

激光聚变中的科学计算^{*}

裴文兵[†] 朱少平

(北京应用物理与计算数学研究所 北京 100094)

摘要 科学计算在激光聚变研究中发挥着重要的作用. 经过长期的努力, 中国已形成了以 LARED 系列程序为核心的分段模拟激光聚变主要环节和关键问题的二维数值模拟能力. 文章首先介绍了激光聚变的主要物理过程、主要物理过程的特征以及对科学计算的要求. 其次, 介绍了 LARED 系列程序的主要功能以及在激光聚变物理研究中的应用, 介绍了正在研制和发展的模拟激光聚变全过程的新一代高性能并行应用程序的思路. 最后, 介绍了激光聚变科学计算中面临的一些挑战性问题.

关键词 激光聚变, 科学计算, LARED 系列程序

Scientific computing for laser fusion

PEI Wen-Bing[†] ZHU Shao-Ping

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

Abstract Scientific computing plays a key role in laser fusion research. In China, much effort has been paid over many years to develop 2D and 3D computer simulation codes, forming a 2D simulation capability through which the key physics issues of laser fusion can be individually simulated, mainly using the LARED code family containing six different 2D (and partially 3D) code series. The main physical processes and the characteristics of laser fusion, and the necessary scientific computing requirements are first reviewed. Then the main functions of the LARED code series and some of their applications in laser fusion research are given. A roadmap to develop a new generation of high performance codes for the full simulation of indirect drive laser fusion is presented. Finally, some challenging problems in laser fusion computing are discussed.

Keywords laser fusion, scientific computing, LARED codes

1 引言

激光聚变是实现可控热核聚变的一条途径, 它是利用激光或激光产生的 X 射线作驱动源, 加热和驱动含有氘氚燃料的球状靶丸内爆压缩, 使之达到聚变点火和燃烧条件, 实现聚变. 1960 年, 激光器问世不久, 前苏联科学家 Basov 等人^[1]就提出利用激光产生高温等离子体的思想, 我国科学家王淦昌^[2]建议利用激光开展实验室出中子的实验, 这是激光聚变概念的雏形. 1972 年, 美国科学家 Nuckolls 等人^[3]发表了激光驱动靶丸内爆压缩的理论和计算结果, 为激光惯性约束聚变基本原理与概念的建立奠定了重要的基础. 自上世纪 70 年代初以来, 伴随激光技术的进步, 激光聚变研究取得了实质性进展^[4,5], 正在向点火目标迈进. 目前,

美国已完成输出能量为 1.8MJ 的国家点火装置^[6]的工程建造, 计划 2010 年开始进行点火实验演示. 法国正在建造 2.0MJ 的 LMJ 装置^[7]. 我国系统的激光聚变研究始于 20 世纪 70 年代, 通过数十年的努力, 在物理研究、实验诊断、实验靶制备以及激光器研制等方面均获得了长足的进步, 形成了激光聚变完整的研究体系.

激光聚变研究是一项大科学工程, 需要物理、诊断、制靶和驱动器的协调发展. 物理是激光聚变研究的核心, 点火靶的设计要通过物理研究来确定, 驱动器的技术指标、靶制备的要求要根据物理要求来决

^{*} 国家高技术研究发展计划长期资助, 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2005CB321702)和国家自然科学基金(重大研究计划)(批准号: 10835003)部分资助项目

2009-05-13 收到初稿, 2009-07-05 收到修改稿

[†] 通讯联系人. Email: pei_wenbing@iapcm.ac.cn

定. 实现激光聚变点火是一件极富挑战性的工作. 无论从科学与技术还是从工程与工艺的角度, 激光聚变点火都是一件“近极限”的工作, 它逼近目前科学、技术、工程与工艺的极限. 充分的物理研究是完成点火靶设计的必要条件, 同时驱动器和靶制备能力是点火靶设计时必须考虑的因素. 物理研究充分, 点火靶设计优化, 会降低对驱动器和靶制备的要求. 反过来, 驱动器和靶制备能力提升会减轻点火靶设计的压力. 靶设计、靶制备与驱动器三者之间相互耦合, 密切相关, 需要各自创造性的工作, 也需要循环融合, 互相促进.

激光聚变物理研究包括理论、数值模拟和实验三个主要方面. 激光聚变的物理过程非常复杂, 要发现其中的规律, 认识其中的机理, 需要理论与实验的结合, 需要高置信度的数值模拟能力. 激光聚变中的数值模拟是研究者对激光聚变理论认识的结晶, 因为数值模拟是建立在物理模型与物理参数基础上的; 数值模拟还是连接理论和实验的桥梁, 是实验的理论设计与分析的主要手段; 同时, 数值模拟可以作为一种新的实验手段(即数值实验), 研究物理规律与机制. 建立高置信度的数值模拟能力既是激光聚变研究的重要工作, 也是做好激光聚变研究的必要条件.

2 激光聚变主要物理过程

当激光直接辐照靶丸时(称为直接驱动, 见图1), 在靶丸的外表面产生等离子体, 激光在等离子体中传播并发生多种相互作用. 激光的大部分能量在临界面(激光能够到达的最深位置)附近转换为电子能量, 通过电子热传导把能量向高密度区输运, 被加热的物质向外喷射, 同时它的反冲压(即烧蚀压)产生一个冲击波, 向内压缩靶丸未加热的部分(也叫推进层), 这一过程称为烧蚀. 当冲击波从主燃料层(氘冰)进入氘氚(DT)气体时, 推进层开始向内加速飞行, 主燃料与氘氚气体均被压缩. 当气体被压缩到一定程度后, 推进层进入减速阶段, 主燃料层被进一步压缩到每立方厘米几百克的密度, 同时将动能转变为内能, 芯部燃料的密度和温度也不断增加, 在中心形成热斑, 达到点火条件, 点燃聚变反应. 氘氚聚变反应发生, 产生中子与 α 粒子, α 粒子输运使热核燃烧从中心向主燃料层中传播, 获得能量增益. 这是中心点火的概念, 其关键是要创造接近一维球对称内爆的条件, 并有效控制流体力学(界面)不稳定性

对点火热斑形成造成的破坏作用. 直接驱动对激光束辐照均匀性的要求很高.

