

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
Katedra fyzikální elektroniky

Numerické simulace jevů v plazmatu při pulzní laserové depozici

Výzkumný úkol

Autor práce: **Bc. Jan Nikl**
Vedoucí práce: **Ing. Milan Kuchařík, PhD.**
Konzultant: **Ing. Michal Novotný, PhD., FZÚ AV ČR**
Školní rok: **2015/2016**

Před svázáním místo této stránky **vložíte zadání práce** s podpisem děkana (v jedné kopii práce bude list s originálem podpisu).

Toto bude jediný oboustranný list ve Vaší práci!

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem předloženou práci vypracoval samostatně a že jsem uvedl veškerou použitou literaturu.

V Praze dne 15.09.2016

Bc. Jan Nikl

Poděkování

Tímto bych chtěl poděkovat svému školiteli Ing. Milanu Kuchaříkovi, PhD. za dlouhé odborné diskuze, podporu, vstřícnost a rovněž za věcné rady a připomínky. Také bych chtěl poděkovat svému konzultantovi Ing. Michalu Novotnému, PhD. za cenné zkušenosti a dlouhodobě vstřícný přístup.

Bc. Jan Nikl

Název práce:

Numerické simulace jevů v plazmatu při pulzní laserové depozici

Autor: Bc. Jan Nikl

Obor: Informatická fyzika

Druh práce: Výzkumný úkol

Vedoucí práce: Ing. Milan Kuchařík, PhD.

Konzultant: Ing. Michal Novotný, PhD., FZÚ AV ČR

Abstrakt:

Tato práce rozšiřuje dříve vyvinuté 1D numerické modely pro simulace laserové ablace a expanze plazmatu při PLD depozici do 2D. Je použit lagrangeovský jednotekutinový jednoteplotní hydrodynamický přístup v cylindrické geometrii. Robustnosti je dosaženo vyhlazováním výpočetní sítě technikou ALE. Pro absorpci laserového záření mechanismem inverzního brzdného záření je vyvinut nový efektivní algoritmus, který je založen na globálním mapování na pomocnou síť, kde jsou řešeny stacionární Maxwellovy rovnice. Pro rovnici parabolického vedení tepla je odvozeno semi-implicitní diferenční schéma druhého řádu konvergence. Různé varianty rozkladu rovnice zachování energie jsou porovnány na úloze řešení nelineární advekčně-difuzní rovnice, pro kterou je nalezeno analytické řešení. Výsledky simulace 1D úlohy ukazují dobrou shodu s literaturou. Simulace ve 2D realisticky modelují proces vzniku plazmové plumy.

Klíčová slova: lagrangeovská hydrodynamika, laserové plazma, numerické metody, PLD, vedení tepla, absorpce laseru, ALE

Title:

Numerical plasma simulations for pulsed laser deposition

Author: Bc. Jan Nikl

Abstract:

This thesis extends previous 1D numerical models for simulations of laser ablation and plasma expansion during PLD deposition to 2D. Single-fluid one-temperature Lagrangian hydrodynamics is used in cylindrical geometry. ALE algorithm increases the robustness by allowing computational mesh smoothing. A new effective algorithm of laser absorption by inverse Bremsstrahlung is developed, that is based on global remapping on an auxiliary mesh, where stationary Maxwell's equations are solved. A semi-implicit differential scheme of the second order is derived for the parabolic heat conduction equation. Different splittings of the energy conservation equation are compared on a non-linear advection-diffusion equation, for which an analytical solution is constructed. The results of a 1D problem are in a good agreement with literature. The simulations in 2D realistically model process of plasma plume creation.

Key words: Lagrangian hydrodynamic, laser plasma, numerical methods, PLD, heat conduction, laser absorption, ALE

Seznam symbolů a značek

c	rychlost světla ve vakuu
π	Ludolfovo číslo
e	elementární náboj
m_e	hmotnost elektronu
m_p	hmotnost protonu
k_B	Boltzmannova konstanta
\hbar	redukovaná Planckova konstanta
ϑ	Heavisideova funkce
δ	Diracova delta funkce
A	nukleonové číslo
Z	stupeň ionizace
T	teplota
p	hydrostatický skalární tlak
ϱ	hmotnostní objemová hustota
ε	specifická vnitřní energie
\vec{W}	tepelný tok
\vec{u}	jednotekutinová rychlost

Obsah

Úvod	8
1 Absorpce laserového záření	10
1.1 Model srážkové frekvence	11
1.2 Algoritmus mapování na pomocnou výpočetní síť	13
1.2.1 Generování pomocné výpočetní sítě	14
1.2.2 Spárování výpočetních uzlů s pomocnými buňkami	16
1.2.3 Nalezení průsečíků	17
1.2.4 Výpočet parciálních objemů	18
1.2.5 Testovací úloha	22
1.2.6 Aplikace na absorpci laseru	23
2 Vedení tepla	25
2.1 Semi-implicitní numerické schéma	26
2.1.1 Prostorová diskretizace	28
2.1.2 Difuze skokové funkce	34
2.1.3 Stacionární vedení v nehomogenním prostředí	38
2.2 Koefficient tepelné vodivosti	41
2.3 Metoda rozkladu	42
2.3.1 Nelineární advekčně-difuzní rovnice	43
2.3.2 Simulace rázové vlny	45
3 Rozšíření fyzikálních modelů	49
3.1 Držení pevné a kapalná fáze	49
3.2 Model fázového přechodu	50
4 Simulace laserové ablace	51
4.1 Jednorozměrné simulace	51
4.2 Dvourozměrné simulace	56
Závěr	60
Literatura	62

Úvod

Tato práce se zabývá problematikou numerických simulací metody *pulzní laserové depozice* (PLD), která slouží k přípravě *tenkých vrstev*. Díky své tloušťce řádově nanometrů až mikrometrů mají unikátní strukturně závislé vlastnosti, kterými se odlišují od běžných objemových materiálů. Nalezly tak za posledních několik desetiletí uplatnění v mnoha odvětvích průmyslu a jsou nadále zkoumány. Metoda PLD spočívá v ablaci materiálu masivního terče za použití intenzivního laserového svazku ($\sim \text{GW}/\text{cm}^2$). Vzniká tak nad povrchem tzv. *plazmová pluma* [1, 2], která se šíří prostorem vakuové komory a následně materiál dopadá na připravený substrát, na jehož povrchu takto za ideálních podmínek roste epitaxně deponovaná vrstva materiálu. Zde se primárně soustředíme na depozice ve vakuu s kovovými pevnolátkovými terči [3], což je historicky nejběžnější postup, přestože vzhledem k flexibilitě metody PLD je možné deponovat i keramické [4] či organické materiály [5]. Další variantou je naplnění komory inertním plynem a to až do vyšších tlaků [6] nebo případně i reaktivním plynem [7].

Procesy při metodě PLD můžeme rozčlenit pro potřeby numerického modelování do čtyř částí: absorpce laserového záření, ablace materiálu terče, expanze plazmatu a depozice na substrátu [1]. Z hlediska popisu a numerického modelování tato práce navazuje na předchozí práci [8], kde byly první tři procesy simulovány jednodimenzionálně ve vyvinutém simulačním kódu. Cílem této práce je model rozšířit do dvou dimenzí a implementovat klíčová rozšíření, kterými jsou držení pevné a kapalné fáze a model fázového přechodu, do dvoudimenzionálního simulačního kódu *PALE2* vyvíjeného na katedře KFE. Tento kód je totiž určen především pro simulace laserové ablace za výrazně vyšších intenzit dopadajícího laserového záření ($\sim 10^{15} \text{ W}/\text{cm}^2$) například na laserovém systému PALS, což jsou o minimálně šest řádů vyšší intenzity než je běžné u PLD. Z tohoto důvodu musí být kód rozšířen a modifikován v mnoha směrech, aby modely pokrývaly i tyto podmínky, jak ukázala už předešlá práce. Z hlediska použitých numerických metod jsou si oba kódy blízké a v obou je použito *jednotekutinové jednoteplotní* přiblížení, které bylo použito již v předchozí práci a je vhodné pro simulace laserového plazmatu pro řádově nanosekundové laserové pulzy [1]. Oba kódy jsou také primárně *lagrangeovské*, což znamená, že se výpočetní síť pohybuje se simulovanou hmotou, takže je dosahováno vysoké přesnosti u úloh s rychlou změnou objemu látky, jako tomu je právě u metody PLD, kdy vrstva řádově mikrometr silná po ablaci expanduje do až centimetry velkého plazmového oblaku. Zásadním rozdílem však je, že kód *PALE2* integruje metodu *ALE* (Arbitrary Lagrangian Eulerian), která umožňuje dynamicky vyhlazovat výpočetní síť za běhu simulace [9] a tím omezuje problém čistě lagrangeovských kódů s deformací sítě, který je zejména kritický při simulacích ve více dimenzích.

Již v předešlé práci bylo identifikováno několik problémů při simulacích za nízkých intenzit (z hlediska laserového plazmatu), které jsou zde z části adresovány spolu s dalšími. Patří mezi ně například revidování modelu srážkové frekvence během absorpce laseru tak, aby odrazivost terče odpovídala skutečnosti. Dále vylepšení modelu koeficientu tepelné vodivosti a nebo navázání schématu vedení tepla a řešení rovnic hydrodynamiky.

Mimo to se objevilo několik neočekávaných problémů, které musely být řešeny

pro dosažení realistických 2D simulací. Vyskytly se problémy s modelem absorpce laserového záření a vedení tepla, které bylo nutné přizpůsobit podmínkám ablace za nízkých intenzit laseru, ale které se v 1D nevyskytovaly a nebyly tak zpočátku očekávány. Výchozím bodem pro oba problémy je rovnice diferenciálního *zákona zachování energie*, která podle [9, kapitola 6] a [8, kapitola 3.2] v lagrangeovských souřadnicích má podobu:

$$e \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -p \nabla \cdot \vec{u} - \nabla \cdot \vec{I} - \nabla \cdot \vec{W} . \quad (1)$$

Člen divergence Poyntingova vektoru absorbovaného laserového záření \vec{I} představující jeden ze zdrojových členů rovnice je jedním z těchto problémů, protože absorpce laserového záření je oproti 1D výrazně komplikovanější a ukázalo se, že doposud používané modely pro účely simulace metody PLD nepostačují. Proto byl vyvinut nový algoritmus absorpce laseru založený na řešení stacionárních Maxwellových rovnic, který je popsán v kapitole 1.

Druhým problematickým členem v (1) je divergence toku tepla \vec{W} , který zastupuje příspěvek uzavírající rovnice vedení tepla. Numerické schéma vedení tepla bylo však na rozdíl od zbytku schématu pouze prvního řádu konvergence v čase. Pro získání přesnějších výsledků bylo proto odvozeno, implementováno a otestováno schéma druhého řádu konvergence. Tématu vedení tepla se celkově věnuje kapitola 2.

Zbývá část práce je rozdělena na kapitulu 3, která se zabývá dříve zmíněnou technikou držení pevné a kapalné fáze a modelem fázového přechodu. Kapitola 4 pak prezentuje dosažené výsledky realistických numerických simulací 1D a 2D úloh a porovnává je s 1D kódem a literaturou.

1 Absorpce laserového záření

V rámci Bakalářské práce [8] byly použity pro simulace PLD dva algoritmy výpočtu absorpce laserového záření mechanismem *inverzního brzdného záření*. Prvním byla absorpce na kritické hustotě, kdy je veškerý absorbovaný výkon laseru koncentrován do jediné nadkriticky husté buňky. Takovýto algoritmus lze přímo rozšířit pro 2D simulace při předpokladu dopadu paralelních paprsků a běžně se tedy používá v kódu PALE2.

Nicméně jak bylo konstatováno už u 1D simulací, pro realistické modelování je nutné použít druhý algoritmus, který je založený na řešení *stacionárních Maxwellových rovnicích* [10, 11, 12]. Tento převzatý kód dokáže sestavit a vyřešit soustavu rovnic popisující odrazy laserového záření na rozhraní výpočetních buněk a absorpci uvnitř buněk za předpokladu homogenních veličin uvnitř. Na rozdíl od předešlého případu nelze efektivně algoritmus rozšířit pro 2D úlohy, protože vzhledem k deformaci výpočetní sítě by docházelo k odrazu od skloněných rozhraní, čímž by obecně vznikla závislost absorbované energie každé výpočetní buňky na všech ostatních, což by při výpočtu enormně zvyšovalo výpočetní nároky simulace.

Jeden možný přístup řešení vlnové rovnice v nehomogenním prostředí popisující šíření laserového záření je použití *raytracingu*, kdy je sledován odraz několika paprsků, čímž situaci s multi-odrazy aproximativně vyřešíme. Kódy založené na raytracingu jsou aktivně vyvíjeny na KFE [13] a v době psaní této práce byly už i pokusně integrovány do kódu PALE2.

Jiný přístup, který byl vyvinut v rámci této práce, je založen na mapování (interpolaci) potřebných simulačních veličin na pomocnou obdélníkovou výpočetní síť, kde můžeme aplikovat 1D absorpční kód na jednotlivé řádky či sloupce (dle orientace sítě vůči laseru) již zcela nezávisle. Tímto postupem ovšem zcela zanedbáváme změnu směru paprsků při šikmém dopadu odrazem či lomem, přesto však dává tento absorpční algoritmus velmi dobré výsledky jak pro 1D úlohy (resp. radiálně uniformní), kde by měl být výsledek teoreticky totožný s 1D simulací, tak i u 2D úloh (viz. kapitola 4).

Již v předešlé práci se ukázalo, že je nutné revidovat výpočet srážkové frekvence, která je klíčovým parametrem při absorpci mechanismem inverzního brzdného záření. Konkrétně relativní komplexní permitivita, která ovlivňuje šíření elektromagnetických vln v látce, použitá ve stacionárních Maxwellových rovnicích je určena jako:

$$\hat{\epsilon}_r = 1 - \frac{\omega_{pe}^2}{\omega_L(\omega_L + i\nu)}, \quad (2)$$

kde značí ω_{pe} elektronovou plazmovou frekvenci, $\omega_L = 2\pi c/\lambda_L$ úhlovou frekvenci monochromatických vln laserového záření (λ_L vlnová délka vln) a ν srážkovou frekvenci interakce elektronů s jinými částicemi, při které dochází k výměně energie a tím k absorpci energie procházející elektromagnetické vlny. Bližší popis algoritmu založeného na stacionárních Maxwellových rovnicích je mimo rozsah tohoto textu, ale lze jej nalézt například v [12]. Následující podkapitola se pak zabývá globálním modelem srážkové frekvence, který se v kódu používá.

Druhá podkapitola popisuje samotný algoritmus mapování (interpolace) fyzikálních veličin na pomocnou obdélníkovou síť, který byl vytvořen a ověřen. Absorpce laserového záření se po provedení vlastního mapování redukuje na pouhou iteraci 1D

absorpčního kódu v jednotlivých směrech paralelních dopadajících paprsků.

1.1 Model srážkové frekvence

Globální model srážkové frekvence vychází z článku [14]. Celkově model plně pokrývá potřebný rozsah pro běžné hydrodynamické simulace ablace pevnolátkového terče tj. teploty v rozpětí řádově od pokojové teploty až k teplotám 10^3 eV. V limitě pro vysoké teploty je dobře platná klasická elektron-iontová srážková frekvence ve *Spitzer-Härmově* aproximaci [15]:

$$\nu_{SH} = \frac{4}{3} \sqrt{2\pi} \frac{Z e^4 m_e n_e}{(m_e k_B T)^{3/2}} \ln \Lambda , \quad (3)$$

kde n_e zastupuje elektronovou hustotu, kterou za předpokladu kvazineutrality určíme jako $n_e = Z \rho / (A m_p)$. Výraz $\ln \Lambda$ symbolicky značí Coulombův logaritmus, který vypočítáme jako $\ln \Lambda = \max(2, \sqrt{1 + (b_{max}/b_{min})^2})$ [12]. Symboly b_{max} a b_{min} označují maximální a minimální záměrný parametr, které jsou dány vztahy:

$$b_{max} = \frac{\sqrt{k_B T / m_e}}{\max(\omega_{pe}, \omega_L)} , \quad (4)$$

$$b_{min} = \max \left(\frac{Z e^2}{k_B T}, \frac{\hbar}{\sqrt{m_e k_B T}} \right) . \quad (5)$$

Naopak pro nízké teploty pod úroveň *Fermiho teploty*, která například pro hliník činí přibližně 11.7 eV a 7.0 eV pro měď [16], je plazma silně degenerované a v pevné látce musíme uvažovat *elektron-fononovou* interakci tj. vznik kvant vibrací krystalové mříže rozptylem urychlovaných elektronů. Podle [14] je srážková frekvence elektron-fononové interakce v limitě chladného plazmatu přibližně rovna:

$$\nu_{el-fonon} = 2k_S \frac{e^2 k_B T}{\hbar^2 v_F} , \quad (6)$$

přičemž v_F zastupuje Fermiho rychlost, kterou vypočítáme jako $v_F = \hbar \sqrt{3\pi^2 n_e} / m_e$. Multiplikativní konstanta k_S pak umožňuje tento obecný teoretický model přizpůsobit empirickým hodnotám pro konkrétní pevnou látku (viz. dále).

Uvedené dvě srážkové frekvence přibližně platné pro různé teplotní rozsahy jsou následně interpolovány v celém rozsahu pomocí harmonického průměru:

$$\nu^{-1} = \nu_{SH}^{-1} + \nu_{el-fonon}^{-1} . \quad (7)$$

Ve střední oblasti okolo Fermiho teploty ovšem model tvořený touto přímou interpolací nereálně nadhodnocuje srážkovou frekvenci (Obr. 1), protože by střední volná dráha elektronů byla menší než charakteristická vzdálenost mezi ionty [14]. Z tohoto důvodu je do modelu přidáno kritérium omezující srážky pod úroveň:

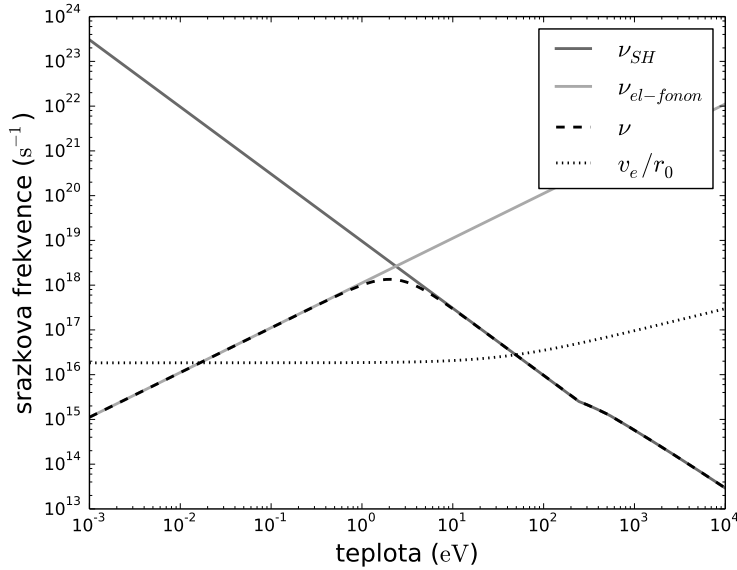
$$\nu < v_e \left(\frac{3}{4\pi n_i} \right)^{1/3}, \quad (8)$$

kde $v_e = \sqrt{v_F^2 + k_B T / m_e}$ je charakteristická rychlost elektronů přecházející od Fermiho rychlosti v pevné látce (limita nízkých teplot – degenerovaného plazmatu) k tepelné rychlosti volných elektronů v horkém plazmatu (limita vysokých teplot – ideálního plazmatu). Veličina n_i pak značí iontovou hustotu, kterou vypočítáme jako $n_i = \rho / (A m_p)$.

Pro uzpůsobení teoretického modelu srážkové frekvence empirickým hodnotám odrazivosti R objemového materiálu zavedeme komplexní index lomu \hat{n} , který je určen jako $\hat{n}^2 = \hat{\varepsilon}_r$, kde $\hat{\varepsilon}_r$ máme definováno vztahem (2). Pro odrazivost při kolmém dopadu z vakua pak platí:

$$R = \left| \frac{\hat{n} - 1}{\hat{n} + 1} \right|^2. \quad (9)$$

Zpětným výpočtem při dosazení parametrů odpovídajících pevné látce a střední ionizace získáme konstantu k_S v (6). Pro hliník ve viditelné oblasti tak podle článku [14] dostáváme hodnotu $k_S = 9.4$. Pro měď po dosazení $\lambda_L = 0.266 \mu\text{m}$, $Z = 4.4$, $A = 63$, $\rho = 8.94 \text{ g/cm}^3$, $R = 0.34$, $T = 0.0258 \text{ eV}$ [17] získáváme hodnotu přibližně $k_S \doteq 435$.



Obr. 1: Srovnání srážkových frekvencí pro měď (ν_{SH} – Spitzer-Härmova aproximace, $\nu_{el-phonon}$ – elektron-fononová srážková frekvence, ν – harmonický průměr ν_{SH} a $\nu_{el-phonon}$, v_e/r_0 – omezující kritérium).

Tento model resp. převzatý kód absorpce laseru se celkově osvědčil již v Bakalářské práci pro simulace ablace hliníku, ale v simulacích s měděným terčem místy hrubě podhodnocoval absorpci, což bylo způsobeno fixní hodnotou konstanty k_S v kódu.

Opravou kódu a s použitím vypočítané hodnoty pro měď pak byly prováděny všechny výpočty uvedené v této práci.

Za zmínku však stojí praktický fyzikální problém při simulacích s tímto modelem, který spočívá v samozesilující se absorpci laserového záření při ablaci. To je způsobeno rostoucí závislostí srážkové frekvence na teplotě. Modul relativní permitivity (2) totiž roste se srážkovou frekvencí a tím i teplotou, ale podle (9) bude klesat odrazivost terče, takže do terče pronikne větší podíl intenzity a terč jej bude absorbovat. Tím jsme ovšem dospěli k nestabilnímu vývoji, protože absorpce povede opět k ohřevu a zvyšování teploty. Toto vede k rychlému ohřevu terče, ale také tímto mechanismem pak mohou v simulaci narůstat šířící se poruchy. Z těchto důvodů je potřeba v simulacích opatrně volit dostatečně jemnou výpočetní síť v oblasti absorpce.

1.2 Algoritmus mapování na pomocnou výpočetní síť

Pro použití 1D absorpčního modelu bylo nutné vyvinout mapovací algoritmus, který v podstatě vhodným způsobem interpoluje veličiny lagrangeovské sítě na pomocnou obdélníkovou síť. Celý proces mapování se skládá z několika částí, které budou popsány v následujících podkapitolách, přičemž je na závěr v kapitole 1.2.5 uvedena ukázková/testovací úloha demonstrující funkčnost metody a v kapitole 1.2.6 konkrétní aplikace algoritmu na absorpci laseru. Samotnému algoritmu předchází postup generování pomocné výpočetní sítě popsany v první podkapitole. Obecně je však algoritmus nezávislý na volbě sítě, ale pouze vyžaduje, aby:

1. pomocná výpočetní síť překrývala původní síť,
2. byla obdélníková
3. a také aby v každé buňce pomocné sítě ležel nanejvýš jeden uzel sítě původní.

Poslední bod může být ovšem obtížné bezpečně splnit, takže algoritmus ověřuje platnost tohoto předpokladu.

Na základě těchto předpokladů byl vytvořen efektivní algoritmus mapování, který je navíc vhodný pro paralelizaci, která pak byla provedena pro *symetrický multiprocessing* na CPU v OpenMP® [18] a též pro *GPGPU* na grafických kartách NVIDIA® v CUDA® [19]. Zrychlení $S = T_s/T_p$ (T_s čas běhu sériového kódu, T_p čas běhu paralelního kódu) dosahovalo u čtyř-jádrového procesoru Intel Core i7 s Hyper-Threadingem (2 vlákna na jedno fyzické jádro) až $S \lesssim 1.9$. U grafické karty NVIDIA GTX950 bylo zrychlení v rozsahu $2 \lesssim S \lesssim 3$ v závislosti na úloze, konfiguraci atd.

Samotným mapováním máme namysli přepočítání objemových hustot aditivních veličin z buněk jedné konečné sítě na jinou tak, aby opět síťová funkce aproximovala spojitou veličinu, v tomto případě za předpokladu aproximace po částech konstantními funkcemi (střední hodnotou přes objem). Algoritmus mapování je čistě *geometrický* a je tedy založen na určení všech průsečíků hran obou sítí. Můžeme proto přesně dodržet zvolenou aproximaci, takže je postup zcela konzervativní z hlediska veličin (až na zaokrouhlovací chyby apod.). Zároveň jej můžeme označit za *globální*, protože výpočetní sítě jsou navzájem nezávislé a liší se tak od lokálních algoritmů mapování, které naopak

předpokládají jen malé vzájemné posunutí jinak shodných sítí, jako je tomu například v ALE kódech včetně používaného simulačního kódu PALE2 [9]. Celkově algoritmus poskytuje vysokou přesnost a flexibilitu mapování [20], ale to je kompenzováno vyššími výpočetními nároky, které zde ovšem snižujeme za efektivního použití všech řečených předpokladů. Geometrii problému umožňuje algoritmus použít kartézskou a nebo cylindrickou (směr dopadu laseru ovšem musí být v axiálním směru).

