ČESKÉ VYSOKÉ TECHNICKÉ UČENÍ V PRAZE

FAKULTA JADERNÁ A FYZIKÁLNĚ INŽENÝRSKÁ KATEDRA FYZIKY



VÝZKUMNÝ ÚKOL

Fluidní modelování interakce laserového záření s porézními materiály

Autor: Vedoucí práce: Praha, 2018 Bc. Lubomír Hudec prof. Ing. Richard Liska, CSc.





Katedra: fyziky

Akademický rok: 2017/2018

VÝZKUMNÝ ÚKOL

| Student: | Bc. Lubomír Hudec | | |
|-------------------|-------------------------------------|--|--|
| Studijní program: | Aplikace přírodních věd | | |
| Obor: | Fyzika a technika termojaderné fúze | | |
| Vedoucí úkolu: | prof. Ing. Richard Liska, CSc. | | |

Název úkolu: Fluidní modelování interakce laserového záření s porézními materiály

Pokyny pro vypracování:

1) Seznámit se s metodami modelování absorpce laseru v terčících [3,4] se zaměřením na metody pro absorpci v pěnách [1,2].

2) Seznámit se s 1D lagrangeovským kódem [5] a 2D ALE kódem PALE, naučit se tyto kódy nejen používat, ale i modifikovat.

3) Zopakovat výpočty s makroskopicky strukturovaným modelem [1].

4) Implementovat multiškálový model [2,3] do 1D kódu [5] a navrhnout vhodnou modifikaci náhodného odrazu paprsků zahrnující jejich šíření v příčném směru.

5) Ověřit implementaci multiškálového modelu ve 2D metodě trasování paprsků v kódu PALE a navrhnout vhodnou modifikaci náhodného odrazu paprsků ve 2D zahrnující jejich šíření při náhodném odrazu ve 3D.

Literatura:

 T. Kapin, M. Kuchařík, J. Limpouch, and R. Liska. Hydrodynamic simulations of laser interactions with low-density foams. Czechoslovak Journal of Physics, 56:B493-B499, 2006.
 J. Velechovský, J. Limpouch, R. Liska, and V. Tikhonchuk. Hydrodynamic modeling of laser interaction with micro-structured targets. Plasma Phys. Control. Fusion, 58(9):095004, 2016.

[3] J. Velechovský. High-order numerical methods for laser plasma modeling. PhD thesis, Czech Technical University in Prague, Universite de Bordeaux, 2015.

[4] J. Velechovský. Numerické metody modelování laserového plazmatu. Diplomová práce, ČVUT, FJFI, 2011.

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

Datum zadání: 27.10.2017

.....

Datum odevzdání: 30.06.2018

vedoucí katedry

Poděkování

Chtěl bych tímto poděkovat svému školiteli prof. Ing. Richardovi Liskovi, CSc. za všechen čas, věnovaný při konzultacích, za poskytnuté informace, cenné rady a připomínky, které mi pomohly při vypracování této práce.

Lubomír Hudec

Abstrakt

Fluidní numerické modelování interakce laserového záření s porézní látkou je velmi komplikováno přítomností její vnitřní mikrostruktury, která se vyznačuje velkým kontrastem v hustotě mezi jejími jednotlivými částmi. Modelování pěnového terčíku jako homogenního materiálu, tj. bez započítaní vnitřní pěnové struktury, značně nadhodnotí rychlost jeho propalování při interakci s intenzivním laserovým svazkem. Pro získání správných výsledků je nutné zohlednit vnitřní pěnovou strukturu a do modelu započítat i proces tzv. homogenizace pěny, při kterém jsou póry pěny vyplňovány expandujícím plazmatem a neumožní laserovému svazku po určitou dobu proniknout dále do materiálu. Jednou z metod, pro modelování porézních materiálů je multiškálový model, kde se současně simuluje pěnový terčík na dvou časových a prostorových škálách a který umožňuje modelovat i pěny s reálnou vnitřní strukturou s náhodně orientovanými pevnými pěnovými elementy. Toho je v multiškálovém modelu dosaženo zavedením náhodného odrazu laserového svazku na rozhraní mezi homogenizovanou a nehomogenizovanou, studenou pěnou. Rovnoměrně rozdělený náhodný odraz, jak se ovšem ukázalo, není kompatibilní s 2D cylindricky symetrickým výpočtem hydrodynamiky a způsobuje nefyzikální propalování terčíku v blízkosti jeho osy symetrie, pokud je při výpočtu šíření laserového záření na výpočetní síti použito pouze dvoudimenzionálního popisu, tedy 2D metoda trasování paprsků. Tato práce se zabývá návrhem modifikace tohoto náhodného odrazu, abychom tento zmíněný nedostatek odstranili. Rovněž se zabýváme implementací multiškálového modelu do 1D pro možnost srovnání jeho výsledků s makroskopicky strukturovaným modelem.

Obsah

| Ú | Úvod 7 | | | | | | |
|--|-------------------|--|-----------------|--|--|--|--|
| 1 Absorpce laserového záření v plazmatu | | | | | | | |
| | | 1.0.1 Dispersní relace elektromagnetických vln v plazmatu | 9 | | | | |
| | | 1.0.2 Inverzní brzdné záření | 10 | | | | |
| | 1.1 | Metody modelování absorpce laserového záření v 1D | 11 | | | | |
| | | 1.1.1 Absorpce na kritické ploše | 12 | | | | |
| | | 1.1.2 Absorpce inverzním brzdným zářením | 13 | | | | |
| | | 1.1.3 Řešení stacionárních Maxwellových rovnic | 14 | | | | |
| | 1.2 | Metody modelování absorpce laserového záření ve 2D | 16 | | | | |
| | | 1.2.1 Metoda trasování paprsků ve 2D | 17 | | | | |
| | | 1.2.2 Metoda trasování paprsků ve 3D | 18 | | | | |
| າ | Мо | delování absornce laserového záření v norézních materiálech | 20 | | | | |
| 4 | WIO | 203 Mikroskonická struktura porézních materiálů | 20 | | | | |
| | 2.1 | Ionizační vlna v porézním materiálu | 21 | | | | |
| | $\frac{2.1}{2.2}$ | Modely absorpce laserového záření v porézních materiálech | 21 | | | | |
| | 2.2 | 2.2.1 Homogenní model pěny | $\frac{20}{23}$ | | | | |
| | | 2.2.2 Makroskopicky strukturovaný model | $\frac{-5}{23}$ | | | | |
| | | 2.2.3 Metoda zpožděného absorpčního koeficientu | 23 | | | | |
| | | 2.2.4 Multiškálový model | 24 | | | | |
| | 2.3 | Modifikace náhodného odrazu | 27 | | | | |
| | | 2.3.1 Náhodný odraz ve 2D cylindrické symetrii | 27 | | | | |
| | | 2.3.2 Modifikace náhodného odrazu ve 2D | 28 | | | | |
| | | 2.3.3 Modifikace náhodného odrazu v 1D | 32 | | | | |
| 3 | Výs | sledky numerických simulací | 33 | | | | |
| 3.1 Modelování interakce laseru s porézním materiálem v 1D | | | | | | | |
| | | 3.1.1 Makroskopicky strukturovaný model | 34 | | | | |
| | | 3.1.2 Multiškálový model | 36 | | | | |
| | | 3.1.3 Srovnání metod | 37 | | | | |
| | 3.2 | Výsledky z 2D simulací | 39 | | | | |
| | | 3.2.1 Testování modifikace náhodného odrazu | 39 | | | | |
| | | 3.2.2 Modelování 4.5 mg/cm ³ TAC pěny pro různé velikosti pórů \ldots | 42 | | | | |
| | | 3.2.3 Modelování 9.1 mg/cm³ TAC pěny pro různé velikosti pórů \hdots | 44 | | | | |
| Zź | Závěr 47 | | | | | | |
| Po | oužita | á literatura | 49 | | | | |

Úvod

V této práci se budeme zabývat numerickými metodami pro fluidní modelování interakce laserového záření s terčíkem z porézního materiálu. Nízkohustotní pěny mají široké uplatnění ve fyzice laserového plazmatu, díky svým unikátním vlastnostem, mezi které patří hlavně vysoká účinnost absorpce laserového záření a schopnost vyhladit nerovnoměrnosti v ozáření terčíku. Lze je využít, mimo jiné, např. jako aktivní médium pro rentgenový laserový zdroj a nebo materiál pro laserové urychlování nabitých částic. S pěnami se rovněž počítá, jako s materiálem pro vnější obal terčíkové kapsle pro inerciální termojadernou fúzi, jenž má za úkol zvýšit účinnost a symetrii imploze.

Modelování pěnového terčíku jako homogenního materiálu ovšem značně nadhodnotí rychlost šíření ionizační a tepelné vlny v tomto materiálu. Je tedy nutné zohlednit vnitřní mikrostrukturu pěny při modelování její interakce s laserovým svazkem, jelikož právě přítomnost nadkriticky hustých částí pěny svazku nedovolí proniknout dále do materiálu a určuje místo depozice jeho energie. Při interakci pěn s laserem dochází k tzv. homogenizaci pěnové struktury, kdy jsou mezery mezi póry vyplňovány expandujícím plazmatem, dokud se rozdíly v hustotách nevyrovnají a teprve potom vzniká jednotné, homogenní plazma. Vzhledem k tomu, že rozměry těchto mikroskopických pěnových elementů jsou o několik řádů menší než jsou rozměry modelovaného terčíku, je pro modelování absorpce potřeba použít speciální metody, jenž věnují zvláštní pozornost vnitřní struktuře materiálu a její interakci s laserovým zářením.

Mezi takovéto metody patří multiškálový model [19], modelující interakci porézního materiálu na dvou časových a prostorových škálách současně. Na hydrodynamické úrovni je pak pěna modelována jako homogenní materiál, současně je ale započítána také interakce mikroskopické pěnové struktury s dopadajícím laserovým zářením na mikroškálové úrovni, kde je tato interakce modelována jako jednodimenzionální expanze tenké pěnové vrstvy.

Multiškálový model umožňuje efektivně modelovat i pěny s komplikovanou strukturou, ve které jsou pevné elementy orientovány náhodně. Toho je v této metodě reálně docíleno zavedením náhodného odrazu laserového svazku na rozhraní mezi plně homogenizovanou a nehomogenizovanou, studenou pěnou. Původní implementace multiškálového modelu v kódu PALE zahrnovala použití 3D metody trasování paprsků pro výpočet šíření laserového záření přes výpočetní síť. Pro multiškálový model bychom ovšem chtěli v novějším kódu PALE2 využít jednoduší, více osvědčenou 2D verzi této metody trasování paprsků. Náhodný odraz, zavedený multiškálovým modelem, ale při použití pouze dvoudimenzionálního popisu šíření paprsků vede v kombinaci s 2D cylindrickým výpočtem hydrodynamiky na jeho nerovnoměrné rozložení. Daleko větší počet paprsků, než je fyzikálně možné, je náhodně odraženo směrem k ose symetrie a tím je nefyzi-kálně urychleno propalování pěny v této středové oblasti.

Hlavním cílem této práce je tedy návrh modifikace, jenž by tyto vzniklé nedostatky multiškálového modelu a 2D metody trasování paprsků odstranila. Navrhovaná možnost úpravy využívá snížení pravděpodobnosti náhodného odrazu směrem k ose, jenž by mělo snížit i celkový počet paprsků, odražených tímto směrem a tím pádem eliminovat nesymetrické propalování pěnového terčíku. V první kapitole se podíváme na fyzikální popis interakce intenzivního laserového svazku s plazmatem a také na metody modelování absorpce záření, používané v 1D a 2D numerických hydrodynamických kódech.

Následující kapitola bude obsahovat rozšíření těchto metod na modelování absorpce v pěnách, konkrétně se zaměříme na již zmíněný multiškálový model. Dále se v této kapitole budeme věnovat návrhu modifikace multiškálového modelu, která by eliminovala výše uvedené problémy, vznikající při jeho použití s 2D metodou trasování paprsků. Jelikož tento návrh zahrnuje generování náhodného pravděpodobnostního rozdělení, budou krátce zmíněny základní poznatky, nutné pro numerické generování náhodných veličin. Na konci této kapitoly pak bude představen návrh modifikace náhodného odrazu pro použití multiškálového modelu v 1D.

Nakonec budou v poslední kapitole prezentovány výsledky, získané aplikací probíraných metod v 1D a 2D numerických simulacích. Vstupní parametry pro tyto modely byly zvoleny v souladu s experimenty, provedenými na laserovém systému PALS.

Kapitola 1

Absorpce laserového záření v plazmatu

V této kapitole se zaměříme na popis šíření a absorpce záření v plazmatu. Nejprve se seznámíme se základním fyzikálním popisem srážkové absorpce elektromagnetických vln v ideálním plazmatu, poté se podíváme na konkrétní metody absorpce používané v numerických simulačních kódech.

Podíváme se na metody použité v 1D lagrangeovském kódu [1] , mezi ně bude patřit absorpce na kritické ploše, absorpce inverzním brzdným zářením a v poslední řadě pak metoda založená na řešení stacionárních Maxwellových rovnic.

Na konci kapitoly se pak seznámíme s 2D a 3D verzí metody trasování paprsků, použitou ve 2D cylindrickém kódu PALE.

V celé práci budeme pro popis fyzikálních vzorců používat soustavu jednotek cgs, nejčastěji používanou soustavou ve fyzice laserového plazmatu.

Výjimkou bude pouze intenzita laserového záření, kterou budeme vyjadřovat, při prezentaci výsledků v 3. kapitole, v kombinovaných jednotkách W/cm², dále energii laserového impulsu budeme vyjadřovat v joulech ($1 \ J = 10^7 \ erg$) a elektronovou teplotu plazmatu v elektron
voltech ($1 \ eV \approx 11600 \ K$).

1.0.1 Dispersní relace elektromagnetických vln v plazmatu

Plazma bez přítomnosti vnějšího magnetického pole se chová jako dispersní prostředí. Pro rovinnou elektromagnetickou vlnu ve studeném plazmatu platí dispersní relace [2]

$$\omega^2 = \omega_p^2 + k^2 c^2, \tag{1.1}$$

kde ω a \vec{k} jsou úhlová frekvence, resp. vlnový vektor elektromagnetické vlny, ω_p je (elektronová) plazmová frekvence a c je rychlost světla ve vakuu.

Plazmová frekvence udává frekvenci podélných elektrostatických oscilací elektronů vůči kladně nabitému pozadí tvořeném nehybnými ionty a můžeme ji vyjádřit pomocí elektronové hustoty n_e , hmotnosti m_e a náboje e elektronu podle vztahu [2]

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n_e e^2}{m_e}}.$$
(1.2)

Elektromagnetické vlnění se bude plazmatem šířit, bude-li v (1.1) vlnový vektor \vec{k} reálný. To nastane v případě, že úhlová frekvence vlnění je větší než plazmová frekvence daného prostředí, tj. když $\omega > \omega_p$. V opačném případě pro $\omega \leq \omega_p$ nastane exponenciální útlum elektromagnetických vln v plazmatu, popřípadě jejich odraz na rozhraní.

Pro pevně danou frekvenci elektromagnetické vlny ω (resp. pro zadanou vlnovou délku λ) bude existovat hraniční hodnota elektronové hustoty, nazývaná kritická hustota n_e^{crit}

$$n_e^{crit} = \frac{m_e \omega^2}{4\pi e^2} = \frac{\pi m_e c^2}{e^2 \lambda^2},$$
 (1.3)

pro kterou platí $\omega = \omega_p$. Kombinací výše uvedených poznatků tedy zjistíme, že se daná elektromagnetická vlna může v plazmatu šířit jen tehdy, když je elektronová hustota plazmatu nižší než kritická hustota n_e^{crit} , takové plazma pak nazýváme <u>podkritické</u>. V opačném případě, tedy když $n_e > n_e^{crit}$, bude plazma <u>nadkritické</u> a vlna o dané vlnové délce do takového plazmatu nepronikne.

Kritickou hustotu je pro naše účely vhodné vyjádřit v jednotkách materiálové (hmotnostní) hustoty ρ , která je vztahem

$$\varrho = Am_p n_i = Am_p \frac{n_e}{Z}.$$
(1.4)

propojena s elektronovou hustotou n_e a iontovou hustotou n_i (za dodatečného předpokladu kvazineutrality plazmatu $n_e \approx Z n_i$, který ovšem musí být při použití fluidního popisu plazmatu vždy nutně splněn). Ve výše uvedených výrazech A vyjadřuje atomové číslo iontů plazmatu, Z stupeň jejich ionizace a m_p označuje hmotnost protonu. Výsledný výraz pro praktický výpočet kritické hustoty má tvar

$$\varrho_{cr} = Am_p \frac{n_e^{crit}}{Z} = \frac{Am_p m_e \pi c^2}{Ze^2 \lambda^2}.$$
(1.5)

1.0.2 Inverzní brzdné záření

Dominantním mechanismem absorpce laserového záření v plazmatu, vzniklém při interakci nanosekundového laseru s pevným terčíkem, je absorpce inverzním brzdným zářením. Brzdné záření vzniká v důsledku zrychleného pohybu nabitých částic v elektromagnetickém poli kladně nabitého jádra atomu. Inverzní brzdné záření pak označuje proces opačný, tedy srážkovou absorpci elektromagnetických vln v plazmatu. Přesný popis mechanismu absorpce je poněkud složitější, protože se přímo nejedná o srážku dvou částic, o ale zprostředkované působení elektromagnetického pole vlny na volné elektrony, způsobující jejich srážky s jinými částicemi. Elektromagnetické pole laserového záření elektrony táhne s sebou při svém postupu plazmatem a způsobuje při tom jejich rozkmitání v příčném směru. Při tomto procesu však ještě nedochází k výměně energie mezi vlnou a elektrony, ta nastane až při srážce kmitajícího elektronu s jinou nabitou částici. Elektron při srážce předá částici část své energie právě na úkor energie vlny, čímž dojde k jejímu útlumu. Nejčastěji se jedná o elektron-iontovou srážku.

