

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

# Numerické metody modelování laserového plazmatu

Diplomová práce

Autor práce: **Bc. Jan Velechovský**  
Vedoucí: **doc. Ing. Richard Liska, CSc.**  
Konzultant: **prof. Ing. Jiří Limpouch, CSc.**  
Školní rok: **2010/2011**



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

Praha, 5. 5. 2011

Jan Velechovský



# Poděkování

Je milou povinností na tomto místě poděkovat především vedoucímu práce doc. Ing. Richardu Liskovi, CSc. za poskytnutí všech cenných informací, za jeho trpělivost a čas věnovaný podnětným konzultacím a v neposlední řadě za mnohé rady a poznámky k tomuto textu. Dále děkuji prof. Ing. Jiřímu Limpouchovi, CSc. za diskuse problematiky absorpce laserového záření v plasmatu a užitečné připomínky k jejímu modelu. Rád bych zde také vyjádřil poděkování svým rodičům za jejich lásku a starostlivou podporu během mého studia.

Tato diplomová práce byla částečně podporována následujícími projekty: SGS ČVUT č. 10/299/OHK4/3T/14, GAČR č. P205/10/0814, výzkumný záměr č. MSM6840770022.

Jan Velechovský



Název práce: **Numerické metody modelování laserového plasmatu**  
Autor: Jan Velechovský  
Obor: Inženýrská informatika  
Druh práce: Diplomová práce  
Vedoucí práce: doc. Ing. Richard Liska, CSc.  
Katedra fyzikální elektroniky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská  
Konzultant: prof. Ing. Jiří Limpouch, CSc.  
Katedra fyzikální elektroniky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

## Abstrakt

Práce pojednává o hydrodynamickém modelování plasmatu a má dvě základní části. První se zabývá výpočtem absorpce laserové energie. Pro určení šíření fokusovaného laserového svazku v plasmatu je použit algoritmus trasování paprsků. Hlavními mechanismy absorpce energie je inverzní brzdné záření a rezonanční absorpce. Tento model byl za účelem simulace interakce intenzivního laserového svazku s terčíkem tvořeným jednou, případně dvěma foliemi, implementován do 2D Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) hydrodynamického kódu. Druhá část práce je věnována remapování konzervativních veličin v ALE metodě. Navrhnuté remapování používá po částech parabolickou rekonstrukci a je třetího řádu přesnosti na hladkém řešení. Uvádíme výsledky získané použitím tohoto remapování v ALE metodě a v testu cyklického remapování.

Klíčová slova: trasování paprsků, laserové plasma, ALE, remapování

Title: **Numerical methods for laser plasma modeling**  
Author: Jan Velechovský

## Abstract

The thesis deals with hydrodynamical modeling of laser plasma and has two basic parts. The first one is concerned with computation of laser energy deposition. Ray tracing algorithm is developed to determine focused laser beam propagation in plasma. The main deposition mechanism of its energy are inverse bremsstrahlung and resonant absorption. This model was implemented to 2D Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) hydrodynamical code to simulate interaction of the intense laser beam with single- and double-foil target. The second part of the thesis is dedicated to conservative quantity remapping in ALE method. Proposed remapping technique use piecewise parabolic reconstruction and is third order accurate on smooth solution. Results obtained by the remapping in ALE method and cyclic remapping tests are shown.

Keywords: ray tracing, laser plasma, ALE, remapping





# Obsah

Úvod	1
<b>1 Hydrodynamický model laserového plasmatu</b>	<b>3</b>
<b>2 Absorpce laserového záření v plasmatu</b>	<b>7</b>
2.1 Šíření laserového záření v plasmatu	9
2.1.1 Paprsková rovnice	10
2.2 Mechanismy absorpce laserového záření	13
2.2.1 Inverzní brzdné záření	13
2.2.2 Rezonanční absorpce	15
2.3 Parametry laserového svazku	17
2.4 Popis numerického modelu	19
2.4.1 Model absorpce na kritické ploše	21
2.4.2 Model absorpce s trasováním paprsků	22
<b>3 Metoda ALE a remapování</b>	<b>29</b>
3.1 Po částech konstantní rekonstrukce	31
3.2 Po částech lineární rekonstrukce	32
3.2.1 Limitování sklonu rekonstrukce	32
3.3 Po částech parabolická rekonstrukce	34
3.3.1 Limitování koeficientů rekonstrukce	36
3.3.2 Metoda aproximací hodnot v uzlech	37
3.4 Výpočet numerických toků	38
3.5 Rozšíření Lagr. metody vysokého řádu na ALE	40
<b>4 Numerické testy a výsledky</b>	<b>43</b>
4.1 Simulace interakce laseru s pevnými terčiky	43
4.1.1 Masivní hliníkový terčik	43
4.1.2 Tenká hliníková fólie	45
4.1.3 Dvě rovnoběžné fólie	47
4.2 Remapování	51
4.2.1 Cyklické remapování	54
4.3 Metoda ALE vysokého řádu přesnosti	61
4.3.1 Konvergence na hladkém řešení	61
4.3.2 Nespojité případy s rázovou vlnou	62
<b>Závěr</b>	<b>65</b>
<b>Publikace</b>	<b>67</b>
<b>Literatura</b>	<b>69</b>



# Úvod

Numerické modelování fyzikálních procesů je mocným nástrojem moderní fyziky. Přestože matematický aparát vždy popisuje stav a vývoj systému pouze v jistém přiblížení, je nalezení analytických řešení ve skutečném komplexních fyzikálních systémech nemožné. K získání řešení je nutné navrhnou příslušné numerické postupy a modelovat tyto procesy za použití výpočetní techniky.

V této práci zkoumáme vybrané aspekty hydrodynamických modelů. Jedná se o modely dynamiky tekutin a také o modely šíření laserového záření v plasmatu pro modelování interakce záření výkonového pulsního laseru s hmotou. Tu v našem případě představuje terčik, který se vlivem absorbované energie záření rychle ohřívá a ze kterého expanduje plasma v koruně proti směru dopadajícího záření.

Prvním cílem práce je zdokonalení modelu absorpce zahrnutím sbíhavosti laserového svazku a implementace tohoto modelu do kódu PALE [1, 2]. Tato část navazuje na bakalářskou práci [3] zabývající se modelováním absorpce laserového záření v plasmatu. V ní byla popsána základní fyzika interakce a představeny jednoduché modely absorpce v 1D a ve 2D. Zde zmíněný proces interakce laserového záření s plasmatem popíšeme důkladněji, a to jak z hlediska směru šíření záření, tak i útlumu. Soustředíme se na nanosekundové laserové pulsy s frekvencí ve viditelném spektru s maximální intenzitou řádově  $10^{15}$  W/cm<sup>2</sup>. Představíme zde realističtější numerický model založený na sledování trajektorií jednotlivých paprsků [4, 5] sbíhavého laserového záření, navrhne jeho implementaci a provedeme několik simulací pro srovnání s jednoduššími modely. Pro popis šíření laserového pole v plasmatu používáme přiblížení geometrické optiky, které zanedbává jeho vlnové vlastnosti. Požadujeme tedy, aby charakteristické rozměry plasmatu byly velké ve srovnání s vlnovou délkou záření. Uvažovanými mechanismy deponování energie v plasmatu jsou inverzní brzdné záření a rezonanční absorpce [6]. Protože rychlost laserového záření je nesrovnatelně vyšší než rychlost pohybu vlastního plasmatu, můžeme řešit šíření záření a absorpci energie laseru v každém časovém kroku simulace nezávisle. Problém interakce laseru s plasmatem si rozdělíme jednak na hledání optické dráhy, a pak na popis útlumu záření podél této trajektorie.

Druhá část práce se věnuje vlastnímu numerickému řešení soustavy hydrodynamických rovnic, konkrétně pak metodě ALE [7] kombinující Lagrangeovský a Eulerovský přístup. Důležitou součástí této metody je remapování, tedy konzervativní interpolace zachovávajících se veličin ze staré Lagrangeovské sítě na vyhlazenou

sít. Současné metody remapování [8, 9, 10] používají před integrací přes buňky vyhlazené sítě rekonstrukci, která je po částech lineární, a jsou druhého řádu přesnosti na hladkém řešení. Cílem této části je návrh remapování využívajícího po částech parabolickou rekonstrukci, které bude třetího řádu přesnosti a zároveň nebude vytvářet nové extrémy v okolí rázových vln na nespojitých řešeních. Jedním ze známých přístupů vedoucích ke splnění poslední jmenované vlastnosti je omezení koeficientů rekonstrukce pomocí tzv. limiterů [11]. Tyto limity používají například několik různých diferenčních náhrad pro výpočet derivací v dané buňce výpočetní sítě a jejich vhodnou kombinací se snaží předejít vzniku nových extrémů při remapování. Popíšeme vybrané limity pro po částech lineární [12, 13] a po částech parabolickou rekonstrukci [14, 15, 16] a porovnáme jejich výsledky na problému cyklického remapování. Bude nás zajímat především experimentální ověření jejich řádů konvergence na hladkém řešení a zachování mezí v nespojitých případech. Výsledky srovnáme s remapováním využívajícím metody FCT [17], která hledá vhodnou kombinaci mezi toky nízkých řádů zachovávajících meze a toky vyšších řádů přesnějších na hladkém řešení. Vybrané remapování použijeme k rozšíření 1D Lagrangeovské metody vysokého řádu přesnosti na hladkém řešení [18] na ALE metodu a ověříme zachování řádu konvergence na hladkém řešení.

Obsah práce si nyní popíšeme podrobněji. V první kapitole uvádíme systém rovnic hydrodynamického modelu pro dynamiku tekutin a pro laserové plasma formulovaný v Lagrangeovských souřadnicích. Zmiňujeme zde předpoklady jeho použití a dáváme do souvislosti dvě různé Lagrangeovské formulace použité v modelech [1] a [18].

Druhá kapitola se zabývá šířením elektromagnetického záření v plasmatu. Kromě základních disperzních vztahů pro plasma zde popisujeme určení směru šíření a hlavní mechanismy absorpce energie laseru. Představujeme Gaussovský model pro popis fokusovaného laserového svazku. Dále formulujeme model absorpce na kritické ploše a model s trasováním paprsků pro tento laserový svazek a navrhujeme jejich implementaci na logicky ortogonální čtyřúhelníkové síti do 2D kódu PALE.

Třetí kapitola je věnována remapování v ALE metodě. Uvádíme zde různé přístupy pro výpočet po částech lineární a především po částech parabolické rekonstrukce využívané v remapování vysokého řádu přesnosti. V závěru kapitoly popisujeme rozšíření Lagrangeovské metody vysokého řádu přesnosti na hladkém řešení [18] na ALE metodu.

Poslední kapitola je pak zaměřena na testování modelu absorpce laserového záření s trasováním paprsků a testování různých metod remapování. Trasování paprsků ověříme při modelování interakce laserového záření s pevným terčíkem tvořeným jednou, respektive dvěma slabými kovovými foliemi. Různé metody remapování ověříme na problému cyklického remapování a vybranou metodu také v kompletní ALE metodě pro hydrodynamiku tekutin.

# Kapitola 1

## Hydrodynamický model laserového plasmatu

V této kapitole uvedeme předpoklady použití hydrodynamického popisu, dále uvedeme systém rovnic popisující dynamiku tekutin, respektive laserového plasmatu, formulovaný v Lagrangeovských souřadnicích. Vybraným aspektům jeho numerického řešení se věnujeme v dalších kapitolách. Jmenovitě se jedná o absorpci laseru metodou trasování paprsků v 2D ALE kódu pro laserové plasma a o rozšíření 1D Lagrangeovského kódu vysokého řádu přesnosti pro popis tekutin na kompletní ALE metodu s remapováním vysokého řádu přesnosti. Pro oba zmíněné případy v této kapitole uvedeme matematickou formulaci problému.

Hydrodynamický popis se používá především pro modelování komplexního problému interakce laseru s terčíky, který by bylo možno jen obtížně modelovat pomocí částicových kódů. Tyto kódy řeší pohybové rovnice pro vlastní částice plasmatu a bývají tedy výpočetně náročné. Další možností je popis plasmatu pomocí kinetické teorie, kde hledáme distribuční funkci  $f(\vec{x}, \vec{v}, t)$  udávající počet částic v daném místě s danou rychlostí. Kinetický popis se tak neomezuje pouze na stavy s lokální termodynamickou rovnováhou, ovšem je rovněž výpočetně náročný. V hydrodynamickém popisu si musíme vystačit s rovnovážným rozdělením rychlostí popsáním jediným parametrem – teplotou.

Předpoklady pro použití hydrodynamického popisu laserového plasmatu mohou být snadno ilustrovány uvážením vlivu zahřívání plasmatu na distribuční funkci, středními dobami výměny energie mezi částicemi plasmatu a jejich volnými drahami. Tyto časové a prostorové parametry musí být menší než typické rozměry zkoumaného laserového plasmatu. Je možné ukázat, že distribuční funkce elektronů zahříváných srážkovou absorpcí pro střední intenzity laserů, tj. pro parametr  $I \cdot \lambda^2 < 10^{14} \text{ W/cm}^2 \cdot \mu\text{m}^2$ , se významně neodlišuje od rovnovážného Maxwellovského rozdělení [6].

Základem obecného hydrodynamického popisu jsou zákony zachování hmoty, hybnosti a energie. Ty jsou v případě neviské kapaliny vyjádřeny soustavou Eulerových rovnic. Obecnější případ představují Navier-Stokesovy rovnice. Tyto rovnice je

třeba uzavřít stavovou rovnicí, svazující spolu tlak, teplotu, vnitřní energii a hustotu, a v případě laserového plasmatu je doplnit o další relevantní fyzikální procesy, jako je absorpce laseru či tepelná vodivost.

V případě numerického řešení těchto rovnic na počítači rozdělíme simulovanou oblast na velký počet malých podoblastí, ve kterých nahradíme derivace konečnými diferencemi a soustavu parciálních diferenciálních rovnic tak převedeme na soustavu rovnic obyčejných. Toto dělení zpravidla provádíme zavedením výpočetní sítě<sup>1</sup>. Jsou zde možné dva přístupy. Eulerovské metody používají pevnou výpočetní síť a počítají toky hydrodynamických veličin mezi jejími buňkami. Naopak Lagrangeovský přístup fixuje pohyb výpočetní sítě na pohyb zkoumané látky. Pohyblivá výpočetní síť jednak umožňuje snadnou formulaci okrajových podmínek v případě pohybujících se rozhraní a také přirozeným způsobem mění prostorové rozlišení sítě při kompresi či expanzi látky. Tyto dvě vlastnosti jsou klíčové pro modelování interakce laseru s terčíkem, kde se setkáváme jak s volným rozhraním při expanzi plasmatu do vakua, tak s výraznou změnou velikosti oblasti simulované interakce.

Základní soustava Eulerových rovnic v Lagrangeovských souřadnicích má tvar

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \vec{u} = 0 \quad (1.1)$$

$$\rho \frac{d\vec{u}}{dt} + \operatorname{grad} p = 0 \quad (1.2)$$

$$\rho \frac{d\epsilon}{dt} + p \operatorname{div} \vec{u} = 0, \quad (1.3)$$

kde  $\rho$  značí hustotu,  $\vec{u}$  rychlost,  $p$  tlak,  $\epsilon = E/\rho - \vec{u}^2/2$  vnitřní energii na jednotku hmoty,  $E$  celkovou energii na jednotku objemu. Derivace  $\frac{d}{dt}$  podél trajektorie přitom obsahuje advektivní člen, tedy

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \operatorname{grad},$$

pohyb výpočetní sítě je popsán rovnicí

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u},$$

a stavová rovnice má tvar

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

Pro modelování laserového plasmatu musíme zákon zachování energie (1.3) doplnit o tepelnou vodivost a absorpci laseru, přejde tedy na tvar

$$\rho \frac{d\epsilon}{dt} + p \operatorname{div} \vec{u} = - \operatorname{div} \vec{I} + \operatorname{div}(\kappa \operatorname{grad} T), \quad (1.4)$$

kde  $T$  označuje teplotu,  $\kappa$  tepelnou vodivost a  $\vec{I}$  Poyntingův vektor, tedy hustotu toku energie laseru, dále nazývanou též intenzita. Tento fyzikální model laserového

<sup>1</sup>Existují i jiné způsoby řešení hydrodynamických rovnic, viz. např. SPH

plasmatu je použit v dvoudimenzionálním ALE<sup>2</sup> [7] kódu PALE [1, 2]. Výpočtu divergence intenzity laserového pole pomocí trasování paprsků v tomto kódu se podrobně věnujeme v druhé kapitole. Popis tepelné vodivosti či řešení vlastní hydrodynamiky v kódu PALE je možné nalézt v [2]. Pro přesnější popis laserového plasmatu je možné další rozšíření těchto rovnic, například o radiační transport, magnetická pole, transport netermálních<sup>3</sup> částic, dvoutepelní<sup>4</sup> model, přiřazující oddělené teploty iontům a elektronům, a další. Aplikaci těchto modelů v hydrodynamických kódech popisuje např. [6].

V hydrodynamickém popisu se setkáváme i s jiným tvarem Eulerových rovnic v Lagrangeovských souřadnicích. Pro jednoduchost budeme uvažovat pouze jednodimenzionální případ. Zákon zachování hmoty přepíšeme pro proměnou  $\tau = 1/\rho$

$$\rho \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\rho} \right) - \operatorname{div} u = 0, \text{ neboť } \frac{d\tau}{dt} = \frac{d\tau}{d\rho} \frac{d\rho}{dt} = -\frac{1}{\rho^2} \frac{d\rho}{dt}.$$

Vyjádřením vnitřní energie  $\epsilon$  ve tvaru  $\epsilon = e - u^2/2$ , přejdeme v rovnici (1.3) k vyjádření pro celkovou energii na jednotku hmoty  $e$

$$\begin{aligned} \rho \frac{d}{dt} \left( e - \frac{u^2}{2} \right) + p \frac{\partial u}{\partial x} &= 0 \\ \rho \left( \frac{de}{dt} - u \frac{du}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (pu) - u \frac{\partial p}{\partial x} &= 0 \\ \rho \frac{de}{dt} + \frac{\partial}{\partial x} (pu) - u \left( \rho \frac{du}{dt} + \frac{\partial p}{\partial x} \right) &= 0, \end{aligned} \quad (1.5)$$

Člen  $(\rho \frac{du}{dt} + \frac{\partial p}{\partial x})$  je díky zákonu zachování hybnosti (1.2) roven nule.

Dále lze zavést počáteční souřadnici  $x_0$  a přepsat rovnice vzhledem k této souřadnici. Pohybující se souřadnice  $x$  je pak funkcí  $x = x(x_0, t)$  a platí  $x(x_0, 0) = x_0$ . Částice látky s počáteční polohou  $x_0$  je tedy v čase  $t$  na souřadnicích  $x = x(x_0, t)$ . Uvážením

$$\frac{\partial}{\partial x_0} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{dx}{dx_0} \quad \text{a} \quad \int_{V_0} \rho_0 dx_0 = \int_V \rho dx = m_V,$$

neboť hmota libovolného objemu  $m_V$  se v Lagrangeovských souřadnicích zachovává,

<sup>2</sup>Arbitrary Lagrangian-Eulerian, viz kapitola 3

<sup>3</sup>například tzv. rychlé elektrony, jejichž zavedením můžeme aproximovat nerovnovážné rozdělení rychlostí v jejich distribuční funkci

<sup>4</sup>V teorii plasmatu se setkáváme též s dvoukapalinovým modelem, kde je pohyb elektronů a iontů řešen samostatně a provázán pomocí elektromagnetické interakce. Tento popis je vhodný k teoretické analýze plasmových vln a nestabilit, nicméně v hydrodynamických simulacích nejsme schopni rychlý pohyb elektronů od iontů probíhající s plasmovou frekvencí (v případě laserového plasmatu řádově  $10^{13} - 10^{16} \text{ [s}^{-1}\text{]}$ , viz (2.2)) rozlišit.

lze Eulerovy rovnice (1.1) – (1.3) přepsat na konečný tvar

$$\rho_0 \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{\rho} \right) - \frac{\partial u}{\partial x_0} = 0 \quad (1.6)$$

$$\rho_0 \frac{du}{dt} + \frac{\partial p}{\partial x_0} = 0 \quad (1.7)$$

$$\rho_0 \frac{de}{dt} + \frac{\partial}{\partial x_0} (pu) = 0, \quad (1.8)$$

kde  $\rho_0$  je počáteční hustota a pohyb sítě se opět vypočte řešením

$$\frac{dx}{dt}(x_0, t) = u(x(x_0, t), t). \quad (1.9)$$

Tato formulace je použita ve článku [18] prezentujícím 1D hydrodynamickou metodu vysokého řádu přesnosti. Konkrétně se jedná nespojitou Galerkinovu metodu pracující s aproximací stavových veličin ve středech buněk výpočetní sítě. Tato metoda je přirozeným rozšířením metody konečných objemů ve smyslu použití po částech polynomiální aproximace neznámých. Volba aproximace navíc umožňuje volit řád metody, a to až do třetího řádu přesnosti na hladkém řešení. Důležitou vlastností metody je také respektování druhého zákona termodynamiky, tedy růst entropie a s ním spojený převod kinetické na vnitřní energii v oblasti rázových vln. Bližší popis lze nalézt ve zmíněném článku. Ve třetí kapitole této práce se budeme věnovat rozšíření této čistě Lagrangeovské na kompletní ALE metodu.



# Kapitola 2

## Absorpce laserového záření v plasmatu

Na úvod kapitoly věnujeme několik slov použité soustavě jednotek a uvedeme číselné hodnoty potřebných fyzikálních konstant. Dále se zaměříme na šíření laserového záření v plasmatu. Po přehledu základních vlastností plasmatu přejdeme k popisu šíření záření pomocí paprskové rovnice a popíšeme rovněž mechanismy jeho útlumu. Konkrétně se jedná o inverzní brzdné záření a rezonanční absorpci. Dále uvedeme Gaussovský model pro popis laserového svazku a na závěr zformulujeme metody pro numerický výpočet absorpce laserového záření v plasmatu v kódu PALE.

Všechny uváděné vzorce jsou formulovány v soustavě CGS, jejíž základními jednotkami jsou centimetr, gram a sekunda. Tato soustava je ve fyzice plasmatu často používána. Výjimkou je pouze teplota v elektronvoltech (eV). Vybrané fyzikální konstanty tak nabývají hodnot uvedených v tabulce 2. Při prezentování výsledků se

fyzikální konstanta	značka	hodnota a jednotka
Boltzmannova k.	$k_B$	$1.602 \cdot 10^{-12}$ erg/eV
redukovaná Planckova k.	$\hbar$	$1.055 \cdot 10^{-27}$ erg·s
náboj elektronu	$e$	$4.803 \cdot 10^{-10}$ statC
hmotnost elektronu	$m_e$	$9.109 \cdot 10^{-28}$ g
rychlost světla ve vakuu	$c$	$2.998 \cdot 10^{10}$ cm/s

Tabulka 2.1: Fyzikální konstanty použité v této práci.

pak přidržíme konvencí a přejdeme pro energii k jednotce  $1 \text{ J} = 1 \cdot 10^7 \text{ erg}$  a pro intenzitu laserového záření použijeme  $\text{W/cm}^2$ .

Nejjednodušší model vychází ze znalosti šíření elektromagnetického pole o úhlové frekvenci  $\omega$  bezsrážkovým plasmatem popsaným disperzním vztahem

$$\omega^2 = \omega_p^2 + k^2 c^2, \quad (2.1)$$

kde  $c$  je fázová rychlost světla,  $\vec{k}$  vlnový vektor a  $\omega_p$  plasmová frekvence, tedy frekvence elektrostatických oscilací elektronů ve studeném plasmatu. Pro plasma s hustotou elektronů  $n_e$  hmotnosti  $m_e$  o náboji  $e$  použijeme vztah [20]

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m_e}} \quad [\text{s}^{-1}]. \quad (2.2)$$

Rovnice (2.1) nám určuje jistou kritickou frekvenci  $\omega_k$ , tedy úhlovou frekvenci pro kterou se  $\omega = \omega_p \rightarrow \vec{k} = 0$  a tudíž se pole plasmatem nemůže šířit. Jelikož je plasmová frekvence  $\omega_p$  závislá na hustotě volných elektronů  $n_e$ , můžeme uvažovat, že pro pevnou frekvenci se elektromagnetické pole v plasmatu šíří pouze pro hustotu elektronů nižší (tuto budeme nazývat podkritickou) než je jistá hraniční hustota  $n_e^{\text{crit}}$ , daná rovností  $\omega = \omega_p$ . Uvážením  $\omega = 2\pi f = 2\pi c/\lambda$ , kde  $f$  je frekvence,  $c$  rychlost a  $\lambda$  vlnová délka světla ve vakuu dostáváme rovnost

$$\left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^2 = \frac{4\pi e^2 n_e^{\text{crit}}}{m_e}$$

definující kritickou hustotu volných elektronů  $n_e^{\text{crit}}$ , tedy

$$n_e^{\text{crit}} = \frac{m_e \pi c^2}{e^2 \lambda^2} \quad [\text{cm}^{-3}]. \quad (2.3)$$

Docházíme tedy k závěru, že v prvním přiblížení se elektromagnetické pole šíří plasmatem pouze pro hustoty nižší než je hustota daná rovnicí (2.3). Tento model v sobě nezahrnuje žádné disipativní procesy a tedy ani žádnou absorpci. Ta se přidává „uměle“, a to nejčastěji jako pohlcení předem zadaná částí energie v oblasti nejvyšší hustoty plasmatu, tedy na kritické ploše. Ve skutečnosti se však záření v plasmatu s rostoucí hustotou ohýbá a vrací se zpět dříve než dospěje ke kritické ploše. Tento proces si podrobněji popíšeme v následující části. Uvažování srážkových procesů nám pak umožní přirozeně zavést koeficient absorpce podél optické dráhy paprsků záření. Připomeňme ještě, že disperzní vztah (2.1) je svázán s permitivitou

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} = 1 - \frac{n_e}{n_e^{\text{crit}}} \quad (2.4)$$

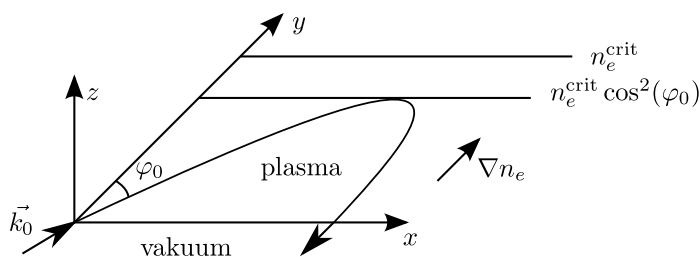
jež definuje index lomu  $n$  a index útlumu  $\chi$  pomocí vztahů

$$n = \Re(\sqrt{\epsilon}) \text{ a } \chi = \Im(\sqrt{\epsilon}). \quad (2.5)$$

## 2.1 Šíření laserového záření v plasmatu

Nejprve uvažujme prostředí s konstantním směrem gradientu indexu lomu. Bez ohledu na konkrétní směr šíření plasmatem ukážeme, že pro šikmo dopadající záření v prostředí s konstantním směrem gradientu hustoty existuje jistá hranice indexu lomu  $n_{\text{crit eff}}$  a tedy i hustoty plasmatu, za kterou se již záření nešíří.

Zvolme osu  $y$  ve směru gradientu hustoty volných elektronů<sup>1</sup>  $n_e$  a osu  $x$  tak, aby se vlnový vektor  $\vec{k}$  dopadajícího záření nacházel v rovině  $xy$ . Hranice plasmatu



Obrázek 2.1: Šíření laserového záření v prostředí s konstantním směrem gradientu hustoty.

je dána rovinou  $y = 0$  a úhel počátečního odklonu vlnového vektoru na této hranici  $\vec{k}_0$  od osy  $y$  označme  $\varphi_0$ .