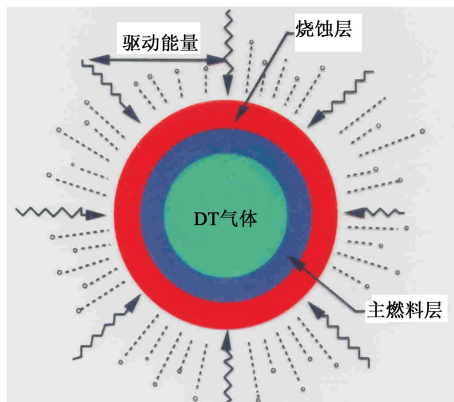


图1 惯性约束聚变中心点火示意图(其中主燃料层是氘冰, 芯部为氘氚(DT)气体)

为了降低对激光束辐照均匀性的要求, 以辐射烧蚀驱动靶丸内爆的间接驱动方式被提了出来. 间接驱动方式如图2所示, 激光首先要转换为软X射线, 再利用软X射线去辐照靶球、驱动内爆. 图3是间接驱动激光聚变按动作的时间过程分解的流程图, 可分为黑腔物理和靶丸内爆物理两部分. 首先, 激光通过激光入射孔进入由高原子序数(简称高Z)材料构成的柱形黑腔, 照射和加热黑腔内壁, 产生高温等离子体, 并很快充满黑腔. 后续激光在这些等离子体中传播, 通过逆韧致吸收(即电子-离子碰撞)过程沉积能量, 加热等离子体, 同时与等离子体相互作用激发各种微观不稳定性. 激光的大部分能量在临界面附近转换为电子能量, 通过电子热传导进一步加热和烧蚀高密度等离子体, 同时高温等离子体将大部分沉积的激光能量转换成X射线辐射, 除部分X射线直接从激光入射孔逃逸或被靶丸吸收, 大部分X射线加热黑腔壁(包括激光辐照和未辐照的壁), 通过与腔壁多次吸收和再发射, X射线辐射很快被热化, 在腔内形成几乎均匀的X射线辐射场. 热化的、均匀的X射线辐射场是烧蚀靶丸驱动内爆的主要能源. 除了烧蚀机制外, 靶丸内爆物理的其他过程(内爆压缩、点火和燃烧)对于直接驱动和间接驱动都是相同的. 显然, 间接驱动是以牺牲靶丸能量耦合效率为代价换取靶丸辐照均匀性的. 与电子烧蚀比较, 辐射烧蚀本领或效率要高得多, 因而对不均匀性的热匀滑效果以及对小尺度扰动的烧蚀致稳作用相对要好. 相对于直接驱动, 间接驱动对靶丸辐照均匀性和靶丸均匀性的要求要宽松. 美国的国家点火装置NIF与法国的兆焦耳激光装置LMJ的设计

均以实现间接驱动聚变点火为目标。

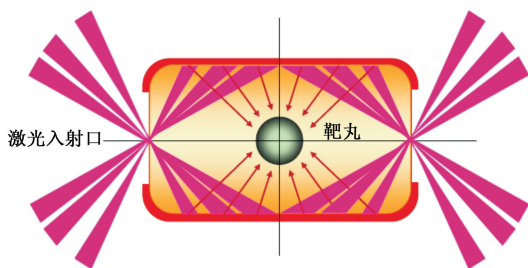


图2 间接驱动激光聚变示意图

无论是直接驱动还是间接驱动,靶丸内爆均是核心过程,其中的关键是要控制流体力学不稳定性的发展,确保点火热斑的形成.流体力学不稳定性包括冲击波引起的 Richtmyer - Meshkov (RM) 不稳定性和惯性力引起的 Rayleigh - Taylor (RT) 不稳定性.流体力学不稳定性使得物质界面扰动放大,引起湍流混合,使冷燃料进入热斑,导致热斑温度下降或热斑体积变小,严重时导致靶丸外壳破裂.引起流体力学不稳定的主要因素来源于靶丸本身和驱动源的不对称性(大尺度)和不均匀性(小尺度)(本文将不作区分,统称为不均匀性).不均匀性的要求依赖于具体的靶丸设计,例如增加 DT 质量可放宽对不均匀性的要求,但需要更多的驱动能量.在激光聚变靶设计中,激光-靶丸能量耦合效率(驱动靶丸内爆的辐射能量与入射激光能量之比)和辐照均匀性是两个重要指标.

激光等离子体相互作用是影响激光-靶丸能量耦合效率和辐照均匀性的破坏性因素,特别是在间接驱动的情况下.激光与等离子体相互作用激发受激 Raman 散射(SRS)、受激 Brillouin 散射(SBS)和成丝不稳定性,不仅使一部分激光能量通过激光入射孔被散射出黑腔,降低激光吸收效率,而且改变激光光斑之间的能量匹配与激光传播方向,破坏辐射驱动对称性和靶丸压缩的时间匹配.此外,受激 Raman 散射还将产生超热电子,这些超热电子预热点火靶丸导致压缩度下降.有效控制激光与等离子体相互作用引发的不稳定性是激光聚变研究的又一关键问题.

3 激光聚变程序的特点和物理模型描述

激光聚变涉及复杂的物理过程,并且不同过程具有非常不同的特征时空尺度.问题的特点决定了大规模数值模拟是激光聚变物理研究的最主要的手

段之一.由于不同过程时空尺度相差很大,激光聚变的数值模拟难以统一在一个程序中全过程实现.根据物理过程的差异,激光聚变数值模拟分为关键过程的局部模拟和考虑这些效应的整体模拟,局部模拟主要针对激光与等离子体相互作用以及流体力学不稳定性,整体模拟采用辐射流体力学描述.

3.1 激光等离子体相互作用

激光等离子体相互作用涉及波-波和波-粒子相互作用的微观不稳定性,严格说来需要用动理学描述,要求空间分辨率至少是激光波长(小于 $1\mu\text{m}$) 的十分之一,时间分辨率要求小于激光频率的倒数,约为 10^{-15}s .激光聚变中等离子体的空间尺度为厘米(黑腔长度)量级,时间尺度约 10^{-8}s (激光脉冲宽度),并且是三维的.简单的估计就可以得到结论:对激光在大尺度黑腔等离子体中传播的动理学模拟来说,计算规模非常大,即使是千万亿次计算机也无法满足要求,不可能纳入激光聚变全过程模拟的总体程序中.

