

非均匀混合下氘氚聚变反应速率的理论研究*

沈刚¹⁾²⁾ 衷斌^{1)†} 吴勇¹⁾ 王建国¹⁾

1) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

2) (中国工程物理研究院研究生院, 北京 100088)

(2022 年 6 月 17 日收到; 2022 年 8 月 24 日收到修改稿)

激光驱动惯性约束聚变中壳层材料和聚变燃料的混合是影响聚变点火燃烧性能的关键物理问题, 聚变过程中混合物形态的演化及相应热核反应速率的物理建模直接影响数值模拟的置信度, 具有重要的科学意义和应用价值. 本文以扩散混合机制下混合形态随时间的演化规律及其对热核反应速率的影响为研究对象, 基于热力学平衡与理想气体物态方程假设, 通过解析分析与一维球几何扩散方程数值解的对比研究, 揭示了扩散混合主导下热核反应速率随混合形态演化的物理规律. 研究发现, 混合量主要通过影响燃料的体积份额直接影响热核反应速率, 由混合非均匀尺度和扩散系数共同决定的扩散时间直接影响热核反应速率的时间演化行为. 进一步利用蒙特卡罗方法直接模拟扩散过程得到的互扩散系数, 定量分析了燃料中混入低 Z 、高 Z 材料时热核反应速率随时间演化的差异, 通过与美国非均匀混合效应实验典型数值模拟结果进行对比分析, 验证了理论评估的可靠性. 本工作对我国惯性约束聚变混合效应实验的设计和改进行具有重要参考意义.

关键词: 混合形态, 非均匀混合, 热核反应速率, 互扩散系数**PACS:** 52.57.-z, 25.60.Pj, 52.25.Fi, 52.65.Pp**DOI:** 10.7498/aps.72.20221197

1 引言

激光驱动惯性约束聚变 (ICF) 的靶丸在内爆过程中, 由于壳层燃料界面的流体不稳定性的发展^[1-3], 冲击波在轻重物质界面产生的微喷、层裂^[4]以及各种工程因素, 如靶丸上的用于充注聚变燃料的充气管^[5]、靶丸的支撑结构^[6]等, 导致壳层材料混入聚变燃料中, 从而降低了中心氘氚热斑 (Hot-spot) 的温度和密度, 直接影响惯性约束聚变点火燃烧性能.

实际靶丸内爆过程中多组分混合物中的混合量、混合分布呈现复杂的演化过程, 燃料和壳层材料混合演化的精细描述原则上需要在三维流体力学框架下进行多相流模拟, 这大大增加了数值模拟的复杂性和计算规模, 工程上通常把混合物简化为

单一介质处理, 采用单介质流体力学框架模拟靶丸内爆过程. 若各种物理过程充分发展, 混合物的空间分布在计算的空间网格尺度上达到均匀分布, 则混合物相关物理建模如物态方程、辐射参数等大为简化, 有一套较成熟的理论模型. 而靶丸实际内爆过程中混合通常没有足够的时间充分发展, 聚变燃烧阶段燃料在亚网格尺度上分布的非均匀性将增加新的自由度, 产生的影响需要在相应的物理模型和参数中予以体现. 本文关注的问题是单流体框架下亚网格尺度非均匀混合对热核反应速率的影响, 其直接影响 ICF 内爆靶丸的聚变性能, 特别是在有一定自持燃烧的点火装置上混合形态的演化与力学过程耦合在一起, 更增加了问题的复杂性. 亟需发展相应物理模型描述混合非均匀程度对热核反应速率的影响.

亚网格尺度下壳层物质和聚变燃料混合的非

* 国家重点研发计划 (批准号: 2017YFA0402300) 和国家自然科学基金 (批准号: 11934004) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhong_bin@iapcm.ac.cn

均匀程度由混合形态描述, 通常包括均匀原子混合形态和非均匀混合形态, 以离子碰撞平均自由程和混合非均匀尺度比值的大小来区分. 当非均匀尺度和碰撞自由程可比或更小时, 混入物质不影响聚变燃料的空间分布, 则称为均匀原子混合形态; 当非均匀尺度远大于碰撞自由程, 即混入氘氚燃料物质宏观上出现的非均匀聚集状态, 称为非均匀混合形态, 有时也称为“颗粒”混合. 需要说明的是, 在聚变燃烧的温度密度条件下, 物质处于等离子体状态, 不存在固态的颗粒状态, 本文仅把混入物质的非均匀聚集状态形象地称为“颗粒”混合. 显然, 非均匀混合下混入的壳层物质对聚变燃料的空间分布产生影响, 其极端形态为混入物与燃料完全分离的理想“颗粒”混合形态, 即混入物质与燃料互不相溶, 各自占有部分体积.

温度均匀时, 氘氚聚变反应速率可以表示为 $R = \langle \sigma v \rangle_{DT} \overline{N_D(\mathbf{r}) N_T(\mathbf{r})}$, 其中 $N_D(\mathbf{r})$, $N_T(\mathbf{r})$ 为计算网格内氘、氚离子数密度的空间分布, 显然均匀混合下, $\overline{N_D(\mathbf{r}) N_T(\mathbf{r})} = \overline{N_D(\mathbf{r})} \cdot \overline{N_T(\mathbf{r})}$, 对于非均匀混合形态, 等式并不成立, 有此可定义热核反应速率修正因子 η 为

$$\eta = \frac{\overline{N_D(\mathbf{r}) N_T(\mathbf{r})}}{\overline{N_D(\mathbf{r})} \cdot \overline{N_T(\mathbf{r})}}, \quad (1)$$

则 $R_{\text{非均匀}} = R_{\text{均匀}} \cdot \eta$.

下面讨论 η 与非均匀混合程度即混合形态的关系. 氘氚和壳层物质处于非均匀混合形态时, 在等温等压条件下有

$$\eta = 1 + \frac{\overline{x'^2}}{\overline{x}^2}, \quad (2)$$

其中 x 为氘氚离子的数密度份额, $\overline{x'^2}$ 为 x 空间分布的方差, 其大小直接影响热核反应速率. 当聚变燃料和混入的壳层物质处于分离状态时, 各自占有部分体积, 即理想“颗粒”混合形态, 聚变燃料体积份额在理想气体物态方程下为 $v_{DT} = \overline{x}$, 由此 $\overline{x'^2} = \overline{x}(1 - \overline{x})$, 为方差的最大取值, 则修正因子取极大值 $\eta_{\max} = 1/\overline{x}$. 可以理解为混入的物质起了“占体”的作用, 混入物质越多, 占的体积越大, 聚变燃料份额的平均值 \overline{x} 越小, 对热核反应速率的影响就越大; 与此相反, 当两种物质完全均匀混合时, 显然 $\overline{x'^2} = 0$, $\eta_{\min} = 1$; 介于两者之间的非均匀混合形态下的热核反应修正因子 η 的取值范围为 $1/v_{DT} \sim 1$. 可见, 混合形态对热核反应速率的影响

实质是亚网格尺度下聚变燃料数密度的非均匀性, 非均匀性越大即方差越大, 则对热核反应速率的影响越大.

长期以来, 混合相关研究工作主要集中在混合来源及其影响效应方面, 单流体框架、亚网格尺度下混合形态的演化及对热核反应速率的影响近些年才逐渐引起人们的关注. 实验方面, Murphy 等^[7,8]和 Haines 等^[9,10]自 2016 年起, 在 NIF^[11] (national ignition facility) 和 OMEGA^[12] 等激光装置上开展了一系列非均匀混合效应实验 (MARBLE Campaign), 内爆靶丸初始填充氘代泡沫 (CD) 材料, 留有不同尺度的气孔, 内部充入含氚气体, 相当于已知混合量及非均匀混合形态, 通过氘氚中子产额与氘氚中子产额的比值校验相关混合模型和程序. 我国蒲昱东等^[13]在“十三五”期间基于神光装置^[14]开展了氘代泡沫球参金的实验, 研究了高 Z 元素的非均匀混合对聚变性能的综合影响, 初步建立了以惯性压缩为主的非均匀混合效应的实验研究能力.