Dopadající elektromagnetickou vlnu si rozložíme na dvě vlny ve směrech os  $x$  a  $y$  s příslušnými vlnovými vektory  $\vec{k}_x$  a  $\vec{k}_y$ , platí tedy  $\vec{k} = (k_x, k_y, 0)$ , kde  $k_x = \frac{\omega}{c} \sin(\varphi)$  a  $k_y = \frac{\omega}{c} \cos(\varphi)$ . Disperzní vztah (2.1) pak přejde na tvar

$$\omega^2 = \omega_p^2 + (k_x^2 + k_y^2) c^2.$$

Hustota volných elektronů závisí pouze na  $y$ , a proto bude  $k_x$  rovno konstantě<sup>2</sup>  $k_x = \frac{\omega}{c} \sin(\varphi_0)$ , zatímco  $k_y$  zůstává funkcí  $y$ . K odrazu laseru dochází na ploše kde  $k_y = 0$ . Obdobně jako v předcházejícím textu tedy určíme kritickou frekvenci  $\omega_{\text{crit}}$  položením  $k_y = 0$

$$\begin{aligned} \omega_{\text{crit}}^2 &= \omega_p^2 + (k_x^2 + 0^2) c^2 \\ \omega_{\text{crit}}^2 &= \omega_p^2 + \left(\frac{\omega}{c} \sin \varphi_0\right)^2 c^2 \\ \omega_{\text{crit}}^2 (1 - \sin^2 \varphi_0) &= \omega_p^2 \\ \omega_{\text{crit}}^2 &= \frac{\omega_p^2}{\cos^2 \varphi_0} \quad [\text{s}^{-1}]. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Z výrazu (2.6) je vidět, že kritická frekvence je dána nejen parametry plasmatu, tj. plasmovou frekvencí  $\omega_p$ , ale také úhlem dopadu záření. Obdobně jako v (2.2)

<sup>1</sup>přesněji řečeno ve směru gradientu indexu lomu, tyto hodnoty jsou však spolu svázány vztahem (2.4), tedy  $n^2 \approx 1 - \frac{n_e}{n_e^{\text{crit}}}$ , a proto si směr jejich gradientu pro zjednodušení dovolíme zaměňovat

<sup>2</sup>Na tento vztah můžeme také nahlížet jako na zákon zachování momentu hybnosti fotonu ve směru osy  $y$  [23].

můžeme tedy zavést efektivní kritickou hustotu volných elektronů  $n_e^{\text{crit eff}}$ , která je funkcí vlnové délky laserového záření ve vakuu  $\lambda$  a úhlu dopadu  $\varphi_0$  záření vzhledem ke směru gradientu hustoty volných elektronů plazmatu (2.3).

$$n_e^{\text{crit eff}} = n_e^{\text{crit}} \cos^2 \varphi_0 = \frac{m_e \pi c^2}{e^2 \lambda^2} \cos^2 \varphi_0 \quad [\text{cm}^{-3}]. \quad (2.7)$$

Index lomu  $n$  v místě odrazu paprsku, tedy tam kde  $n_e = n_e^{\text{crit eff}}$  získáme kombinací vztahů (2.4), (2.5) a (2.7).

$$n = \Re(\sqrt{\epsilon}) = \Re\left(\sqrt{1 - \frac{n_e}{n_e^{\text{crit}}}}\right) = \Re\left(\sqrt{1 - \frac{n_e^{\text{crit}} \cos^2 \varphi_0}{n_e^{\text{crit}}}}\right) = \sin \varphi_0.$$

Tento vztah použijeme na obrázcích 4.9 a 4.10 k ověření numericky napočítaných trajektorií paprsků.

### 2.1.1 Paprsková rovnice

Důležitým prvkem při popisu elektromagnetického laserového pole v plazmatu je směr jeho šíření. Ten je v přiblížení geometrické optiky v prostředí popsaném indexem lomu  $n$  dán paprskovou rovnicí [21]

$$\frac{d}{ds} \left( n \frac{d\vec{r}}{ds} \right) = \nabla n, \quad (2.8)$$

kde  $\vec{r}$  popisuje optickou dráhu a  $\frac{d}{ds}$  derivaci podél této trajektorie. Pro numerický výpočet si dopadající laserové záření rozdělíme na svazek nezávislých a vzájemně se neovlivňujících paprsků, jejichž trajektorie budeme na základě rovnice (2.8) hledat.

Naším cílem je na základě rovnice (2.8) určit trajektorii pro jednotlivé paprsky. Okrajová podmínka, tedy počáteční rozložení a směry paprsků jsou dány na základě vlastností laserového svazku dopadajícího na terčik. Předpokládejme, že je dán průsečík paprsku s hranicí výpočetní sítě kde paprsek vstupuje a že známe jeho směr.

Analytické řešení je možné pouze v několika speciálních případech, pro obecné případy je nutné použití numerických metod. Na úvod ukažme použití explicitní Runge–Kuttovy metody 4. řádu pro tento okrajový problém. To ovšem vyžaduje přepsat rovnici (2.8) na systém obyčejných diferenciálních rovnic prvního řádu. Uvažujme jednotkový vektor ve směru šíření paprsku [28]

$$\frac{d\vec{r}}{ds} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \quad (2.9)$$

kde  $\theta$  je úhel odklonu paprsku od svislé osy  $z$  a  $\phi$  je azimut paprsku, tedy odklon od osy  $x$  v rovině  $xy$ . Substitucí do rovnice (2.8), tj. náhradou derivace

$$\frac{d}{ds} = \frac{d\theta}{ds} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{d\phi}{ds} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{dn}{ds} \frac{\partial}{\partial n}$$

dostaneme

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial x} &= n \cos \theta \cos \phi \frac{d\theta}{ds} - n \sin \theta \sin \phi \frac{d\phi}{ds} + \sin \theta \cos \phi \frac{dn}{ds} \\ \frac{\partial n}{\partial y} &= n \cos \theta \sin \phi \frac{d\theta}{ds} + n \sin \theta \cos \phi \frac{d\phi}{ds} + \sin \theta \sin \phi \frac{dn}{ds} \\ \frac{\partial n}{\partial z} &= -n \sin \theta \frac{d\theta}{ds} + \cos \theta \frac{dn}{ds}.\end{aligned}$$

Z těchto rovnic eliminujeme členy  $\frac{dn}{ds}$ , tj. ze třetí si vyjádříme

$$\frac{dn}{ds} = \frac{1}{\cos \theta} \left[ \frac{\partial n}{\partial z} + n \sin \theta \frac{d\theta}{ds} \right],$$

dosadíme do zbývajících dvou a ty vyřešíme vzhledem k  $\frac{d\theta}{ds}$  a  $\frac{d\phi}{ds}$ . Za použití rovnic (2.9) pak zkompletujeme následující systém, jehož numerické řešení použijeme pro srovnání s námi použitou metodou, detailně popsanou ve třetí kapitole.

$$\begin{aligned}\frac{dx}{ds} &= \sin \theta \cos \phi \\ \frac{dy}{ds} &= \sin \theta \sin \phi \\ \frac{dz}{ds} &= \cos \theta \\ \frac{d\theta}{ds} &= \frac{\cos \theta}{n} \left[ \cos \phi \frac{\partial n}{\partial x} + \sin \phi \frac{\partial n}{\partial y} \right] - \frac{\sin \theta}{n} \frac{\partial n}{\partial z} \\ \frac{d\phi}{ds} &= \frac{1}{n \sin \theta} \left[ \cos \phi \frac{\partial n}{\partial y} - \sin \phi \frac{\partial n}{\partial x} \right]\end{aligned}\tag{2.10}$$

Pro zjednodušení se v následujícím textu omezíme na řešení ve dvou dimenzích. Položením  $\phi = \pi$  z rovnic (2.10) po zjednodušení značení  $\frac{d}{ds} = \dot{\phantom{x}}$  získáme soustavu popisující optickou dráhu paprsku v rovině  $yz$ .

$$\begin{aligned}\dot{y} &= \sin \theta \\ \dot{z} &= \cos \theta \\ \dot{\theta} &= \frac{1}{n} \left[ \cos \theta \frac{\partial n}{\partial y} - \sin \theta \frac{\partial n}{\partial z} \right]\end{aligned}\tag{2.11}$$

Naproti tomu pro určení absorpce na čtyřúhelníkové výpočetní síti předpokládejme konstantní hodnoty indexu lomu v buňkách výpočetní sítě se skoky na hranách buněk. Analytické řešení paprskové rovnice (2.8) v buňkách je jednoduché, pro  $n = \text{konst.}$  dostáváme

$$\begin{aligned}\frac{d}{ds} \left( n \frac{d\vec{r}}{ds} \right) &= 0 \\ n \frac{d\vec{r}}{ds} &= \vec{a} \\ \vec{r} &= \vec{a}x + \vec{b},\end{aligned}$$

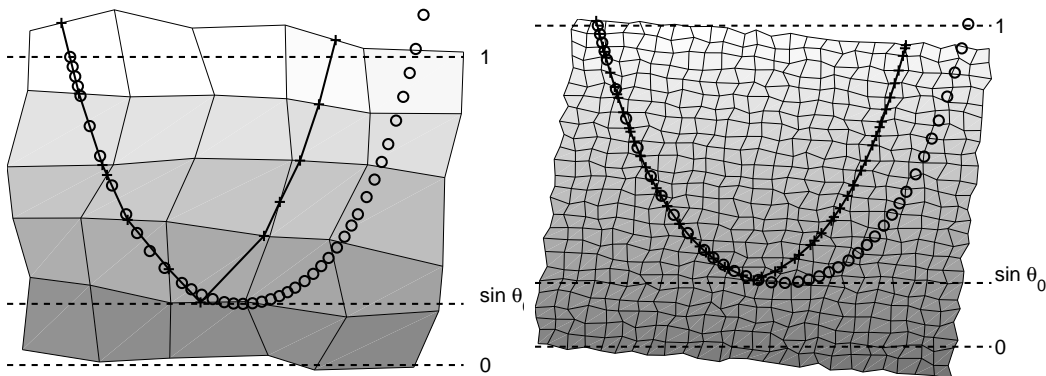
kde  $x = s/n$  je parametr přímky a  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  jsou konstantní vektory. Paprsky se tedy za daných předpokladů pohybují v buňkách po přímkách. Na hranách buněk se skokem indexu lomu přejdeme od paprskové rovnice ke Snellovu zákonu popisujícímu lom paprsku

$$\frac{n_{\text{in}}}{n_{\text{out}}} = \frac{\sin(\varphi_{\text{out}})}{\sin(\varphi_{\text{in}})},$$

kde  $n_{\text{in}}$  značí index lomu v buňce odkud paprsek vstupuje na rozhraní pod úhlem  $\varphi_{\text{in}}$  k normále rozhraní. Obdobně index  $n_{\text{out}}$  značí hodnoty v následující buňce. Trajektorie paprsků určíme z počátečního směru dopadu paprsků tak, že postupně na každé hraně výpočetní sítě, na kterou paprsek dorazí, počítáme jejich průsečík a také lom paprsku v závislosti na parametrech plasmatu v daném místě.

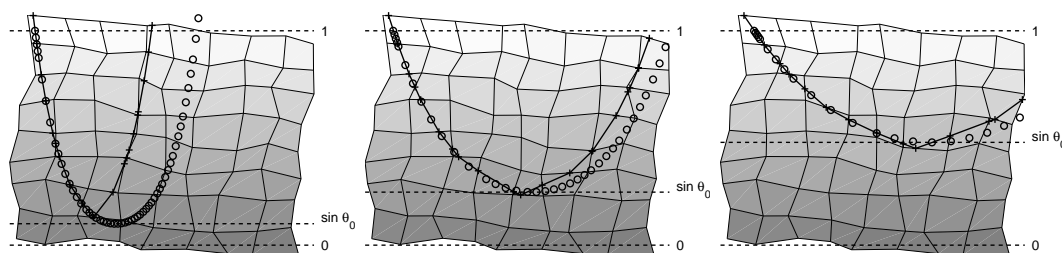
Provedeme porovnání výsledků námi zvolené metody, předpokládající konstantní hodnoty parametrů v buňkách výpočetní sítě se skoky veličin na hranicích buněk spojené s lomem paprsků, s přímou integrací paprskové rovnice pomocí Runge–Kuttovy metody. Zvolíme si jednoduchý případ, kdy uvažujeme šíření záření pouze v rovině  $yz$  a index lomu závislý pouze na  $z$ .

Pro lineární závislost indexu lomu  $n = Cz$  přejdou rovnice (2.11) na  $\dot{y} = \sin \theta$ ,  $\dot{z} = \cos \theta$ ,  $\dot{\theta} = -\frac{\sin \theta}{z}$  a jejich numerické řešení (vykresleno pomocí kroužků) je na obrázku 4.9 spolu s řešením na výpočetní síti (plná čára), jehož detailní popis je ve třetí kapitole. Odstín šedi a čárkovaná čára udávají index lomu v buňkách.



Obrázek 2.2: Šíření paprsků pro dvě různě jemné sítě. Úhel dopadu  $\theta_0 = 0.2$  rad. Lineární profil indexu lomu. Přímé řešení paprskové rovnice znázorněno pomocí kroužků, řešení na výpočetní síti pak plnou čarou spolu s průsečíky paprsku s hranami sítě.

Z obrázků 4.9 a 4.10 je možné nahlédnout, že námi zvolená metoda, uvažující konstantní index lomu v buňkách výpočetní sítě a lom na hranicích, dává pro lineární průběh indexu lomu rozumné výsledky. Jsou přesné vzhledem k hloubce do které záření proniká, viz také začátek této kapitoly. Co se týká celkové optické dráhy paprsku, dochází k ostrému odrazu od plochy efektivní kritické hustoty. Tím je dráha paprsku lehce modifikována ve srovnání s přímým řešením paprskové rovnice (znázorněno kroužky). Pro absorpci je naštěstí rozhodující právě hloubka průniku záření a tato odchylka ve tvaru trajektorie tedy nepředstavuje závažný problém pro použití tohoto modelu.



Obrázek 2.3: Šíření paprsků pro různé úhly dopadu — zleva  $\theta_0 = 0.1, 0.25, 0.5$  rad. Lineární profil indexu lomu. Přímé řešení paprskové rovnice znázorněno pomocí kroužků, řešení na výpočetní síti pak plnou čarou spolu s průsečíky paprsku s hranami sítě.

## 2.2 Mechanismy absorpce laserového záření

Hlavním mechanismem absorpce laserové energie jsou pro námi volené parametry laseru (délka pulsu řádově stovky ps, intenzita  $10^{15}$  W/cm<sup>2</sup>) srážkové procesy dané Coulombovskou interakcí částic plazmatu, tedy inverzní brzdné záření. V závislosti na geometrickém uspořádání experimentu se dále uplatňuje rezonanční absorpce, jejíž vliv je významný především pro větší vlnové délky v horkém plazmatu, kde inverzní brzdné záření přestává být efektivním. Zmíněné dva mechanismy absorpce si blíže představíme v následujícím textu.

### 2.2.1 Inverzní brzdné záření

Brzdným zářením nazýváme záření uvolněné ve formě fotonů při srážkách (Coulombovské interakci) nabytých částic mezi sebou. Historicky se jednalo o brzdění urychlených elektronů v poli iontů těžkých prvků za vzniku spojité části spektra rentgenového záření. Opačný proces, tedy pohlcení fotonu v důsledku interakce nabitých částic mezi sebou, pak nazýváme inverzní<sup>3</sup> brzdné záření.

Vyjdeme opět z modelu studeného plazmatu, kde uvažujeme pohyb elektronů na statickém pozadí tvořeném ionty. Na rozdíl od modelu v první části kapitoly navíc uvažujeme brzdění elektronů popsané srážkovou frekvencí  $\nu_{ei}$  srážek s ionty. Rovnice pro pohyb jednoho elektronu hmotnosti  $m_e$  s nábojem  $e$  pod vlivem elektrického pole  $\vec{E}_0 e^{-i\omega t}$  záření v plazmatu má tedy tvar

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

Jejím řešením získáme rovnice pohybu elektronu, tento pohyb způsobí polarizaci prostředí vedoucí na vztah pro permitivitu  $\epsilon$  plazmatu [3]

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \nu_{ei}^2} + i \frac{\nu_{ei}}{\omega} \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \nu_{ei}^2}, \quad (2.12)$$

<sup>3</sup>někdy také reverzní brzdné záření, z originálního „inverze/reverze bremsstrahlung“

$\omega_p$  značí plasmovou frekvenci,  $\omega$  frekvenci laseru a  $\nu_{ei}$  srážkovou frekvenci elektronů s ionty.

Při výpočtu srážkové frekvence  $\nu_{ei}$  použijeme Spitzerovu formuli [19], která vychází z interakce elektronů s Maxwellovským rozdělením rychlostí s nehybnými ionty a neuvažuje vliv elektromagnetického pole laseru na tyto srážky. Toto přiblížení tedy nelze použít pro extrémně silná elektromagnetická pole, kde již rychlost oscilací elektronů v tomto poli není zanedbatelná vzhledem k jejich tepelné rychlosti. V takto silných polích se srážková frekvence stává funkcí intenzity elektrického pole laseru v daném místě. Jejím výpočtem se v této práci nezabýváme, neboť pro námi uvažované parametry laseru lze tento vliv, stejně jako vliv magnetické složky pole, zanedbat. Pro odstranění singularity pro  $T_e \rightarrow 0$  doplníme do jmenovatele Fermiho energii  $E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_e)^{2/3}$  pro degenerovaný elektronový plyn, čímž získáme výsledný vztah

$$\nu_{ei} = \frac{4}{3} \frac{\sqrt{2\pi} Z^2 e^4 n_i \ln \Lambda}{\sqrt{m_e} (k_B T_e + E_F)^{3/2}} \quad [\text{s}^{-1}], \quad (2.13)$$

kde  $n_e = Z n_i$  představuje elektronovou hustotu,  $Z$  ionizaci,  $n_i = \frac{\rho}{A m_p}$  iontovou hustotu,  $\rho$  hustotu látky,  $A$  atomové číslo,  $e$  náboj elektronu,  $m_e$  hmotnost elektronu,  $k_B$  Boltzmannovu konstantu,  $T_e$  elektronovou teplotu a  $\ln \Lambda$  Coulombův logaritmus. Pro jeho určení používáme aproximační vzorec

$$\ln \Lambda = \max[2, \ln \sqrt{b_{max}^2 / b_{min}^2}],$$

kde  $b_{max} = (k_B T_e / m_e)^{1/2} / \max[\omega_p, \omega]$  a  $b_{min} = \max[Z e^2 / k_B T_e, \hbar / (k_B T_e / m_e)^{1/2}]$ ,  $\hbar$  značí redukovanou Planckovu konstantu,  $\omega_p$  plasmovou frekvenci a  $\omega$  frekvenci laserového záření.

Transport energie záření  $Q$  podél paprsku  $s$  určíme z rovnice

$$\frac{dQ}{ds} = -\kappa_{ib} Q,$$

kde za absorpční koeficient inverzního brzdného záření  $\kappa_{ib}$  klademe [23]

$$\kappa_{ib} = \frac{2\omega}{c} \Im(\sqrt{\epsilon}). \quad (2.14)$$

Permitivitu  $\epsilon$ , respektive imaginární část z odmocniny, získáme ze vztahu (2.12),  $\omega$  značí frekvenci laseru a  $c$  rychlost světla ve vakuu.

Energii absorbovanou vlivem inverzního brzdného záření  $\Delta Q$  podél trajektorie  $s$  tedy určíme z počáteční energie  $Q_{in}$  jako

$$\Delta Q = Q_{in} - Q_{out} = Q_{in} \left( 1 - e^{-\int \kappa_{ib} ds} \right), \quad (2.15)$$

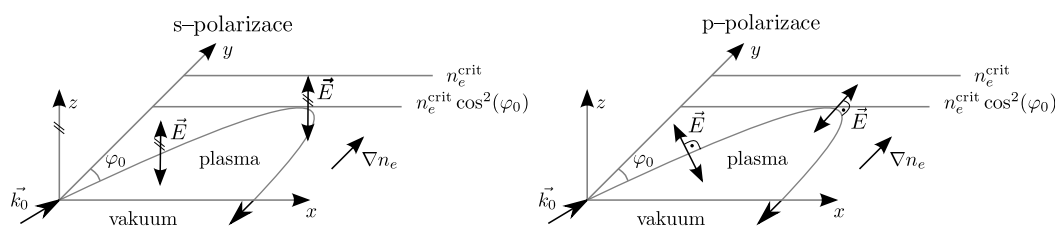
kde integrace probíhá podél optické dráhy paprsku.



### 2.2.2 Rezonanční absorpce

Má-li dopadající laserové záření nenulovou složku vektoru intenzity elektrického pole ve směru gradientu hustoty plazmatu, pak evanescentní<sup>4</sup> elektrická vlna v oblasti kritické hustoty rezonančně vybudí plasmovou vlnu [27]. Plasmová frekvence, tedy frekvence oscilací elektronů kolem rovnovážné polohy v plazmatu, je rovna frekvenci laseru (a tedy i evanescentní vlny) právě v oblasti kritické plochy.

Demonstrujme tento jev na uspořádání shodném s obrázkem 2.1 v předchozí kapitole. Odlišme přitom dva případy lineární polarizace. V prvním, tzv. s-polarizace,



Obrázek 2.4: Schématické znázornění vektoru intenzity elektrického pole pro s, resp. p-polarizaci.

kmitá elektrické pole ve směru osy  $z$  a jeho složka ve směru gradientu hustoty je tedy nulová. Naopak pro p-polarizaci má složka  $z$  nulovou, směr v rovině  $xy$  je pak dán z kolmosti  $\vec{E}$  na směr šíření  $\vec{k}$ . V případě p-polarizace má tedy elektromagnetické pole v oblasti ohybu paprsku před kritickou hustotou nenulovou složku  $\vec{E}$  ve směru gradientu hustoty a dochází tedy k rezonančnímu vybudění plasmové vlny.

Konkrétními mechanismy útlumu takto vybuděné vlny se v této práci zabývat nebudeme. Rychlost jejího šíření je dána pouze tepelným pohybem částic a předpokládáme tedy její útlum v oblasti kritické hustoty kde vzniká. Při útlumu uvažujeme rovnoměrné zahřívání elektronů v plazmatu které nenaruší jejich Maxwellovské tepelné rozdělení. Ve skutečnosti se však ukazuje, že část energie vlny (opět v závislosti na intenzitě elektromagnetického pole v daném místě) je předávána především rychlejšími částicím. Distribuční funkce pro rychlostní rozdělení elektronů již není Maxwellovská, ale má druhý výrazný pík. Toto se často v hydrodynamických kódech ošetřuje zavedením speciálních částic, tzv. rychlých elektronů, jejichž transport je řešen nezávisle.

Předpokládáme-li lineární profil hustoty volných elektronů  $n_e$  v oblasti kritické plochy v plazmatu s charakteristickou délkou  $L_{\text{char}} = n_e^{\text{crit}} / |\text{grad } n_e|^{\text{crit}}$ , kde  $n_e^{\text{crit}}$  je kritická hustota volných elektronů, pak pro p-polarizaci získáme analytické řešení pro rezonančně absorbovanou energii  $\Delta Q_{\text{res}}$  ve formě [27]

$$\Delta Q_{\text{res}} = Q_{\text{refl}} 18q \frac{F_{\text{Airy}}^3(q)}{|F'_{\text{Airy}}(q)|}, \quad \text{kde} \quad (2.16)$$

$$q = \left( \frac{\omega}{c} L_{\text{char}} \right)^{2/3} \sin^2(\varphi_{\text{in}}). \quad (2.17)$$

<sup>4</sup> Stacionární vlna v oblasti blízkého pole, jejíž intenzita exponenciálně klesá od hranice na které vznikla.

$Q_{\text{refl}}$  značí energii paprsku v bodě obratu,  $F_{\text{Airy}}$  Airyho funkci a  $F'_{\text{Airy}}$  její derivaci,  $\varphi_{\text{in}}$  úhel mezi gradientem elektronové hustoty a dopadajícím paprskem,  $\omega$  frekvenci laseru a  $c$  rychlost světla ve vakuu.

Pro zjednodušení výpočtu (abychom se vyhnuli opakovanému numerickému vyčíslování Airyho funkcí) uvedeme přibližné řešení pro malé, resp. velké úhly dopadu [29] a najdeme vhodnou aproximaci funkce definované vztahem (2.16). Pro malé úhly dopadu a tedy malý parametr  $q$  (definovaný v (2.17)) je řešení

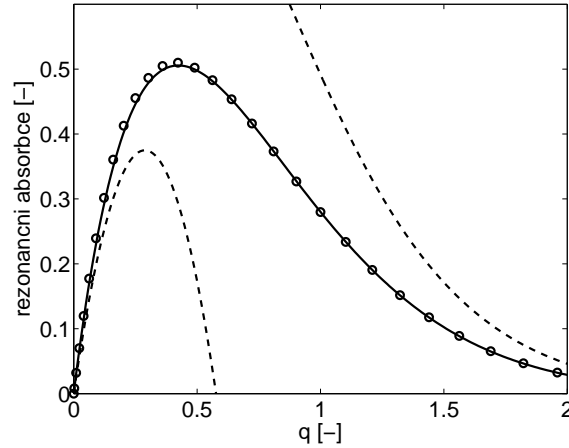
$$\frac{\Delta Q_{\text{res}}}{Q_{\text{refl}}} = aq\left(1 - \frac{2}{3}aq\right), \text{ kde } a = \left(\frac{2\pi}{3^{1/3}\Gamma(1/3)}\right)^2 \approx 2.6. \quad (2.18)$$

Naopak pro větší úhly, přesněji  $q > 1$

$$\frac{\Delta Q_{\text{res}}}{Q_{\text{refl}}} = 2e^{-\frac{4}{3}q^{3/2}} - e^{-\frac{8}{3}q^{3/2}}. \quad (2.19)$$

Jako rozumnou aproximaci vztahu (2.16) nakonec použijeme

$$\frac{\Delta Q_{\text{res}}}{Q_{\text{refl}}} = q \frac{e^{-\frac{4}{3}q^{3/2}}}{q + 0.48} \pi/2. \quad (2.20)$$



Obrázek 2.5: Zlomek rezonančně absorbované energie pro p-polarizaci v závislosti na parametru  $q$  definovaném v (2.16). Přerušovaná čára značí analytická řešení pro malé (2.18) a velké (2.19) úhly, kolečka řešení (2.16) a plná čára použitou fitovací funkcí (2.20).

Známe tedy jednak triviální popis rezonanční absorpce pro s-polarizaci, kde je složka  $\vec{E}$  ve směru gradientu hustoty nulová a nulová je i absorpce. Pro p-polarizaci je absorbovaná energie dána jako funkce energie paprsku v místě odrazu, úhlu pod jakým se odráží, charakteristické délky plasmatu a vlnové délky laseru, viz (2.16).

Pokud uvažujeme cylindrickou symetrii při interakci pevného terčíku s laserovým svazkem dopadajícím v ose symetrie  $z$ , pak je směr gradientu hustoty nezávislý na azimutálním úhlu  $\phi$  v rovině  $xy$  a jeho projekce do této roviny má vždy radiální směr. Pro lineárně polarizovaný svazek tak ve směru kmitání vektoru elektrického pole  $\vec{E}$  dostáváme dvě oblasti odpovídající p-polarizaci, zatímco ve směru magnetické složky další dvě oblasti odpovídající s-polarizaci. Výsledná absorpce energie již tedy není cylindricky symetrická. Abychom tento problém vyřešili, můžeme uvažovat kruhovou polarizaci záření, či provést středování přes úhel  $\phi$ . Výsledkem středování složky vektoru  $\vec{E}$  do radiálního směru dostáváme faktor  $\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} |\sin \phi| d\phi = 2/\pi$ , kterým budeme navíc násobit rezonanční absorpci ve vzorci (2.16) pro případ cylindrické symetrie. Na závěr shrňme, že maximální podíl rezonančně absorbované energie je tedy v případě cylindrické symetrie zhruba  $0.5 \cdot 2/\pi \approx 32\%$  z energie paprsku, kterou nese při jeho ohybu blízko kritické plochy.

## 2.3 Parametry laserového svazku

Předpokládejme, že intenzita laserového svazku v simulovaných experimentech je rozložena symetricky podél osy jeho šíření<sup>5</sup>, pro její popis tedy použijeme cylindrické souřadnice  $(r, z)$ . Předpokládáme-li rovnoběžnost laserových paprsků dopadajících na terčík, stačí nám k popisu laserového svazku znát velikost intenzity  $I = I(r, t)$ , kterou navíc často vyjadřujeme ve tvaru  $I(r, t) = I_s(r)I_t(t)$ , potřebujeme tedy znát pouze její prostorový  $I_s(r)$  a časový  $I_t(t)$  průběh. Jako příklad uveďme Gaussovské rozložení v prostoru i v čase, tedy  $I_s(r) = e^{-(r/r_0)^2}$  a  $I_t(t) = I_{\max} e^{-(\frac{t-t_0}{\tau})^2}$ . Přiblížení rovnoběžných paprsků je dobře aplikovatelné v případě, kdy k absorpci energie dochází v blízkosti roviny fokusu laserového paprsku, nezahrnuje však sbíhavost či rozbíhavost svazku.