必须抓住问题的物理本质,开展数值模拟研究,理论与实验结合,认识与理解激光与等离子体相互作用的规律与机制,评估不稳定性的影响,寻找控制不稳定性发展的有效手段.目前的激光与等离子体相互作用数值模拟研究可分为三个层次:一是线性分析,根据线性理论得到的不稳定性增长率及标度关系,分析黑腔等离子体中各种不稳定性发展的可能性及与激光参数和等离子体状态之间的关系,找到控制它们发展的办法;二是动理学模拟,常用的是粒子模拟(也叫 PIC)方法^[8],主要研究波-波(二级衰变、多重散射等)、波-粒子(粒子俘获、频移导致的失谐等)相互作用的非线性机制.动理学模拟对理解和预测实验有很重要的作用,但是模拟的时空尺度与实际问题相差很大;三是流体模拟,在一定的物理近似下建立流体尺度的物理模型,在接近真实时空尺度的情形下,研究激光束在等离子体中传播的全过程.美国利弗莫尔国家实验室的 pF3D^[9,10]就是流体力学尺度下的三维激光与等离子体相互作用并行应用程序.

3.2 流体力学不稳定性

激光聚变中的流体力学不稳定性除了要研究流体运动外,还要研究包含原子电离和复合、辐射输运、快带电粒子输运等复杂过程,具有物理过程多、时空尺度变化大、强非线性等特点,这实际上是辐射

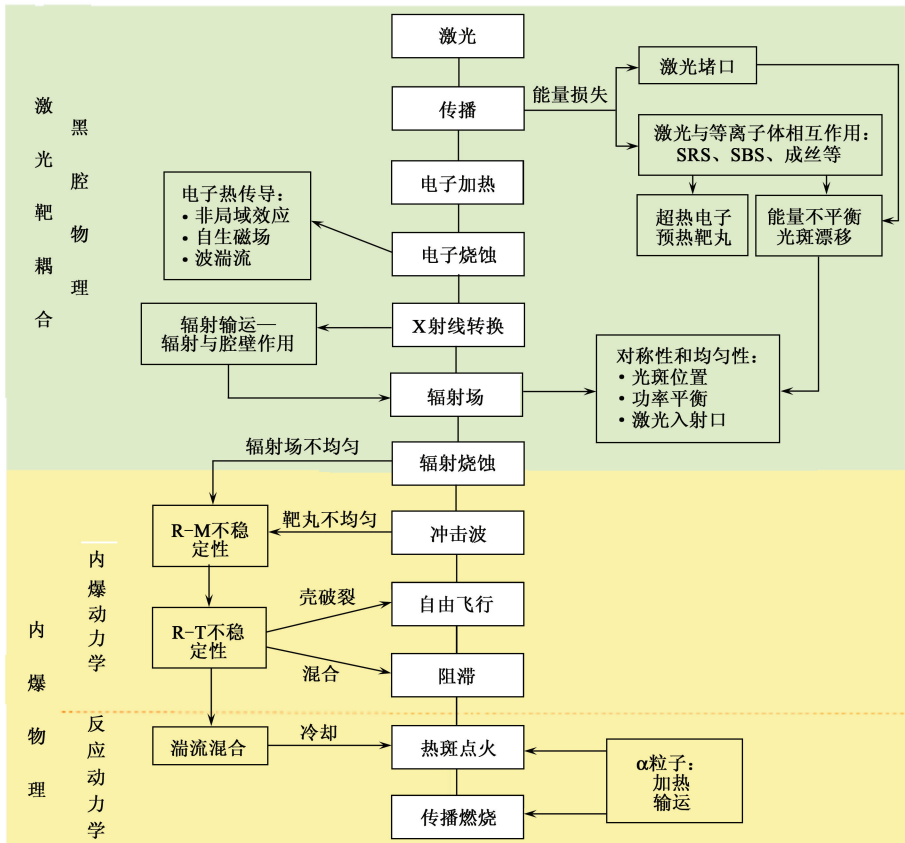


图3 激光惯性约束聚变辐射驱动过程图

流体力学界面不稳定性问题. 研究界面不稳定性问题要认识线性发展与各种模非线性耦合的规律, 特别要关注不稳定性发展导致不同介质湍流混合的规律. 界面不稳定性发展本质上是三维的, 需要三维的数值模拟. 例如, 在二维情况下, 涡旋只能平行和反平行, 有较多合并的可能性; 而三维情况下, 涡旋可以在空间任何方向, 有较多可能向小尺度耦合, 涡旋破碎将成为主要过程, 所以人为引进的对称性将部分掩盖物理问题的真实信息. 为了模拟靶丸内爆过程中的流体力学不稳定性演化, 分辨单个扰动模需要 50 个网格左右, 假设系统的空间尺度与不稳定性特征扰动波长之比约为 200, 也就是三维数值模拟需要的空间网格数约为 $(200 \times 50)^3 = 10^{12}$ 个, 如此规模网格数的数值模拟是目前的计算机不能承受的. 在实际的研究工作中, 必须通过物理建模、计算方法与算法等综合手段, 在抓住物理问题主要特征与保证数值模拟分辨率的前提下, 降低计算规模.

3.3 非平衡辐射流体力学描述的整体模拟

激光与黑腔耦合转换成 X 射线、X 射线驱动靶丸内爆的整个过程可以用非平衡辐射流体力学方程

组来描述. 激光产生等离子体的显著特点是非局部热力学平衡 (non-LTE), 不仅离子、电子和辐射场之间达不到平衡, 而且原子过程、辐射场也都是非平衡的. 在激光与黑腔耦合转换成 X 射线、以及 X 射线驱动靶丸内爆过程中, 辐射与带电粒子是重要的能量运输机制, 必须细致研究.