理论研究方面, 聚变燃料分布的方差及随时间的演化主要由力学混合、扩散混合两类物理过程决定. 力学混合主要指力学不稳定性发展到后期的湍流阶段产生的亚网格尺度上的非均匀混合. 混合形态的演化及相应热核反应速率建模可基于单流体的湍流模型描述^[15]. 由混合物中组分浓度的空间梯度引起的扩散过程是混合形态由非均匀混合发展到均匀混合的另一种物理机制, 在靶丸聚变燃烧阶段由于扩散系数的大幅增大而主导混合形态的演化^[4].

本文的主要研究内容是扩散过程主导的混合形态演化及相应热核反应速率建模的理论研究, 据我们所知, 该类研究未见公开报道. 本文包括以下 4 个方面: 1) 基于混入的壳层物质和燃料相互扩散的物理图像, 通过解析分析及数值求解一维球几何扩散方程, 获得了扩散混合主导下非均匀混合形态及热核反应速率随时间演化的物理模型; 2) 研制了基于 Monte Carlo (以下简称为蒙卡) 方法直接模拟扩散过程计算互扩散系数的方法, 较高置信度地给出了碳-氘、金-氘混合物典型聚变状态下的互扩散系数; 3) 基于以上两项工作系统分析了影响热核反应速率随时间演化的关键物理因素, 包括混合量的大小、混合的非均匀尺度及壳层材料高低 Z 的差别等; 4) 针对美国 MARBLE Campaign 系

列非均匀混合效应实验开展了理论研究,与相应典型三维数值模拟结果进行了对比分析,验证了理论评估的可靠性.

2 理论和数值模拟方法

2.1 解析理论

考虑到聚变燃料数密度份额的方差由聚变燃料的分布信息决定,可采用概率密度函数 (PDF) 描述不同程度非均匀混合的聚变燃料分布,类似的思想最早在化学反应流的相关文章^[16,17]中提出.

如图 1 所示,在理想“颗粒”混合下,混合物中的燃料浓度只有 0 和 1 两个分离的取值,在均匀原子混合下,混合物的燃料浓度为单一的取值,介于二者之间的分布函数则是不同燃料浓度的混合物占有不同的份额,由相应的分布函数描述.由此定义两个物理量,分别为描述不同燃料浓度物质的质量分布函数 $m(c)$ (定义为燃料浓度在 $c-c+dc$ 之间的混合物的质量份额) 和体积分布函数 $v(c)$ (与质量分布函数定义类似),由此经过推导可得到热

核反应速率修正因子公式为

$$\eta = \int_0^1 m(c)^2 c^2 / v(c) dc / \bar{c}^2, \quad (3)$$

其中 \bar{c} 为燃料平均浓度. 在满足热力学平衡及理想气体物态方程条件下,考虑到 $v(c)$ 与 $m(c)$ 的关系,定义 $p(c)$:

$$p(c) \equiv \frac{(1 + Z_L)\mu_S c + (1 + Z_S)\mu_L(1 - c)}{(1 + Z_L)\mu_S \bar{c} + (1 + Z_S)\mu_L(1 - \bar{c})}, \quad (4)$$

$p(c)$ 为混合物中轻、重材料性质及平均燃料浓度的已知函数,其中下标 L, S 分别代表燃料和壳层物质, Z 为离化度, μ 为摩尔质量,则 $v(c) = m(c) \cdot p(c)$, 由此可得:

$$\eta = \int_0^1 m(c) c^2 / p(c) dc / \bar{c}^2. \quad (5)$$

考虑到 β 函数在不同参数取值下呈现出双峰或单峰结构,能够较好描述混合形态演化过程中 $m(c)$ 的变化^[18],选取 $m(c)$ 分布为 β 函数形式,如图 2 所示.依据 (5) 式计算的热核反应速率修正因子 η 随相应参数的增大逐渐下降到 1,与混合形

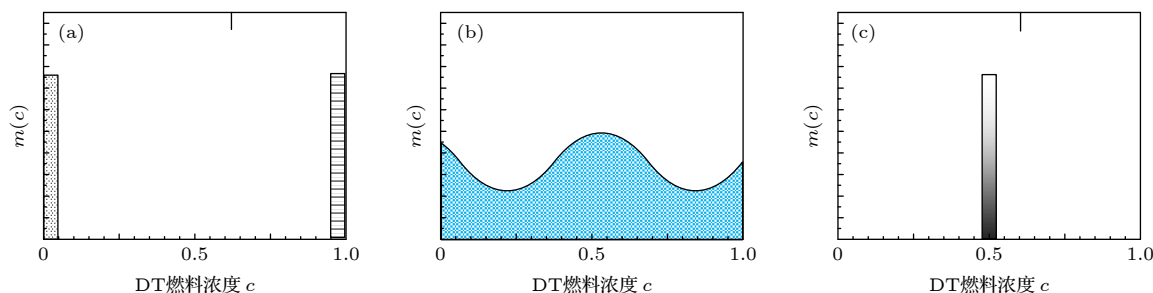


图 1 不同混合形态下聚变燃料质量分布函数 $m(c)$ 的示意图 (a) 理想“颗粒”混合; (b) 非均匀混合; (c) 均匀原子混合

Fig. 1. Schematic diagram of fusion fuel mass distribution function $m(c)$ under different mix morphology: (a) Ideal chunk mix; (b) heterogeneous mix; (c) homogeneous atomic mix.

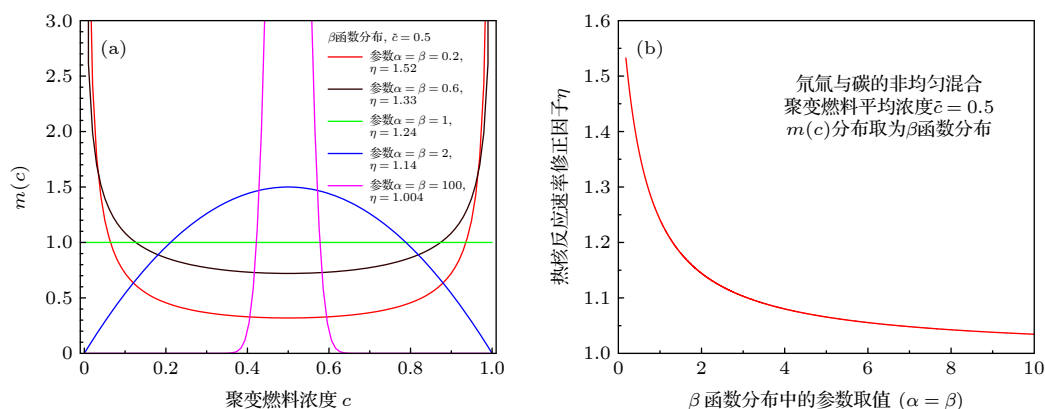


图 2 不同参数 β 函数分布的 $m(c)$ 及相应的热核反应速率修正因子 (a) 不同参数下的 β 函数分布; (b) 相应修正因子 η

Fig. 2. $m(c)$ taken as the distribution of β function with different parameters and corresponding correction factor of thermonuclear reaction rate: (a) β function distribution with different parameter; (b) corresponding η .