Vhodnější aproximací popisující elektromagnetické pole laseru je tzv. Gaussovský svazek, viz obrázek 2.6, který získáme řešením Helmholtzovy rovnice v paraxiálním přiblížení [30]. Tento popis je tedy přesný pouze pro malé uhly rozbíhavosti svazku. Jeho výhodou je, že i pro sbíhavý svazek dostáváme uvážením difrakce konečnou intenzitu v rovině fokusu. Zůstaneme-li u vyjádření pro velikost intenzity ve tvaru  $I(r, z, t) = I_s(r, z)I_t(t)$ , pak pro Gaussovský svazek dostáváme

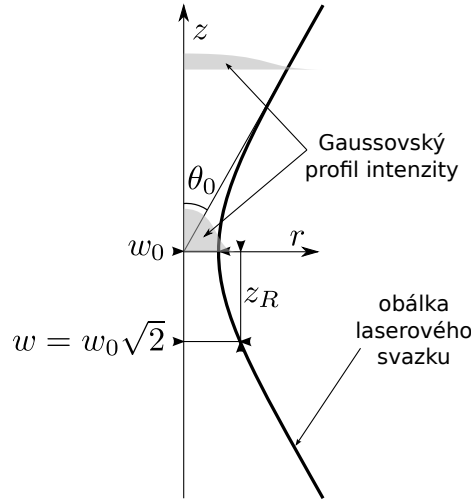
$$I_s(r, z) = \left( \frac{w_0}{w(z)} \right)^2 e^{-\frac{2r^2}{w^2(z)}}, \quad (2.21)$$

kde  $w_0$  představuje minimální poloměr a aktuální  $w(z)$  poloměr určíme jako

$$w(z) = w_0 \sqrt{1 + \left( \frac{z}{z_R} \right)^2} \quad (2.22)$$

kde  $z_R = \frac{w_0}{\theta_0}$  označuje tzv. Rayleighovu délku a  $\theta_0$  úhel rozbíhavosti svazku. Pozname-

<sup>5</sup>Ve skutečných experimentech, prováděných například na pracovišti PALS, je při každém výstřelu laserový svazek unikátní a není zcela symetrický ani homogenní, ovšem tyto malé náhodné odchylky



Obrázek 2.6: Náčrtek k parametrům Gaussovského laserového svazku.

nejme, že předchozí rovnici lze upravit na tvar  $\frac{w^2}{w_0^2} - \frac{r^2}{z_R^2} = 1$  a v proměných  $w$ ,  $z$  se tedy jedná o rovnici hyperboly s osami  $w_0$  a  $z_R$ . Úhel rozbíhavosti svazku  $\theta_0$  odpovídá odklonu paprsku obálky svazku od osy ve velké vzdálenosti od roviny fokusu. Obálkou myslíme plochu s intenzitou  $e^{-2}$  násobku intenzity na ose. Můžeme tedy snadno spočítat, jaký podíl energie nese záření ohraničené touto obálkou.

$$E_w = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{w_0} r I(r, 0, t) dr d\varphi dt}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} r I(r, 0, t) dr d\varphi dt} = \frac{\int_0^{w_0} r e^{-\frac{2r^2}{w_0^2}} dr \cdot 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} f(t) dt}{\int_0^{\infty} r e^{-\frac{2r^2}{w_0^2}} dr \cdot 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} f(t) dt} = 1 - e^{-2} \doteq 0.865.$$

Při popisu laserového svazku se často používá pojem poloměr fokusu  $r_f$ , který definuje plochu obsahující 80% energie dopadajícího záření. Vztah mezi  $r_f$  a  $w$ , resp.  $w_0$  získáme vyřešením rovnice

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{r_f} r e^{-\frac{2r^2}{w_0^2}} dr d\varphi = 0.8 \cdot \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} r e^{-\frac{2r^2}{w_0^2}} dr d\varphi.$$

Výsledkem je vztah  $r_f = \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\ln(5)} w_0 \doteq 0.897 w_0$ .

Minimální poloměr Gaussovského svazku v rovině fokusu<sup>6</sup> je roven  $w_0$  a je jedním z parametrů popisujících dané uspořádání laseru. Celkově je tedy k popisu Gaussovského svazku třeba znát parametry  $w_0$  a  $\theta_0$  popisující prostorovou závislost a dále jeho časový průběh  $I_t(t)$  zahrnující v sobě maximální dosaženou intenzitu  $I_{\max}$ .

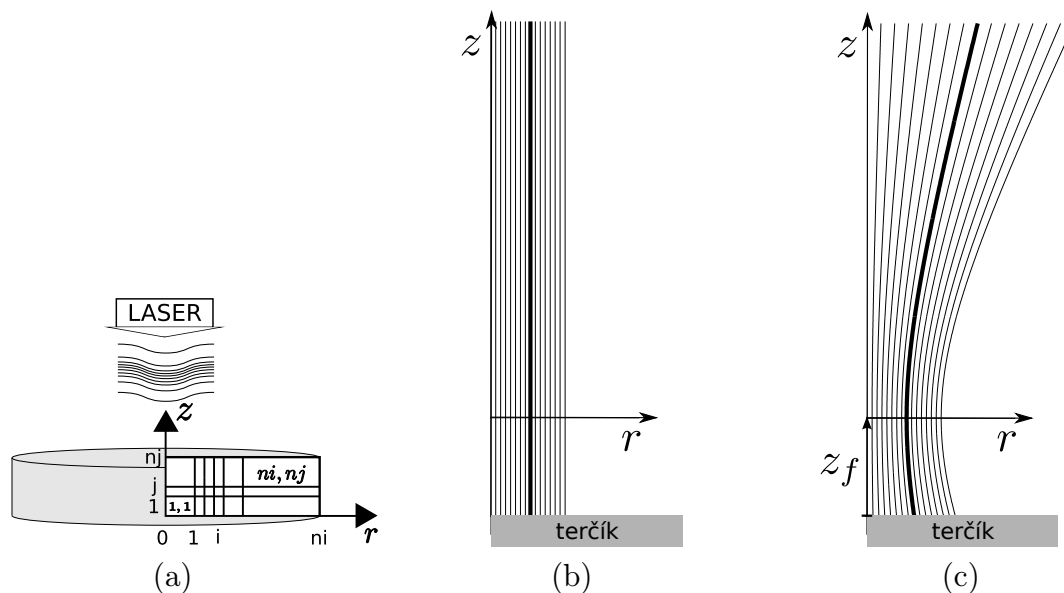
je obtížné měřit či předpovídat. Opakováním experimentů lze do jisté míry vyloučit jejich vliv, také proto se jimi v numerických simulacích nezabýváme.

<sup>6</sup>Difrakční mez spjatá s tímto poloměrem je dána  $w_0 = \frac{\lambda}{\pi\theta_0}$ , a například pro laser PALS po dosažení dostáváme  $\frac{\lambda}{\pi \cdot 15^\circ} \approx 1.2\lambda$ . Skutečný minimální poloměr fokusu z experimentu je však několikanásobně větší, neboť v sobě zahrnuje kromě difrakce i chybu nasčítanou průchodem laseru optickou soustavou.

V dalším textu zformulujeme algoritmy pro výpočet šíření a absorpce záření popsaného jak pomocí rovnoběžného svazku, tak pro řípad Gaussovského laserového svazku. Tyto modely jsou formulovány pro logicky ortogonální čtyřúhelníkovou síť, která je použita v kódu PALE. Tato síť předpokládá konvexnost buněk a také kladný objem každé buňky  $V_c > 0$ . Uvažujeme konstantní hodnoty všech skalárních parametrů (hustota, teplota, ionizace. . .) v buňkách se skoky na hranicích, v našem případě tedy na hranách buněk. Navíc předpokládáme válcovou symetrii experimentu, budeme se tedy pohybovat v cylindrických souřadnicích popsaných axiální osou  $z$  a radiální  $r$ .

## 2.4 Popis numerického modelu

Geometrie simulace je popsána následujícím způsobem. Logicky čtyřúhelníková výpočetní síť obsahuje  $ni$  buněk ve směru radiální osy  $r$  a  $nj$  buněk ve směru axiální osy  $z$ . Buňky budeme označovat dvojicí čísel  $[i, j]$ , kde  $i$ , resp.  $j$  udává polohu ve směru osy  $r$ , resp.  $z$  a  $i \in \{1, \dots, ni\}$ ,  $j \in \{1, \dots, nj\}$ . Uzly pak číslujeme od 0 do  $ni$ , resp.  $nj$ , známe přitom jejich souřadnice  $(r_{i,j}, z_{i,j})$ . Laser, jakožto zdroj záření, je umístěn symetricky na ose nad terčíkem. V případě Gaussovského svazku je navíc nutné popsat polohu roviny fokusu vzhledem k terčíku, na obrázku 2.7 popsána parametrem  $z_f$ . V následujícím popisu pro jednoduchost uvažujeme rovinu fokusu na souřadnici  $z = 0$ .



Obrázek 2.7: Náčrt geometrie simulace. Laser dopadá shora podél osy  $z$ . Celkový pohled a značení výpočetní sítě (a), paprsky pro případ s rovnoběžným (b), resp. Gaussovským (c) svazkem.

Před samotným popisem si shrňme základní filosofii obou algoritmů. Připomeňme, že absorpci řešíme v každém časovém kroku simulace nezávisle. Vyjdeme

ze skutečnosti, že paprsky vstupují do buněk výpočetní sítě přes jejich vnější hrany. Přitom vždy uvažujeme případ, kdy je počet paprsků výrazně větší než počet buněk ve směru osy  $r$  a na každou buňku tedy připadá několik paprsků. Každý paprsek přitom nese určitou energii danou velikostí intenzity laserového záření  $I(r, z, t)$  v místě dopadu do plasmatu, počáteční šířkou paprsku  $d_r$  a časovým krokem  $\Delta t$ .

Pro každý paprsek vstupující do sítě budeme sledovat jeho trajektorii, tedy postup buňkami sítě. Při absorpci na kritice předpokládáme pohyb paprsků neovlivněný plasmatem a zajímá nás pouze to, kdy paprsek narazí na nadkritickou buňku, tedy na buňku s hustotou  $n_e$  větší než kritická hustota  $n_e^{\text{crit}}$  daná vztahem (2.3). Naopak při modelu trasování paprsků nás budou zajímat konkrétní průsečíky paprsků se sítí, ve kterých uvažujeme jejich lom. Z hodnot parametrů v buňkách podél paprsku postupně napočítáme jak útlum záření daný inverzním brzdícím zářením, tak i rezonanční absorpci. Zmíněné postupy v následujícím popisu dále rozvedeme.

Jak pro rovnoběžný, tak pro Gaussovský svazek si dopadající záření rozdělíme na jednotlivé paprsky. V obou případech jsou charakterizovány jejich souřadnicí  $r$  v rovině fokusu, značenou  $w_0^r$ . Tento parametr probíhá množinu  $w_0^r \in \{\epsilon \dots w_{\text{max}}\}$ , kde  $\epsilon = d_1/2$  je poloha prvního a  $w_{\text{max}}$  posledního paprsku, a  $z_R$  zůstává pro všechny paprsky konstantní. Rozložení paprsků  $w_0^r$  můžeme volit například s požadavkem, aby na každou buňku počáteční sítě připadal konstantní počet paprsků. Další možností je volba rozložení zajišťující konstantní energii všech paprsků, v tomto případě ovšem hrozí nebezpečí, že daleko od osy již bude počet paprsků menší než počet buněk výpočetní sítě. Tento stav představuje porušení základního předpokladu uvažovaného modelu a vedl by k absorpci energie pouze v buňkách, kterými prochází alespoň jeden paprsek, zatímco v ostatních buňkách mezi nimi by byla absorpce nulová.

Energii připadající na jednotlivé paprsky snadno určíme v rovině fokusu ( $z = 0$ ), kde má vektor intenzity záření konstantní směr

$$Q_r^{\Delta t} = \int_{t_1}^{t_2} \int_0^{2\pi} \int_{w_0^r - d^r/2}^{w_0^r + d^r/2} r I(r, 0, t) dr d\varphi dt \quad (2.23)$$

kde  $d^r$  představuje šířku paprsku v rovině fokusu a  $\Delta t = t_2 - t_1$  jeden časový krok Lagrangeovského schématu. Známe-li rozložení paprsků, sledujeme průchod jednotlivých paprsků výpočetní sítí a divergenci intenzity laseru, která vystupuje jako zdrojový člen v rovnici zákona zachování energie (1.4), pak určíme jako součet úbytků energií  $\Delta Q_r$  v dané buňce pro jednotlivé paprsky [24]

$$\text{div } \vec{I} \approx \frac{1}{V_c} \sum_{r=1}^N \frac{\Delta Q_r}{\Delta t}. \quad (2.24)$$

Zde  $N$  značí počet paprsků pocházejících danou buňkou a  $V_c$  její objem.

Pro určení průsečíku jednotlivého paprsků s hranicí výpočetní sítě definujeme funkci

$$f(r, z) = \begin{cases} \frac{r^2}{w(z)^2} = \frac{r^2}{(w_0^r)^2(1+r^2/z_R^2)} & \text{pro Gaussovský svazek} \\ f(r) = \frac{r}{w_0^r} & \text{pro rovnoběžný svazek.} \end{cases} \quad (2.25)$$

Touto funkcí rozdělíme rovinu na dvě části. První z nich, kde  $f(r, z) < 1$ , odpovídá část nalevo od paprsku (blíže k ose), tj.  $r < w(z)$ , druhá naopak napravo.

Předpokládejme, že uzly tvořící hranici výpočetní sítě jsou indexovány ve směru hodinových ručiček indexem  $h$ . Paprsek pak vstupuje do výpočetní sítě právě v buňce, na jejíž hraně je splněna podmínka  $f(r_h, z_h) < 1$  a  $f(r_{h+1}, z_{h+1}) > 1$  a navíc je hranou první ve směru šíření záření. Tato podmínka navíc zaručuje, že paprsek stejnou hranou buňku neopustí. Takovéto paprsky tedy neuvažujeme. Další postup se již liší v závislosti na zvolené metodě absorpce.

### 2.4.1 Model absorpce na kritické ploše

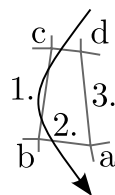
V tomto modelu předpokládáme trajektorii paprsků neovlivněnou průchodem plazmatem a zajímá nás pouze, kdy daný paprsek narazí na kritickou plochu, viz obrázek 2.9. Uvažujeme-li záření dopadající shora, vybereme průsečík paprsku s hranicí výpočetní sítě s maximální souřadnicí  $z_h$  a tuto si zapamatujeme. Poté, co paprsek opustí výpočetní síť, celý postup opakujeme dokud existuje nový průsečík, pro který jemu odpovídající nový uzel hrany  $z_h^n < z_h$ .

Postup výpočetní sítě se, obdobně jako při hledání průsečíku s její hranicí, řídí hodnotami funkce  $f$  ve vybraných uzlech buněk podél paprsku. Jedná se o obdobu algoritmu popsaného dále, viz obrázek 2.12 s tím rozdílem, že místo počítání skalárního součinu porovnáváme hodnoty funkce  $f$ . Navíc je třeba modifikovat pořadí vyhodnocování podmínek, konkrétně testovat hrany proti směru hodinových ručiček. Tímto ošetříme i případy, kdy paprsek protíná dvakrát tutéž hranu, viz obrázek 2.8. Pseudokód pro výběr další buňky by v tomto případě vypadal

```

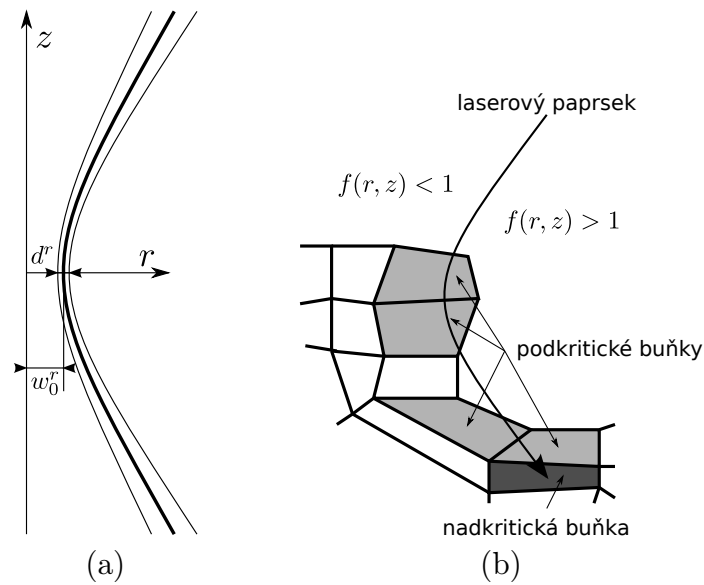
if( $f(r_b, z_b) > 1$ )
. Jdi_přes_hranu_1
else if( $f(r_a, z_a) > 1$ )
. Jdi_přes_hranu_2
else
. Jdi_přes_hranu_3
endif

```



Obrázek 2.8: Degenerovaný případ průchodu paprsku do další buňky.

Při vstupu paprsku do nové buňky vždy rozlišujeme následující případy. Buď logický index  $i$  nebo  $j$  překročil rozměry sítě, pak paprsek výpočetní síť opouští a vracíme se k hledání dalšího průsečíku s hranicí. Dále kontrolujeme hustotu volných elektronů v buňce – pokud je vyšší než kritická, připočteme předem zadanou část energie paprsku (2.23) k divergenci intenzity v této buňce a pokračujeme na následující paprsek. Pokud nenastane ani jedna z těchto variant, postupujeme podle dříve zmíněného algoritmu, tedy v závislosti na hodnotě funkce  $f$  v protějších vrcholech buňky, do buňky nové. Na závěr poznamenejme, že výhodou tohoto algoritmu je, že není třeba vyčíslovat souřadnice žádného z průsečíků paprsku s výpočetní sítí.



Obrázek 2.9: Absorpce na kritické ploše. Detail paprsku pro Gaussovský svazek (a) a jeho průchod sítí (b).

Pro jednoduché experimenty, kde většina laserového záření dopadá kolmo na gradient hustoty plazmatu, je model absorpce na kritické ploše dobře použitelný. Mezi zápory tohoto přístupu patří jednak nutnost zadat podíl absorbované ku odražené energii laseru jako vstupní parametr. Také velikost divergence v buňce na kritické ploše závisí na jejím objemu. Energie každého paprsku se totiž absorbuje maximálně v jedné buňce a pokud zmenšíme její tloušťku ve směru paprsku na polovinu, výsledkem je dvojnásobná divergence intenzity (tedy přírůstek hustoty energie) v dané buňce. Její ničím neomezený růst při dělení výpočetní sítě je dán předpokládanou nespojitostí (skokem) intenzity laserového záření podél paprsku v místě kritické plochy.

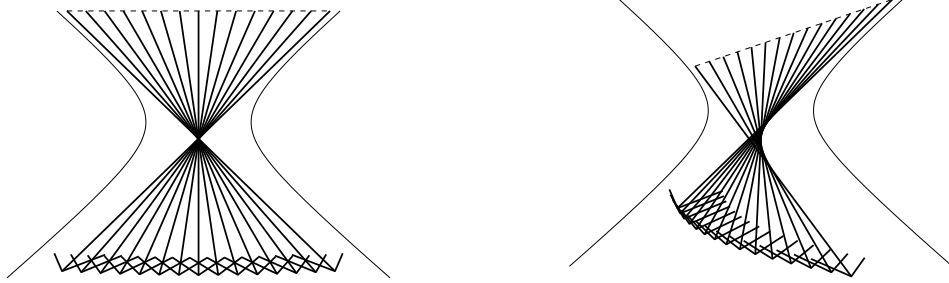
Níže popsaný model s trasováním paprsků obě zmíněná negativa použitím reálnějšího fyzikálního popisu šíření a absorpce záření v plazmatu přirozeným způsobem odstraňuje. Před kritickou plochou totiž typicky dochází k ohybu paprsku, tento paprsek se tedy pohybuje pouze v prostředí s konečným absorpčním koeficientem (2.14) a úbytek jeho energie aproximuje spojitou funkci s omezenou derivací. Energie absorbovaná v buňce se v tomto modelu se počítá ze součtu energií jednotlivých paprsků. Podíl absorbované a odražené energie je pak dán hloubkou průniku paprsků do plazmatu.

## 2.4.2 Model absorpce s trasováním paprsků

V tomto modelu již uvažujeme vliv plazmatu na směr paprsků laserového záření. Dochází tedy k ohybu paprsků před kritickou plochou. Formulaci pro Gaussovský svazek provedeme zavedením difrakčního členu do výpočtu ohybu paprsku na hranách buněk. Pokud bychom brali v úvahu pouze počáteční rozložení paprsků popsané Gaussovským svazkem na okraji plazmatu a přímé šíření paprsků v řídkém plazmatu,



pak by mohlo docházet ke vzniku kaustik, tedy ploch se singularitou v intenzitě, viz obrázek 2.10.



Obrázek 2.10: Fokusace paprsků do bodu (a) a vznik kaustiky (b) pro přímé paprsky, které by odpovídaly na hranici výpočetní sítě (slabá přerušovaná čára) Gaussovskému rozložení. Pro jednoduchost neuvažujeme cylindrickou symetrii.

V modelu s trasováním paprsků opět pro každý paprsek najdeme průsečík s hranicí výpočetní sítě a zvolíme ten, který odpovídá první buňce ve směru dopadajícího záření. Při jeho průchodu sítí paprsek popisujeme pomocí souřadnic bodu  $(r_r, z_r)$  průsečíku s sítí, úhlem odklonu  $\alpha_r$  od osy  $z$  a energií  $Q_r$ . Postupujeme tak, že z hodnot  $(r_r^0, z_r^0)$  a  $\alpha_r^0$  na vnější hraně buňky  $i^0j^0$  napočítáme nový průsečík  $(r_r^1, z_r^1)$  na „vnitřní“ hraně (hrana kterou paprsek vystupuje) buňky  $i^0j^0$ , tato společná hrana nám určí následující buňkou  $i^1j^1$ . V závislosti na indexu lomu v buňkách  $i^0j^0$  a  $i^1j^1$ , směru gradientu hustoty na příslušné hraně a difraci v buňce určíme nový úhel odklonu paprsku  $\alpha_r^1$ , viz obrázek 2.11. Také určíme novou hodnotu energie  $Q_r^1$ . Ta je určena inverzním brzděním zářením v buňce  $i^0j^0$  a je funkcí hustoty, teploty, ionizace a délky trajektorie paprsku v dané buňce. Z polohy průsečíku  $(r_r^1, z_r^1)$  a úhlu  $\alpha_r^1$  opět určíme nový průsečík a celý postup opakujeme, dokud se paprsek nedostane na hranici výpočetní sítě, kudy síť opouští.

Na hranici výpočetní sítě (při vstupu ani při výstupu paprsku) nepředpokládáme ostrou hranici plasmatu s vakuem, a proto zde lom paprsku neuvažujeme. To nám také zajistí deponování energie do pevného terčíku na počátku simulace a tím i vznik plasmové korony. Pro určení lomu paprsků na vnitřních hranách buněk výpočetní sítě potřebujeme znát gradient hustoty volných elektronů  $\nabla n_e$  v daném bodě. Směr gradientu určuje normálu rozhraní na kterém probíhá lom. Složky gradientu v uzlech  $i, j$ , kde  $i \in \{1, 2 \dots ni-1\}$ ,  $j \in \{1, 2 \dots ni-1\}$  výpočetní sítě vypočteme podle vzorce [22]

$$\begin{aligned}
 (\nabla n_{e_{i,j}})_x = & \left( \frac{y_{i,j+1} - y_{i+1,j}}{2} n_{e_{i+1,j+1}} + \frac{y_{i-1,j} - y_{i,j+1}}{2} n_{e_{i,j+1}} + \right. \\
 & \left. + \frac{y_{i,j-1} - y_{i-1,j}}{2} n_{e_{i,j}} + \frac{y_{i+1,j} - y_{i,j-1}}{2} n_{e_{i+1,j}} \right) \frac{1}{V_{n_{i,j}}} \quad (2.26)
 \end{aligned}$$

$$(\nabla n_{e_{i,j}})_y = - \left( \frac{x_{i,j+1} - x_{i+1,j}}{2} n_{e_{i+1,j+1}} + \frac{x_{i-1,j} - x_{i,j+1}}{2} n_{e_{i,j+1}} + \frac{x_{i,j-1} - x_{i-1,j}}{2} n_{e_{i,j}} + \frac{x_{i+1,j} - x_{i,j-1}}{2} n_{e_{i+1,j}} \right) \frac{1}{V_{n_{i,j}}}, \quad (2.27)$$

kde

$$V_{n_{i,j}} = \frac{V_{c_{i+1,j+1}} + V_{c_{i,j+1}} + V_{c_{i,j}} + V_{c_{i+1,j}}}{4}$$

značí objem buňky  $i, j$ . Na hranici sítě klademe  $\nabla n_e = \vec{0}$ . Pro vyhlazení takto napočteného gradientu provedeme navíc konvoluci s Gaussovským jádrem a konečně hodnotu na hraně každé buňky v místě průsečíku s paprskem určíme lineární interpolací ze dvou uzlů, které k této hraně přísluší.

Známe-li rovinu lomu na hraně, hodnoty indexu lomu v přilehlých buňkách a úhel dopadu, můžeme již pomocí Snellova zákona (2.1.1) určit úhel lomu  $\varphi_{\text{out}}$  a z něj nový úhel  $\alpha_r$  popisující směr paprsku. Tento úhel navíc v případě Gaussovského svazku opravíme o difrakční člen zmíněný dříve. Tato oprava, tedy změna směru paprsku, je dána rozdílem derivací trajektorie paprsku (2.22) při vstupu a výstupu z buňky. Pro výpočet ohybu skutečného paprsku v buňce mezi body  $(r_r^0, z_r^0)$  a  $(r_r^1, z_r^1)$  nejprve najdeme odpovídající virtuální paprsek. Pro tento platí

$$z_R^v = z_R \quad w_0^v = w_0^r \frac{|r_r^0|}{w(z_r^0)}$$

Ohyb paprsku zjistíme za předpokladu malých úhlů jako rozdíl derivací, opravený úhel odklonu paprsku od osy  $z$  je tedy  $\alpha_r^1 + \Delta\alpha$ , kde

$$\Delta\alpha = \left| \frac{d}{dz} w^v(z_r^0) - \frac{d}{dz} w^v(z_r^1) \right| \quad \frac{d}{dz} w^v(z) = \frac{w_0^v z}{z_R^2 \sqrt{1 + (z/z_R)^2}}.$$

Po odrazu paprsku od kritické plochy, popsaného níže, již tuto difrakční korekci neuvážujeme. Pokud je v rovnici (2.1.1)

$$\frac{n_{\text{in}}}{n_{\text{out}}} \sin(\varphi_{\text{in}}) > 1, \quad (2.28)$$

pak tato nemá pro  $\varphi_{\text{out}}$  řešení a dochází tedy k úplnému odrazu. Na rozhraní dvou materiálů by obecně docházelo k odrazu jisté části záření pro všechny úhly  $\varphi_{\text{in}}$ , my však očekáváme hladký profil plasmatu a uvažujeme tedy buď lom paprsku záření jako celku nebo úplný odraz.

V místě odrazu se navíc uplatní jev rezonanční absorpce a paprsek zde, mechanismem popsaným v předešlé kapitole, předává část své energie plasmatu. Pro jednoduchost uvažujeme absorpci této energie v první buňce ve směru paprsku před jeho odrazem. Absorpci inverzním brzděním zářením pro každý paprsek v dané buňce určíme z parametrů plasmatu v buňce a z dráhy, kterou zde paprsek urazil. Pro

přímé paprsky v buňkách je dráha rovna eukleidovské vzdálenosti průsečíků paprsku s buňkou na vstupu a na výslupu.

V následujícím pseudokódu shrneme celý postup výpočtu absorbované energie laserového záření v plasmatu metodou trasování paprsků na dané časové hladině. Nechť  $\vec{X}$  značí souřadnice všech uzlů výpočetní sítě a  $n_e, T, Z$  parametry plasmatu v buňkách.

