

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ УДАРНО-ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В МАТЕРИАЛАХ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ СВЕРХКОРОТКИХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДЕЛИ БАЕРА–НУНЦИАТО¹⁾

© 2024 г. П. А. Чупров^{1,*}, С. В. Фортова¹, В. В. Шепелев¹

¹ 123056 Москва, 2-ая Брестская ул., 19/18, Институт автоматизации проектирования РАН, Россия

*e-mail: petchu@mail.ru

Поступила в редакцию 29.02.2024 г.

Переработанный вариант 08.04.2024 г.

Принята к публикации 31.05.2024 г.

Представлена математическая модель, основанная на многофазной модели Баера–Нунциато. Эффективность модели продемонстрирована на численном решении ударно-волновых задач в конденсированных средах при наличии явной контактной границы с вакуумом. Рассматриваются результаты численного моделирования задач о взаимодействии фемтосекундного лазерного излучения с мишенью из алюминия. Показано преимущество применения модели Баера–Нунциато по сравнению с однофазной гидродинамической моделью при расчете динамики контактной границы. Простота реализации и возможность легкого введения дополнительных субмоделей, таких как горение, делает этот подход привлекательным для моделирования высокоэнергетических процессов в многофазных средах. Библ. 16. Фиг. 7.

Ключевые слова: фемтосекундное лазерное излучение, гидродинамика, металлы.

DOI: 10.31857/S0044466924090159, EDN: WIQNKT

1. ВВЕДЕНИЕ

Сверхкороткие лазерные импульсы (< 1 нс) — это одно из новых и активно развивающихся направлений техники, находящее широкое применение в промышленности. С их помощью возможно добиться модификации поверхностной структуры материала с необычайной точностью, недоступной механическому воздействию. Одним из ярких примеров такой технологии является поверхностное упрочнение материала LSP (laser shock peening) (см. [1]– [3]). Поверхность материала, упрочненного таким образом, показывает отличную сопротивляемость усталостным нагрузкам и малое количество дефектов поверхности, что обуславливает применение этой технологии в авиастроении, например, для упрочнения лопаток двигателей. Применяются лазеры и для создания поверхностных маломасштабных структур, например LIPSS (laser induced periodic surface structures) (см. [4], [5]). С помощью таких периодических структур можно значительно изменить свойства поверхности, например, ее коэффициент трения или отражательную характеристику. Таким образом, существует большой интерес к исследованию, особенно численному, процессов, вызванных воздействием сверхкороткого лазерного импульса. Существенным свойством таких коротких импульсов энергии является тот факт, что поглощение энергии лазерного импульса происходит целиком внутри небольшого слоя толщиной d_T , причем время нагрева существенно меньше характерного акустического времени. Это приводит к тому, что сразу после облучения в материале присутствует нагретый слой малой толщины с огромным давлением (см. [6]). Этот замечательный факт позволяет не создавать сложные численные алгоритмы, напрямую моделирующие лазерное излучение и его взаимодействие с веществом, а использовать теоретические оценки для задания корректных начальных условий. Особый интерес представляет исследование волновой динамики процесса, особенно на малых временах. При существенном затухании волн в материале они больше не способны ни вызывать пластические деформации, ни приводить к абляции вещества, что и обуславливает интерес к начальной стадии процесса. Большое распространение получили такие методы, как молекулярно-динамическое моделирование (см. [7]– [9]). Молекулярно-динамическое моделирование позволяет получать невероятно точные результаты, в некоторых

¹⁾ Работа выполнена в рамках государственного задания АААА-А19-124022400174-3.

случаях максимально приближенные к полной симуляции реально протекающих процессов. Однако попытки исследования крупномасштабных многомерных явлений с помощью такого метода в настоящее время встречают трудности, связанные с недостаточной мощностью доступных вычислительных ресурсов. Таким образом, возникает потребность в более экономном методе, основанном, например, на принципах механики сплошной среды. Известны успешные попытки моделирования начальных этапов процесса с помощью численного алгоритма, основанного на гидродинамической системе уравнений Эйлера. Однако подобный подход приводит к появлению нефизичных эффектов на границе между материалами, например, границе металл-вакуум (см. [10]). В настоящей работе предлагается метод, основанный на двухфазной гидродинамической системе уравнений Баера–Нунциато, в которой одна из фаз представляет собой конденсированное вещество мишени, а другая – идеальный газ. Представленный метод верифицируется на модельных задачах, а полученные результаты сравниваются с результатами моделирования другими методами.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Математическая модель основана на системе уравнений Баера–Нунциато (см. [11]):