假设电子和离子分别处于局部热动平衡, 具有各自的温度 T_e 和 T_i , 则电子与离子的运动满足如下方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \delta \rho_{DT}, \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} + \nabla (P_e + P_i) + \nabla \cdot \mathbf{P}_r = 0, \quad (2)$$

$$C_{ve} \frac{dT_e}{dt} + T_e \left(\frac{\partial P_e}{\partial T_e} \right)_\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{F}_e + W_L + W_{ae} - W_{er} - W_{ei} - \delta \epsilon_{DT}, \quad (3)$$

$$C_{vi} \frac{dT_i}{dt} + T_i \left(\frac{\partial P_i}{\partial T_i} \right)_\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{F}_i + W_{ai} + W_{ei}, \quad (4)$$

$$\frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla, \quad (5)$$

这里, d/dt 和 $\partial/\partial t$ 分别是 Lagrangian 和 Eulerian 时间导数, ρ 是质量密度, \mathbf{u} 是流体速度, P_e 和 P_i 分别是电子和离子压强, \mathbf{P}_r 是辐射压强张量(在辐射扩散近似下退化为标量), C_{ve} 和 C_{vi} 分别是电子和离子比热, 各组分的压强和比热通过状态方程表示为温度和密度的函数; \mathbf{F}_e 和 \mathbf{F}_i 分别是电子和离子热流, 理论和实验表明经典的 Spitzer-Harm 热传导近似不能描述激光聚变中的电子传热问题^[11]; W_L 是激光能源项, 表征激光能量转移到电子的速率, 由一个三维光路追踪模块计算逆韧致吸收; $\delta\rho_{DT}$ 和 $\delta\varepsilon_{DT}$ 分别是 DT 反应产生的中子逃逸出系统引起的质量和内能损失, 由核反应速率方程确定; $W_{\alpha e}$ 和 $W_{\alpha i}$ 分别是 α 粒子与电子和离子的能量交换项, 由核反应速率方程和 α 粒子输运方程给出; W_{ei} 是电子-离子能量交换项, W_{er} 是电子-辐射能量交换项,

$$W_{er} = \frac{1}{\rho} \int [j_v(T_e) \left(1 + \frac{c^2}{2h\nu^3} I_v\right) - \mu_v(T_e) I_v] d\mathbf{\Omega}, \quad (6)$$

其中 $j_v(T_e)$ 和 $\mu_v(T_e)$ 分别是自由-自由、束缚-自由和束缚-束缚过程的辐射发射和吸收系数, 可以通过求解等离子体非平衡原子过程的束缚电子平均占据概率速率方程得到. 辐射强度 $I_v(t, \mathbf{x}, \mathbf{\Omega})$ 不仅是时空的函数, 而且还是光子频率和方向的函数, 满足辐射输运方程:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \frac{\partial I_v}{\partial t} + \mathbf{\Omega} \cdot \nabla I_v \\ & = j_v(T_e) \left(1 + \frac{c^2}{2h\nu^3} I_v\right) - \mu_v(T_e) I_v. \end{aligned} \quad (7)$$

如果辐射场接近各向同性分布, 即 $I_v(t, \mathbf{x}, \mathbf{\Omega}) = I_v(t, \mathbf{x})$, 则辐射输运方程可以近似为扩散方程:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \frac{\partial I_v}{\partial t} + \nabla \cdot \frac{1}{3\mu'_v(T_e)} \nabla I_v \\ & = j_v(T_e) \left(1 + \frac{c^2}{2h\nu^3} I_v\right) - \mu_v(T_e) I_v, \end{aligned} \quad (8)$$

其中 $\mu'_v(T_e)$ 为有效吸收系数. 如果辐射场的能谱满足 Planck 分布, 则辐射扩散方程可以进一步近似为辐射热传导方程:

$$C_{vr} \frac{dT_r}{dt} + T_r \left(\frac{\partial P_r}{\partial T_r} \right)_\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{F}_r + W_{er}, \quad (9)$$

其中 T_r , C_{vr} 和 \mathbf{F}_r 分别是辐射温度、辐射比热和辐射热流. 辐射热传导方程(9)式与方程(1)~(5)式通常称为三温流体力学方程组.

关于激光传播的光路方程、非平衡原子过程的束缚电子平均占据概率速率方程、核反应动力学方程、 α 粒子输运方程、以及在辐射流体力学方程组中出现的各种热流和能量交换项, 由于受篇幅限制就

不具体给出了, 感兴趣的读者可查阅参考文献 [12—15].

在上述整体数值模拟中, 激光与等离子体相互作用引起的激光能量损失是必须考虑的. 具体的处理方法是在计算 W_L 时扣除这部分能量损失. 原则上, 流体力学界面不稳定性效应是包含在整体模拟中的. 但是, 实际的整体模拟中的网格分辨率不够, 无法反映小尺度高阶模的发展和强非线性阶段高阶模与中低阶模之间的耦合影响. 这些影响通常是通过加入各种湍流混合模型唯象地加以考虑.

从科学计算的角度来看, 上述辐射流体力学模型已经很复杂了. 但是从激光聚变物理研究的角度分析, 这个物理模型还不能全面正确地描述激光聚变的整个过程, 需要进一步完善. 例如, 上述模型只考虑了 α 粒子引起的能量输运, 而没有考虑 α 粒子引起的质量和动量输运, 因此只适用于聚变反应很少的情况. 对于较高能耗的聚变点火研究, 需要建立 α 粒子输运与流体耦合的物理模型. 还有, 电子热流 \mathbf{F}_e 不能采用 Spitzer-Harm 热传导近似, 需要采用动力学方法给出电子热流. 电子热流本身就是一个不简单研究课题, 与流体力学耦合则更是复杂.

4 LARED 系列程序及其应用

多介质大形变、多物理过程和多时空尺度是激光聚变数值模拟面临的挑战, 实际构型、定量正确是激光聚变数值模拟需满足的要求. 经过多年努力, 北京应用物理与计算数学研究所建立了以 LARED 系列程序为核心的二维数值模拟能力, 能够模拟激光聚变各主要环节和关键物理问题. LARED 是指 Laser Atom Radiation Electron Dynamics. 图 4 列出了间接驱动激光聚变及其主要应用领域的数值模拟程序及流程.

LARED-P 是一个二维和三维并行的粒子模拟程序系列, 用于激光与等离子体相互作用问题的研究, 尽管模拟的时空尺度受计算机资源所限, 但它是理解不稳定性非线性机制的有效工具. LARED-P 也用于相对论电子束的产生和在稠密等离子体中的传输研究, 这是激光聚变快点火研究中的关键问题之一.