- $\forall i \in (1, ni), j \in (1, nj)$  napočítáme index lomu  $n_{ij} = \Re(\sqrt{\epsilon_{ij}})$  a absorpční koeficient  $\kappa_{ij}^{\text{ib}} = \frac{2\omega}{c} \Im(\sqrt{\epsilon_{ij}})$  v buňkách z permitivity  $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}(n_{e_{ij}}, T_{ij}, Z_{ij}, \omega)$  dané rovnicí (2.12)
- $\forall i \in (0, ni), j \in (0, nj)$  napočítáme gradient hustoty volných elektronů  $\nabla n_{e_{ij}}$  v uzlech (2.26) a (2.27)
- Načteme parametry laseru a rozmístění paprsků
- for  $m$  from 1 to *pocet\_paprsku*
  1. najdeme průsečík  $\vec{p}_r = (r_r, z_r)$  paprsku  $m$  s hranicí výpočetní sítě, získáme pozici  $i, j$  a orientaci  $o$  příslušné buňky
  2. určíme energii<sup>7</sup> nesenou paprskem (2.23)  $Q \approx I(r_r, 0, t)r_r d_r \Delta t$ , kde  $d_r = d_r(\vec{p}_r)$  je šířka paprsku a  $I$  intenzita laserového záření (2.21)
  3.  $\alpha = \alpha_0$ 
    - do while( $i <> 0$  and  $j <> 0$  and  $i <> ni + 1$  and  $j <> nj + 1$ )
      - $i_{\text{old}} = i, j_{\text{old}} = j, \vec{p}_{r_{\text{old}}} = \vec{p}_r$
      - if(paprsek  $m$  vystupuje z buňky  $ij$ )
        - . nastavíme  $i, j, o$  (paprsek se vrací zpět do předchozí buňky)
      - else
        - .  $[i, j, o, \vec{p}_r, \alpha] = \text{Krok\_Do\_Další\_Buňky}(i, j, o, \vec{p}_r, \alpha, \vec{X})$
        - .  $\nabla n_e^{\text{loc}} = \text{Lineární\_Interpolace}(i, j, \vec{p}_r, \vec{X}, \nabla n_e)$
        - .  $tmp = -\kappa_{i_{\text{old}}j_{\text{old}}}^{\text{ib}} \sqrt{(p_r - p_{r_{\text{old}}})_x^2 + (p_r - p_{r_{\text{old}}})_y^2}$
        - .  $\text{div } \vec{I}_{i_{\text{old}}j_{\text{old}}} = \text{div } \vec{I}_{i_{\text{old}}j_{\text{old}}} + \frac{Q}{V_{i_{\text{old}}j_{\text{old}}}\Delta t} (1 - e^{tmp})$  (2.15,2.24)
        - .  $Q = Qe^{tmp}$
        - .  $\varphi_{\text{in}} = \text{Úhel\_Dopadu\_Na\_Rozdrani}(\nabla n_e^{\text{loc}}, \alpha)$
        - . if( $\frac{n_{\text{in}}}{n_{\text{out}}} \sin(\varphi_{\text{in}}) \geq 1$ ) then
          - . . if( $\nabla n_e^{\text{loc}} \cdot \vec{L} > 0$ ) then
            - . . .  $\alpha = \alpha + 2\varphi_{\text{in}} + \pi$
            - . . .  $q = \text{Parametr\_Rezonanční\_Absorpce}(\omega, \nabla n_e^{\text{loc}}, \varphi_{\text{in}})$  (2.17)
            - . . .  $Q_{\text{res}_{ij}} = Qq \frac{e^{-\frac{4}{3}q^{3/2}}}{q+0.48}$  (2.20)
            - . . .  $\text{div } \vec{I}_{ij} = \text{div } \vec{I}_{ij} + \frac{Q_{\text{res}_{ij}}}{V_{ij}\Delta t}$
            - . . .  $Q = Q - Q_{\text{res}_{ij}}$

<sup>7</sup>zde vyjádřena na jeden radián

```

. . . endif
. . else
. . .  $\alpha = \alpha + (\varphi_{\text{in}} - \arcsin(\frac{n_{\text{in}}}{n_{\text{out}}} \sin \varphi_{\text{in}}))$  (2.1.1)
. . endif
. endif
enddo

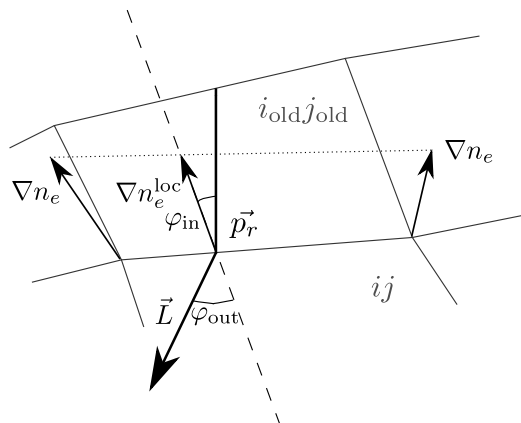
end

```

Hledání průsečíku paprsku v kroku —1— je pro rovnoběžný svazek analogické hledání průsečíku přímky a polygonu, při více průsečících vybereme ten první ve směru dopadajícího záření. Obecně můžeme porovnávat hodnotu  $f$  (2.25) v hraničních uzlech.

Energie paprsku —2— je dána jeho polohou a příčným průřezem  $r_r d_r$  v místě dopadu do plasmatu, dále prostorovým a časovým profilem laserového svazku a velikostí časového kroku<sup>8</sup>  $\Delta t$ .

Ve třetím kroku sledujeme trajektorii paprsku na výpočetní síti dokud ji neopustí. Při průchodu paprsku po logicky obdélníkové síti může nastat celkem  $4 \cdot 4 =$



Obrázek 2.11: Náčrtek k popisu algoritmu absorpce s modelem trasování paprsků.

16 možností (paprsek vstupuje do buňky buď logicky shora, zdola, zprava nebo zleva a analogicky k tomu buňku opouští). Tyto stavy můžeme odlišit polohou vrcholů buňky vzhledem k paprsku a podle nich se také rozhoduje rutina `Krok_Do_Další_Buňky` popsaná dále. Příspěvek k divergenci intenzity záření v příslušné buňce je pak určen podle (2.24) s tím rozdílem, že oproti modelu absorpce na kritické ploše se stále paralelními paprsky zde v podstatě vycházíme z příčného průřezu paprsku na hranici výpočetní sítě<sup>9</sup>. Tuto ztrátu způsobenou inverzním brzdným zářením musíme samozřejmě odečíst od zbývající energie paprsku  $Q$ .

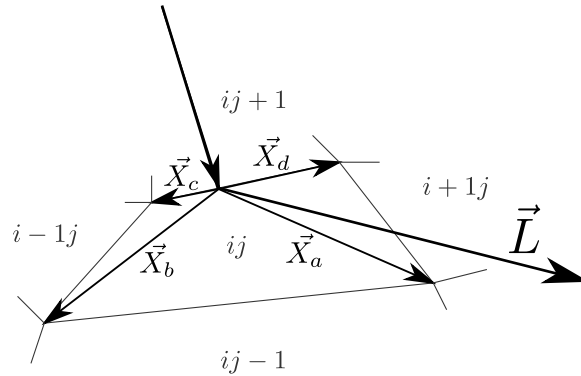
<sup>8</sup> $\Delta t$  zde používáme pouze pro snazší představu o tom, že paprsek nese jistou energii. Pro výpočet divergence intenzity je nepodstatná, neboť se zde vykrátí.

<sup>9</sup>Pokud bychom chtěli určit např. intenzitu záření podél paprsku, bylo by nutné uvažovat změnu jeho průřezu v souvislosti s průchodem sítí. V našem modelu interakce záření s hmotou nás však tato veličina nezajímá, a proto si výpočet aktuálního průřezu paprsku odpustíme.

V místě průsečíku na hraně buňky uvažujeme tři případy, a sice lom paprsku, odraz a přímý průchod. Poslední případ nastane, pokud platí podmínka (2.28), avšak paprsek se pohybuje proti směru gradientu hustoty volných elektronů. Tuto podmínku zapíšeme pomocí záporného znaménka skalárního součinu gradientu a směru paprsku  $\vec{L}$ , tedy  $\nabla n_e^{\text{loc}} \cdot \vec{L} < 0$ . Lom a odraz se odliší opět podle (2.28), při odrazu navíc uvažujeme rezonanční absorpci části záření v závislosti na parametru  $q$ . S vědomím jisté malé nepřesnosti tuto část energie také zahrneme do členu  $\text{div} \vec{I}$ , který napočítáme podle (2.24).

V cylindrické symetrii je algoritmus navíc doplněn podmínkou pro „odraz“ záření na ose  $z$  odpovídající průchodu paprsku osou symetrie, pro kartézský případ by se změnil pouze příčný průřez paprsku, případně koeficient u rezonanční absorpce pro lineárně polarizované záření laseru.

Pseudokód podprogramu Krok\_Do\_Další\_Buňky pro případ, kdy paprsek dopadá na buňku v logickém uspořádání shora, tj. pro jednu pevnou hodnotu proměnné  $o$ .



Obrázek 2.12: Náčrtek k podprogramu s výsledným směrem záření.

```

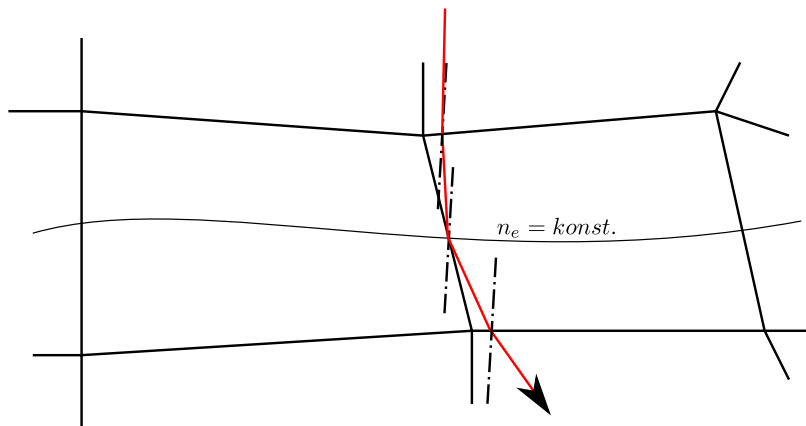
if( $\vec{L} \times \vec{X}_a < 0$ )
.    $i = i + 1$ 
.    $\vec{p}_r = \text{Průsečík\_S\_Pravou\_Hranou}(\vec{p}_r, \alpha, \vec{X})$ 
else
.   if( $\vec{L} \times \vec{X}_b > 0$ )
.     .    $i = i - 1$ 
.     .    $\vec{p}_r = \text{Průsečík\_S\_Levou\_Hranou}(\vec{p}_r, \alpha, \vec{X})$ 
.     else
.     .    $j = j - 1$ 
.     .    $\vec{p}_r = \text{Průsečík\_Se\_Spodní\_Hranou}(\vec{p}_r, \alpha, \vec{X})$ 
.   endif
endif

```

Vektor  $\vec{L}$  představuje směr dopadajícího paprsku na buňku  $ij$ . Vzdálenější levý (z pohledu paprsku) uzel od místa dopadu paprsku označme indexem  $a$  a další ve směru hodinových ručiček.  $\vec{X}_i$ ,  $i \in \{a, b, c, d\}$  značí vektory spojující místo dopadu

s uzly buňky. První podmínka, tedy záporný vektorový součin, značí, že se rozhodující uzel nachází napravo od paprsku a ten nutně vstupuje do buňky  $i + 1, j$  (situace na obrázku 2.12). Při hledání průsečíku s hranou buňky je pak třeba vhodnou numerickou metodou zajistit, aby tento průsečík skutečně ležel mezi uzly  $a$  a  $d$ , tedy například použít metodu půlení intervalu v případě dopadu paprsku do blízkosti uzlu. Ostatní podmínky jsou podobné. Tímto rozhodováním si ušetříme hledání dvou průsečíků paprsku s hranou v každé buňce. Pro obecný případ dopadu paprsku ze všech logických směrů je nutné volit změnu  $i$  a  $j$  v závislosti na logickém směru dopadu paprsku  $o$ .

Podmínka „if(paprsek  $m$  vystupuje z buňky  $ij$ )“ z popisu hlavního algoritmu by se řešila podobně, tedy v závislosti na znaménku vektorového součinu  $\vec{L}$  s kombinací vektorů uzlů  $\vec{X}_c$  a  $\vec{X}_d$ . Na závěr poznamenejme, že situace odrazu paprsku od hrany buňky není nutně svázána s podmínkou (2.28) pro odraz na rozhraní prostředí daných směrem gradientu hustoty a naopak, viz obrázek 2.13. Při druhém lomu se totiž paprsek vrací do shodné buňky, i když nebyla splněna podmínka odrazu (2.28). V tomto případě paprsek postupuje do hustšího plasmatu a všechny lomy jsou tedy směrem od normály.



Obrázek 2.13: Ukázka průchodu paprsku (červený) výpočetní sítí (zobrazeny dvě buňky). Slabá plná čára značí plochu konstantní hustoty a čerchovaná její normálu, na které dochází k lomu.

# Kapitola 3

## Metoda ALE a remapování

Jak jsme již zmínili v první kapitole, pohyblivá výpočetní síť v Lagrangeovské hydrodynamice umožňuje snadnou formulaci okrajových podmínek v případě pohybujících se rozhraní a také přirozeným způsobem mění prostorové rozlišení sítě při kompresi či expanzi látky. Pohyb výpočetní sítě, který je plně určen pohybem látky, však může vést k její degeneraci. Tím myslíme například převrácení buněk výpočetní sítě (změna pořadí vrcholů jejího konvexním obalu) při smykových nebo vířivých proudech v látce.

K odstranění degenerace výpočetní sítě byla v článku [7] navržena kombinace Lagrangeovského a Eulerovského přístupu, nazvána ALE<sup>1</sup> metodou. Výhodou této formulace je rozdělení hydrodynamického výpočtu do tří samostatných fází, a to

1. **Lagrangeovský** výpočet několika časových kroků. Této části jsme se věnovali v první kapitole, ve které se odkazujeme na články popisující konkrétní numerická schémata pro Lagrangeovský časový krok.
2. **Rezonování**, neboli vyhlazení výpočetní sítě. V této kapitole se zabýváme pouze jednodimenzionálními problémy a rezonováním, při kterém zůstane nová buňka v těsném okolí buňky staré výpočetní sítě, jako příklad jednoduchého rezonování uvedme (3.5).
3. **Remapování**, tedy interpolace konzervativních veličin na novou výpočetní síť. Z první fáze totiž známe pouze hodnoty veličin na původní Lagrangeovské (staré) výpočetní síti a pro další časový Lagrangeovský krok potřebujeme přepočítat tyto hodnoty na (novou) síť vzniklou rezonováním.

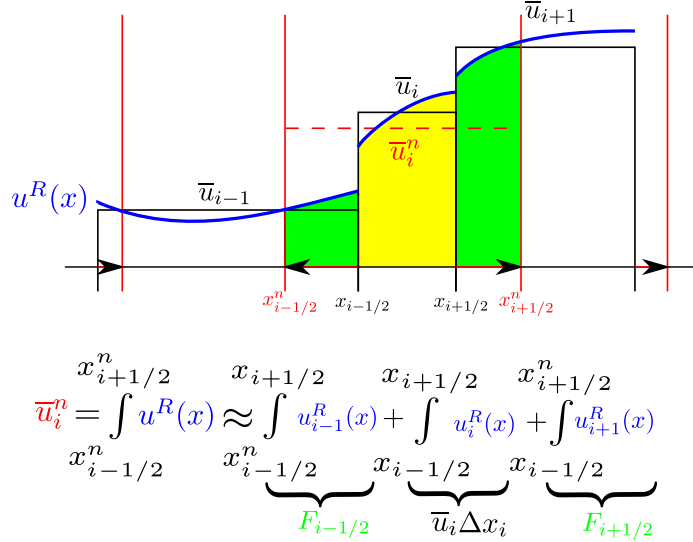
Tyto fáze se střídají vždy v uvedeném pořadí za sebou, existuje však několik přístupů k přepínání mezi nimi. První možností je čistě Lagrangeovský výpočet s zařazením rezonování a následného remapování až ve chvíli, kdy dojde k degeneraci výpočetní sítě. Opačným případem je provádění rezonování a remapování po každém časovém kroku, krajním případem je navracení se vždy na původní síť a tedy obdoba čistě Eulerovské metody. Další možností je zařazování rezonování/remapování po určitém

---

<sup>1</sup>Arbitrary Lagrangian Eulerian

počtu časových kroků, kde na rozdíl od prvního přístupu pracujeme stále s kvalitní výpočetní sítí, můžeme si dovolit jednoduší rezonování a rovněž celková chyba vnesená remapováním může být v důsledku menšího posunutí sítí vůči sobě menší.

Samotné remapování můžeme dále rozdělit na dvě části. První z nich je rekonstrukce neznámé funkce z jejich integrálních průměrů v buňkách výpočetní sítě a druhou výpočet numerických toků, tedy integrace této rekonstrukce přes oblasti dané



Obrázek 3.1: Schematický náčrtek remapování v jedné buňce. Stará síť spolu s integrálními průměry černě, nová červeně.  $x_{i\pm 1/2}$  značí polohy uzlů sítě, modře rekonstrukce funkce  $u(x)$  a zeleně numerické toky  $F_{i\pm 1/2}$ . Vzorec platí pro speciální případ posunutí uzlů nové sítě naznačený šipkami.

posunutím nové sítě od staré, viz obrázek 3.1. Při remapování tedy chceme z polohy uzlů staré  $x_{i-1/2}$  a nové  $x_{i-1/2}^n$  sítě a integrálních průměrů (3.5)  $\bar{u}_i$  v buňkách staré sítě napočítat průměry  $\bar{u}_i^n$  na nové síti, tedy

$$\bar{u}_i^n = \frac{1}{\Delta x_i^n} \int_{x_{i-1/2}^n}^{x_{i+1/2}^n} u^R(x) dx, \quad (3.1)$$

kde  $x_i^n$  jsou objemy buněk nové sítě a  $u^R(x)$  hledaná rekonstrukce funkce  $u(x)$  napočítaná z integrálních průměrů  $\bar{u}_i$  na staré síti. Navíc požadujeme, aby remapování bylo konzervativní, tedy aby platilo

$$\sum_i \bar{u}_i \Delta x_i = \sum_i \bar{u}_i^n \Delta x_i^n. \quad (3.2)$$

Další vhodnou vlastností remapování je, aby nevytvářelo nové lokální extrémů. Pokud definujeme meze jako

$$\begin{aligned} u_i^{\min} &= \min \{ \bar{u}_{i-1}, \bar{u}_i, \bar{u}_{i+1} \} \\ u_i^{\max} &= \max \{ \bar{u}_{i-1}, \bar{u}_i, \bar{u}_{i+1} \}, \end{aligned} \quad (3.3)$$



pak řekneme, že remapovací metoda zachovává meze, právě tehdy když

$$\forall i \quad u_i^{\min} \leq \bar{u}_i \leq u_i^{\max}. \quad (3.4)$$

Vraťme se nyní k hledání rekonstrukce (3.1). Uvažujme, že máme danou výpočetní síť popsanou souřadnicemi uzlů  $x$  s poločíselným indexem a integrální průměry  $\bar{u}$  neznáme funkce  $u$  v jejich buňkách.  $\bar{u}_i$  tedy odpovídá hodnotě v buňce  $(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$ . Integrální průměr funkce  $u(x)$  je definován jako

$$\bar{u}_i = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u(x) dx, \quad (3.5)$$

kde  $\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$  označuje objem příslušné buňky. Dále označme pozici středu buňky  $x_i = \frac{x_{i+1/2} + x_{i-1/2}}{2}$ , jejíž pomocí lze vyjádřit souřadnici uzlu jako  $x_{i\pm 1/2} = x_i \pm \frac{\Delta x_i}{2}$ . Hledanou rekonstrukci v buňce  $i$  označme  $u_i^R(x)$ . V případě Eulerových rovnic remapujeme hustotu  $\rho$ , hustotu hybnosti  $\rho u$  a hustotu celkové energie  $\rho e$ , jejichž integrací přes objem získáme konzervativní veličiny, tedy hmotu, hybnost a celkovou energii. V této práci se omezíme pouze na takové rekonstrukce, které je možno explicitně vyjádřit z hodnot  $\bar{u}$  v několika okolních buňkách.

### 3.1 Po částech konstantní rekonstrukce

Pokud hledáme rekonstrukci ve tvaru  $u_i^R(x) = u_i^D$ , pak z požadavku na zachování střední hodnoty pro naši rekonstrukci v buňce

$$\frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u(x) dx = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u_i^R(x) dx \quad (3.6)$$

po aplikaci definice (3.5) dostáváme

$$\bar{u}_i = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u_i^D dx = u_i^D \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} dx = u_i^D \quad (3.7)$$

a tedy  $u_i^D = \bar{u}_i$ .

Tato jednoduchá rekonstrukce má tu příjemnou vlastnosti, že zůstává v mezích. Tím myslíme, že ve vnitřních<sup>2</sup> buňkách výpočetní síť splňuje  $\forall x \in (x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$  rekonstrukce následující nerovnosti

$$\begin{aligned} u_i^R(x) &\geq \min \{ \bar{u}_{i-1}, \bar{u}_i, \bar{u}_{i+1} \} \quad \text{a} \\ u_i^R(x) &\leq \max \{ \bar{u}_{i-1}, \bar{u}_i, \bar{u}_{i+1} \}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

---

<sup>2</sup>definice v krajních buňkách souvisí s volbou okrajových podmínek

## 3.2 Po částech lineární rekonstrukce

Tuto rekonstrukci hledáme ve tvaru

$$u_i^R(x) = u_i + u_i^x(x - x_i), \quad (3.9)$$

který odpovídá Taylorově rozvoji v bodě  $x_i$ . Z podmínky (3.6) dostaneme  $u_i = \bar{u}_i$  a pro odhad derivace můžeme požit například centrální diferenci, tedy

$$u_i^x = \frac{\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}. \quad (3.10)$$

Tato rekonstrukce však již obecně nezůstává v mezích, což může mít pro remapování jakožto i pro celou ALE metodu vážné důsledky. Do řešení totiž například vnášíme nové extrémy, což může mít za následek vznik oscilací (často v okolí rázových vln). K odstranění tohoto problému se používají pro omezení odhadu derivace tzv. limity. Uvedme tři příklady pro po částech lineární rekonstrukci.

### 3.2.1 Limitování sklonu rekonstrukce

*Minmod* (MM) limiter [13] porovnává diferenční náhradu derivace ve středu buňky vypočtenou podle (3.10) s náhradami v jejich uzlech. Výsledná rekonstrukce tvaru (3.9) pak namísto  $u_i^x$  využívá limitovaný člen  ${}^{\text{mm}}u_i^x$

$${}^{\text{mm}}u_i^x = \text{minmod} \left( u_i^x, \beta \frac{\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i}{x_{i+1} - x_i}, \beta \frac{\bar{u}_i - \bar{u}_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right). \quad (3.11)$$

Koeficient  $\beta \in (1, 2)$  lze volit s ohledem na vlastnost limitování. Nižší hodnota představuje silnější limitování, zatímco vyšší zachovává lokální extrémy a lepší konvergenci na hladkém řešení. Funkce *minmod* je definována jako

$$\text{minmod}(a, b, c) = \begin{cases} \min(a, b, c) & \text{pokud } a, b \text{ a } c \text{ jsou kladná} \\ 0 & \text{pokud nemají } a, b \text{ a } c \text{ stejná znaménka} \\ -\min(|a|, |b|, |c|) & \text{pokud } a, b \text{ a } c \text{ jsou záporná} \end{cases} \quad (3.12)$$

*Barth–Jespersenův* (BJ) limiter [12] je konstruován tak, aby zachoval lokální meze rekonstrukce. Definujme nejprve meze v uzlech

$$\begin{aligned} u_{i-1/2}^{\min} &= \min(\bar{u}_{i-1}, \bar{u}_i) \\ u_{i-1/2}^{\max} &= \max(\bar{u}_{i-1}, \bar{u}_i). \end{aligned}$$

Nelimitovaná rekonstrukce by měla v obou uzlech každé buňky hodnoty

$$\begin{aligned} u_{i,i-1/2}^u &= u_i^u(x_{i-1/2}) = \bar{u}_i - u_i^x \Delta x_i / 2 \\ u_{i,i+1/2}^u &= u_i^u(x_{i+1/2}) = \bar{u}_i + u_i^x \Delta x_i / 2, \end{aligned}$$

Pro omezení těchto hodnot definujeme

$$\alpha_i^{i\pm 1/2} = \begin{cases} \min\left(\frac{u_{i\pm 1/2}^{\max} - \bar{u}_i}{u_{i\pm 1/2}^u - \bar{u}_i}\right) & \text{pro } u_{i\pm 1/2}^u - \bar{u}_i > 0 \\ 1 & \text{pro } u_{i\pm 1/2}^u - \bar{u}_i = 0 \\ \min\left(\frac{u_{i\pm 1/2}^{\min} - \bar{u}_i}{u_{i\pm 1/2}^u - \bar{u}_i}\right) & \text{pro } u_{i\pm 1/2}^u - \bar{u}_i < 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

Hodnota  $\alpha_i$  v buňce je pak dána jako minimum z hodnot v uzlech, tedy

$$\alpha_i = \min\left(\alpha_i^{i-1/2}, \alpha_i^{i+1/2}\right).$$

Limitovaná rekonstrukce má tvar

$${}^{\text{BJ}}u_i^R(x) = \bar{u}_i + \alpha_i u_i^x(x - x_i). \quad (3.14)$$

Tento dobře známý limiter se často používá a v našich numerických testech v následující kapitole bude sloužit jako základ pro porovnávání s navrženými metodami limitování po částech parabolické rekonstrukce.

*Venkatakrishnanův* limiter [32, 11] představuje hladké rozšíření BJ limitru. Funkci  $\min(1, y)$  v (3.13) totiž nahrazuje  $\frac{y^2+2y}{y^2+y+2}$  a (3.13) tak přejde na tvar

$$\phi_i^{i\pm 1/2} = \begin{cases} \frac{1}{\Delta u_{i\pm 1/2}} \left[ \frac{(\Delta u_i^{\max 2} + \epsilon^2) \Delta u_{i\pm 1/2} + 2 \Delta u_{i\pm 1/2}^2 \Delta u_i^{\max}}{\Delta u_i^{\max 2} + 2 \Delta u_{i\pm 1/2}^2 + \Delta u_i^{\max} \Delta u_{i\pm 1/2} + \epsilon^2} \right] & \text{pro } \Delta u_{i\pm 1/2} > 0 \\ \frac{1}{\Delta u_{i\pm 1/2}} \left[ \frac{(\Delta u_i^{\min 2} + \epsilon^2) \Delta u_{i\pm 1/2} + 2 \Delta u_{i\pm 1/2}^2 \Delta u_i^{\min}}{\Delta u_i^{\min 2} + 2 \Delta u_{i\pm 1/2}^2 + \Delta u_i^{\min} \Delta u_{i\pm 1/2} + \epsilon^2} \right] & \text{pro } \Delta u_{i\pm 1/2} < 0 \end{cases}, \quad (3.15)$$

kde

$$\begin{aligned} u_i^{\min} &= \min(\bar{u}_{i-1}, \bar{u}_i, \bar{u}_{i+1}) \\ u_i^{\max} &= \max(\bar{u}_{i-1}, \bar{u}_i, \bar{u}_{i+1}) \\ \Delta u_i^{\max} &= u_i^{\max} - \bar{u}_i \\ \Delta u_i^{\min} &= u_i^{\min} - \bar{u}_i \\ \Delta u_{i\pm 1/2} &= u_{i\pm 1/2}^u - \bar{u}_i \end{aligned}$$

V konkrétní implementaci je třeba  $\Delta u_{i\pm 1/2}$  nahradit  $\text{sign}(\Delta u_{i\pm 1/2}) (|\Delta u_{i\pm 1/2}| + \omega)$ , kde  $\omega = 1 \cdot 10^{-12}$  pro 64 bitovou aritmetiku.  $\epsilon^2 = (K \Delta x_i)^3$  se volí pro vyrušení vlivu limiteru v blízkosti hladkého extrému a za  $K$  se typicky berou hodnoty 0.3, 1 nebo 10 [32]. Hodnota limiteru  $\phi_i$  v buňce se napočítá jako  $\phi_i = \min(\phi_i^{i-1/2}, \phi_i^{i+1/2})$  a výsledná rekonstrukce pak

$${}^{\text{Venk}}u_i^R(x) = \bar{u}_i + \phi_i u_i^x(x - x_i). \quad (3.16)$$

### 3.3 Po částech parabolická rekonstrukce

Hlavní motivací pro návrh po částech parabolické rekonstrukce je dosažení vyššího řádu konvergence metody na hladkém řešení. Popíšeme dva přístupy k jejímu nalezení. První z nich přirozeným způsobem rozšiřuje předchozí, po částech lineární, metodu a rovněž zobecňuje používání limiterů na členy vyššího řádu. Hledáme tedy rekonstrukci v buňce ve tvaru

$$u_i^R(x) = u_i + u_i^x(x - x_i) + \frac{1}{2}u_i^{xx}(x - x_i)^2. \quad (3.17)$$

Výpočet neznámých koeficientů  $u_i$ ,  $u_i^x$  a  $u_i^{xx}$  v následujícím textu podrobně odvodíme. Z podmínky na zachování integrálního průměru (3.6)