Pro odvození zavedme síť A a B, kde síť A odpovídá původní lagrangeovské síti a síť B pomocné obdélníkové síti. Pokud označíme $\varphi_{i,j}^A$, $\varphi_{i,j}^B$ hustotu veličiny na síti A a B v buňce (i, j) odvozené od spojitě hustoty veličiny φ a $V_{i,j}^A$, $V_{i,j}^B$ objemy buněk síti A a B v buňce (i, j) (pro zjednodušení zápisu je objem míněn dle kontextu množinově i číselně tj. $V_{i,j}^\alpha = \int_{V_{i,j}^\alpha} dV$). Pak vypočítáme $\varphi_{i,j}^A$ z $\varphi_{i,j}^B$ jako:

$$\begin{aligned} \varphi_{i,j}^A &\approx \frac{1}{V_{i,j}^A} \int_{V_{i,j}^A} \varphi dV = \frac{1}{V_{i,j}^A} \int_{\bigcup_{k,l} V_{k,l}^B \cap V_{i,j}^A} \varphi dV = \frac{1}{V_{i,j}^A} \sum_{k,l} \int_{V_{k,l}^B \cap V_{i,j}^A} \varphi dV \approx \\ &\approx \frac{1}{V_{i,j}^A} \sum_{k,l} \varphi_{k,l}^B \int_{V_{k,l}^B \cap V_{i,j}^A} dV = \frac{1}{V_{i,j}^A} \sum_{k,l} \varphi_{k,l}^B V_{i,j,k,l}^{A \cap B}, \quad (10) \end{aligned}$$

kde $V_{i,j,k,l}^{A \cap B} = \int_{V_{k,l}^B \cap V_{i,j}^A} dV$ představuje parciální objem výpočetní buňky (i, j) na síti A společný s buňkou (k, l) sítě B. Určení těchto parciálních objemů nezávislých na mapované veličině je cílem algoritmu, kdy libovolná přípustná veličina je pak mapována pouze výpočtem uvedené sumy.

1.2.1 Generování pomocné výpočetní sítě

Před prvním krokem celkového algoritmu probíhá vygenerování pomocné výpočetní sítě, která podle předpokladů uvedených výše musí pokrývat původní síť, být obdélníková a do buňky pomocné sítě může spadat maximálně jeden uzel původní sítě. Zaručení těchto předpokladů při generování pomocné sítě je samo o sobě náročnou úlohou, ale vzhledem k tomu, že je žádoucí provádět absorpci laseru na hustší výpočetní síti, není na závadu, že pomocná síť nebude minimalizovat počet buněk. Splnění tedy bude pouze 1. a 2. předpoklad, zatímco 3. teoreticky zajištěn není, ale vzhledem k vyšší hustotě sítě je prakticky velmi pravděpodobné, že splnění bude a vzhledem k tomu, že následující fáze algoritmu je schopna porušení tohoto předpokladu rozpoznat, nehrozí riziko nedefinovaného chování.

Nejprve jsou seřazeny souřadnice všech uzlů původní výpočetní sítě podle každé souřadné osy zvlášť. S přihlédnutím k tomu, že následující krok je průměrování souřadnic přes průměrovací okno nastavitelné délky, není nutné řadit souřadnice pod úroveň těchto průměrovacích oken. Byl proto s výhodou použit řadící algoritmus rekursivního *rychlého řazení* (Quicksort) modifikovaný tak, že ukončovací kritérium obsahuje navíc podmínku, že první a poslední řazený prvek se nacházejí ve stejném průměrovacím okně. Poté provedeme vlastní průměrování v těchto oknech o délkách N_x^{avg} , N_y^{avg} a přitom si také uložíme celkově nejmenší a největší souřadnici. Pokud x_i^{sort} a y_j^{sort} jsou seřazené souřadnice uzlů s indexy $1 \dots N_x + 1$ resp. $N_y + 1$, kde N_x a N_y jsou počty výpočetních buněk v x a y (pro jednoduchost předpokládejme dělitelnost počtu

uzlů N_x^{avg} a N_y^{avg}), pak průměry přes průměrovací okna a mezní souřadnice (x_0^{avg} a $x_{(N_x+1)/N_x^{avg}+1}^{avg}$) jsou v x (a analogicky v y):

$$\begin{aligned}
x_0^{avg} &= \min_{j=1 \dots N_x^{avg}} x_j^{sort} , \\
x_i^{avg} &= \left(\sum_{j=(i-1)N_x^{avg}+1}^{iN_x^{avg}+1} x_j^{sort} \right) / N_x^{avg} \quad \text{pro } i \in \{1 \dots (N_x + 1)/N_x^{avg}\} , \\
x_{(N_x+1)/N_x^{avg}+1}^{avg} &= \max_{j=N_x - N_x^{avg} + 2 \dots N_x + 1} x_j^{sort} .
\end{aligned} \tag{11}$$

V druhém kroku algoritmus nabízí dvě možné strategie označené jako „klasická“ a „duální“. Při „klasické“ strategii (Obr. 2a) použijeme pro další postup vypočítané průměry x_i^{avg} , y_j^{avg} a přitom první a poslední nahradíme uloženým minimem a maximumem:

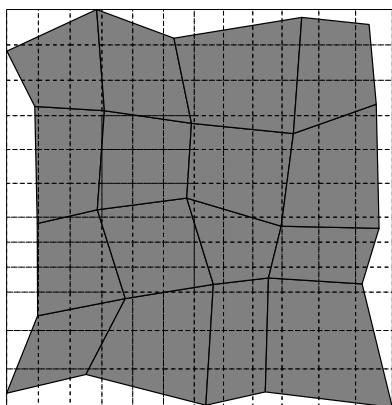
$$\begin{aligned}
x_1^{klas} &= x_0^{avg} , \\
x_i^{klas} &= x_i^{avg} \quad \text{pro } i \in \{2 \dots (N_x + 1)/N_x^{avg} - 1\} , \\
x_{(N_x+1)/N_x^{avg}+1}^{klas} &= x_{(N_x+1)/N_x^{avg}+1}^{avg} .
\end{aligned} \tag{12}$$

Pokud je ovšem velký rozdíl mezi extrémem a nahrazovaným průměrem, mohlo by dojít k velkému zředění sítě například na čele plazmové plumy (viz. kapitola 4), což by mohlo mít velmi negativní vliv na přesnost simulace. Z tohoto důvodu byla vytvořena i „duální“ strategie (Obr. 2b), při které se zprůměrují každé dva po sobě jdoucí průměry z předešlého kroku:

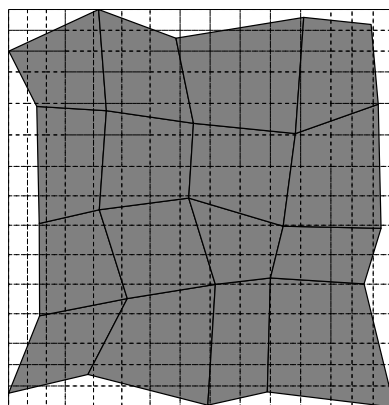
$$\begin{aligned}
x_1^{dual} &= x_0^{avg} , \\
x_i^{dual} &= (x_{i-1}^{avg} + x_i^{avg})/2 \quad \text{pro } i \in \{2 \dots (N_x + 1)/N_x^{avg}\} , \\
x_{(N_x+1)/N_x^{avg}+1}^{dual} &= x_{(N_x+1)/N_x^{avg}+1}^{avg} .
\end{aligned} \tag{13}$$

Je-li však síť velmi málo deformovaná, pak naopak touto strategií nadměrně zhušťujeme síť. Vzhledem k uvedenému se používá „duální“ strategie pro podélný směr (vůči paprskům laseru) a „klasická“ pro příčný směr.

Prostřednictvím jedné či druhé strategie získáme vektor souřadnic, ve kterém se mohou, zejména při použití malých průměrovacích oken, vyskytovat duplicitní nebo velmi blízké hodnoty. Musíme proto tyto souřadnice vyfiltrovat kritériem na minimální povolenou vzdálenost $(x_{i+1}^{klas/dual} - x_i^{klas/dual}) > \epsilon^{ref} (x_{(N_x+1)/N_x^{avg}+1}^{avg} - x_0^{avg})$, která je odvozena od celkové velikosti výpočetní sítě násobnou konstantou ϵ^{ref} (používaná hodnota byla $\epsilon^{ref} = 1.0 \cdot 10^{-6}$). Dále je nutné navýšit maxima v obou souřadných osách, protože zbytek algoritmu považuje za pomocné výpočetní buňky zdola uzavřené a shora otevřené intervaly mezi uzly (viz. dále), takže by maximální prvek již nespadal do žádné z pomocných buněk. K tomuto účelu slouží další konstanta, která udává poměr mezi přidaným inkrementem a velikostí poslední (tj. u uzlu s nejvyšší souřadnicí) buňky (nastavena byla na $1.0 \cdot 10^{-4}$). Protože by mohla takto vzniklá síť být velmi nehomogenní, provádíme též laplaceovské vyhlazení sítě. Pokud jsou $x_i^{klas/dual}$ získané



(a) „klasická“ strategie



(b) „duální“ strategie

Obr. 2: Porovnání obou strategií generování pomocné výpočetní sítě při nastavení trojnásobného zjemnění bez vyhlazení (plně původní síť, čárkovaně pomocná síť).

polohy, pak vyhlazené polohy (bez okrajových prvků) budou $\tilde{x}_i^{klas/dual} = (x_{i-1}^{klas/dual} + 2x_i^{klas/dual} + x_{i+1}^{klas/dual})/4$. Nakonec ekvidistantně rozložíme rovnoměrně stanovený počet řádků/sloupců pomocné výpočetní sítě mezi získané souřadnice.

1.2.2 Spárování výpočetních uzlů s pomocnými buňkami

Prvním krokem algoritmu je spárování výpočetních uzlů původní sítě s výpočetními buňkami pomocné sítě. Tato část algoritmu je navržena obecněji, takže nevyžaduje druhý předpoklad na maximálně jeden uzel původní sítě v buňce sítě pomocné, ale dokáže porušení tohoto předpokladu detekovat a nedovolit další běh algoritmu.

Nejprve je iterací přes uzly původní sítě nalezena pro každý uzel příslušná buňka pomocné sítě, do které spadá. Jelikož platí předpoklad na pokrytí původní sítě pomocnou sítí (a konečnost sítí), musí takováto buňka existovat. Pokud tomu tak není, i v tomto případě kód toto rozpozná a navrátí chybový kód. Prohledávání vzhledem k tomu, že pomocná síť je obdélníková (buňka je kartézským součinem zdola uzavřených a shora otevřených intervalů souřadnic), lze provádět nezávisle podél každé ze souřadných os zvlášť. Nalezené indexy pomocné buňky jsou uloženy do struktury příslušné uzlu původní sítě a je navýšeno počítadlo počtu uzlů původní sítě v buňce pomocné sítě. Jako počáteční odhad pro prohledávání je použit přepočtení indexu uzlu na pomocnou síť násobením poměrem počtu uzlů pomocné sítě vůči uzlům původní sítě (při stejném lineárním indexování). Celou iteraci můžeme provádět paralelně a inkrementaci počítadla separovat, aby nedocházelo ke kolizím, a nebo nahradit *atomickou operací* pro inkrementaci. Nicméně se neukázal zřetelný přínos paralelizace na CPU v této části, takže kód je zde prováděn sériově. Na moderních GPU naopak využijeme efektivní implementace atomických operací [19].

Následně alokujeme pole potřebných struktur pomocné sítě pro uložení indexů uzlů původní sítě a distribuujeme je mezi pomocné buňky podle výše zmíněných po-

čítadel. V paralelizovaném kódu (opět pouze GPU) provedeme *kumulativní součet* počítadel, čímž určíme přímo indexy uvnitř pole struktur pro každou pomocnou buňku. Počítadla poté vynulujeme.

Dále provedeme inverzní přiřazení, tedy tak, aby pomocné buňky nesly informace o uzlech původní sítě v nich obsažených. Provedeme proto (paralelně na GPU) iteraci přes uzly původní sítě a v buňce pomocné sítě, jejíž indexy již máme uložené, (atomicky) inkrementujeme počítadlo a z jeho hodnoty určíme index struktury pro uložení indexů uzlu, kterou naplníme.

Pokud některé z počítadel nese hodnotu větší hodnotu než jedna, další kód již vykonávat nebudeme. V opačném případě pokračujeme v algoritmu podle další kapitoly.

1.2.3 Nalezení průsečíků

Druhým krokem algoritmu je hledání průsečíků hran obou sítí. Nejprve určíme jejich počet, který je díky tomu, že je pomocná síť obdélníková, dán pro hrany původní sítě jejich *manhattanovskou vzdáleností* v lineárních indexech buněk pomocné sítě (pro hranu s polohou počátečního uzlu (\bar{x}_1, \bar{y}_1) a koncového (\bar{x}_2, \bar{y}_2) je rovna $|\bar{x}_1 - \bar{x}_2| + |\bar{y}_1 - \bar{y}_2|$). Můžeme pak alokovat potřebné struktury a distribuovat je hranám původní sítě podobně jako v minulé podkapitole.

Následně procházíme paralelně jednotlivé hrany původní sítě a hledáme jejich průsečíky s hranami pomocné sítě, přičemž nalezené body ukládáme pouze do struktur původní sítě, abychom zabránili kolizím. Při samotném hledání průsečíků postupujeme tak, že si nejprve určíme zda-li je hrana spíše horizontální ($|\Delta\bar{x}| \geq |\Delta\bar{y}|$; $\Delta\bar{x} = \bar{x}_2 - \bar{x}_1$ a $\Delta\bar{y} = \bar{y}_2 - \bar{y}_1$) či vertikální ($|\Delta\bar{x}| < |\Delta\bar{y}|$). Toto má význam jednak aby při dalším výpočtu nedocházelo k velkým numerickým chybám, ale zároveň nemohla nastat situace vedoucí k dělení nulou při výpočtu jejich směrnice.

Poté procházíme buňky pomocné sítě od jednoho uzlu hrany k druhému, přičemž indexy těchto buněk již máme z minulého kroku. Algoritmus je v pseudokódu uveden výše (Alg. 1). Přejít z jedné buňky do další probíhá tak, že podle rozdílu souřadnic rozhodneme, do kterého kvadrantu hrana směřuje a podle toho zvolíme obvodový uzel buňky pomocné sítě v daném kvadrantu (bráno relativně vůči středu buňky). Zbývá pak rozhodnout, jestli hrana původní sítě protíná svislou a nebo horizontální hranu vycházející z tohoto uzlu. Pokud je hrana původní sítě spíše horizontální, dopočítáme polohu na hraně $y_{hrana} = (x_{uzel} - \bar{x}_1)\Delta\bar{y}/\Delta\bar{y} + \bar{y}_1$, kde (x_{uzel}, y_{uzel}) představuje polohu tohoto uzlu. Porovnáním s y_{uzel} rozhodneme, zdali se jedná o hledaný průsečík v tomto případě na svislé hraně a nebo leží na vodorovné hraně a musíme postupovat opačným výpočtem $x_{hrana} = (y_{uzel} - \bar{y}_1)\Delta\bar{x}/\Delta\bar{y} + \bar{x}_1$. Když je hrana spíše vertikální, celý postup je obrácený. Poté polohu průsečíku uložíme a přejdeme do sousední buňky pomocné sítě v daném směru.

Na GPU jsou paralelně kromě výpočtu průsečíků také za pomoci atomických operací navyšována počítadla průsečíků hran pomocné sítě, ale na CPU tato část běží odděleně sériově. Inverzi přiřazení provádíme obdobně jako v minulé kapitole, ale navíc další část algoritmu vyžaduje seřazení průsečíků podle souřadnic na hranách pomocné sítě. Vzhledem k tomu, že předpokládáme hustší pomocnou síť, průsečíků na jedné

hraně obvykle bude velmi málo, takže jsou vhodné řadicí algoritmy s minimálními nároky, byť s vyšší asymptotickou složitostí. Z těchto důvodů je použito na GPU *Shellovo řazení* a na CPU *řazení vkládáním* přímo při inverzi přiřazení, tedy sériově, protože opět zrychlení bylo při paralelizaci téměř neprokazatelné.

Alg. 1 Výpočet průsečíku hrany původní sítě s hranou sítě pomocné.

```

if  $(\Delta\bar{x} > 0) \vee (\Delta\bar{x} = 0 \wedge \Delta\bar{y} \geq 0)$  then
     $\Delta i_x \leftarrow +1$ 
else
     $\Delta i_x \leftarrow -1$ 
end if
if  $(\Delta\bar{y} > 0) \vee (\Delta\bar{y} = 0 \wedge \Delta\bar{x} \leq 0)$  then
     $\Delta i_y \leftarrow +1$ 
else
     $\Delta i_y \leftarrow -1$ 
end if
 $(x_{uzel}, y_{uzel}) \leftarrow POLOHA\_UZLU\_RELATIVNE(\Delta i_x, \Delta i_y)$ 
if  $|\Delta\bar{x}| \geq |\Delta\bar{y}|$  then
     $y_{hrana} \leftarrow (x_{uzel} - \bar{x}_1)\Delta\bar{y}/\Delta\bar{x} + \bar{y}_1$ 
    if  $(\Delta i_y > 0 \wedge y_{hrana} < y_{uzel}) \vee (\Delta i_y < 0 \wedge y_{hrana} \geq y_{uzel})$  then
         $x_{hrana} \leftarrow x_{uzel}$ 
    else
         $y_{hrana} \leftarrow y_{uzel}$ 
         $x_{hrana} \leftarrow (y_{uzel} - \bar{y}_1)\Delta\bar{x}/\Delta\bar{y} + \bar{x}_1$ 
    end if
else
     $x_{hrana} \leftarrow (y_{uzel} - \bar{y}_1)\Delta\bar{x}/\Delta\bar{y} + \bar{x}_1$ 
    if  $(\Delta i_x > 0 \wedge x_{hrana} < x_{uzel}) \vee (\Delta i_x < 0 \wedge x_{hrana} \geq x_{uzel})$  then
         $y_{hrana} \leftarrow y_{uzel}$ 
    else
         $x_{hrana} \leftarrow x_{uzel}$ 
         $y_{hrana} \leftarrow (x_{uzel} - \bar{x}_1)\Delta\bar{y}/\Delta\bar{x} + \bar{y}_1$ 
    end if
end if

```

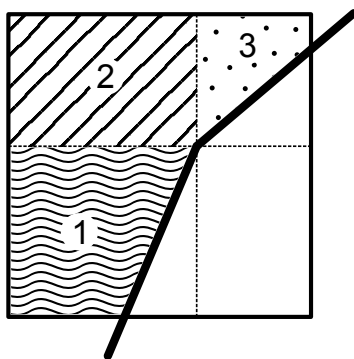
1.2.4 Výpočet parciálních objemů

Posledním krokem vlastního algoritmu je výpočet parciálních objemů vyskytujících se ve vztahu (10). Nejprve určíme počet potřebných struktur pro parciální objemy buněk pomocné sítě. To provedeme (paralelní na GPU) iterací přes hrany původní sítě (abychom zbytečně neprocházeli prázdné buňky pomocné sítě) a (atomicky) inkrementujeme počítadla v každé buňce pomocné sítě, kterou hrana prochází. Lze nahlédnout, že počet parciálních objemů v každé buňce je menší nebo roven počtu hran jí procházejících plus jedna. Poté alokujeme tyto struktury a distribuujeme je podobně jako v minulých kapitolách.

Dále chceme aplikovat tentýž postup pro buňky původní sítě, ale zde je na rozdíl od předešlých podkapitol problém v tom, že nemáme apriorní znalost počtu parciálních objemů v ní obsažených. Bylo by možné tento počet určit algoritmicky procházením hran podobně jako tomu bude v dalším textu, ale vzhledem k optimalizaci pro maximální rychlost algoritmu na úkor paměti, použijeme pouze hrubý nadhodnocující odhad. Tím je v tomto případě obsah (ve smyslu lineárních indexů pomocných buněk) minimálního obdélníku ohraničujícího buňku původní sítě.

Následuje výpočet parciálních objemů buněk pomocné sítě, kdy při iteraci přes buňku pomocné sítě může být kód zcela paralelizován díky nezávislosti výpočtů. Nejprve musíme odlišit komplikovanější případ, kdy se v buňce nachází uzel původní sítě, od toho, kdy buňkou procházejí pouze hrany původní sítě.

Při první variantě se zabýváme speciálně pouze hranami vycházejícími z uzlu původní sítě a jejich pomocnými parciálními objemy, protože finální výpočet parciálních objemů musí probíhat společně s ostatními hranami (ale s použitím již určených pomocných parciálních objemů). Spočítáme si „levý“ pomocný objem vůči hraně v jejím kvadrantu (vůči uzlu pomocné sítě), který je roven objemu průniku vlastní buňky pomocné sítě s levou polorovinou (tj. po levé normále) hrany (orientované ve směru k obsaženému uzlu) a s kvadrantem v němž se hrana vůči uzlu nachází (Obr. 3). „Pravý“ pomocný objem (tj. po pravé normále hrany) je pak doplňkem do objemu kvadrantu (v průniku se samotnou buňkou). Procházíme následně hrany proti směru hodinových ručiček (pouze konvence) a pomocný parciální objem pro buňku původní sítě uzavřené mezi dvěma po sobě jdoucími hranami je roven součtu „pravého“ objemu první hrany, „levého“ objemu druhé hrany a součtu objemů kvadrantů, které jsme přeskočili při přechodu od kvadrantu první hrany ke kvadrantu druhé. Pokud se obě hrany nacházejí ve stejném kvadrantu součet objemů přeskočených kvadrantů položíme roven minus objemu kvadrantu, ve kterém se nacházejí, jestliže jsou v něm v sousledném pořadí, čímž de facto celkově počítáme objem kvadrantu minus „levý“ objem první hrany minus „pravý“ objem druhé hrany, tedy skutečně pomocný parciální objem sevřené buňky. Pokud by byly v kvadrantu v opačném pořadí, znamená to přeskočení všech tří zbylých kvadrantů, takže můžeme sečíst objemy těchto kvadrantů a nebo použít výpočet jako v prvním případě a dopočítat doplněk do objemu buňky pomocné sítě.

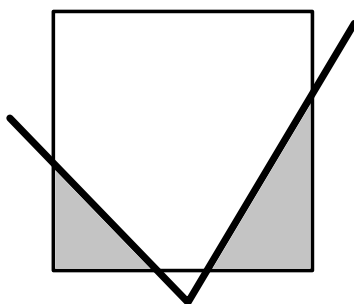


Obr. 3: Pomocné objemy v buňce pomocné sítě pro nekonvexní buňku původní sítě (1 – „levý“ pomocný objem, 2 – přeskočený kvadrant, 3 – „pravý“ pomocný objem).

Druhý případ nastává, když buňkou pomocné sítě prochází pouze hrany původní

sítě a nebo pro uzel v ní obsažený jsme již podle předešlého textu vypočítali pomocné objemy. Procházíme průsečíky hran proti směru hodinových ručiček (pouze konvence), kde využijeme toho, že v minulé podkapitole jsme seřadili průsečíky podle souřadnic. Pro každý průsečík najdeme po příslušné hraně druhý, ležící na jiné hraně buňky, nebo koncový uzel hrany, pokud leží v dané buňce. Potom musíme rozhodnout, jestli jsme už buňku původní sítě nalevo a napravo od hrany (při orientaci od daného průsečíku po vnitřní normále) už navštívili. Pro hranu nezakončenou uzlem uvnitř buňky je tomu tak, když hrana směřuje na již navštívenou obvodovou hranu buňky pomocné sítě (až na výjimečné případy, viz. dále). Pro hranu zakončenou uzlem uvnitř buňky (dále jen nodální) si vedeme za tímto účelem tabulku, které z buněk byly již navštíveny. Pokud jsme buňku nalevo zatím nenavštívili a hrana není nodální, vypočítáme „levý“ a „pravý“ pomocný objem stejně jako v minulém odstavci, ale namísto kvadrantu použijeme objem celé buňky. V případě, že daná hrana je nodální, namísto toho načteme do „levého“ a „pravého“ objemu příslušné již určené pomocné parciální objemy z minulého odstavce. Poté už můžeme vypočítat (pomocný) parciální objem buňky nalevo též podobně jako v minulém odstavci, tedy jako součet „pravého“ objemu předchozí hrany a „levého“ objemu současné hrany minus objem celé buňky. Poté (pomocný) parciální objem uložíme a nebo v případě, že už je uložený, jej nahradíme, čímž postupně hodnotu zpřesňujeme. Pomocný parciální objem buňky napravo nastavíme na „pravý“ pomocný objem, pokud nebyla tato buňka zatím navštívena.

Může ovšem nastat situace, kdy se jeví buňka podle uvedených kritérií jako nenavštívená, ale přesto ve skutečnosti již navštívena byla, ale je natolik nekonvexní, že průnik s procházenou buňkou pomocné sítě má podobu dvou vzájemně nesouvislých oblastí (Obr. 4). Tento případ vyřešíme tím, že v okamžiku ukládání pomocného objemu buňky napravo nebudeme případnou již uloženou hodnotu přepisovat (jako tomu bylo u buňky nalevo), ale hodnoty sečteme a nastavíme na výsledek i „pravý“ pomocný objem. Tím, že nejprve bude druhá část průniku vystupovat jako buňka napravo (díky průchodu proti směru hodinových ručiček), dojde k sečtení objemů a následnými případnými výpočty, kdy bude vystupovat jako buňka nalevo, se bude už pouze zpřesňovat výsledek.