态由非均匀混合过渡到均匀混合 η 的下降规律一致, 从而验证了 (5) 式的正确性. 由此获得了热核反应速率与亚网格尺度下不同浓度燃料质量分布的函数关系.

实际的混合形态存在不同尺度、不同形状的“颗粒”, 简化起见, 本文选取典型“颗粒”尺度并按照球几何处理, 每个颗粒外面包围一层氘氚燃料, 用“颗粒”+氘氚小球之间的互扩散过程表征整个热斑区混合形态的演化过程, 如图 3 所示. 为获得扩散过程中质量份额分布 $m(c)$ 的解析公式, 对扩散物理图像进行了简化处理, 假设氘氚燃料扩散进颗粒中心的时间和壳层物质到达氘氚燃料外半径的时间大致相同 [4], 则 $h_2 = h(v_s^{-1/3} - 1)$ (相应符号物理量含义见图 3), 进一步假设混合区内的氘氚浓度均匀分布, 则可依据 (5) 式推导出热核反应速率修正因子与扩散深度比例 h/r_s 的函数关系为

$$\begin{aligned} \eta\left(\frac{h}{r_s}\right) = & \left\{ \bar{c} + \frac{(1-\bar{c})(1-v_s)[1-(1-h/r_s)^3]}{v_s[(1+h_2/r_s)^3-1]} \right\}^{-2} \\ & \times \left\{ v_s \bar{c}^2 \left[\left(1 + \frac{h_2}{r_s}\right)^3 - \left(1 - \frac{h}{r_s}\right)^3 \right] \right\}^{-1} \\ & \times \left\{ \frac{\bar{c} v_s}{1-v_s} [(1+h_2/r_s)^3-1] \right. \\ & \left. + (1-\bar{c}) [1-(1-h/r_s)^3] \right\}^2 \\ & + \frac{v_s}{(1-v_s)^2} [v_s^{-1} - (1+h_2/r_s)^3] \\ & (0 < h/r_s < 1), \end{aligned} \quad (6)$$

其中 v_s 为初始分离状态壳层物质的体积份额.

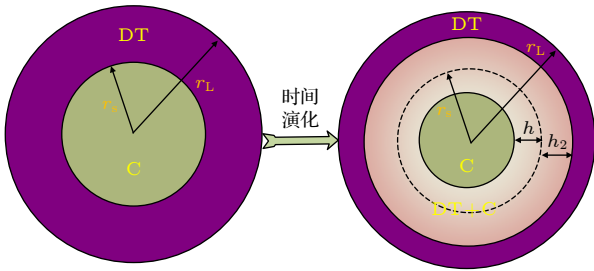


图 3 “颗粒”+氘氚小球系统互扩散过程示意图

Fig. 3. Schematic diagram of mutual diffusion process of chunk+DT system.

为了更精确地描述扩散过程, 应用追赶法、隐式格式离散方法数值求解了有限空间下的一维球几何扩散方程, 根据求得的氘氚燃料离子浓度的空间分布随时间的发展给出热核反应速率修正因子

随时间的演化过程, 并与解析结果进行了比较, 如图 4 所示. 考虑到解析公式 (6) 中, 当扩散深度 $h = r_s$ 时代表扩散过程结束, 达到完全均匀混合, 而实际扩散过程中浓度完全均匀需要很长时间, 取 $\tau_{\text{diffusion}} = r_s^2/(6.76D)$ 表征扩散基本完成时间 (其中 D 为扩散系数), 由此解析公式中的 h 取为 $h = \sqrt{6.76Dt}$. 从图 4 的比较来看, 解析公式给出的修正因子在扩散早期较数值解下降慢、后期略小于数值解, 这与解析模型的物理假设相关, 符合物理定性规律. 两条曲线较为接近说明解析模型尽管有所简化, 依然具有较高的精度.

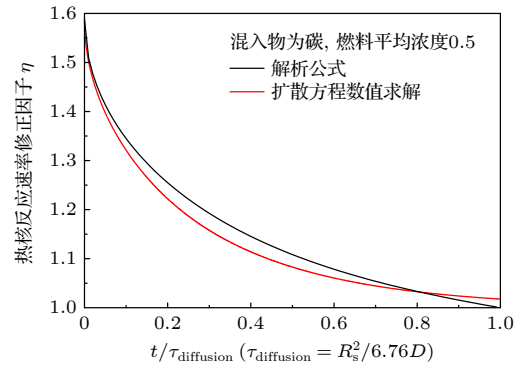


图 4 热核反应速率修正因子数值解与解析解的比较

Fig. 4. Comparison of numerical and analytical solutions for the correction factor of thermonuclear reaction rate.

2.2 蒙卡数值模拟

从 2.1 节可以看出, 壳层物质与氘氚燃料的互扩散系数是影响扩散过程演化行为的基础参数, 而不同动理学理论的互扩散系数约有倍数的差异 [19–21]. 为更好认识和理解相关理论, 应用蒙卡方法研制了计算互扩散系数的方法和程序. 具体流程为, 基于蒙卡方法直接模拟各组份在混合物中的自扩散过程, 确定各组份的自扩散系数, 根据“Darken Approximation” [22] 的组合规则, 计算不同燃料浓度下颗粒加氘氚燃料系统的互扩散系数.

为简化起见, 蒙卡模拟时仅考虑离子之间的库仑散射, 忽略与电子的相互作用. 总体计算流程为, 按照温度 T 下的麦克斯韦 (Maxwell) 速度分布抽取离子的能量、运动方向, 以样本离子的空间分布为权重抽取离子所在位置, 由此确定样本离子的初始状态, 然后模拟其经历的各种事件, 包括自由飞行、穿过几何面及库仑散射等. 跟踪样本离子在背景离子中扩散过程的具体流程如图 5 所示.

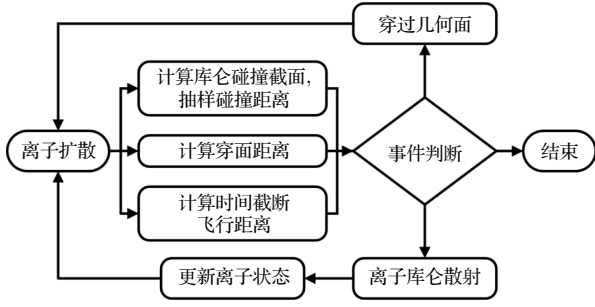


图 5 跟踪样本离子扩散过程的示意图

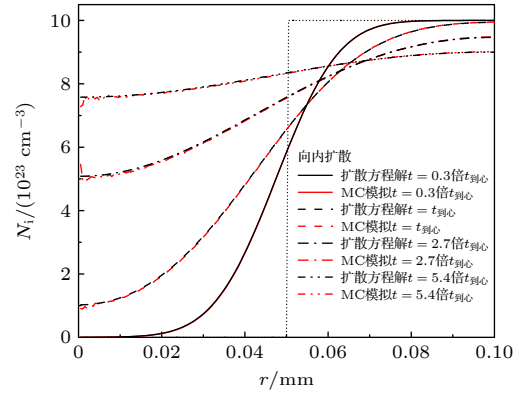
Fig. 5. Schematic diagram of tracking ion diffusion process.

