



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 123 за 2016 г.



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

**Соломянная А. Д., Вичев И.Ю.**

Сравнение и анализ  
спектров плазмы железа (по  
материалам семинара  
NLTE9)

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Соломянная А. Д., Вичев И.Ю. Сравнение и анализ спектров плазмы железа (по материалам семинара NLTE9) // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 123. 27 с. doi:[10.20948/prepr-2016-123](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-123)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-123>

**Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М.В.Келдыша  
Российской академии наук**

**А.Д. Соломянная, И.Ю. Вичев**

**Сравнение и анализ спектров  
плазмы железа  
(по материалам семинара NLTE9)**

**Москва — 2016**

**Соломянная А.Д., Вичев И.Ю.**

**Сравнение и анализ спектров плазмы железа (по материалам семинара NLTE9)**

В работе представлены результаты сравнения характеристик плазмы железа, полученных по итогам семинара по неравновесной плазме NLTE9, который проводился в Париже, Франция, в 2015 г. В семинаре приняли участие более 20 кодов из 9 стран, в том числе программный комплекс THERMOS от ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Приводится краткий обзор кодов, принявших участие в семинаре, а также сравнение различных характеристик плазмы для нескольких расчетных случаев.

**Ключевые слова:** неравновесная плазма, программа THERMOS

**Anna Dmitrievna Solomyannaya, Ilya Yurievich Vichev**

**Comparison and analysis of the iron plasma spectra (based on the NLTE9 workshop)**

The results of the comparison of iron plasma characteristics obtained on the basis of the NLTE9 workshop, which was held in Paris, France, in 2015. The meeting was attended by more than 20 codes from 9 countries including code THERMOS from Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS. The paper provides a brief overview of codes and comparison of the plasma characteristics for several cases.

**Key words:** non-LTE plasma, code THERMOS

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №14-11-00699. Расчёты производились на суперкомпьютере "МВС-100К" (МСЦ РАН).

## Оглавление

Введение .....	3
Семинары по моделированию неравновесной плазмы .....	4
Краткий обзор кодов .....	6
Результаты расчетов.....	8
Моделирование эксперимента .....	23
Заключение.....	25
Литература .....	25

## Введение

Неравновесные модели плазмы активно используются в газодинамическом моделировании плазмы для проведения численных экспериментов. Для расчетов плазменных характеристик при заданных условиях используется столкновительно-излучательная модель плазмы. При условиях, которые реализуются в экспериментах, тяжело определить температуру и плотность плазмы, а также получить плазму, однородную по пространству и времени. Таким образом, единственным вариантом для верификации используемых моделей является вычислительный эксперимент и сравнение различных кодов между собой. Именно такая возможность предоставляется участникам семинаров по неравновесной плазме NLTE [1], в которых принимают участие рабочие группы из разных стран, занимающиеся моделированием неравновесной плазмы. Начиная с первого совещания, на этих семинарах, кроме сравнения кодов, предоставляется широкая возможность обсудить нерешенные физические и численные проблемы, физические эффекты в плазме, а также предложить варианты экспериментов для дальнейшего изучения.

Начиная с 2005 г., Россию на этих конференциях представляет программный комплекс THERMOS [2], разработанный в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН под руководством В.Г. Новикова. Благодаря участию в семинарах, произошел большой рывок в понимании процессов, происходящих в неравновесной плазме [3 – 5].

Последний семинар NLTE9 проводился во Франции, в Париже, в 2015 году. Организаторами семинара было предложено провести расчеты плазмы железа при заданных условиях. Результаты сравнений показали, что программный комплекс THERMOS дает результаты, близкие к ведущим мировым кодам, однако существует ряд проблем, работа над которыми ведется в настоящее время. Все расчеты характеристик неравновесной плазмы производились на суперкомпьютере «МВС-100К» [6].

## Семинары по моделированию неравновесной плазмы

Семинары NLTE представляют большой интерес для рабочих групп, занимающихся моделированием неравновесной плазмы. Краткая история семинаров приведена в таблице 1. Итогом конференции NLTE8 стала книга [13], в которой участники семинара рассмотрели различные аспекты, возникающие при моделировании неравновесной плазмы.

Всем участникам семинара предлагается провести расчеты плазменных характеристик из предложенного организаторами списка (см. таблицу 2). Во время работы семинара проводится сравнение различных характеристик плазмы при заданных начальных условиях.

Таблица 1. История семинаров по неравновесной плазме NLTE

Конференция	Год	Место проведения	Результаты
NLTE1	1996	Gaithersburg, USA	[7]
NLTE2	2001	Virtual Workshop	[8]
NLTE3	2003	Gaithersburg, USA	[9]
NLTE4	2005	Las Palmas de Gran Canaria, Spain	[10]
NLTE5	2007	Santa Fe, USA	[11]
NLTE6	2009	Athens, Greece	
NLTE7	2011	Vienna, Austria	[12]
NLTE8	2013	Santa Fe, USA	[13]
NLTE9	2015	Paris, France	

В качестве исследуемого вещества на 9-м семинаре было выбрано железо. В таблице 2 приведено описание определенных организаторами случаев для расчета характеристик плазмы железа. Как видно из таблицы 2, организаторами было предложено провести расчеты прозрачной плазмы железа с заданной температурой  $T_e$  (эВ) и плотностью  $N_e$  (см<sup>-3</sup>) электронов. Целью этих случаев было сравнение проблемы в плазме «нулевой размерности»: без учета неоднородности плазмы, граничных эффектов и взаимодействия с тяжелыми частицами. Дополнительно к этому было предложено провести расчет для плазмы с заданным планковским полем излучения, определяемым температурой излучения  $T_{rad} = 250$  эВ и коэффициентом ослабления  $c_{rad} = 0,02$ :

$$W(x) = c_{rad} / (\exp(xT_e / T_{rad}) - 1).$$

Как вариант, можно было представить расчеты для однородного шара плазмы радиуса  $R = 0,1$  см (или плоского слоя) с заданными температурой, плотностью и полем излучения. Для температур начиная от 120 эВ требовалось также провести расчет радиационных потерь на заданной сетке по энергии фотонов для двух интервалов: 1)  $\lambda = 10 - 18$  Å,  $\delta\lambda = 0,002$  Å; 2)  $\lambda = 1,5 - 2$  Å,  $\delta\lambda = 0,0005$  Å.

Таблица 2. Описание условий для расчета плазмы железа

$T_e$ , эВ	$N_e$ , см <sup>-3</sup>	$T_{rad}$ , эВ	$C_{rad}$	$R$ , см	Спектр
30	$10^{14}$	0	0	0	$\lambda = 10 - 18 \text{ \AA}$ ; $\delta\lambda = 0,002 \text{ \AA}$ (4001 точка) $\lambda = 1,5 - 2 \text{ \AA}$ ; $\delta\lambda = 0,0005 \text{ \AA}$ (2501 точка)
60	$10^{19}$	250	0,02	0,1	
120	$10^{22}$				
200	$10^{24}$				
400					
700					
1000					
2000					
4000					
Минитест - сравнение на заданном наборе конфигураций					
2000	$10^{14}$	0	0	0	$\lambda = 1,775 - 1,875 \text{ \AA}$ ; $\delta\lambda = 0,0001 \text{ \AA}$ (1001 точка)
4000	$10^{24}$				

Вторая часть расчетов касалась сравнения кодов на заданном наборе данных. По коду sFAC v.1.5.0 [14] были получены данные для ограниченного набора конфигураций, содержащих 22 уровня:

- Fe XXV:  $1s^2$ ,  $1s 2l$  и  $2l 2l'$ ,
- Fe XXVI:  $1s$  и  $2l$  состояния,
- голое ядро.

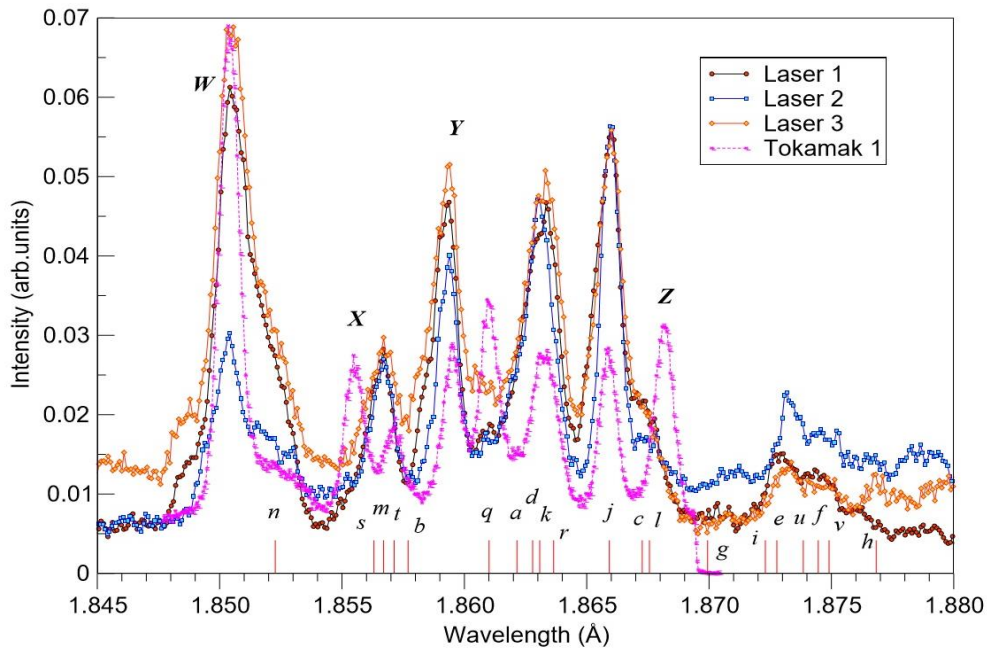


Рис. 1. Экспериментальные спектры излучения плазмы железа. Результаты предоставлены NRL (USA) и Forschungszentrum Juelich, Germany

Итоговой задачей семинара было моделирование экспериментов: 3 вариантов лазерной плазмы железа и 1 – с токамака (см. рис. 1). Экспериментальные спектры были представлены NRL(USA) и Forschungszentrum Juelich, Germany. Требовалось подобрать параметры плазмы для лучшего соответствия результа-

тов расчета экспериментам. Спектр охватывает область  $\lambda = 1,845 - 1,88 \text{ \AA}$ , где наблюдаются линии от гелиоподобных ионов железа и их сателлитов.

Исходные данные конфигураций и результаты уровней энергии и сечений для минитеста по программе FAS, а также графики экспериментов и их оцифровку можно найти на сайте конференции.

## Краткий обзор кодов

Так как для участия в конференции необходимо было предоставить расчёт хотя бы в одной заданной точке, весь набор тестовых случаев для плазмы железа был выполнен не всеми представленными на семинаре кодами. В таблице 3 представлены названия кодов, их разработчики, институт и страна, которые приняли участие в 9-м семинаре. Необходимо заметить, что некоторые группы предоставляли по несколько кодов, которые основывались на разных методах описания системы кинетических уравнений и разных приближениях, используемых при вычислениях скоростей процессов. Кроме того, некоторые из представленных кодов имели по несколько версий с разной степенью детализации исходных данных. Программный комплекс THERMOS состоит из набора программ, которые позволяют получать термодинамические и радиационные свойства как равновесной, так и неравновесной плазмы в широкой области температур и плотностей. Расчет характеристик неравновесной плазмы проводился по столкновительно-излучательной модели с использованием базы данных KIAM\_DB [15].