Obr. 4: Průnik (šedivě) buňky pomocné sítě s nekonvexní buňkou původní sítě v podobě dvou vzájemně nesouvislých oblastí.

Celkově jsme tímto postupem určili všechny netriviální parciální objemy uvnitř buněk pomocné sítě. Jediný vzorec pro výpočet pro výpočet integrálu objemu, který jsme potřebovali, je pro „levý“ (popř. „pravý“) pomocný objem, což je mnohoúhelník,

vytvořený průnikem hrany, ke které je sestrojen, se čtvercem (v předchozím textu s kvadrantem a nebo celou buňkou pomocné sítě). Můžeme jej složit z trojúhelníku a případně několika obdélníků (Obr. 5). Jediné parametry, které pro výpočet objemu potřebujeme, jsou polohy průsečíků hrany $((\bar{x}_1, \bar{y}_1), (\bar{x}_2, \bar{y}_2))$ se čtvercem a poloha uzlu po levé popř. pravé normále (ve smyslu uvedeném výše), k němuž je prováděna integrace $((\bar{x}_{uzel}, \bar{y}_{uzel}))$. Objem v kartézské geometrii V^\square je pak (dolní indexy objemů odpovídají elementům v obrázku 5):

$$V_1^\square = \min(|\bar{x}_1 - \bar{x}_{uzel}|, |\bar{x}_2 - \bar{x}_{uzel}|) \max(|\bar{y}_1 - \bar{y}_{uzel}|, |\bar{y}_2 - \bar{y}_{uzel}|) , \quad (14)$$

$$V_2^\square = \max(|\bar{x}_1 - \bar{x}_{uzel}|, |\bar{x}_2 - \bar{x}_{uzel}|) \min(|\bar{y}_1 - \bar{y}_{uzel}|, |\bar{y}_2 - \bar{y}_{uzel}|) , \quad (15)$$

$$V_3^\square = \min(|\bar{x}_1 - \bar{x}_{uzel}|, |\bar{x}_2 - \bar{x}_{uzel}|) \min(|\bar{y}_1 - \bar{y}_{uzel}|, |\bar{y}_2 - \bar{y}_{uzel}|) , \quad (16)$$

$$V_4^\square = \frac{1}{2} |\bar{x}_1 - \bar{x}_2| |\bar{y}_1 - \bar{y}_2| , \quad (17)$$

$$V^\square = V_1^\square + V_2^\square - V_3^\square + V_4^\square . \quad (18)$$

V cylindrické geometrii (x je radiální složkou) nemusíme započítávat násobnou konstantu π , protože podle (10) se násobné konstanty pokrátí. Výpočet objemu V° je poté:

$$V_1^\circ = \min(|\bar{x}_1^2 - \bar{x}_{uzel}^2|, |\bar{x}_2^2 - \bar{x}_{uzel}^2|) \max(|\bar{y}_1 - \bar{y}_{uzel}|, |\bar{y}_2 - \bar{y}_{uzel}|) , \quad (19)$$

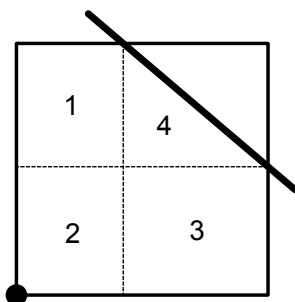
$$V_2^\circ = \max(|\bar{x}_1^2 - \bar{x}_{uzel}^2|, |\bar{x}_2^2 - \bar{x}_{uzel}^2|) \min(|\bar{y}_1 - \bar{y}_{uzel}|, |\bar{y}_2 - \bar{y}_{uzel}|) , \quad (20)$$

$$V_3^\circ = \min(|\bar{x}_1^2 - \bar{x}_{uzel}^2|, |\bar{x}_2^2 - \bar{x}_{uzel}^2|) \min(|\bar{y}_1 - \bar{y}_{uzel}|, |\bar{y}_2 - \bar{y}_{uzel}|) , \quad (21)$$

$$V_4^\circ = \frac{1}{3} |\bar{x}_1 - \bar{x}_2| |\bar{y}_1 - \bar{y}_2| (\bar{x}_1 + \bar{x}_2 + \bar{x}_{vnitřní}) , \quad (22)$$

$$V^\circ = V_1^\circ + V_2^\circ - V_3^\circ + V_4^\circ , \quad (23)$$

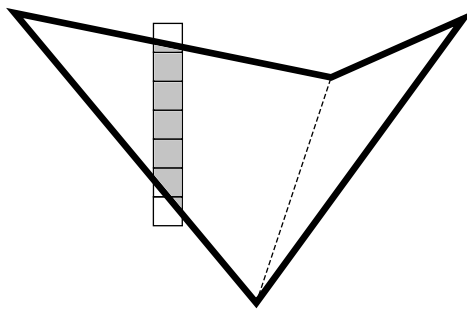
kde $\bar{x}_{vnitřní}$ je rovno \bar{x}_1 nebo \bar{x}_2 podle toho, který průsečík je blíže v radiální ose k uzlu, vůči kterému provádíme integraci.



Obr. 5: Pomocný „levý“ popř. „pravý“ objem sloužený z jednotlivých elementů (uzel, vůči němuž je prováděna integrace, je zvýrazněn).

Poslední částí algoritmu je inverze přiřazení, tak aby buňky původní sítě měly též přiřazeny parciální objemy, ale navíc také nastavení parciálních objemů buněk po-

mocné sítě, které jsou pokryté jedinou buňkou sítě původní, protože těmi jsme se v předešlém textu zatím nezabývali. Provádíme proto (paralelní) iteraci přes buňky původní sítě. Vzhledem k tomu, že předpokládáme, že buňky původní sítě mohou být i nekonvexní, je prvním krokem nalezení uzlu, jehož protější (tj. nespojený hranou) uzel je s ním spojitelný úsečkou (úhlopříčkou) uvnitř buňky (Obr. 6). Tuto úsečku zkonstruujeme a určíme její průsečíky s hranami pomocné sítě pomocí algoritmu z předešlé podkapitoly. Touto úsečkou jsme rozdělili buňku na dva trojúhelníky, které jsou už konvexní (jedná se o simplex ve 2D geometrii). Každý z nich pak procházíme zvlášť a hledáme v něm obsažené buňky pomocné sítě. Rozdíl mezi trojúhelníky však je, že u jednoho budeme vyplňovat včetně sestrojité úsečky a u druhého nikoliv, tedy tak, aby každá buňka byla navštívena pouze jednou. Samotné procházení probíhá od uzlu s nejnižší souřadnicí v ose x (pouze konvence) až k nejvyšší. S výhodou využijeme toho, že nalezené průsečíky obvodových hran jsou seřazeny, a procházíme tedy průsečíky na hranách postupně. Z indexů buněk pomocné sítě, ve kterých se průsečíky nacházejí, sestrojíme interval lineárních indexů v ose y buněk pomocné sítě mezi těmito hranami. Tento interval musí zahrnovat i rasterizaci dané hrany (Obr. 6) kromě případu, kdy se jedná o zmíněnou úhlopříčku (viz. výše). Tento interval pak procházíme a pokud daná buňka pomocné sítě nemá přiřazen žádný parciální objem, znamená to, že je buňka celá pokryta buňkou původní sítě, takže doplníme toto přiřazení. V každém případě však provedeme inverzi přiřazení, tedy prohledáme přiřazené parciální objemy této navštívené buňky pomocné sítě a parciální objem příslušný dané buňce původní sítě přeneseme též na tuto buňku původní sítě. Vzhledem k tomu, že iterace probíhala právě přes buňky původní sítě, nemůže dojít ke kolizím při zápisu a tato část může probíhat plně paralelizovaně. Rychlost běhu této části je nicméně často omezena propustností přístupu do paměti, což zejména limituje výkon na CPU.

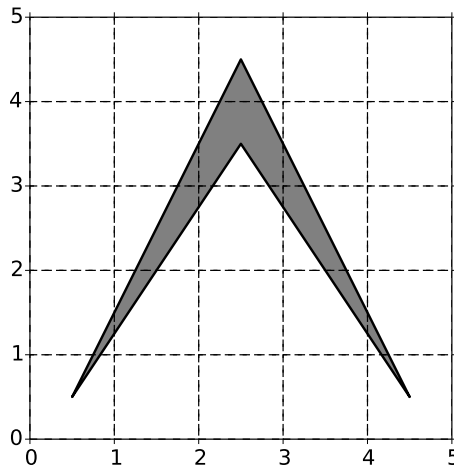


Obr. 6: Rozdělení buňky původní sítě na trojúhelníky a naznačení následné rasterizace.

1.2.5 Testovací úloha

Pro ověření funkčnosti algoritmu posloužilo několik testovacích úloh, ke kterým bylo vypočítáno z jejich geometrie analytické řešení. Všemi algoritmus bez potíží prošel. Zde uvedme jednu z nich, která má dobrý vypovídající charakter, protože analyticky je snadno řešitelná, ale algoritmicky je netriviální a kontroluje tak hned několik aspektů kódu. Původní síť je tvořena jedinou buňkou (Obr. 7), jejíž uzly mají polohu

$(0.5, 0.5)$, $(2.5, 3.5)$, $(4.5, 0.5)$, $(2.5, 4.5)$. Pomocná síť velikosti 5×5 buněk byla ekvidistantní s krokem 1 od 0.0 do 5.0 v obou osách.



Obr. 7: Testovací úloha s nekonvexní buňkou.

Vidíme, že se jedná o nekonvexní buňku (původní síť), která prochází hned několika buňkami pomocné sítě. Ve středu se pak například nachází buňka pomocné sítě, ve které je průnik s nekonvexní buňkou rozdělen na dvě nespojité části, jak bylo rozebíráno jako speciální případ v minulé podkapitole. Pomocná buňka hned nad zmiňovanou dále kombinuje hrany, které jsou zakončeny uzlem uvnitř buňky s hranami, které pouze procházejí skrz, což je další komplikovaný případ.

Analyticky nalezneme objem například rozkladem na dva trojúhelníky a určíme tak, že v kartézské geometrii je objem roven 2.0. Běh kódu vypočítal tento objem, který je součtem parciálních objemů, s odchylkou od analytického řešení $-2.220446 \cdot 10^{-16}$, což je chyba na úrovni strojové přesnosti (pro výpočet byla použita stejně jako ve zbytku simulačního kódu čísla s plovoucí desetinnou čárkou s dvojitou přesností podle standardu IEEE 754 [21]). V cylindrické geometrii je analytický výsledek 10.0 (bez násobné konstanty π , viz. minulé podkapitola) a výsledek vypočítaný programem v tomto případě měl chybu $1.776357 \cdot 10^{-15}$, takže též na úrovni strojové přesnosti. Celkově můžeme shrnout, že kód tímto testem prošel a jeví se jako plně funkční.

1.2.6 Aplikace na absorpci laseru

V minulých podkapitolách byly představeny jednotlivé části algoritmu, které nyní můžeme sloučit dohromady a použít pro vytvoření celkového schématu pro absorpci laseru. Nejprve vygenerujeme pomocnou výpočetní podle kapitoly 1.2.1, přičemž konkrétní parametry ponecháváme nastavitelné a konkrétní hodnoty jsou uvedeny u simulací v kapitole 4. Dále spárujeme výpočetní uzly pomocné sítě s buňkami původní sítě, určíme průsečíky hran a vypočítáme parciální objemy podle kapitol 1.2.2–1.2.4.

Poté můžeme už přejít k samotnému mapování, kdy pro účel absorpce laserového záření jsou mapovány na pomocnou výpočetní síť veličiny: hmotnostní hustota ρ ,

teplota T a ionizace Z . Konkrétně hmotnostní hustotu na pomocné síti B vypočítáme jako:

$$\varrho_{i,j}^B = \left(\sum_{k,l} \varrho_{k,l}^A V_{k,l,i,j}^{A \cap B} \right) / \left(\sum_{k,l} V_{k,l,i,j}^{A \cap B} \right). \quad (24)$$

Na tomto místě připomeňme, že pomocná síť B pokrývá původní síť A, ale opačně tomu tak být nemusí (a obvykle ani není), takže nemůžeme v (24) použít v děliteli objem pomocné buňky $V_{i,j}^B$.

Zbylé veličiny (teplota a ionizace) však nesplňují dříve uvedené předpoklady (kapitola 1.2), takže jsou obě veličiny mapovány v součinu s hmotnostní hustotou, ale i přesto se u součinu $T \cdot \varrho$ dopouštíme chyby, protože se nejedná přesně vzato o aditivní veličinu pro obecnou stavovou rovnici. Pro stavovou rovnici ideálního plynu je situace v pořádku, protože je součin úměrný hustotě vnitřní energie, ale pro jiné stavové rovnice tomu tak být nemusí. Nicméně pokud nepředpokládáme velké gradienty ve veličinách, tak vzhledem k obvykle malé proměnlivosti závislosti hustoty vnitřní energie na teplotě je aproximace dostatečná. Výpočet teploty je tedy proveden následovně:

$$T_{i,j}^B = \frac{1}{\varrho_{i,j}^B} \left(\sum_{k,l} T_{k,l}^A \varrho_{k,l}^A V_{k,l,i,j}^{A \cap B} \right) / \left(\sum_{k,l} V_{k,l,i,j}^{A \cap B} \right) = \left(\sum_{k,l} T_{k,l}^A \varrho_{k,l}^A V_{k,l,i,j}^{A \cap B} \right) / \left(\sum_{k,l} \varrho_{k,l}^A V_{k,l,i,j}^{A \cap B} \right). \quad (25)$$

Vztah pro ionizaci pak zcela analogický.

Tímto máme všechny potřebné veličiny na pomocné výpočetní síti. Vzhledem k tomu, že pomocná síť je obdélníková, pro laser zářící podél jedné ze souřadných os se původně 2D úloha absorpce laseru rozpadá za předpokladu nezávislosti paprsků na oddělené 1D úlohy pro jednotlivé řádky/sloupce sítě. V následujícím kroku proto můžeme použít podle kapitoly 1.1 opravený 1D algoritmus absorpce laseru založený na řešení stacionárních Maxwellových rovnic [10, 11, 12]. Vzhledem k řešené nezávislosti provádíme výpočet paralelně na CPU a výsledkem jsou distribuce divergence intenzity resp. Poyntingova vektoru dopadajících paprsků laseru uvnitř pomocné sítě $(\nabla \cdot \vec{I}^B)_{i,j}$.

Posledním krokem je zpětné mapování divergence, kterým určíme divergenci Poyntingova vektoru na původní lagrangeovské síti $(\nabla \cdot \vec{I}^A)_{i,j}$, jelikož se jedná o objemovou hustotu absorbovaného výkonu, může být veličina mapována přímo:

$$(\nabla \cdot \vec{I}^A)_{i,j} = \frac{1}{V_{i,j}^A} \sum_{k,l} (\nabla \cdot \vec{I}^B)_{k,l} V_{i,j,k,l}^{A \cap B}. \quad (26)$$

Získané hodnoty jsou následně použity v schématu řešení rovnic hydrodynamiky na místě zdrojového členu v rovnici diferenciálního zákona zachování energie (1). Samotná integrace z diskrétní časové hladiny n na $n + 1$ pak probíhá v kódu PALE2 v rámci metody prediktor-korektor [9, 8].

2 Vedení tepla

Pro simulace ablace pevnolátkového terče za nízkých intenzit dopadajícího laserového záření se ukázalo jako klíčový model vedení tepla, který se významnou měrou podílí na energetické bilanci na povrchu terče a ovlivňuje tak vznik plazmatu nad povrchem [1]. Odváděním tepla z povrchu terče při velmi nízkých intenzitách vzniká dokonce tzv. ablační práh [3], kdy již nedochází k odpařování materiálu, ale pouze k ohřevu terče. Další důležitou oblastí je také okolí absorpčního maxima v plazmatu, kde vedení tepla ovlivní výsledný profil rozložení teploty a dá tak vzniknout charakteristické „plazmové švestce“ (angl. plasma plume) [2].

Tato kapitola se tedy zabývá problematikou řešení parabolické rovnice vedení tepla, vycházející z Fourierova zákona, v obecném tvaru:

$$a \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + f, \quad (27)$$

kde $a = \rho(\partial \varepsilon / \partial T)_\rho$, přičemž derivaci ε podle T určíme z konkrétní stavové rovnice, a κ značí koeficient tepelné vodivosti, kterému se budeme podrobně věnovat v druhé podkapitole. Předpokládáme kladnou hodnotu u obou koeficientů a stejnoměrnou omezenost. Funkce f představuje obecný zdrojový člen.

Jak v jednodimenzionálním kódu vyvinutém v rámci Bakalářské práce [8], tak i ve 2D simulačním kódu PALE2 se používá principiálně stejné numerické schéma, které bylo blíže studováno v [22]. Schéma je založeno na metodě konečných diferencí za použití mimetických operátorů podle článku [23]. Mimetickým operátorem je míněn diskrétní operátor, který je zkonstruován po vzoru spojitého a přejímá obvykle i jeho některé užitečné vlastnosti. V tomto případě je výhodou například dobré chování schématu v okolí skokových nespojitostí a celkově dobrá aproximace i na hrubých výpočetních sítích. Vzhledem k řešení rovnice v tepelných tocích (viz. kapitola 2.1.1), je také schéma zcela energeticky konzervativní. Nicméně nedostatkem původního schématu byl první řád konvergence v čase. Odvození schématu za použití mimetických operátorů však umožňuje i konstrukci s jinou časovou diskretizací. V podkapitole 2.1 je tedy odvozeno bezpodmínečně stabilní semi-implicitní numerické schéma, které se od původního implicitního schématu liší druhým řádem konvergence v čase (za předpokladu konstantních koeficientů). Implementováno a testováno bylo v 1D simulačním kódu i 2D kódu PALE2.

Dále byl v rámci této práce vylepšen model koeficientu tepelné vodivosti, který je pro simulace vedení tepla klíčový. Původní model byl nevyhovující zejména v oblasti středních teplot od řádově jednotek eV po stovky eV, za kterou se obvykle podmínky při PLD nedostávají. Nově odvozený model popisuje tuto oblast lépe a je popsán v podkapitole 2.2.

Numerické schéma vedení tepla je v používaných kódech zakompováno použitím *metody rozkladu* (angl. splitting) v rovnici zákona zachování energie (1) [8, 9]. Nejprve je prováděn v obou používaných simulačních kódech výpočet transportní části v rámci lagrangeovské hydrodynamiky společně s absorpcí laserového záření (viz. kapitola 1) a poté teprve výpočet parabolické části, ale stále na stejné časové hladině byt s již novými hodnotami veličin. Podkapitola 2.3 proto pojednává o metodě rozkladu a je

zde demonstrováno na nelineární advekčně-difuzní rovnici, že existují i lepší postupy než je stávající a dává tak návod pro budoucí úpravy či návrh nového simulačního kódu.

2.1 Semi-implicitní numerické schéma

Původní rovnici vedení tepla (27), která představuje parabolickou parciální diferenciální rovnici druhého řádu, můžeme přepsat do tzv. tokového tvaru převedením na soustavu rovnic prvního řádu následujícím způsobem:

$$a \frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{W} + f , \quad (28)$$

$$\vec{W} = -\kappa \nabla T . \quad (29)$$

Okrajovou podmínku použijeme Neumannova typu na hranici simulační oblasti V :

$$-\vec{W} \cdot \vec{n} \Big|_{\partial V} = \psi_W , \quad (30)$$

přičemž \vec{n} označuje vnější normálu a ψ_W hladkou funkci na ∂V , která představuje kolmý tepelný tok přes hranici V . Tu nejčastěji volíme pro adiabatickou okrajovou podmínku rovnu nule.

Provedme nyní časovou diskretizaci (28) a (29) za použití centrální diference:

$$a \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} \nabla \cdot \vec{W}^{n+1} = f^{n+1/2} - \frac{1}{2} \nabla \cdot \vec{W}^n , \quad (31)$$

$$\vec{W}^{n+1} = -\kappa \nabla T^{n+1} , \quad (32)$$

$$-\vec{W}^{n+1} \cdot \vec{n} \Big|_{\partial V} = \psi_W^{n+1} , \quad (33)$$

s označením $f^{n+1/2} = \frac{1}{2} f^{n+1} + \frac{1}{2} f^n$ a Δt je délka časového kroku. Časovou hladinu zde zapisujeme jako horní index u všech veličin kromě koeficientů, u kterých předpokládáme pomalou proměnlivost a budeme je určovat vždy na výchozí časové hladině. Za reálných podmínek tomu tak není, protože koeficient vedení tepla κ je teplotně závislý (viz. další podkapitola), takže je nutné provést vhodnou transformaci rovnic pro odstranění vedoucí mocninné závislosti. Nicméně jak bylo ukázáno v [22], výsledná soustava rovnic je zcela formálně shodná, takže pro jednoduchost provedeme popis pro původní netransformované rovnice (31–33).

Dále zavedme abstraktní operátory, kterými sjednotíme výpočet okrajové podmínky s výpočtem uvnitř výpočetní oblasti na tvar:

$$\frac{1}{2} D \vec{W}^{n+1} + \Omega T^{n+1} = F , \quad (34)$$

$$\vec{W}^{n+1} - G T^{n+1} = 0 , \quad (35)$$

kde $D\vec{W}$ představuje zobecněnou divergenci vektorové funkce \vec{W} a GT zobecněný gradient skalární funkce T . Funkce pravé strany je dána:

$$F = \begin{cases} f^{n+1/2} + \Omega T^n - \frac{1}{2} D\vec{W}^n & \text{na } V \\ \frac{1}{2} \psi_W^{n+1} & \text{na } \partial V \end{cases} . \quad (36)$$

Použité operátory G , D a Ω jsou definovány následovně:

$$GT = -\kappa \nabla T , \quad (37)$$

$$D\vec{W} = \begin{cases} \nabla \cdot \vec{W} & \text{na } V \\ -\vec{W} \cdot \vec{n} & \text{na } \partial V \end{cases} , \quad (38)$$

$$\Omega T = \begin{cases} (a/\Delta t)T & \text{na } V \\ 0 & \text{na } \partial V \end{cases} , \quad (39)$$

Pro korektnost a též další odvození zavedme také Hilbertův prostor H jako zúplnění množiny hladkých skalárních funkcí teploty na uzávěru simulační oblasti V , který má definován skalární součin (pro $u, v \in H$):

$$(u, v)_H = \int_V u v \, dV + \oint_{\partial V} u v \, dS . \quad (40)$$

Obdobně pro vektorové funkce toků tepla definujeme Hilbertův prostor \vec{H} se součinem (pro $\vec{U}, \vec{V} \in \vec{H}$)

$$(\vec{U}, \vec{V})_{\vec{H}} = \int_V \frac{1}{\kappa} \vec{U} \cdot \vec{V} \, dV . \quad (41)$$

Základem metody mimetických operátorů je volba jediného primárního operátoru, který je diskretizován a všechny ostatní (diskrétní) operátory jsou pak odvozeny od něho, takže diskrétní operátory mají některé vzájemné vlastnosti shodné jako spojitě, což se pozitivně projevuje na vlastnostech výsledného schématu. Podle citovaného článku [23] je jako primární operátor zvolena divergence resp. abstraktní operátor D . Zbylé operátory budou odvozeny právě od něho za použití integrální identity vycházející z Gaussovy věty ($\int_V \nabla \cdot \vec{U} \, dV = \oint_{\partial V} \vec{U} \cdot \vec{n} \, dS$) násobením \vec{U} funkcí u :

$$\int_V u (\nabla \cdot \vec{U}) \, dV + \int_V \frac{1}{\kappa} \vec{U} \cdot (\kappa \nabla u) \, dV = \oint_{\partial V} u (\vec{U} \cdot \vec{n}) \, dS . \quad (42)$$

S použitím této identity a definic (37), (38) ihned dostáváme vzájemný vztah:

$$(D\vec{U}, u)_H = (\vec{U}, Gu)_{\vec{H}} . \quad (43)$$

Z něho plyne, že $G = D^*$, tedy G je sdružený operátor k D ve smyslu příslušných skalárních součinů a prostorů.

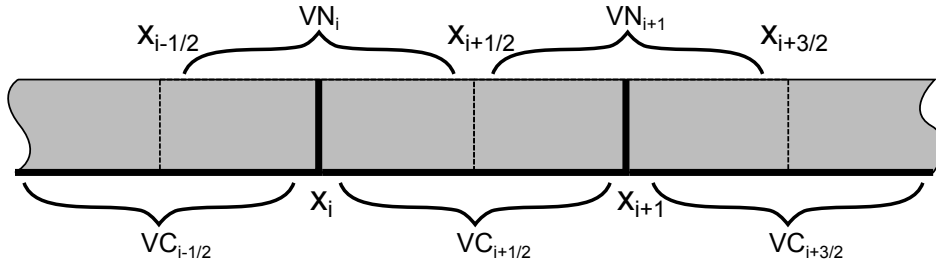
Ze soustavy rovnic (34), (35) eliminujeme teploty uvnitř simulační oblasti, kde existuje inverzní operátor k Ω (Ω je pozitivně definitní):

$$\left(I + \frac{1}{2}G\Omega^{-1}D \right) \vec{W}^{n+1} = G\Omega^{-1}F . \quad (44)$$

Na hranici je vzhledem k použití Neumannovy okrajové podmínky již eliminována teplota v (34) z definice operátoru Ω v (39).