蒙卡模拟扩散过程的关键是确定等效库仑截面. 从两体库仑碰撞的微观散射截面出发, 考虑到多次小角度散射的累计效应可等效为一次大角度散射, 唯象选取库仑碰撞的特征长度对应的圆面积乘以库仑对数作为微观截面的理论形式, 相关系数依据气体运动论理论中自扩散系数和微观截面的关系 [23], 以及等离子体聚变燃烧条件下自扩散系数的动理学理论公式 [24] 综合确定. 得到入射离子 α 与背景离子 β 的等效库仑截面为

$$\sigma_{\text{eff}} = 0.718 \frac{Z_{\alpha}^2 Z_{\beta}^2 e^4 \ln \Lambda}{(k_B T_i)^2}. \quad (7)$$

利用扩散过程的定标关系 $D \propto h^2/t$, 根据蒙卡模拟的不同时刻的扩散深度可以提取出自扩散系数. 自扩散过程中蒙卡模拟结果与一维球几何扩散方程数值解的比较结果如图 6 所示, 其中扩散方程数值解的扩散系数采用蒙卡模拟结果的提取值. 可以看出, 在相同的扩散系数下, 蒙卡模拟的扩散过程与数值解很好地一致, 说明蒙卡直接模拟扩散过程能够精确反映扩散方程的解, 也表明任意时刻

扩散深度提取的扩散系数具有很好的一致性.

图 6 蒙卡模拟的离子数密度分布随时间演化行为与扩散方程数值解的比较 (数值解的扩散系数为 $2243 \text{ cm}^2/\text{s}$, 到心时间为 0.9 ns)Fig. 6. Comparison between time evolution of ion number density distribution simulated by MC and numerical solution of diffusion equation. (diffusion coefficient of numerical solution is $2243 \text{ cm}^2/\text{s}$, time of diffusion to center is 0.9 ns).

为综合检验蒙卡方法计算自扩散系数的准确性, 对不同温度、密度下的结果与动理学理论进行了比较, 如图 7 所示, 其中黑线是解析公式的结果, 红色的五角星是蒙卡模拟的结果. 可以看到, 蒙卡模拟给出的随温度、密度变化的自扩散系数结果与相应动理学理论很好地一致, 表明通过蒙卡直接模拟扩散过程计算自扩散系数的方法是可靠的.

依据“Darken Approximation”可由自扩散系数组合给出互扩散系数, 对于 α 与 β 两种组分的混合物, 其组合形式为

$$D_{\alpha\beta} = x_{\alpha} D_{\beta} + x_{\beta} D_{\alpha}, \quad (8)$$

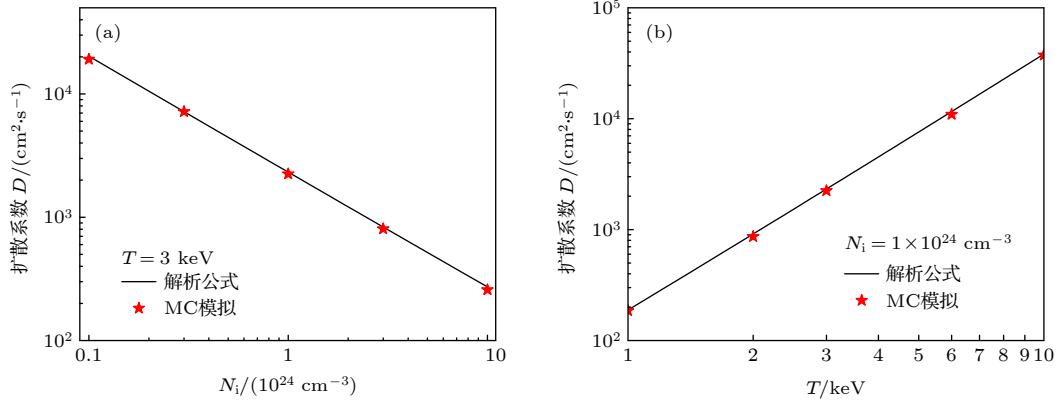


图 7 蒙卡模拟给出的氘自扩散系数与动理学理论的比较 (a) 随数密度的变化; (b) 随温度的变化

Fig. 7. Comparison between self diffusion coefficient of deuterium given by MC simulation and kinetic theory: (a) With number density; (b) with temperature.

其中, $D_{\alpha\beta}$ 为互扩散系数; x_α , x_β 为两种组分的数密度的份额; D_α , D_β 分别为组分 α , β 在混合物中的自扩散系数. “Darken Approximation” 忽略了不同种类离子间的相互关联, 对大部分问题在百分之几的精度上是准确的, 而各组分的自扩散系数由蒙卡程序模拟标识离子在均匀混合背景离子下的扩散过程获得.

3 结果及讨论

3.1 互扩散系数模拟结果

图 8 分别模拟给出了不同燃料浓度下氘与碳、氘与金的互扩散系数, 并与 Ticknor 等^[19]、Molvig 等^[20] 及 Stanton 和 Murillo^[21] 的动理学理论进行了比较. 蒙卡模拟氘与碳互扩散系数的热力学状态为密度 4.2 g/cm^3 , 温度 3 keV , 模拟的互扩散系数随燃料浓度增加从 $167 \text{ cm}^2/\text{s}$ 单调下降到 $56 \text{ cm}^2/\text{s}$, 约倍数变化, 下降的原因主要是互扩散过程由含量少的组分主导, 聚变燃料浓度低时由氘主导, 则扩散系数相应增大, 燃料浓度高时由碳主导, 扩散系数相应减小. 从扩散系数随燃料浓度变化的趋势上看, Stanton 和 Murillo^[21] 的理论结果与蒙卡结果较为接近, 即随着燃料浓度的增加, 互扩散系数的下降逐渐趋缓, 定量上看 Stanton 和 Murillo^[21] 的结果较蒙卡模拟的偏低约 40%—50%; Molvig 等^[20] 的理论互扩散系数与燃料浓度关系较弱, 在燃料浓度取中间值时 (0.3—0.7), 与蒙卡的结果偏差较小. Ticknor 等^[19] 的结果与蒙卡模拟结果相比在低燃料浓度时偏高约 50%, 但互扩散系数随燃料浓度的

增加下降较快, 当燃料浓度为 0.7 时两者结果基本一致, 燃料浓度再增加时 Ticknor 等^[19] 的结果反而小于蒙卡模拟的结果.

蒙卡模拟氘与金的互扩散系数的状态为密度 4.9 g/cm^3 , 考虑到金在不同温度下离化度的差别, 温度分别取 3 keV 和 1 keV 两个典型值, 相应离化度分别约为 70 和 50. 可以看到, 互扩散系数在不同燃料浓度下的差别在 1 个量级以内, 温度 3 keV 时的互扩散系数在 $4\text{—}0.4 \text{ cm}^2/\text{s}$ 内变化, 温度 1 keV 时的互扩散系数在 $0.7\text{—}0.07 \text{ cm}^2/\text{s}$ 内变化. Molvig 等^[20] 的理论基本没有反映燃料浓度的影响, 整体较蒙卡模拟结果偏大, 特别是在燃料浓度高的区域. Ticknor 等^[19] 的结果依然高于蒙卡模拟的结果, 且不同温度下的差别基本相同, 高约 40%—50%, 这和碳-氘上的差别基本一致. Ticknor 等^[19] 的结果和蒙卡模拟结果的差别较碳-氘情况下的偏小, 在高温下偏低约 10%—30%, 低温时, 燃料浓度小于 0.7 时与蒙卡结果接近, 最大偏低约 15%, 燃料浓度再增大时开始大于蒙卡模拟的结果, 最大偏高 20%. 总的来看, 蒙卡模拟给出的互扩散系数与相关动理学理论在 50% 以内相符, 具有较高的置信度.