Специально для семинара была составлена база атомных данных железа с учетом возбуждений с уровня  $1s$ . Основная база, содержащая «полный» набор нерелятивистских конфигураций, была вычислена с помощью программы, входящей в программный комплекс THERMOS. Далее с помощью программ CATS и FAS были уточнены линии для переходов, попадающих в интервалы, необходимые для сравнения спектров. На заданной сетке по энергии фотонов посредством методики RUSAM [5] были проведены свертка детальных данных и уточнение положений линий и сил осцилляторов в «полной» базе.

При составлении системы уравнений для скоростей столкновительных процессов используются формулы Лотца [16] и Режемортера [17], скорости обратных процессов получаются исходя из принципа детального равновесия. Для процесса фотоионизации используется приближение Крамерса [18], для автоионизации и диэлектронного захвата – дипольное приближение [19].

Для проведения расчетов на основе программ, входящих в комплекс, была создана программа для суперкомпьютера «МВС-100К», позволяющая выдавать характеристики, требуемые для сравнения, в отдельный файл в процессе проведения вычислений. Из этого файла с помощью программы постобработки формировался файл в формате, необходимом для загрузки в базу данных семинара. Так как при выдаче спектров при заданных условиях необходимо учитывать только радиационные ширины линий, расчет спектров так же проводился в программе постобработки.

Таблица 3. Коды, по которым были предоставлены расчёты на 9-м семинаре

Название кода	Разработчик(и)	Институт	Страна	
FLYCHK	Hyun-Kyung Chung	IAEA	Austria	
HULCHK				
CANPS 15	Wu Zeqing	IAPCM	China	
SPECL				
DLAYZ	Gao Cheng, Zeng Jiaolong, Yuan Jianmin	NUDT		
AVERROES	C. Bowen, F.Gilleron, O.Peyrusse, R. Piron	CEA	France	
CORH9	M. Poirier, M.Belkhiri			
DEDALE	F. Gilleron, R. Piron			
FOCH_MU	M. Belkhiri, M. Poirier			
HULLAC_V9	D. Gilles			
OPAZ	C. Blancard			
NOHEL	A.Decoster			CEA-DIF
SEMILLAC	Y. Frank			The Hebrew University
CRAC	E. Stambulchik	Weizmann Institute of Science		
THERMOS	A. Solomyannaya, I. Vichev V.Novikov A.Grushin	KIAM	Russia	
ATLANTIS	M.A. Mendoza, R. Florido, J.G. Rubiano, J.M. Gil, R. Rodriguez, P. Martel, E. Minguez	UPM/ULPGC	Spain	
ATMED	A. Benita, E. Minguez, M.A. Mendoza, J.G. Rubiano, R. Florido, J.M. Gil, R. Rodri- guez, P. Martel			
DENIM	F. de Gaufridy	DENIM	Czech Repub- lic/Spain	
ATOMIC	C. Fontes, Honglin Zhang, J. Abdallah, J. Colgan, G.Armstrong	LANL	USA	
CRETIN	H. Scott	LLNL		
NOMAD	Yu.Ralchenko	NIST		
SCRAM	Stephanie Hansen	SNL		
SCSF				
CLOUDY	F. Guzman	University of Kentucky		
JATOM	A. Sasaki	JAEA		Japan

Представим часть кодов, с которыми будут далее приведены сравнения расчетов. По выбранным кодам были представлены результаты тестовых случаев почти для всех заданных параметров, что позволяет сравнить основные характеристики плазмы. Код ATOMIC [20] от LANL на семинаре представил 13 вариантов с разной степенью детализации баз и с учетом/без учета мультипольных переходов. При расчетах по коду использовалась собственная атомная база данных по энергиям уровней и положениям линий, а также сечений и скоростей [21 – 22]. От Sandia NL были представлены код SCSF [23], основанный на водородоподобной модели с экранировкой и UTA методикой для описания профилей линий, и два варианта кода SCRAM [24 – 25], использующего разную степень детализации. Также широко известной является программа FLYCHK



[26 – 27], которая основана на универсальных схемах атомных структур и масштабировании водородоподобных сечений процессов. Еще одним кодом для сравнения был выбран код AVERROES [28] O. Peyrusse из CEA, Франция. Код основан на собственной схеме усреднения конфигураций. В качестве исходных данных при вычислениях почти все коды используют атомные данные, полученные по программе FAC.

## Результаты расчетов

Результаты расчетов для каждого случая заносятся в базу данных, которая открывается за несколько дней до начала конференции, так что участники могут сразу исправить ошибки, например, связанные с несоответствием единиц и пр.

Сравнения результатов расчетов проводились по четырем основным группам параметров:

- а) глобальные данные: общее число ионов по кратностям, энергии уровней, средний заряд плазмы, центральные моменты, внутренняя энергия, статистический вес и радиационные потери в линиях, при фотопоглощении и при тормозном излучении;
- б) параметры по ионам: населенность и потенциал ионизации, общее число уровней и статистический вес, общие и относительные скорости всех важных процессов ионизации и рекомбинации;
- в) параметры по уровням: абсолютные и относительные заселенности, населенности по оболочкам, числа заполнения, скорости процессов;
- г) спектральные коэффициенты по процессам и, в некоторых случаях, по ионам. При выдаче спектров для случаев, перечисленных в таблице, необходимо учитывать только радиационные ширины линий. Для описания эксперимента можно учитывать все механизмы уширения.

По причине того, что база данных по расчетам закрывается через 2 месяца после окончания конференции (предоставляется время на исправление ошибок), все сравнения, приведенные в препринте, содержат данные программы THERMOS, которые были получены на момент закрытия базы.

По коду THERMOS были предоставлены расчеты только при заданных температуре, плотности и поле излучения. Несмотря на то что в комплекс программ THERMOS входят программы для расчетов плоского, цилиндрического и сферического слоев плазмы, оказалось сложно организовать выдачу в требуемом формате.

На рисунках результаты расчетов подписаны только для кода THERMOS, результаты по остальным кодам обозначены цифрами. Результаты, полученные по одной программе, на всех рисунках имеют один и тот же номер. Для сравнения были выбраны детальные программы ATOMIC, FLYCHK, SCRAM и коды SCSF и AVERROES, использующие разные методики усреднения уровней.

На рис. 2-4 приведена средняя степень ионизации в прозрачной плазме железа при разной плотности электронов  $N_e$  в зависимости от температуры. Можно заметить, что в основном результаты имеют схожее поведение. Основные отличия между расчетами наблюдаются в корональной плазме ( $N_e = 10^{14}$  1/см<sup>3</sup>) в области ионизации оболочки с главным квантовым числом  $n = 3$  (ниже  $T = 200$  эВ). В плазме, близкой к равновесной ( $N_e = 10^{22}$  1/см<sup>3</sup>), код THERMOS дает заниженную ионизацию по сравнению со всеми остальными кодами. Это объясняется тем, что при проведении вычислений не используется обрезание вклада связанных состояний. В остальных кодах, как правило, для учета плотностных эффектов используют кулоновскую поправку Стюарта-Пьятта [29].

На рис. 5 приведены радиационные потери в прозрачной плазме при плотности электронов  $N_e = 10^{19}$  1/см<sup>3</sup> и разных температурах. Из рисунка можно видеть, что общее поведение радиационных потерь при температурах выше 60 эВ одинаково по всем кодам и дает величины одного порядка. Для вычисления внутренней энергии (эВ/атом) используется формула

$$E_{\text{int}} = \sum_{ks} \frac{E_{ks} n_{ks}}{N_i} - E_0,$$

где  $n_{ks}$  – концентрация иона с зарядом  $k$  и энергией  $E_{ks}$  (эВ),  $N_i$  – плотность ионов,  $E_0$  (эВ) – точка отсчета, для которой, как правило, используется энергия основного состояния нейтрального атома. Из рис. 6 можно видеть, что все коды дают похожее поведение внутренней энергии. Значения внутренней энергии были представлены не всеми кодами.

На рис. 7 представлено общее число учитываемых уровней в разных кодах в прозрачной плазме при плотности электронов  $N_e = 10^{19}$  1/см<sup>3</sup>. Для сравнения выбраны два кода с разными методиками усреднения (число конфигураций от нескольких сотен до нескольких тысяч) и три детальных кода с числом конфигураций от  $10^4$  до  $10^6$ . При разнице в числе конфигураций, достигающих несколько порядков, полученные средние параметры имеют неплохую степень согласованности между собой.

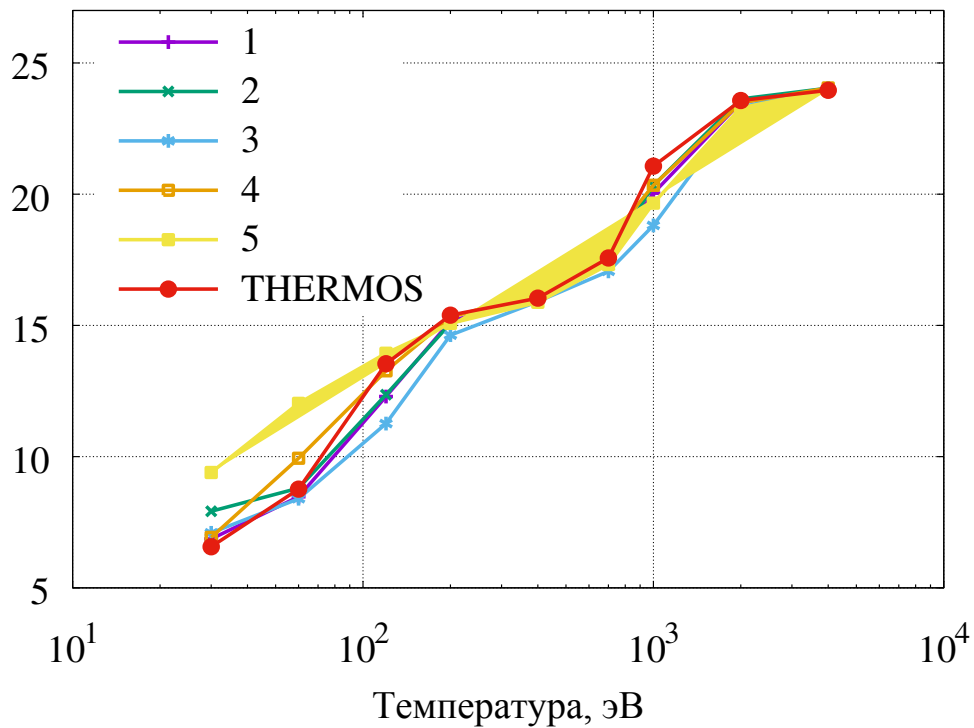


Рис. 2. Средняя степень ионизации в прозрачной плазме железа при плотности электронов  $N_e = 10^{14} \text{ 1/cm}^3$