2.1.1 Prostorová diskretizace

Prostorovou diskretizaci provedeme v 1D, ale postup by byl zcela analogický i ve 2D a odvození je uvedeno v původním článku [23]. Podobně jako u ostatních numerických schémat použitých v 1D lagrangeovském kódu a 2D ALE kódu, používáme *střídavou síť* (angl. staggered). To znamená, že některé veličiny aproximujeme síťovými funkcemi na uzlech sítě a jiné v buňkách sítě. Volba diskretizace vychází z odvození *kompatibilního schématu* pro řešení Eulerových rovnic, které bylo provedeno v předešlé práci [8]. Pro účely vedení tepla použijme závěrů, že funkce teploty T a koeficientu vedení tepla κ jsou centrálními veličinami, jejichž indexy budou poločíselné probíhající od $3/2$ do $N_N - 1/2$ ($N_N = N_C + 1$ počet uzlů sítě, N_C počet buněk sítě). Naopak toky tepla \vec{W} budeme považovat za nodální veličiny a jejich indexy budou celočíselné od 1 do N_N . Objem buňky $i + 1/2$ označíme $VC_{i+1/2}$ a objem v *duální síti* příslušný uzlu i pak VN_i (platí $VC_{i+1/2} = 1/2(VN_{i+1} + VN_i)$).



Obr. 8: Střídavá výpočetní síť (x_i jsou polohy výpočetních uzlů a $x_{i+1/2}$ polohy výpočetních buněk).

Nejprve definujme *přirozené* skalární součiny (angl. natural inner product), které budou diskrétní analogií ke skalárním součinům (40) a (41) v tom smyslu, že normy jimi indukované jsou konzistentní (tj. na rovnoměrné síti limitním přechodem kroku sítě k nule jsou si rovny pro danou spojitou funkci a její zúžení na síť). Pro skalární funkce zavádíme diskrétní obdobu spojitého skalárního součinu (40)¹:

$$(u, v)_{HC} = \sum_{i=1}^{N_N-1} u_{i+1/2}v_{i+1/2}VC_{i+1/2} + u_1v_1 + u_Mv_M . \quad (45)$$

¹Vzhledem k použití Neumannovy okrajové podmínky máme explicitně dány toky \vec{W}_1, \vec{W}_{N_N} a teploty T_1, T_{N_N} nevyužijeme na rozdíl od například Newtonovy okrajové podmínky použité v článku, ale pro jednotnost je ponecháváme v odvození.

Podobně pro vektorové funkce analog (41):

$$(\vec{U}, \vec{V})_{HL} = \sum_{i=1}^{N_N-1} \frac{(\vec{U}, \vec{V})_{i+1/2}}{\kappa_{i+1/2}} VC_{i+1/2} , \quad (46)$$

kde skalární součin $(\cdot, \cdot)_{i+1/2}$ na buňce $i + 1/2$ reflektuje skutečnost, že nodální a centrální veličiny nejsou aproximovány ve stejném bodě prostoru. Pro splnění vlastností skalárního součinu a konzistence norem nicméně postačuje volba libovolného váženého průměru. Nabízí se proto použití aritmetického průměru (váhy rovny jedné):

$$(\vec{U}_{i+1/2}, \vec{V}_{i+1/2})_{i+1/2}^a = \frac{1}{2}(\vec{U}_i \vec{V}_i + \vec{U}_{i+1} \vec{V}_{i+1}) , \quad (47)$$

nebo váženého průměru nodálními objemy:

$$(\vec{U}_{i+1/2}, \vec{V}_{i+1/2})_{i+1/2}^b = \frac{VN_i \vec{U}_i \vec{V}_i + VN_{i+1} \vec{U}_{i+1} \vec{V}_{i+1}}{VN_i + VN_{i+1}} . \quad (48)$$

Důsledky této volby budou patrné později a též zahrnuty do srovnání v testech schématu v kapitole 2.2.

Dále zavedme *formální* skalární součiny (angl. formal inner product), které nám pomohou určit prvky matic, protože osamostatňují jednotlivé členy a odstraňují koeficienty vycházející z geometrie sítě. Jelikož provádíme odvození pro 1D úlohu, definice formálního skalárního součinu pro skalární funkce je téměř shodná s definicí přirozeného skalárního součinu (45), ale pro úplnost jej zadefinujeme:

$$[u, v]_{HC} = \sum_{i=1}^{N_N-1} u_{i+1/2} v_{i+1/2} + u_1 v_1 + u_M v_M . \quad (49)$$

Pro vektorové funkce se definice zjednodušuje na:

$$[\vec{U}, \vec{V}]_{HL} = \sum_{i=1}^{N_N-1} \vec{U}_i, \vec{V}_i . \quad (50)$$

Porovnáním formálních a přirozených skalárních součinů pozorujeme, že operátor \mathcal{M} , pro který platí $(u, v)_{HC} = [\mathcal{M}u, v]_{HC}$, bude mít tvar:

$$\begin{aligned} (\mathcal{M}u)_{i+1/2} &= u_{i+1/2} VC_{i+1/2} \quad \text{pro } i \in \{1, \dots, N_N - 1\} , \\ (\mathcal{M}u)_1 &= u_1 , \\ (\mathcal{M}u)_{N_N} &= u_{N_N} . \end{aligned} \quad (51)$$

Podobně zavedme převodní operátor \mathcal{L} tak, že $(\vec{U}, \vec{V})_{HL} = [\mathcal{L}\vec{U}, \vec{V}]_{HL}$, který pro volbu $(\cdot, \cdot)_{i+1/2}^a$ v (46) je po úpravách:

$$\begin{aligned}
(\mathcal{L}^a \vec{U})_i &= \frac{1}{2} \left(\frac{VC_{i+1/2}}{\kappa_{i+1/2}} + \frac{VC_{i-1/2}}{\kappa_{i-1/2}} \right) \vec{U}_i \quad \text{pro } i \in \{2, \dots, N_N - 1\}, \\
(\mathcal{L}^a \vec{U})_1 &= \frac{1}{2} \frac{VC_{3/2}}{\kappa_{3/2}} \vec{U}_1, \\
(\mathcal{L}^a \vec{U})_{N_N} &= \frac{1}{2} \frac{VC_{N_N-1/2}}{\kappa_{N_N-1/2}} \vec{U}_{N_N}.
\end{aligned} \tag{52}$$

V případě volby $(\cdot, \cdot)_{i+1/2}^b$ dostaneme:

$$\begin{aligned}
(\mathcal{L}^b \vec{U})_i &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\kappa_{i+1/2}} + \frac{1}{\kappa_{i-1/2}} \right) VN_i \vec{U}_i \quad \text{pro } i \in \{2, \dots, N_N - 1\}, \\
(\mathcal{L}^b \vec{U})_1 &= \frac{1}{2} \frac{VN_1}{\kappa_{3/2}} \vec{U}_1, \\
(\mathcal{L}^b \vec{U})_{N_N} &= \frac{1}{2} \frac{VN_{N_N}}{\kappa_{N_N-1/2}} \vec{U}_{N_N}.
\end{aligned} \tag{53}$$

Odsud je vidět význam volby skalárního součinu, kterým je v důsledku dána v operátoru \mathcal{L} aproximace nodálního koeficientu κ , díky kterému bychom mohli přepsat obě varianty jako $(\mathcal{L} \vec{U})_i = (VN_i/\kappa_i) \vec{U}_i$ pro vnitřní uzly a $(\mathcal{L} \vec{U})_i = \frac{1}{2}(VN_i/\kappa_i) \vec{U}_i$ pro okrajové. V prvním případě je κ rovno:

$$\begin{aligned}
\kappa_i^a &= \frac{VC_{i+1/2} + VC_{i-1/2}}{\frac{VC_{i+1/2}}{\kappa_{i+1/2}} + \frac{VC_{i-1/2}}{\kappa_{i-1/2}}} \quad \text{pro } i \in \{2, \dots, N_N - 1\}, \\
\kappa_1^a &= \kappa_{3/2}, \\
\kappa_{N_N}^a &= \kappa_{N_N-1/2}.
\end{aligned} \tag{54}$$

Jedná se tedy o aproximaci váženým harmonickým průměrem na vnitřních uzlech a extrapolaci centrálních hodnot na okrajových uzlech. Takovýto tvar není nahodilý, protože tato aproximace odpovídá řešení stacionárního problému vedení tepla při konstantní aproximaci κ uvnitř buněk. Vezměme si dva spojené homogenní materiály o koeficientech vedení tepla $\tilde{\kappa}_{3/2}, \tilde{\kappa}_{5/2}$ a délkách $\tilde{l}_{3/2}, \tilde{l}_{5/2}$, v jejichž střezech jsou teploty $\tilde{T}_{3/2}, \tilde{T}_{5/2}$ a \tilde{T}_2 na vzájemném rozhraní. Při stacionárním vedení tepla bude podle Fourierova zákona tepelný tok (v kladném směru osy) $\tilde{W} = -2\tilde{\kappa}_{3/2}(\tilde{T}_2 - \tilde{T}_{3/2})/\tilde{l}_{3/2} = -2\tilde{\kappa}_{5/2}(\tilde{T}_{5/2} - \tilde{T}_2)/\tilde{l}_{5/2}$. Pokud chceme určit náhradu $\tilde{\kappa}_2$ obou koeficientů $\tilde{\kappa}$ tak, aby též platil Fourierův zákon mezi oběma materiály $\tilde{W} = -2\tilde{\kappa}_2(\tilde{T}_{5/2} - \tilde{T}_{3/2})/(\tilde{l}_{3/2} + \tilde{l}_{5/2})$, dostaneme řešením soustavy rovnic vztah $\tilde{\kappa}_2 = (\tilde{l}_{3/2} + \tilde{l}_{5/2})/(\tilde{l}_{3/2}/\tilde{\kappa}_{3/2} + \tilde{l}_{5/2}/\tilde{\kappa}_{5/2})$. To je ovšem objemy vážený harmonický průměr vystupující v (54).

Druhá varianta volby skalárního součinu vede na:

$$\begin{aligned}
\kappa_i^b &= \frac{1}{\frac{1}{\kappa_{i+1/2}} + \frac{1}{\kappa_{i-1/2}}} \quad \text{pro } i \in \{2, \dots, N_N - 1\}, \\
\kappa_1^b &= \kappa_{3/2}, \\
\kappa_{N_N}^b &= \kappa_{N_N-1/2}.
\end{aligned} \tag{55}$$

Aproximace je shodná s předchozí na okrajových uzlech, ale na vnitřních uzlech použí-

váme pouze nevážený harmonický průměr. Na rovnoměrných sítích se však koeficienty budou shodovat. Jelikož obvykle řešíme úlohu nestacionárního vedení tepla s nikoliv po částech konstantními koeficienty vedení tepla, nemusí být teoretický nesouhlas s řešením stacionárního vedení na závadu (viz. kapitola 2.1.3).

Nyní definujme primární diskrétní operátor na síťových funkcích, který bude přímým analogem k primárnímu abstraktnímu operátoru a od kterého odvodíme ostatní operátory. Jako primární jsme zvolili operátor D podle (38), ke kterému použitím centrální diference odvodíme diskrétní protějšek \mathcal{D} jako:

$$\begin{aligned} (\mathcal{D}\vec{U})_{i+1/2} &= \frac{\vec{U}_{i+1} - \vec{U}_i}{VC_{i+1/2}} \quad \text{pro } i \in \{1, \dots, N_N - 1\} , \\ (\mathcal{D}\vec{U})_1 &= \vec{U}_1 , \\ (\mathcal{D}\vec{U})_{N_N} &= -\vec{U}_{N_N} . \end{aligned} \tag{56}$$

Diskrétní operátor toku \mathcal{G} odvodíme tak, aby analogicky k relaci $G = D^*$ platící pro abstraktní operátory platila i relace $\mathcal{G} = \mathcal{D}^*$ v přirozených skalárních součinech. Máme tedy:

$$(\mathcal{D}\vec{U}, u)_{HC} = (\vec{U}, \mathcal{D}^*u)_{HL} . \tag{57}$$

Přejdeme nyní se vztahem do formálních skalárních součinů:

$$[\mathcal{D}\vec{U}, \mathcal{M}u]_{HC} = [\vec{U}, \mathcal{L}\mathcal{D}^*u]_{HL} . \tag{58}$$

Za použití sdruženého operátoru ve formálních skalárních součinech \mathcal{D}^\circledast k \mathcal{D} dostaneme:

$$[\vec{U}, \mathcal{D}^\circledast \mathcal{M}u]_{HC} = [\vec{U}, \mathcal{L}\mathcal{D}^*u]_{HL} , \tag{59}$$

čímž získáváme důležitý vztah $\mathcal{D}^\circledast \mathcal{M} = \mathcal{L}\mathcal{D}^*$. Z něho plyne postup pro určení \mathcal{G} jako:

$$\mathcal{G} = \mathcal{D}^* = \mathcal{L}^{-1} \mathcal{D}^\circledast \mathcal{M} . \tag{60}$$

Připomeňme, že operátor \mathcal{L} je pozitivně definitní a proto k němu existuje i inverzní operátor. Určitý problém ovšem představuje, že na rozdíl od původního operátoru nemusí být obecně inverzní operátor lokální ve smyslu stencilu (tj. mít pásovou matici). V 1D tomu tak není, protože podle (52) a (53) má operátor diagonální matici, ale ve 2D při deformaci sítě tomu tak být může [23]. Chceme-li určit zbylou část $\mathcal{D}^\circledast \mathcal{M}$, pak dosazením do $[\mathcal{D}\vec{U}, \mathcal{M}u]_{HC} = [\vec{U}, \mathcal{D}^\circledast \mathcal{M}u]_{HC}$ po úpravě dostaneme:

$$\begin{aligned} (\mathcal{D}^\circledast \mathcal{M}u)_i &= u_{i-1/2} - u_{i+1/2} \quad \text{pro } i \in \{2, \dots, N_N - 1\} , \\ (\mathcal{D}^\circledast \mathcal{M}u)_1 &= u_1 - u_{3/2} , \\ (\mathcal{D}^\circledast \mathcal{M}u)_{N_N} &= u_{N_N-1/2} - u_{N_N} . \end{aligned} \tag{61}$$

Pro korektnost bychom měli definovat zbývající diskrétní analog k abstraktnímu operátoru Ω , ale v tomto případě se jedná o pouhé zúžení původního operátoru zavedeného v (39) na výpočetní síť, takže ponecháme původní symbol.

Nyní již můžeme přistoupit k diskretizaci původní soustavy rovnic (34) a (35) nahrazením původních abstraktních operátorů jejich diskrétními protějšky:

$$\frac{1}{2}\mathcal{D}\vec{W}^{n+1} + \Omega T^{n+1} = \mathcal{F} , \quad (62)$$

$$\vec{W}^{n+1} - \mathcal{G}T^{n+1} = 0 , \quad (63)$$

kde funkce pravé strany \mathcal{F} je určena jako:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{i+1/2} &= f_{i+1/2}^{n+1/2} + (\Omega T^n)_{i+1/2} - \frac{1}{2}(\mathcal{D}\vec{W}^n)_{i+1/2} \quad \text{pro } i \in \{1, \dots, N_N - 1\} , \\ \mathcal{F}_1 &= \frac{1}{2}\psi_{W_1}^{n+1} , \\ \mathcal{F}_{N_N} &= \frac{1}{2}\psi_{W_{N_N}}^{n+1} . \end{aligned} \quad (64)$$

Eliminací teploty T^{n+1} z rovnic uvnitř výpočetní oblasti obdobně jako ve (44) dostaneme:

$$\left(\mathcal{I} + \frac{1}{2}\mathcal{G}\Omega^{-1}\mathcal{D} \right) \vec{W}^{n+1} = \mathcal{G}\Omega^{-1}\mathcal{F} . \quad (65)$$

Na celou rovnost aplikujeme operátor \mathcal{L} , abychom se vyvarovali zmiňovaným problémům s \mathcal{L}^{-1} při dosazování za \mathcal{G} z (60), čímž získáme:

$$\left(\mathcal{L} + \frac{1}{2}\mathcal{D}^*\mathcal{M}\Omega^{-1}\mathcal{D} \right) \vec{W}^{n+1} = \mathcal{D}^*\mathcal{M}\Omega^{-1}\mathcal{F} . \quad (66)$$

To je finální operátorový vztah pro výpočet toku tepla na nové časové hladině uvnitř výpočetní oblasti, kde na levé straně máme symetrický pozitivně definitní operátor s pásovou maticí. Pro výpočet tak můžeme použít vysoce efektivní řešiče, kterými je v 1D kódu LU rozklad založený na *Thomasově algoritmu* z numerické knihovny NAG [24] a ve 2D *metoda konjugovaných gradientů* s předpokládáním metodou *střídavých směrů*.

Na okraji eliminovat teplotu T^{n+1} nemusíme, protože operátor Ω je zde nulový, takže (62) se redukuje na:

$$\frac{1}{2}\mathcal{D}\vec{W}^{n+1} = \mathcal{F} . \quad (67)$$

Při skutečném výpočtu je ovšem problém v tom, že metodou rozkladu při řešení Eulerových rovnic s vedením tepla se mění skutečné tepelné toky mezi kroky výpočtu vedení tepla. V důsledku je tedy nutné vypočítat tepelné toky na časové hladině n pomocí (63), kde narážíme na nelokálnost operátoru \mathcal{G} , musíme proto na rovnici aplikovat operátor \mathcal{L} :

$$\mathcal{L}\vec{W}^n = \mathcal{D}^*\mathcal{M}T^n . \quad (68)$$

Vzniklá soustava rovnic má podobně příznivé vlastnosti jako (66), takže ji též

můžeme řešit velmi efektivně, ale přesto se tímto navyšuje výpočetní čas přibližně na dvojnásobek. To je neúměrné, protože stejné přesnosti výsledku při přibližně stejném výpočetním času bychom dosáhli pouhým výpočtem pomocí implicitního schématu s polovičním časovým krokem. Musíme proto schéma modifikovat tak, aby se nevyužívaly explicitně tepelné toky \vec{W}^n , ale pouze teploty T^n , které máme k dispozici i po výpočtu hydrodynamické části (jsou počítány ze stavové rovnice).

Rozepíšeme v (65) funkci pravé strany podle definice (64) pro vnitřek výpočetní oblasti s využitím linearit operatorů:

$$\left(\mathcal{I} + \frac{1}{2}\mathcal{G}\Omega^{-1}\mathcal{D}\right)\vec{W}^{n+1} = \mathcal{G}\Omega^{-1}f^{n+1/2} + \mathcal{G}T^n - \frac{1}{2}\mathcal{G}\Omega^{-1}\mathcal{D}\vec{W}^n. \quad (69)$$

K rovnici přičteme rovnost (63) použitou na časové hladině n tak, jako bychom přepočítávali tepelné toky \vec{W}^n :

$$\left(\mathcal{I} + \frac{1}{2}\mathcal{G}\Omega^{-1}\mathcal{D}\right)\vec{W}^{n+1} = \mathcal{G}\Omega^{-1}f^{n+1/2} + 2\mathcal{G}T^n - \left(\mathcal{I} + \frac{1}{2}\mathcal{G}\Omega^{-1}\mathcal{D}\right)\vec{W}^n.$$

Nyní s využitím linearit a označení $\vec{W}^{n+1/2} = \frac{1}{2}(\vec{W}^{n+1} + \vec{W}^n)$ dostáváme:

$$\left(\mathcal{I} + \frac{1}{2}\mathcal{G}\Omega^{-1}\mathcal{D}\right)\vec{W}^{n+1/2} = \frac{1}{2}\mathcal{G}\Omega^{-1}f^{n+1/2} + \mathcal{G}T^n. \quad (70)$$

Podobně jako v předchozím odvození pro získání schématu s lokálním stencilem aplikujeme operátor \mathcal{L} , takže získáme finální tvar:

$$\left(\mathcal{L} + \frac{1}{2}\mathcal{D}^*\mathcal{M}\Omega^{-1}\mathcal{D}\right)\vec{W}^{n+1/2} = \frac{1}{2}\mathcal{D}^*\mathcal{M}\Omega^{-1}f^{n+1/2} + \mathcal{D}^*\mathcal{M}T^n. \quad (71)$$

Vzniklé schéma je při přepočtu tepelných toků podle (68) ekvivalentní schématu (66) a má i stejnou matici levé strany. Za předpokladu časové konstantnosti koeficientů a objemů je také totožné s (66) bez přepočtu tepelných toků.

Pro úplnost rozepíšeme finální schéma (71) s použitím příslušných definic a operátoru \mathcal{L}^a uvnitř výpočetní oblasti:

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{2} \frac{1}{a_{i-1/2}^n VC_{i-1/2}} W_{i-1}^{n+1/2} + \\ & + \frac{1}{2} \left(\left(\frac{VC_{i+1/2}}{\kappa_{i+1/2}} + \frac{VC_{i-1/2}}{\kappa_{i-1/2}} \right) + \Delta t \left(\frac{1}{a_{i+1/2}^n VC_{i+1/2}} + \frac{1}{a_{i-1/2}^n VC_{i-1/2}} \right) \right) W_i^{n+1/2} - \\ & - \frac{\Delta t}{2} \frac{1}{a_{i+1/2}^n VC_{i+1/2}} W_{i+1}^{n+1/2} = \\ & = \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{f_{i-1/2}^{n+1/2}}{a_{i-1/2}^n} - \frac{f_{i+1/2}^{n+1/2}}{a_{i+1/2}^n} \right) + T_{i-1/2}^n - T_{i+1/2}^n. \quad (72) \end{aligned}$$

Okrajová podmínka má podle (67) tvar:

$$\begin{aligned}\vec{W}_1^{n+1/2} &= \frac{1}{2}(\psi_{W_1}^{n+1} + \psi_{W_1}^n), \\ \vec{W}_{N_N}^{n+1/2} &= -\frac{1}{2}(\psi_{W_{N_N}}^{n+1} + \psi_{W_{N_N}}^n).\end{aligned}\quad (73)$$

Z tepelných toků na nové časové hladině pak vypočítáme teploty T^{n+1} pomocí (62) jako:

$$T^{n+1} = T^n + \Omega^{-1} f^{n+1/2} - \Omega^{-1} \mathcal{D} \vec{W}^{n+1/2} . \quad (74)$$

Po rozepsání dostáváme:

$$T_{i+1/2}^{n+1} = T_{i+1/2}^n + \frac{\Delta t}{a_{i+1/2}^n} f_{i+1/2}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{a_{i+1/2}^n} \frac{W_{i+1}^{n+1/2} - W_i^{n+1/2}}{VC_{i+1/2}} . \quad (75)$$

Zejména pro použití spolu s hydrodynamickou částí je však vhodnější zápis přímo s vnitřní energií ($a = \rho \partial \varepsilon / \partial T \approx \rho(\varepsilon^{n+1} - \varepsilon^n) / (T^{n+1} - T^n)$), kde odstraníme závislost na slabě teplotně závislém koeficientu a , čímž dostaneme schéma v tokovém tvaru a konzervativita bude splněna zcela přesně (hmotnostní hustota ρ je konstantní):

$$\varepsilon_{i+1/2}^{n+1} = \varepsilon_{i+1/2}^n + \frac{\Delta t}{\rho_{i+1/2}} f_{i+1/2}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\rho_{i+1/2}} \frac{W_{i+1}^{n+1/2} - W_i^{n+1/2}}{VC_{i+1/2}} . \quad (76)$$

Teploty $T_{i+1/2}^{n+1}$ pak dopočítáme ze stavové rovnice s použitím nově vypočítaných specifických vnitřních energií $\varepsilon_{i+1/2}^{n+1}$.

2.1.2 Difuze skokové funkce

Ověření vlastností odvozeného schématu a porovnání s původním implicitním schématem provedeme na úloze tepelné difuze skokové funkce, která má analytické řešení. Ačkoliv je úloha jednorozměrná, použijeme ji pro testování 1D i 2D kódu, kde podmínky a řešení konstantně rozšíříme v kolmém směru. Vzhledem k nespojitosti počáteční podmínky první výpočetní krok provádíme vždy implicitním schématem, které pracuje pouze na nové časové hladině, kde už má parabolická rovnice hladké řešení (viz. dále). Úlohu řešíme v neomezeném prostoru, kdy výsledné řešení zužujeme na výpočetní oblast, přičemž okrajové podmínky v simulaci nastavíme podle analytického řešení. Počáteční podmínka úlohy je dána jako:

$$T_0^{diff}(x) = T_l^{diff} + (T_r^{diff} - T_l^{diff}) \vartheta(x - x_0^{diff}), \quad (77)$$

kde T_l^{diff} , T_r^{diff} , x_0^{diff} jsou parametry úlohy s tím, že T_l^{diff} a T_r^{diff} představují levou a pravou počáteční teplotu vzhledem k rozhraní v x_0^{diff} .