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}_x(\mathbf{U}) + \mathbf{G}_y(\mathbf{U}) = \mathbf{H}(\mathbf{U}) \bar{\alpha}_x + \mathbf{S}(u) \bar{\alpha}_y$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \bar{\alpha} \\ \bar{\alpha}\bar{q} \\ \bar{\alpha}\bar{q}\bar{v} \\ \bar{\alpha}\bar{q}\bar{u} \\ \bar{\alpha}\bar{q}\bar{E} \\ \alpha q \\ \alpha q v \\ \alpha q u \\ \alpha q E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{\alpha}\bar{q}\bar{v} \\ \bar{\alpha}(\bar{q}\bar{v}^2 + \bar{p}) \\ \bar{\alpha}\bar{u}\bar{v} \\ \bar{\alpha}\bar{v}(\bar{q}\bar{E} + \bar{p}) \\ \alpha q v \\ \alpha(qv^2 + p) \\ \alpha uv \\ \alpha v(qE + p) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{\alpha}\bar{q}\bar{u} \\ \bar{\alpha}\bar{v}\bar{u} \\ \bar{\alpha}(\bar{q}\bar{u}^2 + \bar{p}) \\ \bar{\alpha}\bar{u}(\bar{q}\bar{E} + \bar{p}) \\ \alpha q u \\ \alpha v u \\ \alpha(q u^2 + p) \\ \alpha u(qE + p) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} -\bar{v} \\ 0 \\ \bar{p} \\ \bar{p}\bar{v} \\ 0 \\ -\bar{p} \\ -\bar{p}\bar{v} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} -\bar{u} \\ \bar{p} \\ 0 \\ \bar{p}\bar{u} \\ -\bar{p} \\ 0 \\ -\bar{p}\bar{u} \end{bmatrix}.$$

Здесь t — время, x, y — пространственные координаты, α — объемная доля, v — x -компонента скорости, u — y -компонента скорости, q — плотность, p — давление, E — полная удельная энергия, e — удельная внутренняя энергия. Параметры с чертой сверху соответствуют твердой фазе, параметры без черты — газовой фазе. Параметры $\bar{p}$, $\bar{v}$ и $\bar{u}$ — давление и скорости на межфазной границе, которые были выбраны следующим образом: $\bar{v} = \bar{v}$, $\bar{u} = \bar{u}$ и $\bar{p} = \bar{p}$.

Модель Баера–Нунциато можно отнести к классу *diffuse interface*, т.е. моделей со взаимопроникновением фаз. Это означает, что в модели предполагается наличие в каждой ячейке всех фаз. В случае, когда некоторый объем вычислительной области должен соответствовать физической области, занимаемой лишь одной фазой, например, металлом, объемная доля остальных фаз полагается равной некоторой заранее определенной малой константе. Таким образом, и граница между различными фазами представляет собой не резкий перепад, а плавное изменение соотношения объемных долей. Таким образом, наличие в каждой ячейке нескольких фаз приводит, с одной стороны, к тому, что решаемые уравнения не меняются во всей расчетной области, а с другой стороны, к тому, что в каждой ячейке разные фазы обладают разными давлениями и скоростями. Для стабильной работы алгоритма и наилучшему моделированию реальных процессов эти давления и скорости должны стремиться к равновесию между фазами, что приводит к необходимости некоторых алгоритмов релаксации давления и скорости. К настоящему времени в литературе присутствуют хорошо обоснованные и проверенные алгоритмы для задач динамики пористых и гранулированных сред (см., например, [12]), которые используют уравнения состояния обеих фаз для нахождения равновесного давления. Применительно к задачам описания ударно-волновых процессов в твердых телах применить классические механизмы релаксации затруднительно по причине возникновения отрицательных давлений, что делает невозможным использование уравнения состояния идеального газа для моделирования области вакуума. В связи с этим для настоящей работы был разработан следующий прототип алгоритма релаксации давления и скорости:

- Для начала определяется «эффективное» давление $\hat{p} = \bar{p}\bar{\alpha}$.
- Решается нелинейное уравнение на $\hat{q}$ — плотность после релаксации: $\bar{e}(\hat{p}, \hat{q}) - \bar{e}(\bar{p}, \bar{q}) + \frac{1}{2}(\bar{p} + \hat{p})\left(\frac{1}{\bar{q}} - \frac{1}{\hat{q}}\right) = 0$, где $\bar{e}$ — внутренняя энергия твердой фазы.
- С помощью найденной плотности обновляется значение объемной доли $\hat{\alpha} = \bar{\alpha}\frac{\bar{q}}{\hat{q}}$.