LARED-H 是一个二维拉氏非平衡三温辐射流体力学程序, 包含非平衡原子过程和激光光路计算, 用于激光靶耦合和黑腔物理研究. 利用 LARED-H 计算提供的黑腔辐射驱动源, 我们还能够开展辐射

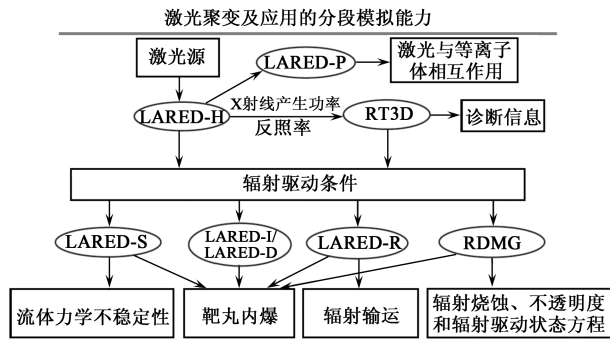


图4 激光聚变及应用研究的分段数值模拟能力的关系图

驱动内爆研究以及其他应用研究,如流体力学不稳定性、辐射运输、辐射不透明度、状态方程等。靶丸内爆过程能够用 LARED-I 和 LARED-D 来模拟,它们都是二维拉氏三温辐射流体力学程序,所不同的是:前者是在柱坐标下编写的,后者则采用球坐标。LARED-D 常用来模拟直接驱动内爆。LARED-R 是一个二维多群辐射运输拉氏流体力学程序,包含辐射运输多群近似、多群扩散近似和热传导近似,不同区域可以采用不同的近似,用于辐射运输及烧蚀研究。LARED-S 是一个二维(部分三维)并行的多介质欧拉辐射(多群扩散和热传导近似)流体力学程序系列,用于模拟平面、柱和球几何的流体力学不稳定性问题。图 4 中除了 LARED 系列程序外,还有两个程序:RDMG 和 RT3D。RDMG 是一维非平衡辐射流体力学程序,辐射可以是多群运输、多群扩散和热传导近似,物理建模相对比较齐全,能够用于激光靶耦合、直接驱动和间接驱动靶丸内爆、辐射运输、辐射烧蚀、冲击波等物理问题研究。RT3D 程序是一个不考虑流体运动、灰体近似的辐射运输三维蒙特卡罗程序,能够计算复杂几何结构,可用于研究黑腔内靶丸或其他样品组件的辐照均匀性问题。关于这些程序更细致的介绍参阅文献[16]。

在我国激光聚变物理研究中,LARED 系列程序已经发挥了重要的作用,下面举例介绍若干研究成果。图 5 是神光 II 黑腔辐射温度的数值模拟结果与实验测量值的比较。黑腔设计尺寸为腔长 $1400\mu\text{m}$,直径 $800\mu\text{m}$,激光入射口直径 $380\mu\text{m}$,八束激光以与腔轴呈 45° 角分别从两边的激光入射孔注入到黑腔。实验中,在激光入射口外与腔轴成 30° 的方向上,用亚千能谱仪测量黑腔辐射温度。根据 LARED-H 计算结果,利用后处理程序(静态 X 射线输运程序)可以给出与实验测量直接比较的辐射温度。图 5 显示 LARED 程序给出的结果与实验测量的辐射温度在峰值附近符合得很好。

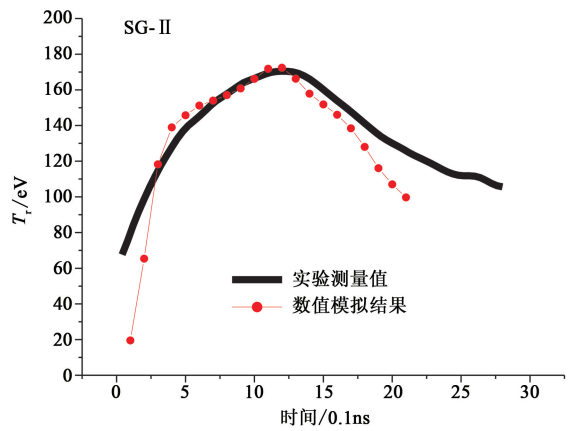


图5 LARED-H 计算的神光 II 黑腔辐射温度与实验测量值的比较

另一个例子是辐射不透明度参数测量实验的理论设计和分析[17]。辐射不透明度是高温等离子体的重要参数之一,辐射运输数值模拟是否正确、精确,辐射不透明度是关键参数之一。辐射不透明度的计算涉及原子结构、能级布局、谱线形状和等离子体环境等,是复杂的多体问题,需要用相关实验验证辐射不透明度计算模型。辐射不透明度测量实验要求在干净的环境中产生均匀的平衡的等离子体状态。

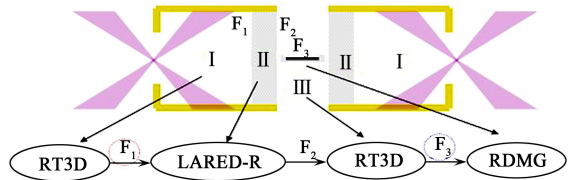


图6 辐射不透明度实验物理设计及模拟

神光 II 装置的三倍频激光输出能量约为 2.5kJ 。在这样的低能量条件下,如何在干净的环境中产生均匀的具有较高温度的等离子体样品供实验所用,需要创新的靶设计思想。激光能量低,所以黑腔的尺寸必须小,否则会由于黑腔辐射温度低而无法产生高温等离子体样品。黑腔的尺寸小,必须采取有效措施控制杂散激光和高温黑腔等离子体进入样品等离子体区,干扰测量结果。为此,利用 LARED 系列程序对辐射不透明度实验进行了理论设计,提出了如图 6 所示的实验理论方案。图中 II 区为 CH 泡沫,作用类似一个过滤器,阻止高温黑腔等离子体和杂散激光,但允许辐射通过并加热待测样品,这样解决了干净环境创造问题。有了这个过滤器,黑腔尺寸就可以小,入射激光能量低,也可以产生高辐射温度。2006 年,在神光 II 装置上完成了该实验,实验结

果表明,测量环境是干净的,产生的等离子体样品温度约为 95eV,密度为 25mg/cm³,是目前公开发表的同类实验所获得的最高温度。

这个实验的模拟分四个步骤,利用 RT3D, LARED-R 和 RDMG 3 个程序完成,其计算流程如图 6 所示。首先,用三维辐射运输 RT3D 程序计算了从激光加源区(区域 I)进入 CH 泡沫的辐射流 F₁;以 F₁ 作为边界条件,用二维辐射运输程序 LARED-R 计算辐射在 CH 泡沫中的传输,得到出泡沫的辐射流 F₂;再用 RT3D 程序对区域 III 进行模拟,给出进入样品的辐射流 F₃;最后用一维辐射运输流体程序 RDMG 计算样品状态随时间的演化。这个研究充分展示了数值模拟在激光聚变物理研究中的作用,同时也充分展示了激光聚变物理研究的特点:理论、数值模拟与实验结合,辐射流 F₁ 就采用实验结果进行了标定。