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u_i^R(x) dx &= \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u_i + u_i^x(x - x_i) + \frac{1}{2}u_i^{xx}(x - x_i)^2 dx \\ &= u_i \left[ x \right]_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} + u_i^x \left[ \frac{1}{2}(x - x_i)^2 \right]_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} + \frac{1}{2}u_i^{xx} \left[ \frac{1}{3}(x - x_i)^3 \right]_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \\ &= u_i \underbrace{(x_{i+1/2} - x_{i-1/2})}_{\Delta x_i} + \frac{1}{2}u_i^x \left[ \underbrace{(x_{i+1/2} - x_i)^2}_{\frac{\Delta x_i}{2}} - \underbrace{(x_{i-1/2} - x_i)^2}_{-\frac{\Delta x_i}{2}} \right] + \\ &\quad + \frac{1}{6}u_i^{xx} \left[ \left( \frac{\Delta x_i}{2} \right)^3 + \left( \frac{\Delta x_i}{2} \right)^3 \right] \\ &= u_i \Delta x_i + \frac{1}{24}u_i^{xx} \Delta x_i^3 = \bar{u}_i \Delta x_i, \end{aligned}$$

dostáváme první vztah mezi hledanými koeficienty

$$u_i = \bar{u}_i - \frac{1}{24}u_i^{xx} \Delta x_i^2. \quad (3.18)$$

Zbylé koeficienty vypočteme z podmínky, abychom minimalizovali chybu rekonstrukce v sousedních buňkách. Proto definujme funkcional  $\phi(u_i, u_i^x, u_i^{xx})$  vyjadřující tuto chybu ve smyslu nejmenších čtverců odchylky integrálních průměrů, dosadíme předpoklá-

daný tvar (3.17) a upravme

$$\begin{aligned}
\phi(u_i, u_i^x, u_i^{xx}) &= \sum_{j \in \{i-1, i+1\}} \left( \bar{u}_j - \frac{1}{\Delta x_j} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u_i^R(x) dx \right)^2 \\
&= \left[ \bar{u}_{i-1} - u_i - u_i^x \frac{(\Delta x_i/2)^2 - (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i/2)^2}{2\Delta x_{i-1}} - u_i^{xx} \frac{-(\Delta x_i/2)^3 + (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i/2)^3}{6\Delta x_{i-1}} \right]^2 + \\
&\quad + \left[ \bar{u}_{i+1} - u_i - u_i^x \frac{(\Delta x_{i+1} + \Delta x_i/2)^2 - (\Delta x_i/2)^2}{2\Delta x_{i+1}} - u_i^{xx} \frac{(\Delta x_{i+1} + \Delta x_i/2)^3 - (\Delta x_i/2)^3}{6\Delta x_{i+1}} \right]^2 \\
&= \left[ \bar{u}_{i-1} - \bar{u}_i + \frac{1}{2} u_i^x (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) - \frac{1}{12} u_i^{xx} (\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) (2\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) \right]^2 + \\
&\quad + \left[ \bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i - \frac{1}{2} u_i^x (\Delta x_{i+1} + \Delta x_i) - \frac{1}{12} u_i^{xx} (\Delta x_{i+1} + \Delta x_i) (2\Delta x_{i+1} + \Delta x_i) \right]^2
\end{aligned}$$

v posledním kroku jsme za  $u_i$  dosadili z (3.18). Pro zjednodušení zápisu dále zavede-  
ním

$$\begin{aligned}
\Delta x_{i,i\pm 1} &= \Delta x_{i\pm 1} + \Delta x_i \\
\Delta_2 x_{i,i\pm 1} &= 2\Delta x_{i\pm 1} + \Delta x_i
\end{aligned} \tag{3.19}$$

získáváme konečné vyjádření funkcionálu  $\phi$

$$\begin{aligned}
\phi(u_i^x, u_i^{xx}) &= \left[ \bar{u}_{i-1} - \bar{u}_i + \frac{1}{2} u_i^x \Delta x_{i,i-1} - \frac{1}{12} u_i^{xx} \Delta x_{i,i-1} \Delta_2 x_{i,i-1} \right]^2 + \\
&\quad + \left[ \bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i - \frac{1}{2} u_i^x \Delta x_{i,i+1} - \frac{1}{12} u_i^{xx} \Delta x_{i,i+1} \Delta_2 x_{i,i+1} \right]^2
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Tento funkcionál vyjadřuje chybu rekonstrukce. Vztah pro hledané koeficienty  $u_i^x$  a  $u_i^{xx}$  proto získáme tak, že položíme derivace podle těchto koeficientů rovny nule

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial \phi}{\partial u_i^x} = \left[ \bar{u}_{i-1} - \bar{u}_i + \frac{1}{2} u_i^x \Delta x_{i,i-1} - \frac{1}{12} u_i^{xx} \Delta x_{i,i-1} \Delta_2 x_{i,i-1} \right] \Delta x_{i,i-1} - \\
&\quad - \left[ \bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i - \frac{1}{2} u_i^x \Delta x_{i,i+1} - \frac{1}{12} u_i^{xx} \Delta x_{i,i+1} \Delta_2 x_{i,i+1} \right] \Delta x_{i,i+1} \\
0 &= \frac{\partial \phi}{\partial u_i^{xx}} = - \left[ \bar{u}_{i-1} - \bar{u}_i + \frac{1}{2} u_i^x \Delta x_{i,i-1} - \frac{1}{12} u_i^{xx} \Delta x_{i,i-1} \Delta_2 x_{i,i-1} \right] \frac{1}{6} \Delta x_{i,i-1} \Delta_2 x_{i,i-1} - \\
&\quad - \left[ \bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i - \frac{1}{2} u_i^x \Delta x_{i,i+1} - \frac{1}{12} u_i^{xx} \Delta x_{i,i+1} \Delta_2 x_{i,i+1} \right] \frac{1}{6} \Delta x_{i,i+1} \Delta_2 x_{i,i+1}
\end{aligned}$$

Vyřešením této lineární soustavy získáme vzorce pro neomezené koeficienty, které pro jednoduchost zápisu přeznačíme<sup>3</sup> na  $\bar{u}_i^x = u_i^x$ ,  $\bar{u}_i^{xx} = u_i^{xx}$ .

$$\bar{u}_i^x = 2 \frac{(\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i) \Delta x_{i,i-1} \Delta_2 x_{i,i-1} + (\bar{u}_i - \bar{u}_{i-1}) \Delta x_{i,i+1} \Delta_2 x_{i,i+1}}{\Delta x_{i,i-1} \Delta x_{i,i+1} (\Delta_2 x_{i,i-1} + \Delta_2 x_{i,i+1})} \quad (3.21)$$

$$\bar{u}_i^{xx} = 12 \frac{(\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i) \Delta x_{i,i-1} - (\bar{u}_i - \bar{u}_{i-1}) \Delta x_{i,i+1}}{\Delta x_{i,i-1} \Delta x_{i,i+1} (\Delta_2 x_{i,i-1} + \Delta_2 x_{i,i+1})} \quad (3.22)$$

Tyto koeficienty nám již plně určují rekonstrukci (3.17), neboť po aplikaci vztahu (3.18) získáme  $u_i^R$  jako

$$u_i^R(x) = \bar{u}_i + \bar{u}_i^x (x - x_i) + \frac{1}{2} \bar{u}_i^{xx} \left[ (x - x_i)^2 - \frac{1}{12} \Delta x_i^2 \right]. \quad (3.23)$$

Poslední člen v předchozí rovnici tedy zajišťuje zachování integrálního průměru pro libovolné hodnoty koeficientů  $\bar{u}_i^x$  a  $\bar{u}_i^{xx}$ . Na závěr poznamenejme, že pro určení koeficientů po částech parabolické rekonstrukce v buňce postačují hodnoty  $u$  v této buňce a ve dvou sousedních buňkách a objemy  $\Delta x$  těchto tří buněk. Také lze ukázat, že tato rekonstrukce je přesná pro polynomy až do druhého řádu. Pokud bychom obdobný postup s minimalizací chyby v sousedních buňkách aplikovali na po částech lineární rekonstrukci tvaru (3.9), získali bychom vztah pro odhad derivace

$$u_i^x = 2 \frac{(\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i) \Delta x_{i,i+1} + (\bar{u}_i - \bar{u}_{i-1}) \Delta x_{i,i-1}}{\Delta x_{i,i-1}^2 + \Delta x_{i,i+1}^2}.$$

Snadno můžeme nahlédnout, že uvedené odhady pro lineární a parabolickou rekonstrukci se obecně nerovnaají. Rovnost nastane pro rovnoměrnou výpočetní síť, na níž oba vztahy přejdou v centrální diferenci (3.10).

Obdobně jako v případě po částech lineární rekonstrukce, je i v tomto případě nutné nějakým způsobem omezit koeficienty rekonstrukce.

### 3.3.1 Limitování koeficientů rekonstrukce

*Minmod* (MM) limiter pro po částech parabolickou rekonstrukci [13] získáme postupnou aplikací limitru (3.11) nejprve na náhradu druhé a posléze první derivace, konkrétně

$${}^m u_i^{xx} = \text{minmod} \left( \bar{u}_i^{xx}, \beta \frac{\bar{u}_{i+1}^x - \bar{u}_i^x}{\Delta x_{i,i+1}/2}, \beta \frac{\bar{u}_i^x - \bar{u}_{i-1}^x}{\Delta x_{i,i-1}/2} \right), \text{ kde opět } \beta \in (1, 2)$$

pokud omezení odhadu druhé derivace nebylo třeba, tedy pokud platí  ${}^m u_i^{xx} = \bar{u}_i^{xx}$ , pak již první derivaci nelimitujeme a pokládáme  ${}^m u_i^x = \bar{u}_i^x$ . V opačném případě aplikujeme (3.11) i na koeficient lineárního členu

$${}^m u_i^x = \text{minmod} \left( \bar{u}_i^x, \beta \frac{\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i}{\Delta x_{i,i+1}/2}, \beta \frac{\bar{u}_i - \bar{u}_{i-1}}{\Delta x_{i,i-1}/2} \right)$$

<sup>3</sup>ovšem  $\bar{u}_i \neq u_i$ , viz (3.18) a podmínka na zachování integrálního průměru

a výsledná rekonstrukce má tvar

$$u_i^{\text{minmod}}(x) = \bar{u}_i + {}^m u_i^x (x - x_i) + \frac{1}{2} {}^m u_i^{xx} \left[ (x - x_i)^2 - \frac{1}{12} \Delta x_i^2 \right]. \quad (3.24)$$

*Kuzmin–Barth–Jespersenův* [14] (KBJ) limiter pro po částech parabolickou rekonstrukci rozšíříme obdobným způsobem, tedy aplikací BJ limitru nejprve na odhad druhé a posléze první derivace. Pokud zapíšeme BJ limiter v buňce (3.14) jako funkci  $\text{BJ}(\bar{u}_{i-1}, \bar{u}_i, \bar{u}_{i+1}, \bar{u}_i^x, \Delta x_i)$  s návratovou hodnotou  $\alpha_i$ , pak je KBJ limiter popsán následující sekvencí

$$\begin{aligned} \alpha_i^{xx} &= \text{BJ}(\bar{u}_{i-1}^x, \bar{u}_i^x, \bar{u}_{i+1}^x, \bar{u}_i^{xx}, \Delta x_i) \\ \alpha_i^{xo} &= \text{BJ}(\bar{u}_{i-1}, \bar{u}_i, \bar{u}_{i+1}, \bar{u}_i^x, \Delta x_i) \\ \alpha_i^x &= \max(\alpha_i^{xo}, \alpha_i^{xx}) \\ {}^B u_i^{xx} &= \alpha_i^{xx} \bar{u}_i^{xx} \\ {}^B u_i^x &= \alpha_i^x \bar{u}_i^x \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$u_i^{\text{KBJ}}(x) = \bar{u}_i + {}^B u_i^x (x - x_i) + \frac{1}{2} {}^B u_i^{xx} \left[ (x - x_i)^2 - \frac{1}{12} \Delta x_i^2 \right].$$

*Nejatův* limiter [15] pro po částech parabolickou rekonstrukci je posán jako

$$\sigma = \frac{1 - \tanh(S(\phi_0 - \phi_i))}{2},$$

kde za konstanty volíme  $\phi_0 = 0.8$  a  $S = 20$  a  $\phi_i$  je dáno (3.15), pak

$$\begin{aligned} {}^N u_i^{xx} &= \sigma \bar{u}_i^{xx} \\ {}^N u_i^x &= [(1 - \sigma)\phi_i + \sigma] \bar{u}_i^x \\ u_i^{\text{Nejat}}(x) &= \bar{u}_i + {}^N u_i^x (x - x_i) + \frac{1}{2} {}^N u_i^{xx} \left[ (x - x_i)^2 - \frac{1}{12} \Delta x_i^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.26)$$

### 3.3.2 Metoda aproximací hodnot v uzlech

Tato metoda, známá pod zkratkou PPM<sup>4</sup> [16], prezentuje jiný způsob, jak hledat po částech parabolickou rekonstrukci. Koefficienty představující náhrady první a druhé derivace ve středu buňky výpočetní sítě můžeme nahradit jinými. V tomto případě se bude jednat o funkční hodnoty v uzlech. Namísto  $\bar{u}^{xx}$  a  $\bar{u}^x$  budeme tedy hledat předpis pro výpočet a následné limitování hodnot  $u^l$  v levém, respektive  $u^r$  v pravém uzlu příslušícím dané buňce. Mezi těmito koeficienty platí jednoduché převodní vztahy

$$\begin{aligned} \bar{u}_i^x &= \frac{u_i^r - u_i^l}{\Delta x_i} \\ \bar{u}_i^{xx} &= 12 \frac{(u_i^r + u_i^l)/2 - \bar{u}_i}{\Delta x_i^2} \end{aligned} \quad (3.27)$$

---

<sup>4</sup>Piecewise Parabolic Method

Aproximaci hodnoty  $u$  v uzlu  $i + 1/2$  třetího řádu přesnosti získáme podle následujícího vzorce [16], jiné odhady lze nalézt např. v [33]

$$u_{i+1/2} = \bar{u}_i + \frac{\Delta x_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} (\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i) + \frac{1}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+1}} \times \\ \times \left\{ \frac{2\Delta x_{i+1}\Delta x_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \left[ \frac{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}{2\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} - \frac{\Delta x_{i+2} + \Delta x_{i+1}}{2\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} \right] (\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i) - \right. \\ \left. - \Delta x_i \frac{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}{2\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \delta \bar{u}_{i+1} + \Delta x_{i+1} \frac{\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}}{\Delta x_i + 2\Delta x_{i+1}} \delta \bar{u}_i \right\}, \quad (3.28)$$

kde  $\delta \bar{u}_i$  představuje skok  $u$  v dané buňce a vypočteme ho podle

$$\delta \bar{u}_i = \begin{cases} 0 & \text{pro } (\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i)(\bar{u}_i - \bar{u}_{i-1}) < 0 \\ \min(|\Delta x_i \bar{u}_i^x|, 2|(\bar{u}_i - \bar{u}_{i-1})|, 2|(\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i)|) \cdot \text{sign}(\Delta x_i \bar{u}_i^x) & \text{jinak,} \end{cases} \quad (3.29)$$

kde  $\bar{u}_i^x$  v předchozím výrazu je dáno (3.21). Tato podmínka jednak zaručuje, že  $u_{i+1/2}$  zůstane v mezích daných  $\bar{u}_i$  a  $\bar{u}_{i+1}$  a také vede k lepší reprezentaci nespojitostí [16]. Nejprve inicializujeme jednostranné hodnoty rekonstrukce v uzlech  $u_i^r = u_{i+1}^l = u_{i+1/2}$ , pro omezení překmitů však použijeme následující omezení. Tato omezení jsou obdobou limiterů používaných v předchozí formulaci. Je-li  $\bar{u}_i$  lokálním maximem, což poznáme například z podmínky

$$(u_i^r - \bar{u}_i)(\bar{u}_i - u_i^l) \leq 0$$

pak klademe  $u_i^r = u_i^l = \bar{u}_i$  a rekonstrukce je tedy v této buňce konstantní. Dále požadujeme, aby byla parabolická rekonstrukce v každé buňce monotónní, pokud

$$(u_i^r - u_i^l) \left( \bar{u}_i - \frac{1}{2}(u_i^r + u_i^l) \right) > \frac{(u_i^r - u_i^l)^2}{6}$$

pak opravíme hodnotu  $u_i^l = 3\bar{u}_i - 2u_i^r$  a obdobně pokud platí

$$-\frac{(u_i^r - u_i^l)^2}{6} > (u_i^r - u_i^l) \left( \bar{u}_i - \frac{1}{2}(u_i^r + u_i^l) \right)$$

opravíme  $u_i^r = 3\bar{u}_i - 2u_i^l$ . Tímto jsme završili postup hledání parabolické rekonstrukce, která při svém výpočtu v tomto případě počítá pouze s hodnotami  $u$  a  $\Delta x$  v celkem pěti nejbližších buňkách. Užitím (3.27) totiž přejdeme k předchozímu tvaru rekonstrukce (3.23).

### 3.4 Výpočet numerických toků

V předchozím textu jsme popsali různé výpočty rekonstrukce funkce ze známých integrálních průměrů. Druhou částí remapování je pak výpočet numerických toků



mezi sousedními buňkami, tedy integrace této rekonstrukce. Pokud předpokládáme, že uzly nové výpočetní sítě (tuto síť budeme označovat indexem  $n$ ) vzniklé rezonováním zůstanou v okolí daném dvěma nejbližšími buňkami, tj.  $x_{i-3/2} \leq x_{i-1/2}^n \leq x_{i+1/2} \forall i$ , můžeme numerické toky uzly sítě  $F$  pro rekonstrukci s přesností do druhého řádu počítat při pohybu uzlu doprava, tj.  $x_{i-1/2}^n \geq x_{i-1/2}$ , jako

$$\begin{aligned} F_{i-1/2} &= \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i-1/2}^n} u_i^R(x) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i-1/2}^n} (a_i + b_i x + c_i x^2) dx = \\ &= (x_{i-1/2}^n - x_{i-1/2}) \left[ a_i + b_i \frac{x_{i-1/2}^n + x_{i-1/2}}{2} + \frac{c_i}{3} (x_{i-1/2}^n{}^2 + x_{i-1/2}^n x_{i-1/2} + x_{i-1/2}{}^2) \right], \end{aligned} \quad (3.30)$$

kde jsme pro jednoduchost zápisu přešli od vyjádření paraboly vzhledem ke středu buňky ke standardnímu výrazu  $a_i + b_i x + c_i x^2$ , přitom platí tyto převodní vztahy

$$\begin{aligned} c_i &= \frac{1}{2} \bar{u}_i^{xx} \\ b_i &= \bar{u}_i^x - \bar{u}_i^{xx} x_i \\ a_i &= \bar{u}_i - \bar{u}_i^x x_i + \frac{1}{2} \bar{u}_i^{xx} \left( x_i^2 - \frac{1}{12} \Delta x_i^2 \right). \end{aligned}$$

Pro pohyb uzlu sítě vlevo, tj.  $x_{i-1/2}^n \leq x_{i-1/2}$ , dostaneme numerický tok

$$\begin{aligned} F_{i-1/2} &= \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i-1/2}^n} u_{i-1}^R(x) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i-1/2}^n} (a_{i-1} + b_{i-1} x + c_{i-1} x^2) dx = \\ &= (x_{i-1/2}^n - x_{i-1/2}) \times \\ &\quad \times \left[ a_{i-1} + b_{i-1} \frac{x_{i-1/2}^n + x_{i-1/2}}{2} + \frac{c_{i-1}}{3} (x_{i-1/2}^n{}^2 + x_{i-1/2}^n x_{i-1/2} + x_{i-1/2}{}^2) \right]. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Hodnoty konzervativních veličin v jedné buňce jsou vyjádřeny ve tvaru  $\bar{u}_i \Delta x_i$  a pro jejich zachování (3.2) tedy musí platit, že hodnota  $\bar{u}_i^n$  v nové buňce je rovna hodnotě v buňce staré a rozdílu numerických toků přes její hranici, viz také obrázek 3.1. Předpokládáme přitom, že poloha koncových uzlů se nemění a jsou v nich tedy nulové toky. Jednoduchou úpravou tohoto vztahu získáme vzorec pro výpočet  $\bar{u}^n$  na nové síti, a sice

$$\begin{aligned} \bar{u}_i^n \Delta x_i^n &= \bar{u}_i \Delta x_i + F_{i+1/2} - F_{i-1/2} \\ \bar{u}_i^n &= \bar{u}_i \frac{\Delta x_i}{\Delta x_i^n} + \frac{F_{i+1/2} - F_{i-1/2}}{\Delta x_i^n}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Vztahem (3.32) jsme završili popis základního přístupu k remapování konzervativních veličin využívající po částech konstantní, lineární či parabolickou rekonstrukci.

Tento proces může být dále doplněn. V popisu rekonstrukce jsme zmínili její důležité vlastnosti, tedy konzervativnost (3.6) a zachování mezí (3.8). Obdobné

vlastnosti můžeme definovat pro celý proces remapování. Jeho konzervativnost, tedy v případě Eulerových rovnic zachování celkové hmoty, hybnosti a energie plyne z vyjádření hodnot na nové síti ve formě rozdílu numerických toků (3.32). Meze pro remapovanou funkci  $\bar{u}_i^n$  definujeme z hodnot  $\bar{u}_{i-1}$ ,  $\bar{u}_i$  a  $\bar{u}_{i+1}$  (3.3).

Aby remapovaná funkce zůstala v mezích, lze provádět kromě limitování rekonstrukce další operace. Jednou z nich je „oprava“ [10, 9], kdy provedeme předistribuvání  $\bar{u}^n \Delta x^n$  z buňky, v níž jsou porušeny meze, do okolních. Tato metoda je obzvláště vhodná pro použití ve 2D, kde umožňuje použití zjednodušených forem integrace numerických toků, neboť přesná integrace ve více dimenzích vyžaduje hledání mnoha průsečíků výpočetních sítí a je tedy výpočetně velice náročná. Navíc ani u vhodně limitované rekonstrukce ve 2D není obecně zaručeno zachování mezí. Další možností jak zachovat meze je metoda FCT<sup>5</sup> [17], kde odděleně napočítáme toky nízkého (dané po částech konstantní rekonstrukcí) které zachovávají meze a toky vysokého řádu (po částech lineární či parabolické) a hledáme jejich vhodnou kombinaci, která zachová meze ale nevnáší do výsledku zbytečně mnoho numerické difuze z toků nízkého řádu přesnosti. Tyto a další vlastnosti jednotlivých metod numericky ověříme v následující kapitole na problému cyklického remapování.

### 3.5 Rozšíření Lagrangeovské metody vysokého řádu přesnosti na ALE

V této sekci popíšeme rozšíření nespojitě Galerkinovy metody pro Lagrangeovskou hydrodynamiku v 1D [18] popsané na konci první kapitoly. Tuto metodu za použití jednoduchého rezonování a po částech parabolického remapování navrhnutého v předchozí sekci zobecníme na kompletní ALE metodu. Zobecnění provedeme následujícím způsobem.

Jelikož Lagrangeovský výpočet v [18] probíhá vzhledem k počáteční souřadnici  $x_0$ , zvolíme postup, kdy rezonování/remapování bude následovat do daném počtu Lagrangeovských časových kroků. Po každých  $n$  krocích výpočet zastavíme a napočítáme souřadnice  $x(x_0, t)$  dané rovnicí (1.9). Na této výpočetní síti provedeme rezonování tvaru

$$x_{i+1/2}^n = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}. \quad (3.33)$$

Při následném remapování ze znalosti staré výpočetní sítě  $x$  a integrálních průměrů hustoty  $\rho$ , hustoty hybnosti  $\rho u$  a hustoty celkové energie  $\rho e$  v jejich buňkách podle vzorce (3.17) napočítáme rekonstrukci v těchto buňkách. Z této rekonstrukce a ze souřadnic nové sítě  $x^n$  napočítáme numerické toky (3.30), resp. (3.31) a z nich integrální průměry (3.32) na nové výpočetní síti. Tyto nové hodnoty spolu s novou výpočetní sítí použijeme jako počáteční podmínku pro další Lagrangeovský výpočet.

---

<sup>5</sup>Flux Corrected Transport

Pro zachování vysokého řádu přesnosti je přitom nutné provést po částech parabolickou rekonstrukci i na nové výpočetní síti, neboť v Eulerových rovnicích tvaru (1.6) - (1.8) potřebujeme znát vyjádření počáteční hustoty  $\rho_0$  jako funkce  $x^n$  (což je nová počáteční souřadnice  $x_0$ ). Pro zachování přesnosti výpočtu je nutné provádět rekonstrukci vždy na proměnných představujících hustoty konzervativních veličin, tedy  $\rho$ ,  $\rho u$  a  $\rho e$ .



# Kapitola 4

## Numerické testy a výsledky

V této kapitole se budeme jednak zabývat simulací interakce fokusovaného laserového záření s terčíky. Ověříme funkčnost navrženého modelu absorpce s trasováním paprsků a porovnáme jej s jednoduchým modelem absorpce na kritické ploše. Používáme metody a algoritmy popsané ve druhé kapitole implementované do 2D ALE hydrodynamického kódu PALE [1, 2]. Dále použijeme cyklické remapování k zjištění řádu konvergence různých metod remapování a na závěr uvedeme výsledky dosažené 1D ALE metodou vysokého řádu přesnosti pro vybrané úlohy hydrodynamiky.

### 4.1 Simulace interakce laseru s pevnými terčíky

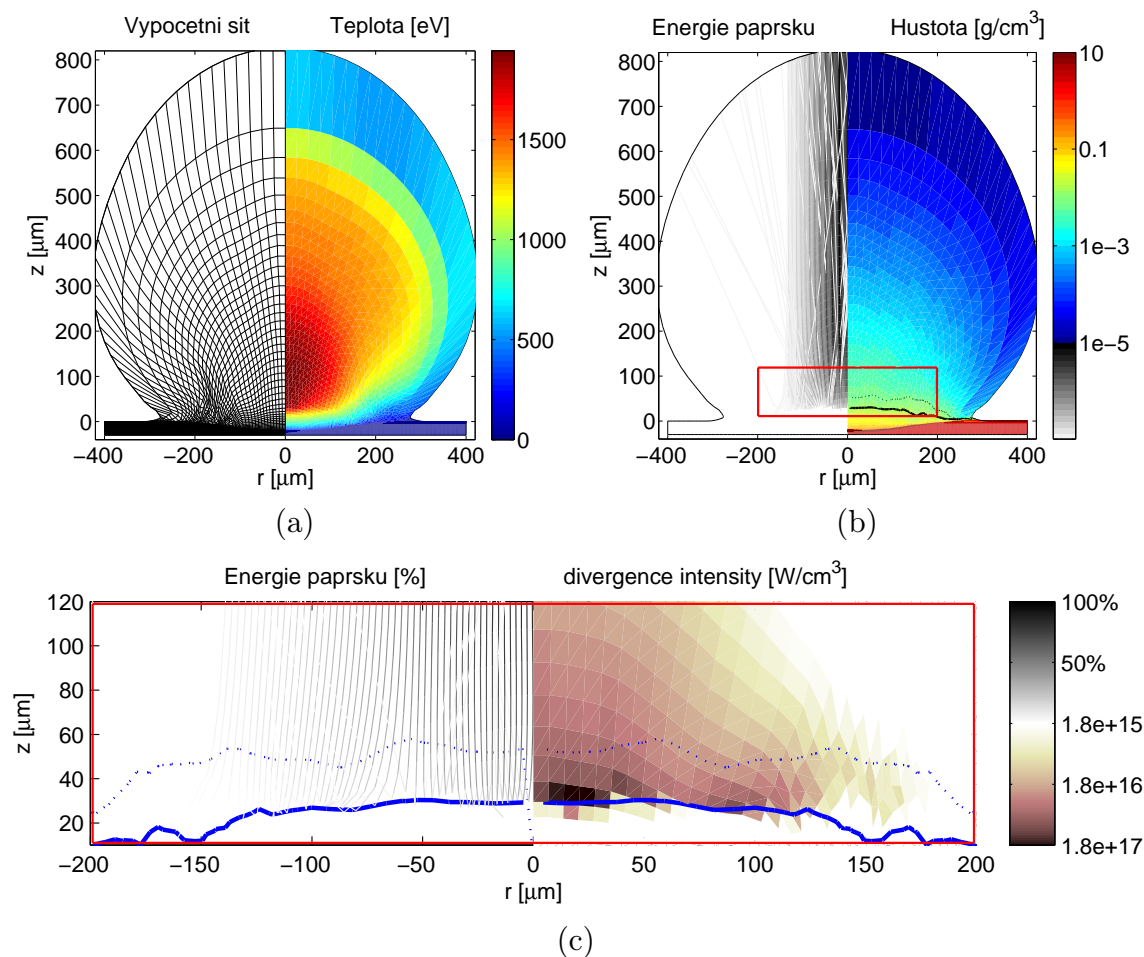
Jako testovací úlohy pro model absorpce laserového záření s trasováním paprsků volíme jednak kolmý dopad záření na hliníkové terčíky. Jedná se o masivní terčik a tenkou folii umístěné v rovině fokusu. Pro případ folie srovnáme výsledky s jednodušším modelem předpokládajícím absorpci energie záření na kritické ploše. Další simulací bude interakce fokusovaného záření s dvojicí rovnoběžných fólií – první hliníková tloušťky  $0.8 \mu\text{m}$  a druhá hořčíková s tloušťkou  $2 \mu\text{m}$ . Porovnáme případy různého umístění fólií vzhledem k rovině fokusu. Tyto testovací úlohy odpovídají skutečným experimentům prováděným na laseru PALS.

#### 4.1.1 Masivní hliníkový terčik

Uvažujeme puls záření o energii 100 J Gaussovského profilu v prostoru a čase s pološířkou maxima (FWHM) 400 ps posunutého v čase o 400 ps od počátku simulace. Třetí harmonické frekvenci laseru PALS odpovídá vlnová délka 438 nm. Terčik umístěný na počátku simulace kolmo na osu záření se nachází ve vakuu při pokojové teplotě, tedy zhruba 0.03 eV a je popsán stavovou rovnicí ideálního plynu s plynovou konstantou  $1, \overline{66}$ , přičemž uvažujeme plnou ionizaci. Celkový čas simulace je zpravidla

dvojnásobkem pološířky maxima. Uvažujeme model laserového svazku s rovnoběžnými paprsky a poloměr fokusu  $100 \mu\text{m}$ , čemuž odpovídá maximální dosažená intenzita záření zhruba  $2 \cdot 10^{15} \text{ W/cm}^2$  a kritická hustota plně ionizovaného hliníku  $0.02 \text{ g/cm}^3$ .

Na obrázku 4.1 (a) je na záporné ose zobrazena výpočetní síť, na kladné pak teplota v eV při lineární stupnici. Na obrázku 4.1 (b) jsou na záporné ose zobrazeny vybrané paprsky záření, kde odstín šedi odpovídá energii nesené paprskem. Na kladné ose je logaritmicky znázorněna hustota v  $\text{g/cm}^3$  a její kontura odpovídající kritické hustotě (plná čára) a její polovině (přerušovaná). V části (c) pak detail oblasti kritické hustoty s vyobrazenými paprsky a divergencí intenzity laseru v buňkách  $[\text{W/cm}^3]$  na logaritmické stupnici, a to od maximální divergence po její jednu setinu a opět kontura kritické hustoty a její poloviny.