3.2 非均匀混合下影响热核反应速率的物理因素及影响规律

在单介质辐射流体力学的框架下, 影响非均匀混合热核反应速率的物理量包括: 1) 燃料的平均浓度 \bar{c} , 表征混合量的多少; 2) 聚变开始时的典型非均匀尺度, 即颗粒尺度的平均值, 表征非均匀混

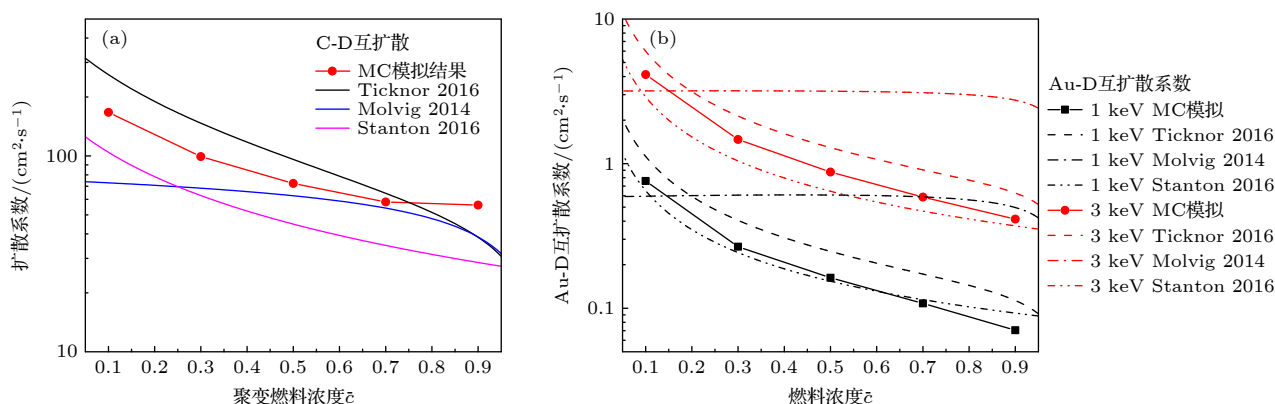


图 8 蒙卡模拟给出的互扩散系数与动理学公式的比较 (a) 氘与碳; (b) 氘与金

Fig. 8. Comparison of the mutual diffusion coefficient between MC simulation and kinetic theories: (a) Carbon and deuterium; (b) gold and deuterium.

合程度; 3) 不同非均匀尺度的概率分布, 如指数分布、对数高斯分布、平分布等; 4) 混入壳层物质的材料性质等. 下面对非均匀混合下影响热核反应速率的物理因素及影响规律进行讨论.

3.2.1 燃料平均浓度的影响

在混合物密度一定的条件下, 燃料平均浓度代表了混入物质的多少, 即混合量的大小. 燃料浓度越大, 混入物质相对越少. 以碳氦混合为例, 模拟燃料平均浓度分别为 0.3, 0.5, 0.7, 0.9 时热核反应速率修正因子演化行为如图 9 所示. 可以看出, 聚变燃料浓度的影响体现在两个方面, 主要的一方面是决定了初始完全分离状态下聚变燃料的体积份额, 从而决定了热核反应速率的修正因子 η 的初始值, 随着燃料浓度增加, 燃料的体积份额相应增大, 混合物质的占体效应下降, η 相应减小; 另一方面, 不同燃料浓度下扩散系数的差别影响了 η 随时间的演化行为, 燃料浓度越大, 扩散系数越小, 扩散越慢, 热核反应速率修正因子下降到 1 的时间相应越长.

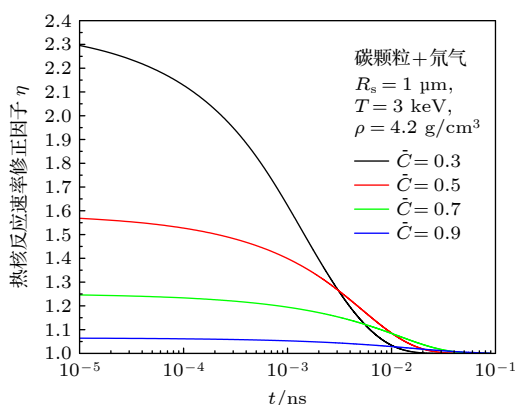


图 9 扩散混合下热核反应速率修正因子时间演化与平均燃料浓度的关系

Fig. 9. Time evolution of thermonuclear reaction rate correction factor with different average fuel concentration under diffusion mixing.

3.2.2 非均匀混合程度的影响

混合的非均匀程度可以用聚变开始时颗粒尺度 r_s 来表征. r_s 主要影响扩散的快慢. 根据扩散理论定标关系, 扩散完成时间与 r_s^2 成正比. 从图 10 的模拟结果可以看到颗粒尺度对修正因子的影响, 初始两种组分完全分离状态时, 由于燃料的体积份额是固定的, 修正系数 η 与颗粒的尺度无关; 对 η 演化行为的影响, 则是颗粒越大, 扩散越慢, η 下降越慢.

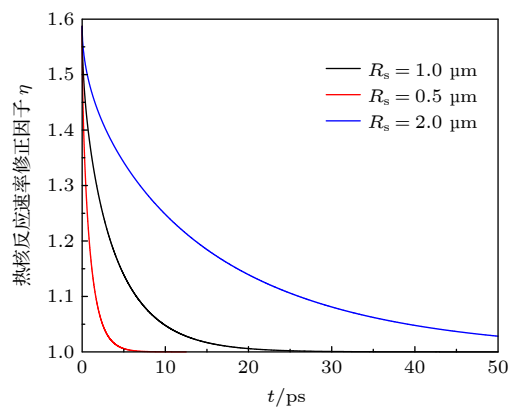


图 10 热核反应速率修正因子时间演化与颗粒尺度的关系 (取燃料平均浓度 0.5, 扩散系数 $100 \text{ cm}^2/\text{s}$)

Fig. 10. Time evolution of thermonuclear reaction rate correction factor with different chunk size under diffusion mixing.

3.2.3 颗粒尺度不同概率分布的影响

实际状态下, 颗粒尺度 r_s 总是有一定的概率分布, 不是单一取值, 固定 r_s 的平均值, 用解析公式 (6) 分析了 r_s 不同概率分布下的热核反应修正因子. 此时 η 的计算公式为

$$\eta(t) = \int_{x=0}^{\infty} f(x) \eta'(x, t) dx, \quad \left(x = \frac{r_s}{\bar{r}_s}\right), \quad (9)$$

其中 $f(x)$ 为 r_s 的概率密度分布函数, 选取了指数分布、对数高斯分布、平分布等三类典型分布, 和单一尺度的 δ 分布结果进行了比较, 如图 11 所示.

$f(x)$ 为指数分布的具体形式为

$$f(x) = e^{-x}, \quad (x > 0), \quad \bar{x} = 1, \quad \text{标准差 } \sigma = 1; \quad (10)$$

$f(x)$ 为对数高斯分布的具体形式为

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \ln 2} x} \exp \left[-(\ln x + \ln 2 / 2)^2 / (2 \ln 2) \right], \quad (x > 0), \quad \bar{x} = 1, \quad \text{标准差 } \sigma = 1; \quad (11)$$

$f(x)$ 为平分布的具体形式为

$$f(x) = \frac{1}{2}, \quad (0 < x < 2), \quad \bar{x} = 1, \quad \text{标准差 } \sigma = \sqrt{3}/3; \quad (12)$$

$f(x)$ 为 δ 分布, 即对应单一颗粒度的具体形式为

$$f(x) = \delta(x - 1), \quad \bar{x} = 1, \quad \text{标准差 } \sigma = 0. \quad (13)$$

从图 11(a) 可以看出 r_s 的 4 种概率密度分布存在较大差异, 图 11(b) 可以看出, 热核反应速率修正因子 η 随时间的演化与 r_s 的概率分布有一定关系. 指数分布和对数正态分布的差别不大, 和平

分布及单一尺度有较明显的差别. 初始时刻从相同的 η 值出发, 随着扩散过程的发展, 由于尺度较小的颗粒扩散过程较快, 颗粒有小尺度概率分布的状态, η 下降就较单一尺度颗粒下降得更快, 且指数分布和对数正态分布由于小尺度的颗粒占比更高, η 的下降也比平分布下降得更快. 扩散后期, 大尺度的颗粒扩散得慢, 使 η 值在较长时间内都大于 1, 从 4 个概率分布的比较可以看出, 大颗粒尺度占比越高, η 下降得越慢, 符合物理定性规律. 整体来看, 颗粒尺度不同概率分布对热核反应速率的影响相对较小, 敏感性小于平均颗粒尺度及燃料平均浓度的影响.