5 新一代数值模拟程序的发展

物理研究对数值模拟能力提出了很高的要求。现在的 LARED 系列程序以及其他的应用程序在物理研究中发挥了重要的作用。但是,目前的数值模拟能力远远不能满足物理研究的需要。为此,我们将分别针对黑腔、辐射运输和内爆问题研制的 LARED-

H、LARED-R 和 LARED-I 程序的算法和模块进行集成,发展成模拟激光聚变全过程的二维 LARED 集成程序;同时将现有的二维球几何多介质欧拉辐射流体力学程序,发展成三维自适应并序程序,用于靶丸内爆过程的模拟;研制一个能够模拟自聚焦与 SRS,SBS 耦合的三维流体程序 LAP3D,用于激光等离子体相互作用研究,这是今后激光聚变研究的一项重点工作。

LARED 集成程序必须充分继承现有的 LARED 程序系列。现有的 LARED 系列程序,经过多年的努力,已具备分段模拟激光聚变关键物理过程,部分程序得到物理实验的初步考核,是集几代人智慧和经验的宝贵财富。然而,这些程序(称为遗产程序)研制较早,模块化程度低,可扩展性差,与现代高性能计算机及应用软件的发展趋势不相适应。要想实现激光聚变全过程的数值模拟,需要革新应用程序研制的思路,创新应用程序的实现方法,采用现代软件工程技术,适应计算机发展趋势。为此,经过数年的探索,我们明确了研制的思想:根据高性能计算机的体系结构与物理问题的主要特点,研制并行自适应结构网格应用支撑软件框架;在该框架上实现 LARED 系列程序的集成,将它们升级为可持续发展的新一代并行应用程序,同时加速新的应用程序研制,实现数值模拟能力建设的跨越式发展。

整体二维局部三维激光聚变程序

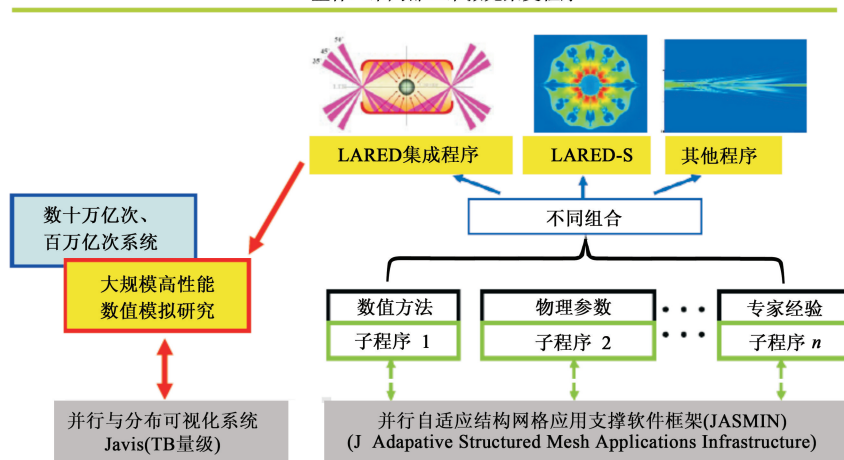


图 7 新一代激光聚变并行程序实现的技术路线及程序结构

新一代并行应用程序发展的技术路线及程序结构见图 7。底层是基于 LARED 系列程序特点设计的并行自适应结构网格应用软件支撑框架,采用面向对象的并行软件构建技术,封装程序中与物理问题无关的具有共性的自适应结构网格、核心数据结

构、数据通信、计算方法、高性能算法和并行计算技术,提供规范的软件标准接口。图中的第二层是与问题(物理模型、边界条件、物理参数等)相关的、包含个性计算方法、高性能算法与专家经验的应用模块或子程序,可以是遗产程序中的成熟模块,也可以是

新研制的模块,通过标准接口函数集成到软件支撑框架上.把这些模块进行不同的组合,就形成一系列新一代并行应用程序(如图中的最顶层所示).同时,数值模拟产生的大规模数据场,通过框架集成的格式规范的标准输出函数,可以快速地实现并行与分布可视化,便于物理学家揭示新的物理规律.

采用这种先进的软件构建技术,不仅能有效地解决遗产程序可扩展性差和维护困难等难题,而且从根本上改变了以往手工作坊式的编程方式,为多人共同研制应用程序提供了良好环境,并且使得计算方法研究人员和应用程序开发人员分别专注于计算方法和数值模拟本身的科学问题,而不必关心与物理、数学无关的并行实现技术等问题,有利于吸纳国外先进的计算方法,避免了重复劳动,缩短了应用程序研制周期.

根据上述思想,北京应用物理与计算数学研究所 2004 年开始以激光聚变应用程序研制为牵引,进行了并行自适应结构网格应用支撑软件框架(简称“JASMIN”)的研制,并于 2006 年研制成功 JASMIN 框架 1.0 版,现已发展到 1.5 版.目前已经有 5 个程序(LARED-P、LARED-H、LARED-S、LARED-R 和 RT3D)移植到 JASMIN 框架上,移植到 JASMIN 框架上的程序具有并行和自适应功能,基本实现了程序的更新换代.通过对这些程序的考核,我们证明了基于 JASMIN 框架发展新一代程序的途径是可行的.在此基础上,LARED 程序集成工作正在紧张有序地开展.

6 挑战性问题

实现激光聚变全过程的高科学置信度的数值模拟是我们的目标,虽然已经取得了一系列的进展,但是还有很多挑战性的问题有待解决,既有物理建模、数值计算方法和物理参数方面的问题,也有程序软件研制方面的问题.下面简要介绍物理建模和数值计算方法方面的关键问题.

激光与等离子体相互作用的物理建模包括两个方面:一是激光在大尺度等离子体中传播的流体模型,涉及波-波、波-粒子相互作用的自聚焦,SRS 和 SBS 过程的相互耦合;二是在激光聚变整体模拟中,如何考虑激光与等离子体相互作用的影响.激光与等离子体相互作用与等离子体状态密切相关,目前简单扣除受激散射激光能量的处理方式,不能反映对辐射驱动对称性的影响.