Odvodíme si tedy nyní absorpční koeficient elektromagnetického záření v plazmatu v důsledku srážkové absorpce. Vyjdeme z pohybové rovnice pro elektron v poli elektromagnetické vlny [3]

$$m_e \frac{\mathrm{d}^2 \vec{r}}{\mathrm{d}^2 t} + m_e \nu_{ei} \frac{\mathrm{d} \vec{r}}{\mathrm{d} t} = e \vec{E}_0 e^{-i\omega t},\tag{1.6}$$

kde na pravé straně je elektrická část Lorentzovy síly, prostřednictvím které vlna o intenzitě elektrického pole $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$ působí na volný elektron. Na levé straně je zahrnut člen zodpovědný za tlumení oscilací elektronu vlivem elektron-iontových srážek, které jsou charakterizovány srážkovou frekvencí ν_{ei} . Tato pohybová rovnice má velmi jednoduché řešení

$$\vec{r}(t) = -\frac{e\vec{E}(t)}{\omega m_e(\omega + i\nu_{ei})}.$$
(1.7)

Budeme-li předpokládat, že stejný pohyb budou vykonávat všechny elektrony, nacházející se v plazmatu, pak tento společný pohyb způsobí polarizaci prostředí [3]

$$\vec{P} = n_e e \vec{r}(t) = -\frac{\omega_p^2 \varepsilon_0 \vec{E}(t)}{\omega(\omega + i\nu_{ei})}.$$
(1.8)

Použitím definičního vztahu pro elektrickou indukci $\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon \vec{E}$, následným dosazením a rozkladu výsledku na reálnou a imaginární část dostaneme výraz pro komplexní permitivitu plazmatu [3]

$$\varepsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \nu_{ei}^2} + i \frac{\nu_{ei}}{\omega} \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \nu_{ei}^2}.$$
(1.9)

Znalost permitivity plazmatu už nám konečně umožní určit absorpční koeficient inverzního brzdného záření [4]

$$\kappa_{ib} = \frac{2\omega}{c} \Im(\sqrt{\varepsilon}), \tag{1.10}$$

ale také nám udává index lomu prostředí $n = \Re(\sqrt{\varepsilon})$, důležitou veličinu při určování směru šíření vlny.

Elektron-iontová srážková frekvence

Pro výpočet elektron-iontové srážkové frekvence v ideálním plazmatu použijeme Spitzerovu formuli [5]

$$\nu_{ei} = \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2\pi} Z^2 e^4 n_i \ln \Lambda}{\sqrt{m_e} (k_B T_e + E_F)^{3/2}}$$
(1.11)

platnou pro plazma s tepelnou energií elektronů $k_B T_e$ vyšší než je Fermiho energie $E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_e)^{2/3}$ degenerovaného elektronového plynu. Ve Spitzerově formuli označuje k_B Boltzmannovu konstantu, T_e elektronovou teplotu plazmatu, \hbar je redukovaná Planckova konstanta a ln Λ je Coulombův logaritmus, tj. faktor určující, jak moc v plazmatu převládají opakované srážky s rozptylem do malých úhlů nad srážkami částic, způsobujících rozptyl do velkých úhlů. Můžeme ho přibližně vyjádřit ze vzorce

$$\ln \Lambda = \max \{2, \ln \sqrt{b_{max}^2 / b_{min}^2}\}, \qquad (1.12)$$

při znalosti minimální a maximální hodnoty srážkového parametru b_{min} , resp. b_{max}

$$b_{max} = \frac{(k_B T_e/m_e)^{1/2}}{\max\{\omega_p, \omega\}}, \quad b_{min} = \max\left\{\frac{Ze^2}{k_B T_e}, \frac{\hbar\sqrt{m_e}}{(k_B T_e)^{1/2}}\right\}$$
(1.13)

elektron-iontových srážek v plazmatu.

1.1 Metody modelování absorpce laserového záření v 1D

V této části se zaměříme na metody výpočtu zdrojového členu div \vec{I} v hydrodynamické rovnici zákona zachování energie. Předpokládáme, že známe hodnoty fyzikálních veličin na výpočetní síti získaných z předchozího provedeného časového kroku. Našim cílem bude určit v každém časovém kroku průběh intenzity laserového záření \vec{I} na výpočetní síti ze znalosti parametrů plazmatu, získaných při řešení Eulerových rovnic. Způsob, jakým hledanou intenzitu získáme,

bude záviset na použitém fyzikálním modelu. Intenzitu záření, stejně jako všechny ostatní vektorové veličiny, máme podle vybrané konvence zadánu v uzlech výpočetní sítě, zatímco skalární veličinu div \vec{I} chceme znát pro buňky. K tomuto přechodu můžeme využit matematickou identitu

div
$$\vec{I} = \frac{1}{V} \oint_{\partial V} \vec{I} \cdot \vec{dl},$$
 (1.14)

umožňující vypočítat divergenci funkce, konstantní v jistém objemu V, ze znalosti funkčních hodnot na hranici ∂V .

V jednorozměrném případě je divergence intenzity laseru div $I_{j+1/2}$ v buňce j + 1/2 vyjádřena z hodnot v uzlech I_j a I_{j+1} vztahem

$$\operatorname{div}I_{j+1/2} = \frac{I_{j+1} - I_j}{x_{j+1} - x_j},\tag{1.15}$$

kde x_j označuje polohu j-tého uzlu.

1.1.1 Absorpce na kritické ploše

Nejjednodušší model absorpce využívá k určení intenzity laseru dispersní relaci (1.1). Z předchozí podkapitoly už víme, že elektromagnetické záření se nemůže šířit v oblasti plazmatu, jehož hustota je vyšší, než jistá kritická hodnota (1.5). Proto má smysl předpokládat, že určitá část laserového záření $\alpha \in \langle 0, 1 \rangle$ se pohltí v oblasti, kde hustota nabývá kritické hodnoty, označované jako tzv. **kritická plocha** a zbytek záření je odražen zpět do oblasti s nižší hustotou.

Předpokládejme, že laserový svazek dopadá na výpočetní síť zleva. Intenzita záření I_j v j-tém uzlu je pak v tomto přiblížení vypočítána z hustoty $\rho_{j+1/2}$ v sousední buňce j + 1/2 jako [1]

$$I_{j} = \begin{cases} -\alpha I_{L} & \text{pro podkritické plazma} & \varrho_{j+1/2} < \varrho_{cr} \\ 0 & \text{pro nadkritické plazma} & \varrho_{j+1/2} \ge \varrho_{cr}. \end{cases}$$
(1.16)

Předpokládáme, že I_L je počáteční intenzita laseru, který se šíří výpočetní sítí směrem od vyššího indexu k nižšímu (tímto způsobem je tato metoda absorpce implementována v použitém 1D kódu). Koeficient α udává podíl mezi absorbovanou a odraženou energií laserového svazku a obvykle je pevně zadaný pro daný typ terčíku a parametry laseru (přestože by se správně měl mírně měnit i s hustotou plazmatu). Pro zdrojový člen tedy bude platit

$$\operatorname{div} I_{j+1/2} = \begin{cases} \frac{-\alpha I_L}{x_{j+1} - x_j} & \text{pro} \quad \varrho_{j+1/2} \ge \varrho_{cr} \land \ \varrho_{j+3/2} < \varrho_{cr} \\ 0 & \text{pro zbylé buňky.} \end{cases}$$
(1.17)

Tento model absorpce není ovšem fyzikálně přesný, neboť energie laseru není v plazmatu deponována spojitě, ale veškerá předaná energie laseru se absorbuje hned v první nadkritické buňce, což může být jednak pro některé aplikace nežádoucí (například pro makroskopicky strukturovaný model pěny), ale také může v některých případech ovlivnit přesnost řešení hydrodynamiky a vedení tepla.

Model absorpce na kritické ploše je vlastně jen zjednodušené přiblížení absorpce inverzním brzdným zářením, které si popíšeme v následujícím odstavci. Bude-li se hustota plazmatu blížit ke kritické hustotě dané (1.5), absorpční koeficient (1.10) poroste do nekonečna. Veškerá energie dopadajícího paprsku se tímto mechanismem absorbuje ještě dříve, než paprsek dorazí ke kritické ploše. Tak tomu bude ale ovšem pouze v případě, když nebudeme uvažovat ohyb paprsku při průchodu plazmatem, při kterém může být vychýlen mimo kritickou plochu. Parametr α má tedy i dodatečný význam, udávající jak velký podíl energie záření se skutečně dostane ke kritické ploše.

1.1.2 Absorpce inverzním brzdným zářením

Transport energie laserového záření Q podél paprsku s je v tomto případě určen rovnicí [7]

$$\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}s} = -\kappa_{ib}Q,\tag{1.18}$$

kde κ_{ib} je koeficient absorpce vlivem inverzního brzdného záření

$$\kappa_{ib} = \frac{2\omega}{c} \Im(\sqrt{\varepsilon}). \tag{1.19}$$

Absorbovanou energi
i $\Delta Q_{j+1/2}$ v buňcej+1/2získáme integrací transportní rovnice podél optické dráhy pap
rsku

$$\Delta Q_{j+1/2} = Q(x_{j+1}) - Q(x_j) = Q(x_{j+1}) \exp\left(-\int_{x_j}^{x_{j+1}} \kappa_{ib} \, ds\right) = Q(x_{j+1})e^{-\kappa_{ib}(x_{j+1}-x_j)}.$$
(1.20)

Intenzita laserového záření vlastně reprezentuje výkon vztažený na jednotku plochy, vynásobením předchozí rovnosti velikostí časového kroku Δt a současně jejím vydělením velikostí buňky získáme vztah pro pokles intenzity laseru v důsledku absorpce

$$I_j = I_{j+1} \exp(-\kappa_{ib}(x_{j+1} - x_j)), \qquad (1.21)$$

kde při výpočtu postupujeme opět ve směru šíření laserového svazku, tj. od vyššího indexu k nižšímu.

V 1D multiškálovém modelu pracujeme kromě dopadajícího paprsku také s paprskem, odraženým na rozhraní nehomogenizované pěny. Pokud bychom chtěli zahrnout i absorpci odraženého laseru, budeme počítat zvlášť pokles jeho intenzity I' podle vztahu (1.21), ale v opačném směru. Pak provedeme operaci divergence samostatně pro intenzitu každého z paprsků a jako zdrojový člen bude pak vstupovat do hydrodynamického zákona zachování energie součet těchto dvou hodnot.

1.1.3 Řešení stacionárních Maxwellových rovnic

Tato metoda vychází z analytického řešení Maxwellových rovnic pro elektromagnetickou vlnu interagující s prostředím o známé permitivitě ε . Díky tomu, že se elektrická a magnetická pole vlny mění s periodou $T = \frac{2\pi}{\omega} \ll \Delta t$ mnohem menší než je hydrodynamický časový krok, tedy škála, se kterou se mění parametry plazmatu, jako je hustota a elektronová teplota, můžeme materiálové konstanty ε a μ během řešení považovat za časově nezávislé a Maxwellovy rovnice označujeme jako stacionární:

$$\nabla \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \qquad \vec{D} = \varepsilon \vec{E}$$
$$\nabla \times \vec{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = 0 \qquad \vec{B} = \mu_0 \vec{H}.$$

Budeme-li předpokládat, že laserové záření bude představovat rovinnou vlnu, šířící se, bez újmy na obecnosti, například ve směru osy z, kombinací Faradayova a Ampérova zákona získáme vlnovou rovnici pro jedinou nenulovou složku intenzity elektrického pole $E = E_x$ této vlny

$$\frac{\partial^2 E}{\partial^2 z} = -\omega^2 \varepsilon \mu_0 E. \tag{1.22}$$

Rešení této rovnice je

$$E(z) = E_0 e^{\pm i\omega\sqrt{\mu_0\varepsilon}z},\tag{1.23}$$

jež můžeme interpretovat jako šíření vln ve dvou různých směrech - záporné znaménko by odpovídalo dopadající vlně, kladné znaménko vlně odražené. Obdobně bychom získali stejný výraz i pro intenzitu magnetického pole, která pro náš případ má nenulovou pouze složku $H = H_y$. Označíme-li P intenzitu elektrického pole dopadající vlny a R pole odražené vlny, můžeme pak zavést koeficient odrazu V = R/P.

V každé buňce výpočetní sítě použijeme toto analytické řešení k výpočtu intenzity laserového záření v okolních uzlech. Intenzita záření odpovídá časově vystředované hustotě toku energie $\vec{S} = \frac{c}{4\pi}\vec{E} \times \vec{H}$ pro elektromagnetické pole je někdy označována jako Poyntingův vektor a jeho střední hodnota je dána [3]

$$<\vec{S}>=\frac{c}{4\pi}\Re(\vec{E}\times\vec{H}^{*})=\frac{c}{8\pi}(\vec{E}\times\vec{H}^{*}+\vec{E}^{*}\times\vec{H}).$$
 (1.24)

Dosazením řešení (1.23) můžeme vyjádřit z-ovou složku středovaného Poyntingova vektoru (všechny ostatní složky jsou nulové) pomocí intenzity dopadající vlny a koeficientu odrazu vztahem [8]

$$S_z = |P|^2 \left[\Re(\sqrt{\varepsilon})(|V|^2 - 1) - 2\Im(\sqrt{\varepsilon})\Im(V) \right].$$
(1.25)

Koeficient odrazu V a intenzitu dopadající vlny P vypočítáme ze spojitosti tečných složek E a \vec{H} na rozhraní mezi každou buňkou. Pro každou buňku j + 1/2 budeme mít hned dvě hodnoty koeficientu odrazu a dvě hodnoty intenzity dopadajícího paprsku, každá z nich bude příslušet jednomu z hraničních uzlů této buňky, např. $V_{j+1/2}(z_{j+1})$ bude označovat koeficient pro pravý uzel, $V_{j+1/2}(z_j)$ pro levý. Na rozhraní vypočítáme ze znalosti $V_{j+1/2}(z_j)$ tento koeficient pro sousední buňku, ale odpovídající stejnému uzlu $V_{j-1/2}(z_j)$, v rámci jedné buňky pak využijeme řešení (1.23) a hodnota parametru v protějším uzlu bude exponenciálně snížena v závislosti na velikosti dané buňky $|z_j - z_{j-1}|$ a permitivitě $\sqrt{\varepsilon_{j+1/2}}$.

Algoritmus metody absorpce záření, založené na řešení Maxwellových rovnic, by se zjednodušeně dal popsat těmito kroky [6] :

- 1. Nalezení první buňky s nadkritickou hustotou ve směru šíření laseru a nalezení nejvzdálenějšího uzlu j_{min} do kterého ještě záření pronikne (vlivem jeho exponenciálního útlumu po překročení kritické plochy). Předpokládáme, že záření už dále nepronikne a můžeme tak zvolit $V_{j_{min}-1/2}(z_{j_{min}}) = 0.$
- 2. Postupujeme směrem doprava a pro každou buňku vypočítáme koeficient odrazu ze znalosti hodnoty v předchozí buňce podle podmínky na rozhraní [6]

$$V_{j-1/2}(z_j) = V_{j-1/2}(z_{j-1})e^{-2i\frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_{j-1/2}}(z_j-z_{j-1})}$$
(1.26)

$$V_{j+1/2}(z_j) = \frac{1 - \sqrt{\varepsilon_{12}} + V_{j-1/2}(z_j)(1 + \sqrt{\varepsilon_{12}})}{1 + \sqrt{\varepsilon_{12}} + V_{j-1/2}(z_j)(1 - \sqrt{\varepsilon_{12}})},$$
(1.27)

kde $\varepsilon_{12} = \varepsilon_{j-1/2}/\varepsilon_{j+1/2}.$

- 3. Pro poslední pravý uzel J položíme intenzitu dopadající vlny rovnou vnější intenzitě laseru I_L a nastavíme $|P_{J+1/2}(z_J)|^2 = I_L$. Dále postupujeme opět směrem vlevo a pro každou buňku a uzel nastavíme příslušnou hodnotu $|P_{j+1/2}(z_j)|^2$. Pro $j < j_{min}$ bude pro všechny uzly $|P_{j+1/2}(z_j)|^2 = 0$.
- 4. Z předem napočítaných koeficientů už můžeme konečně určit výsledné intenzity záření $\vec{I} = <\vec{S} >$ ve všech uzlech sítě ze vzorce (1.25) [6]

$$I_{j} = |P_{j-1/2}(z_{j})|^{2} \left[n_{j-1/2}(|V_{j-1/2}(z_{j})|^{2} - 1) - 2\chi_{j-1/2}\Im(V_{j-1/2}(z_{j})) \right], \qquad (1.28)$$

kde jsme označili $n_{j-1/2} = \Re(\sqrt{\varepsilon_{j-1/2}})$ index lomu a $\chi_{j-1/2} = \Im(\sqrt{\varepsilon_{j-1/2}})$ koeficient absorpce v buňce j - 1/2.