Odvoďme nyní analytické řešení parabolické rovnice difuze (27). V rámci celé úlohy budeme používat konstantní homogenní koeficient tepelné vodivosti $\kappa = \kappa^{diff}$, koeficient $a = a^{diff}$ a nulové zdrojové členy. Tím se rovnice vedení tepla při označení $\eta^{diff} = \kappa^{diff} / a^{diff}$ redukuje na:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \eta^{diff} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} . \quad (78)$$

Na teplotu aplikujeme Fourierovu transformaci ($T(t, x) = \int_{\mathbb{R}} \hat{T}(t, k) e^{ikx} dk$, $\hat{T}(t, k) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} T(t, x) e^{-ikx} dx$), kde využijeme linearitu rovnice, která pak musí platit pro jednotlivé prostorové módy:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \eta^{diff} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \hat{T} e^{ikx} = 0 . \quad (79)$$

Aplikací diferenciálního operátoru na levé straně a pokrácením bazické funkce dostáváme:

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial t} + \eta^{diff} k^2 \hat{T} = 0 . \quad (80)$$

Získaná rovnice představuje lineární obyčejnou diferenciální rovnici v čase pro dané k , která má řešení:

$$\hat{T}(t, k) = \hat{T}(0, k) \exp(-\eta^{diff} k^2 t) , \quad (81)$$

kde $\hat{T}(0, k)$ určíme z počáteční podmínky. Pro získání obecného řešení úlohy pro libovolnou počáteční podmínku (kvadraticky integrovatelnou) odvodíme *Greenovu funkci* položením počáteční podmínky pro určité x' :

$$T(0, x) = \delta(x - x') . \quad (82)$$

Odsud odvodíme spektrum počáteční podmínky dopřednou Fourierovou transformací:

$$\hat{T}(0, k) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \delta(x - x') e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\pi} e^{-ikx'} . \quad (83)$$

Dosazením do řešení (81) a zpětnou Fourierovou transformací dostáváme Greenovu funkci ve tvaru:

$$G^{diff}(t, x, x') = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-ikx'} e^{-\eta^{diff} k^2 t} e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{4\pi\eta^{diff}t}} \exp\left(-\frac{|x - x'|^2}{4\eta^{diff}t}\right) . \quad (84)$$

Řešení pro libovolnou počáteční podmínku T_0 získáme prostorovou konvolucí $T = G^{diff} * T_0$. V případě úlohy difuze skokové funkce dosazením počáteční podmínky (77) obdržíme po úpravách:

$$T^{diff}(t, x) = \frac{1}{2}(T_l^{diff} + T_r^{diff}) + \frac{1}{2}(T_r^{diff} - T_l^{diff}) \operatorname{erf}\left(\frac{x - x_0^{diff}}{\sqrt{4\eta^{diff}t}}\right) . \quad (85)$$

Tepelný tok, který použijeme pro okrajové podmínky, pak má tvar:

$$W^{diff}(t, x) = -(T_r^{diff} - T_l^{diff}) \sqrt{\frac{\kappa^{diff} a^{diff}}{4\pi t}} \exp\left(-\frac{(x - x_0^{diff})^2}{4\eta^{diff} t}\right). \quad (86)$$

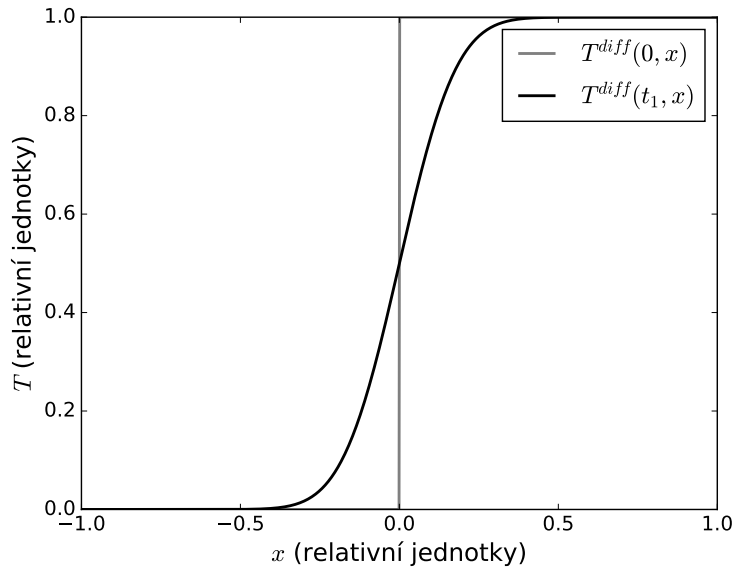
Srovnání numerických schémat provedeme za použití relativní diskrétní obdoby integrální normy L_1 prostoru, kterou označíme jako „ L_1 chyba“ a pro síťovou funkci teploty T^{sim} a na síť bodově zúžené analytické řešení T^{anal} ($T_{i+1/2}^{anal} = T^{anal}(x_{i+1/2})$) ji určíme jako:

$$E_{L_1}(T^{sim}, T^{anal}) = \frac{\sum_{i=1}^{N_C} |T_{i+1/2}^{sim} - T_{i+1/2}^{anal}| VC_{i+1/2}}{\sum_{i=1}^{N_C} |T_{i+1/2}^{anal}| VC_{i+1/2}}. \quad (87)$$

Pro experimentální určení řádu konvergence schématu provedeme sérii simulací na rovnoměrné síti s krokem Δx od $x_{min} = -1$ do $x_{max} = 1$ a časovým krokem svázaným s prostorovým jako $\Delta t = C_{tx} \Delta x$. Parametry jednotně nastavíme (v relativních jednotkách) na:

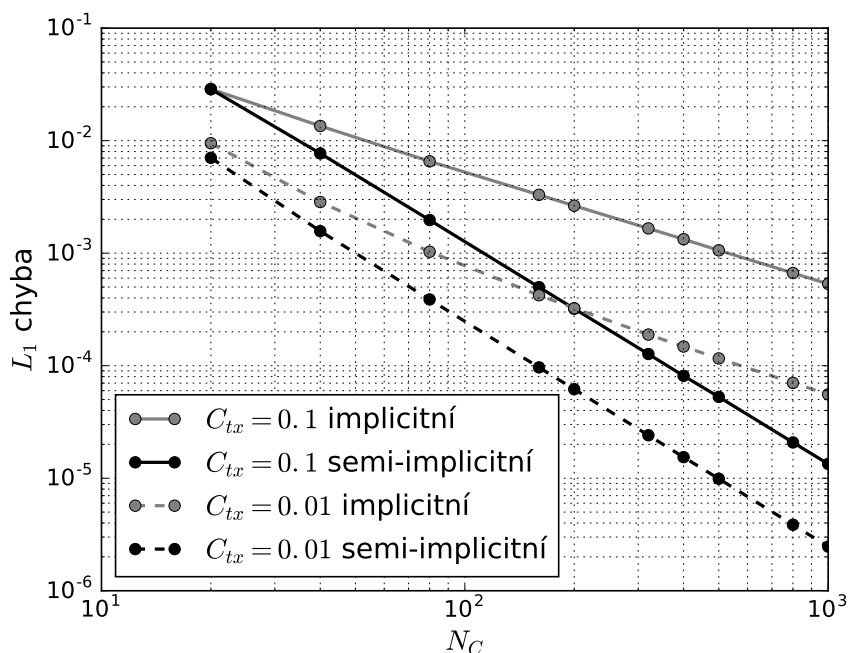
$$\begin{aligned} T_l^{diff} &= 0, & T_r^{diff} &= 1, & \kappa^{diff} &= 1, \\ a^{diff} &= 1, & x_0^{diff} &= 0, & t_1 &= 1.0 \cdot 10^{-2}, \end{aligned}$$

kde t_1 je koncový čas simulace. Analytické řešení pro dané parametry úlohy je vyneseno v obrázku 9.



Obr. 9: Analytické řešení úlohy difuze skokové funkce v počátečním a koncovém čase.

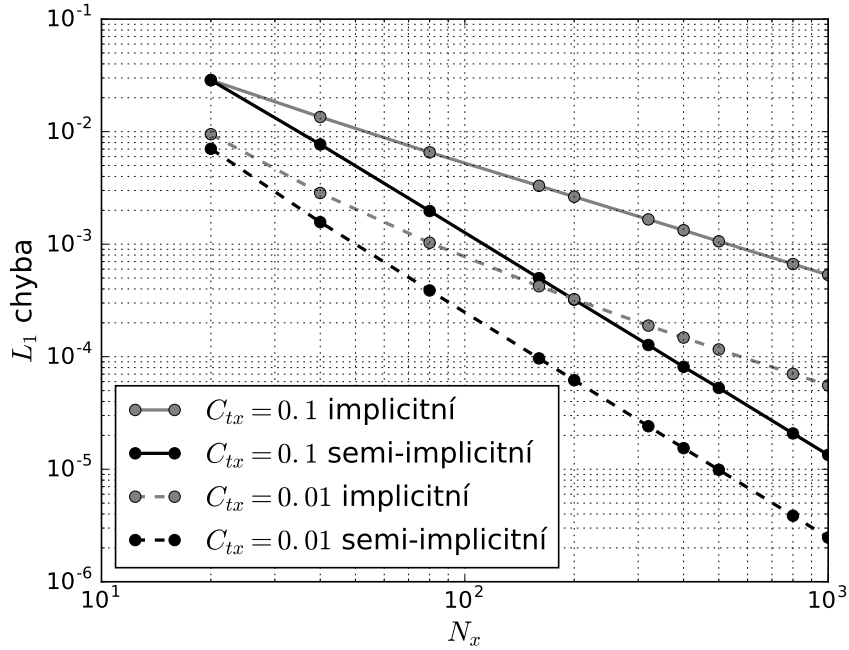
Ve srovnání chyb obou schémat s $C_{tx} = 0.1$ (Obr. 10) jasně vidíme, že sestavené semi-implicitní diferenční schéma je celkově druhého řádu konvergence, přesněji pro $N_C = 1000$ byl řád 1.97. Naopak původní implicitní schéma je celkově prvního řádu



Obr. 10: Srovnání chyb numerických schémat vedení tepla v 1D kódu při úloze difuze skokové funkce pro různé délky časového kroku $\Delta t = C_{tx}\Delta x$.

konvergence a pro $N_C = 1000$ je jeho řád 1.00, protože ač je druhého řádu v prostoru, je pouze prvního řádu v čase. Toto potvrzuje i série s $C_{tx} = 0.01$, kde semi-implicitní schéma dosahuje pro $N_C = 1000$ řádu 2.00. Zpočátku se ovšem i implicitní schéma blíží téměř k druhému řádu, což je způsobeno druhým řádem v prostoru. Fixním poměrem $\Delta t/\Delta x$ namísto $(\Delta t)^2/\Delta x$, který by odpovídal proporčně řádům konvergence implicitního schématu v prostoru a čase, dochází postupně k převládání chyby v časové doméně nad chybou v prostorové i přesto, že na počátku díky volbě menší hodnoty C_{tx} časový krok byl dostatečný. Nicméně asymptoticky se dostáváme celkově k prvnímu řádu konvergence schématu. Konkrétně pro $N_C = 1000$ byl řád 0.90.

Simulace ve 2D probíhaly za naprosto shodných podmínek v ose x a konstantním rozšířením v ose y (v kartézské geometrii). Výpočetní síť v tomto směru byla též rovnoměrná (celková síť je obdélníková, tj. kartézským součinem sítí v obou dimenzích) v rozsahu $y_{min} = 0$ až $y_{max} = 0.1$ s $N_y = 10$ výpočetními buňkami (počet výpočetních buněk v ose x značíme analogicky N_x). Pro zhodnocení odchylky od analytického řešení používáme též L_1 chybu, ale nyní sčítáme i přes indexy v ose y , kde ale z definice (87) vidíme, že chyba je invariantní vůči tomuto konstantnímu rozšíření a dochází pouze k průměrování hodnot. Výsledky obou sérií s $C_{tx} = 0.1$ a $C_{tx} = 0.01$ (Obr. 11) ukazují naprostou shodu s 1D kódem (Obr. 10) a to dokonce číselnou, kdy hodnoty chyb se shodují na minimálně tři platná místa. Byl tak ověřen řád konvergence odvozeného semi-implicitního schématu i v kódu PALE2 a lze prohlásit simulační kódy v rámci vedení tepla pro 1D úlohy za ekvivalentní a dále můžeme provádět 1D testy vedení tepla pouze v 1D kódu, jako tomu je v následující podkapitole.



Obr. 11: Srovnání chyb numerických schémat vedení tepla v kódu PALE2 při úloze difuze skokové funkce pro různé délky časového kroku $\Delta t = C_{tx}\Delta x$.

2.1.3 Stacionární vedení v nehomogenním prostředí

Druhá testovací úloha se zaměřovala na porovnání skalárních součinů $(\cdot, \cdot)_{i+1/2}^a$ (47) a $(\cdot, \cdot)_{i+1/2}^b$ (48) resp. odvozených koeficientů vedení tepla κ^a (54) a κ^b (55). Za tím účelem je řešeno stacionární vedení tepla s nehomogenním koeficientem κ analyticky a též simulací v 1D kódu s nestacionárním vedením tepla, kdy teoretické řešení použijeme jako počáteční podmínku a pozorujeme výchylku od tohoto stavu po určitém čase. Vzhledem k tomu, že máme u odvozeného schématu okrajovou podmínku Neumannova typu v teplotách, existuje aditivní konstantní stacionární řešení úlohy (27), takže pro poměření nebudeme používat teploty, ale tepelný tok, který je v tomto případě více vypovídající. Dále je potřeba zvážit projekci spojitých funkcí na síť, kde mezi hlavní metody patří bodové zúžení a střední hodnota přes výpočetní buňku, ale bylo ověřeno, že se kvalitativně výsledky shodují, takže je zde uvedeno pouze bodové zúžení.

Rovnice vedení tepla (27) se ve stacionárním případě v 1D redukuje na:

$$konst. = W^{stac} = -\kappa \frac{dT}{dx} . \quad (88)$$

Řešením ve výpočetní oblasti (tj. (x_{min}, x_{max})) pak je:

$$T^{stac}(x) = -W^{stac} \int_{x_{min}}^x \kappa^{-1}(\tilde{x}) d\tilde{x} + T_l^{stac} , \quad (89)$$

kde T_l^{stac} je zmíněnou aditivní konstantou a tepelný tok W^{stac} určíme z podmínky $T^{stac}(x_{max}) = T_r^{stac}$, přičemž T_r^{stac} je také danou konstantou.

V úloze zvolíme průběh koeficientu κ jako:

$$\kappa^{stac}(x) = \kappa_0^{stac} \cos^2 \left((x - x_0^{stac}) \frac{\pi}{4} \right), \quad (90)$$

s parametry κ_0^{stac} a x_0^{stac} .

Řešením stacionárního vedení tepla podle (89) je poté pro $x_{min} = x_0^{stac} - 1$ a $x_{max} = x_0^{stac} + 1$ následující:

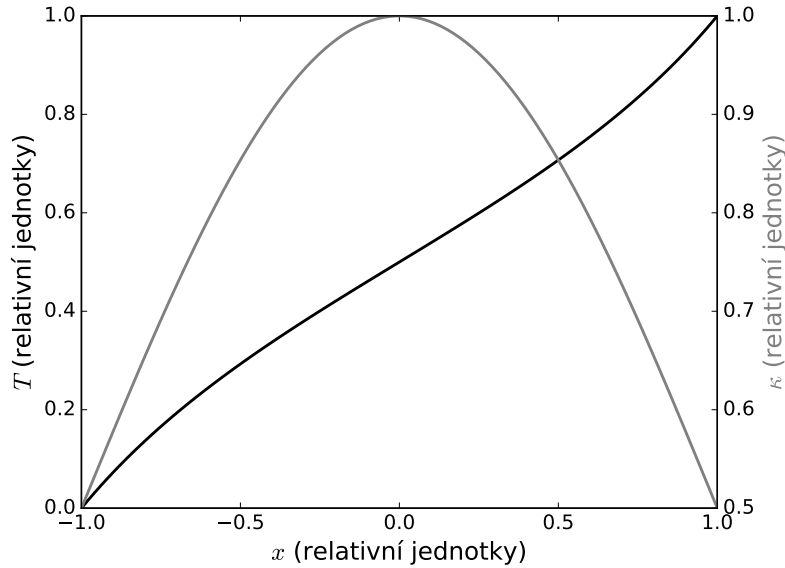
$$T^{stac}(x) = T_l^{stac} + \frac{1}{2}(T_r^{stac} - T_l^{stac}) \left(1 + \text{tg} \left((x - x_0^{stac}) \frac{\pi}{4} \right) \right). \quad (91)$$

Tepelný tok je přitom podle (88):

$$W^{stac} = -(T_r^{stac} - T_l^{stac}) \kappa_0^{stac} \frac{\pi}{8}. \quad (92)$$

V testovací úloze byly zvoleny tyto parametry:

$$\begin{aligned} T_l^{stac} &= 0, & T_r^{stac} &= 1, & \kappa_0^{stac} &= 1, \\ a^{stac} &= 1, & x_0^{stac} &= 0, & t_1 &= 1.0. \end{aligned}$$



Obr. 12: Profil koeficientu tepelné vodivosti κ^{stac} (šedivě) a teploty T^{stac} (černě) v prostoru.

Za těchto parametrů měl koeficient tepelné vodivosti κ^{stac} a řešení v teplotě T^{stac} průběh vyneseny v obrázku 12.

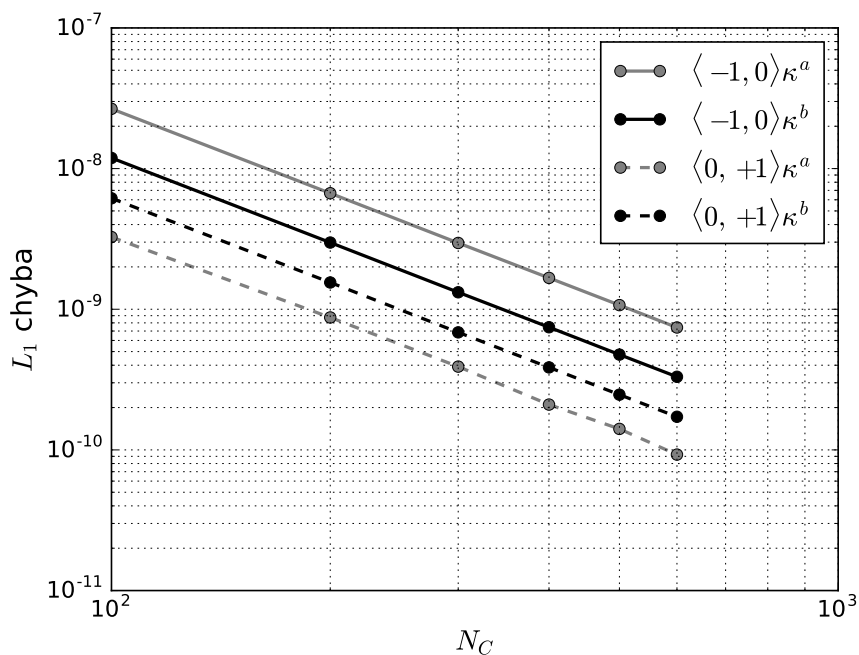
Podobně jako v předchozí úloze byl v simulacích pevný poměr časového a prostorového kroku, kde byla zvolena hodnota $C_{tx} = 1.0$ pro zde uvedené simulace. Výpočty na rovnoměrné síti potvrdily druhý řád konvergence schématu i se slabě nehomogenním

koeficientem tepelné vodivosti, ale koeficienty κ^a a κ^b se dle definic (54) a (55) shodují, takže z hlediska porovnání koeficientů nemá výsledek další význam.

Zaměříme se proto na simulace na nerovnoměrné síti s geometrickým faktorem $C_g = 0.98$, pro kterou jsou polohy výpočetních uzlů dány:

$$x_i = x_{min} + (x_{max} - x_{min}) \frac{C_g^i - 1}{C_g^{N_C} - 1}. \quad (93)$$

Sít se tedy geometricky zjemňuje v kladném směru souřadné osy, ale pro ověření řádu konvergence takto určíme polohy jen pro 100 výpočetních buněk a dále pro vyšší N_C s použitím lineární interpolace rovnoměrně zjemňujeme výpočetní síť. Časový krok je nyní odvozen od velikosti nejmenší výpočetní buňky. Vzhledem k asymetrii sítě rozdělíme úlohu na dva nezávislé podproblémy díky znalosti analytického řešení (91),(92), podle kterého můžeme nastavit okrajové podmínky. Jedním podproblémem je výpočet na intervalu $\langle -1, 0 \rangle$, kdy se síť zjemňuje v okolí maxima koeficientu κ^{stac} , a druhý je případ pro interval $\langle 0, 1 \rangle$, kde se síť zjemňuje v lineární oblasti.



Obr. 13: Chyba v tepelných tocích v úloze stacionárního vedení tepla v nehomogenním prostředí s $C_{tx} = 1.0$ a rovnoměrně zjemňovanou výpočetní sítí s geometrickým faktorem $C_g = 0.98$ pro 100 buněk.

Výsledky pro různé počty buněk jsou uvedeny v obrázku 13. Výsledky opět potvrzují druhý řád konvergence i na slabě nehomogenní síti. Můžeme odsud také vyčíst, že výsledky jsou relativně vyrovnané, protože na intervalu $\langle -1, 0 \rangle$ dává menší chybu koeficient κ^b , ale na druhém intervalu $\langle 0, 1 \rangle$ je lepší naopak koeficient κ^a . První případ ukazuje, že téměř lineární průběh κ na hrubé síti lépe aproximuje κ^b , protože integrální L_1 chyba je většinou tvořena chybou v oblasti hrubé sítě díky tomu, že schéma

je druhého řádu konvergence v prostoru. Ve druhém případě lépe aproximuje okolí maxima na hrubé síti koeficient κ^a . Celkově můžeme shrnout, že oba koeficienty jsou srovnatelné a značně závisí na konkrétní situaci, kdy je ten který koeficient lepší. Pro κ^a mluví teoretické splnění stacionárního vedení tepla s konstantní aproximací κ v objemech výpočetních buněk, jak bylo dříve řečeno. Za reálných podmínek však mnohdy může být blíže skutečnému řešení spíše koeficient κ^b .

2.2 Koeficient tepelné vodivosti

Koeficient tepelné vodivosti vystupující v rovnici vedení tepla (27) je klíčovým parametrem simulace. Doposud používaný model sestával ze dvou částí, Spitzer-Härmova koeficientu v plazmatu [15] a konstantní tabelované hodnoty tepelné vodivosti κ_{solid} v pevné látce [8]. Takovýto model je velmi přibližný a je zejména nepřesný v okolí Fermiho teploty, kde neplatí přiblížení ideálního plazmatu ani elektronového plynu v pevné látce. Z těchto důvodů použijeme zpřesněný model založený na globálním modelu srážkové frekvence uvedeným v kapitole 1.1.

Tepelná vodivost odvozená od Spitzer-Härmovy srážkové frekvence ν_{SH} definované v (3) je:

$$\kappa_{SH} = \kappa_0 \frac{n_e k_B^2 T}{m_e \nu_{SH}}, \quad (94)$$

kde κ_0 představuje přibližně konstantní člen, který je v původním modelu roven $\kappa_0 = 13.5$ pro všechny materiály. Pokud nahradíme ν_{SH} srážkovou frekvencí globálního modelu ν , dostaneme v limitě nízkých teplot, kde převládá $\nu_{el-phonon}$ definovaná v (6), konstantní teplotní závislost, což odpovídá očekávání pro pevnou látku. Model je tak částečně verifikován a podle [14] je platný pro celý teplotní rozsah.

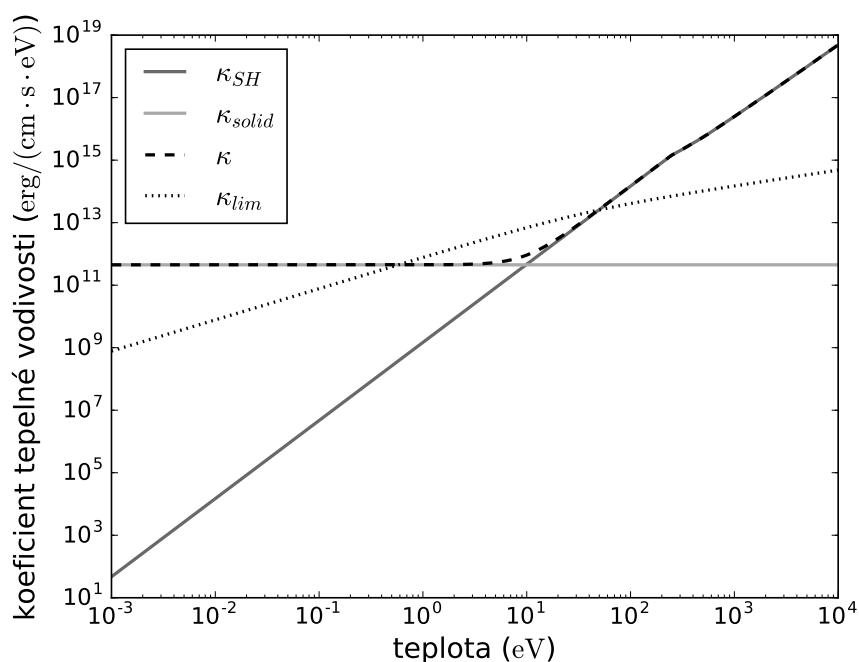
Harmonický průměr použitý pro interpolaci ν v (7) při dosazení do (94), kde vystupuje v převrácené hodnotě, znamená, že hodnoty tepelné vodivosti sčítáme:

$$\kappa = \kappa_{solid} + \kappa_{SH}. \quad (95)$$

Za zmínku však stojí, že pokud bychom určovali konstantu k_S ve výrazu pro $\nu_{el-phonon}$ (6) z hodnoty κ_{solid} , tak obecně dostaneme jinou hodnotu než která byla určena z odrazivosti objemového materiálu v kapitole 1.1. Pro hliník získáme hodnotu $k_S = 2.3$ [14]. Pro měď s tepelnou vodivostí $\kappa_{solid} = 4.48 \cdot 10^{11}$ erg/(cm s eV) vypočítáme za použití materiálových konstant z kapitoly 1.1 hodnotu $k_S \doteq 12.4$. To je hodnota 35 krát nižší než bylo odvozeno z odrazivosti objemového materiálu, což ukazuje na určitou vnitřní inkonzistenci modelu, ale také na hrubé určení κ_0 . Tyto chyby jsou způsobeny příliš aproximativním globálním modelem, ale vzhledem k použití v odlišných schématech nedochází nikde k přímému porovnání hodnot a tím vážnějšímu rozporu.