Obrázek 4.1: Interakce s masivním hliníkovým terčikem popsaná modelem s trasováním paprsků. Čas 600 ps. Výpočetní síť spolu s teplotou (a), vybrané paprsky záření a hustota (b), detail oblasti kritické hustoty — vybrané paprsky laseru a z nich napočítaná divergence intenzity v buňkách (c).

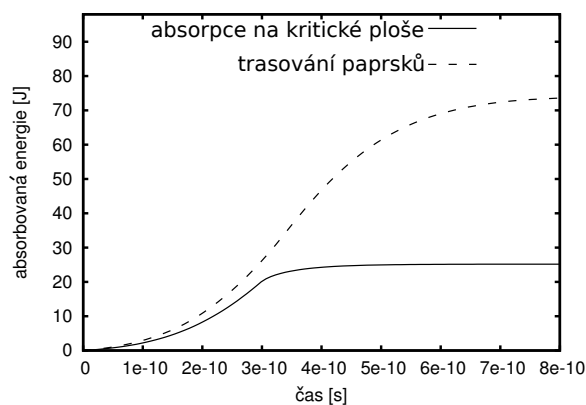
Na obrázku 4.1 nepozorujeme prakticky žádné odražené paprsky. To zna-

mená, že již před odrazem ztratily rozhodující část energie, a tedy ani význam rezonanční absorpce zde nebude velký. Paprsky díky kolmému dopadu na kritickou plochu pronikají hluboko do plasmatu, kde efektivně probíhá proces absorpce inverzním brzdným zářením. Obdobné simulace pro odlišný poloměr fokusu či vlnovou délku laseru a jejich vliv na množství absorbované energie lze nalézt v [24].

### 4.1.2 Tenká hliníková fólie

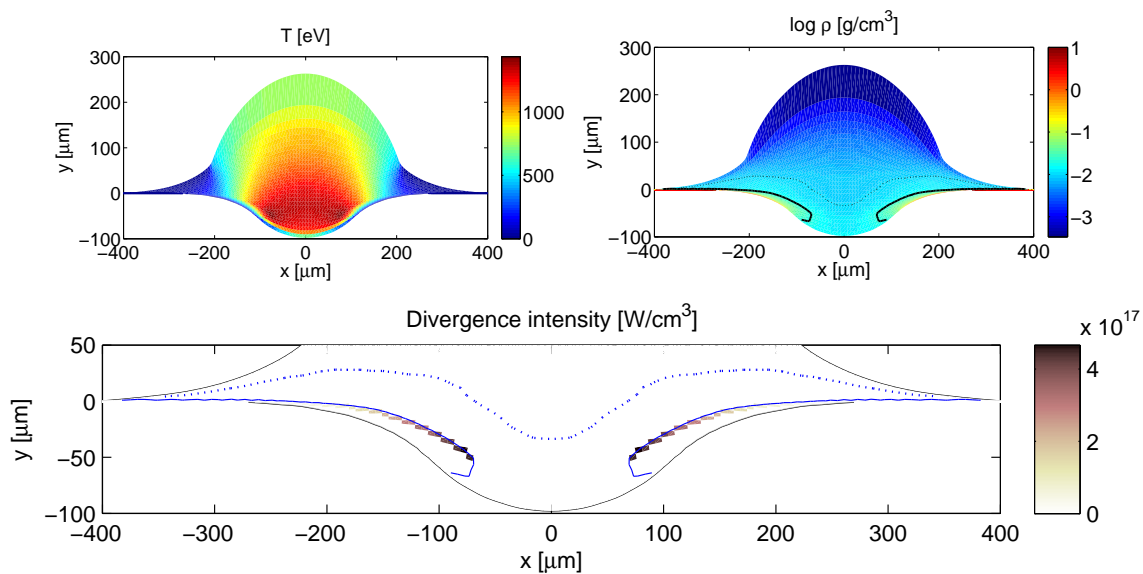
V této části porovnáme model absorpce na kritické ploše s modelem trasování paprsků. Uvažovaný laserový puls má shodné parametry s předchozím případem, opět uvažujeme model s přímým laserovým svazkem. Tentokrát za terčik volíme hliníkovou fólii tloušťky  $0.8 \mu\text{m}$ , u které na rozdíl od masivního terčiku očekáváme rychlé propálení a plasma expandující na obě strany folie. Na obrázku 4.3 (a) vidíme výsledek pro model absorpce na kritické ploše (s koeficientem absorpce 0.75) v čase těsně po propálení terčiku, přesněji po přerušení plochy kritické hustoty plasmatu (zobrazena plnou čarou v grafu hustoty, přerušovaná čára odpovídá ploše s poloviční hustotou). Vidíme, že v tomto modelu absorpce je výsledná divergence intenzity laseru v buňkách výpočetní sítě nenulová pouze na jedné řadě buněk, kterými prochází kritická plocha.

Naopak na obrázku 4.3 (b) vidíme výsledky pro model s trasováním paprsků opět v čase těsně po přerušení plochy kritické hustoty. V porovnání s absorpcí na kritice přichází tento okamžik později. Toto zpoždění je dáno vyšší teplotou, na kterou se ohřívá téměř celá plasmová korona, neboť inverzní brzdné záření se uplatňuje i v řídkém plasmatu dále od kritické plochy.

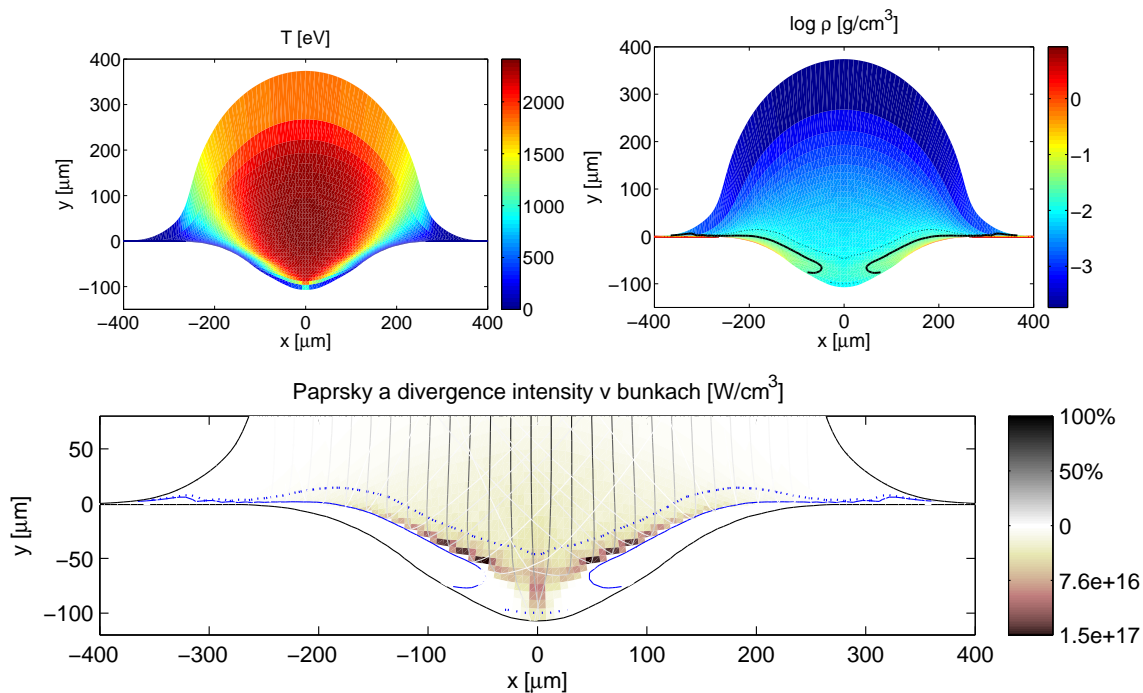


Obrázek 4.2: Porovnání absorbované energie v hliníkové folii pro různé modely absorpce.

Časový vývoj absorpce energie se pro oba modely značně odlišuje. Zatímco v případě absorpce na kritice po propálení terčiku (přesněji po propálení otvoru srovnatelných rozměrů s poloměrem fokusu) není v podstatě již žádný zdroj, který by plasmatu předával energii, při pokročilejším modelu se plasma dále zahřívá a stále efektivně pohlcuje energii až na výsledných zhruba 75% z celkové energie záření, viz obrázek 4.2.



(a) — 330 ps



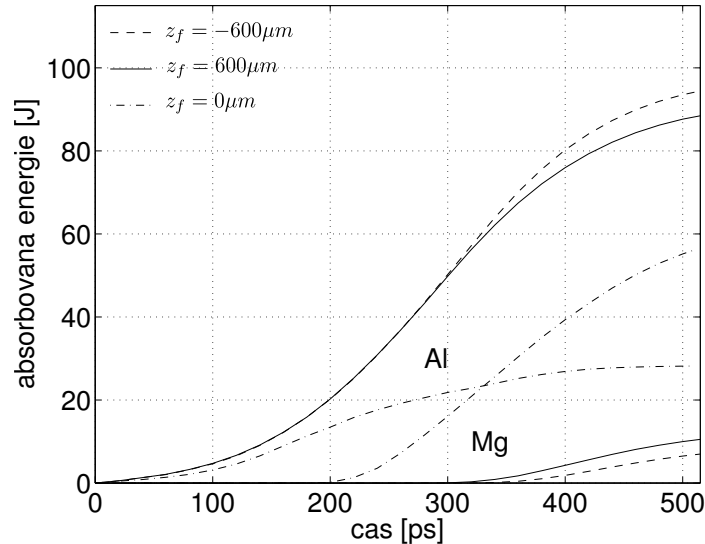
(b) — 350 ps

Obrázek 4.3: Interakce laserového záření s hliníkovou fólií popsaná dvěma různými modely absorpce. Absorpce na kritické ploše (a) a trasování paprsků (b). Vlevo teplota, vpravo logaritmus hustoty a dole divergence intensity a v případě (b) také vybrané paprsky záření – jejich energie je dána stupněm šedi, viz horní polovina škály barev.



### 4.1.3 Dvě rovnoběžné fólie

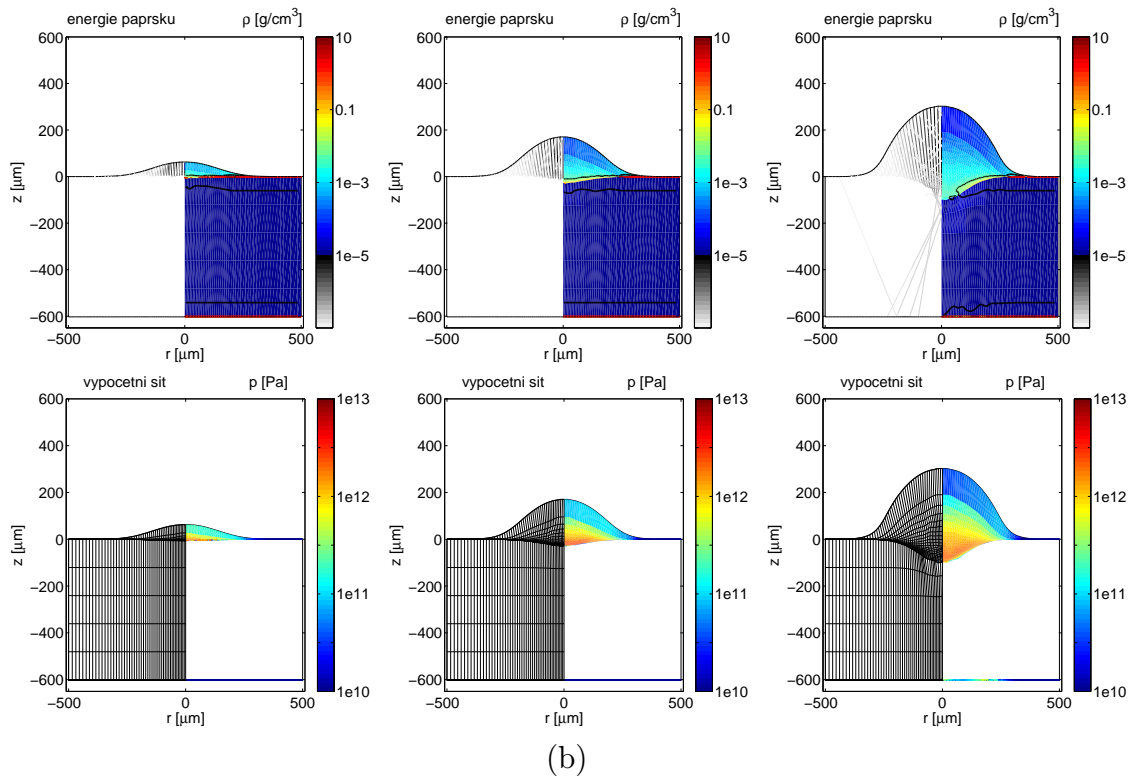
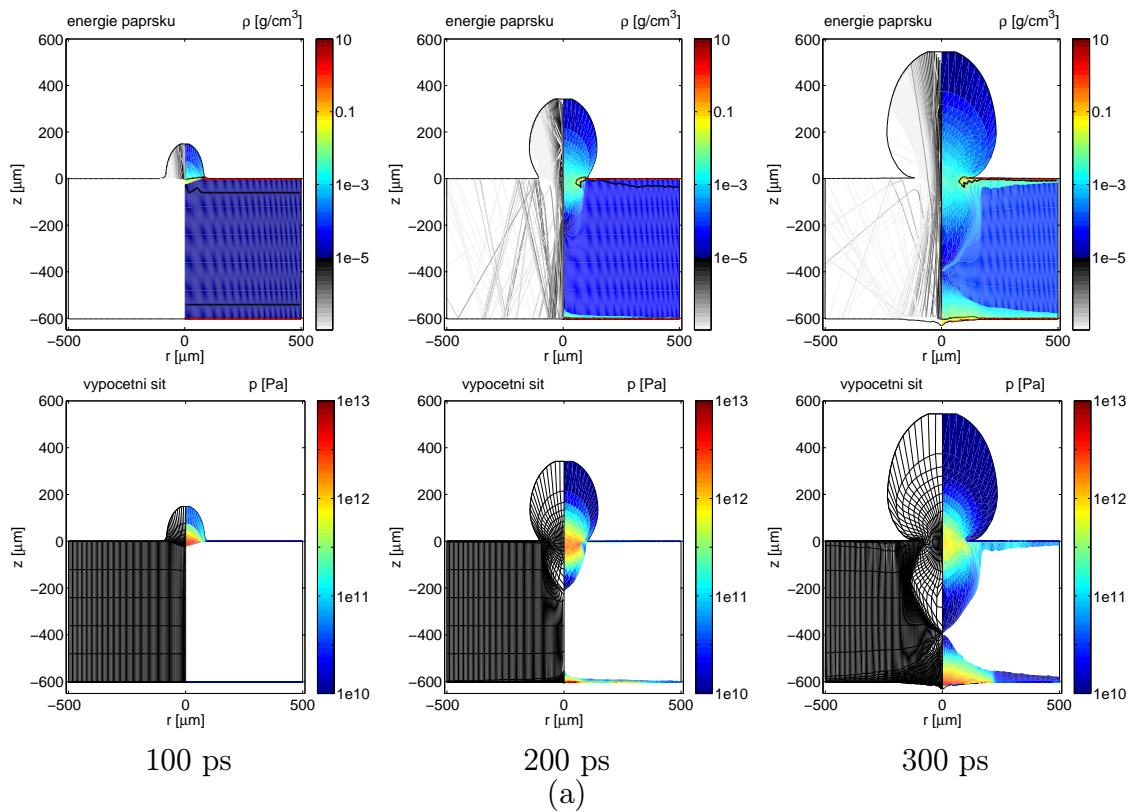
V tomto případě uvažujeme fokusovaný Gaussovský svazek s minimálním poloměrem fokusu  $r_f = 40\mu\text{m}$  a úhlem rozbíhavosti  $\theta_0 = 15^\circ$ . Tento svazek má pološířku maxima v čase 300 ps, je posunut o 300 ps od počátku simulace a nese energii 115 J. Ostatní parametry jsou shodné s předchozí úlohou. Na rozdíl od předchozího případu s jednou folií, kde docházelo k absorpci energie v blízkosti roviny fokusu, v případě dvou oddělených folií je již rozbíhavost laserového svazku nezanedbatelným faktorem. Terčík je tedy složený ze dvou rovnoběžných folií, vzdálených od sebe  $600\mu\text{m}$ . Záření na třetí harmonické frekvenci opět dopadá shora, nejdříve na hliníkovou fólii v  $z = 0$  tloušťky  $0.8\mu\text{m}$ , kterou postupně propaluje a dostává se tak k druhé hořčíkové fólii v  $z = -600$  o tloušťce  $2\mu\text{m}$ . Porovnáme tři případy, a sice umístění první fólie do roviny fokusu,  $600\mu\text{m}$  před a za tuto rovinu. Poznamenejme, že podobné konfigurace experimentů jsou užitečné ke zkoumání interakce plasmatu s povrchy pevných látek [31].



Obrázek 4.4: Energie absorbovaná v jednotlivých fóliích pro různá umístění terčů vzhledem k rovině fokusu.

Výsledky simulací, tedy časový průběh interakce, jsou znázorněny na obrázcích 4.5 a 4.6. Na prvním z nich vidíme výsledky v čase 100, 200 a 300 ps pro hliníkovou fólii umístěnou v rovině fokusu, tj.  $z_f = 0$ , (a), resp.  $600\mu\text{m}$  před ní, tj.  $z_f = -600$ , (b). Výsledek pro terč  $600\mu\text{m}$  za rovinu fokusu, tj.  $z_f = 600$ , je v těchto časech simulace téměř identický s obrázkem 4.5 (b). Jednotlivé sloupce odpovídají různým časům simulace, v prvních řádku jsou vykresleny vybrané paprsky záření a profil hustoty, ve druhém pak výpočetní síť a tlak (tlak v buňkách odpovídajících vakuu nevykresluje).

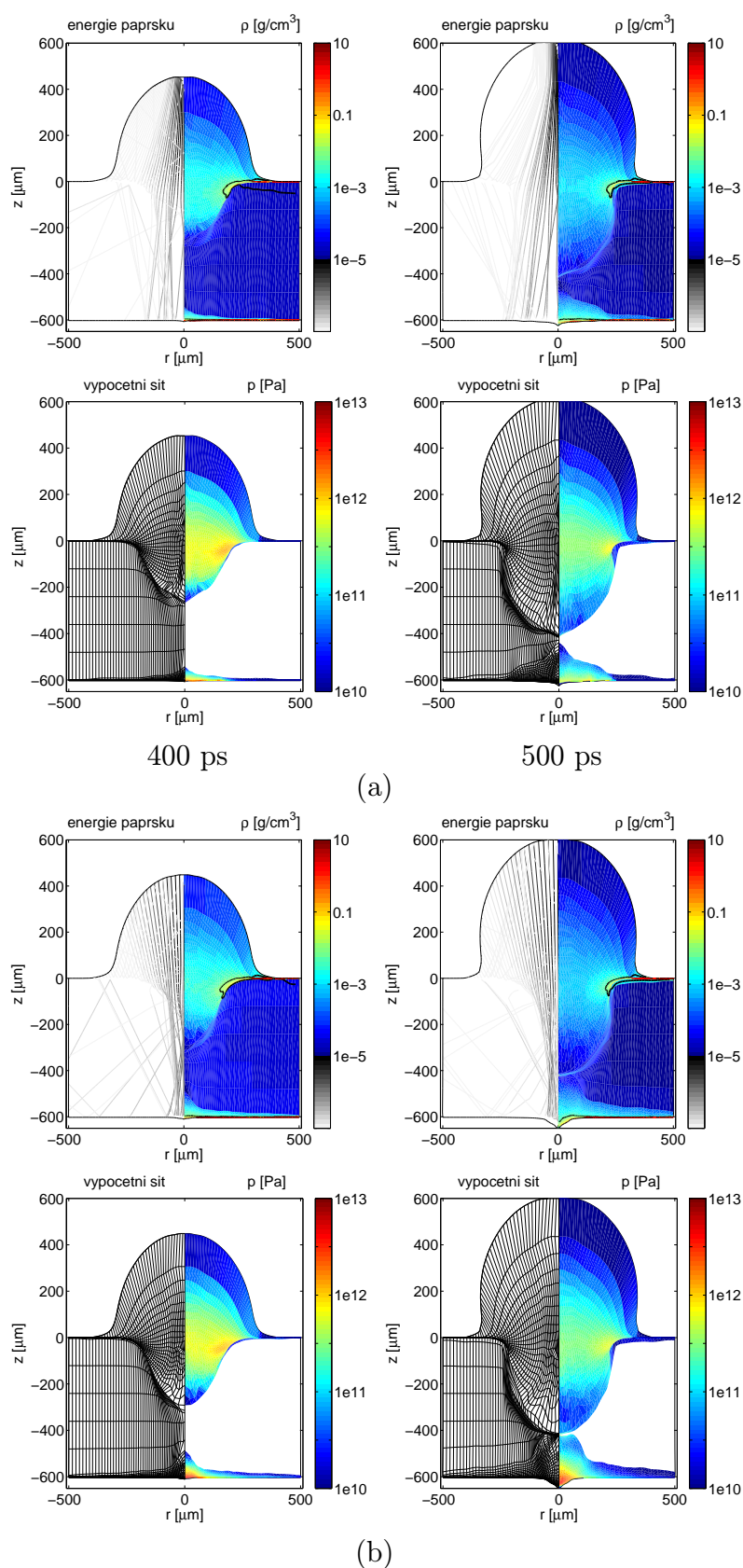
V průběhu interakce dochází nejdříve k zahřátí první fólie, její povrch expanduje proti směru dopadajícího záření za vzniku plasmatu. Pohlcování energie v plasmatu způsobuje jeho další zahřátí a expanzi. Ve chvíli kdy hustota tohoto



Obrázek 4.5: Porovnání interakce laseru s dvoufóliovým terčičkem při jeho umístění do roviny fokusu, tj.  $z_f = 0$  (a), resp. před ní, tj.  $z_f = -600$  (b) pro model s trasováním paprsků v čase 100, 200 a 300 ps.

plasmatu klesne pod kritickou hustotu, část záření začne procházet a ohřívat povrch spodní folie. U tohoto modelu absorpce však dále dochází i k dalšímu výraznému zahřívání první folie, viz obrázek 4.4, a také k mírnému ohřívání vnitřních ploch folií vlivem odraženého záření. V závislosti na umístění terčíku vzhledem k rovině fokusu se pak ze spodní fólie formuje plasma s rozdílným tvarem a parametry, viz obrázek 4.6. V případě (b) je fokus na spodní hořčikové folii a vzniklé hořčikové plasma je užší ve směru osy  $r$  než v případě roviny fokusu před oběma foliemi na obrázku 4.6 (a), kde je záření na spodní folii již značně rozfokusované. Hliníkové plasma vzniklé z první folie je pro oba případy podobné, což je dáno shodnou intenzitou záření v její rovině.

Z porovnání 4.5 (a) s (b) vidíme, že v případě první folie umístěné v rovině fokusu dochází k jejímu propálení díky zahrnutí gaussovského modelu laserového svazku mnohem dříve. Stejný efekt můžeme pozorovat i na obrázku 4.4, kde je vykreslena energie absorbovaná jednotlivými foliemi v závislosti na čase. Při fokusu na horní folii je tedy daleko více energie absorbováno spodní hořčikovou folií.



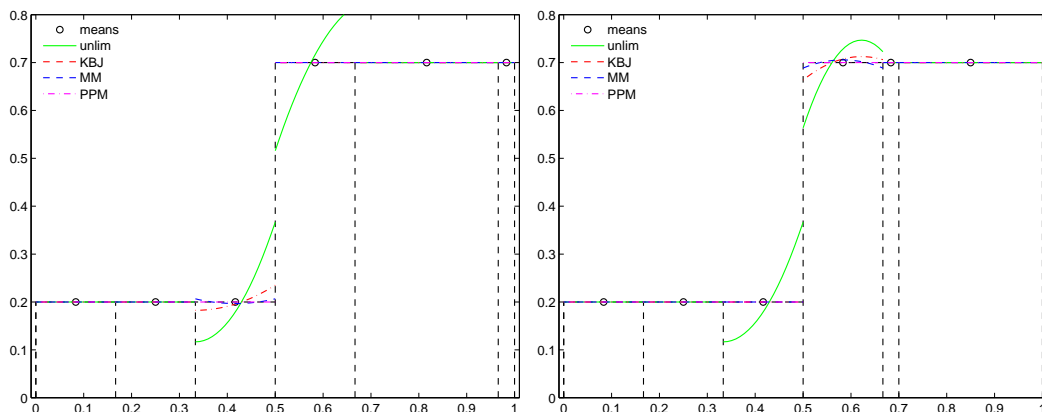
Obrázek 4.6: Porovnání interakce laseru s dvoufóliovým terčíkem při jeho umístění za (a) , resp. před (b) rovinu fokusu ( $z_f = 600$ , resp.  $z_f = -600$ ) pro model trasování paprsků v čase 400 a 500 ps.

## 4.2 Remapování

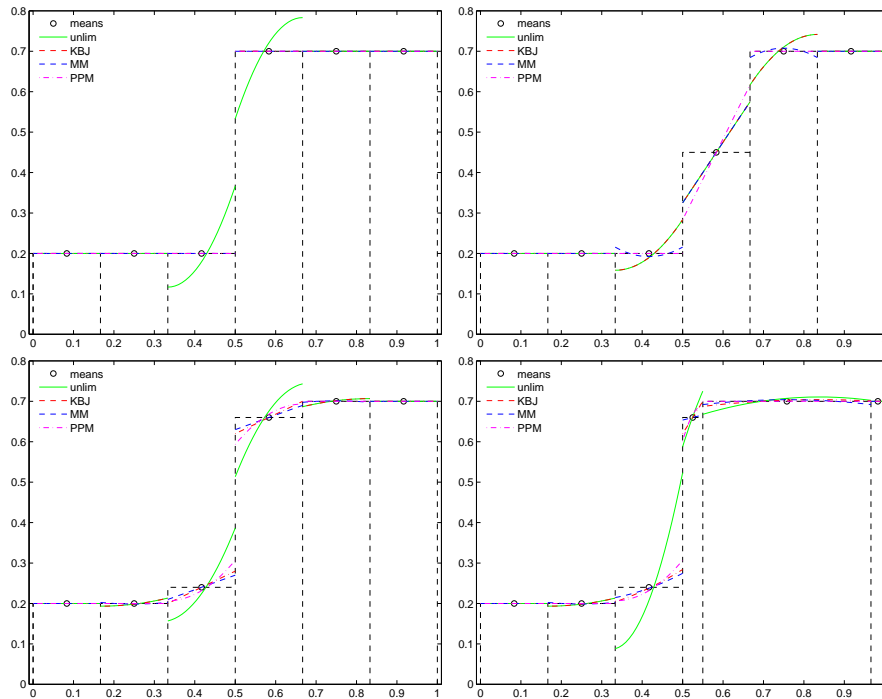
V této části porovnáme různé metody remapování popsané ve třetí kapitole a numericky zjistíme jejich řád konvergence na problému cyklického remapování. Cyklické remapování představuje jednoduchý test, kde máme danou počáteční výpočetní síť s integrálními průměry  $\bar{u}$  v buňkách. Tato síť se pohybuje podle jistého předpisu a v každém pseudočasovém kroku tohoto pohybu provádíme remapování  $\bar{u}$  na novou síť.

Použijeme následující značení pro jednotlivé metody. Remapování s po částech konstantní rekonstrukcí budeme značit jako *donor*, po částech lineární *lin.* – v případě neomezeného sklonu daného centrální diferencí (3.10) *unl.*, s po částech parabolickou rekonstrukcí *pp* – v případě neomezených koeficientů (3.23) *unl.*. Zkratky pro limitory odpovídají rovnicím *BJ* – (3.14), *MM* – (3.11), resp. (3.24), *KBJ* – (3.25), *Nejat* – (3.26). V případě BJ, resp. KBJ limitru volíme  $\beta = 1.5$  a pro Nejatův limiter  $K = 1$ . Dále zkratka *PPM* značí po částech parabolickou rekonstrukci podle (3.27) a *lin. FCT*, resp. *pp FCT* metodu popsanou v [17] s toky vysokého řádu přesnosti danými po částech lineární neomezenou, resp. po částech parabolickou neomezenou rekonstrukcí.

Před testem cyklického remapování nejprve na obrázcích 4.7 a 4.8 porovnáme vybrané rekonstrukce. Na prvním z nich vidíme rozdíl pro různé výpočetní sítě (došlo k pohybu pouze jednoho uzlu) při rekonstrukci skoku. Výrazné překřivení u nelimitované po částech parabolické rekonstrukce (zelená) potvrzují nutnost omezení rekonstrukce, případně jiného omezení numerických toků při remapování. V případě KBJ a mimmod limiteru vidíme, že dochází k omezení rekonstrukce na konstantní pouze na jedné straně nespojitosti. Další rekonstrukce jsou zobrazeny na obrázku 4.8. Jako jediná rekonstrukce, která ve všech případech zůstává v mezích (3.8), se ukazuje PPM rekonstrukce.