V bakalářské práci [6] bylo navrženo vylepšení této metody, používající výpočet průběhu intenzity laserového záření na zjemněné výpočetní síti k dosažení přesnějších výsledků.

1.2 Metody modelování absorpce laserového záření ve 2D

Při přechodu do více dimenzí je navíc potřeba se při popisu interakce elektromagnetického záření s plazmatem zajímat také o směr jeho šíření. Původní dopadající laserový svazek je výhodné si rozdělit na mnoho nezávislých, vzájemně neinteragujících paprsků, jejichž postup přes výpočetní síť pak můžeme popisovat jednotlivě využitím aparátu geometrické optiky. Směr šíření \vec{r} každého paprsku v prostředí o indexu lomu $n = \Re(\sqrt{\varepsilon})$ je v tomto přiblížení dán paprskovou rovnicí [3]

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left(n \frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}s} \right) = \nabla n, \tag{1.29}$$

kde $\frac{d}{ds}$ vyjadřuje derivaci podél trajektorie paprsku. Pro obecný případ prostorové závislosti indexu lomu je k řešení této rovnice potřeba použití numerických metod.

Paprskovou rovnici lze převést na soustavu šesti obyčejných diferenciálních rovnic prvního řádu zavedením směru paprsku \vec{k} [9]

$$\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}s} = \vec{k},\tag{1.30}$$

$$\frac{\mathrm{d}\vec{k}}{\mathrm{d}s} = \vec{k} \times \left(\frac{\nabla n}{n} \times \vec{k}\right). \tag{1.31}$$

Pokud bychom se omezili pouze na 2D případ, tj. šíření jen v rovině xy, soustava (1.31) dostane tvar [10]

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}s} = \sin\theta \tag{1.32}$$

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}s} = \cos\theta \tag{1.33}$$

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}s} = \frac{1}{n} \left(\cos \theta \frac{\partial n}{\partial x} - \sin \frac{\partial n}{\partial y} \right),\tag{1.34}$$

řešením těchto rovnic pak bude směr šíření paprsku v této rovině, daný úhlem θ odklonu od osy y a závislý na lokální hodnotě indexu lomu n(x, y). Výše uvedenou soustavu bychom mohli vyřešit běžnými numerickými metodami pro řešení soustavy obyčejných diferenciálních rovnic a získat tak trajektorii paprsku na výpočetní síti.

Tento přístup se v praxi běžně využívá v jiných hydrodynamických kódech [9], v kódu PALE2 byl ovšem zvolen jiný postup, neboť řešení soustavy pro každý paprsek by bylo, vzhledem k jejich obrovskému počtu, výpočetně náročné a při jistých zjednodušeních lze celý proces přímého řešení paprskové rovnice obejít.

Díky tomu, že máme v každé buňce výpočetní sítě konstantní parametry permitivity ε , resp. indexu lomu n, můžeme vypočítat analytické řešení paprskové rovnice pro každou buňku a poté jednotlivá řešení navázat využitím podmínek na rozhraní. Pro n = konst., $\nabla n = 0$ je řešením paprskové rovnice [10]

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \left(n \frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}s} \right) = 0 \implies n \frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}s} = \vec{c}_1 \tag{1.35}$$

$$\vec{r} = \frac{\vec{c_1}}{n}s + \vec{c_2},$$
 (1.36)

jenž představuje rovnici přímky, kde $\vec{c_1}$ a $\vec{c_2}$ jsou konstantní vektory dány okrajovými podmínkami. V případě, že bychom uvažovali konstantní gradient indexu lomu mezi dotyčnými buňkami, přesným řešením by byla parabola. Dále se ale pro jednoduchost omezíme pouze na případ šíření paprsků po přímkách. Na rozhraní dvou buněk, kde se skokově mění hodnota indexu lomu z n_1 na n_2 , navážeme řešení v jednotlivých buňkách pomocí Snellova zákona lomu

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{\sin(\varphi_2)}{\sin(\varphi_1)},\tag{1.37}$$

kde φ_1 vyjadřuje úhel mezi tečnou k trajektorii paprsku dopadajícího na rozhraní a normálou k tomuto rozhraní a φ_2 je úhel, pod kterým paprsek vstupuje do následující buňky. Normála k rozhraní lomu je určena směrem gradientu elektronové hustoty ∇n_e .

Konečné trajektorie paprsků získáme postupným počítání jejich průsečíků s výpočetní sítí a jejich lomem na každém rozhraní mezi dvěma buňkami o úhel daný lokálními parametry plazmatu. Tomuto přístupu se říká **metoda trasování paprsků**, z anglického *Ray-Tracing*.

1.2.1 Metoda trasování paprsků ve 2D

Ve 2D cylindricky symetrickém kódu PALE2 se pohybujeme na logicky ortogonální čtyřúhelníkové výpočetní síti, jenž je tvořena ni buňkami ve směru radiální osy r a nj buňkami ve směru axiální osy válcové symetrie z. Poloha každé buňky je pak označena dvojicí indexů [i, j], kde $i \in \{1, ..., ni\}$ a $j \in \{1, ..., nj\}$. Ve 2D metodě trasování paprsků nás bude zajímat pouze šíření záření v této rovině. Aby byla zachována válcová symetrie, všechny extenzivní fyzikální veličiny musí být vynásobeny jakobiánem transformace do cylindrických souřadnic $\mathcal{J} = r$.

Předpokládáme, že zdroj laserového záření je umístěn proti směru osy z a že je od terčíku dostatečně vzdálený na to, abychom mohli dopadající paprsky považovat za rovinné. Rozdělení laserového svazku na jednotlivé paprsky probíhá tak, aby na každou radiální výpočetní buňku jich připadlo několik.

Pro každý paprsek budeme sledovat jeho trajektorii na výpočetní síti - budeme hledat jednotlivé průsečíky s hranami buněk, na kterých budeme předpokládat jeho lom. V každé prošlé buňce budou paprsky deponovat část své energie v důsledku jejich absorpce inverzním brzdným zářením. Šíření paprsku výpočetní sítí popisujeme pomocí souřadnic průsečíků s hranami sítě (r_r, z_r) a úhlu α_r mezi směrem paprsku a osou z.

Zdrojový člen div \vec{I} určíme podle (1.14) jako součet přírůstků ΔQ_r absorbované energie paprsků v buňce o objemu V_c za časový krok Δt [10]

div
$$\vec{I} = \frac{1}{V_c} \sum_{r=1}^{N} I_r d_r r_r = \frac{1}{V_c} \sum_{r=1}^{N} \frac{\Delta Q_r}{\Delta t},$$
 (1.38)

kde I_r představuje intenzitu r-tého paprsku o šířce d_r , nacházejícího se na radiální souřadnici r_r .

Na začátku každého nového časového kroku Δt nejprve pro všechny buňky výpočetní sítě napočítáme jejich index lomu $n_{ij} = \Re(\sqrt{\varepsilon_{ij}})$ a absorpční koeficient inverzního brzdného záření $\kappa_{ij}^{ib} = \frac{2\omega}{c} \Im(\sqrt{\varepsilon_{ij}})$, kde ε_{ij} je permitivita plazmatu daná (1.9). Dále pro všechny uzly napočítáme gradient elektronové hustoty $\nabla n_{i,j}^e$.

Následně pro každý paprsek r najdeme jeho průsečík $\vec{p_r}^0 = (r_r, z_r)$ s viditelnou hranou výpočetní sítě. Vzhledem k tomu, že při vzniku plazmové koróny se může výpočetní sítka deformovat, další buňka ve směru šíření laseru už nemusí být následující v logickém smyslu a proto musíme také najít orientaci (pootočení) buňky, abychom mohli správně určit směr šíření. Dále určíme energii $Q_r^0 \approx I_r(\vec{p_r},t)r_r d_r(\vec{p_r})\Delta t$ nesenou paprskem podle jeho počáteční polohy dopadu na terčík. Lom, resp. odraz na hranici plasmatu s vakuem neuvažujeme, abychom zajistili plynulý přenos energie do terčíku. Předpokládáme, že laserový svazek bude zpočátku dopadat kolmo na terčík, tedy $\alpha^0 = 0$. Indexy buňky, ve které se bude paprsek nacházet označíme i^k, j^k . Indexem k postupně

číslujeme každý průchod paprsku rozhraním mezi buňkami. Obdobně označíme i průsečík \vec{p}_r^k paprsku s hranami sítě a směr šíření α_r^k .

Jakmile známe první průsečík paprsku s viditelnou hranicí, můžeme vypočítat jeho postup do dalších výpočetních buněk. První je nutné určit ze znalosti $\vec{p_r}^k$ a α_r^k následující průsečík $\vec{p_r}^{k+1}$ na protější stěně aktuální buňky. Odtud můžeme jednoduše vypočítat optickou dráhu paprsku v této buňce $\Delta l = ||\vec{p_r}^{k+1} - \vec{p_r}^k||$, ze které pak vypočítáme úbytek energie paprsku vlivem absorpce podle vztahu $Q_r^{k+1} = Q_r^k e^{-\kappa \Delta l}$, kde jsme $\kappa = \kappa_{ikjk}^{ib}$ označili koeficient inverzního brzdného záření. Divergence intenzity laserového záření se pak zvýší o tento absorbovaný úbytek energie paprsku [10]

div
$$\vec{I}_{i^k j^k} = \text{div } \vec{I}_{i^k j^k} + \frac{Q_r^k}{V_{i^k j^k} \Delta t} (1 - e^{-\kappa \Delta l}).$$
 (1.39)

Nový směr šíření vypočítáme ze Snellova zákona (1.37) lomu na rozhraní. Normála k rozhraní bude v našem případě dána směrem gradientu elektronové hustoty ∇n_e^{loc} v bodě dopadu paprsku. Tuto hodnotu lokálního gradientu elektronové hustoty v bodě průsečíku $\vec{p_r}^k$ získáme lineární interpolací ze dvou uzlů, jež přísluší dané hraně buňky. Jakmile budeme znát směr normály k ploše, na které nastává lom, můžeme z úhlu dopadu φ_{in} určit úhel odrazu φ_{out} a z toho následně získáme úhel α_r^{k+1} , popisující nový směr paprsku: [10]

$$\alpha_r^{k+1} = \alpha_r^k + \left(\varphi_{in} - \arcsin\left(\frac{n_{in}}{n_{out}}\sin\varphi_{in}\right)\right). \tag{1.40}$$

V případě, že $\frac{n_{in}}{n_{out}}\sin\varphi_{in} \geq 1$ dochází k totálnímu odrazu, případně k přímému průchodu, pokud je původní směr paprsku shodný se směrem gradientu ∇n_e^{loc} . Pokud nastane totální odraz, nový směr šíření bude dán $\alpha_r^{k+1} = \alpha_r^k + \pi + 2\varphi_{in}$. Pro Gaussovský svazek je navíc také potřeba v této fázi výpočtu zahrnout opravný difrakční člen, jehož účelem je zabránění vzniku singularit intenzity laseru.

Výpočet trajektorie paprsku končí, opustí-li výpočetní oblast a nebo pokud se všechna jeho nesená energie absorbuje. Jelikož uvažujeme cylindrickou symetrii, musíme doplnit podmínku pro odraz záření procházející osou z (aby se zamezilo paprsku dostat se na souřadnici r < 0). Konkrétně tedy musíme otočit r-složku příslušného směrového vektoru. Paprsek při průchodu osou z tedy výpočetní síť neopouští, pouze se otočí jeho směr šíření zpět do plazmatu. Celý postup hledání trajektorie opakujeme pro všechny modelované paprsky.

1.2.2 Metoda trasování paprsků ve 3D

V předchozí části jsme si ukázali metodu trasování paprsků, kde je šíření paprsků omezeno v rovině osové symetrie. Nyní si ukážeme postup pro výpočet šíření laserového paprsku ve třech dimenzích, který je současně kompatibilní s cylindricky symetrickým dvoudimenzionálním algoritmem výpočtu hydrodynamiky. Pro použití běžné 3D ray-tracing metody [11] bychom byli nuceni přidat dodatečnou dimenzi výpočetních buněk k získání 3D výpočetní sítě, tj. diskretizovat chybějící azimutální úhel (ve kterém při 2D výpočtu hydrodynamiky předpokládáme osovou symetrii). To lze ovšem obejít při předpokladu jenom jediné buňky pro celý azimutální směr, této buňce pak připadne všechna absorbovaná energie, jenž je následně při výpočetní síť pak představuje polovinu průřezu nově vzniklé 3D sítě. Rozhraní takovýchto buněk má tvar pláště válce (pro počáteční, nezdeformovanou výpočetní síť) nebo části povrchu kužele v obecném případě - celý proces určení lomu na rozhraní bude tedy mnohem komplikovanější a náročnější, než tomu bylo v případě trasování paprsků ve 2D. Abychom mohli určit, které 2D výpočetní buňce nakonec připadne energie absorbovaná podél trajektorie paprsku inverzním brzdným zářením, ale

také k samotnému určení trajektorie paprsku, využijeme stávající $r=\sqrt{x^2+y^2}$ azsouřadnice v rovině výpočetní sítě.

Obdobně jako ve 2D metodě označíme $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ průsečík paprsku a výpočetní sítě. Směr šíření tentokrát nebudeme určovat pomocí úhlů, ale vektoru $\vec{d} = (d_x, d_y, d_z)$. Normála k rovině lomu je dána vektorem $\vec{N} = (N_x, N_y, N_z)$ [7]

$$\vec{N} = \frac{1}{||\vec{N}||} \left((\vec{\nabla}n)_r \frac{p_x}{\sqrt{p_x^2 + p_y^2}}, \ (\vec{\nabla}n)_r \frac{p_y}{\sqrt{p_x^2 + p_y^2}}, \ (\vec{\nabla}n)_r \right), \tag{1.41}$$

kde $||\vec{N}||$ je normalizace vektoru normály
a $\vec{\nabla}n$ je gradient indexu lomu získaný z 2D výpočetní sítě.

Známe-li průsečík paprsku s výpočetní sítí, normálu \vec{N} k rovině lomu v tomto bodě, pak ze směru dopadajícího paprsku \vec{d}_{in} vypočítáme z obecného tvaru Snellova zákona směr \vec{d}_{out} lomeného paprsku [11]

$$\vec{d}_{out} = \frac{n_{in}}{n_{out}} \left[\vec{N} \times (-\vec{N} \times \vec{d}_{in}) \right] - \vec{N} \sqrt{1 - \left(\frac{n_{in}}{n_{out}}\right)^2 (\vec{N} \times \vec{d}_{in}) \cdot (\vec{N} \times \vec{d}_{in})}, \tag{1.42}$$

v tomto vzorci n_{in} a n_{out} značí index lomu buňky, kterou paprsek opouští, resp. do které vstupuje.

Případ, že výraz pod odmocninou ve Snellově zákoně nabývá záporného znaménka, obdobně jako tomu bylo v (1.40) odpovídá totálnímu odrazu na rozhraní, tj. paprsek dostane nový směr $\vec{d}_{out} = 2(-\vec{N} \cdot \vec{d}_{in})\vec{N} + \vec{d}_{in}$.

Následně ještě musíme najít nový průsečík \vec{p}_{out} paprsku s boční stěnou následující toroidální 3D buňky a z něho následně určit optickou dráhu $L = ||\vec{p}_{out} - \vec{p}_{in}||$ paprsku v buňce. Z numerického hlediska představuje určování průsečíku přímky a válcové/kuželové plochy řešení kvadratické algebraické rovnice, jako výsledek potom vezmeme nejmenší nezáporný kořen. Pokud bychom chtěli do algoritmu zakomponovat parabolické šíření paprsku v každé buňce, pro nalezení průsečíku by bylo nutné vyřešit algebraickou rovnici čtvrtého řádu.