Přidané kritérium omezení srážkové frekvence (8) v okolí Fermiho teploty se potom projeví jako:

$$\kappa > \kappa_{lim} = \kappa_0 \frac{n_e k_B^2 T}{m_e v_e} \left(\frac{3}{4} \pi n_i \right)^{-1/3}. \quad (96)$$



Obr. 14: Srovnání koeficientů tepelné vodivosti v závislosti na teplotě pro měď s materiálovými konstantami uvedenými v textu.

Celkový průběh je vyneseno v obrázku 14. Numerické simulace v 1D s tímto koeficientem v kapitole 4 však ukazují, že vedení tepla je v oblasti plazmové plumy nadměrné. Nicméně simulace ve 2D toto nepotvrzuje, což ukazuje na rozdílnosti v 1D a 2D přístupu. Ve 2D totiž dochází k výraznému vedení tepla i v příčném směru. Musíme tedy na toto brát zřetel a zapínat použití tohoto modelu v simulaci selektivně v závislosti na dimenzi úlohy.

2.3 Metoda rozkladu

Pro společnou integraci hydrodynamické transportní části celkového schématu s vedením tepla slouží *metoda rozkladu* (angl. splitting). V případě používaných simulačních kódů je implementována tím způsobem, že je nejprve provedena hydrodynamická část řešená *kompatibilním schématem* metody konečných diferencí [25, 8]. Tím vypočítáme i advekční část rovnice zákona zachování energie (1), která je tvořena hyperbolickou parciální diferenciální rovnicí. Navíc je zde zahrnuta i integrace zdrojového členu, kterým je obvykle absorpce laseru (viz. kapitola 1). Takto určené veličiny pak slouží jako výchozí pro řešení rovnice vedení tepla (27) pomocí implicitního či semi-implicitního diferenčního schématu (kapitola 2.1), která tvoří parabolickou část zákona zachování energie (1). Nově získané hodnoty veličin se již ukládají na novou časovou hladinu. Při obou výpočtech přitom používáme stejnou délku časového kroku, protože se pohybujeme ve skutečnosti mezi shodnými časovými hladinami.

Takto postavená metoda řešení je zejména efektivní pro vůbec nebo slabě provázané děje, kde umožňuje řešit úlohu v nižší dimenzi a nebo v našem případě odděleně

hyperbolickou a parabolickou část rovnice vhodnými numerickými schémata. Vedení tepla a advekční část však nezávislé nejsou, protože kondukční mechanismus transportu tepla ovlivní tlak a tím konvekční transport a naopak. Navíc zde hraje roli i teplotně závislá srážková frekvence (viz. kapitola 1.1), kterou je ovlivněna absorpce laseru a tím opět rozdělení teploty. Díky existenci těchto vazeb složení numerických schémat pomocí metody rozkladu nemusí dosahovat očekávaného řádu konvergence schématu. V našem případě bychom například za ideální považovali dosažení druhého řádu schématu při použití kompatibilního schématu pro hydrodynamickou část a semi-implicitního schématu pro vedení tepla, která jsou obě právě druhého řádu konvergence. Za reálných podmínek tohoto řádu složení dosahovat nemusí. Cílem této kapitoly tedy je vytvořit vhodnou testovací úlohu, kvantifikovat na ní chybu jednotlivých postupů při metodě rozkladu a tím případně nalézt vhodnější techniku než je současná.

2.3.1 Nelineární advekčně-difuzní rovnice

Pro přiblížení reálné situaci použijeme jako testovací úlohu nelineární advekčně-difuzní rovnici, která tak bude napodobovat nelinearitu Eulerových rovnic s vedením tepla. Prototypem pro nás bude *Burgersova rovnice*, kterou ale doplníme o difuzní člen:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \eta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (97)$$

kde $u = u(t, x)$ je dostatečně hladká funkce a η je kladný konstantní parametr. Pro tuto úlohu existuje analytické řešení [26], které odvodíme pro případ neomezeného prostoru a později zúžíme na simulační oblast, kde nastavíme odpovídajícím způsobem okrajové podmínky.

Nejprve provedeme substituci $u = \frac{\partial \phi}{\partial x}$ pro $\phi = \phi(t, x)$ dostatečně hladkou funkci. Dostaneme tak:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 - \eta \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) = 0. \quad (98)$$

Díky předpokladu hladkosti bude existovat funkce $\alpha = \alpha(t)$, pro kterou bude platit:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 - \eta \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \alpha(t). \quad (99)$$

Dále budeme postupovat parametrizací $\phi(t, x) = F(\theta(t, x))$, kdy substituujeme ϕ jednoparametrickou „tvarovou“ funkcí $F = F(\theta)$ (její derivace budeme značit čárkou) a časově a prostorově závislou funkcí $\theta = \theta(t, x)$, přičemž opět předpokládáme dostatečnou hladkost obou funkcí. Po dosazení do předešlé rovnosti získáme po úpravách:

$$F' \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(F' \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 = \eta F'' \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \eta F' \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \alpha(t). \quad (100)$$

Tuto rovnici rozdělíme tak, že bude splněna řešením následující soustavy rovnic:

$$\frac{1}{2} \left(F' \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 = \eta F'' \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2, \quad (101)$$

$$F' \frac{\partial \theta}{\partial t} = \eta F' \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \alpha(t). \quad (102)$$

První rovnici vyřešíme eliminací $\frac{\partial \theta}{\partial x}$ z obou stran rovnice:

$$\frac{1}{2} F'^2 = \eta F'' . \quad (103)$$

Integrací této obyčejné diferenciální rovnice dostaneme tvar funkce F :

$$F(\theta) = -2\eta \log|\theta - \beta| + \gamma, \quad (104)$$

kde β a γ jsou integrační konstanty. Vzhledem k tomu, že θ vystupuje v (100) pouze v derivacích a je tedy určena až na aditivní konstantu, můžeme bez újmy na obecnosti položit $\beta = 0$. Nenulovost a dokonce pozitivita θ (resp. dolní omezenost díky řečené aditivní konstantně) bude zajištěna tvarem řešení, jak později uvidíme.

Druhou rovnici (102) vydělíme členem F' , který je podle (104) roven $F'(\theta) = -2\eta/\theta$ a je tudíž nenulový. Po dosazení obdržíme:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \eta \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \frac{\alpha}{2\kappa} \theta. \quad (105)$$

Jedná se o lineární parciální diferenciální podobnou rovnici difuze (78) řešené v kapitole 2.1.2. Budeme postupovat obdobným způsobem a po Fourierově transformaci ($\theta \xleftrightarrow{F.T.} \hat{\theta}$) v prostoru získáme:

$$\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial t} = -\eta k^2 \hat{\theta} - \frac{\alpha}{2\eta} \hat{\theta}. \quad (106)$$

Řešením této lineární diferenciální rovnice dostáváme:

$$\hat{\theta}(t, k) = \hat{\theta}_0 \exp(-\eta k^2 t - \mu(t)), \quad \mu(t) = \int_0^t \frac{1}{2\eta} \alpha(t') dt', \quad (107)$$

kde $\hat{\theta}_0$ je spektrum počáteční podmínky.

Zpětnou Fourierovou transformací obdržíme vztah pro θ v čase $t > 0$:

$$\theta(t, x) = \frac{\exp(-\mu(t))}{\sqrt{4\pi\eta t}} \int_{\mathbb{R}} \theta_0(x') \exp\left(-\frac{|x - x'|^2}{4\eta t}\right) dx'. \quad (108)$$

Abychom se vyhnuli dosazení za θ_0 z Fourierovy transformace, použijeme definic:

$$u = \frac{\partial \phi}{\partial x} = F' \frac{\partial \theta}{\partial x} = -2\eta \frac{1}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} = -2\eta \frac{\partial \log \theta}{\partial x}. \quad (109)$$

Tím máme pro počáteční podmínku $u_0 = -2\eta \frac{\partial \log(\theta_0)}{\partial x}$. Odsud integrací dostáváme:

$$\theta_0(x) = C \exp \left(-\frac{1}{2\eta} \int_{-\infty}^x u_0(x') dx' \right), \quad (110)$$

kde C je integrační konstanta, po které pouze požadujeme kladnost.

Dosazením θ_0 do (108) a odsud do (109) získáme finální vztah pro u :

$$u(t, x) = \frac{\int_{\mathbb{R}} (x - x') \exp \left(-\frac{(x - x')^2}{4\eta t} - \frac{1}{2\eta} \int_{-\infty}^{x'} u_0(x'') dx'' \right) dx'}{t \int_{\mathbb{R}} \exp \left(-\frac{(x - x')^2}{4\eta t} - \frac{1}{2\eta} \int_{-\infty}^{x'} u_0(x'') dx'' \right) dx'}. \quad (111)$$

Počáteční podmínku položíme obdobně jako u klasické difuze ve tvaru skokové funkce:

$$u_0(x) = U_0(1 - \vartheta(x)), \quad (112)$$

kteřá sice nesplňuje požadovanou hladkost, ale existuje pro ní derivace ve smyslu zobecněných funkcí a nebo ji můžeme chápat jako limitu hladkých funkcí. Navíc samotné hladké řešení přechází v limitě $t \rightarrow 0+$ do u_0 .

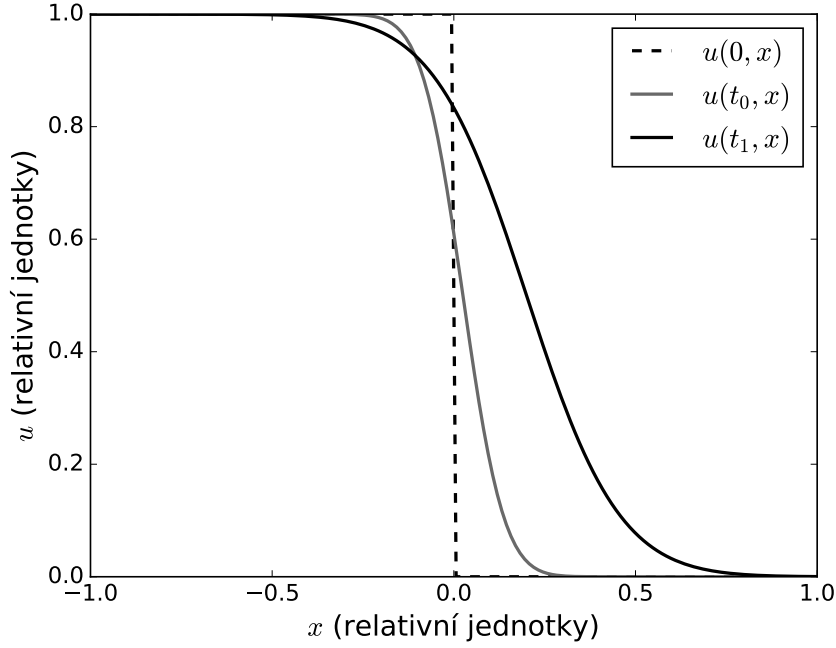
Pro tuto počáteční podmínku existují příslušné primitivní funkce a dostáváme tak po úpravě řešení:

$$u(t, x) = U_0 \left(1 + \exp \left(\frac{U_0}{2\eta} \left(x - \frac{U_0}{2} t \right) \right) \frac{1 + \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{\eta t}} \right)}{1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x - U_0 t}{2\sqrt{\eta t}} \right)} \right)^{-1}. \quad (113)$$

2.3.2 Simulace rázové vlny

Porovnání různých postupů metody rozdělení vyzkoušíme na úloze rázové vlny (112), pro níž jsme v minulé podkapitole odvodili řešení (113) (Obr. 15). Vzhledem k nespojitosti takovéto počáteční podmínky by však docházelo k velkým numerickým chybám při simulacích, které nejsou hlavním předmětem zkoumání v této kapitole, takže nastavíme počáteční čas t_0 nenulový a díky znalosti analytického řešení v čase upravíme příslušným způsobem počáteční podmínku. Okrajová podmínka je pak Dirichletova pro u v x_{min} a x_{max} nastavená podle analytického řešení.

Analogicky s používanými simulačními kódy pro řešení Eulerových rovnic s vedením tepla rozdělíme pomocí metody rozkladu nelineární advektivně-difuzní rovnici (97) na advektivní a difuzní část. Advektivní část, která odpovídá Burgersově rovnici, budeme řešit *Lax-Wendroffovým* schématem, které je podobně jako kompatibilní schéma s prediktor-korektorem [8] v kódech pro Eulerovy rovnice též druhého řádu konvergence. Dále je také disperzní a díky tokovému tvaru konzervativní. Schéma používáme v dvoukrokovém tvaru, kde si zavádíme pomocnou časovou hladinu $n + 1/2$ a duální pomocnou síť. Na rovnoměrné síti s prostorovým Δx , polohovými dolními indexy 1 až N a pomocnými $1/2$ až $N - 1/2$ při časovém kroku Δt má schéma tvar:



Obr. 15: Analytické řešení úlohy rázové vlny šířící se podle nelineární advekčně-difuzní rovnice v různých časech (parametry uvedené v textu).

$$u_{i+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2}(u_i^n + u_{i+1}^n) - \frac{\Delta t}{2} \frac{f^{LW}(u_{i+1}^n) - f^{LW}(u_i^n)}{\Delta x}, \quad (114)$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \Delta t \frac{f^{LW}(u_{i+1/2}^{n+1/2}) - f^{LW}(u_{i-1/2}^{n+1/2})}{\Delta x}. \quad (115)$$

Označili jsme přitom $f^{LW}(u) = u^2/2$, což je nelineární tok v advekční části (97).

Pro difuzní část použijeme semi-implicitní schéma odvozené v kapitole 2.1. Matice soustavy bude velmi podobná, ale namísto κ použijeme η a koeficient a nahradíme konstantně jedničkou. Uvedme zde alespoň obdobu (75) pro určení hodnot na nové časové hladině:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \Delta t \frac{W_{i+1/2}^{n+1/2} - W_{i-1/2}^{n+1/2}}{\Delta x}, \quad (116)$$

kde toky W určíme právě z upravené soustavy (72). Hodnoty u_1^{n+1} a u_N^{n+1} jsou určeny z okrajové podmínky tj. z analytického řešení.

Testováno bylo několik postupů metody rozkladu:

- 1) Advekční krok následovaný difuzním, tedy původní postup používaný v simulačních kódech pro řešení Eulerových rovnic s vedením tepla.
- 2) Difuzní krok a následný advekční.

3) Kombinace předešlých, kdy příspěvky (divergence numerických toků) z obou postupů zprůměrujeme. Slouží především jako referenční, protože lze předpokládat nejvyšší přesnost, ale z praktického hlediska je tento postup nevýhodný, protože se tímto zdvojnásobuje výpočetní náročnost.

4) Symetrizovaný rozklad, kdy střídáme postupy 1 a 2 v každém kroku.

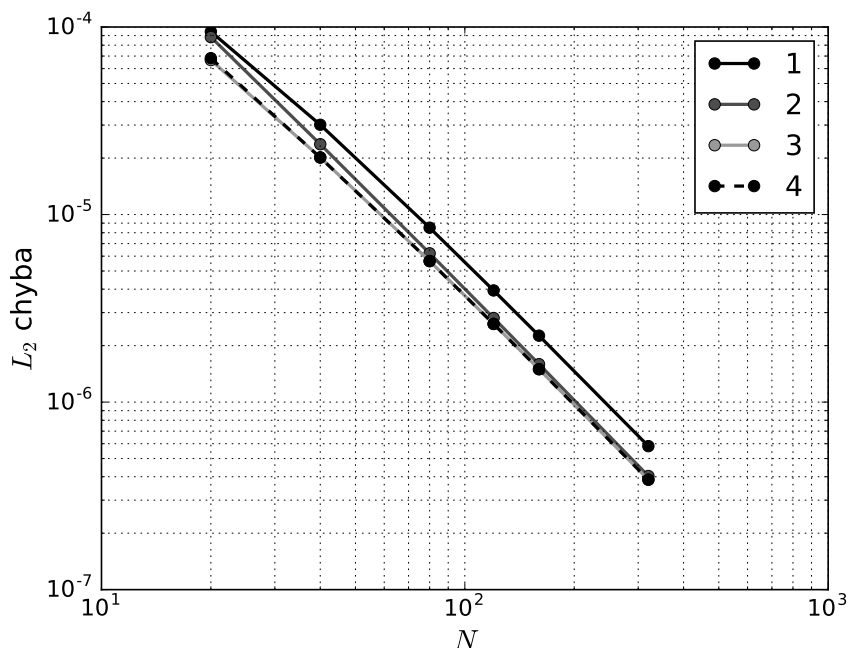
Porovnání s analytickým řešením provedeme „ L_2 chybou“ tj. pomocí relativní diskrétní analogie integrální normy L_2 prostoru (u^{sim} je výsledek simulace a u^{anal} analytické řešení):

$$E_{L_2}(u^{sim}, u^{anal}) = \frac{\sum_{i=1}^N |u_i^{sim} - u_i^{anal}|^2}{\sum_{i=1}^N |u_i^{anal}|^2}. \quad (117)$$

Parametry simulace byly nastaveny následovně (v relativních jednotkách):

$$\begin{aligned} x_{min} &= -1, & x_{max} &= +1, & \eta &= 0.1, \\ t_0 &= 0.05, & t_1 &= 0.4, & C_{tx} &= 0.5, \end{aligned}$$

přičemž koeficient $C_{tx} = \Delta t / \Delta x$ stejně jako dříve označuje poměr mezi časovým a prostorovým krokem.



Obr. 16: Srovnání chyb různých postupů metody rozkladu v úloze rázové vlny šířící se podle nelineární advektivně-difuzní rovnice při $C_{tx} = 0.5$ (1 – advekce → difuze, 2 – difuze → advekce, 3 – průměr 1 a 2, 4 – symetrizovaný rozklad).

Výsledky simulací (Obr. 16) ukazují, že ve všech případech je schéma druhého řádu konvergence. Jako nejhorší se jeví právě původní pořadí metody rozkladu. Opačně

pořadí je o poznání lepší a asymptoticky se blíží nejpřesnějšímu pořadí 3. Nicméně pokud vyloučíme ze zmíněných praktických důvodů pořadí 3, tak jednoznačně nejlepší je symetrizované pořadí 4, které nepřináší dodatečné výpočetní nároky, ale téměř naprosto kopíruje profil referenčního pořadí 3.

Důležitým závěrem je, že nedošlo ke snížení řádu konvergence schématu vlivem metody rozkladu. Ideální za daných podmínek se zdá použití symetrizovaného pořadí pro simulační kódy, ale je nutno též uvážit, že za reálných podmínek je ve schématu zahrnuta i absorpce laseru během hydrodynamické části, která by mohla být střídavou změnou pořadí negativně ovlivněna. Nabízí se pak například rozdělení absorpce laseru do obou částí, ale to by přineslo dodatečné výpočetní nároky. Tato metoda je celkově náročnější na implementaci a její přínos (snížení numerické chyby) může záviset na daných podmínkách a řešení začlenění netestovaných částí schématu. Z těchto důvodů symetrizace metody rozkladu v simulačních kódech použita nebyla.

3 Rozšíření fyzikálních modelů

Lagrangeovská jednotekutinová hydrodynamika spolu s vedením tepla (kapitola 2) a absorpcí laseru (kapitola 1) dokáže dobře numericky aproximovat vývoj a dynamiku plazmatu jako proudění kvazineutrální elektron-iontové tekutiny. Nicméně pro komplexní simulaci ablace pevnolátkového terče zejména při metodě PLD, kde intenzity dopadajícího laserového záření obvykle nejsou řádově o mnoho vyšší než ablační práh materiálu [3], je nutné zahrnout do popisu i charakteristické vlastnosti všech fází látky, které neodpovídají tekutinovému modelu, a též fázové přechody mezi nimi.

3.1 Držení pevné a kapalné fáze

Jedním z nejzásadnějších problémů tekutinového přístupu je absence soudržných sil v pevné a kapalné látce, která by odpovídala existenci inter-atomárních vazeb při silné degeneraci elektron-iontové tekutiny. V Eulerových rovnicích jsou totiž síly v rovnici hybnosti:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p I) = 0, \quad (118)$$

klasicky určeny hydrostatickým tlakem p , který nereflektuje zmíněné fyzikální jevy. Bez jakýchkoliv soudržných sil pak například látka samovolně expanduje do vakua, jak bychom očekávali u (ideálního) plynu, ale nikoliv u pevné či kapalné látky. Z těchto důvodů je nutné alespoň kvalitativně zahrnout vliv těchto sil. V předešlé práci [8] byl proto vytvořen empirický model držení pevné a kapalné fáze, který se osvědčil a byl proto rozšířen do 2D a implementován v kódu PALE2.

V rámci metody držení se nabízí mnoho různých postupů, ale jak bylo ukázáno v předešlé práci [8], konzervativní je pouze postup založený na modifikaci sil působících na výpočetní uzel. Na uzel mohou působit kromě tlakové síly podle (118) také další externí síly, jako je například tíhová síla. Navíc je třeba zahrnout člen *umělé viskozity* [27], který zaručuje stabilitu schématu. Tyto členy ovlivňovat nebudeme, protože by to vedlo k neočekávanému nefyzikálnímu chování v prvním případě a nestabilitě v druhém.

Tlaková síla patří mezi *normálové síly*, její velikost tedy odpovídá ploše povrchu na níž působí a míří ve (vnějším) normálovém směru k němu. Konkrétní podobu použitou v numerickém schématu v požívaných kódech odvodíme integrací rovnice zákona zachování hybnosti (118) v lagrangeovských souřadnicích přes nodální objem V_i^N [8, 9], čímž získáme vztah pro působící tlakovou sílu (s použitím Gaussovy věty):

$$F_i^p = \int_{V_i^N} \nabla \cdot (p I) dV = \oint_{\partial V_i^N} p \vec{n} dS. \quad (119)$$

Hranice nodálního objemu však není diferencovatelná, takže ve skutečnosti se integrace rozpadá na součet integrálů přes jednotlivé (duální) obvodové hrany, ale přesné odvození závisí na prostorové diskretizaci a lze jej najít v citovaných pracích.

Tuto sílu vynásobíme koeficientem držení α_i , který byl zaveden v Bakalářské práci [8] v kapitole 4.1.4. Součin pak použijeme pro výpočet přírůstku hybnosti resp. rychlosti v diskretizované době (118) namísto původní tlakové síly. Tím simulujeme soudržné

síly, které kompenzují síly tlakové pro nízké teploty. Nicméně závislosti objemové, jako je $(\partial p/\partial \varrho)_T$, tímto neovlivníme, takže nenasimulujeme například pružnost pevné látky či plasticitu [28, 29], ale zabráníme nereálné expanzi a kompresi látky v normálovém směru.

Použitý koeficient α_i je teplotně závislý, potřebujeme tedy znát nodální teplotu, ale teplota je dle konstrukce centrální veličinou (viz. kapitola 2). Protože při prudké expanzi nechceme, aby horké výpočetní buňky byly bržděny studenými, vezmeme jako nodální teplotu maximum teplot okolních buněk (ve 2D čtyř a dvou v 1D).

Pro každý výpočetní uzel navíc evidujeme v jaké se nachází fázi, což umožňuje blokovat použití držení pro už jednou odpařené uzly. Jejich držení by totiž mohlo významně ovlivnit dynamiku systému a chování by bylo značně nereálné, protože oblast plazmové plumy je o několik řádů řidší než pevná látka, takže vazebné síly na těchto inter-atomárních vzdálenostech budou minimální.

3.2 Model fázového přechodu

Druhým adresovaným problémem jsou fázové přechody, kde především přechod kapalina–plyn se svým latentním teplem nezanedbatelným způsobem podílí na energetické bilanci ablovaného terče [1]. Konkrétně u mědi činí měrné skupenské teplo varu $\Delta H_{var} \doteq 4.8 \cdot 10^{10}$ erg/g. Tento přechod byl řešen již v předešlé práci [8] v kapitole 4.3 modifikací přírůstku specifické vnitřní energie ε ve schématech hydrodynamických rovnic a vedení tepla spolu s derivací $(\partial \varepsilon/\partial T)_\varrho$ vystupující v koeficientu a rovnice vedení tepla (27). Tento postup byl integrován i do simulačního kódu PALE2 zcela analogickým způsobem pro stavovou rovnici ideálního plynu a je používán pro simulace v kapitole 4. Odlišností implementace v kódu PALE2 je, že po kroku vedení tepla je přepočítávána specifická vnitřní energie z divergence tepelných toků podle (76) (pro implicitní schéma je vztah shodný, ale jsou použity veličiny na časové hladině $n + 1$ namísto $n+1/2$). V 1D kódu se ovšem používá přepočet teploty podle (75). Zatímco teplotní přírůstek modifikován být nemusel, protože zahrnuje již modifikovaný koeficient a , který sníží odběrem latentního tepla v oblasti fázového přechodu nárůst teploty, tak přírůstek vnitřní energie musí být úměrně snížen, aby bylo dosaženo stejného efektu. Použijeme zde tedy vztah původně odvozený pro přírůstek vnitřní energie v hydrodynamické části zákona zachování energie zcela analogickým způsobem.