电子热传导是激光聚变中的一个重要的能量输运机制,主要发生在临界密度附近,它的作用是进一步加热和烧蚀高密度等离子体.电子热传导的计算至关重要:对于直接驱动,它影响激光的吸收和靶丸的内爆;对于间接驱动,它影响激光能量沉积分布和 X 射线转换效率.在激光聚变中,由于电子温度的空间尺度与对电子热流贡献最大的那群电子的碰撞自由程可以比拟,经典的 Spitzer-Harm 热传导近似已不适用,实际的电子热流远远小于 Spitzer-Harm 热传导近似给出的理论预计,也就是电子热传导受阻.导致电子热传导受阻的本质是电子分布函数偏离 Maxwell 分布,所以要正确计算电子热流需要采用动力学的方法.电子热流的动力学计算自身就是一个不简单的问题,要耦合在整体模拟中更是复杂.

非平衡辐射流体力学模拟需要自治计算非平衡原子过程.目前计算中广泛采用的是平均原子模型,它具有计算量小、容易与流体力学耦合的特点,对于计算平均电离度和 X 射线转换效率(或能量)是十分有效的,但无法给出精确的能谱信息,难以满足辐射输运计算的要求.细致的离子组态模型原则上能够提供足够精确的能谱信息,但计算量难以承受.因此,目前迫切需要发展适合辐射流体力学计算的平衡原子过程的物理模型.另外,平均原子模型中如何描述双电子过程也是一个没有解决的理论问题.

激光聚变过程中物质从固态变化到高温等离子体状态,前面给出的电子、离子温度脱离的辐射流体力学方程组只适用于等离子体条件,目前在一定的处理下强行用于非等离子体状态,带来的一个是如何给出电子和离子的状态方程,它们实际上是无法区分的.因此,需要研究从固态到高温等离子体状态全区域的辐射流体力学物理建模问题,且必须与状态方程描述综合考虑.

低密度气体采用流体描述的适应性也是一个值得关注的问题.考虑两团气体对碰,按流体描述,气体相碰后,气体运动受阻,交界面速度为零,气体动能转变为内能,温度升高,同时在气体中产生冲击波.如果从分子动力学角度来看,两团气体的分子或原子要相互对穿,之间会形成一个混合区,其宽度具有碰撞自由程尺度,如果气体密度高,自由程短,混合区宽度远小于气体尺度,流体近似是合适的.但如果气体密度足够低,混合区宽度与气体尺度相当,显然流体近似是不成立的.NOVA 激光装置的等离子体对碰实验^[18]表明,单流体 LASNEX 计算的离子

温度比实验高得多. LARED-H 模拟填充低密度气体的黑腔,发现离子温度异常高,理论分析认为是冲击波引起升温. 关键原因是在小尺度低密度等离子体中,流体近似是不合适的. 这一现象带来的问题是,黑腔气体中的冲击波对内爆靶丸压缩(特别是对称性)是否有影响. 另外,点火靶丸中心的 DT 气体是主燃料层 DT 冰的饱和蒸气,密度非常低. 在冲击波进入气体的初期,流体近似也是不适用的,会影响靶丸压缩状态. 因此,在流体模型局部(时间和空间)失效时,需要考虑原子扩散效应,改进流体的建模.

强耦合等离子体中的 α 粒子输运的建模问题. 当点火靶丸被压缩后,形成一个低温高密度的主燃料层包围着密度相对低的中心热斑,主燃料层库仑对数 $\ln\Lambda_{ae} < 1, \ln\Lambda_{ai} \sim 9$,热斑中 $\ln\Lambda_{ae} \sim 3, \ln\Lambda_{ai} \sim 10$. 一般认为, $\ln\Lambda > 10$ 是弱耦合等离子体,带电粒子间的多体库仑相互作用可以近似为两体相互作用的叠加,可用 Fokker-Planck 方程描述. 而强耦合等离子体是一个多体强关联问题,目前还没有很好的解决方法. 另外, α 粒子输运与流体耦合的建模也是一个重要的问题.

多介质大变形问题是二维和三维辐射流体力学计算的难点,由于它与物理问题、实际构型等因素密切相关,迄今没有得到很好的解决. 单独计算多介质问题或大变形问题,没有不可克服的困难,困难的是既有多介质又有大变形,而激光聚变恰恰是多介质与大变形共存,并且要求计算针对实际的构型,达到定量正确. 拉氏方法计算物质界面很方便,但网格随流体变形导致计算失败. 欧拉方法适合于计算大变形问题,但处理多介质界面不够精细. 尽管随着计算机技术的发展,采用高精度格式被认为有可能改善物质界面的计算精度,但对于物质密度和辐射性质差别很大的情况,网格必须分得足够小以至于实际上不可行. 解决多介质大变形问题的可能途径有两个:一是采用自适应网格细分(AMR)技术实现欧拉计算. AMR 的实质就是物理需要细致的区域用细网格计算,其他区域仍用粗网格计算;另一个解决途径是采用任意拉氏-欧拉(ALE)方法. 它是一种拉氏和欧拉结合的方法,既不要求网格固定在流体上,也不要求网格固定在实验室坐标系上,网格可以根据需要进行调整. 因此,在计算中变形小的区域用拉氏网格,变形大的区域用欧拉网格,中间区域采用 ALE 网格过渡. 无论哪种途径都是和问题相关,控制 AMR 和 ALE 的判据与物理过程密不可分,应具体问题具体分析,采用合适的方法、途径和判据.

随着计算机以十年千倍的速度发展,计算机的体系结构变得异常复杂,应用程序从串行向并行转变,程序结构变得相当复杂,给应用程序的发展带来了前所未有的挑战. 要高效用好计算机,完全发挥计算机的能力,必须解决两个瓶颈问题,即应用程序研制效率(或周期)和运行效率. 这方面的问题将在本期本专题的另一篇文章中讨论.