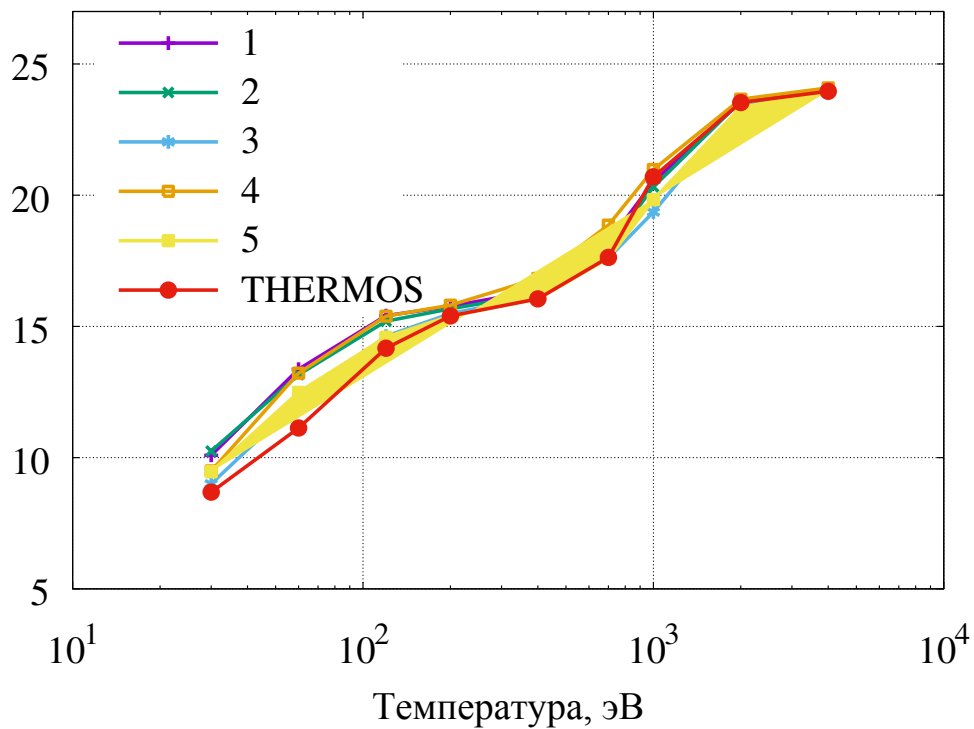


Рис. 3. Средняя степень ионизации в прозрачной плазме железа при плотности электронов  $N_e = 10^{19} \text{ 1/cm}^3$

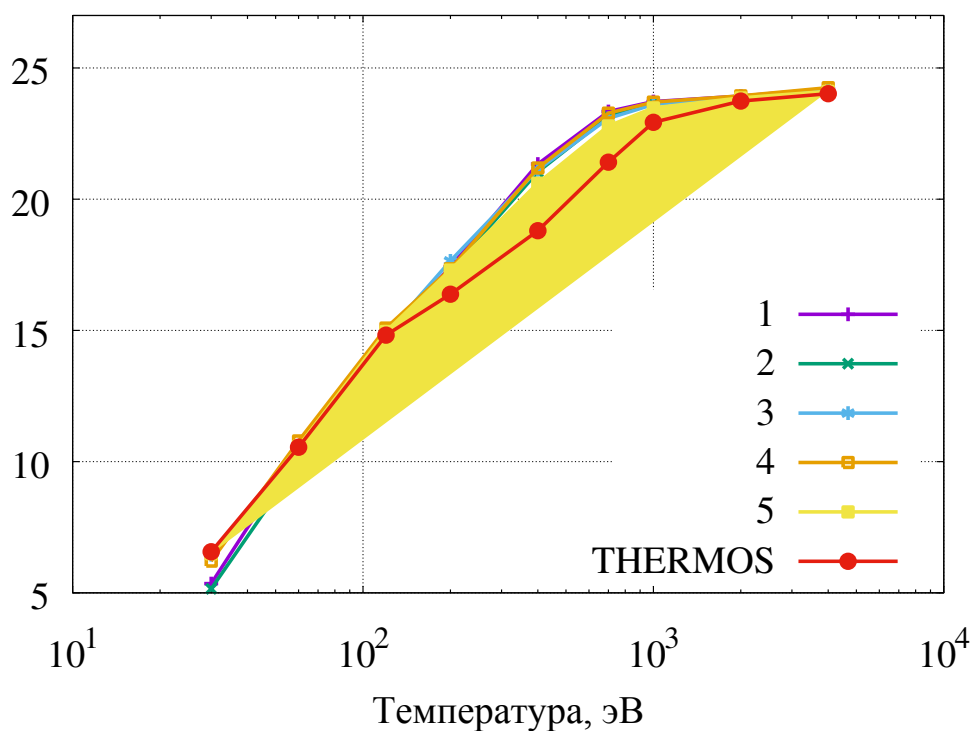


Рис. 4. Средняя степень ионизации в прозрачной плазме железа при плотности электронов  $N_e = 10^{22}$   $1/\text{см}^3$

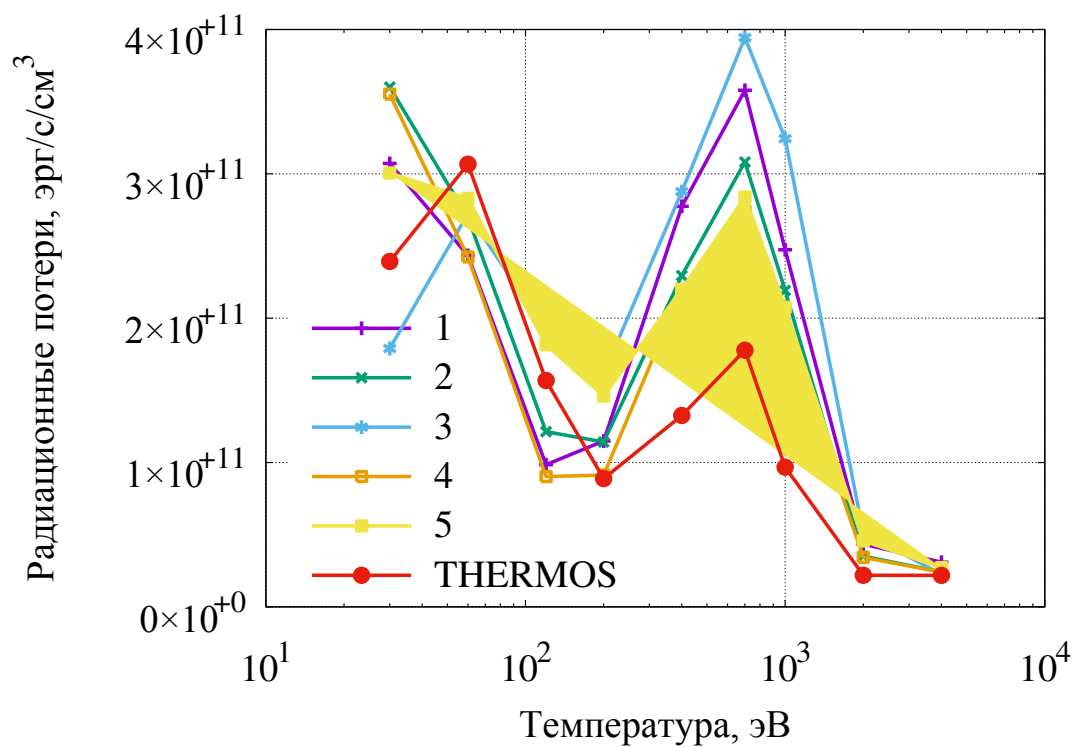


Рис. 5. Радиационные потери ( $\text{эрг}/\text{см}^3$ ) в прозрачной плазме железа при плотности электронов  $N_e = 10^{19}$   $1/\text{см}^3$

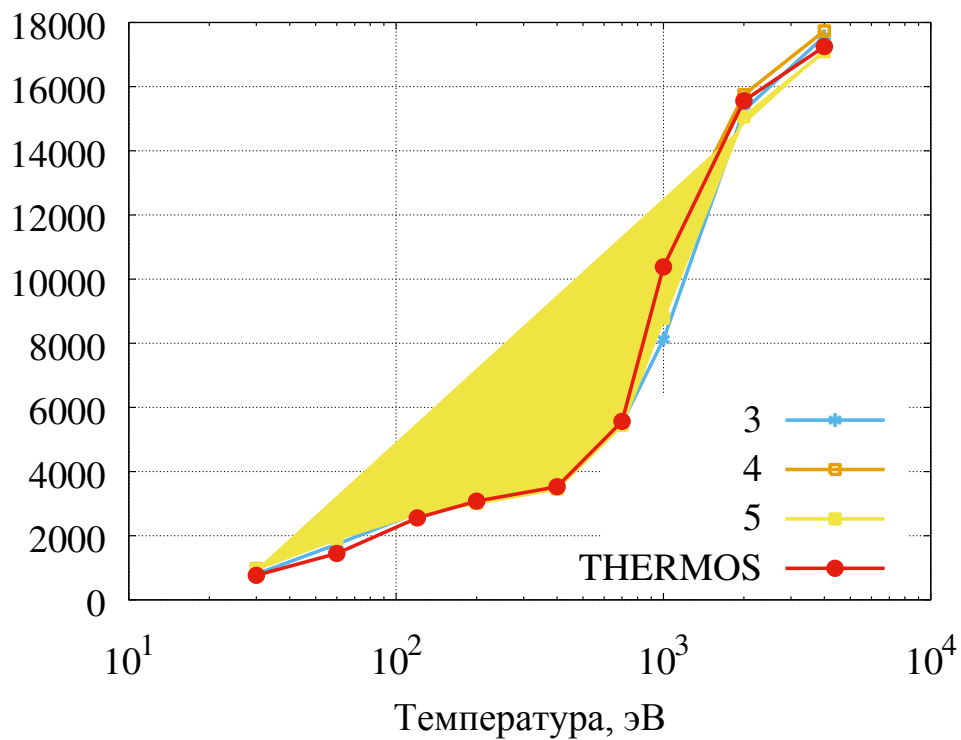


Рис. 6. Внутренняя энергия (эВ/атом) в прозрачной плазме железа при плотности электронов  $N_e = 10^{19}$  1/см<sup>3</sup>

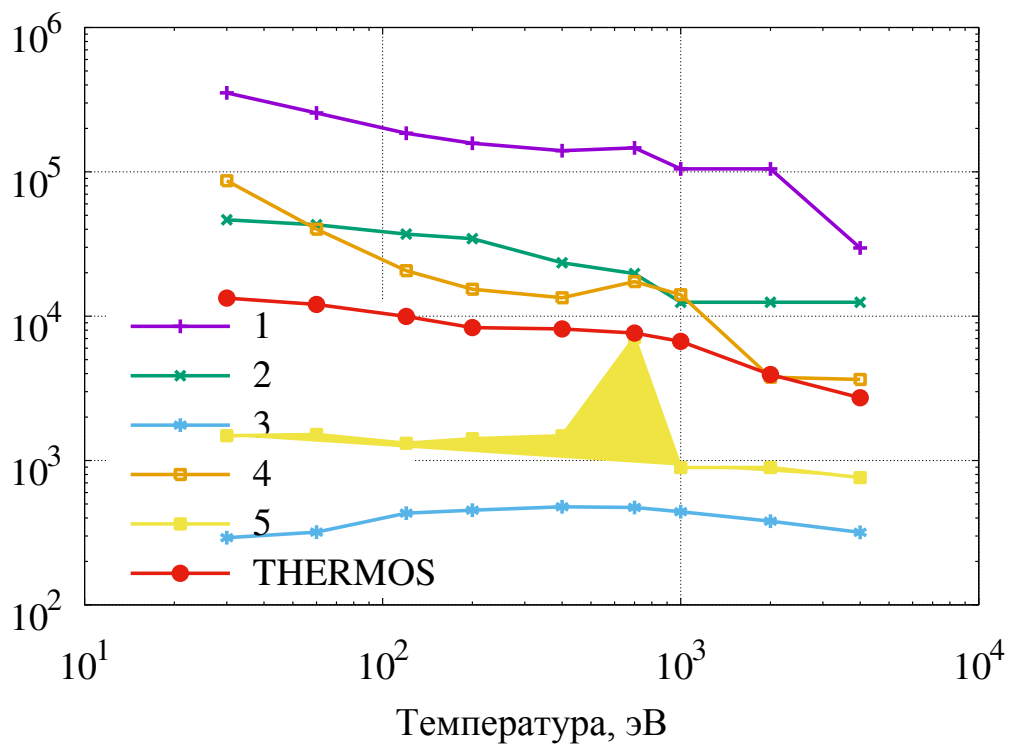


Рис. 7. Количество учитываемых энергетических уровней при плотности электронов  $N_e = 10^{19}$  1/см<sup>3</sup>