Pak už nám nic nebrání ve výpočtu absorbované energie paprsku ΔQ , jestliže byla energie paprsku před vstupem do dané buňky Q, pak při výstupu bude jeho energie snížena o absorbovanou energii

$$\Delta Q = Q(1 - e^{-\kappa_{ib}L}). \tag{1.43}$$

Kapitola 2

Modelování absorpce laserového záření v porézních materiálech

Na začátku této kapitoly se nejdříve podíváme na vnitřní strukturu porézních materiálu a v čem se tyto materiály liší od homogenní pevné látky. Následně si ukážeme základní fyzikální teorii šíření a interakce laserového záření v porézní podkritické pěně a popíšeme si základní metody pro numerické simulace interakce laserového svazku s pěnovým terčíkem. Zbytek kapitoly bude věnován problematice modifikování náhodného odrazu laserového paprsku, jenž nastává při jeho interakci s pěnou. Konkrétně bude představena metoda použitelná pro 1D multiškálový model a následně bude představen návrh modifikace pro eliminaci nežádoucího asymetrického propalování pěnového terčíku, vznikajícího při použití multiškálového modelu v kombinaci s 2D metodou trasování paprsků.

2.0.3 Mikroskopická struktura porézních materiálů

Porézní materiály mohou mít velmi komplikovanou vnitřní mikroskopickou strukturu, jenž je obecně složena z nehomogenních elementů pevné látky o různých tvarech a velikostech, oddělených a vyplněných plynem, případně vakuem. Hustota pevných elementů ρ_s , obsažených v pěně, odpovídá hustotě pevné látky (plastu), přibližně tedy ~ 1 g/cm³. Jejich nejčastější tvar je dán kombinací tenkých membrán, slupek anebo vláken. Tloušťka těchto elementů je v řádu desítek nanometrů, zatímco jejich vzájemná vzdálenost, jenž by v součtu měla zhruba odpovídat celkové velikosti jednoho póru pěny, se pohybuje v jednotkách µm.

Vztah mezi tloušťkou δ_s vrstev z pevného materiálu, oddělujících póry o velikosti δ_0 a průměrnou makroskopickou hustotou porézního materiálu ρ_{av} je definován empiricky jako [12]

$$\delta_s \simeq \delta_0 \left(\frac{\varrho_{av}}{\varrho_s}\right)^{\alpha}.$$
(2.1)

Hodnota parametru α je spojena se složitostí a povahou vnitřní struktury materiálu. Pro $\alpha = 0.5$ jsou póry oddělené uzavřenými, spojitými, dvoudimenzionálními přepážkami - takovéto pěny mají uzavřenou strukturu. Příkladem materiálu s uzavřenou strukturou pórů je např. běžně dostupný polystyren (Obr. 2.3 - (a)). Naopak $\alpha = 1$ odpovídá otevřeným pórům, jejichž hranice jsou tvořeny sítí vláken. Porézní materiály však můžou mít ještě složitější vnitřní strukturu, vzniklou jako kombinace dvou výše uvedených hraničních případů, obecně tedy $\alpha \in \langle 0.5, 1 \rangle$. Na Obr.2.3 - (b) je zobrazena struktura triacetát celulózy, pěny s kombinovanou, otevřenou vnitřní strukturou, pro kterou by odpovídala hodnota parametru $\alpha \simeq 0.8$ [12].



a) polystyren 20 mg/cm 3

b) triacetát celulóza 9.1 mg/cm^3

Obr. 2.3 - Snímky nízkohustotní pěny z řádkovacího elektronového mikroskopu. Převzato z [13], upraveno.

2.1 Ionizační vlna v porézním materiálu

Laserové záření se šíří v neutrálním plynu, resp. v pevném terčíku, zpravidla ve formě ionizační vlny, která odděluje zahřátou oblast ionizovaného plynu od studené, neutrální části. Čelo této vlny se pak pohybuje rychlostí, jenž je dána rovnováhou mezi tokem energie dodávané laserem a energií absorbovanou vzniklým plazmatem v důsledku jeho ohřevu a ionizace.

Šíření ionizační vlny v podkriticky hustém porézním materiálu je oproti případu homogenního materiálu navíc zpomaleno procesem expanze a homogenizace pórů, jenž znemožňuje laserovému paprsku po určitou dobu τ_h proniknout dále do materiálu. Ionizační vlna může postoupit médiem teprve až hustota zpočátku nadkriticky hustého plazmatu klesne pod kritickou mez a umožní laserovému záření proniknout do další vrstvy pórů. Díky tomu, že šíření ionizační a tepelné vlny v porézních pěnách je velmi specifické a odlišné od případu homogenního materiálu, byl proces propalování pěny v práci [14] nazván jako šíření tzv. hydrotermální vlny. Čelo hydrotermální vlny označuje oblast, kde dochází k výměně energie mezi zářením a vzniklým plazmatem. Oblast za prošlou hydrotermální vlnou má pak zhruba konstantní teplotu, protože rychlost elektronové tepelné výměny převládá nad rychlosti, kterou se vlna šíří v porézním materiálu [15].

Nyní se podíváme na fyzikální model [16] popisující interakci záření s porézní pevnou látkou. Budeme uvažovat jednoduchou situaci, kdy laserový svazek o intenzitě I_L dopadá kolmo na rozhraní pěnového terčíku a vakua. Dále budeme předpokládat, že pevné elementy oddělující póry budou mít tvar tenkých přepážek, tedy tzv. uzavřenou strukturu a budou orientované kolmo ke směru šíření laseru. Jejich počáteční tloušťka bude dána vztahem (2.1) pro $\alpha = 0.5$. Materiál tak bude jednotlivými stěnami pórů rozdělen na mnoho samostatných, vakuem oddělených vrstev, ve kterých se bude absorpce laserového záření řídit lokálními parametry vzniklého plazmatu. Při interakci s laserovým zářením se tyto vrstvy budou rovnoměrně zahřívat a volně expandovat do prostoru až do té doby, než jejich původní hustota ρ_s poklesne pod kritickou hodnotu hustoty ρ_{cr} danou (1.4), a umožní tak záření proniknout do další vrstvy.

Délku časového intervalu nutného k homogenizaci jedné pěnové vrstvy označíme τ_h . Homogenizací budeme označovat proces absorpce záření v pevných elementech a jejich následnou expanzi a vyplnění prázdného prostoru v porézním materiálu vzniklým plazmatem. Homogenizace se někdy rozlišuje na dvě fáze - expanze a vyplnění pórů se nazývá rychlou fází homogenizace, interakce takto vzniklého expandujícího plazmatu s okolním, již homogenizovaným plazmatem se pak označuje jako pomalá fáze. Proces homogenizace budeme pro podkriticky husté pěny považovat za ukončený při poklesu hustoty mikrostruktury na kritickou hustotu, v případě nadkritické pěny je pak homogenizace ukončena, pokud se vyrovnají hustotní rozdíly mezi pevnými elementy a okolním plazmatem. Pak můžeme předpokládat, že ionizační vlna postoupí vždy o vzdálenost velikosti jednoho póru δ_0 pokaždé, když se plně homogenizuje předchozí vrstva materiálu. Rychlost propalování pevného materiálu laserem pak bude přibližně dán vztahem [17]

$$v_p \simeq \delta_0 / \tau_h. \tag{2.2}$$

Výše uvedené přiblížení bude platit ovšem pouze v případě, že tloušťka stěny pevného materiálu δ_s bude větší nebo srovnatelná s délkou skinové vzdálenosti l_s exponenciálního průniku laseru do nadkritického prostředí. V opačném případě by docházelo k současnému propalování více vrstev naráz a finální rychlost propalování porézního materiálu by se zvýšila o faktor $k = l_s/\delta_s$. Tato podmínka je splněna pro uvažované pěny s makroskopickou hustotou v řádu $\rho_{av} \sim 10 \text{ mg/cm}^3$. Abychom mohli určit rychlost propalování porézní látky, je potřeba určit homogenizační čas τ_h . Budeme-li považovat expanzi pevného materiálu za jednodimenzionální a kolmo k pevné vrstvě materiálu, hustota vzniklého plazmatu bude s časem t klesat podle vztahu [16]

$$n(t) = \frac{n_s \delta_s}{c_s t},\tag{2.3}$$

kde rychlost expanze je charakterizována i
ontovou zvukovou rychlostí c_s . Homogenizace pevné vrstvy je ukončena (plasma se stává transparentní pro laserové záření), pokud se její i
ontová hustota stane podkritická, tzn. jakmile poklesne z původní hodnoty n_s na $n(\tau_h) = n_{cr}$.

Zvukovou rychlost c_s můžeme určit z energetické bilance plazmatu - absorbovaná energie laseru se mění na energii potřebnou k ionizaci materiálu, jeho ohřevu a na kinetickou energii expandujícího plazmatu. V prvním přiblížení předpokládáme, že energie potřebná na ionizaci je nesrovnatelně menší než energie potřebná k expanzi pěny na podkritickou hustotu. Tím pádem budou při interakci s laserovým zářením atomy terčíku nejprve plně ionizovány na svůj maximální stupeň ionizace Z_{max} a až poté nastane jejich expanze a ohřev. Protože je laserová energie kontinuálně deponovaná v plazmatu, můžeme proces expanze považovat přibližně za izotermický. V tomto případě je pak energie vynaložená na expanzi jednotkového objemu za jednotku času $4\varrho_s c_s^3$.

Srovnáme-li tuto potřebnou energii s energií dodanou laserem $4m_i n(t)c_s^3 \approx I_L$, můžeme v libovolném čase t zvukovou rychlost přibližně vyjádřit jako [16]

$$c_s \simeq \sqrt{\frac{I_L t}{4m_i n_s \delta_s}},\tag{2.4}$$

kde m_i je iontová hmotnost terčíku a n_s je původní hustota pevného elementu pěny, jehož počáteční šířku δ_s známe z (2.1). Kombinací (2.3) a (2.1), a po dosazení zvukové rychlosti, tedy získáme výraz pro výpočet času potřebného k homogenizaci pevného materiálu [16]

$$\tau_h = \delta_s \left(\frac{4m_i Z_{max}^2 n_{cr}}{I_L}\right)^{1/3} \frac{n_s}{n_{cr}} = \delta_0 \left(\frac{4m_i Z_{max}^2}{I_L}\right)^{1/3} \frac{n_{av}^{\alpha} n_s^{1-\alpha}}{n_{cr}^{2/3}}.$$
(2.5)

Rychlost propalování porézního materiálu pak bude dána [17]

$$v_p = \frac{n_{cr}^{2/3} I_L^{1/3}}{(4m_i Z_{max}^2)^{1/3} n_{av}^\alpha n_s^{1-\alpha}}.$$
(2.6)

Elektronová teplota plazmatu těsně po skončení homogenizace může být odhadnuta srovnáním definice $c_s = (Z_{max}T_e/m_i)^{1/2}$ a výrazu (2.4) [16]

$$T_e \approx \left(\frac{I_L}{4n_{cr}}\right)^{2/3} \left(\frac{m_i}{Z_{max}}\right)^{1/3}.$$
(2.7)

Tento odhad je velmi důležitý, protože nám umožní sledovat pozici ionizační a homogenizační oblasti při znalosti časového a prostorového průběhu teploty v plazmatu, získaného např. z experimentu anebo numerických simulací.

2.2 Modely absorpce laserového záření v porézních materiálech

2.2.1 Homogenní model pěny

První možností je modelování porézního materiálu jako homogenního pevného materiálu, tzn. bez započítání vnitřní struktury pěny. Hustota pěnového terčíku je v tomto případě zvolena jako průměrná hodnota mezi hustotou stěn pórů a mezer mezi nimi. Výsledky při použití takovéhoto modelu se ale neshodují s provedenými experimenty, právě z důvodu nezapočítání mikroskopické pěnové struktury a jejího vlivu na absorpci laserového záření.

2.2.2 Makroskopicky strukturovaný model

Nejjednodušší metodou modelování interakce laseru s pěnovým terčíkem je přímé započítání rozdílů v hustotách jednotlivých elementů pěny na hydrodynamické škále [18]. Porézní materiál je pak v tomto případě reprezentován střídající se strukturou tvořenou oblastmi s vysokou hustotou (představující pevné stěny pórů), oddělenými místy s nízkou hustotou. Na každý pór tak připadne několik výpočetních buněk, z nichž určitý počet bude mít hustotu odpovídající pevné látce a zbytek bude mít hustotu velmi nízkou a představovat tak prázdné místo mezi póry. Výpočet provádíme běžnými hydrodynamickými metodami, obvykle na velmi jemné výpočetní síťce, neboť šířka pevných elementů je mnohem menší než jejich vzájemná vzdálenost. Pro 1D simulace je tento postup přímočarý a dává dostatečně přesné výsledky, pro více dimenzí pak ale nastává problém, jaký tvar pevných elementů zvolit a v jakém směru tyto přepážky orientovat aby výsledná struktura nejvíce odpovídala skutečnému pěnovému materiálu.

2.2.3 Metoda zpožděného absorpčního koeficientu

Další z metod modelování absorpce záření v pěnových materiálech je založena na fyzikální teorii [16] uvedené na začátku této kapitoly. Interakce laseru s porézním strukturou může být modelována zavedením časově proměnného absorpčního koeficientu κ_{ef} . Tato modifikace předpokládá, že postup ionizační a tepelné vlny je v pěně omezen procesem její homogenizace a že doba depozice energie laseru v každém póru je oproti případu homogenní pěny uměle prodloužena o čas nutný k jeho vyplnění expandujícím plazmatem. Pěnový terčík je pak možné modelovat jako homogenní materiál o příslušné průměrné hustotě a pouze sledovat a měnit absorpční koeficient ze znalosti lokálních parametrů vzniklého plazmatu ve všech předchozích časových krocích.

Zpozděný absorpční koeficient [19] je definován jako

$$\kappa_c^{ef}(t^n) = \begin{cases} 1/\delta_0 & \text{pro} \quad s_c(t^n) \le \delta_0 \left(\frac{\varrho_{av}}{\varrho_c}\right)^{\alpha} \\ & \\ \kappa_c^{ib} & \text{pro} \quad s_c(t^n) > \delta_0 \left(\frac{\varrho_{av}}{\varrho_c}\right)^{\alpha}, \end{cases}$$
(2.8)

kde s_c označuje efektivní šířku pevné stěny póru v pěně, jejíž časový vývoj odhadneme za předpokladu její rovnoměrné expanze. Tento koeficient nahradí koeficient absorpce inverzního brzdného záření v (1.10) při použití metody trasování paprsků.

V každé buňce c výpočetní sítě se tedy bude nalézat 1D vrstva pevné látky, u níž předpokládáme, že vlivem absorpce laserového záření bude měnit svou tloušťku s_c podle vztahu [19]

$$s_c(t^n) = \delta_s + \sum_{k=1}^n a_c^k \Delta t^k, \qquad (2.9)$$

kde δ_s je počáteční tloušťka pěnového elementu, t^n je aktuální čas výpočtu, Δt^k označuje všechny předešlé časové kroky simulace a a_c^n je zvuková rychlost, vypočtená pro každý časový krok z rozdílu současné elektronové teploty T_c^n a počáteční hodnoty T_c^0 dle výrazu [19]

$$a_c^n = \sqrt{\frac{Z}{Am_p}(T_c^n - T^0)}.$$
 (2.10)

2.2.4 Multiškálový model

Multiškálový model [19] je založen na modelování absorpce laserového záření na dvou časových a prostorových škálách. Pro modelování časového vývoje parametrů plazmatu na makroskopické (hydrodynamické) úrovni používáme běžné lagrangeovské metody, navíc ale také modelujeme na mikroskopické škále interakci laserového záření s vnitřní strukturou pěny. Hlavní výhodou multiškálového modelu je použití standardních hydrodynamických metod bez nutnosti započítání mikrostruktury pěny na hydrodynamické úrovni - na rozdíl od předchozích metod však není multiškálový model omezen pouze na 1D geometrii a dokáže popsat interakci s porézní strukturou mnohem přesněji.

Každá výpočetní buňka na hydrodynamické škále v tomto modelu obsahuje jeden element z porézního materiálu, jehož interakci s dopadajícím laserem budeme numericky modelovat na mikroskopické úrovni jako expanzi jednodimenzionální vrstvy ideálního plynu. Počáteční hustota tohoto elementu bude odpovídat hustotě pevné látky (plastu) obsažené v každé pěnové buňce. Multiškálový model je vlastně rozšíření metody zpozděného absorpčního koeficientu provádíme ale kompletní simulaci mikroskopické struktury namísto pouhého odhadu její šířky v závislosti na parametrech hydrodynamické škály. V následujícím textu budeme všechny veličiny, které se vztahují k mikroškálové úrovni, označovat pro lepší přehlednost vlnovkou, zatímco veličiny na hydrodynamické škále ponecháme bez označení.