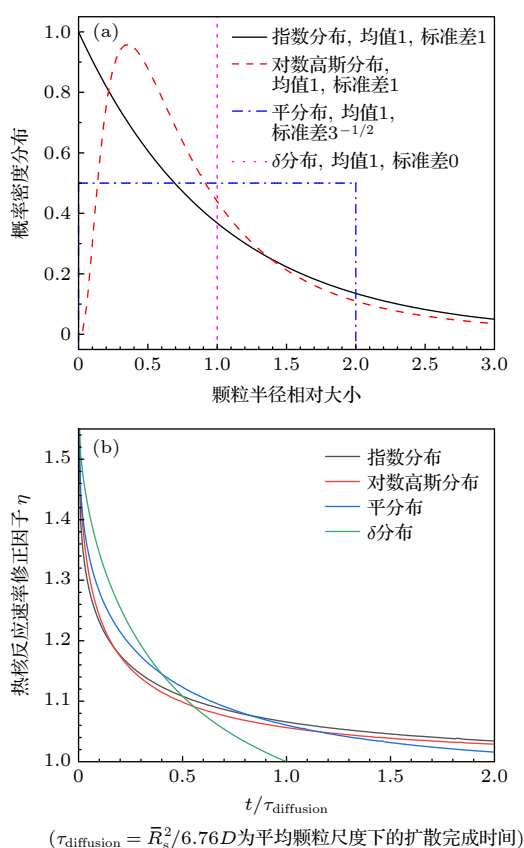


图 11 颗粒尺度概率密度分布及不同分布下热核反应速率修正因子时间演化的差异

Fig. 11. Time evolution of thermonuclear reaction rate correction factor with different chunk size distribution under diffusion mixing.

3.2.4 燃料中混入低 Z 、高 Z 物质的差别

本小节以混入低 Z 的碳和高 Z 的金为例说明燃料中混入低 Z 、高 Z 物质的差别, 模拟的结果如图 12 所示. 可以看出, 燃料浓度相同的条件下, 初始完全分离时低 Z 的碳较高 Z 的金占据更大的

体积份额, 导致燃料体积减小, 热核反应速率修正因子相应增大; 扩散发展过程中, 由于低 Z 的碳较高 Z 的金扩散系数小约两个量级, 导致扩散时间偏快约两个量级, η 值下降到接近 1 的时间偏早约两个量级.

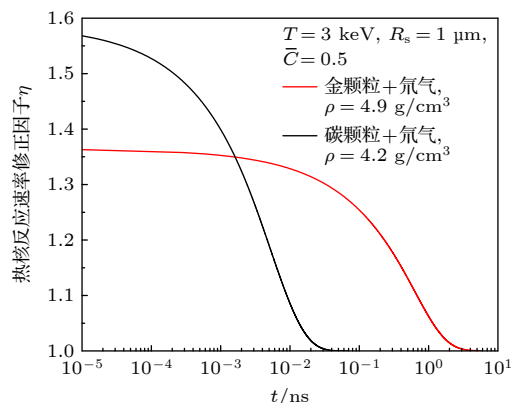


图 12 金颗粒 + 氘、碳颗粒 + 氘的热核反应速率修正因子时间演化的比较

Fig. 12. Comparison of rate correction factors for gold + deuterium system and carbon + deuterium system.

下面对均匀混合、理想“颗粒”混合的热核反应速率公式适用条件进行讨论. 以 ICF 内爆实验热斑的典型状态来说, 聚变特征时间约 100 ps 量级, 典型聚变温度 (约 3 keV)、密度状态下氘气和碳的互扩散系数约在 $100 \text{ cm}^2/\text{s}$ 量级. 聚变开始时非均匀尺度在 $0.1 \text{ }\mu\text{m}$ 量级及以下的颗粒, 在聚变时间的 1% 以内即完成了扩散过程, 可当作完全均匀原子混合处理; 非均匀尺度在 $10 \text{ }\mu\text{m}$ 量级及以上的颗粒, 在聚变时间内扩散过程仅完成了 1%, 在聚变过程中基本可当作理想“颗粒”混合处理; 处于中间尺度的状态则需要应用我们的模型评估非均匀混合状态及其演化对热核反应速率的影响. 对于混入重材料的情形 (例如金), 相同颗粒尺度下, 扩散特征时间约慢两个量级, 由此完全均匀原子混合和理想“颗粒”混合的物理判据分别为非均匀尺度小于 $0.01 \text{ }\mu\text{m}$ 量级和大于 $1 \text{ }\mu\text{m}$ 量级.

3.3 与典型实验数值模拟结果的对比分析

美国 MARBLE Campaign 系列非均匀混合效应实验中, 内爆靶丸填充氘代泡沫材料 (CD), 留有 30, 50, 90 μm 等不同尺度的气孔, 内部充入氘气 (HT), 相当于已知混合量及不同尺度的非均衡混合形态, 通过氘气中子产额和氘气中子产额的比

值综合校验混合形态对热核反应速率影响的建模和程序^[9,10].

对于氘氚聚变, 由于实验上 CD 的质量份额很大, 约 95%, 由 HT 的占体效应导致氘氚聚变性能的增量很小, 可以按照均匀混合处理, 即在热力学状态固定条件下氘氚中子产额可表示为

$$Y_{DD} = \overline{N_D}^2 \langle \sigma v \rangle_{DD} V \tau_{\text{fusion}}, \quad (14)$$

其中 τ_{fusion} 为聚变时间.

对于氘氚聚变, 由于氘氚处于不同组分中, 混合形态对聚变速率影响很大, 修正因子从完全分离状态的取值 0 到均匀混合下的最大值 1. 氘氚中子产额可表示为

$$Y_{DT} = \overline{N_D} \cdot \overline{N_T} \langle \sigma v \rangle_{DT} V \int_0^{\tau_{\text{fusion}}} \eta_{DT} dt. \quad (15)$$

考虑到氘氚比的平均值是固定的, 则 CD/HT 在温度平衡条件下氘氚中子与氘氚中子的比值为

$$\frac{Y_{DT}}{Y_{DD}} \propto \frac{\int_0^{\tau_{\text{fusion}}} \eta_{DT} dt}{\tau_{\text{fusion}}} \frac{\langle \sigma v \rangle_{DT}}{\langle \sigma v \rangle_{DD}}. \quad (16)$$

