THERMOS Toolkit: Комплекс программ и банк данных для вычисления свойств равновесной и неравновесной плазмы

Вичев И.Ю., Соломянная А.Д., Грушин А.С., Ким Д.А., Цыгвинцев И.П., Ярцев Б.Л.

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва, Российская федерация: office@keldysh.ru

THERMOS Toolkit [1] был разработан в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, в него входят банк атомных данных и комплекс программ, разработанных для расчёта термодинамических и радиационных свойств плазмы в широком диапазоне температур и плотностей.

Комплекс включает в себя коды для численного моделирования прозрачной и оптически плотной плазмы. Свойства плазмы в локальном термодинамическом равновесии (LTE) вычисляются с использованием модели самосогласованной поля Хартри-Фока-Слэтера или статистики Саха-Больцмана с атомной базой данных. Для неравновесных случаев решается система уравнений поуровневой кинетики в квазистационарном приближении для фиксированного поля излучения с использованием модели столкновительно-излучательного равновесия (CRE) на основе атомных баз данных.

Процесс расчёта баз атомных данных основан на нерелятивистской модели, дополненной процедурой построения базы данных RDCA (**R**educed **D**etailed **C**onfiguration **A**ccounting) [2]. Уточнение положений и сил спектральных линий проводится с использованием данных из детальных атомных кодов, таких как RCG [3], FAC [4] или по доступным экспериментальным данным. В дополнение к этому была разработана специальная методика для усреднения атомных данных на заданной сетке по энергии фотонов – **R**adiative **U**nresolved **S**pectra **A**tomic **M**odel или RUSAM [5], [6], которая направлена на сокращение времени расчётов с незначительным снижением точности.

Для учёта эффектов неравновесности плазмы в первом приближении можно использовать таблицы радиационных и термодинамических свойств вычисляются для двух предельных случаев – прозрачного и оптически плотного плазменного слоя. Данные таблицы совместно с интерполяцией по обобщённому escape-фактору [7] могут быть использованы в расчётах по кодам радиационной газовой динамики. Данный метод интерполяции довольно эффективен и даёт разумные результаты для широкого круга задач.

THERMOS Toolkit принимает участие в международных семинарах по сравнению кодов для расчёта свойств неравновесной плазмы [8], а полученные с его помощью результаты хорошо согласуются с другими достаточно известными во всем мире кодами.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №14-11-00699.

Литература

1. THERMOS – Software package and database. http://keldysh.ru/thermos/ru/.
2. J. Abdallah and M.E. Sherrill. The reduced detailed configuration accounting (RDCA) model for NLTE plasma calculations. High Energy Density Physics, 4(3-4):124–130, 2008.
3. R.D. Cowan. The theory of atomic structure and spectra. University of California Press, 1981.
4. M.F. Gu. The flexible atomic code. Canadian Journal of Physics, 86(5):675–689, 2008.
5. V.G. Novikov, V.V. Ivanov, etc. Calculation of tin emission spectra in discharge plasma: The influence of reabsorption in spectral lines. High Energy Density Physics, 3:198–203, 2007.
6. V.G. Novikov, K.N. Koshelev, A.D. Solomyannaya. Radiative unresolved spectra atomic model. 16th International Conference on Atomic Processes in Plasmas, Monterey, CA, 2009.
7. V.G. Novikov and A.D. Solomyannaya. Spectral characteristics of plasma consistent with radiation. High Temperature, 36(6):835–841, 1998.
8. The Non-LTE Code Comparison Workshop. http://nlte.nist.gov/.