Далее необходимо сказать, что эффективные скорости ионизации и рекомбинации на самом деле являются скоростями, но не коэффициентами матрицы кинетических уравнений. Скорость ионизации  $C_k$  (1/с) представляет собой общую скорость процессов, ведущих к ионизации иона с данной кратностью

$$C_k = \sum_{ks} \frac{n_{ks}}{n_k} \sum_{s'} C(ks \rightarrow k+1, s'),$$

соответственно, скорость рекомбинации  $R_k$  (1/с):

$$R_k = \sum_{ks} \frac{n_{ks}}{n_k} \sum_{s'} R(ks \rightarrow k-1, s'),$$

где  $n_k = \sum_s n_{ks}$  – концентрация иона с кратностью ионизации  $k$ ,

$C(ks \rightarrow k+1, s')$  – скорость ионизации состояния иона  $ks$  в состояние  $k+1, s'$  (столкновительная ионизация, фотоионизация, автоионизация или их сумма)

$R(ks \rightarrow k-1, s')$  – скорость рекомбинации состояния иона  $ks$  в состояние  $k-1, s'$  (трехчастичная рекомбинация, фоторекомбинация, диэлектронная рекомбинация или их сумма).

Для сравнения скоростей процессов, полученных по разным кодам, была выбрана точка с плотностью электронов  $N_e = 10^{19}$  1/см<sup>3</sup> и температурой  $T = 700$  эВ, в которой, с одной стороны, наблюдается максимальное излучение, а с другой стороны – максимальные отличия между кодами. На рис. 8 приведено распределение по степеням ионизации. В целом все коды дают схожие распределения. Для справки в таблице 4 приведены потенциалы ионизации  $I_k$  в зависимости от кратности ионизации  $k$ , используемые в выбранных кодах. Как можно заметить, несмотря на разные исходные данные, потенциалы ионизации отличаются всего на несколько процентов. Наиболее сильное отличие наблюдается в коде 5, где, по всей видимости, была использована не совсем корректная методика усреднения уровней.

При этих условиях в плазме основную роль в определении средней степени ионизации играют процессы автоионизации и диэлектронной рекомбинации, приведем их сравнение на рис. 9-10. Как можно видеть, разница в скоростях, получаемых по разным кодам, незначительна.

На рис. 11 (интервал [10 – 18] Å) и рис. 12 (интервал [1,5 – 2] Å) приведены сравнения спектров с детальной моделью (1) и средней (2). Из рисунков можно

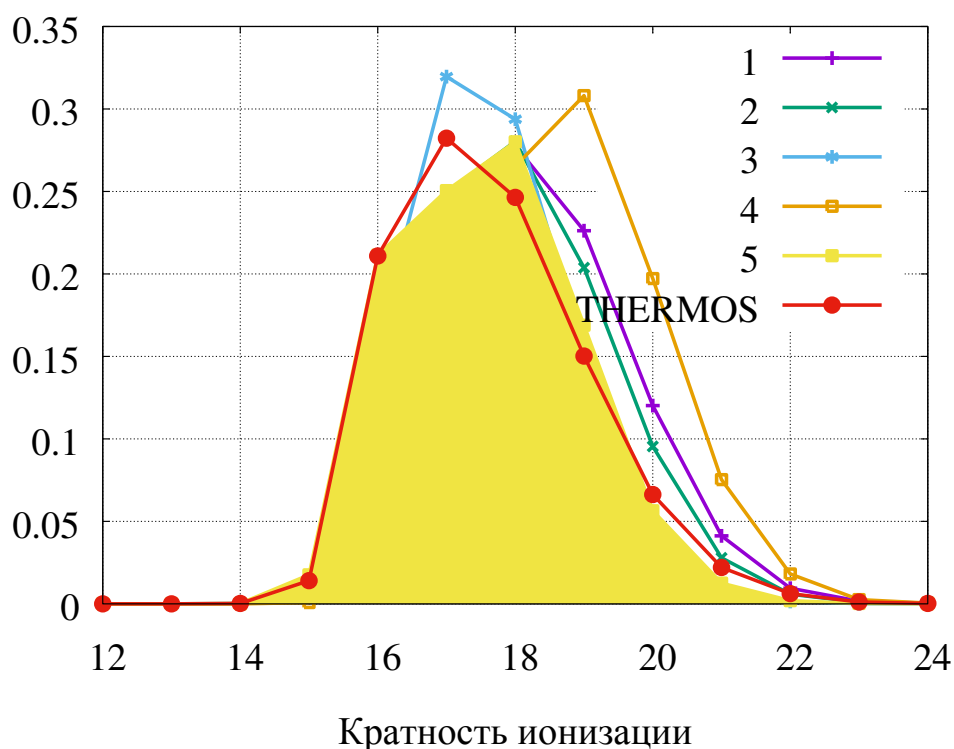


Рис. 8. Вероятность ионов различной кратности в прозрачной плазме железа при плотности электронов  $N_e = 10^{19}$  1/см<sup>3</sup> и температуре  $T = 700$  эВ

видеть, что в принципе все модели дают аналогичные результаты. Модель с усреднением описывает правильно поведение массивов линий на интервале  $[10 - 18]$  Å. Из сравнения результатов кода THERMOS с детальной моделью можно наблюдать небольшой сдвиг линий, а также перераспределение сил осцилляторов. В целом сравнение моделей показывает, что программный комплекс THERMOS при описании прозрачной плазмы не уступает по точности основным мировым кодам.

Таблица 4. Потенциалы ионизации  $I_k$  в эВ от кратности ионизации  $k$  в плазме железа

$k$	1	2	3	4	5	THERMOS
13	3,904e+02	3,894e+02	3,896e+02	3,850e+02	3,580e+02	3,886e+02
14	4,541e+02	4,531e+02	4,546e+02	4,506e+02	3,920e+02	4,521e+02
15	4,897e+02	4,888e+02	4,880e+02	4,841e+02	4,277e+02	4,877e+02
16	1,266e+03	1,265e+03	1,264e+03	1,251e+03	1,295e+03	1,262e+03
17	1,366e+03	1,366e+03	1,365e+03	1,347e+03	1,358e+03	1,362e+03
18	1,468e+03	1,467e+03	1,449e+03	1,449e+03	1,473e+03	1,464e+03
19	1,573e+03	1,572e+03	1,573e+03	1,565e+03	1,586e+03	1,570e+03
20	1,681e+03	1,680e+03	1,683e+03	1,682e+03	1,683e+03	1,678e+03
21	1,792e+03	1,791e+03	1,792e+03	1,792e+03	1,787e+03	1,789e+03
22	1,946e+03	1,945e+03	1,938e+03	1,945e+03	1,891e+03	1,943e+03
23	2,047e+03	2,047e+03	2,043e+03	2,039e+03	1,998e+03	2,045e+03

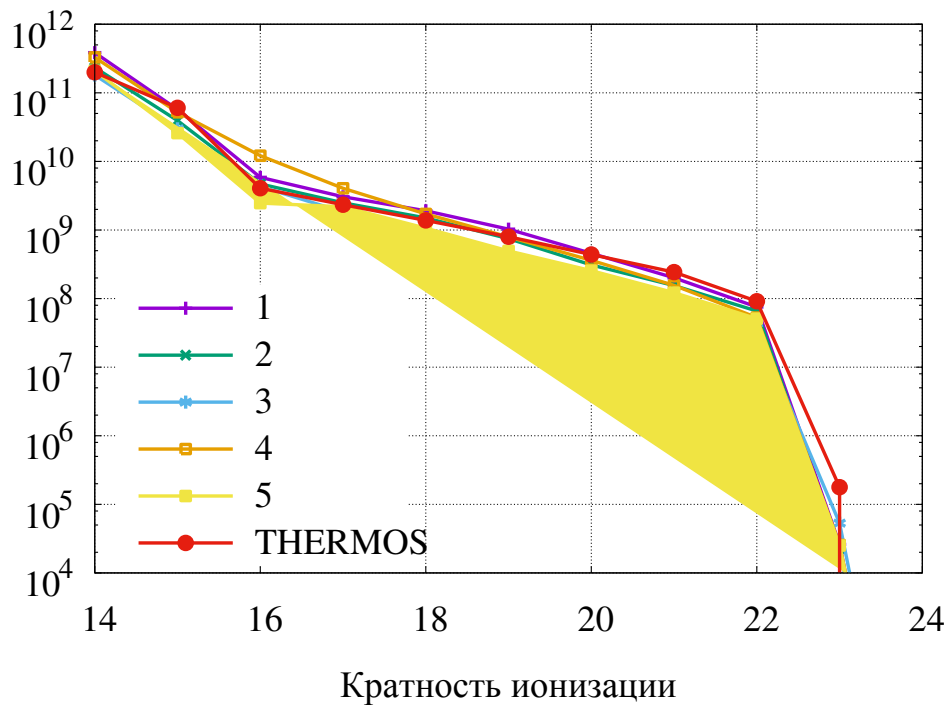


Рис. 9. Скорость автоионизации (1/с) в зависимости от кратности ионизации в прозрачной плазме железа при плотности электронов  $N_e = 10^{19}$  1/см<sup>3</sup> и температуре  $T = 700$  эВ

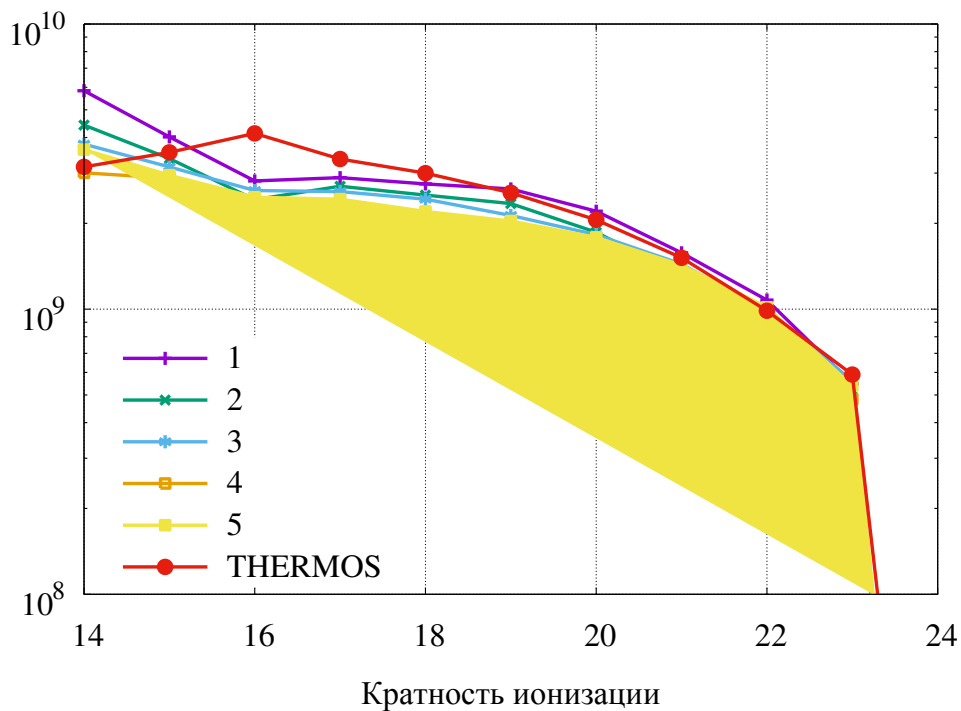


Рис. 10. Скорость диэлектронной рекомбинации (1/с) в зависимости от кратности ионизации в прозрачной плазме железа при плотности электронов  $N_e = 10^{19}$  1/см<sup>3</sup> и температуре  $T = 700$  эВ



