merdji, A. S. Morlens, J. P. Rousseau, and C. Valentin. A high-intensity highly coherent soft X-ray femtosecond laser seeded by a high harmonic beam. *Nature*, 431(7007):426–429, sep 2004.