Výpočetní oblast na hydrodynamické úrovni tak může být rozdělena na tři oddělené části podle toho, v jakém stavu se nachází pěna na mikroskopické úrovni. První oblast je tvořena studenou, nehomogenizovanou porézní látkou v pevné fázi, do této oblasti ještě nepronikly laserové paprsky a tak zde tedy nedochází k jejich absorpci. Druhou oblastí je pak plně homogenizované plazma, tato část je plně transparentní pro dopadající laserové záření a dochází zde pouze k částečné absorpci vlivem inverzního brzdného záření. Převážná většina energie laseru je ovšem absorbována na rozhraní mezi výše uvedenými oblastmi. Rozhraní je tvořeno pouze jedinou řadou výpočetních buněk a je to také jediná část výpočetní domény, kde je počítáno také s mikroskopickou škálou. Veškerá energie příchozích paprsků je v těchto buňkách pohlcena a společně s elektronovým tepelným tokem vystupují jako parametry ovlivňující rychlost expanze na mikroskopické úrovni. Jakmile tato mikroškálová 1D vrstva naexpanduje tak, že se její hustota sníží pod hodnotu kritické hustoty (tj. dojde k takzvané homogenizaci buňky), stává se příslušná makroskopická buňka rovněž transparentní pro tepelný tok a laserové záření, v této buňce se také úplně přestane mikroskopický model dále počítat a rozhraní mezi nehomogenizovanou a homogenizovanou částí pěny se posune do další buňky ve směru šíření laserových paprsků.

Mikrostruktura pěny je na mikroskopické úrovni modelována pouze jedinou výpočetní buňkou, jenž reprezentuje pevný element pěny o počáteční tloušťce δ_s a hustotě ϱ_s . Celková hmota buňky $\tilde{m}_c = \varrho_s \delta_s$ je rozdělena mezi dva uzly, které se nacházejí na souřadnicích \tilde{x}_c , resp. $-\tilde{x}_c$. Předpokládáme, že expanze buňky bude symetrická, a tak stačí modelovat pohyb pouze jednoho z uzlů. Pro výpočet potřebných fyzikálních veličin používáme tzv. "staggered"diskretizaci, kde skalární veličiny jsou počítány pro buňky a vektorové veličiny jsou zadávány v uzlech.

Vzhledem k tomu, že velikost modelované 1D buňky je mnohem menší, než jsou rozměry 2D buněk na hydrodynamické škále, není možné pro výpočty na mikroskopické škále použít stejnou hodnotu časového kroku Δt^n . Z tohoto důvodu hydrodynamický časový krok rozdělíme na N menších kroků $\Delta \tilde{t}^m$, které již budou splňovat lokální Courant-Friedrichs-Levyho (CFL) podmínku [20] . CFL podmínka je nutná podmínka stability diferenčního schématu a využívá se pro odhad správné velikosti stabilního časového kroku, v našem případě má CFL podmínka tvar

$$\Delta \tilde{t}^m \le \frac{\Delta \tilde{x}_c^m}{\tilde{c}_s^m},\tag{2.11}$$

kde $\Delta \tilde{x}_c^m = 2\tilde{x}_c^m$ je velikost mikroskopické buňky a c_s^m rychlost zvuku. Bude platit, že součet všech mikroskopických časových kroků je roven hodnotě hydrodynamického časového kroku, tj. $\Delta t^n = \sum_{m=1}^N \Delta \tilde{t}^m$.

Rychlost uzlu \tilde{v}_c^{m+1} mikroškálové 1D buňky na m+1 časové hladině vypočteme podle diferenčního schématu [19]

$$\frac{\tilde{v}_{c}^{m+1} - \tilde{v}_{c}^{m}}{\Delta \tilde{t}^{m}} = \frac{\max\{0, \tilde{p}_{c}^{m} - p_{c}^{n}\}}{\tilde{m}_{c}},$$
(2.12)

kde $\tilde{p}_c^m = p(\tilde{\varrho}_c^m, \tilde{\varepsilon}_c^m)$ představuje mikroskopický tlak a p_c^n je vnější, makroskopický tlak příslušné buňky na hydrodynamické škále. Tlak na mikroskopické škále je vypočítán ze stavové rovnice ideálního plynu

$$\tilde{\rho}_c^m = (\gamma - 1)\tilde{\varrho}_c^m \tilde{\varepsilon}_c^m \tag{2.13}$$

ze znalosti specifické vnitřní energie $\tilde{\varepsilon}_c^m$, hustoty $\tilde{\varrho}_c^m = \tilde{m}_c^m / \tilde{x}_c^m$ a Poissonovy konstanty γ . Obdobným způsobem můžeme dále dopočítat polohu uzlu \tilde{x}_c^{m+1} a specifickou vnitřní energii buňky $\tilde{\varepsilon}_c^{m+1}$ [19]

$$\frac{\tilde{x}_{c}^{m+1} - \tilde{x}_{c}^{m}}{\Delta \tilde{t}^{m}} = \frac{1}{2} (\tilde{v}_{c}^{m+1} + \tilde{v}_{c}^{m})$$
(2.14)

$$\frac{\tilde{\varepsilon}_c^{m+1} - \tilde{\varepsilon}_c^m}{\Delta \tilde{t}^m} = -\frac{\tilde{p}_c^m(\tilde{v}_c^{m+1} + \tilde{v}_c^m)}{2m_c} - \frac{\Delta Q_c^n}{2\varrho_c}.$$
(2.15)

V poslední rovnici vystupuje na pravé straně člen $\Delta Q_c^n/2\varrho_c$ odpovídající energii absorbovaného laserového záření v odpovídající buňce c na hydrodynamické škále. Absorpce na hydrodynamické úrovni je počítána opět metodou trasování paprsků.

Elektronový tepelný transport na hydrodynamické škále je rovněž započítán do celkové energetické bilance na mikroskopické škále. Zvýší-li se vnitřní energie buňky na hydrodynamické úrovni vlivem tepelného toku, o stejnou hodnotu se také navýší vnitřní energie buňky na mikroškále. Mikroskopická vnitřní energie je tedy svázána s makroskopickou relací [19]

$$\tilde{\varepsilon}_c^{m*} = \tilde{\varepsilon}_c^m + \max\{0, \varepsilon_c^{n*} - \varepsilon_c^n\},\tag{2.16}$$

zde veličiny označené hvězdičkou vyjadřují hodnoty po provedení kroku vedení tepla.

Z makroskopického hlediska je pěna opět modelována jako homogenní médium o odpovídající střední hustotě. Hydrodynamická škála je ovlivňována mikroskopickou prostřednictvím parametru Ψ_c , jenž představuje stupeň homogenizace pěny v buňce c a může nabývat tří možných hodnot podle velikosti mikroškálové hustoty [19]

$$\Psi_{c} = \begin{cases} 0 & \text{pro elementy pěny v pevném skupenství,} & \tilde{\varrho}_{c}^{m} = \varrho_{s} \\ 1 & \text{pro pěnu ve stavu probíhající homogenizace,} & \varrho_{cr} \leq \tilde{\varrho}_{c}^{m} < \varrho_{s} \\ 2 & \text{pro plně homogenizované plazma,} & \tilde{\varrho}_{c}^{m} \leq \varrho_{cr}. \end{cases}$$
(2.17)

Tento parametr má v podstatě dvě funkce, první z nich je spojena s absorpcí záření a změnou směru šíření paprsků uvnitř plazmatu, druhá funkce pak týká modelování pevné fáze a její fázové přeměny.

Ve všech buňkách, kde je $\Psi_c = 1$ dochází k absorpci příchozích laserových paprsků. V těchto buňkách začne probíhat výpočet expanze na mikroskopické škále, a jakmile $\tilde{\varrho}_c^m$ klesne pod ϱ_{cr} , stav buňky se změní na $\Psi_c = 2$. Jelikož se současně homogenizuje jenom jedna řada buněk a výpočet mikroškály probíhá pouze v malé části makroskopické výpočetní sítě, není celková výpočetní náročnost kódu touto modifikací výrazně ovlivněna.

Vylepšením oproti předchozím metodám je také předpoklad náhodné orientace pevných pěnových elementů a vrstev v materiálu terčíku. Směr šíření laserových paprsků je pak na rozhraní mezi $\Psi_c = 1$ a $\Psi_c = 2$ náhodně změněn, což odpovídá fyzikální představě, že pokud paprsek nedopadá kolmo na expandující pevnou stěnu póru ale pod jistým úhlem, jeho směr šíření je vychýlen gradientem hustoty dříve než paprsek dorazí ke kritické ploše.

Pokud paprsek, náhodně odražený na rozhraní mezi $\Psi_c = 1$ a $\Psi_c = 2$ směřuje do homogenizující se buňky s $\Psi_c = 1$, pak se v této buňce veškerá jeho zbývající energie absorbuje. Pokud se naopak odrazí do již homogenizované buňky ($\Psi_c = 2$), pokračuje se dál v modelování jeho trajektorie plazmatem pomocí trasování paprsků.

Další funkcí parametru Ψ_c je už zmíněné modelování pevné fáze pěny. Přestože modelovaný terčík je zpočátku v pevném skupenství, během celého výpočtu řešení zákonů zachování je na něj pohlíženo jako na plyn. Aby ovšem byly výsledky použitelné i pro jiné, než plynné skupenství, je třeba zpočátku zamezit nežádoucímu pohybu materiálu v pevné fázi, dokud se neroztaví, případně neodpaří. Proto se dodatečně snižují/nulují síly, působící na uzly sítě, pokud je teplota alespoň jedné ze sousedních buněk menší, než je teplota tání/varu. V případě pěny jsou navíc také nepohyblivé všechny nehomogenizované buňky, tedy buňky, kde $\Psi_c = 0$.

2.3 Modifikace náhodného odrazu

Multiškálový model byl původně navržen pro 2D sféricky symetrické simulace za použití 3D metody trasování paprsků jako vylepšení stávajících metod pro modelování interakce laserového záření s porézní látkou [7]. Důležitou roli při této metodě hraje odraz paprsků na náhodně orientovaných pevných pěnových elementech, jenž umožňuje multiškálový model použít nejen na modelování terčíků z pěny s uzavřenou vnitřní strukturou ale také ho rozšířit na mnohem častější případ polouzavřené nebo otevřené struktury pórů. Touto metodou zavedený náhodný odraz však může představovat značnou komplikaci pro určování směru síření laserových paprsků, zejména pokud bychom chtěli použít jednodušší 2D metodu trasování paprsků namísto plně třídimenzionálního popisu. Ukázalo se totiž, že náhodně zvolený směr ve 2D rovině porušuje cylindrickou symetrii modelu, více paprsků se odráží směrem k ose válcových souřadnic, což pak ve výsledku způsobuje mnohem rychlejší, nefyzikální propalování středu terčíku v okolí osy dopadajícího laserového svazku. Paprsky, které ve skutečnosti nemíří přesně na osu symetrie, ale byly odraženy pouze do poloprostoru směrem k ose, se při použití 2D ray-tracingu vždy k této ose dostanou, protože se při použití této metody popisuje směr šíření jen v rovině dané výpočetní sítí.

Implementace multiškálového modelu do 1D vyžaduje nalezení úplně nového postupu pro započítání náhodné orientace pěnové struktury v prostoru. Jednou z možných variant je zahrnutí šíření odražených paprsků v příčném směru, tato změna šíření by způsobila prodloužení optické dráhy paprsku v každé buňce a zvýšila by účinnost absorpce laseru v pěně.

2.3.1 Náhodný odraz ve 2D cylindrické symetrii

Ve 2D metodě trasování paprsků v kódu PALE2 se popisuje směr jejich šíření pouze v rovině rz výpočetní sítě [10] . Dochází-li k odrazu paprsku na rozhraní, je náhodně zvolen úhel φ mezi záporným směrem osy z a novým směrem odrazu paprsku. Zvolíme-li náhodný úhel φ rovnoměrně v intervalu 0 až 2π , paprsek bude mít 50% pravděpodobnost, že bude odražen směrem k ose z a stejnou pravděpodobnost, že bude odražen od osy. To znamená, že zhruba v polovině případů, zanedbáme-li jeho ohyb v plazmatu a nebudeme-li uvažovat konečné rozměry terčíku, se paprsek dostane do hraničních buněk sousedící s osou (Obr. 2.4 vpravo). Ve skutečnosti ale při 3D popisu odrazu paprsku bude nejvíce záležet na úhlu θ , který paprsek svírá s 2D výpočetní rovinou, a který při 2D trasování paprsků vůbec neuvažujeme. Na Obr. 2.4 je ve třech dimenzích ukázáno šíření dvou paprsků se stejným úhlem φ odrazu v rovině výpočetní síťky, ale rozdílným úhlem θ . Můžeme vidět, že ale pouze jeden z těchto paprsků skutečně prochází střední hraniční buňkou, ve 2D projekci by se ale oba dva paprsky dostaly do této nejbližší buňky u osy.

Nechť bod na výpočetní síti, ve kterém nastane náhodný odraz, má souřadnice $[r_i, z_j]$ a nechť hranice buněk [1, j], nacházejících se nejblíže ose z, jsou od této osy vzdáleny poloměrem r_1 . Pak pravděpodobnost P, že pří náhodné volbě úhlu θ se paprsek dostane do hraničních buněk osy z může být přibližně vyjádřena jako

$$P \approx \frac{2r_1}{2\pi r_i} = \frac{r_1}{\pi r_i},\tag{2.18}$$

tento vzorec je platný pro $r_1 \ll r_i$. Pokud by nás zajímala např. pravděpodobnost, se kterou by se paprsek náhodně odrazil z poloviny poloměru terčíku přesně do středové osy, tak při modelování terčíku 400 stejně velkými buňkami v radiálním rozměru by šance na odraz přesně k ose byl zhruba $\frac{1}{200\pi} \approx 0.0016$. Vidíme tedy, že skutečná pravděpodobnost odrazu paprsku k ose je velmi nízká - aby náš fyzikální model odpovídal realitě a mohli jsme multiškálový model



Obr. 2.4 - Ukázka šíření paprsků se stejným úhlem φ projekce do 2D výpočetní roviny, ale rozdílným směrovým úhlem ve směru kolmém na tuto rovinu. Na pravém obrázku pak je znázorněn náhodný odraz na rozhraní nehomogenizované pěny ve 2D metodě trasování paprsků.

použít v kombinaci s 2D metodou trasování paprsků, bude potřeba najít vhodný způsob, jak nefyzikální odraz k ose eliminovat.

2.3.2 Modifikace náhodného odrazu ve 2D

Projekce 3D šíření do 2D

Jednou z možností, jak zachovat správné rozdělení náhodného odrazu ve dvou dimenzích je zvolit náhodně úhel ve 3D prostorovém úhlu 4π a následně vypočítat jeho projekci na 2D výpočetní síťku. V současné implementaci metody trasování paprsků v kódu PALE2 je celý azimutální směr diskretizován pouze jedinou výpočetní buňkou [7] - trajektorie paprsku tedy musí být plně určena souřadnicemi na výpočetní síti z a r. Pro každý paprsek, který přímo neprochází osou symetrie, to ale znamená, že v jeho projekci na 2D výpočetní síť bude docházet ke zdánlivému odrazu paprsku v místě, ve kterém se nejvíce přiblíží této ose. Tato situace je znázorněna na Obr. 2.5, kde je vyobrazena projekce šíření obecně orientovaného paprsku do roviny výpočetní sítě rz a projekce při pohledu ve směru osy cylindrických souřadnic z. Směr paprsku popisujeme úhlem φ v rovině výpočetní síťky a úhlem θ , jenž paprsek svírá s touto rovinou. Vyjádříme-li trajektorii paprsků pomocí počátečního bodu $[r_i, z_i]$, pak by v buňce o následující souřadnici $r_{min} = r_i \sin \theta$ muselo dojít ke změně směru šíření v projekci do osy r, aby byl zachován původní směr šíření ve 3D (v případě, že $\theta < \pi/2$ je směr dán jednoznačně). Abychom mohli takovýto popis odrazu použít, pro každý paprsek by bylo nutné při průchodu každou buňkou kontrolovat, jestli se nedostal do místa o souřadnici r_{min} a změnit jeho směr šíření v r tak, aby byl ve zachován původní směr odrazu. Nesmíme ovšem zapomenout, že náš hlavní záměr není pouze popis přímočarého šíření paprsků v plazmatu, ale také započítaní jejich ohybu vlivem rozdílných parametrů plazmatu podél trajektorie. V případě, že jsou trajektorie paprsků zakřivovány a ohýbány, minimální vzdálenost paprsku od osy r_{min} je nutné při každé změně směru znova přepočítat.



Obr. 2.5 - Projekce náhodně zvoleného směru ve 3D na 2D výpočetní síťku. Při projekci může nastat zdánlivý odraz paprsku, viz pravý obrázek.

Pozn.: Už jen samotné generování náhodného úhlu ve 3D není triviální a vyžaduje speciální pozornost. Volbu náhodného směru ve 3D můžeme přirovnat k výběru náhodného bodu na povrchu koule - pak náhodný směr je dán vektorem, spojujícím daný bod s počátkem souřadnic (středem této koule). K získání náhodného rozdělení však nestačí jen vygenerovat dva uniformně rozdělené náhodné úhly ve sférických souřadnicích. Takováto volba úhlů by vedla k mnohem většímu počtu směrů mířících na póly pomyslné kulové plochy a méně by byly zastoupeny směry odpovídající rovníku. Pokud by pomocná kulová plocha byla charakterizována body v souřadnicovém systému (r, θ, ϕ) , pak správné rovnoměrné rozdělení bodů na kouli by bylo dáno úhly [21]

$$\theta = 2\pi u, \quad \phi = \cos^{-1}(2v - 1),$$
(2.19)

kde u a v jsou rovnoměrně rozdělené náhodné veličiny na (0,1).