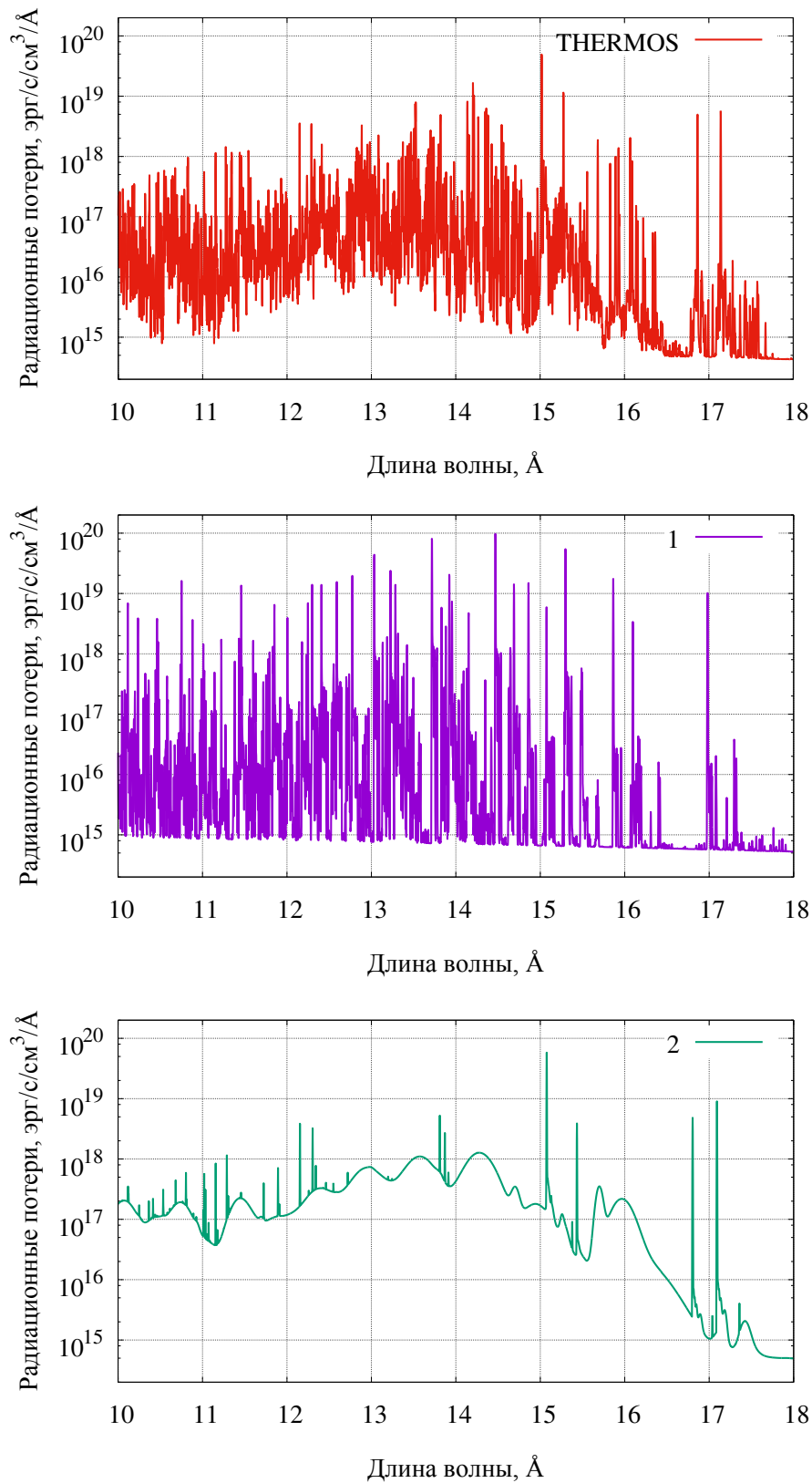


Рис. 11. Радиационные потери ( $\text{эрг/с/см}^3/\text{Å}$ ) в прозрачной плазме железа при плотности электронов  $N_e = 10^{19} \text{ 1/см}^3$  и температуре  $T = 700 \text{ эВ}$  по программе THERMOS (верхний график), детальной модели (средний) и модели с усреднением уровней (нижний) на интервале  $[10 - 18] \text{ Å}$ .

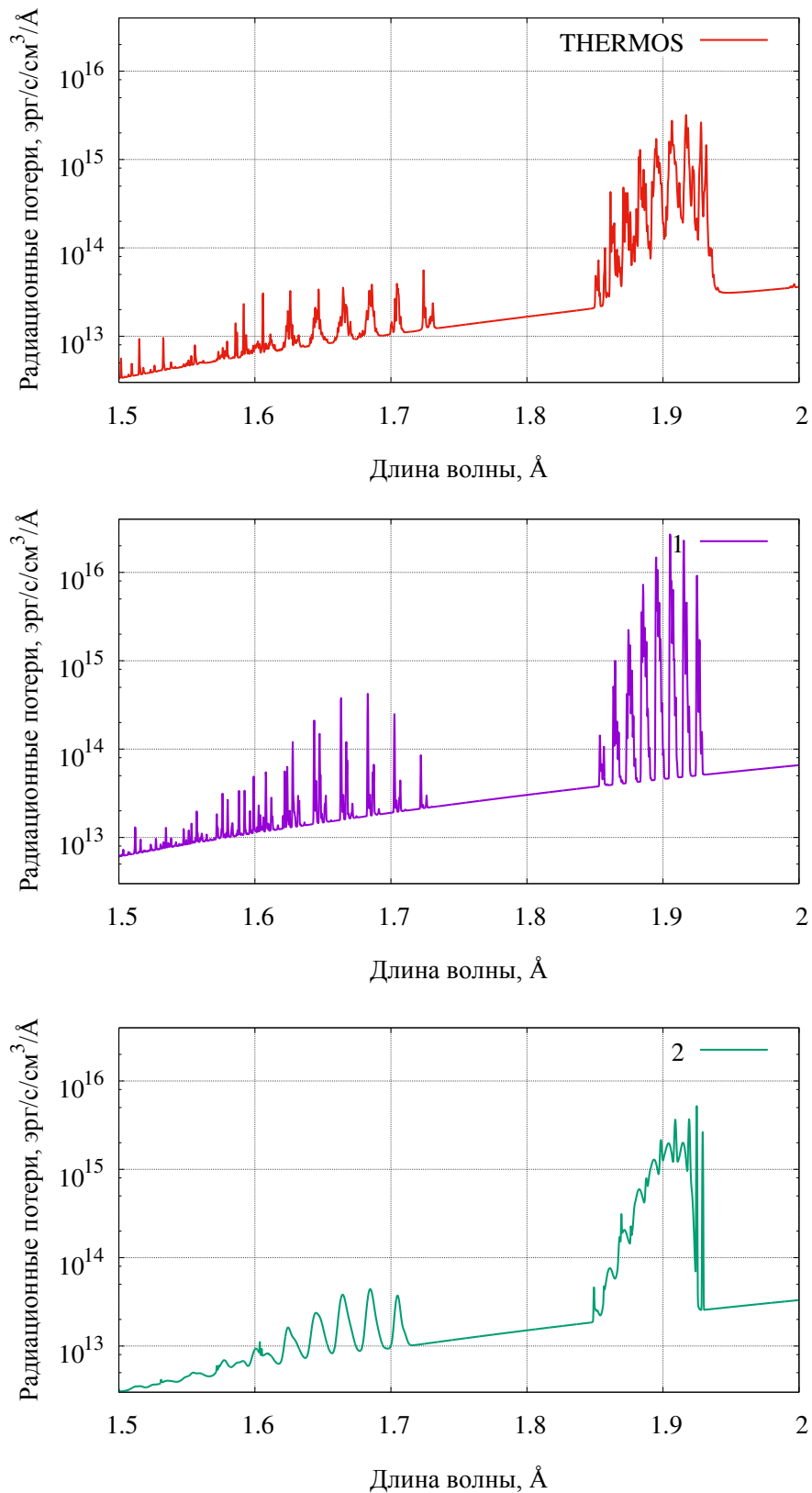


Рис. 12. Радиационные потери (эрг/с/см<sup>3</sup>/Å) в прозрачной плазме железа при плотности электронов  $N_e = 10^{19}$  1/см<sup>3</sup> и температуре  $T = 700$  эВ по программе THERMOS (верхний график), детальной модели (средний) и модели с усреднением уровней (нижний) на интервале [1,5 – 2] Å.

На рис. 13 приведена средняя степень ионизации плазмы железа при плотности электронов  $N_e = 10^{19}$  1/см<sup>3</sup> с заданным полем излучения. Как можно видеть из рисунка, выбранные коды дают близкие результаты. Для дальнейших сравнений была выбрана температура 200 эВ, так как при более высоких электронных температурах роль поля излучения незначительна. На рис. 14 приведено распределение ионов по кратностям ионизации. Как и следовало ожидать из сравнения ионизации, распределение по коду 3, дающему более низкую ионизацию, имеет максимум при другой ионизации. Распределение по коду THERMOS имеет небольшой сдвиг в сторону большей ионизации.

Сравнение радиационных потерь для плазмы с заданным полем излучения на разных интервалах длин волн приведено на рисунках 15-16. В этом случае на рис. 15 можно заметить хорошее соответствие между результатами кодов, в то время как на рис. 16 наблюдаемое отличие составляет несколько порядков. Отличие результатов, представленных по коду 1, скорее всего, связано с описанием крыльев линий. Результаты по кодам 2 и THERMOS дают схожие сечения для линий. Отличия наблюдаются в порогах фотоионизации, крыльях линий и в силах осцилляторов. Таким образом, вопрос о верификации программ при наличии поля излучения пока остается открытым.

Расчеты для шара (плоского слоя) плазмы были представлены несколькими кодами. Результаты расчетов имеют такую же тенденцию: без поля излучения и в случае, если температура поля излучения ниже электронной – результаты по всем кодам почти совпадают. При наличии поля излучения с температурой выше электронной наблюдается рассогласованность результатов. Результаты, полученные на семинаре для однородной одномерной плазмы железа, предполагается использовать для тестирования программ, входящих в комплекс программ THERMOS.

Для верификации кодов без привязки к точности вычисления атомных данных было предложено провести расчеты на заданном наборе конфигураций. Данные для энергии уровней, положения линий, сил осцилляторов, сечений и скоростей были заранее посчитаны с помощью кода sFAC. Расчеты характеристик плазмы на этом наборе данных были проведены несколькими кодами: CRETIN, DEDALE\_T, DLAYZ, HULLAC\_v9, SCRAM и SPECL. Средняя ионизация, полученная для всех точек по всем кодам приблизительно одинаковая, в то время как скорости процессов могут отличаться в несколько раз (см. рис. 17). По итогам семинара было решено продолжить практику верификации кодов без привязки к точности вычисления атомных данных.