4 Simulace laserové ablace

Pro demonstraci vlastností popsaných metod za reálných podmínek laserové ablace při metodě PLD byla zvolena 1D úloha z předešlé práce [8] z kapitoly 5.5 a to sice ze dvou důvodů. Jednak v Bakalářské práci byly pozorovány některé nedostatky při těchto simulacích plynoucí zejména z převzatého kódu absorpce laseru, který byl nyní opraven (viz. kapitola 1.1). Za druhé článek obsahuje, podle kterého je úloha navržena [30], poměrně značnou paletu grafů a závislostí, se kterými je možné výsledky srovnávat a to včetně detailů terče. Na druhé straně referenční výsledky obsahují i data, která jsou mimo současné možnosti 1D či 2D simulačních kódů, jako je například určení poměrného zastoupení jednotlivých iontů v plazmové plumě. Primárně se však jedná též o 1D jednotekutinový jednoteplotní hydrodynamický model jako je použit zde, ale v případě článku pouze aplikovaný pro expandující plazma a terč je modelován zvlášť primárně rovnicí vedení tepla bez možnosti pohybu hmoty. Navíc je zde ovšem úloha v podkapitole 4.2 rozšířena i do dvou dimenzí pro prezentaci možností 2D simulačního kódu PALE2 s integrovanými rozšířeními z předešlých kapitol.

Společně všem numerickým simulacím byly parametry materiálu terče, laseru a modelu držení/přechodu fází (viz. kapitola 3). Terč předpokládáme pevnolátkový masivní z mědi za přibližně pokojové teploty ($T = 0.03$ eV) s tabulkovými konstantami jako v kapitole 1.1, jehož simulovanou tloušťku označíme d a bude uvedena dále. Zdroj laserového záření máme Nd:YAG na čtvrté harmonické frekvenci tj. s vlnovou délkou $\lambda = 0.266$ μm . Časová šířka gaussovského pulzu (FWHM) byla 10 ns a maximum v čase 10 ns se špičkovou intenzitou $I_{max} = 1$ GW/cm^2 . Pro účely 2D simulace byl pulz modelován s též gaussovským prostorovým profilem se šířkou (FWHM) 0.25 mm. Pro absorpci laserového záření používáme algoritmus založený na stacionárních Maxwellových rovnicích podle kapitoly 1. Koeficienty pro držení pevné a kapalné fáze byly při značení podle předešlé práce [8, kapitola 4.1.4] nastaveny na $A = 0.08$ eV, $B = 1.0 \cdot 10^{-2}$, $E = 3$. Model fázového přechodu kapalina–plyn měl nastavenou hodnotu ΔH_{var} podle kapitoly 3 při teplotě varu $T_b = 0.244$ eV a teplotě tání $T_m = 0.117$ eV, které jsou společné s modelem držení pevné a kapalné fáze z téže kapitoly. Vedení tepla probíhalo s nastaveným omezením tepelného toku na $f^{max} = 0.01$ (viz. [8, kapitola 3.2]). Jednotně byla nastavena i lineárně-kvadratická umělá viskozita na $C_1 = 1.0$, $C_2 = 1.0$ (viz. [8, kapitola 2.4.3]) a Courant-Friedrichs-Lewyho číslo $C_{CFL} = 0.25$ určující dynamicky délku časového kroku (viz. [8, kapitola 2.4.4]). Hydrodynamické okrajové podmínky nastavujeme kromě horní hranice na zrcadlení tlaku tj. Neumannovu na nulovou derivaci a horní naopak Dirichletovu na nulový tlak, což odpovídá fyzikálně expanzi do *vakua*. Tepelné okrajové podmínky volíme *adiabatické* tj. Neumannova typu na nulový tepelný tok.

4.1 Jednorozměrné simulace

Nejprve zhodnotíme 1D simulaci při použití 1D kódu a též 2D kódu v cylindrických souřadnicích, ale s homogenními (resp. radiálně uniformními) podmínkami, takže v obou případech jde o 1D úlohu. Počáteční čas simulací bude $t_0 = 0$ ns a koncový $t_1 = 20$ ns. Pro porovnání použijeme stavovou rovnici ideálního plynu s ionizací nastavenou na průměrnou terče tj. $Z = 4.4$ (obdržíme z Thomas-Fermiho teorie pomocí

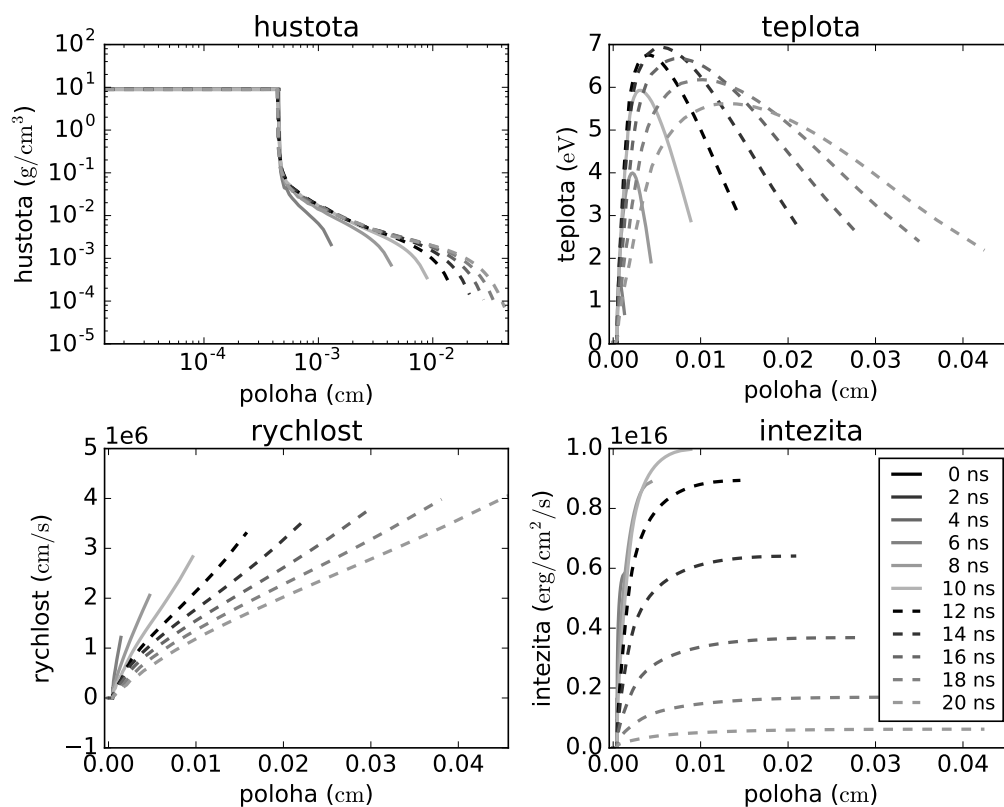
stavové rovnice QEOS [31]) a Poissonovou konstantou $\gamma^{IP} = 5/3$. Simulovanou tloušťku terče volíme $d = 4.5 \mu\text{m}$, kterou pokryjeme geometrickou výpočetní sítí o $N_y = 100$ buňkách s geometrickým faktorem $C_g^{PALE2} = 0.94$ v podélném směru vůči směřování laserového paprsku.

Faktor odlišujeme horním indexem, protože v kódu PALE2 se používá jiný výpočet poloh uzlů sítě oproti zde zavedenému (93). Pro dimenzi x by polohy byly dány:

$$\begin{aligned} r_i &= r_{i-1} + (C_g^{PALE2})^{i-2} \quad \text{pro } i \in \{2, \dots, N_N\}, \\ r_1 &= 0, \\ x_i &= x_{min} + (x_{max} - x_{min}) \frac{r_i}{r_{N_N}}. \end{aligned} \tag{120}$$

Tento postup generování sítě byl pro korektní porovnání též integrován i do jednorozměrného kódu, ale vliv na výsledky je obvykle minimální.

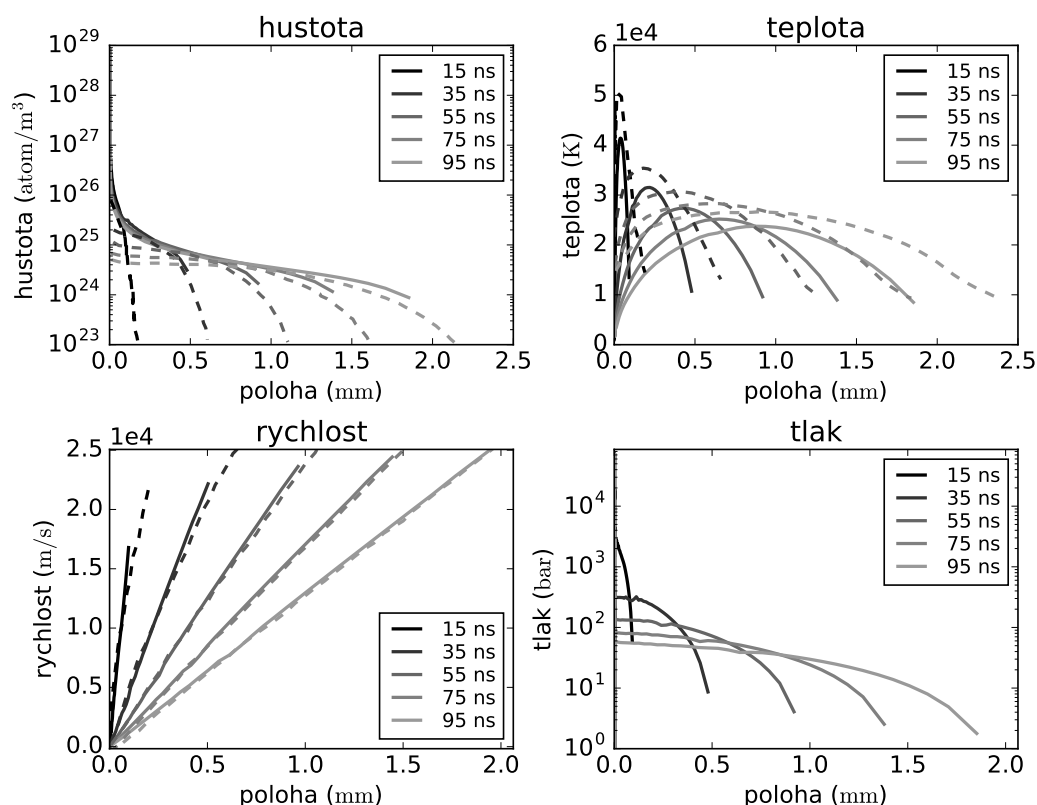
V případě 2D pak používáme rovnoměrnou síť v příčném směru s $N_x = 5$ buňkami. Pomocná síť pro absorpci laseru v kódu PALE2 byla generována podle kapitoly 1.2.1 s trojnásobným zjemněním v příčném směru a pětinasobným v podélném.



Obr. 17: Prostorové průběhy veličin v různých časech získané simulačním kódem PALE2 v 1D úloze se stavovou rovnicí ideálního plynu mezi časy $t_0 = 0 \text{ ns}$ a $t_1 = 20 \text{ ns}$.

Uvedené grafy průběhů veličin v různých časech (Obr. 17) byly dosaženy kódem

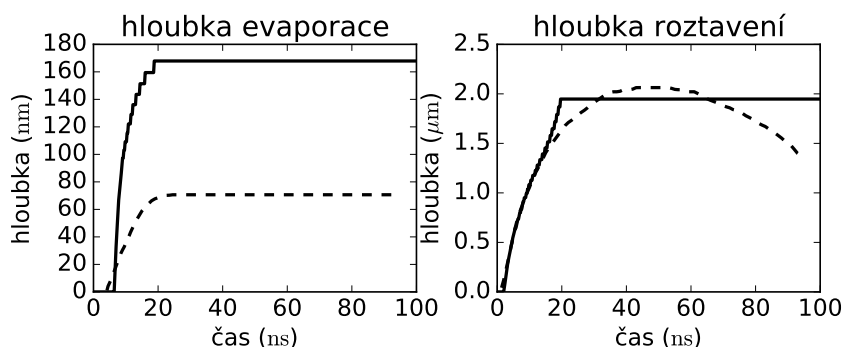
PALE2. Rozdíl od 1D kódu při lineární interpolaci byl například v relativní L_1 normě řádu 10^{-7} v teplotě a grafy by byly okem nerozeznatelné a proto zde uváděny nejsou. Lze z tohoto usuzovat, že simulační kódy mohou jsou v podstatě ekvivalentní v 1D úlohách a je tím ověřena funkčnost všech integrovaných rozšíření do kódu PALE2, mezi které patří zejména zmíněné držení pevné a kapalné fáze, model fázového přechodu, vedení tepla a absorpce laseru. Mimo to je dobře patrná dynamika vzniku plazmové plumy, která dosahuje okolo času 14 ns svého maxima v teplotě, ale dále expanduje a urychluje se. Vzniklé plazma blízké kritické hustotě také stíní terč (angl. plasma shielding), ale díky algoritmu založeného na stacionárních Maxwellových rovnicích zůstává distribuce intenzity stále plynulá a dochází tak k postupnému ohřevu plazmové plumy.



Obr. 18: Srovnání průběhů veličin 1D simulačního kódu (plně) s literaturou [30] (čárkovaně) při použití stavové rovnice QEOS.

Druhá simulace navazuje na Bakalářskou práci, kde byla použita stavová rovnice QEOS [31] a metoda *reinicializace* [8, kapitola 4.4], při které po výpočtu první části simulace stejně jako v předchozím případě do času $t_1 = 20$ ns následovala druhá část až do času $t_2 = 100$ ns. Ve druhé části už neprovádíme absorpci laseru, protože intenzita pulzu už je zanedbatelná a také nesimulujeme pohyb pevné a kapalné fáze, který už na expanzi nemá větší efekt, čímž šetříme výpočetní čas a předcházíme problémům simulace tuhnutí kapalné fáze. Výpočetní síť byla pozměněna na $d = 2.5 \mu\text{m}$ s geometrickým koeficientem $C_g = 0.96$, aby odpovídala předchozí práci.

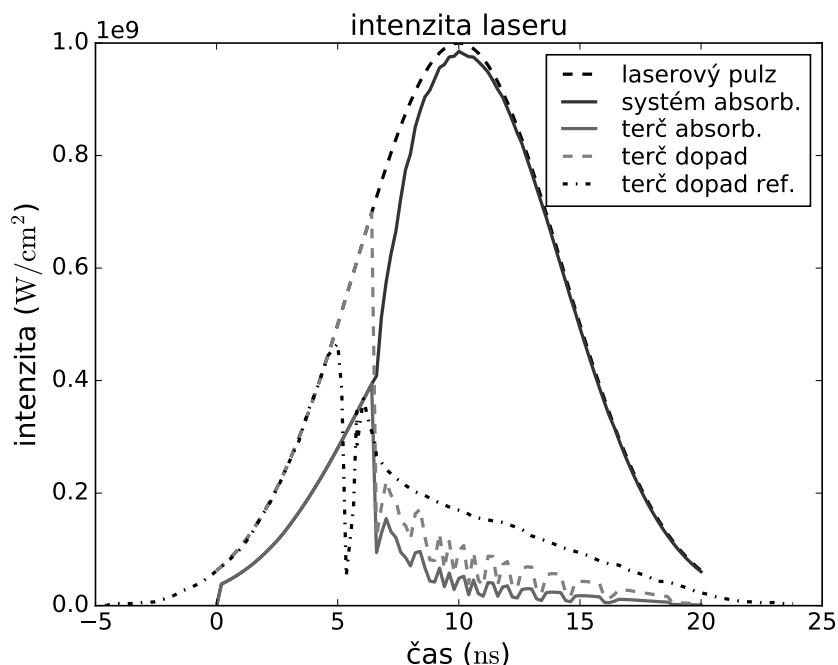
Výsledky (Obr. 18) byly vyhotoveny v 1D simulačním kódu, protože metoda reinicializace nebyla implementována v kódu PALE2, ale z předešlého lze předpokládat, že výsledky by byly naprosto shodné. Srovnání s referenčními daty ukazuje velmi dobrou shodu zejména v rychlostech. Teploty jsou mírně podhodnoceny, což je kompenzováno nepatrně vyšší hustotou, protože vzájemný součin je úměrný hustotě tepelné energie. Bohužel nemáme k dispozici srovnání tlaků, ale lze předpokládat, že při porovnatelné absorpci laserového záření bude i hustota deponované energie podobná. Dále vidíme určité prodloužení jednotlivých křivek veličin, které ovšem získat nemůžeme ani vyšším rozlišením v oblasti čela plazmové plumy, protože zde hraje roli odlišný model odpařování látky. V citovaném článku [30] je totiž použit termodynamický přístup určení tlaku par nad povrchem pomocí *Clausius-Clapeyronovy* rovnice, který je nenulový pro jakékoliv teploty. Dochází tedy odpařování i pod teplotou varu, zatímco v této práci je model držení kapalně fáze (kapitola 3.1) navržen tak, aby především povoloval expanzi až v okolí teploty varu a stejně tak model fázového přechodu je lokalizován do této oblasti. Přes jednoduchost modelu však vidíme, že průběhy si velmi dobře odpovídají pro dané rozlišení, což potvrzuje jejich správnost.



Obr. 19: Srovnání hloubek (ve smyslu množství) odpaření a roztavení materiálu v 1D simulačním kódu (plně) s literaturou [30] (čárkovaně) při použití stavové rovnice QEOS.

Bližší informace o dějích v terči nám poskytnou grafy hloubky odpaření a roztavení (Obr. 19). Hloubky však neodpovídají poloze skutečného rozhraní, ale množství odebraného/roztaveného materiálu terče (přepočítáváno hustotou pevné látky). Jako pozitivní lze hodnotit velmi dobrou shodu hloubky roztavení, která vypovídá zejména o tom, že je funkční a přesné vedení tepla v terči. Mírné zrychlování postupu tavení je dané částečně zadní adiabatickou okrajovou podmínkou, kdy dochází k celkovému navyšování teploty celého terče. Zde by byla vhodnější Dirichletova podmínka na teplotu, která by tomuto jevu zabránila, ale ta vzhledem k odvození schématu v kapitole 2.1 není dostupná. Lze také ukázat, že prosté řešení okrajové podmínky doplněním matice podle inverze vztahu pro přírůstek teploty (75) vede na matici bez převládající diagonály, což vede k numerickým problémům při řešení soustavy. K oběma průběhům je nutno ovšem dodat, že skutečné hodnoty byly vypočítány do času konce první části simulace ($t_1 = 20$ ns) vzhledem k použití metody reinicializace a dále jsou hloubky vyneseny jako konstantní, protože fáze už detailněji nesimulujeme (viz. výše). Tento postup je ospravedlněn tím, že jak vidíme u hloubky evaporace, přibližně po čase 20 ns

už nedochází k odpařování ani v referenční simulaci. Nicméně právě hloubka evaporace je v našem případě nadhodnocena, což vysvětluje mírně vyšší hustoty plazmatu oproti referenci. Na vině jsou především modely držení/přechodu fází, které například nezohledňují nárůst teploty varu s tlakem.



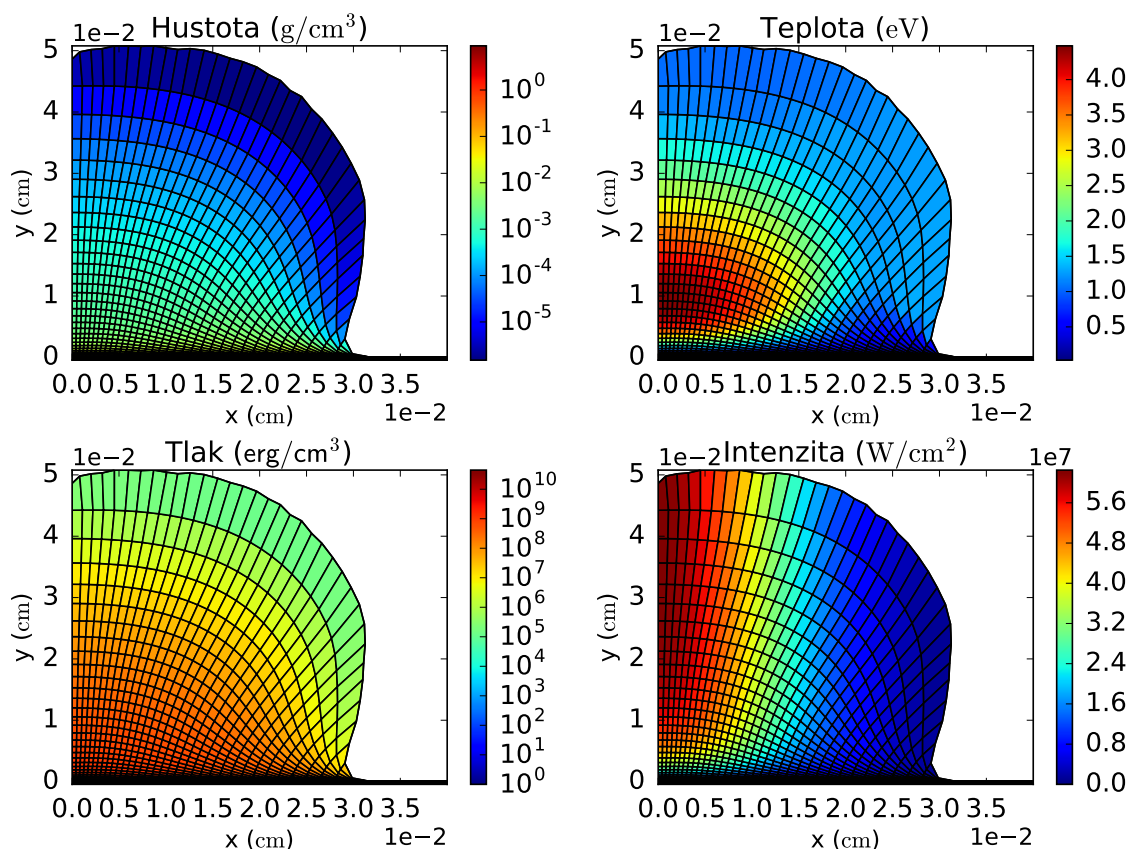
Obr. 20: Porovnání intenzit laseru v čase získané 1D simulačním kódem s literaturou [30] (laserový pulz – příchozí laserový pulz do simulační oblasti, systém absorb. – intenzita absorbovaná v simulovaném systému, terč absorb. – intenzita absorbovaná celým terčem, terč dopad – dopadající intenzita na terč, terč dopad ref. – referenční data dopadající intenzity na terč).

Poslední srovnávanou závislostí jsou intenzity laserového záření v čase (Obr. 20). Porovnáváme průběh intenzity příchozího laserového pulzu, intenzitu, která je absorbována systémem (tj. jejíž divergence je absorbovaným výkonem a zdrojovým členem v rovnici zákona zachování energie (1)), dále intenzitu absorbovanou samotným terčem a také intenzitu dopadající na terč a to včetně referenčních dat. Za terč při tom považujeme veškeré výpočetní buňky, které nebyly odpařeny. Na první pohled je zřejmé, že se zásadně projevila oprava srážkové frekvence podle 1.1, kde se oproti minulé práci výrazně zvýšila celková absorpce díky odrazivosti okolo $R = 0.34$ pro pevnou látku. Dobře také vidíme silné stínění terče plazmatem (angl. plasma shielding), kdy okolo maxima pulzu se dostává k terči pouhých přibližně 10% intenzity. Porovnání intenzity dopadající na terč s referenčními daty ukazuje, že zastínění terče nastává dříve, na což mají vliv již komentované modely držení/přechodu fází. V pozdějších časech je intenzita naopak nižší, ale tady můžeme polemizovat, zda je přesnější náš přístup s určením absorpčních koeficientů ze srážkové frekvence a nebo spíše odvozené zjednodušené koeficienty, ale s rozlišením na interakci elektronu s neutrální částicí a elektron-iontovou

interakci [30]. Drobné oscilace jsou způsobeny problematickou definicí povrchu terče při lagrangeovském přístupu, kdy index poslední kapalného uzlu přeskakuje mezi uzly a graf intenzity je tak nespojitý.