Modifikace pravděpodobnostního rozdělení úhlu odrazu

Druhá možná metoda je založena na změně pravděpodobnosti, se kterou se budou paprsky odrážet do určitých směrů. Takto můžeme zachovat výpočet trajektorie paprsků jen ve 2D, kde se náhodně bude při odrazu volit jen jeden úhel φ v rovině výpočetní síťky. Aby výsledný směr šíření, v celkovém součtu přes všechny modelované paprsky, odpovídal náhodnému odrazu ve 3D, rozdělení pravděpodobnosti volby náhodného úhlu φ nebude uniformní na $(0, 2\pi)$, ale bude zvoleno tak aby byla pravděpodobnost odrazu směrem k ose ($\varphi \in (0, \pi)$) menší, než od osy ($\varphi \in (\pi, 2\pi)$).

Základní myšlenka metody je velmi jednoduchá - omezíme počet paprsků, které dopadají směrem k ose. Nesymetrické propalování středu terčíku způsobují převážně paprsky, odražené směrem k ještě nepropálené, studené části ($\varphi \in \langle 0, \pi/2 \rangle$) - to z důvodu, že energie nesená paprsky se téměř okamžitě absorbuje v první nehomogenizované buňce pěny. Naopak paprsky, které jsou odraženy sice směrem k ose, ale prochází přes expandující plazmovou korónu ($\varphi \in \langle \pi/2, \pi \rangle$), nám nesymetrické propalování nezpůsobují, protože jejich absorpce inverzním brzdným zářením je postupná. Proto se zaměříme hlavně na snížení počtu problematických paprsků odražených do levého dolního rohu výpočetní sítě.

Za tímto účelem změníme úhlové rozdělení pravděpodobnosti odrazu z rovnoměrného rozdělení na jinou, modifikovanou náhodnou veličinu. Chtěli bychom, aby minimální pravděpodobnost odrazu náležela libovolně zvolenému úhlu φ_{min} . Dále požadujeme, aby nové rozdělení pravděpodobnosti bylo spojité a periodické.

Vhodný tvar hustoty pravděpodobnosti modifikovaného náhodného odrazu by byl např.

$$f(\varphi) = \frac{1}{2\pi} (1 + \sin(\varphi - \varphi_{min} - \frac{\pi}{2})).$$
(2.20)

Tato funkce nabývá minima pro φ_{min} a pak spojitě přechází ke své maximální hodnotě v $\varphi_{min} + \pi$, což příhodně odpovídá opačnému směru, než pro který je hustota minimální. Funkce je navíc symetrická ve svém argumentu, takže po dosažení maxima opět klesá k minimální hodnotě. Nevýhodou takovéto náhodné veličiny ale je, že neexistuje analytický předpis inverzní funkce $F^{-1}(\varphi)$ k její distribuční funkci $F(\varphi) = \frac{1}{2\pi}\varphi + \frac{1}{2\pi}\cos(\varphi - \varphi_{min} - \frac{\pi}{2})$, jejíž znalost je nutná k efektivnímu generování náhodných čísel s tímto rozdělením. Existují metody, které by nám umožnily numericky vygenerovat toto náhodné rozdělení, jejich použití by ale vedlo ke zbytečnému zvýšení výpočetní náročnosti algoritmu. Namísto toho použijeme jiné rozdělení s obdobnými vlastnostmi, které ale půjde generovat mnohem snáze. Vezmeme-li normální rozdělení na $(-\infty, +\infty)$ a oba konce ořízneme funkcí $mod(2\pi)$, získáme rozdělení, jenž se svým tvarem hustoty pravděpodobnosti velmi podobá výše zmíněnému (2.20). Funkce modulo způsobí, že hodnota v minimu funkce již nebude nulová, jako by tomu bylo u původního návrhu, ale bude zhruba odpovídat jedné padesátině maximální hodnoty. Tato skutečnost je možná dokonce preferovanou vlastností, protože chceme počet paprsků směřujících k ose pouze omezit a ne snížit na nulu. Protože vycházíme z normálního rozdělení, máme zaručeno, že po jeho transformaci na interval 0 až 2π výsledek zůstane hustotou pravděpodobnosti. Tuto metodu generování náhodného rozdělení lze snadno implementovat do stávajícího kódu, navíc nepředstavuje žádné znatelné zvýšení výpočetní náročnosti, jelikož pouze vygenerujeme o jedno náhodné číslo více a provedeme navíc několik základních aritmetických operací. Srovnání histogramu vygenerované náhodné veličiny, vzniklé jako modifikace normálního rozdělení na $(0, 2\pi)$, s hustotou náhodné veličiny dané vztahem (2.20) můžete vidět na Obr. 2.6.



Obr. 2.6 - Histogram modifikovaného náhodného rozdělení úhlu pro N=10⁶ při volbě $\varphi_{min} = \pi/2$ úhlu minima pravděpodobnosti. Pro porovnání je uvedena také hustota pravděpodobnosti původního, nerealizovaného návrhu rozdělení (2.20).

Teď už jenom zbývá zvolit úhel φ_{min} , do kterého bychom chtěli posílat nejméně paprsků. Tento úhel může být zvolen více způsoby. Jednou z možností je nastavení pevné hodnoty, nezávisle na poloze buňky, ve které nastává náhodný odraz. Při pevné volbě úhlu minima nastává nejméně asymetrické propalování při $\varphi_{min} = \pi/4$ (testovány ovšem byly pouze úhly v násobcích $\pi/4$). Jinou možností je změna úhlu minima v závislosti na pozici bodu odrazu, možnou realizací by pak bylo například nalezení úhlu, odpovídající směru mířícímu k počátku souřadnicových os, tedy k místu, kde se nejvíce projeví nežádoucí nesymetrické propalování a nastavení minimální pravděpodobnosti odrazu pro tento směrový úhel, jenž bude pro každou buňku a každý paprsek odpovídat jiné hodnotě φ .

Generátory pseudonáhodných čísel

Abychom byli schopni generovat náhodné rozdělení, potřebujeme nejprve metodu pro generování pseudonáhodných čísel. Jedním z nejstarších a nejednodušších generátorů náhodných čísel je například lineární kongruentní generátor [22] . Náhodné číslo I_{k+1} je iteračně vypočteno z předchozího I_k podle $I_{k+1} = (I_k \cdot a + c) \mod m$. Čísla $a, c \in m$ jsou vhodně volena, aby perioda, než se sekvence náhodných čísel začne opakovat byla co největší.

Programovací jazyk FORTRAN, v němž byly oba použité numerické kódy napsány, používá ve funkci RANDOM_NUMBER jako generátor pseudonáhodných čísel pokročilejší metodu zvanou XORshift [23] . Každé následující náhodné číslo v sekvenci vzniká aplikací logického operátoru XOR na bitovou reprezentaci dvojice čísel, obě z nich jsou předchozí vygenerované náhodné čísla, ale jedno z nich bylo modifikované posunutím každého bitu v jeho dvojkové reprezentaci o jednu pozici. Díky tomu, že všechny výpočetní operace jsou v této metodě přímo prováděny na bitové reprezentaci čísla, generování celé sekvence náhodných čísel je otázkou jen několika výpočetních cyklů procesoru.

Generace náhodného rozdělení

Nechť je f(x) hustota pravděpodobnosti náhodné veličiny X, jejichž rozdělení bychom chtěli generovat. K tomuto účelu můžeme využít postup, označovaný jako metoda inverzní integrální transformace [24]. Prvním krokem bude nalezení její distribuční funkce

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(y)dy.$$
(2.21)

Jak už bylo dříve zmíněno, v dalším kroku budeme potřebovat najít její inverzní funkci $F^{-1}(x)$. Nutnost nalezení analytického vyjádření inverzní funkce k distribuční funkci je největší nevýhodou této metody, už jen nalezení distribuční funkce v explicitním tvaru může být problematické, natož pak ještě získání její inverzní funkce. V případě že se nám to povede a inverzní distribuční funkci máme k dispozici, pak už jen stačí vygenerovat náhodné, rovnoměrně rozdělené číslo una (0,1) a dosazením do inverzí funkce získáme náhodně rozdělenou veličinu $X = F^{-1}(u)$, která pak odpovídá hustotě pravděpodobnosti f(x).

Generování normálního rozdělení - Box-Mullerova transformace

Jednoduchý a velmi účinný způsob generování normálního (Gaussova) rozdělení je tzv. Box-Mullerova transformace [25]. Používá se pro vytváření náhodných čísel z normálního rozdělení, které má nulovou střední hodnotu μ a jednotkovou varianci $\sigma^2 = 1$. Potřebujeme mít dvě nezávislé, rovnoměrně rozdělené náhodné veličiny $u_1, u_2 \in (0, 1)$, pak

$$X_1 = \sqrt{-2\ln u_1}\cos(2\pi u_2) \tag{2.22}$$

$$X_2 = \sqrt{-2\ln u_1 \sin(2\pi u_2)} \tag{2.23}$$

jsou dvě náhodné čísla z normálního rozdělení.

2.3.3 Modifikace náhodného odrazu v 1D

Multiškálový model v 1D

Laserový paprsek je při použití multiškálového modelu při svém šíření podkriticky hustou plazmovou korónou nejprve absorbován vlivem inverzního brzdného záření a poté, jakmile se dostane do nehomogenizované, nadkriticky husté buňky, je v ní všechen zbytek jeho energie absorbován. Pokud bychom chtěli model vylepšit a podobně jako ve 2D zahrnout náhodnou prostorovou orientaci vnitřní mikroskopické struktury pěny, přidali bychom obdobně náhodný odraz na rozhraní mezi nehomogenizovanou pěnou ($\psi_c = 1$) a plně homogenizovaným plazmatem ($\psi_c = 2$). V jedné dimenzi nemáme moc možností, jak zahrnout náhodný odraz do stávajícího 1D kódu. Nejspíše jediným vhodným způsobem je výběr nového směru šíření ve 2D rovině, tj. volba jednoho náhodného úhlu β , ze kterého následně určíme, ve kterém směru se bude paprsek pohybovat na jednodimenzionální výpočetní síti. Odražený paprsek se při zpětném průchodu korónou opět absorbuje inverzním brzdným zářením.

Při interakci laserového záření s mikroskopickou strukturou pěny mají paprsky 50% šanci, že se odrazí do nehomogenizované buňky a tím pádem se zde plně pohltí, se stejnou pravděpodobností se také mohou odrazit zpět do homogenizovaného plazmatu a tím pádem do buňky s $\psi_c = 1$ nedeponovat žádnou energii. Praktickou modifikací je nechat vždy pohltit polovinu energie dopadajícího paprsku a zároveň paprsek vždy odrazit zpět pod úhlem β , s polovinou jeho původní energie. Tím docílíme, že ve všech časových krocích při výpočtu hydrodynamiky bude alespoň část energie laseru deponována do nehomogenizovaného materiálu.

Příčný směr šíření odraženého laserového paprsku můžeme zahrnout ve výpočtu poklesu intenzity - paprsek odražený pod úhlem bude mít delší efektivní absorpční optickou dráhu Δx^{eff} a tím pádem se absorbuje více jeho nesené energie, viz Obr. 2.7.

Modifikovaná optická dráha paprsku v buňce j + 1/2 bude dána

$$\Delta x_j^{eff} = \frac{\Delta x_j}{\cos \beta} = \frac{x_{j+1} - x_j}{\cos \beta},\tag{2.24}$$

kde x_j je pozice *j*-tého uzlu.



Obr. 2.7 - Náhodný odraz laserového paprsku v 1D a jeho efektivní optická dráha při šíření v příčném směru.

Kapitola 3

Výsledky numerických simulací

V této části se zaměříme na prezentování výsledků, získaných při použití výše uvedených metod modelování interakce laserového svazku s nízkohustotní pěnou. Parametry laseru a použité materiály pro tyto simulace jsme zvolili tak, aby odpovídaly experimentům provedených na laseru PALS (Prague Asterix Laser System) [26]. Uvažujeme laserový puls s energií 170 J o vlnové délce 438 nm (3. harmonická frekvence jódového laseru) a s Gaussovským profilem v čase i prostoru. Poloměr fokusu laseru byl při těchto parametrech 150 μ m a pološířka v maximu Gaussovského pulsu (FWHM) odpovídala 320 ps. Počátek simulace jsme pak zvolili, podle použitého kódu, 320 ps nebo 500 ps před maximem intenzity laseru.

Jako materiál terčíku byla při experimentech provedených na laserovém systému PALS použita triacetát celulóza $C_{12}H_{16}O_8$ (TAC), nízkohustotní pěna s otevřenou strukturou pórů, jejichž velikost se pohybuje mezi 0.5 - 3 μ m. V této práci budeme modelovat terčík pro dvě různé hustoty této pěny. První modelovaný terčík má tloušťku 400 μ m a je vyroben z pěny TAC o celkové průměrné hustotě 9.1 mg/cm³. Druhý je pak vyroben z lehčí varianty pěny o průměrné hustotě 4.5 mg/cm³ a jeho tloušťka je 380 μ m. Předpokládáme, že modelovaná pěna má na začátku simulace pokojovou teplotu $T \sim 0.03$ eV. Během výpočtu hydrodynamiky používáme buď stavovou rovnici ideálního plynu (předpokládá se plná ionizace pěny v průběhu celého výpočtu) a nebo přesnější QEOS [27] (jenž zahrnuje i výpočet stupně ionizace plazmatu). Pokud nebude uvedeno jinak, v prezentovaných výsledcích byla použita stavová rovnice QEOS.

Abychom mohli porovnávat výsledky simulací s experimentálními daty, budeme chtít zjistit rychlost propalování terčíku. Rychlost propalování pěny budeme určovat dvěma metodami - první z nich sleduje polohu kritické plochy (přesněji tedy polohu první nadkritické buňky ve směru šíření laseru). Druhá metoda je založena na sledování teploty vzniklého plazmatu, při které předpokládáme, že pěna je propálena, pokud její teplota přesáhne 200 eV. V praxi to tedy znamená, že poloha čela hydrotermální vlny šířící se pěnou bude dána první buňkou, ve které při použití první metody klesne hustota pod kritickou úroveň, anebo se zvýší teplota nad 200 eV při použití druhé metody. Hranice 200 eV není zvolena náhodně, při experimentech byl terčík pozorován rentgenovou streak kamerou, jenž je schopna zaznamenat pouze fotony s energií přesahující 1 keV - ty jsou ovšem plazmatem vyzařovány pouze po překročení této hraniční teploty.

3.1 Modelování interakce laseru s porézním materiálem v 1D

Pro účely 1D modelování pěnového terčíku jsme použili 1D lagrangeovský hydrodynamický kód, vytvořený Janem Šilarem v rámci jeho bakalářské práce a výzkumného úkolu [1]. Tento kód zahrnuje jedno-teplotní i dvou-teplotní model hydrodynamiky, který využívá metody rozkladu, tedy samostatné řešení hyperbolické soustavy Eulerových rovnic a parabolické rovnice vedení tepla. Hyperbolická část je řešena metodou prediktor-korektor, rovněž je také započítána umělá viskozita v oblastech komprese. Parabolická část, tedy rovnice vedení tepla používá při řešení implicitní, tzv. mimetické schéma.

V tomto kódu je zahrnuta i metoda pro omezení tepelného toku. To znamená, že rovnice vedení tepla je v průběhu jednoho výpočetního kroku řešena dvakrát, poprvé pro získání hodnoty neomezeného tepelného toku, ten se poté porovná s maximální fyzikálně možnou hodnotou a vhodně se upraví koeficient tepelné vodivosti, abychom při dalším řešení tuto hraniční hodnotu již nepřesáhli. Následně se rovnice vedení tepla vyřeší podruhé, tentokrát už však s omezeným tepelným tokem a s novým koeficientem tepelné vodivosti. Použitím této modifikace budou výsledné hodnoty tepelného toku v mnohem větší shodě s fyzikální teorií a experimenty.

Pro modelování pěnového terčíku jsou ve zmíněném 1D kódu dostupné dvě metody, jednou z nich je makroskopicky strukturovaný model v kombinaci s absorpcí laserového záření pomocí metody řešení stacionárních Maxwellových rovnic. Druhou metodou je pak nově implementovaný multiškálový model, využívající metodu absorpce laseru inverzním brzdným zářením.