在聚变过程中, 氘、氚混合的非均匀程度发展主要由内部 HT + 外部包裹 CD 层的小球系统在 HT/CD 界面处的互扩散过程主导. 图 13(a) 是依据本文的理论给出的初始不同尺度的气孔 (对应聚变开始时的不同 r_{HT}) 在相应的温度、密度条件下, 由扩散过程主导的混合形态对聚变性能的影响量 $\int_0^{\tau_{\text{fusion}}} \eta_{DT} dt / \tau_{\text{fusion}}$ 随聚变时间的变化, 其中温度、密度状态取自文献^[10]中的计算结果, 扩散系数依据相应的状态由蒙卡方法计算得到. 可以看到, 对于初始 30 μm 气孔的靶丸, 相应的聚变时间下, 非均匀混合导致的聚变性能下降量约 7%, 基本可以看作均匀混合, 初始 50 和 90 μm 气孔的靶丸, 非均匀混合导致聚变性能的下降量分别为 25% 和 50%. 图 13(b) 定量比较了本文的理论评估结果和 Haines 等^[10]给出的 HT/CD 之间温度平衡下的三维数值模拟结果 ($\int_0^{\tau_{\text{fusion}}} \eta_{DT} dt / \tau_{\text{fusion}}$ 由文献中的数据及 (16) 式计算给出). 可以看到, 本文的理论和 Haines 等^[10]数值模拟给出的初始气孔尺寸的差异对聚变性能的影响趋势基本是一致的, 即随着气孔尺度的增大, 非均匀混合对聚变性能的影响逐渐增大, 定量上, 我们评估的气孔尺度的影响量较 Haines 等的计算结果略大. 可能的原因是, 热斑中

的气孔在内爆过程中偏离球形几何, 导致 HT/CD 的表面积相对球几何增大, 从而加快了扩散混合过程, 特别是对于较大尺寸的气孔, 修正因子处于变化较剧烈的区间, 这一效应可能更加明显, 从而导致非均匀混合的影响较球几何的评估结果下降. 对于和实验结果的比较, 由于实验中发现 HT/CD 之间存在温度非平衡效应^[10], 增加了新的影响聚变性能的物理因素, 目前的理论工作还未涉及因而无法直接比较, 后续将进一步开展相关研究. 总体来看, Haines 等^[10]给出的 MARBLE Campaign 系列实验典型三维数值模拟结果基本验证了我们关于非均匀混合对聚变性能影响的物理认识.

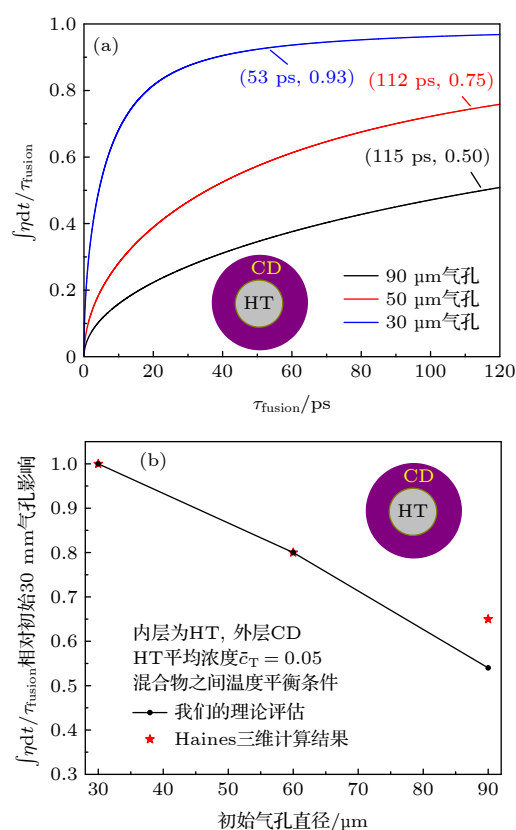


图 13 初始不同气孔尺度靶丸聚变性能随聚变时间的变化及与 Haines 等^[10]三维计算结果的比较

Fig. 13. Fusion performance of different initial pore size with the fusion time and comparison with three dimensional result simulated by Haines et al.^[10].

4 结 论

近年来混合形态对聚变性能的影响逐渐成为 ICF 研究的热点领域. 本文基于混入的壳层物质和燃料相互扩散的物理图像, 通过解析分析及数值求解一维球几何扩散方程, 给出了扩散混合主导下非

均匀混合形态及热核反应速率随时间演化的物理模型. 研制了基于蒙卡方法直接模拟扩散过程计算互扩散系数的方法, 获得的碳-氘、金-氘体系典型状态下的互扩散系数与相关动理学理论的偏差在 50% 以内, 扩散系数与聚变燃料浓度的依赖关系更接近 Stanton 的理论^[21]. 系统分析了影响热核反应速率随时间演化的关键物理因素, 研究发现混合量主要通过影响燃料的体积份额直接影响热核反应速率, 由非均匀尺度和扩散系数共同决定的扩散时间直接影响热核反应速率的演化行为, 而非均匀性尺度的不同概率分布对热核反应速率的影响相对较小. 通过聚变时间和扩散时间的相对比较获得了均匀原子混合和理想“颗粒”混合的物理判据, 对于典型 ICF 热斑状态, 混入低 Z 、高 Z 元素时, 聚变开始时的非均匀混合尺度分别在 0.1 和 0.01 μm 量级及以下的非均匀混合对于聚变反应速率来说可以当作均匀原子混合处理, 聚变开始时的非均匀混合尺度分别在 10 和 1 μm 量级及以上的非均匀混合对于聚变反应速率来说可以当作理想“颗粒”混合处理, 处于中间的状态需要应用本文的理论定量评估非均匀混合对聚变性能的影响. 在此基础上对美国 MARBLE Campaign 系列非均匀混合效应实验开展了理论评估, 将混合形态对聚变性能的相对影响量与典型三维模拟结果进行了对比分析, 验证了本文关于非均匀混合对聚变性能影响理论评估方法的可靠性, 对于我国将要开展的惯性约束聚变混合效应实验的设计改进具有重要参考意义. 下一步将探索考虑电子间、电子与离子间相互作用的蒙卡模拟方法, 从而可以直接模拟两物质的互扩散过程, 直接统计热核反应速率的演化过程, 对于混合物之间温度非平衡的情况也具备了定量评估能力, 结合非球形几何下扩散过程对热核反应速率影响的评估, 可以更深入地认识 MARBLE Campaign 系列实验结果.

参考文献

- [1] Cabot W H, Cook A W 2006 *Nat. Phys.* **2** 562
- [2] Zhou Y 2017 *Phys. Rep.* **720-722** 1
- [3] Zhou Y 2017 *Phys. Rep.* **723-725** 1