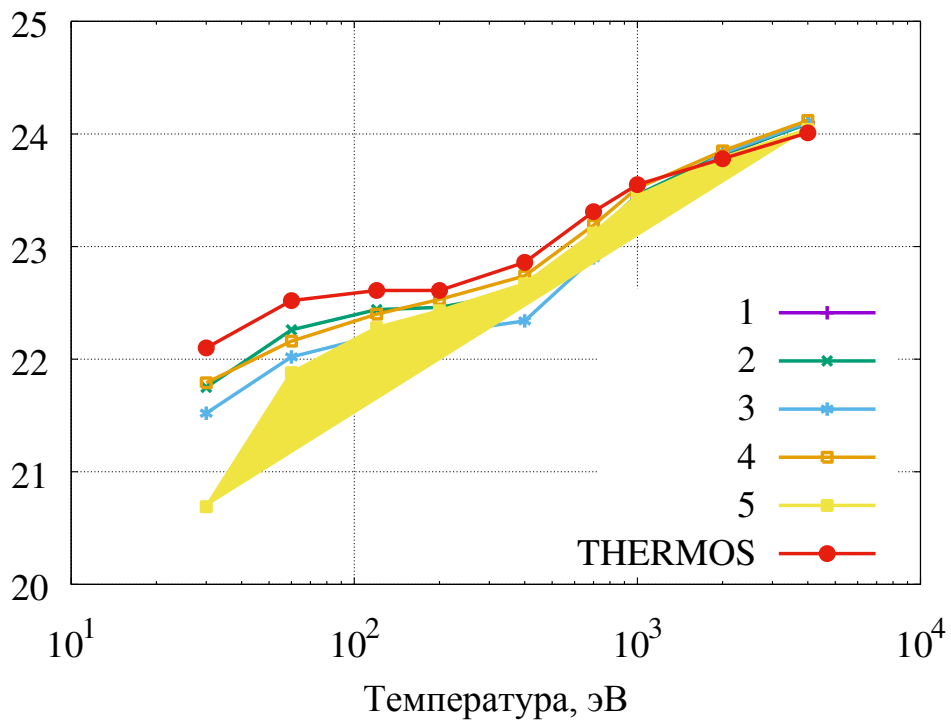


Рис. 13. Средняя степень ионизации в плазме железа в присутствии поля излучения при плотности электронов  $N_e = 10^{19} \text{ 1/см}^3$

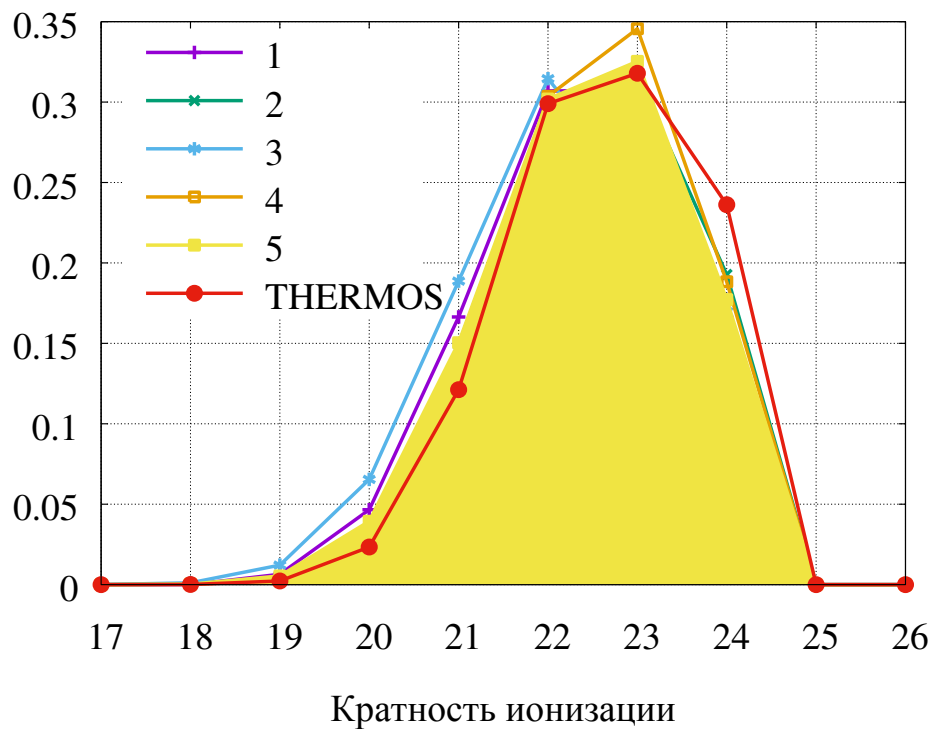


Рис. 14. Вероятность ионов различной кратности в плазме железа в присутствии поля излучения при плотности электронов  $N_e = 10^{19} \text{ 1/см}^3$  и температуре  $T = 200 \text{ эВ}$

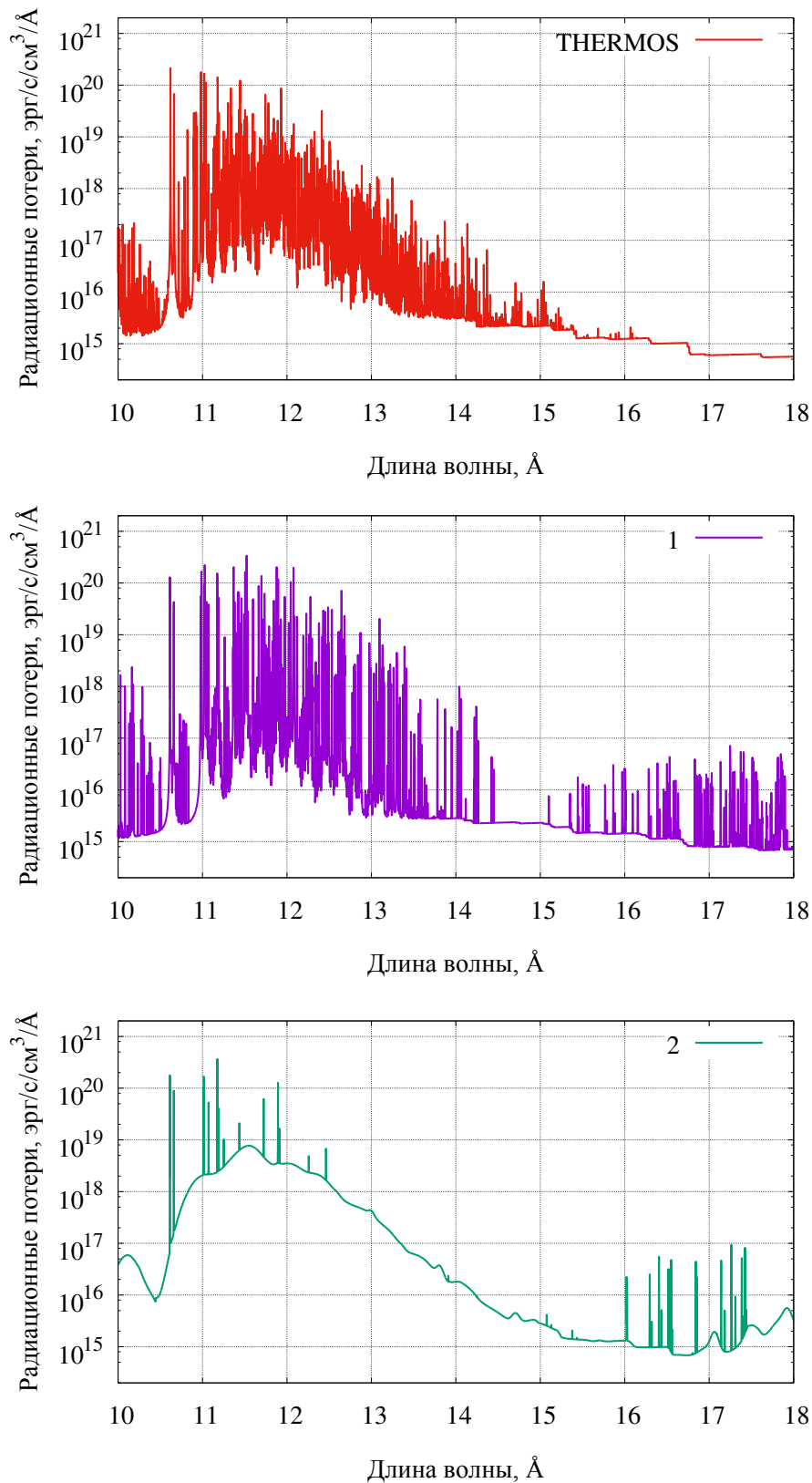


Рис. 15. Радиационные потери ( $\text{эрг/с/см}^3/\text{Å}$ ) в плазме железа в присутствии поля излучения при плотности электронов  $N_e = 10^{19} \text{ 1/см}^3$  и температуре  $T = 200 \text{ эВ}$  по программе THERMOS (верхний график), детальной модели (средний) и модели с усреднением уровней (нижний) на интервале  $[10 - 18] \text{ Å}$ .