3.1.1 Makroskopicky strukturovaný model

Porézní materiál v tomto případě modelujeme jako opakující se strukturu tzv. "přepážek" (angl. slabs) s vysokou hustotou a "mezer" (voids) s nízkou hustotou, tato struktura odpovídá jednodimenzionální projekci vnitřního složení pěny na výpočetní sítku. Každý pór pěny je ve výsledku tvořen dvojicí přepážka - mezera, na každou takovou dvojici připadá několik buněk výpočetní sítě. Přestože tloušťka přepážek je mnohonásobně menší než jejich vzájemné vzdálenosti (velikost mezer), po rozdělení počtu buněk připadajících na jeden pór jich více připadne na přepážku, to je kvůli tomu, abychom neměli moc velké rozdíly mezi hmotami jednotlivých buněk. Ve výpočtech jsme používali poměr 3:2 anebo 35:5, v prvním případě to odpovídá 5 buňkám na jeden pór pěny, v druhém 40.

Pro modelování TAC pěn jsme zvolili velikost jednoho póru 2µm. Hustota přepážky by měla odpovídat hustotě pevného elementu pěny (plastu) 1 g/cm³. Z numerických důvodů nemůže zůstat hustota pěny v mezeře nulová a tak ji tedy položíme rovnou 10^{-4} , tedy hodnotu zanedbatelně malou oproti hustotě v přepážce. Z těchto dvou informací si již dále dopočítáme, že pro pěnu o průměrné hustotě 4.5 mg/cm³ musí připadnout 0.0088 µm na velikost přepážky a 1.9912 µm na mezeru. Pro pěnu o průměrné hustotě 9.1 mg/cm³ je pak odpovídající velikost přepážky a mezery 0.018 µm, resp. 1.982 µm.

Nejvhodnější absorpční model pro tuto aplikaci je metoda založená na řešení stacionárních Maxwellových rovnic. Pro pěnu s vyšší hustou (9.1 mg/cm³) a tedy i silnějšími přepážkami lze bez větších ztrát na přesnosti použít i metodu absorpce na kritické ploše, pro tenčí přepážky (hustota pěny 4.5 mg/cm³) dochází k prosvícení několika přepážek zároveň a následné absorpci v několika pórech naráz a použití absorpce na kritice pak není vhodné, jelikož tento jev nedokáže zachytit.

Výsledné profily hustoty, elektronové plazmové teploty a intenzity laserového záření pro TAC pěnu o hustotě 4.5 mg/cm^3 , počítanou na síťce o velikosti 7600 buněk, jsou uvedeny na Obr. 3.1. Tento snímek odpovídá času simulace 280 ps. Na obrázku jsou pro srovnání uvedena přerušovanou čarou data získaná při použití homogenního modelu pěny, tj. když není započítána vnitřní

porézní struktura a materiál je modelován jen jako homogenní látka o odpovídající průměrné hustotě.

Obdobně jsou na Obr. 3.2 uvedeny výsledky ze simulací počítaných pro pěnu o hustotě 9.1 mg/cm³, konkrétně tedy na síťce o 8000 buňkách (modelovaný terčík je o 20 μ m širší než byl u lehčí pěny, tím pádem nám vzroste i počet potřebných buněk, chceme-li zachovat stejný poměr počtu buněk na pór) a ve stejném čase 280 ps.



Obr. 3.1 - Profil hustoty, elektronové teploty a intenzity laserového záření v čase 280 ps pro pěnu o hustotě 4.5 mg/cm³. Plnou čarou jsou označeny výsledky získané z makroskopicky strukturovaného modelu, přerušovanou čarou pak z homogenního modelu.



Obr. 3.2 - Profil hustoty, elektronové teploty a intenzity laserového záření v čase 280 ps pro pěnu o hustotě 9.1 mg/cm^3 získaný použitím makroskopicky strukturovaného modelu (plná čára).Pro srovnání byly přidány výsledky z homogenního modelu pěny (přerušovaná čára).

Na Obr. 3.3 je pro obě hustoty znázorněna časová závislost hloubky propálení pěnového terčíku určená podle pozice kritické plochy, resp. oblasti s teplotou vyšší než 200 eV. Výsledky ze strukturovaného modelu jsou zde srovnávány s homogenním modelem pěny, pro ten lze k určení polohy tepelné vlny použít pouze metodu založenou na teplotě, neboť všechny buňky terčíku jsou v tomto případě po celou dobu simulace podkritické.



Obr. 3.3 - Srovnání rychlosti propalování porézních materiálů o hustotách 4.5 a 9.1 mg/cm³ při použití strukturovaného a homogenního modelu pěny. Maximum intenzity laserového impulzu nastává v čase 500 ps.

Modelování pěny jako homogenního materiálu předpovídá daleko větší rychlost propalování, než odpovídá experimentálním datům. Experimentálně určená rychlost propalování lehčí TAC pěny 4.5 mg/cm³ byla naměřena 1300 μ m/ns [28], pro pěnu s vyšší hustotou 9.1 mg/cm³ se pak naměřený výsledek pohyboval mezi 600 až 700 μ m/ns [18]. Použijeme-li homogenní model pěny, dostaneme daleko vyšší výslednou průměrnou rychlost 1800 μ m/ns a 1170 μ m/ns pro 4.5 mg/cm³, resp. 9.1 mg/cm³ TAC pěnu. Naopak při použití pokročilejšího strukturovaného modelu dostaneme výsledek 1200 μ m/ns a 770 μ m/ns ve shodě s experimenty provedenými na laseru PALS. Uvedené rychlosti propalování byly z numerických simulací získány lineárním fitem křivky časové závislosti hloubky propálení terčíku.

3.1.2 Multiškálový model

Na rozdíl od makroskopicky strukturovaného modelu, multiškálová metoda nezahrnuje modelování vnitřní struktury pěny na hydrodynamické úrovni. Pěna je v tomto případě modelována jako homogenní / uniformní materiál, absorpce laserového záření je ovšem dána stavem pěny na mikroskopické úrovni, která se počítá zvlášť pro každou nehomogenizovanou buňku. Porézní materiály jsou povětšinou kombinací otevřené a uzavřené struktury pórů, má tedy smysl předpokládat, že pevné elementy pěny tvořící hranice mezi jednotlivými póry jsou v prostoru náhodně orientované. Ve dvou dimenzích by tato náhodná orientace způsobovala náhodnou změnu směru šíření laserových paprsků na hranicích homogenizujících se buněk. V jednodimenzionálních simulacích jsme omezeni pouze na šíření laserového záření podél jedné osy, tj. na dopadající a odražený laserový paprsek šířící se v jenom v jediném směru - náhodnou orientaci pórů v pěně lze nicméně do modelu započítat změnou optické dráhy odražených paprsků a správným nastavením poměru mezi energií odraženou a absorbovanou v nadkritické buňce.

V multiškálovém modelu jsme využívali kombinaci absorpce laserového záření vlivem inverzního brzdného záření a absorpce na kritické ploše. Laserový paprsek je nejprve v plazmové koróně absorbován inverzním brzdným zářením a to až do té doby, než narazí na buňku s nadkritickou hustotou (ve které probíhá proces homogenizace a tedy i výpočet expanze pevného elementu pěny na mikroškále), polovina dopadající energie se v této buňce absorbuje a laserový paprsek se odrazí zpět do řidší části plazmatu, ve které nastává jeho další absorpce vlivem inverzního brzdného záření. V případě započítání modifikace náhodného odrazu se navíc při odrazu zvolí náhodný úhel $\beta \in (0, \pi)$ a v důsledku odklonu od původního směru šíření paprsku a tím pádem i delší uraženou dráhou v terčíku se optická dráha v buňce zvýší o odpovídající faktor $\frac{1}{\cos\beta}$. Při interakci laserového záření s vnitřní strukturou pěny mají paprsky 50% šanci, že se odrazí ve směru šíření laseru a tím pádem se plně pohltí v následující buňce. Se stejnou pravděpodobností se také mohou odrazit zpět a do buňky pak nedeponovat žádnou energii. Pro zjednodušení této metody necháme tedy rovnou polovinu dopadající energie absorbovat a polovinu odrazit zpět pod náhodným úhlem, tentokrát však už pouze do poloroviny proti původnímu směru šíření. Vícenásobný odraz ani ohyb paprsků na gradientech hustoty v této metodě neuvažujeme.

U této metody se předpokládá, že každá buňka výpočetní sítě odpovídá jednomu póru pěny. Tím pádem k modelování 400 μ m vrstvy stačí počítat na síťce o pouhých 200 buňkách. Výsledky simulace pro 9.1 mg/cm³ TAC pěnu jsou na Obr. 3.4, všechny veličiny jsou uvedeny v logaritmickém měřítku, pouze intenzita laserového záření je pro lepší přehlednost vyobrazena v lineárním měřítku (na pravé ose). Díky tomu je pokles intenzity v důsledku absorpce dopadajícího a odraženého paprsku inverzním brzdným zářením mnohem lépe viditelný.



Obr. 3.4 - Hustota, elektronová teplota a intenzita dopadajícího/ odraženého laserového záření pro multiškálový model pěny s hustotou 9.1 mg/cm³ v čase 280 ps. Intenzita záření má samostatné lineární měřítko na pravé straně.

3.1.3 Srovnání metod

Srovnání rychlostí propalování pro hustotu pěny 9.1 mg/cm^3 naleznete na Obr. 3.5. Kromě rychlosti propalování nás dále bude také zajímat celková účinnost absorpce laserového záření v materiálu terčíku. Podrobně jsou jednotlivé přírůstky absorbované energie v různých částech plazmatu uvedeny pro multiškálový model v Tab. 3.1, pro zbylé dva modely je zde uvedena celková absorbovaná energie.

Použití multiškálového modelu vede ještě k výraznějšímu zpomalení propalování, než v případě strukturovaného modelu. V tomto případě dokonce ani nedojde k celkovému propálení 400 μ m terčíku během trvání gaussovkého laserového impulzu.

Průměrná rychlost propalování pěnového terčíku (při vynechání prvních cca 200 ps simulace, kdy teprve dochází k náběhu intenzity laseru a rychlost propalování se v této časové oblasti rapidně mění) vychází při použití multiškálového modelu zhruba 450 μ m/ns. Pro strukturovaný a homogenní model jsou tyto rychlosti 770 μ m/ns, resp. 1170 μ m/ns. Experimentálně byla určena rychlost propalování 600-700 μ m/ns před dosažením maxima intenzity laseru [18].

Zahrnutí modifikace náhodného úhlu odrazu do multiškálového modelu, jak můžeme z Obr. 3.5 vidět, nijak výrazně rychlost propalování terčíku neovlivní - v pozdější fázi simulace, po



Obr. 3.5 - Srovnání rychlostí propalování pěnového terčík, získaných při použití různých metod modelování. Maximum intenzity laseru je v čase 500 ps.

dosažení maxima intenzity laserového impulzu v čase 500 ps, se výsledná hloubka propálení u těchto dvou metod začne odlišovat o pozici jenom jediné buňky, tedy o téměř zanedbatelný rozdíl. Modifikace způsobí vyšší absorpci odraženého laserového paprsku při jeho zpětném průchodu plazmovou korónou, jež má za následek zvýšení její elektronové teploty a urychlení její expanze. Z těchto výsledků tedy vyplývá, že rychlost homogenizace pěny a tím pádem i rychlost propalování terčíku, je převážně dána výkonem absorbovaného záření v této první nadkritické, nehomogenizované buňce a je pouze lehce ovlivněna elektronovým tepelným tokem z horké, expandující koróny.

Co se ale naopak změní při použití modifikace, je celková účinnost absorpce laseru. Absorbovaná energie odraženého paprsku se téměř zdvojnásobí, což způsobí zvýšení celkové účinnosti absorpce o 5% oproti nemodifikovanému multiškálovému modelu. Účinnost absorpce se poté víceméně shoduje s výsledky získanými při modelování strukturovaného terčíku a při použití mnohem detailnější a komplikovanější metody absorpce záření, využívající řešení stacionárních Maxwellových rovnic.

| Makroskopicky strukturovaný model | | Celkem | 141,5 J (83,2 %) | | | | |
|---|-------------------------|------------------|------------------|--|--|--|--|
| Homogenní model | | Celkem | 147,1 J (86,5 %) | | | | |
| Multiškálový model bez modifikace náhodného úhlu odrazu | | | | | | | |
| Dopadající paprsek | První nadkritická buňka | Odražený paprsek | Celkem | | | | |
| 57,5 J (33,8 %) | 56,2 J (33 %) | 18,8 J (11 %) | 132,4 J (77,9 %) | | | | |
| Multiškálový model s modifikací náhodného úhlu odrazu | | | | | | | |
| Dopadající paprsek | První nadkritická buňka | Odražený paprsek | c Celkem | | | | |
| 52,9 J (31,1 %) | 58,5 J (34,4 %) | 29,4 J (17,3 %) | 141 J (83 %) | | | | |

Tab. 3.1 - Srovnání účinnosti absorpce všech použitých metod modelování porézních materiálů. U multiškálového modelu je bilance rozepsána detailněji a je uvedena také absorbovaná energie dopadajícího, resp. odraženého paprsku vlivem inverzního brzdného záření mimo kritickou plochu.

3.2 Výsledky z 2D simulací

Pro 2D modelování interakce laserového záření s porézním materiálem jsme využili kód PALE2 [28] , vyvíjený v posledních letech na Katedře fyzikální elektroniky FJFI ČVUT.

PALE2 je 2D ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) kód v cylindrických a nebo kartézských souřadnicích. Metoda ALE kombinuje Eulerovský (výpočetní síť je fixní v prostoru) a Lagrangeovský (pohyblivá výpočetní síť je vázána na materiál) přístup k řešení hydrodynamických zákonů zachování a umožňuje překonat některé jejich nedostatky. Lagrangeovský přístup je vhodný k řešení problémů, při kterých se rapidně mění rozměry studovaného média, např. při expanzi a nebo kompresi plynu, jeho nevýhodou je ale možnost degenerace výpočetní sítě. Metoda ALE proto zahrnuje vyhlazení výpočetní sítě (rezonování) a následnou interpolaci zachovávajících se fyzikálních veličin na novou výpočetní sítě (remapování). Tyto dva kroky představují Eulerovskou část ALE metody a jsou prováděny buď po určitém počtu provedených Lagrangeovských časových kroků a nebo pokaždé, když se zhorší kvalita výpočetní sítě. Pro modelování pěnového terčíku jsme nicméně používali pouze Lagrangeovskou část kódu PALE2, možnosti rezonování a remapování jsme nemohli využít kvůli jejich nekompatibilitě s použitým multiškálovým modelem.

3.2.1 Testování modifikace náhodného odrazu

Nejprve jsme pro TAC pěnu o hustotě 9.1 mg/cm³ otestovali modifikaci náhodného odrazu navrženou v předchozí kapitole. Tato modifikace je založena na změně pravděpodobnostního rozdělení náhodného úhlu odrazu, do kterého se odráží paprsky na hranici nehomogenizované pěny při použití multiškálového modelu. Náhodný úhel odrazu při použití této úpravy již není rovnoměrně rozložený na intervalu 0 až 2π , ale odpovídá zhruba normálnímu rozdělení, transformovanému na tento interval. Nové rozdělení pravděpodobnosti je generováno takovým způsobem, že můžeme libovolně zvolit jeden parametr - úhel φ_{min} , pro který bude hustota pravděpodobnosti nabývat minimální hodnoty. Tvar rozdělení bude při jakékoliv volbě φ_{min} vždy zachován a pouze se posune, takovým způsobem, aby jeho minimum odpovídalo zvolenému úhlu. Fyzikálně bude úhel φ_{min} (měřený od záporného směru osy z) odpovídat směru, do něhož budeme uměle omezovat počet odražených paprsků. Pro začátek jsme zvolili pouze variantu této modifikace, při které je pevně zadána jediná hodnota tohoto úhlu, nezávislá na místě, ve kterém k náhodnému odrazu došlo.



Obr. 3.6 - Časový průběh hloubky propálení pěnového terčíku pro multiškálový model s 2D metodou trasování paprsků a se zahrnutou modifikací náhodného úhlu odrazu. Uvedené výsledky jsou pro různé hodnoty vstupního parametru φ_{min} . Dopadající laserový svazek nabývá maxima své intenzity v čase 320 ps.

Funkčnost celého algoritmu jsme testovali pro několik zvolených úhlů v oblasti okolo hodnoty $\pi/4$, tj. směru, ve kterém nejvíce dochází k nežádoucímu propalování v blízkosti osy. Rovněž jsme pro kontrolu vyzkoušeli namísto snížení počtu odražených paprsků do tohoto směru jejich počet záměrně zvýšit (nastavení úhlu minima do protějšího směru $\varphi_{min} = \frac{5}{4}\pi$) a sledovat, jestli bude docházet ještě k rychlejšímu propalování. Výsledky, napočítané na výpočetní síťce 200x200 buněk, naleznete na Obr. 3.6.