7 结束语

国际激光聚变向着点火目标稳步迈进,计划 2010 年开始进行点火实验演示. 激光聚变物理研究离不开科学计算,并对科学计算提出了很高的要求. 发展激光聚变的科学计算,不仅是激光聚变研究本身的需求,也能推动我国科学计算在其他领域中的应用. 数值计算方法和程序研制方法具有较好的普适性,在激光聚变应用程序发展的需求牵引下诞生了 JASMIN 框架,由于激光聚变问题的复杂性和多学科的特点,这个框架完全可以作为其他领域科学计算应用程序的开发平台. 还有,激光聚变物理涉及很多基础学科,应用于激光聚变的应用程序只要稍加改造,就可以用于天体物理、高能量密度物理等方面的科学计算,形成有自主知识产权的应用程序软件.

致谢 本文所介绍的研究成果是北京应用物理与计算数学研究所激光聚变研究室全体同志经过多年努力获得的;JASMIN 框架是由我所计算中心研制的;实验工作是由中国工程物理研究院激光聚变中心完成的.

参考文献

- [1] Basov N G, Krokhin O N. In: Proceedings of the 3rd International Conference on Quantum Electronics (Paris, 1963, edited by Grivet P, Bloembergen N). New York :Columbia University Press, 1964. 1373
- [2] 王淦昌. 中国激光,1987,14:641[Wang G C. Chinese Journal of Lasers,1987,14:641(in Chinese)]
- [3] Nuckolls J H, Wood L, Thiessen A *et al.* Nature, 1972, 239: 129
- [4] Lindl J. Phys. Plasmas, 1995, 2: 3933;Lindl J, Amendt P, Berger R L *et al.* Phys. Plasmas, 2004, 11: 339
- [5] Zhang W Y, He X T. 15th International conference on Inertial Fusion Sciences and Applications (IFSA 2007), edited by Azechi H, Hammel B; Gauthier J. Journal of Physics: Conference Series, 2008, 112:032001;He X T. Inertial Fusion

Sciences and Applications 2001, edited by Tananka K A, Meyerhofer D D and Meyer-ter-Vehn J(Elsevier SAS, 2002)

[6] Paisner J A, Campbell E M, Hogan W J. Fusion Technol. , 1994, 26: 755

[7] Holstein P A, Chaland F, Charpin C *et al.* , Laser Part. Beams. 1999,17: 403

[8] Birdsall C K, Langdon A B. Plasma Physics Via Computer Simulation. New York :McGraw-Hill, 1985

[9] Berger R L *et al.* Phys Plasmas, 1998, 5: 4337

[10] Still C H *et al.* Phys. Plasmas, 2000, 7: 2023

[11] Krueer W. Comments on Plasma Phys. , 1979, 5 : 69

[12] 常铁强等. 激光等离子体相互作用与激光聚变. 长沙:湖南科学技术出版社,1988[Chang T Q *et al.* Laser-Plasma Interaction and Laser Fusion. Changsha: Hunan Science and Technology press, 1988(in Chinese)]

[13] 张钧、常铁强. 激光核聚变靶物理基础. 北京:国防工业出版社,2004[Zhang J, Chang T Q. Foundation of Laser Fusion Target Physics. Beijing: Defense Industry Press, 2004 (in Chinese)]

[14] Atzeni S, Meyer-ter-Vehn J. Inertial Fusion: Beam plasma interaction, hydrodynamics, dense plasma physics, Oxford :Clarendon Press, 2003

[15] 李世昌. 高温辐射物理与量子辐射理论. 北京:国防工业出版社,1992[Li S C. High-temperature Radiation Physics and Quantum Radiation Theory. Beijing:Defense Industry Press, 1992(in Chinese)]

[16] Pei W B. Commun. Comput. Phys. , 2007, 2: 255

[17] Xu Y, Zhang J Y, Yang J M *et al.* Phys. Plasmas, 2007, 14: 052701

[18] Wan A S, Barbee J T W, Cauble R *et al.* Phys. Rev. E, 1997, 55: 6293



• 书评和书讯 •

科学出版社物理类重点书推荐

书名	作(译)者	书名	作(译)者
高等量子力学	张永德	非线性声学(第二版)	钱祖文
量子力学	张永德	现代热力学(英文版)	王季陶
量子信息物理原理	张永德	等离子体动力学及其在太阳物理中的应用	黄光力
陀螺力学(第二版)	刘延柱	经典电动力学	曹昌祺
微分几何入门与广义相对论(下册)	梁灿彬、周彬	信息光学理论与计算	李俊昌、熊秉衡
10000个科学难题物理卷	编委会	亚稳金属材料	胡壮麒
铜氧化物高温超导电性实验与理论研究	韩汝珊	超快和纳米光学	张新平
半导体自旋电子学	夏建白等	全息干涉计量—原理和方法	熊秉衡
结构相变物理(第二版)	Fujimoto, M	量子统计力学(第二版)	张先蔚
实用量子力学	Flügge, s	输运理论(第二版)	黄祖洽
经典力学新基础(第二版)	Hestenes, D	激光光散射谱学	张明生
相变和晶体对称性	Izyumov, Y. A	量子力学(卷 I, 卷 II)(第四版)	曾谨言
普朗特流体力学基础(翻译)	H. 欧特尔等	拉曼光谱学与低维纳米半导体	张树霖
液晶物理学(影印)	P. G. de Gennes	路径积分与量子物理导引	侯伯元等
临界现象理论(影印)	J. J. Binney	技术磁学	钟文定
软凝聚态物质(影印)	Richard A. L. Jones	量子光学导论	谭维翰
量子力学原理(第四版)(影印)	P. A. M. Dirac	狭义相对论(第二版)	刘辽等
基本粒子物理学的规范理论(影印)	T. P. Cheng	凝聚态物理的格林函数理论	王怀玉
介观物理导论(第二版)(影印)	Y. Imry	超导、超流和凝聚体(注释版)	James F. A
纳米薄膜分析基础(影印)	T. L. Alford	现代经典光学(注释版)	Geoffrey Brooker
统计力学(第二版)(影印)	F. Schwabl	固体能带理论和电子性质(注释版)	Jone Singleton
磁性量子理论—材料的磁学性能(第三版)(影印)	R. M. White	原子物理学(注释版)	Christopher J. Foot
半导体物理电子学(第二版)(影印)	Sheng S. Li	固体的光学性质(注释版)	Mark Fox
碳纳米管—从基础到应用(影印)	A. Loiseau	凝聚态物质中的磁性(注释版)	Stephen Blundell

购书与咨询电子信箱: mlhukai@yahoo. com. cn dpyan@sina. com