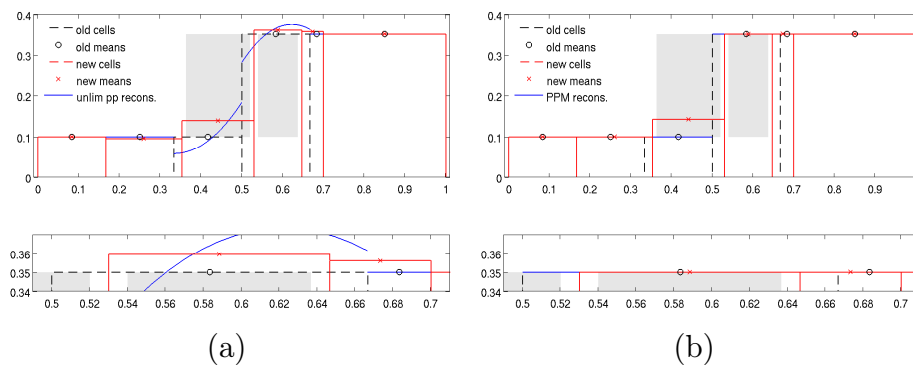


Obrázek 4.7: Porovnání po částech parabolických rekonstrukcí s různými způsoby limitování pro různé případy funkcí a výpočetních sítí. Kroužky značí integrální průměry ve středech buněk, čárkované čáry polohy uzlů.

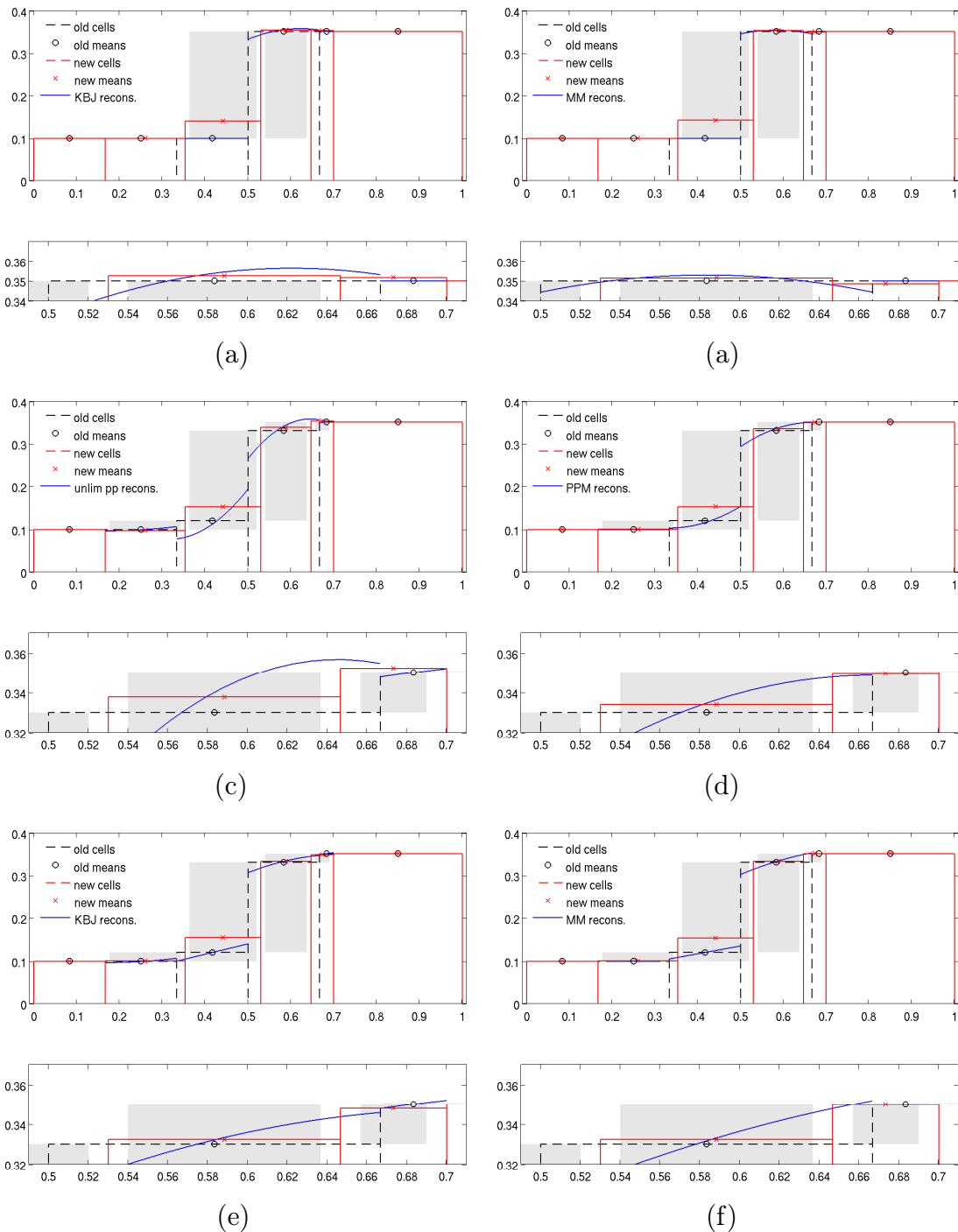


Obrázek 4.8: Porovnání po částech parabolických rekonstrukcí s různými způsoby limitování pro různé případy funkcí a výpočetních sítí, navazuje na obrázek 4.7.

Porovnání vlivu různých rekonstrukcí na jedno remapování vidíme na obrázcích 4.9 a 4.10. Z obrázků vidíme, jak porušení mezí rekonstrukce (3.8) může vést k porušení mezí remapování (3.3) – vyznačeny šedou barvou.



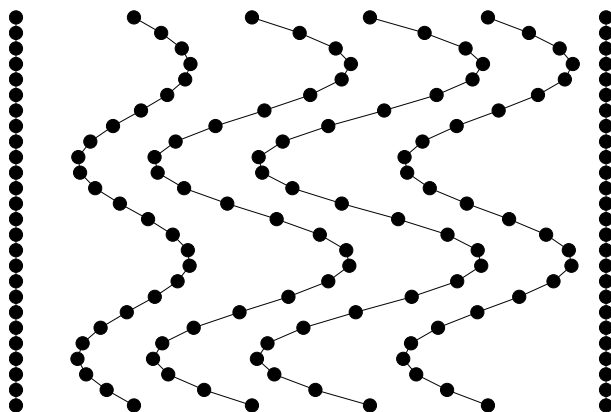
Obrázek 4.9: Jedno remapování skokové funkce pro dvě různé, po částech parabolické rekonstrukce – nelimitovanou (a) a limitovanou PPM (b), viz obrázek 4.10.



Obrázek 4.10: Jedno remapování „vyhlazené skokové“ funkce pro čtyři různé, po částech parabolické rekonstrukce – nelimitovanou (c) a limitované PPM (d), KBJ (a) a (e) a minmod (b) a (f). Černá přerušovaná čára označuje starou síť a kroužky integrální průměry ve středech buněk, plná červená pak síť novou a křížky opět průměry po remapování. Příslušná rekonstrukce je vykreslena modře, šedá pole představují meze remapování a na malých obrázcích dole je příslušný detail hrany skoku.

### 4.2.1 Cyklické remapování

Před testováním různých metod remapování v komplexních ALE kódech je vhodné provést jednodušší dílčí testy. Jedním z nich je například cyklické remapování, při kterém nahradíme první dva kroky ALE metody, tedy jak Lagrangeovský časový krok, tak rezonování, předem daným pohybem výpočetní sítě bez změny hodnot v jejích buňkách. Toky přes hrany této sítě jsou tedy způsobeny výhradně remapováním na posunutou síť a přesným řešením pro cyklické remapování je tedy zachování počáteční podmínky.



Obrázek 4.11: Ukázka sekvence výpočetních sítí pro cyklické ramapování při pěti výpočetních buňkách a 25 pseudočasových krocích. Horizontální osa odpovídá souřadnici  $x$  a vertikální pseudočasové ose  $t$ .

Předpokládejme že známe integrální průměry  $\bar{u}_i^0$  ve všech  $n$  buňkách počáteční sítě  $x^0$  a předpis, kterým je popsán pohyb sítě. Po  $n_t$  pseudočasových krocích získáme integrální průměry  $\bar{u}_i^f$  v buňkách konečné sítě  $x^f$ . Pokud bychom se vrátili do původní sítě (polohu uzlu značíme  $x_{i+1/2}$ ), tedy  $x^0 = x^f$ , pak bychom mohli určit absolutní chybu cyklického remapování jako

$$E^c = \sum_{i=1}^n |\bar{u}_i^0 - \bar{u}_i^f| \Delta x_i^f,$$

kde  $\Delta x_i^f = x_{i+1/2}^f - x_{i-1/2}^f$  představuje objem buňky konečné sítě  $x^f$ . V obecném případě kdy  $x^0 \neq x^f$  využijeme znalosti funkce  $u(x)$  a napočítáme obdobně jako v (3.5) přesné hodnoty na konečné síti

$$\bar{u}_i^c = \frac{1}{\Delta x_i^f} \int_{x_{i-1/2}^f}^{x_{i+1/2}^f} u(x) dx.$$

a chybu cyklického remapování jako

$$E^c = \sum_{i=1}^n |\bar{u}_i^c - \bar{u}_i^f| \Delta x_i^f. \quad (4.1)$$



Kromě této chyby nás také zajímá, jak moc byly během výpočtu porušeny meze (3.3). Tato definice mezí se vztahuje k jednomu remapu, porušení mezí v  $j$ -tém pseudočasovém kroku definujeme jako

$$E_j^b = \sum_{i=1}^n \max(0, \bar{u}_i^j - \max \bar{u}_i^{j-1}) \Delta x_i^j + \sum_{i=1}^n \max(0, \min \bar{u}_i^{j-1} - \bar{u}_i^j) \Delta x_i^j,$$

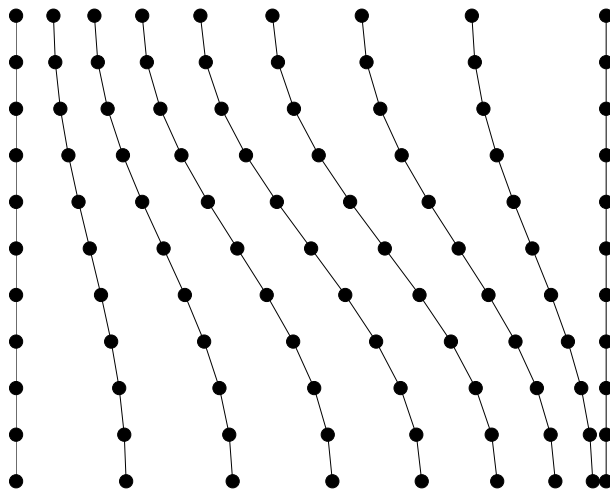
kde  $\max \bar{u}^j = \max\{\bar{u}_{i-1}^j, \bar{u}_i^j, \bar{u}_{i+1}^j\}$  a  $\min \bar{u}^j = \min\{\bar{u}_{i-1}^j, \bar{u}_i^j, \bar{u}_{i+1}^j\}$ . Celkové porušení mezí vyjádříme jako  $L_1$  odchylku v času, tedy průměr  $E_j^b$  přes jednotlivé pseudočasové kroky délky  $\Delta t_j$

$$E^b = \sum_{j=1}^{n_t} E_j^b \Delta t_j. \quad (4.2)$$

Jako další míru chyby cyklického remapování definujeme porušení globálních mezí daných mezemi integrálních průměrů počáteční funkce, tedy

$$E^g = \sum_{i=1}^n \max(0, \bar{u}_i^f - \max \bar{u}) \Delta x_i^f + \sum_{i=1}^n \max(0, \min \bar{u} - \bar{u}_i^f) \Delta x_i^f, \quad (4.3)$$

kde  $\max \bar{u} = \max_i \{\bar{u}_i^0\}$  a  $\min \bar{u} = \min_i \{\bar{u}_i^0\}$ .



Obrázek 4.12: Ukázka sekvence výpočetních sítí pro cyklické ramapování při osmi výpočetních buňkách a 10 pseudočasových krocích v intervalu  $t \in [-1/8, 1/8]$ . Horizontální osa odpovídá souřadnici  $x$  a vertikální pseudočasové ose  $t$ .

### Hladký pohyb výpočetní sítě

Pro pohyb sítě v cyklickém remapování jsme použili předpis [34] pro hladký pohyb sítě. Tento pohyb pro sítě  $\{x_{i-1/2}^j, i = 1, \dots, n; j = 0, \dots, n_t\}$  zobrazený na obrázku

4.11 je popsán následujícími vztahy

$$x(\xi, t) = (1 - \alpha(t))\xi + \alpha(t)\xi^3, \quad \alpha(t) = \frac{\sin(4\pi t)}{2}, \quad 0 \leq \xi \leq 1; \quad 0 \leq t \leq 1 \quad (4.4)$$

Sekvence sítí  $\{x_{i-1/2}^j\}$  je pak dána jako  $x_{i-1/2}^j = x(\xi_i, t^j)$  kde

$$t^j = \frac{j}{n_t}, \quad j = 0, \dots, n_t; \quad \xi_i = \frac{i-1}{n-1}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (4.5)$$

Hladký pohyb sítě při cyklickém remapování je v následujícím textu vždy označen odpovídajícím pseudočasovým intervalem. Počet pseudočasových kroků  $n_t$  byl volen jako  $n_t = 5n$ , kde  $n$  značí počet buněk sítě. Tato volba je svázána s CFL<sup>1</sup> podmínkou, pokud definujeme

$$\text{CFL} = \Delta t \left[ \max_i \left( \frac{a_{i-1/2}}{\Delta x_i} \right) \right]^{-1}, \quad (4.6)$$

kde rychlost pohybu uzlu  $a_{i-1/2}$  je dána  $a_{i-1/2} = \frac{dx_{i-1/2}}{dt}$ , dostáváme během popsaného pohybu sítě maximální numericky zjištěnou CFL 0.48. Tuto podmínku lze také interpretovat tak, že uzel nové sítě zůstane omezen polohou středů jeho sousedních buněk na předchozí pseudočasové vrstvě.

Remap	$\frac{32}{64}$	$\frac{64}{128}$	$\frac{128}{256}$	$E_{64}^c$	$E_{512}^c$	$E_{64}^b$	$E_{512}^b$	$E_{64}^g$	$E_{512}^g$
donor	1.8	1.9	1.9	$1.43 \cdot 10^{-1}$	$2.17 \cdot 10^{-2}$	0	0	0	0
lin. unl.	8.0	8.0	8.0	$4.37 \cdot 10^{-4}$	$8.55 \cdot 10^{-7}$	$7.2 \cdot 10^{-6}$	$1.4 \cdot 10^{-8}$	0	0
lin. BJ	4.6	4.8	4.9	$2.87 \cdot 10^{-3}$	$2.62 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	0
lin. MM	4.5	4.8	4.9	$5.36 \cdot 10^{-3}$	$5.12 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	0
lin. FCT	4.9	4.9	4.7	$1.09 \cdot 10^{-3}$	$9.84 \cdot 10^{-6}$	0	0	0	0
pp unl.	8.0	8.0	8.0	$3.90 \cdot 10^{-4}$	$7.63 \cdot 10^{-7}$	$7.2 \cdot 10^{-6}$	$1.4 \cdot 10^{-8}$	0	0
pp KBJ	8.0	8.0	8.0	$3.91 \cdot 10^{-4}$	$7.63 \cdot 10^{-7}$	$7.2 \cdot 10^{-6}$	$1.4 \cdot 10^{-8}$	0	0
pp MM	8.0	8.0	8.0	$3.90 \cdot 10^{-4}$	$7.63 \cdot 10^{-7}$	$7.2 \cdot 10^{-6}$	$1.4 \cdot 10^{-8}$	0	0
pp FCT	5.2	5.6	5.6	$9.66 \cdot 10^{-4}$	$5.93 \cdot 10^{-6}$	0	0	0	0
PPM	5.1	5.5	5.6	$2.06 \cdot 10^{-3}$	$1.33 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	0
pp Nejat	3.3	3.8	4.0	$1.28 \cdot 10^{-3}$	$2.53 \cdot 10^{-5}$	$5.5 \cdot 10^{-6}$	$1.8 \cdot 10^{-8}$	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$5.6 \cdot 10^{-6}$

Tabulka 4.1: Cyklické remapování funkce  $\sin(2\pi x) + 1$  pro pseudočas  $t \in [0, 1]$ .

Pro sekvenci sítí popsanou (4.4) dochází k superkonvergenci u po částech lineární nelimitované metody a výsledky při normě (4.1) odpovídají třetímu řádu přesnosti, viz tabulka 4.1.

<sup>1</sup>Courant–Friedrichs–Lewy

K jejímu odstranění jsme použili jinou sekvenci výpočetních sítí, popsanou taktéž (4.4) ovšem s pseudočasovým intervalem  $t \in [-1/8, 1/8]$ , jež je zobrazena na obrázku 4.12. Uvážení shodné CFL (4.6) podmínky dostaneme  $n_t = \frac{5}{4}n$ . Porovnáním tabulky 4.1 s 4.3, zejména pak druhých řádků pro po částech lineární neomezenou metodu, ilustruje odstranění tohoto problému.

Remap	$\frac{32}{64}$	$\frac{64}{128}$	$\frac{128}{256}$	$E_{64}^c$	$E_{512}^c$	$E_{64}^b$	$E_{512}^b$	$E_{64}^g$	$E_{512}^g$
donor	2.0	2.0	2.0	$7.91 \cdot 10^{-3}$	$1.01 \cdot 10^{-3}$	0	0	0	0
lin. unl.	3.9	3.9	4.0	$1.16 \cdot 10^{-5}$	$1.92 \cdot 10^{-7}$	0	0	0	0
lin. BJ	3.8	3.9	4.0	$1.13 \cdot 10^{-5}$	$1.91 \cdot 10^{-7}$	0	0	0	0
lin. MM	3.9	3.9	4.0	$1.16 \cdot 10^{-5}$	$1.92 \cdot 10^{-7}$	0	0	0	0
lin. FCT	3.9	3.9	4.0	$1.16 \cdot 10^{-5}$	$1.92 \cdot 10^{-7}$	0	0	0	0
pp unl.	7.9	7.9	8.0	$4.67 \cdot 10^{-7}$	$9.32 \cdot 10^{-10}$	0	0	0	0
pp KBJ	7.9	7.9	8.0	$4.67 \cdot 10^{-7}$	$9.32 \cdot 10^{-10}$	0	0	0	0
pp MM	7.9	7.9	8.0	$4.67 \cdot 10^{-7}$	$9.32 \cdot 10^{-10}$	0	0	0	0
pp FCT	7.9	7.9	8.0	$4.67 \cdot 10^{-7}$	$9.32 \cdot 10^{-10}$	0	0	0	0
PPM	8.0	8.0	8.0	$2.13 \cdot 10^{-7}$	$4.15 \cdot 10^{-10}$	0	0	0	0
pp Nejat	4.0	4.0	4.0	$1.65 \cdot 10^{-5}$	$2.56 \cdot 10^{-7}$	0	0	0	0

Tabulka 4.2: Cyklické remapování funkce  $\exp(x)$  pro pseudočas  $t \in [-1/8, 1/8]$ . Hodnoty ve druhém, třetím a čtvrtém sloupci představují podíly chyb remapování při zjemňování sítě, řád konvergence je tedy dán jako  $\log_2$  těchto podílů. Ostatní sloupce představují chyby definované v textu pro síť s příslušným počtem buněk.

Tabulky 4.2 a 4.3 ukazují konvergenci metod pro dané funkce opět na intervalu  $x \in (0, 1)$ . Pro exponenciálu, tedy hladkou funkci bez extrému uvnitř intervalu, dostáváme podíly chyb 2 pro po částech konstantní rekonstrukci a tedy metodu prvního řádu, resp. 4 pro po částech lineární metody a tedy druhý řád. Pro většinu po částech parabolických metod pak dostáváme podíl 8 odpovídající třetímu řádu konvergence. Výjimkou je pouze případ Nejatova limiteru, kde konvergence nízkého řádu může souviset s volbou konstant v tomto modelu. Funkce sinus v tabulce 4.3 má již extrémy na daném intervalu, což se projeví ve snížení rychlosti konvergence především u metod, které striktně zachovávají meze, tedy PPM a FCT.

V tabulce 4.4 a na obrázku 4.14 jsou uvedeny výsledky pro jednotkový skok. V tomto případě je konvergence u všech metod velice podobná, liší se však absolutní chybou. Z tohoto pohledu nejlépe vychází PPM následované FCT s po částech parabolickou, resp. lineární rekonstrukcí. Tyto metody navíc zachovávají meze. Za zmínku stojí také parabolická metoda s MM limitrem, u které dochází pouze k malému porušení mezí (o dva řády nižší než u nelimitované), a přitom si udržuje třetí řád konvergence na hladkém řešení.

### Pseudonáhodný pohyb výpočetní sítě

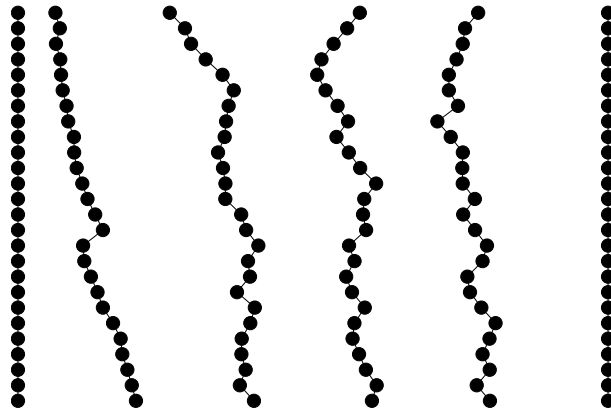
Pro porovnání uvádíme výsledky cyklického remapování popsaného pseudonáhodným pohybem výpočetní sítě. Pokud zachováme značení použité pro hladký pohyb sítě, pak je poloha nového uzlu popsána jako [8]

$$x_{i-1/2}^{j+1} = x_{i-1/2}^j + r_{i-1/2}^j \gamma H_{i-1/2}^j, \quad (4.7)$$

kde  $r_{i-1/2}^j$  je pseudonáhodné číslo z intervalu  $(-0.5, 0.5)$  s rovnoměrným rozdělením,  $\gamma = 0.5$  parametr modelu a

$$H_{i-1/2}^j = \begin{cases} \Delta x_i^j / 2 & \text{pro } r_{i-1/2}^j > 0 \\ \Delta x_{i-1}^j / 2 & \text{pro } r_{i-1/2}^j \leq 0 \end{cases}$$

Příklad náhodného pohybu sítě je uveden na obrázku 4.13. Výsledný pohyb sítě se



Obrázek 4.13: Ukázka jedné sekvence výpočetních sítí pro cyklické ramapování s pseudonáhodným pohybem sítě. 5 buněk výpočetní sítě a 25 pseudočasových kroků. Horizontální osa odpovídá souřadnici  $x$  a vertikální pseudočasové ose  $t$ .

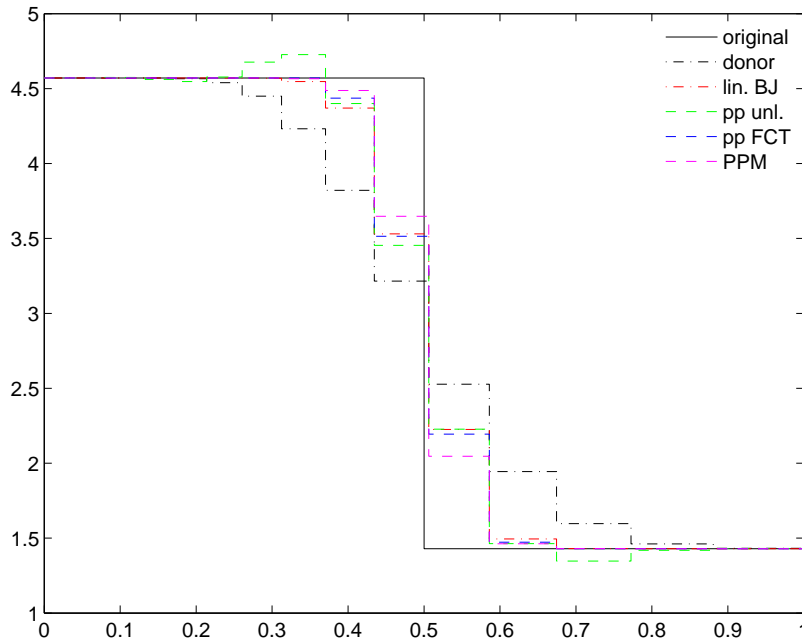
liší pro každý běhu cyklického remapování. Pro zjištění relevantních výsledků jsme provedli deset testů a v tabulce 4.5 jsou uvedeny průměrné hodnoty chyb a z nich napočítané podíly. Počet pseudočasových kroků je vždy pětkrát větší než počet buněk výpočetní sítě. Porovnání jednotlivých metod remapování vychází obdobně jako pro hladký pohyb výpočetní sítě, pouze řád konvergence je u všech metod je o něco horší.

Remap	$\frac{32}{64}$	$\frac{64}{128}$	$\frac{128}{256}$	$E_{64}^c$	$E_{512}^c$	$E_{64}^b$	$E_{512}^b$	$E_{64}^g$	$E_{512}^g$
donor	1.9	2.0	2.0	$4.20 \cdot 10^{-2}$	$5.53 \cdot 10^{-3}$	0	0	0	0
lin. unl.	4.1	4.0	4.0	$3.99 \cdot 10^{-4}$	$6.11 \cdot 10^{-6}$	$7.0 \cdot 10^{-6}$	$1.4 \cdot 10^{-8}$	$9.9 \cdot 10^{-6}$	$5.2 \cdot 10^{-8}$
lin. BJ	4.2	4.4	4.4	$1.42 \cdot 10^{-3}$	$1.72 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	0
lin. MM	4.2	4.5	4.5	$2.15 \cdot 10^{-3}$	$2.58 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	0
lin. FCT	4.0	3.9	3.9	$7.27 \cdot 10^{-4}$	$1.19 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	0
pp unl.	8.0	8.0	8.0	$9.66 \cdot 10^{-5}$	$1.91 \cdot 10^{-7}$	$7.0 \cdot 10^{-6}$	$1.4 \cdot 10^{-8}$	$1.2 \cdot 10^{-5}$	$5.5 \cdot 10^{-8}$
pp KBJ	7.9	8.0	8.0	$9.66 \cdot 10^{-5}$	$1.92 \cdot 10^{-7}$	$7.0 \cdot 10^{-6}$	$1.4 \cdot 10^{-8}$	$1.2 \cdot 10^{-5}$	$5.5 \cdot 10^{-8}$
pp MM	7.9	8.0	8.0	$9.75 \cdot 10^{-5}$	$1.93 \cdot 10^{-7}$	$7.0 \cdot 10^{-6}$	$1.4 \cdot 10^{-8}$	$1.2 \cdot 10^{-5}$	$5.5 \cdot 10^{-8}$
pp FCT	5.6	5.6	5.5	$4.39 \cdot 10^{-4}$	$2.57 \cdot 10^{-6}$	0	0	0	0
PPM	5.3	5.0	5.2	$1.04 \cdot 10^{-3}$	$7.52 \cdot 10^{-6}$	0	0	0	0
pp Nejat	3.7	4.0	4.1	$4.47 \cdot 10^{-4}$	$7.35 \cdot 10^{-6}$	$5.4 \cdot 10^{-6}$	$1.7 \cdot 10^{-8}$	$1.6 \cdot 10^{-5}$	$1.3 \cdot 10^{-6}$

Tabulka 4.3: Cyklické remapování funkce  $\sin(2\pi x) + 1$  pro pseudočas  $t \in [-1/8, 1/8]$ .