- [4] Orth C D 2016 *Phys. Plasmas* **23** 022706
- [5] Weber C R, Clark D S, Pak A, Alfonso N, Bachmann B, Hopkins L F B, Bunn T, Crippen J, Divol L, Dittrich T, Kritcher A L, Landen O L, Le Pape B S, MacPhee A G, Marley E, Masse L P, Milovich J L, Nikroo A, Patel P K, Pickworth L A, Rice N, Smalyuk V A, Stadermann M 2020 *Phys. Plasmas* **27** 032703
- [6] Hammel B A, Tommasini R, Clark D S, Field J, Stadermann M, Weber C 2016 *J. Phys. Conf. Ser.* **717** 012021
- [7] Murphy T J, Douglas M R, Fincke J R, Olson R E, Cobble J A, Haines B M, Hamilton C E, Lee M N, Oertel J A, Parra-Vasquez N A G, Randolph R B, Schmidt D W, Shah R C, Smidt J M, Tregillis I L 2016 *J. Phys. Conf. Ser.* **717** 012072
- [8] Murphy T J, Albright B J, Douglas M R, Cardenas T, Cooley J H, Day T H, Denissen N A, Gore R A, Gunderson M A, Haack J R, Haines B M, Hamilton C E, Hartouni E P, Kim Y, Kozlowski P M, Lee M N, Oertel J A, Olson R E, Yin L 2021 *High Energy Density Phys.* **38** 100929
- [9] Haines B M, Shah R C, Smidt J M, Albright B J, Cardenas T, Douglas M R, Forrest C, Glebov V Y, Gunderson M A, Hamilton C E, Henderson K C, Kim Y, Lee M N, Murphy T J, Oertel J A, Olson R E, Patterson B M, Randolph R B, Schmidt D W 2020 *Nat. Commun.* **11** 544
- [10] Haines B M, Shah R C, Smidt J M, Albright B J, Cardenas T, Douglas M R, Forrest C, Glebov V Y, Gunderson M A, Hamilton C, Henderson K, Kim Y, Lee M N, Murphy T J, Oertel J A, Olson R E, Patterson B M, Randolph R B, Schmidt D 2020 *Phys. Plasmas* **27** 102701
- [11] Moses E I, Atherton J, Lagin L, Larson D, Keane C, MacGowan B, Patterson R, Spaeth M, Van Wonerghem B, Wegner P, Kauffman R 2016 *J. Phys. Conf. Ser.* **688** 012073
- [12] Boehly T R, Brown D L, Craxton R S, Keck R L, Knauer J P, Kelly J H, Kessler T J, Kumpan S A, Bucks S J, Letzring S A, Marshall F J, McCrory R L, Morse S F B, Seka W, Soures J M, Verdon C P 1997 *Opt. Commun.* **133** 495
- [13] Pu Y D, Luo X, Zhang L, Sun C K, Hu Z M, Shen G, Wang X R, Tang Q, Yuan Z, Wang F, Yang D, Yang J M, Jiang S E, Ding Y K, Wang J G 2020 *Phys. Rev. E* **102** 023204
- [14] Peng H, Zhang X M, Wei X, Zheng W, Jing F, Sui Z, Fan D, Lin Z 1999 *Proc. SPIE* **3492** 25
- [15] Ristorcelli J R 2017 *Phys. Fluids* **29** 020705
- [16] Cook A W, Riley J J 1994 *Phys. Fluids* **6** 2868
- [17] Dimotakis P E 2005 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **37** 329
- [18] Girimaji S S 1991 *Combust. Sci. Tech.* **78** 177
- [19] Ticknor C, Kress J D, Collins L A, Cl  rouin J, Arnault P, Decoster A 2016 *Phys. Rev. E* **93** 063208
- [20] Molvig K, Simakov A N, Vold E L 2014 *Phys. Plasmas* **21** 092709
- [21] Stanton L G, Murillo M S 2016 *Phys. Rev. E* **93** 043203
- [22] White A J, Ticknor C, Meyer E R, Kress J D, Collins L A 2019 *Phys. Rev. E* **100** 033213
- [23] Chapman S, Cowling T G (translated by Liu D Y, Wang B Y) 1970 *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases* (Beijing: Science Press) pp137–139 (in Chinese) [查普曼 L, 考林 T G 著 (刘大有, 王伯懿 译) 1970 非均匀气体的数学理论 (北京: 科学出版社) 第137—139页]
- [24] Brueckner K A, Jorna S 1974 *Rev. Mod. Phys.* **46** 325

Investigation on the fusion reaction rate of deuterium and tritium under heterogeneous mixing^{*}

Shen Gang¹⁾²⁾ Zhong Bin^{1)†} Wu Yong¹⁾ Wang Jian-Guo¹⁾

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

2) (*Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China*)

(Received 17 June 2022; revised manuscript received 24 August 2022)

Abstract

Mixing between shell material and gas fuel, caused by hydrodynamic instability, isolated defects, or kinetic effects, is the key to understand the degradation of implosion performance in the research of inertial confinement fusion. Understanding the mixing mechanism and reducing its impact is of extreme importance to achieve the ignition and high gain. The impact of mixing morphology on thermonuclear reaction rate in sub grid level has gradually attracted people's attention in recent years due to its direct influence on burn rate and fusion process, the study on physical model of thermonuclear reaction rate in different mix morphology has important scientific significance and application value. In the paper, the dependence of thermonuclear reaction rate on mass distribution of different fuel concentrations at sub grid scale is derived. Based on thermodynamic equilibrium and ideal gas equation of state, the physical law of the evolution of the thermonuclear reaction rate with mix morphology under the dominance of diffusion mixing is revealed through analytical formula and numerical solution of diffusion equation in one-dimensional spherical geometry. It is convinced that the mixing amount directly affects the thermonuclear reaction rate by mainly affecting the volume fraction of the fuel, and the mixing diffusion time determined by heterogeneous mixing scale and diffusion coefficient directly affects the evolution behavior of the thermonuclear reaction rate. Furthermore, based on mutual diffusion coefficient obtained from direct simulation of diffusion process by Monte Carlo method, the difference of impact to thermonuclear reaction rate for low- Z Carbon and high- Z gold mixing is quantitatively investigated. Heterogeneous mix size with 0.1 μm , 0.01 μm respectively for the low- Z and high- Z mixing can be treated as atomic mix in burn rate aspect, and heterogeneous mix size with 10 μm , 1 μm respectively for the low- Z and high- Z mixing can be treated as ideal chunk mix in burn rate aspect, and heterogeneous mix size in the middle state needs to be evaluated by using the heterogeneous mixing model of thermonuclear reaction rate in the paper. Finally, the physical model is compared with 3D simulation results of the heterogeneous mixing effect experiment called "MARBLE Campaign" carried out on OMEGA laser facility, which is designed as a separated reactant experiments and capsules are filled with deuterated foam and HT gas pores of different size, covering typical mix morphology from atomic mix to chunk mix, which validate the reliability of the theoretical evaluation about the evolution of mixing morphology and its impact to thermonuclear reaction rate. This work is significant for the design and improvement of inertial confinement fusion mixing effect experiment in China.

Keywords: mix morphology, heterogeneous mix, thermonuclear reaction rate, mutual diffusion coefficient

PACS: 52.57.-z, 25.60.Pj, 52.25.Fi, 52.65.Pp

DOI: 10.7498/aps.72.20221197

^{*} Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2017YFA0402300) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11934004).

[†] Corresponding author. E-mail: zhong_bin@iapcm.ac.cn

非均匀混合下氘氚聚变反应速率的理论研究

沈刚 袁斌 吴勇 王建国

Investigation on the fusion reaction rate of deuterium and tritium under heterogeneous mixing

Shen Gang Zhong Bin Wu Yong Wang Jian-Guo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 015201 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20221197

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221197>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于蒙特卡罗-离散纵标方法的氘氚激光等离子体聚变反应率数值模拟

Numerical simulation of deuterium-tritium fusion reaction rate in laser plasma based on Monte Carlo-discrete ordinate method

物理学报. 2019, 68(21): 215201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190440>

氘氚冰籽晶的形核行为

Crystal nucleation behavior of deuterium tritium ice

物理学报. 2022, 71(2): 025203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211018>

异质环境下各向异性扩散对图灵斑图的影响

Effects of anisotropic diffusion on Turing patterns in heterogeneous environment

物理学报. 2022, 71(24): 248201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221294>

考虑介质膨胀速率的锂离子电池管状电极中扩散诱导应力及轴向支反力分析

Influence of local velocity on diffusion-induced stress and axial reaction force in a hollow cylindrical electrode of lithium-ion batteries with considering expansion rate of medium

物理学报. 2018, 67(7): 070203 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172288>

反应扩散系统中反螺旋波与反靶波的数值研究

Numerical investigation on antispiral and antitarget wave in reaction diffusion system

物理学报. 2018, 67(18): 188201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180864>

浓度相关的扩散系数对定向凝固枝晶生长的影响

Effect of concentration-dependent diffusion coefficient on dendrite growth in directional solidification

物理学报. 2019, 68(16): 166401 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190603>