Pro lepší představu je také na Obr. 3.8 uvedeno srovnání vývoje elektronové teploty v pěnovém terčíku pro tři konkrétní testované případy (2D metoda trasování paprsků bez modifikace a poté dva případy s modifikací $\varphi_{min} = \pi/4$, resp. $\varphi_{min} = \pi/2$). Z tohoto srovnání je patrné, že při použití nemodifikované metody trasování paprsků začne docházet v čase 300 ps (tedy cca v době maxima intenzity laseru) k mnohem výraznějšímu propalování terčíku v okolí osy cylindrické symetrie, než je v jeho zbylé části. Tato skutečnost značně přispívá ke zkrácení doby, jenž je nutná k propálení celého terčíku. Použití modifikace s vhodnou hodnotou úhlu φ_{min} dokáže tento problém vyřešit. Na těchto dvou vybraných případech použité modifikace si můžeme ukázat, že k rychlejšímu propalování v okolí středové osy nedochází a šíření tepelné vlny v materiálu odpovídá svým tvarem přibližně případu propalování homogenního materiálu.

Pokud nastavíme maximum pravděpodobnosti ve směru k ose, tak podle očekávání se úměrně tomu urychlí propálení pěnového terčíku. Nejvíce je naopak propalování terčíku zpomaleno při nastavení úhlu minimální pravděpodobnosti odrazu paprsků na $\varphi_{min} = \pi/4$. Po srovnání s experimentálně určenou rychlostí propalování ale zjistíme, že jí více odpovídá výsledek, získaný při použití hodnoty $\varphi_{min} = \pi/2$. Pro tento úhel se zároveň účinnost absorpce laserového záření nejvíce přibližuje nemodifikovanému případu. Účinnost absorpce naleznete pro všechny testované úhly φ_{min} na Obr. 3.7. Použijeme-li navrhovanou modifikaci, celková účinnost absorpce laserového záření v porézním materiálu se nepatrně sníží, protože snížením počtu paprsků odražených k ose nutně zvýšíme počet paprsků, které budou směřovat mimo výpočetní oblast a opustí plazma, aniž by v něm deponovaly všechnu svou energii. Rozdíl se nicméně pohybuje jen v jednotkách procent. Změna úhlového rozložení náhodného odrazu může také na druhou stranu urychlit propalování terčíku v příčném směru, bude-li maximum pravděpodobnosti náhodného odrazu nasměrováno do této oblasti. Příčná rychlost propalování a šířka propálené oblasti se ovšem nezmění natolik, abychom tomu museli věnovat pozornost.



Obr. 3.7 - Srovnání účinnosti absorpce laserového záření v pěnovém terčíku při použití nemodifikované 2D metody trasování paprsků a při použití modifikace náhodného odrazu pro různé testované hodnoty úhlu φ_{min} .



Obr. 3.8 - Interakce laseru s pěnovým terčíkem modelovaná pomocí multiškálového modelu s 1) nemodifikovaným 2D ray-tracingem (vlevo), 2) při použití modifikace náhodného odrazu s $\varphi_{min} = 0.5\pi$ (uprostřed), 3) při použití modifikace náhodného odrazu s $\varphi_{min} = 0.25\pi$ (vpravo). Postupně je ukázán vývoj elektronové teploty plazmatu v časech 200 ps (a), 300 ps (b), 400 ps (c) a 500 ps (d).

3.2.2 Modelování 4.5 mg/cm 3 TAC pěny pro různé velikosti pórů

Nyní, když jsme zjistili, pro jaký parametr φ_{min} funguje modifikace náhodného odrazu nejlépe, můžeme srovnat výsledky multiškálového modelu s případem, kdy je pěnový terčík modelován jako homogenní materiál. Kromě toho budeme také chtít určit, jaký vliv na rychlost propalování má velikost póru pěny.

V multiškálovém modelu vždy velikost jedné buňky výpočetní sítě odpovídá velikosti jednoho póru pěny. To znamená, že pokud budeme chtít snížit rozměry pórů z 2 μ m na 1 μ m, bude zapotřebí rozšířit výpočetní síť z 200x200 na 400x400 (resp. z 190x190 na 380x380 u řidší pěny). Zvětšení počtu buněk nutně znamená snížení velikosti jedné buňky a s tím je spojeno i odpovídající zkrácení hydrodynamického časového kroku, určeného z CFL podmínky [20] . Změna velikosti póru pěny se tedy týká nejenom mikroškály, ale převážně hydrodynamické úrovně. Rozdíl je dobře patrný například u homogenního modelu, kde rozšíření výpočetní domény a změna časového kroku simulace může podstatně ovlivnit výsledek (viz rychlost propalování 9.1 mg/cm³ pěny).

Výsledné srovnání rychlostí propalování je pro 4.5 mg/cm³ TAC pěnu uvedeno na Obr. 3.9. V horní části najdete výsledky pro velikost póru 2 μ m, v dolní části pak pro 1 μ m.

Srovnání 2D profilů elektronové teploty pro homogenní model, multiškálový model a modifikovaný multiškálový model naleznete na Obr. 3.10.



Obr. 3.9 - Srovnání rychlostí propalování u homogenního a multiškálového modelu pro 4.5 mg/cm³ TAC pěnu. Nahoře jsou uvedeny výsledky pro pěnu s velikostí pórů 2 μ m (získané na výpočetní síti 190x190), dole pak pro 1 μ m (výpočetní síti 380x380). Maximum intenzity laseru je v čase 320 ps.



Obr. 3.10 - Interakce laseru s pěnovým terčíkem (4.5 mg/cm³ TAC pěna s velikostí póru 2 μ m) modelovaná pomocí - 1) homogenního modelu (vlevo), 2) multiškálového modelu bez modifikace náhodného odrazu (uprostřed), 3) při použití modifikace náhodného odrazu v multiškálovém modelu s volbou $\varphi_{min} = 0.25\pi$ (vpravo). Postupně je ukázán vývoj elektronové teploty plazmatu v časech 100 ps (a), 140 ps (b), 170 ps (c) a 200 ps (d).

Můžeme konstatovat, že velikost póru nemá pro 4.5 mg/cm³ pěnu výrazný vliv na rychlost propalování. V případě multiškálového modelu je rozdíl jen 10 ps v celkovém čase, nutném k propálení terčíku. Homogenní model předpovídá totožné rychlosti a časy propálení pro oba případy.

Volba úhlu $\varphi_{min} = \pi/4$ v modifikaci náhodného odrazu není, jak se můžeme z poskytnutého Obr. 3.10 přesvědčit, pro případ 4.5 mg/cm³ pěny úplně optimální. Propalování v okolí osy je sice částečně potlačeno, dochází ale k vzniku dvou, samostatně se propalujících oblastí. Hodnota $\pi/4$ byla vybrána na základě provedených testů, které ovšem byly uskutečněny jen pro hustší variantu pěny. Pokud budeme chtít modifikaci dále používat i pro 4.5 mg/cm³ TAC pěnu, bylo by i pro ní zapotřebí provést obdobný test a na základě jeho výsledků zvolit nejlepší možnou hodnotu parametru φ_{min} .

I přesto je však rychlost propalování u modifikovaného multiškálového modelu 1600–1650 μ m/ns mnohem blíže experimentálně získané hodnotě 1300 μ m/ns, než nemodifikovaná metoda (2000–2100 μ m/ns) nebo homogenní model (2400 μ m/ns).

3.2.3 Modelování 9.1 mg/cm 3 TAC pěny pro různé velikosti pórů

Srovnání časového vývoje hloubky propálení 9.1 mg/cm³ TAC pěny najdete na Obr. 3.11. Opět zde srovnáváme homogenní a multiškálový model pro dvě různé velikosti pórů.

Rychlost propalování bude pro tuto hustotu pěny už nejspíše závislá na velikosti pórů, čas propálení se totiž u jednotlivých případů liší zhruba o 70 ps. Nemůžeme ovšem vyloučit, že tento rozdíl není způsobený pouze změnou velikosti výpočetní síťky. U homogenního modelu nebyly kromě výpočetní sítě změněny žádné vstupní parametry, přesto jsou však výsledky značně odlišné z důvodu odlišných časových kroků.

Názorné srovnání vývoje elektronové teploty je opět uvedeno na Obr. 3.12. Velmi dobře je zde viditelné, že při použití modifikace multiškálového modelu je kompletně eliminováno zvýšené propalování pěnového terčíku v oblasti středové osy. Navržená modifikace tedy je při správně zvoleném parametru φ efektivním a vhodným způsobem pro úpravu 2D metody trasování paprsků. Při rozšíření výpočetní sítě se původní dopadající laserový svazek rozdělí na větší počet paprsků (je zachován počet paprsků na jednu výpočetní buňku v radiálním směru) a tím pádem se o to více projeví změna úhlového rozdělení pravděpodobnosti odrazu.

Rychlost propalování se pro modifikovaný multiškálový model bude pohybovat, v závislosti na velikosti pórů, resp. výpočetní sítě, mezi 560 až 620 μ m/nm. Tento výsledek je opět v dobré shodě s experimentálně určenou rychlostí 600-700 μ m/ns. Homogenní model nám dá výslednou rychlost 690-1000 μ m/ns, pro větší rozměr pórů 2 μ m je tedy použitelnou alternativou k multiškálovému modelu pro modelování porézních materiálů. Pro multiškálový model bez modifikace vychází rychlost propalování 950-1100 μ m/ns.



Obr. 3.11 - Srovnání rychlostí propalování u homogenního a multiškálového modelu pro 9.1 mg/cm³ TAC pěnu. Nahoře jsou uvedeny výsledky pro pěnu s velikostí pórů 2 μ m (byla použita výpočetní síť 200x200). Na dolním obrázku jsou výsledky pro velikost 1 μ m (výpočetní síť 400x400). Intenzita laserového svazku nabývá svého maxima v čase 320 ps.



Obr. 3.12 - Interakce laseru s pěnovým terčíkem (9.1 mg/cm³ TAC pěna, velikost póru 2 μ m) modelovaná pomocí -1) homogenního modelu (vlevo), 2) multiškálového modelu bez modifikace náhodného úhlu odrazu (uprostřed), 3) multiškálového modelu s modifikací náhodného úhlu odrazu a volbou $\varphi_{min} = 0.25\pi$ (vpravo). Postupně je ukázán vývoj elektronové teploty plazmatu v časech 200 ps (a), 300 ps (b), 400 ps (c) a 500 ps (d).

Závěr

V tomto výzkumném úkolu jsme se zaměřili na popis metod pro modelování interakce intenzivního laserového záření s porézním pevným terčíkem. První kapitola obsahuje základní vysvětlení fyzikálních mechanismů šíření a absorpce elektromagnetického záření v plazmatu. Následně jsou představeny metody pro zahrnutí těchto absorpčních mechanismů do 1D a 2D numerických hydrodynamických kódů. V druhé kapitole se zabýváme rozšířením těchto metod na případ pěnového terčíku, jenž oproti homogenní látce obsahuje navíc složitou vnitřní strukturu, kterou nelze při modelování zanedbat. Konkrétně jsou uvedeny tři možné metody pro modelování pěnového terčíku - makroskopicky strukturovaný model, metoda zpožděného absorpčního koeficientu a multiškálový model. Zbytek kapitoly je věnován návrhům modifikací multiškálového modelu, zejména tedy návrhu modifikace náhodného odrazu pro 2D kód PALE2. Rovněž se zde věnujeme návrhu modifikace náhodného odrazu a započítání šíření laserového svazku v příčném směru v 1D. V poslední kapitole pak jsou prezentovány dosažené numerické výsledky.

V rámci tohoto výzkumného úkolu byl multiškálový model implementován do stávájícího 1D lagrangeovkého kódu, implementace zahrnovala i návrh vhodné modifikace náhodného odrazu na rozhraní mezi homogenizovanou a nehomogenizovanou pěnou. Šíření laserového záření v příčném směru bylo započítáno zvýšením jeho absorpce v důsledku prodloužení jeho optické dráhy. Výsledky z 1D multiškálového modelu jsme srovnávali s makroskopicky strukturovaným modelem.

Hlavním přínosem této práce je návrh modifikace náhodného odrazu pro 2D kód PALE2. Modifikace měla za úkol odstranit nefyzikální propalování terčíku v blízkosti osy cylindrické symetrie, které bylo způsobeno zvýšeným odrazem paprsků směrem k této ose v důsledku použití pouze dvoudimenzionálního popisu jejich šíření na výpočetní síti. Lepšího rozložení náhodného odrazu při použití 2D metody trasování paprsků bylo dosaženo změnou jeho pravděpodobnostního rozdělení, úhel náhodného odrazu již není při použití modifikace rovnoměrně rozložený na intervalu 0 až 2π , ale pravděpodobnost náhodného odrazu směrem k ose byla uměle snížena. Zvýšené propalování terčíku okolo osy je při použití navrhované modifikace eliminováno.

Použitá literatura

- J. Šilar, Hydrodynamické modelování laserového plazmatu, Výzkumný úkol, FJFI ČVUT (2009)
- [2] D. R. Nicholson, Introduction to plasma theory (Plasma Physics), Wiley (1983)
- [3] M. Kálal, *Elektrodynamika*, Skriptum FJFI ČVUT (2008)
- [4] S. Eliezer, The Interaction of High-power Lasers with Plasmas, Institute of Physics, ISBN 9780750307475 (2002)
- [5] K. Eidmann, J. Meyer-ter-Vehn, T. Schlegel, Hydrodynamic simulation of subpicosecond laser interaction with solid-density matter, Phys. Rev. E, 62(1):1202-1214 (2000)
- [6] J. Velechovský, Modelování absorpce laserového záření v plazmatu, Bakalářská práce, FJFI ČVUT (2009)
- [7] J. Velechovský, High-order numerical methods for laser plasma modeling, Disertační práce, FJFI ČVUT v Praze & Universite de Bordeaux (2015)
- [8] Y. V. Afanas'ev, N. N. Demchenko, O. N. Krokhin, V. B. Rosanov, Absorption and reflection of laser radiation by a dispersing high-temperature plasma, JETP 72, 170-179 (1977)
- B. van der Holst at al, Simulating radiative shock with the CRASH laser package, High Energy Density Physics (9) 8–16 (1977)
- [10] J. Velechovský, Numerické metody modelování laserového plazmatu, Diplomová práce, FJFI ČVUT (2011)
- T. B. Kaiser, Laser ray tracing and power deposition on an unstructured threedimensional grid, Physical Revue E, 61/1, 895–905, (2000)
- [12] S.Y. Gus'kov, Nonequilibrium laser-produced plasma of volume-structured media and inertialconfined-fusion applications, Journal Russ. Laser Res. 31, 574 (2010)
- [13] A.M. Khaenkov, N.G. Borisenko, V.N. Kondrashov, Y.A. Merkuliev, J. Limpouch, V.G. Pimenov, Experience of micro-heterogeneous target fabrication to study energy transport in plasma near critical density, Laser and Particle Beams, 24, 283–290 (2006)
- [14] A. E. Bugrov, S. Y. Gus'kov, V. B. Rozanov, Interaction of a high-power laser beam with low-density porous media, JETP, 111, 903–918 (1997)
- [15] M. Cipriani, S.Y. Gus'kov, R. De Angelis, F.Consoli, Laser-supported hydrothermal wave in low-dense porous substance, Laser and Particle Beams, 36(1), 121-128 (2018)

- [16] S.Y. Gus'kov, J. Limpouch, P. Nicolai, V.T. Tikhonchuk, Laser-supported ionization wave, Phys. Plasmas 18, 103114 (2011)
- [17] J. Limpouch, S. Y. Gus'Kov, V. T. Tikhonchuk, Propagation of laser-supported ionization wave in an underdense target, 38th EPS Conference on Plasma Physics (2011)
- [18] T. Kapin, M. Kuchařík, J. Limpouch, R. Liska, Hydrodynamic simulations of laser interactions with low-density foams, Czechoslovak Journal of Physics, 56 B493-B499 (2006)
- [19] J. Velechovský, J. Limpouch, R. Liska, V. Tikhonchuk., Hydrodynamic modeling of laser interaction with micro-structured targets, Plasma Phys. Control. Fusion 58(9) 095004 (2016)
- [20] R. Courant, K. Friedrichs, H. Lewy, On the partial difference equations of mathematical physics, IBM Journal of Research and Development, 11(2) 215–234 (1967)
- [21] W. Feller, An Introduction to Probability Theory and Its Applications, Wiley New York, Vol. 2, (1971)
- [22] T.E. Hull, A.R. Dobell, Random number generators, SIAM Review, Vol.4 No.3 (1962)
- [23] G. Marsaglia, Xorshift RNGs, Journal of Statistical Software, 8/14 (2003)
- [24] L. Devroye, Non-Uniform Random Variate Generation, Springer Science, ISBN 978-1-4613-8643-8 (1986)
- [25] G.E.P. Box, M. E. Muller, A Note on the Generation of Random Normal Deviates, The Annals of Mathematical Statistics, Vol.29, No.2, 610–611 (1958)
- [26] J. Limpouch, N. G. Borisenko, N. N. Demchenko et al., Laser absorption and energy transfer in foams of various pore structures and chemical compositions, J. Phys. IV/133 (2006)
- [27] R.M. More, K.H. Warren, D.A. Young, G.B. Zimmerman, A New Quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter, Physics of Fluids 31 3059 (1988)
- [28] R. Liska et al., Selected Laser Plasma Simulations by ALE Method, J. Phys.: Conf. Ser. 112 (2008)