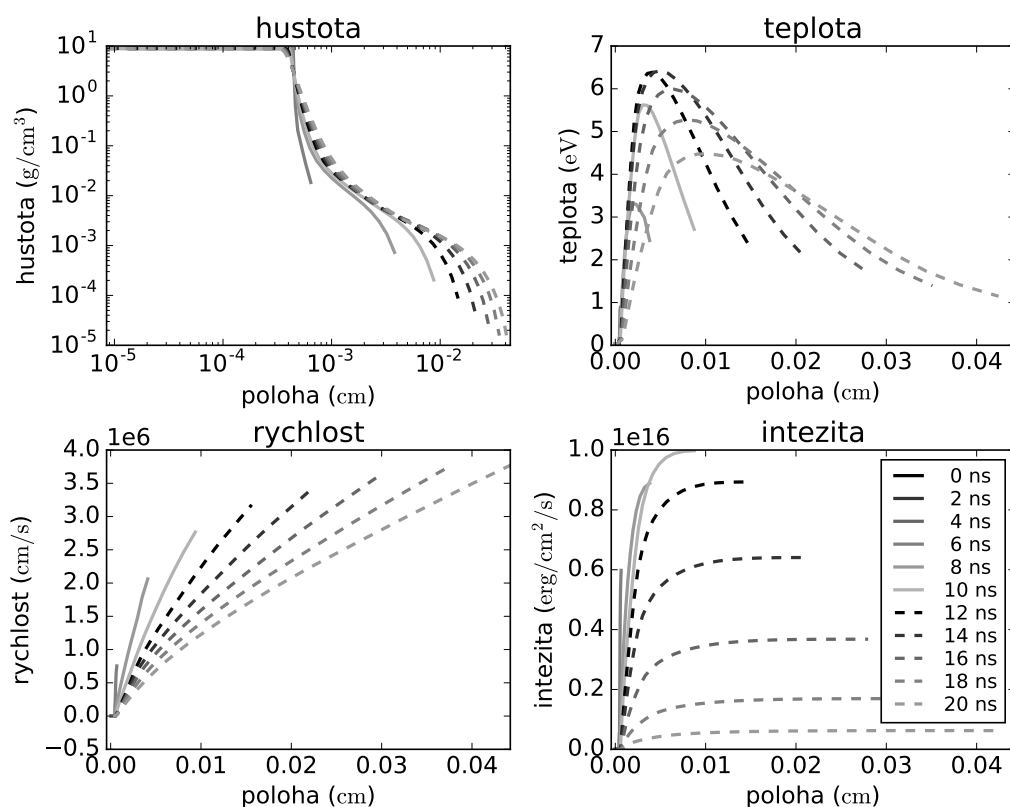
4.2 Dvourozměrné simulace

Dvourozměrné simulace v kódu PALE2 probíhaly v cylindrické geometrii, kde volíme poloměr simulované oblasti terče $r_{max} = 0.5$ mm a hloubku $d = 4.5$ μm . Výpočetní síť generujeme geometrickou v obou dimenzích, v podélném směru s $N_y = 60$ výpočetními buňkami a faktorem $C_{g_y}^{PALE2} = 0.94$ a v příčném směru s $N_x = 39$ buňkami a faktorem $C_{g_x}^{PALE2} = 1.05$. Pomocná síť pro absorpci laseru podle kapitoly 1.2.1 měla nastaveno pětinasobné zjemnění v podélném směru při průměrování přes $N_y^{avg} = 3$ uzly a trojnásobné v příčném směru při průměrování přes celý sloupec (tj. $N_x^{avg} = 61$ uzlů). Pro jednoduchost a porovnatelnost s předchozí podkapitolou používáme opět stavovou rovnici ideálního plynu s týmž nastavením. Stejně tak počítáme od $t_0 = 0$ ns do času $t_1 = 20$ ns. Koeficient tepelné vodivosti používáme původní, takže v plazmatu je ve Spitzer-Härmově aproximaci a v pevné látce konstantní (viz. kapitola 2.2), výsledky pro nový koeficient jsou srovnávány dále.



Obr. 21: Prostorové profily veličin ve falešných barvách v koncovém čase simulace $t_1 = 20$ ns s původním koeficientu tepelné vodivosti.

Vzhledem k rychlé deformaci výpočetní sítě, ke které dochází zejména ablací části povrchu terče zatímco okolí zůstává nehybné, nelze provádět 2D simulace pomocí čistě lagrangeovského přístupu, ale je nutné provádět kroky *rezoningu* a následně *remappingu*, které výpočetní síť vyhladí a přemapují na ni jednotlivé veličiny a tvoří tak základy metody *ALE* [9]. Pro rezoning používáme Winslowovo vyhlazování [32] uvnitř výpočetní oblasti, ale na hranici ponecháváme původní polohy výpočetních uzlů. Tím zůstává zachován tvar plazmové plumy a nejsou výpočetní buňky vytahovány z povrchu terče, což by vedlo k nefyzikálnímu vývoji simulace. Na druhé straně není řešen problém deformace samotné hranice sítě a opakování podobných efektů po odpaření vnější vrstvy terče (tvořící hranici výpočetní oblasti), takže je omezena škálovatelnost simulace k větším rozlišením. Krok rezoningu a remappingu provádíme pravidelně po 40 výpočetních krocích, aby byl stále zachován primárně lagrangeovský charakter simulace a nedošlo k přílišné degradaci výsledků numerickou difuzí.

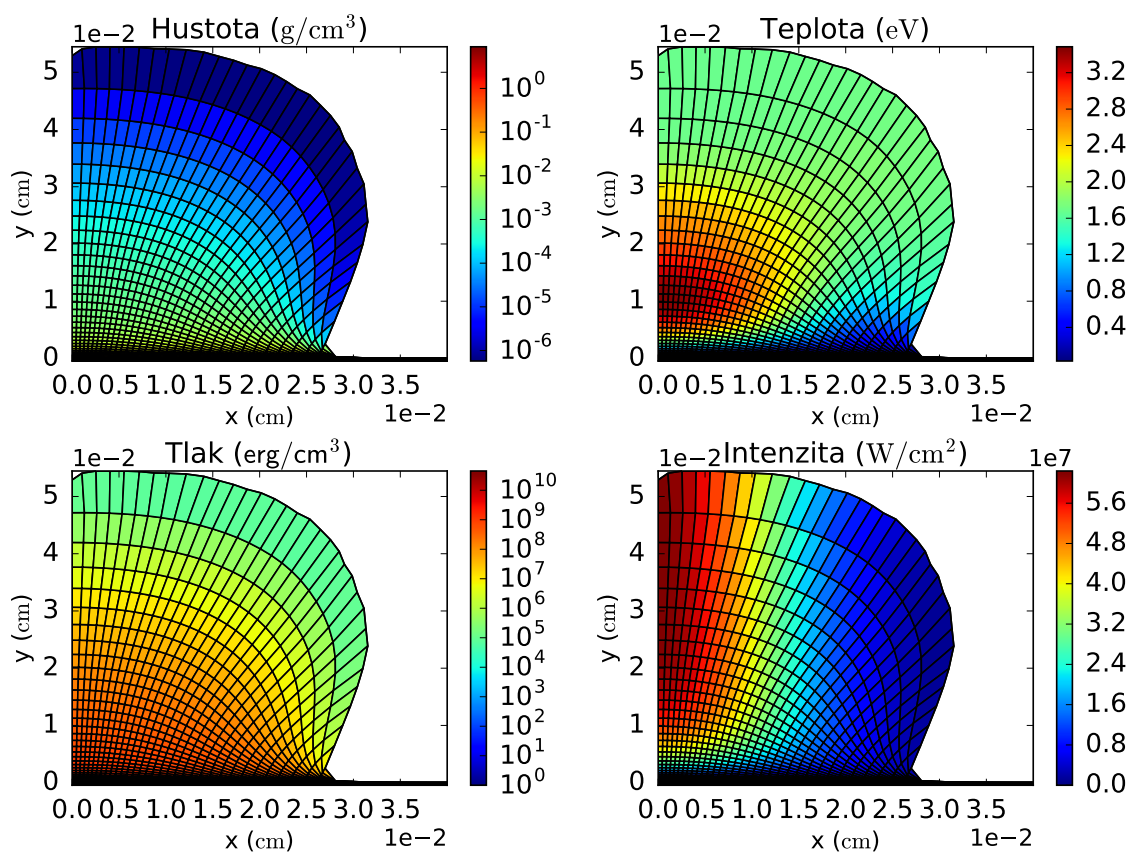


Obr. 22: Podélné průřezy veličin v různých časech na centrální ose s původním koeficientu teplotné vodivosti.

Prostorové průběhy veličin v koncovém čase (Obr. 21) realisticky tvoří profil plazmové plumy [2]. Vidíme zde například stínění terče plazmatem, kdy klesá intenzita před dosažením povrchu terče. Změna intenzity v podélném směru, které odpovídá divergence Poyntingova vektoru a tím i zdrojový člen rovnice zákona zachování energie (1), dobře koresponduje s maximem teploty okolo 0.1 mm nad povrchem terče. Přesto

vedení tepla překonává konvektivní toky z terče a silně odpařuje jeho povrch. Hustota a tlak mají naopak maxima na/u povrchu terče a postupnou podélnou i příčnou expanzí rychle klesají.

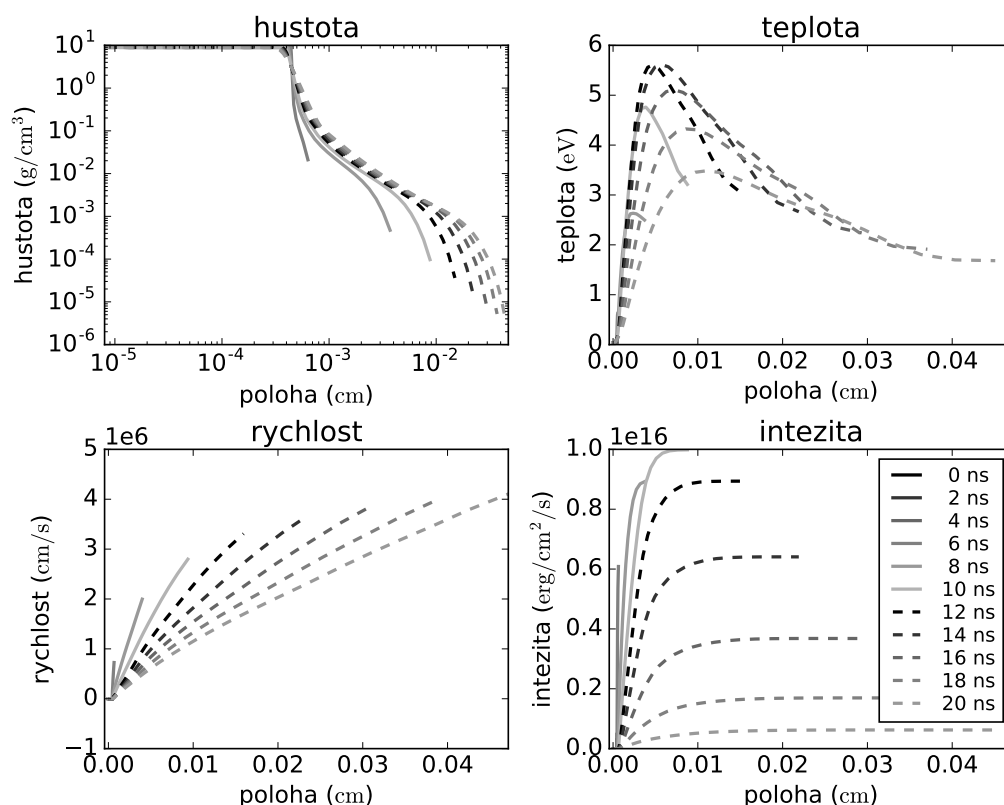
Pro porovnání s předchozí 1D simulací nám poslouží především průřezy veličin na centrální ose (Obr. 22), kde je intenzita laserového pulzu maximální a podobá se tak 1D úloze. Výsledky jsou velmi podobné těm z 1D simulace (Obr. 17), ale největší rozdíl nacházíme u profilu teploty, kde pro větší vzdálenosti od terče teplota rychleji klesá, což lze přisuzovat radiálním tokům tepla, které odvádějí teplo od centrální osy, a stejně tak i konvektivním tokům v téže směru. Tato dynamika vývoje vyplývá z gradientu teploty v příčném směru, který vzniká díky prostorovému profilu laserového pulzu, který v 1D simulaci vůbec neuvažujeme.



Obr. 23: Prostorové profily veličin ve falešných barvách v koncovém čase simulace $t_1 = 20$ ns s koeficientem tepelné vodivosti podle kapitoly 2.2.

Za přesně shodných podmínek, ale s vylepšeným koeficientem vedení tepla podle kapitoly 2.2, byly prováděny 2D simulace, které nám umožňují zhodnotit vliv tohoto koeficientu na výsledky (Obr. 23), (Obr. 24). Změna koeficientu vedení tepla primárně ovlivňuje rozložení teploty, kde jsou rozdíly nejmarkantnější. Teplota u čela plumy je vyšší a naopak maxima teplot blíže terči a kritické hustotě jsou nižší přibližně o 1 eV. Jak bylo uvedeno při zavedení tohoto koeficientu vedení tepla, tak právě v oblasti teplot řádově jednotek eV dochází k navýšení koeficientu a tím i k většímu vedení tepla, které

v podélném směru způsobuje zploštění profilu teploty. V pozdějších časech dokonce dochází téměř k saturaci teplot, ale takovýto vývoj není příliš experimentálně pozorován [2]. Mohli bychom pak diskutovat hodnotu koeficientu omezení tepelného toku f^{max} , ale jelikož je hodnota již relativně malá, snížením bychom zamezili vedení tepla téměř zcela a model koeficientu vedení tepla by nehrál téměř žádnou roli, protože hodnoty by byly dány především právě tímto omezením. Nicméně ze samotného charakteru efektu koeficientu vedení tepla ve 2D, který by byl ještě výraznější v 1D díky neexistenci radiálních toků tepla, shledáváme tento model koeficientu spíše nevhodný pro simulace ablace za nízkých intenzit laserového záření.



Obr. 24: Podélné průřezy veličin v různých časech na centrální ose s koeficientem tepelné vodivosti podle kapitoly 2.2.

Závěr

Modelování metody PLD je komplexní úloha vyžadující zahrnutí vícero rozšíření a modelů do základního fluidního popisu látky. Konkrétně byly v práci zkoumány a vylepšovány modely absorpce laserového záření, celkové problematiky vedení tepla, držení pevné a kapalně fáze a také model fázového přechodu.

Dynamika systému je u simulací laserového plazmatu silně provázána s absorpcí laserového záření a u simulací s nízkou intenzitou dopadajícího záření (z hlediska laserového plazmatu) je zejména nutné detailně simulovat rozložení intenzity laserového pulzu. V tomto ohledu byl model absorpce na kritické hustotě, který je součástí kódu PALE2, zcela nedostačující. V rámci této práce byl proto vytvořen nový algoritmus absorpce laserového záření, který je založen na použití opraveného modelu se stacionárními Maxwellovými rovnicemi spolu se zcela novým algoritmem geometrického mapování. Tento kód je schopen detailně simulovat postupnou atenuaci laserového pulzu v plazmatu i v pevné látce, kde byla provedena korekce srážkové frekvence podle skutečné odrazivosti materiálu. Navíc byl výsledný kód v programovacím jazyce C paralelizován pro výpočet ve více vláknech na CPU (Central Processing Unit) nebo GPU (Graphics Processing Unit), čímž bylo dosaženo nemalého urychlení výpočtu. Kromě toho je algoritmus resp. počítačový kód mapování zcela obecný při splnění daných předpokladů a lze jej proto použít i v jiných úlohách.

Simulace ablace a expanze plazmatu také klade nemalé nároky na model vedení tepla, protože energetická bilance terče je vzhledem k zastínění terče plazmatem do velké míry dána vedením tepla v terči, ale také nad ním v hustém plazmatu. Podobně pak v plazmové plumě profil teploty závisí na axiálních a radiálních tocích tepla. Z těchto důvodů bylo v této práci odvozeno numerické schéma vedení tepla druhého řádu konvergence, které bylo následně úspěšně implementováno v 1D simulačním kódu i kódu PALE2 a také náležitě otestováno. Takto postavené schéma pak může být použito pro jakékoliv simulace a to nejen metody PLD.

Koeficient tepelné vodivosti byl pro lepší aproximaci plazmatu středních teplot vylepšen podle globálního modelu srážkové frekvence použitého modelu absorpce laserového záření. Simulace však ukázaly, že tento model pro některé parametry úlohy není vhodný, takže použití musí být vždy zváženo s ohledem na charakter dané úlohy.

Zkoumána také byla korektnost a přesnost metody rozkladu použité pro sloučení schématu vedení tepla s algoritmem řešení Eulerových rovnic hydrodynamiky. Na úloze nelineárně advektivně-difuzní rovnice, pro kterou bylo odvozeno analytické řešení, bylo demonstrováno, že rozklad je korektní a nesnižuje řád konvergence celkového schématu, ale že existují vhodnější postupy rozkladu. Navrhovaný postup je však implementačně náročnější a jeho přínos může záviset i na ostatních modelech a schématech.

Vzhledem k intenzitám laserového záření blízkým ablačnímu prahu je nutné simulovat termodynamiku fázového přechodu, která se už nezanedbatelnou měrou odráží na energetické bilanci látky. Tento model spolu s vylepšeným modelem držení pevné a kapalně fáze, který napodobuje přirozené chování pevnolátkového terče, byly proto po vzoru předešlé práce rozšířeny i do 2D, implementovány a integrovány do simulačního kódu PALE2.

Nové modely byly otestovány na numerických simulacích odpovídajícím reálným

parametrům při depozici metodou PLD. V kapitole 4 byla ukázána naprostá shoda obou používaných kódů (1D kódu vyvinutého v rámci předešlé práce a kódu PALE2) u 1D úlohy. Velmi dobré výsledky byly dosaženy i v porovnání s literaturou, kde došlo vlivem opravy kódu absorpce laseru k významnému zlepšení. Byl však identifikován problém v podobě závislosti teploty varu na tlaku, jehož řešení by však vyžadovalo konstrukci komplexnějšího modelu fázového přechodu a zůstává tak námětem pro budoucí práci.

Rozšíření 1D úlohy do 2D prokázalo rozdíly obou přístupů při porovnání axiálních průřezů. Výsledky ukazují také reálné modelování tvorby plazmové plumy nad terčem. Zároveň se hladkou distribucí intenzity laserového záření demonstrují schopnosti algoritmu mapování pro absorpci laseru.

Námětem pro budoucí práci by však mohlo být řešení vyhlazování výpočetní sítě na hranici výpočetní oblasti, které nakonec muselo být vyřazeno ze simulace zcela. Posunutí výpočetních uzlů totiž nesmí způsobit vysunutí z terče a tím nefyzikální „odpaření“. Musí být zachován tvar hranice, ale ten nemůžeme definovat pouze z posledních uzlů, které mohou být zatíženy chybou, takže celkově problematika vyžaduje intenzivnější zkoumání. Do současného modelu absorpce laseru by mohly být vedle inverzního brzděného záření zahrnuty také další mechanismy absorpce. Kromě toho algoritmus mapování na pomocnou síť by mohl používat vyšší řád interpolace, což by vylepšilo absorpci laseru zejména za vyšších intenzit.

Literatura

- [1] D. Marla, U. V. Bhandarkar and S. S. Joshi. Critical assessment of the issues in the modeling of ablation and plasma expansion processes in the pulsed laser deposition of metals. *Journal of Applied Physics*, 109(2):021101, 2011. ISSN 00218979. doi:10.1063/1.3537838.
- [2] C. Ursu, S. Gurlui, C. Focsa and G. Popa. Space- and time-resolved optical diagnosis for the study of laser ablation plasma dynamics. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 267(2):446–450, 2009. ISSN 0168583X. doi:10.1016/j.nimb.2008.10.057.
- [3] J. G. Lunney. Pulsed laser deposition of metal and metal multilayer films. *Applied surface science*, 86(94):79–85, 1995. ISSN 0169-4332.
- [4] I. W. Boyd. Thin film growth laser deposition by pulsed laser deposition. *Ceramics International*, 22(95):429–434, 1996. ISSN 1544-2217. doi:10.1177/0300985810372508.
- [5] A. Stanculescu, M. Socol, O. Rasoga, I. N. Mihailescu, G. Socol, N. Preda, C. Breazu and F. Stanculescu. Laser prepared organic heterostructures on glass/AZO substrates. *Applied Surface Science*, 302:169–176, 2014. ISSN 01694332. doi:10.1016/j.apsusc.2014.01.181.
- [6] N. Farid, S. S. Harilal, H. Ding and A. Hassanein. Emission features and expansion dynamics of nanosecond laser ablation plumes at different ambient pressures. *Journal of Applied Physics*, 115(3):1–10, 2014. ISSN 00218979. doi:10.1063/1.4862167.
- [7] E. Millon. Advanced functional oxide thin films grown by pulsed-laser deposition. *Applied Surface Science*, 278:2–6, 2013. ISSN 01694332. doi:10.1016/j.apsusc.2012.10.190.
- [8] J. Nikl. *Hydrodynamické simulace ablace a expanze plazmatu při pulzní laserové depozici*. Bakalářská práce, FJFI ČVUT v Praze, 2015.
- [9] M. Kuchařík. *Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) Methods in Plasma Physics*. Disertační práce, FJFI ČVUT v Praze, 2006.
- [10] S. Atzeni and J. Meyer-ter Vehn. *The Physics of Inertial Fusion: Beam Plasma Interaction, Hydrodynamics, Hot Dense Matter*. Oxford University Press, 2004. ISBN 0198562640.
- [11] T. Kapin, M. Kuchařík, J. Limpouch and R. Liska. Hydrodynamic simulations of laser interactions with low-density foams. *Czechoslovak Journal of Physics*, 56, 2006. ISSN 00114626. doi:10.1007/s10582-006-0243-y.
- [12] J. Velechovský. *Modelování absorpce laserového záření v plazmatu*. Bakalářská práce, FJFI ČVUT v Praze, 2009.

- [13] J. Velechovský. *Numerické metody modelování laserového plazmatu*. Diplomová práce, FJFI ČVUT v Praze, 2011.
- [14] K. Eidmann, J. Meyer-ter Vehn, T. Schlegel and S. Hüller. Hydrodynamic simulation of subpicosecond laser interaction with solid-density matter. *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, 62(1 B):1202–1214, 2000. ISSN 1063651X. doi:10.1103/PhysRevE.62.1202.
- [15] L. Spitzer and R. Härm. Transport phenomena in a completely ionized gas. *Physical Review*, 89(5):977–981, 1953. ISSN 0031899X. doi:10.1103/PhysRev.89.977.
- [16] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders, 1976.
- [17] X. Mao and R. E. Russo. Observation of plasma shielding by measuring transmitted and reflected laser pulse temporal profiles. *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, 64(1):1–6, 1996. ISSN 0947-8396. doi:10.1007/s003390050437.
- [18] OpenMP Architecture Review Board. *OpenMP Application Programming Interface*, 2015. URL <<http://www.openmp.org/mp-documents/openmp-4.5.pdf>>.
- [19] NVIDIA Corporation. *CUDA Toolkit Documentation v7.5*, 2015. URL <<http://docs.nvidia.com/cuda/index.html>>.
- [20] M. Berndt, J. Breil, S. Galera, M. Kuchařík, P. H. Maire and M. Shashkov. Two-step hybrid conservative remapping for multimaterial arbitrary Lagrangian-Eulerian methods. *Journal of Computational Physics*, 230(17):6664–6687, 2011. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2011.05.003.
- [21] IEEE standard for floating-point arithmetic. *IEEE Std 754-2008*, pages 1–70, 2008. doi:10.1109/IEEESTD.2008.4610935.
- [22] J. Šilar. *Hydrodynamické modelování laserového plazmatu*. Bakalářská práce, FJFI ČVUT v Praze, 2008.
- [23] M. Shashkov and S. Steinberg. Solving diffusion equations with rough coefficients in rough grids. *Journal of Computational Physics*, 129(2):383–405, 1996. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.1996.0257.
- [24] The Numerical Algorithms Group Ltd, Oxford, UK. *NAG Library Manual*, 2015. URL <http://www.nag.co.uk/numeric/fl/nagdoc_f125/html/frontmatter/manconts.html>.
- [25] E. Caramana, D. Burton, M. Shashkov and P. Whalen. The construction of compatible hydrodynamics algorithms utilizing conservation of total energy. *Journal of Computational Physics*, 146(1):227–262, 1998. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.1998.6029.

- [26] K. Sakai and I. Kimura. A numerical scheme based on a solution of nonlinear advection–diffusion equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 173:39–55, 2005. ISSN 0377-0427. doi:10.1016/j.cam.2004.02.019.
- [27] E. Caramana, M. Shashkov and P. Whalen. Formulations of Artificial Viscosity for Multi-dimensional Shock Wave Computations. *Journal of Computational Physics*, 144(1):70–97, 1998. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.1998.5989.
- [28] S. K. Sambasivan, M. J. Shashkov and D. E. Burton. A cell-centered Lagrangian finite volume approach for computing elasto-plastic response of solids in cylindrical axisymmetric geometries. *Journal of Computational Physics*, 237:251–288, 2013. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2012.11.044.
- [29] P. H. Maire, R. Abgrall, J. Breil, R. Loubère and B. Rebourec. A nominally second-order cell-centered Lagrangian scheme for simulating elastic-plastic flows on two-dimensional unstructured grids. *Journal of Computational Physics*, 235:626–665, 2013. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2012.10.017.
- [30] A. Bogaerts, Z. Chen, R. Gijbels and A. Vertes. Laser ablation for analytical sampling: what can we learn from modeling? *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 58(11):1867–1893, 2003. ISSN 05848547. doi:10.1016/j.sab.2003.08.004.
- [31] R. M. More, K. H. Warren, D. a. Young and G. B. Zimmerman. A new quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter. *Physics of Fluids*, 31(10):3059, 1988. ISSN 00319171. doi:10.1063/1.866963.
- [32] A. M. Winslow. Numerical Solution of the Quasilinear Poisson Equation in a Nonuniform Triangle Mesh. *Journal of Computational Physics*, 135(2):128–138, 1997. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.1997.5698.