Remap	$\frac{32}{64}$	$\frac{64}{128}$	$\frac{128}{256}$	$E_{64}^c$	$E_{512}^c$	$E_{64}^b$	$E_{512}^b$	$E_{64}^g$	$E_{512}^g$
donor	1.4	1.4	1.4	$1.41 \cdot 10^{-1}$	$5.38 \cdot 10^{-2}$	0	0	0	0
lin. unl.	1.5	1.6	1.5	$5.03 \cdot 10^{-2}$	$1.32 \cdot 10^{-2}$	$7.7 \cdot 10^{-5}$	$3.5 \cdot 10^{-6}$	$6.6 \cdot 10^{-3}$	$1.3 \cdot 10^{-3}$
lin. BJ	1.5	1.6	1.6	$3.85 \cdot 10^{-2}$	$9.65 \cdot 10^{-3}$	0	0	0	0
lin. MM	1.6	1.6	1.6	$4.33 \cdot 10^{-2}$	$1.04 \cdot 10^{-2}$	0	0	0	0
lin. FCT	1.5	1.6	1.6	$3.60 \cdot 10^{-2}$	$9.32 \cdot 10^{-3}$	0	0	0	0
pp unl.	1.6	1.6	1.6	$4.97 \cdot 10^{-2}$	$1.19 \cdot 10^{-2}$	$9.1 \cdot 10^{-5}$	$4.0 \cdot 10^{-6}$	$7.9 \cdot 10^{-3}$	$1.7 \cdot 10^{-3}$
pp KBJ	1.6	1.6	1.7	$5.05 \cdot 10^{-2}$	$1.20 \cdot 10^{-2}$	$6.5 \cdot 10^{-5}$	$3.2 \cdot 10^{-6}$	$7.6 \cdot 10^{-3}$	$1.7 \cdot 10^{-3}$
pp MM	1.6	1.6	1.7	$4.22 \cdot 10^{-2}$	$9.71 \cdot 10^{-3}$	$2.7 \cdot 10^{-6}$	$1.7 \cdot 10^{-8}$	$2.3 \cdot 10^{-5}$	$2.7 \cdot 10^{-6}$
pp FCT	1.6	1.6	1.6	$3.60 \cdot 10^{-2}$	$8.88 \cdot 10^{-3}$	0	0	0	0
PPM	1.7	1.6	1.7	$2.45 \cdot 10^{-2}$	$5.32 \cdot 10^{-3}$	0	0	0	0
pp Nejat	1.6	1.6	1.6	$4.14 \cdot 10^{-2}$	$1.03 \cdot 10^{-2}$	$3.7 \cdot 10^{-5}$	$1.5 \cdot 10^{-6}$	$3.8 \cdot 10^{-3}$	$1.1 \cdot 10^{-3}$

Tabulka 4.4: Cyklické remapování jednotkového skoku pro pseudočas  $t \in [-1/8, 1/8]$ . Hodnoty ve druhém, třetím a čtvrtém sloupci představují podíly chyb remapování při zjemňování sítě, řád konvergence je tedy dán jako  $\log_2$  těchto podílů. Ostatní sloupce představují chyby definované v textu pro síť s příslušným počtem buněk.



Obrázek 4.14: Výsledek pro vybrané metody cyklického remapování pro jednotkový skok a pseudočas  $t \in [-1/8, 1/8]$  na 16 buňkách. Počáteční funkce je zobrazena plnou černou čarou.

Remap	$\frac{32}{64}$	$\frac{64}{128}$	$\frac{128}{256}$	$E_{64}^c$	$E_{512}^c$	$E_{64}^b$	$E_{512}^b$	$E_{64}^g$	$E_{512}^g$
donor	1.8	1.9	1.9	$7.59 \cdot 10^{-2}$	$1.19 \cdot 10^{-2}$	0	0	0	0
lin. unl.	3.5	3.4	3.2	$1.03 \cdot 10^{-3}$	$2.70 \cdot 10^{-5}$	$2.2 \cdot 10^{-6}$	$3.6 \cdot 10^{-9}$	$3.8 \cdot 10^{-5}$	$2.0 \cdot 10^{-7}$
lin. BJ	3.4	3.6	3.7	$1.50 \cdot 10^{-3}$	$3.30 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	0
lin. MM	3.8	3.7	3.9	$2.17 \cdot 10^{-3}$	$4.04 \cdot 10^{-5}$	$1.2 \cdot 10^{-8}$	$1.1 \cdot 10^{-11}$	0	0
lin. Venk	2.1	1.7	1.8	$5.73 \cdot 10^{-3}$	$9.11 \cdot 10^{-4}$	$5.7 \cdot 10^{-7}$	$2.0 \cdot 10^{-9}$	0	0
lin. FCT	3.3	3.7	3.4	$1.23 \cdot 10^{-3}$	$2.95 \cdot 10^{-5}$	0	0	0	0
pp unl.	6.2	6.0	5.7	$2.11 \cdot 10^{-4}$	$9.99 \cdot 10^{-7}$	$2.6 \cdot 10^{-6}$	$4.8 \cdot 10^{-9}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$4.3 \cdot 10^{-8}$
pp KBJ	6.3	5.7	6.1	$2.16 \cdot 10^{-4}$	$9.82 \cdot 10^{-7}$	$2.5 \cdot 10^{-6}$	$4.4 \cdot 10^{-9}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$4.5 \cdot 10^{-8}$
pp MM	6.3	6.0	6.1	$2.20 \cdot 10^{-4}$	$9.43 \cdot 10^{-7}$	$2.6 \cdot 10^{-6}$	$4.4 \cdot 10^{-9}$	$1.3 \cdot 10^{-5}$	$3.9 \cdot 10^{-8}$
pp FCT	5.7	4.8	5.6	$7.11 \cdot 10^{-4}$	$4.66 \cdot 10^{-6}$	0	0	0	0
PPM	4.6	5.3	5.5	$8.46 \cdot 10^{-4}$	$6.40 \cdot 10^{-6}$	0	0	0	0
pp Nejat	1.6	1.6	1.6	$2.41 \cdot 10^{-3}$	$5.64 \cdot 10^{-4}$	$1.9 \cdot 10^{-6}$	$6.4 \cdot 10^{-9}$	$8.5 \cdot 10^{-5}$	$4.3 \cdot 10^{-6}$

Tabulka 4.5: Cyklické remapování funkce  $\sin(2\pi x) + 1$  pro pseudonáhodný pohyb výpočetní sítě. Hodnoty ve druhém, třetím a čtvrtém sloupci představují podíly chyb remapování při zjemňování sítě, řád konvergence je tedy dán jako  $\log_2$  těchto podílů. Ostatní sloupce představují chyby definované v textu pro síť s příslušným počtem buněk.

## 4.3 Metoda ALE vysokého řádu přesnosti

Provedeme test zobecnění Lagrangeovské metody vysokého řádu přesnosti [18] na ALE metodu popsaného v sekci 3.5 řešící rovnice (1.6) – (1.8). Jako testovací úlohy použijeme simulace chování ideálního plynu s různými počátečními podmínkami, pro něž známe přesná řešení. V prvním případě se bude jednat o spojitý problém, na kterém ukážeme vysoký řád konvergence dané metody, ve druhém pak o problém jehož řešení obsahuje nespojitosti. Počáteční výpočetní síť je pro oba případy rovnoměrná.

### 4.3.1 Konvergence na hladkém řešení

Za testovací úlohu volíme problém popsaný následující počáteční podmínkou [18] na intervalu  $x \in [0, 1]$  s periodickými okrajovými podmínkami

$$\rho(x, 0) = 1 + \frac{\sin(2\pi x)}{10} \quad u(x, 0) = 0 \quad p(x, 0) = \rho(x, 0)^\gamma,$$

kde  $\gamma = 3$  představuje plynovou konstantu a stavová rovnice má tedy tvar  $p = \rho(\gamma - 1)\epsilon = 2\rho\epsilon$ . Počítáme řešení do času  $t = 0.8$ , viz obrázek 4.15. Během celého výpočtu zůstává přesné řešení tohoto problému dostatečně hladké a umožňuje experimentálně ověřit vysoký řád konvergence metody.

Řád konvergence metody v  $L_1$  normě vypočteme jako dvojkový logaritmus podílu chyb hustoty na původní síti o  $n$  buňkách a zjemněné síti s  $2n$  buňkami, tedy

$$K_{2n} = \log_2 \left( \frac{E_n}{E_{2n}} \right) = \log_2 \left( \frac{\sum_{i=1}^n |\bar{\rho}_i^e - \bar{\rho}_i^n| \Delta x_i^n}{\sum_{i=1}^{2n} |\bar{\rho}_i^e - \bar{\rho}_i^{2n}| \Delta x_i^{2n}} \right),$$

kde  $\bar{\rho}_i^n$  označuje numericky napočítaný integrální průměr hustoty v konečném čase na síti o  $n$  buňkách a  $\bar{\rho}_i^e$  integrální průměr na přesného řešení na téže síti. Volíme-li přitom posloupnost výpočetních sítí o 80, 160, 320 a 640 buňkách, tak v případě čistě Lagrangeovského výpočtu dostaneme výsledky uvedené v tabulce 4.6.

řád metody	$K_{160}$	$K_{320}$	$K_{640}$	$E_{160}$	$E_{320}$	$E_{640}$
1.	0.8	0.8	0.9	$6.12 \cdot 10^{-3}$	$3.40 \cdot 10^{-3}$	$1.83 \cdot 10^{-3}$
2.	1.8	2.2	2.1	$8.07 \cdot 10^{-5}$	$1.79 \cdot 10^{-5}$	$4.10 \cdot 10^{-6}$
3.	2.7	3.0	3.0	$1.04 \cdot 10^{-5}$	$1.27 \cdot 10^{-6}$	$1.56 \cdot 10^{-7}$

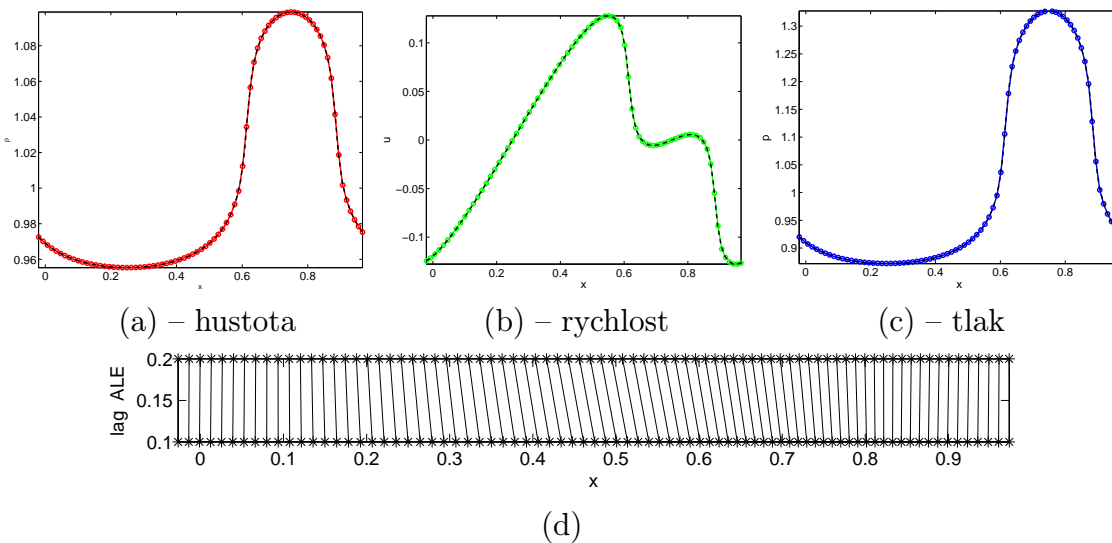
Tabulka 4.6: Řád konvergence Lagrangeovské metody na hladkém řešení a příslušné absolutní chyby na jednotlivých sítích v  $L_1$  normě.

Po rozšíření na ALE metodu popsanou v sekci 3.5, konkrétně přidáním po částech konstantní, po částech lineární (3.11) a po částech parabolické rekonstrukce

(3.24) (obě s minmod limitrem) a po částech parabolického remapování se shodným limitrem jsme dostali výsledky uvedené v tabulce 4.7. Na jednotlivých sítích jsme použili celkem 12, 24, 48, resp. 96 rezonování/remapování což odpovídalo provádění těchto operací každých 20, 40, resp. 80 časových kroků v závislosti na zvoleném řádu metody (1., 2., resp. 3.). Jako rezonování jsme použili (3.5), tento vzorec jsme při každém volání rezonování aplikovali až stokrát, pokud nedošlo k přesunutí libovolného uzlu sítě z mezí daných středy přilehlých buněk na síti předchozí. Tímto několikanásobným voláním jednoduchého rezonování (3.5) jsme zdůraznili pohyb sítě a tím také zvýšili vliv remapování pro ověření zachování vysokého řádu konvergence.

řád metody	$K_{160}$	$K_{320}$	$K_{640}$	$E_{160}$	$E_{320}$	$E_{640}$
1.	0.8	0.8	0.9	$6.16 \cdot 10^{-3}$	$3.44 \cdot 10^{-3}$	$1.85 \cdot 10^{-3}$
2.	1.8	2.0	2.0	$9.16 \cdot 10^{-5}$	$2.25 \cdot 10^{-5}$	$5.64 \cdot 10^{-6}$
3.	2.7	2.9	2.6	$1.17 \cdot 10^{-5}$	$1.60 \cdot 10^{-6}$	$2.70 \cdot 10^{-7}$

Tabulka 4.7: Řád konvergence ALE metody na hladkém řešení a příslušné absolutní chyby na jednotlivých sítích v  $L_1$  normě.



Obrázek 4.15: ALE metoda 3. řádu přesnosti na hladkém řešení – 80 buněk. Hustota (a), rychlost (b) a tlak (c) v čase  $t = 0.8$ . Porovnání výpočetních sítí v čase  $t = 0.8$  (d) pro čistě Lagrangeovskou (spodní) a ALE (horní) metodu.

### 4.3.2 Nespojité případy s rázovou vlnou

Zde volíme Riemmanův problém, tedy problém s počáteční podmínkou popsanou dvěma konstantními hodnotami stavových veličin vpravo a vlevo. Konkrétně se jedná



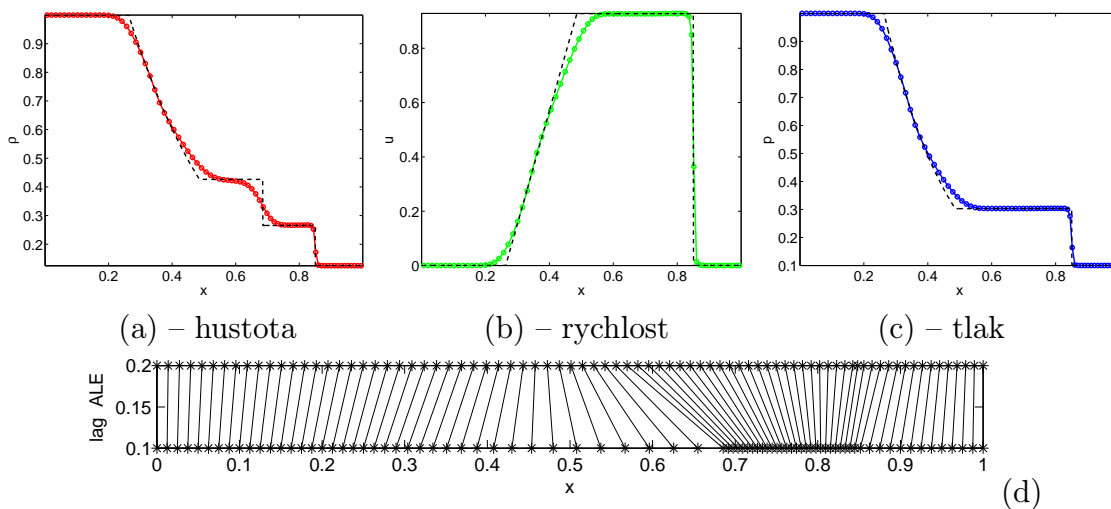
o tzv. Sodův problém [35] popsany na  $x \in [0, 1]$  následujícími hodnotami

$$\rho(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{pro } x < 0.5 \\ 0.125 & \text{pro } x \geq 0.5 \end{cases} \quad u(x, 0) = 0 \quad p(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{pro } x < 0.5 \\ 0.1 & \text{pro } x \geq 0.5 \end{cases}$$

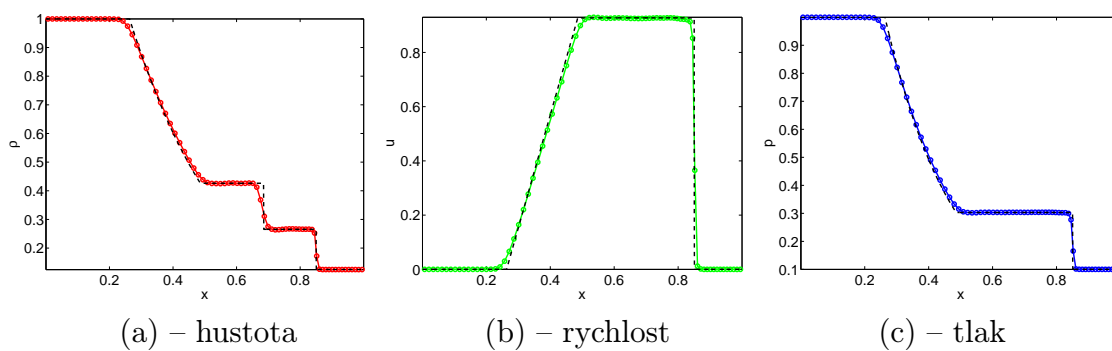
se stavovou rovnicí ideálního plynu s plynovou konstantou  $\gamma = 1.4$  a volnými okrajovými podmínkami. Řešení tohoto problému v sobě obsahuje jak vlnu zředění, tak rázovou vlnu i kontaktní nespojitost. Na obrázcích 4.17, resp. 4.16 vidíme porovnání použití po částech parabolické minmod limitované, resp. po částech konstantní rekonstrukce v ALE metodě popsané v sekci 3.5 a v tabulce 4.8 konvergence a chyby pro 80/160/320 buněk s 12/24/48 rezonováními/remapováními (obě metody shodné jako pro hladký případ popsany výše).

řád metody	$K_{80}$	$K_{160}$	$K_{320}$	$E_{80}$	$E_{160}$	$E_{320}$
1.	0.6	0.6	0.6	$2.42 \cdot 10^{-2}$	$1.63 \cdot 10^{-2}$	$1.04 \cdot 10^{-2}$
2.	0.7	0.6	0.7	$7.57 \cdot 10^{-3}$	$4.97 \cdot 10^{-3}$	$2.96 \cdot 10^{-3}$
3.	1.0	0.8	0.9	$4.45 \cdot 10^{-3}$	$2.57 \cdot 10^{-3}$	$1.42 \cdot 10^{-3}$

Tabulka 4.8: Řád konvergence ALE metody pro nespojitý případ a příslušné absolutní chyby na jednotlivých sítích v  $L_1$  normě.



Obrázek 4.16: ALE metoda tvořená Lagrangeovskou metodou 3. řádu přesnosti a po částech konstantním remapováním. Sodův problém – 80 buněk. Hustota (a), rychlost (b) a tlak (c) v čase  $t = 0.2$ . Porovnání výpočetních sítí v čase  $t = 0.2$  (d) pro čistě Lagrangeovskou (spodní) a ALE (horní) metodu. Během výpočtu proběhlo 24 remapování.



Obrázek 4.17: ALE metoda 3. řádu přesnosti. Sodův problém – 80 buněk. Hustota (a), rychlost (b) a tlak (c) v čase  $t = 0.2$ . Během výpočtu proběhlo 24 remapování s po částech parabolickou rekonstrukcí. Konečná výpočetní síť shodná s obrázkem 4.16 (d).

# Závěr

Z numerických metod pro modelování laserového plasmatu jsme se v první části této práce zaměřili na výpočet absorpce energie laseru. Konkrétně jsme popsali fyzikální základy šíření a absorpce nanosekundových laserových pulsů v plasmatu. Pro sbíhavý Gaussovský svazek jsme uvedli numerický model absorpce s trasováním paprsků předpokládající konstantní hodnoty parametrů v buňkách výpočetní sítě se skoky na hranách. Navrhli jsme algoritmus pro použití tohoto modelu na Lagrangeovských sítích při hydrodynamickém modelování plasmatu ve 2D. Tento model jsme otestovali a provedli jeho srovnání s jednoduchou absorpcí záření na kritické ploše. Ve druhé části jsme popsali ALE hydrodynamickou metodu, zaměřili jsem se na jednu její část, a to remapování. Při něm jsme použili po částech parabolickou rekonstrukci vedoucí k třetímu řádu přesnosti na hladkém řešení. Tento řád přesnosti jsme ověřili na problému cyklického remapování. Dále jsme navrhli postup zobecnění 1D Lagrangeovské metody vysokého řádu přesnosti na hladkém řešení na ALE metodu využívající popsané remapování a ověřili její přesnost na vybraných problémech hydrodynamiky.

Jaký byl tedy přínos této práce? Navrhli jsme rozšíření modelu absorpce na kritické ploše a modelu s trasováním paprsků pro Gaussovský model sbíhavého laserového svazku a provedli jejich implementaci do 2D ALE hydrodynamického kódu PALE. Popsali jsme po částech parabolickou rekonstrukci vedoucí k modelu remapování třetího řádu přesnosti na hladkém řešení. Porovnali jsem různé limity pro omezení této rekonstrukce na problému cyklického remapování a ověřili jejich vliv na konvergenci a další vlastnosti dané metody. Některé výsledky diplomové práce již byly nebo budou publikovány. Model absorpce laserového záření s trasováním paprsků byl použit v pracích (i) a (ii). Po částech parabolické remapování bude prezentováno na konferenci Multimat 2011 (iii).



## Autorovy publikace

- (i) O. Renner, J. Cihelka, L. Juha, E. Krouský, M. Kozlová, R. Liska, M. Šmíd, P. Váchal, Velechovský J., and et al. Spectroscopic diagnosis of energetic plasma jets interaction with walls. In *Book of Abstracts, 14th International Workshop on Radiative Properties of Hot Dense Matter*, page 20, Madrid, 2010. Universidad Politecnica de Madrid.
- (ii) Liska R., Kuchařík M., Limpouch J., Renner O., Váchal P., Bednárik L., and Velechovský J. ALE method for simulations of laser-produced plasmas. In J. Fort, J. Furst, J. Halama, R. Herbin, and F. Hubert, editors, *Finite Volumes for Complex Applications VI*. Springer-Verlag, 2011. In press.
- (iii) R. Liska, M. Shashkov, and J. Velechovsky. High-order remapping with piecewise parabolic reconstruction. In *International Conference on numerical Methods For Multi-Material Fluid Flows, Multimath 2011, Arcachon, France, September 5 - 9, 2011, 2011*. Submitted.
- (iv) H. Jelínková, L' .Bednárik, M. Drahokoupil, M. Duspiva, M. Fibrich, J. Havlík, M. Holec, M. Jelínek, O. Kitzler, J. Kodet, P. Koranda, P. Matlas, V. Michálek, P. Navrátil, M. Němec, D. Vyhlídal, P. Szotkowski, M. Vacek, J. Velechovský, J. Blažej, M. Čech, V. Kubeček, M. Kuchařík, R. Liska, A. Novotný, I. Procházka, M. Šiňor, J. Šulc, and P. Váchal. Lasery a aplikace. In *Workshop 2011*, number SGS10/299/OHK4/3T/14, pages 1–6. Czech Technical University in Prague, 2011.
- (v) O. Renner, J. Cihelka, V. Hájková, L. Juha, E. Krouský, J. Nejd, J. Skála, A. Velyhan, T. Pisarczyk, T. Chodukowski, Z. Kalinowska, P. Pisarczyk, R. Liska, M. Šmíd, P. Váchal, J. Velechovský, and J. Ullschmied. Plasma jets production at laser-burnt-through foils and their interaction with secondary targets. In *5th International Conference on the Frontiers of Plasma Physics and Technology*, 2011. Submitted.



# Literatura

- [1] T. Kapin, M. Kuchařík, J. Limpouch, R. Liska, and P. Váchal. *Arbitrary Lagrangian Eulerian method for laser plasma simulations*. Int. J. Numer. Meth. Fl., **56**(8):1337–1342, 2008.
- [2] M. Kuchařík. *Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) Methods in Plasma Physics*. PhD thesis, CTU FNSPE, 2006.
- [3] J. Velechovský. *Modelování absorpce laserového záření v plazmatu*. Bakalářská práce, ČVUT FJFI, 2009.
- [4] A. B. Iskakov, I. G. Lebo, and V. F. Tishkin. *2D numerical simulation of the interaction of high-power laser pulses with plane targets using the "ATLANT-C" Lagrangian code*. J. of Russian Laser Research, **21**(3):247-263, 2000.
- [5] I. G. Lebo, N. N. Demchenko, A. B. Iskakov, J. Limpouch, V. B. Rozanov, and V. F. Tishkin. *Simulation of high-intensity laser-plasma interactions by use of the 2D Lagrangian code "ATLANT-HE"*. Laser and Particle Beams, **22**:267-273, 2004.
- [6] S. Atzeni. *The physical basis for numerical fluid simulations in laser fusion*. Plasma Physics and Controlled Fusion. **29**(11):1535-1604, 1987.
- [7] C. W. Hirt, A. A. Amsden, and J. L. Cook. *An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds*. J. Comput. Phys. **14**:227-253, 1974, Reprinted in vol. 135(2), 203-216, 1997.
- [8] L. G. Margolin and M. Shashkov. *Second-order sign-preserving conservative interpolation (remapping) on General Grids*. J. Comput. Phys. **184**:266-298, 2003.
- [9] M. Kucharik, M. Shashkov and B. Wendroff. *An efficient linearity-and-bounds-preserving remapping method*. J. Comput. Phys. **188**(2):462-471, 2003.
- [10] R. Loubere and M. Shashkov. *A subcell remapping method on staggered polygonal grids for arbitrary-Lagrangian-Eulerian methods*. J. Comput. Phys. **209**(1):105-138, 2005.
- [11] Ch. Michalak, C. Ollivier-Gooch. *Accuracy preserving limiter for the high-order accurate solution of the Euler equations*. J. Comput. Phys. **228**:8693-8711, 2009.

- [12] T. J. Barth. *Numerical methods for gasdynamic systems on unstructured meshes*. In D. Kroner, M. Ohlberger, and C. Rohde, editors, *Numerical Methods for Gasdynamic Systems on Unstructured Meshes*. Springer, Berlin, 1997.
- [13] M. Yang. Z. J. Wang. *A Parameter-Free Generalized Moment Limiter for High-Order Methods on Unstructured Grids*. 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting. 5 – 8 January 2009, Orlando, Florida. AIAA 2009-605.
- [14] D. Kuzmin. *A vertex-based hierarchical slope limiter for p-adaptive discontinuous Galerkin methods*. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **233**:3077-3085, 2010.
- [15] A. Nejat. *A Higher-Order Accurate Unstructured Finite Volume Newton-Krylov Algorithm for Inviscid Compressible Flows*. Doctoral thesis, The University of British Columbia, Department of Mechanical Engineering, 2007.
- [16] P. Colella, P. R. Woodward. *The Piecewise Parabolic Method (PPM) for Gas-Dynamical Simulations*. *J. Comput. Phys.* **54**:174-201, 1984.
- [17] R. Liska, M. Shashkov, P. Váchal, B. Wendroff. *Optimization-based synchronized flux-corrected conservative interpolation (remapping) of mass and momentum for arbitrary Lagrangian–Eulerian methods*. *J. Comput. Phys.* **229**:1467-1497, 2010.
- [18] F. Vilar, P. H. Maire and R. Abgrall. *Cell-centered discontinuous Galerkin discretizations for two-dimensional scalar conservation laws on unstructured grids and for one-dimensional Lagrangian hydrodynamics*. *Comput. Fluids*, 2010.
- [19] K. Eidmann, J. Meyer ter Vehr, and T. Schlegel. *Hydrodynamic simulation of subpicosecond laser interaction with solid-density matter*. *Phys. Rev. E*, **62**(1):1202-1214, 2000.
- [20] N. N. Demchenko and V. B. Rozanov. *A hydrodynamic model of interaction of picosecond laser pulses with condensed targets*. *J. of Russian Laser Research*, **22**(3):228-242, 2001.
- [21] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*. Pergamon press, Oxford, 1980.
- [22] M. Shashkov. *Conservative Finite-Difference Methods on General Grids*. CRC Press, Boca Raton, Florida, 1996.
- [23] S. Eliezer, *The Interaction of High-power Lasers with Plasmas*. IOP Publishing Ltd, Bristol, 2002.
- [24] J. Velechovský. *Modelování absorpce laserového záření v plazmatu*. Výzkumný úkol, ČVUT FJFI, 2010.
- [25] S. Atzeni, J. Meyer-ter-Vehn. *The physics of inertial fusion*. Clarendon Press, Oxford, 1984, ISBN-13: 978-0-19-856264-1.



- [26] T. B. Kaiser. *Laser ray tracing and power deposition on an unstructured three-dimensional grid*. Phys. Rev. E, **61**(1):895-905, 2000.
- [27] G. J. Pert. *The analytic theory of linear resonant absorption*. Plasma Physics, **20**:175-188, 1978.
- [28] N. Rawlinson, J. Hauser, M. Sambridge. *Seismic ray tracing and wavefront tracking in laterally heterogeneous media*. Advances in Geophysics, **49**, 2007.
- [29] T. Speziale, and P. J. Catto. *Linear wave conversion in an unmagnetized, collisionless plasma*. The Physics of Fluids, **20**(6):990-997, 1977.
- [30] F. Trager. *Handbook of Lasers and Optics*. Springer, 2007, ISBN 0387955798.
- [31] O. Renner, R. Liska, and F. B. Rosmej. *Laser-produced plasma-wall interaction*. Laser and Particle Beams, **27**:725-731, 2009.
- [32] V. Venkatakrishnan. *A Perspective on Unstructured Grid Flow Solvers*. Technical Report ICASE 95-3. NASA. 1995.
- [33] L. White, A. Adcroft. *A high-order finite volume remapping scheme for nonuniform grids: The piecewise quartic method (PQM)*. J. Comput. Phys. **227**:7394-7422, 2008.
- [34] L. G. Margolin, M. Shashkov. *Second-Order Sign-Preserving Remapping on General Grids*. LA-UR-02-525.
- [35] G. A. Sod. *A Survey of Several Finite Difference Methods for Systems of Nonlinear Hyperbolic Conservation Laws*. J. Comput. Phys. **27**:1-31, 1978.