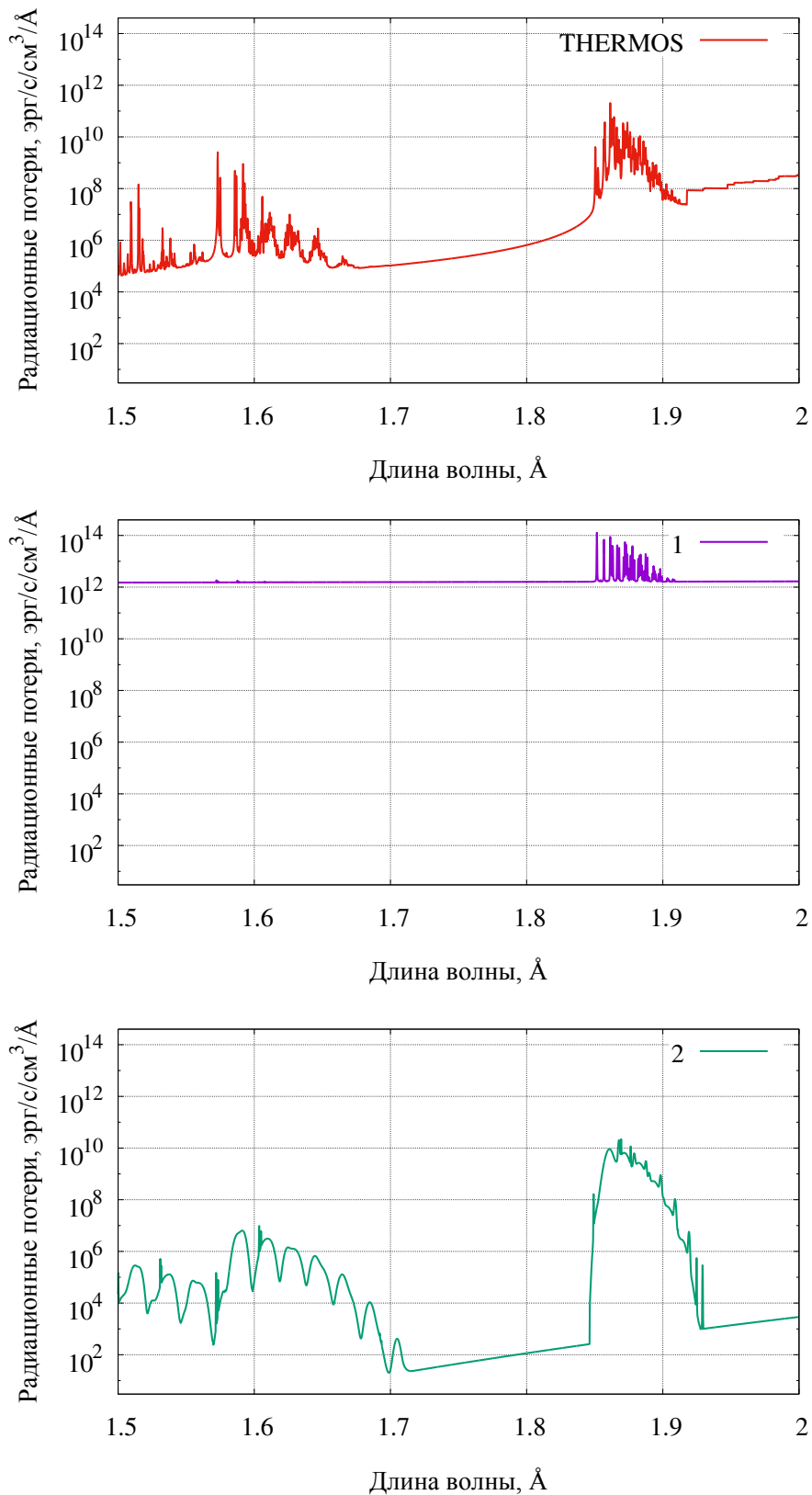


Рис. 16. Радиационные потери (эрг/с/см<sup>3</sup>/Å) в плазме железа в присутствии поля излучения при плотности электронов  $N_e = 10^{19}$  1/см<sup>3</sup> и температуре  $T = 200$  эВ по программе THERMOS (верхний график), детальной модели (средний) и модели с усреднением уровней (нижний) на интервале [1,5 – 2] Å.

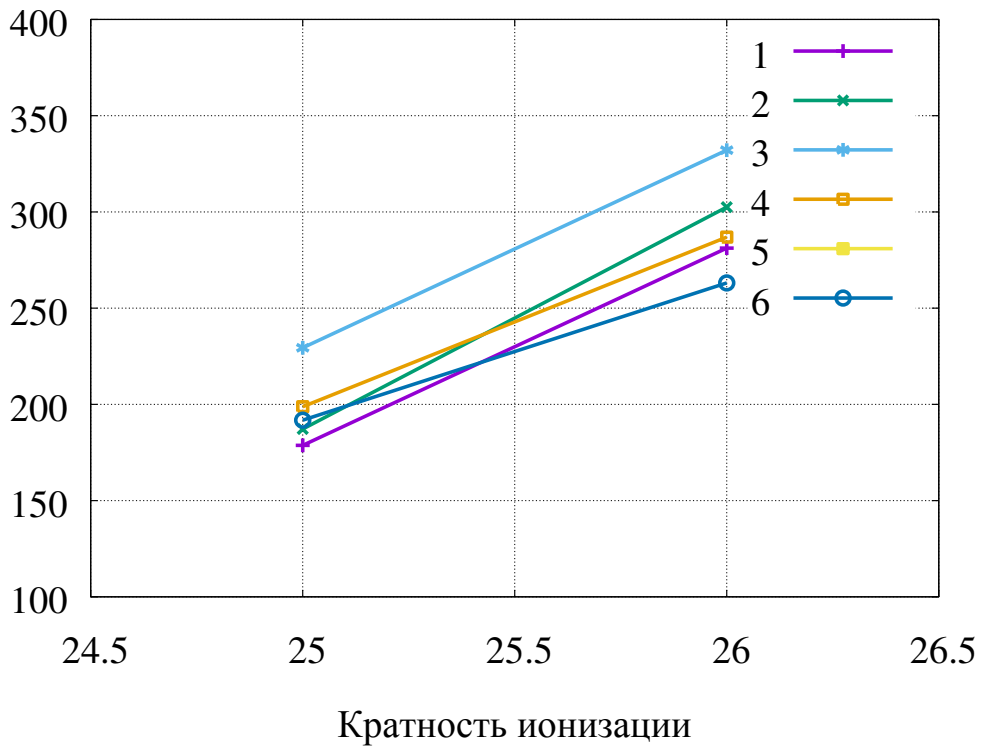
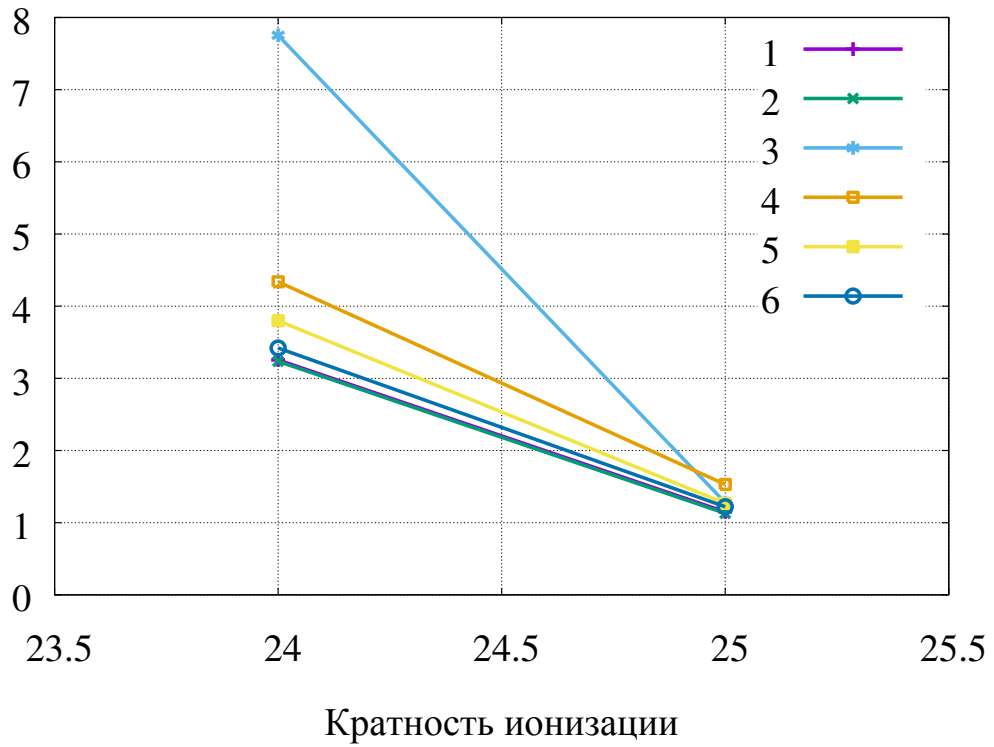


Рис. 17. Скорости ионизации (верхний) и рекомбинации (нижний) в зависимости от кратности ионизации в прозрачной плазме железа для минитеста при плотности электронов  $N_e = 10^{14} \text{ 1/см}^3$  и температуре  $T = 2000 \text{ эВ}$

## Моделирование эксперимента

При моделировании экспериментальных спектров железа (см. рис. 1) получилось довольно легко оценить диапазон температуры и плотности плазмы. В случае плазмы, полученной на токамаке, плотность электронов составляет  $N_e \leq 10^{14}$  1/см<sup>3</sup>, а температура лежит в диапазоне  $T \approx 1600 - 2000$  эВ. Для экспериментов с лазерных установок параметры плазмы лежат в диапазоне температур  $T \approx 1400 - 2000$  эВ и плотностей  $N_e \approx 10^{22} - 10^{24}$  1/см<sup>3</sup>. Дальнейшая интерпретация результатов эксперимента вызвала затруднения почти у всех участников. В результате эксперимент с установки токамак удалось смоделировать кодам: ATOMIC, AVERROES, CRETIN и NOMAD, а лазерные эксперименты – кодам: CRAC, DEDALE\_T, DLAYZ, SCRAM и SCSF.

Как видно из рис. 18, результаты расчета по коду THERMOS для спектра прозрачной плазмы при плотности электронов  $N_e = 10^{14}$  1/см<sup>3</sup> и температуре  $T = 2000$  эВ частично согласуются с результатами эксперимента на установке Токамак 1. Однако, как и у большинства участников семинара, даже такое соответствие потребовало большой работы.

В области  $\lambda = 1,845 - 1,88$  Å наблюдаются линии от гелиеподобных ионов железа и их сателлитов. Как выяснилось, при подробном анализе положение линий в эксперименте сдвинуто как по отношению к теоретическим, так и по отношению к имеющимся экспериментальным данным. Как следует из доклада одного из участников семинара, правильного положения линий не удалось получить даже с помощью настройки «best fit», входящей в программу FAC. Эта настройка позволяет рассчитать положение линий в расщепленном мультиплете, если известно положение некоторых главных линий. Таким образом, подгонка положений линий проводилась вручную для каждого мультиплета. Это позволило достаточно хорошо описать спектр прозрачной плазмы и в случае программы THERMOS. На рис. 19 приведен результат моделирования эксперимента с помощью одного из детальных кодов. Можно заметить, что между этим кодом и кодом THERMOS главное отличие состоит в силе линий мультиплета. Несмотря на то что распределение сил осцилляторов по мультиплету хорошо согласуется между кодами, использование нерелятивистских конфигураций приводит к недозаселенности или к перенаселенности отдельных уровней ионов. В случае плотной плазмы различия между детальным учетом уровней ионов и использованием метода «средней» конфигурации становится еще более заметными. Это связано, в данном случае, с существованием метастабильных состояний гелиеподобных ионов  $1s2s^1S_0$ ,  $1s2s^3S_1$  и  $1s2p^3P_2$ , которые не могут распадаться в случае учета по детальной методике, что приводит к изменению населенности других уровней и, соответственно, влияет на силу линий. Для примера на рис. 20 приведено сравнение экспериментального спектра излучения лазерной плазмы расчетного спектра по одному из кодов.

Необходимо заметить, что, если в случае моделирования эксперимента с токамака, при описании линий можно ограничиться использованием только ра-



диационной и доплеровской шириной, то в случае лазерной плазмы необходимо учитывать и другие механизмы уширения (электронное, Штарк), которые, в свою очередь, могут оказывать влияние на перераспределение сил линий.

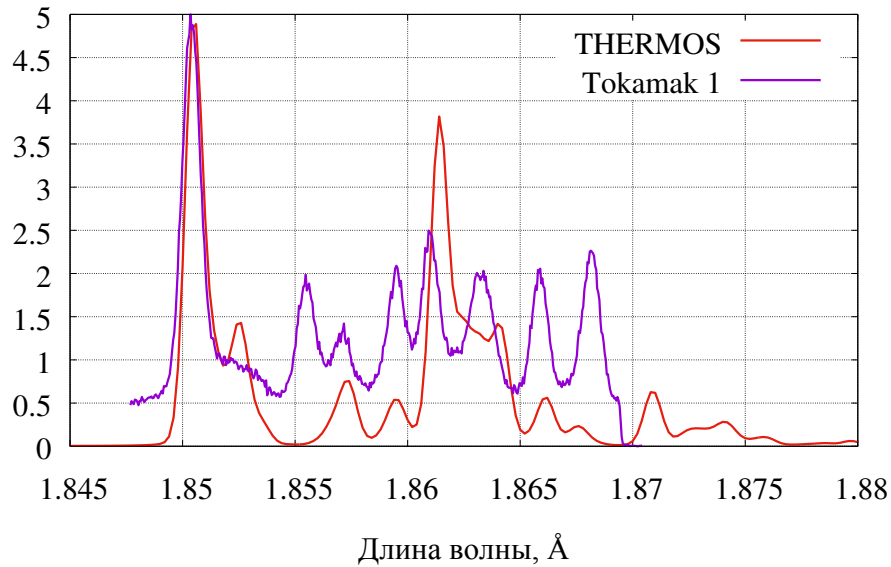


Рис. 18. Сравнение экспериментального спектра излучения железа, полученного на установке Токамак 1, и спектра прозрачной плазмы, рассчитанного по программе THERMOS при плотности электронов  $N_e = 10^{14}$  1/см<sup>3</sup> и температуре  $T = 2000$  эВ

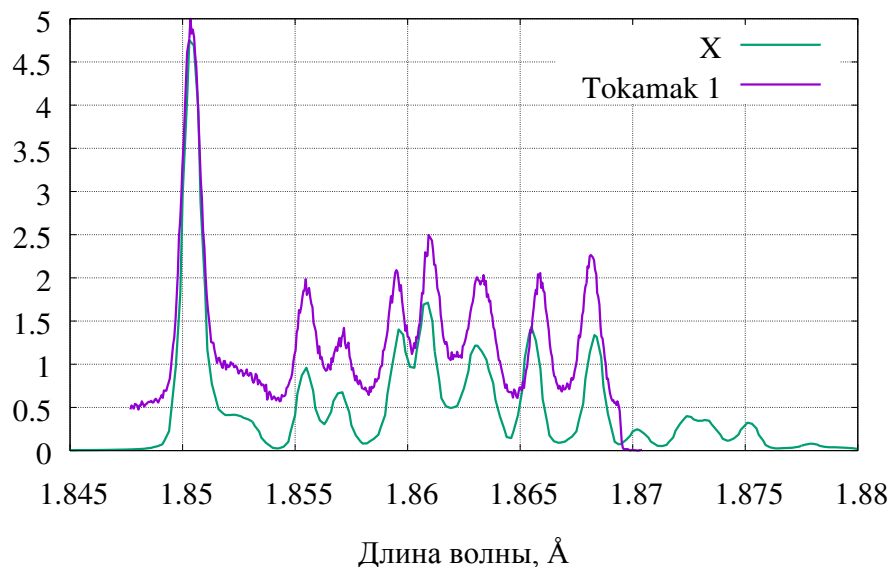


Рис. 19. Сравнение экспериментального спектра излучения железа, полученного на установке Токамак 1, и спектра плазмы по одному из кодов

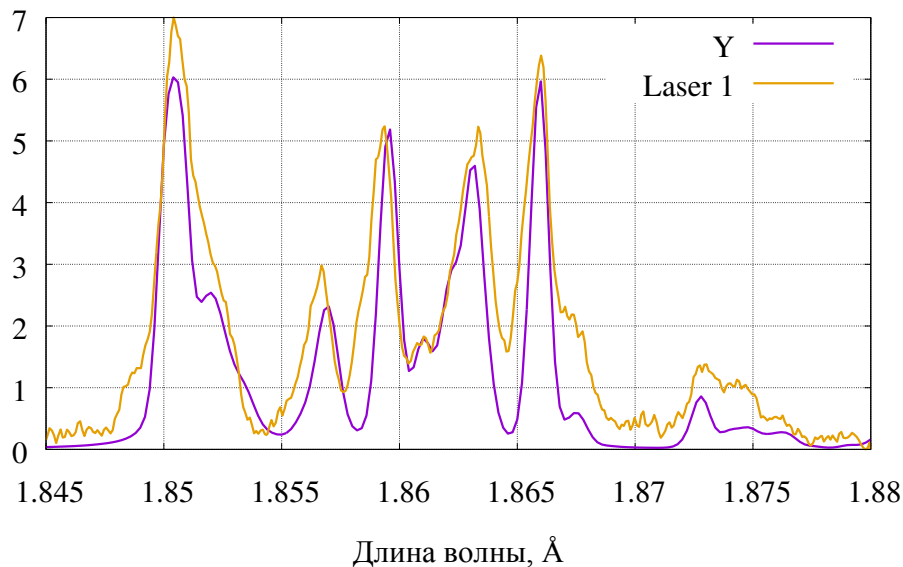


Рис. 20. Сравнение экспериментального спектра излучения железа, полученного с помощью лазера, и расчетного спектра по одному из кодов. Для сравнения были выбран эксперимент Laser 1

## Заключение

Результаты расчетов плазмы железа показали, что программный комплекс THERMOS дает результаты, соответствующие ведущим кодам мира.

Для участия в следующих семинарах потребуется предусмотреть использование атомных данных, полученных с помощью программы sFAC, что позволит верифицировать код и сравнить с другими мировыми кодами без привязки к точности вычисления атомных данных. Необходимо ввести возможность снижения потенциала ионизации при повышении плотности вещества.

По результатам сравнения с экспериментальными спектрами стало ясно, что использование среднего атома приводит к перераспределению сил линий. Из этого следует, что в частных случаях необходимо предусмотреть возможность расчета спектров с детализацией по конфигурациям.

## Литература

1. Ralchenko Y. NIST Saha Non-LTE Database [Электронный ресурс] / Y. Ralchenko. – Режим доступа: <http://nlte.nist.gov/>.
2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2013614395 от 03.07.2013 г. THERMOS: Библиотека функций для расчета радиационных и термодинамических свойств различных веществ и смесей в широкой области температур и плотностей / Новиков В.Г., Соломянная А.Д., Вичев И.Ю., Грушин А.С.
3. Calculation of tin emission spectra in discharge plasma: The influence of re-absorption in spectral lines / V.G. Novikov [et al.] // High Energy Density Physics. – 2007. – Vol. 3. – № 1-2. – P. 198-203.

4. Вичев И.Ю. Моделирование спектров излучения плазмы вольфрама / И.Ю. Вичев, В.Г. Новиков, А.Д. Соломянная // Математическое моделирование. – 2008. – Т. 20. – № 7. – С. 93-106.
5. The modeling of euv sources by considering detailed kinetics, including in-line in the gasdynamics calculation / D.A. Kim [et al.] // Mathematical Models and Computer Simulations. – 2014. – Vol. 6. – № 1. – P. 46–55.
6. МСЦ. Суперкомпьютер «МВС-100К» [Электронный ресурс] / МСЦ. – Режим доступа: <http://www.jscc.ru/hard/mvs100k.shtml>.
7. Lee R.W. Review of the NLTE kinetics code workshop / R.W. Lee, J.K. Nash, Y. Ralchenko // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 1997. – Vol. 58. – № 4. – P. 737-742.
8. Review of the NLTE emissivities code comparison virtual workshop / C. Bowen [et al.] // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2003. – Vol. 81. – № 1–4. – P. 71-84.
9. Bowen C. Comparing plasma population kinetics codes: Review of the NLTE-3 Kinetics Workshop / C. Bowen, R.W. Lee, Y. Ralchenko // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2006. – Vol. 99. – № 1–3. – P. 102-119.
10. Review of the 4th NLTE Code Comparison Workshop / J.G. Rubiano [et al.] // High Energy Density Physics. – 2007. – Vol. 3. – № 1–2. – P. 225-232.
11. Review of the NLTE-5 kinetics workshop / C.J. Fontes [et al.] // High Energy Density Physics. – 2009. – Vol. 5. – № 1–2. – P. 15-22.
12. Comparison and analysis of collisional-radiative models at the NLTE-7 workshop / H.-K. Chung [et al.] // High Energy Density Physics. – 2013. – Vol. 9. – № 4. – P. 645-652.
13. Modern Methods in Collisional-Radiative Modeling of Plasmas : Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics. Vol. 90 / ed. Y. Ralchenko – Springer, 2016. – 90.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-27514-7>
14. Gu M.F. Flexible Atomic Code (FAC) [Электронный ресурс] / M.F. Gu, E. Stambulchik. – Режим доступа: <https://www-amdis.iaea.org/FAC/>.
15. KIAM\_DB: база атомных данных для расчётов спектральных свойств плазмы / И.Ю. Вичев [и др.]. – Москва: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. – 94 с. DOI: [10.20948/mono-2016-vicev](https://doi.org/10.20948/mono-2016-vicev)
16. Lotz W. Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to  $Z=108$  / W. Lotz // Zeitschrift fur Physik A Hadrons and Nuclei. – 1970. – Vol. 232. – № 2. – P. 101-107.
17. Regemorter H. van. Rate of Collisional Excitation in Stellar Atmospheres / H. van Regemorter // Astrophysical Journal. – 1962. – Vol. 136. – P. 906.
18. Mihalas D. Stellar atmospheres : A Series of books in astronomy and astrophysics / D. Mihalas LCCN: 77013211. – San Francisco: W. H. Freeman, 1978. – 632 p.

- 19.Абрамов В.А. Перенос излучения в плазме. / В.А. Абрамов, В.И. Коган, В.С. Лисица // Вопросы теории плазмы / сост. М.А. Леонтович, Б.Б. Кадомцев. – Москва: Энергоиздат, 1982. – Вып. 12. – С. 114-155.
- 20.Cowan R.D. Interface to Los Alamos Atomic Physics Codes [Электронный ресурс] / R.D. Cowan. – Режим доступа: <http://aphysics2.lanl.gov/tempweb/>.
- 21.Mann J.B. Excitation collision strengths for iron ions calculated with a distorted wave method / J.B. Mann // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1983. – Vol. 29. – № 3. – P. 407-452.
- 22.Clark R.E.H. Integral and differential cross sections for electron impact ionization / R.E.H. Clark, J.J. Abdallah, J.B. Mann // Astrophysical Journal. – 1991. – Vol. 381. – P. 597-600.
- 23.Scott H.A. Advances in NLTE modeling for integrated simulations / H.A. Scott, S.B. Hansen // High Energy Density Physics. – 2010. – Vol. 6. – № 1. – P. 39-47.
- 24.Hybrid atomic models for spectroscopic plasma diagnostics / S.B. Hansen [et al.] // High Energy Density Physics. – 2007. – Vol. 3. – № 1–2. – P. 109-114.
- 25.Hansen S.B. Configuration interaction in statistically complete hybrid-structure atomic models 1 1 This article is part of a Special Issue on the 10th International Colloquium on Atomic Spectra and Oscillator Strengths for Astrophysical and Laboratory Plasmas. / S.B. Hansen // Canadian Journal of Physics. – 2011. – Vol. 89. – № 5. – P. 633-638.
- 26.FLYCHK: Generalized population kinetics and spectral model for rapid spectroscopic analysis for all elements / H.-K. Chung [et al.] // High Energy Density Physics. – 2005. – Vol. 1. – № 1. – P. 3-12.
- 27.FLYCHK [Электронный ресурс] / H.-K. Chung [et al.] 00006. – Режим доступа: <http://nlte.nist.gov/FLY/>.
- 28.Peyrusse O. Atomic configuration averages and non-local thermodynamical equilibrium plasma spectroscopy calculations / O. Peyrusse // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. – 1999. – Vol. 32. – № 3. – P. 683.
- 29.Stewart J.C. Lowering of Ionization Potentials in Plasmas / J.C. Stewart, K.D. Pyatt Jr. // The Astrophysical Journal. – 1966. – Vol. 144. – P. 1203.