- С помощью подстановки найденных равновесных значений давления и плотности в закон сохранения энергии находятся равновесное значение скорости $\varepsilon(\hat{p}, \hat{q}) + \hat{v}^2/2 + \hat{u}^2/2 = \varepsilon(p, q) + v^2/2 + u^2/2$. В предположении, что кинетическая энергия равномерно распределяется по направлениям, вышеуказанные соотношения дополняются равенством $\hat{v}^2 - v^2 = \hat{u}^2 - u^2$.

Важным свойством является отсутствие параметров второй (газовой) фазы в этих выражениях, что позволяет использовать идеальный газ для моделирования области, физически соответствующей области вакуума. Это позволяет существенно упростить вычислительный процесс, так как нет необходимости явным образом разрешать границу между областями с разным наполнением, т.е. возможен сквозной счет. В настоящей работе будет продемонстрирована работоспособность такого подхода. Здесь и далее при упоминании моделирования вакуума будет подразумеваться именно использование идеального газа при нормальных условиях в начальный момент времени.

Необходимо отдельно упомянуть, что используемая в работе математическая модель не учитывает упруго-пластические эффекты, наблюдаемые в твердых телах. В силу этого факта, модель не будет способна количественно точно предсказывать итоговые значения формы зоны упрочнения и массы выброшенного вещества. Однако для исследования начальных этапов высокоэнергетических процессов, при которых материалы ведут себя как слабосжимаемые жидкости, настоящая модель может быть применена с большим успехом, как будет показано далее.

3. УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

Для замыкания представленной в предыдущем разделе системы уравнений необходимо задаться уравнением состояния (УРС) вещества. В настоящей работе исследуются свойства твердых тел при экстремальных условиях, что требует аккуратного подхода к данному вопросу. Для всех исследуемых веществ было использовано уравнение состояния в форме Ми-Грюнайзена. В работе используется два вещества, соответственно и два разных УРС — для фторида лития и для алюминия. УРС для фторида лития выглядит следующим образом:

$$p = p_r(q) + \Gamma q(\varepsilon - \varepsilon_r),$$

$$p_r = q_0 c^2 \frac{1-x}{(1-s(1-x))^2}, \varepsilon_r = \frac{p_r}{q_0} \frac{1-x}{2}, x = \frac{q_0}{q}.$$

Здесь $q_0 = 2650 \text{ кг/м}^3$ — референсная плотность вещества, $c = 5150 \text{ м/с}$ — референсная скорость звука, $s = 1.35$ — показатель адиабаты, $\Gamma = 0.71$ — параметр Грюнайзена. Для моделирования алюминия было использовано уравнение состояния, подробно описанное в [10]:

$$p = p_c(q) + \Gamma q(\varepsilon - \varepsilon_c),$$

$$p_c = p_0 y(y^a - y^b), y > 1,$$

$$p_c = p_g(y^n - 1), y < 1,$$

$$\varepsilon_c = \frac{p_0}{q_0} \left(\frac{y^a}{a} - \frac{y^b}{b} \right), y > 1,$$

$$\varepsilon_c = \frac{p_0}{q_0} (a-b) \left[\frac{1}{n} \left(\frac{y^{n-1}}{n-1} + \frac{1}{y} \right) - \frac{1}{n-1} - \frac{1}{ab} \right], y < 1,$$

$$n = p_0(a-b)/p_g.$$

Здесь $q_0 = 2750 \text{ кг/м}^3$ — холодная плотность вещества, $\Gamma = 1.2$ — параметр Грюнайзена, $p_0 = 560.964 \text{ ГПа}$, $a = 1.1266$, $b = 0.9775$, $p_g = 15 \text{ ГПа}$ — параметры холодной кривой, $y = \frac{q}{q_0}$.

4. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Для численного решения системы 2 используется конечно-объемный метод. Для этого система разделяется на две части: первое уравнение системы и остальные уравнения. Такой выбор обусловлен необходимостью отдельной аппроксимации уравнения переноса объемной доли для предотвращения численных осцилляций. В общем виде решение оставшейся системы записывается как

$$\mathbf{U}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{U}_{i,j}^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x} [\mathbf{F}_{i+1/2,j} - \mathbf{F}_{i-1/2,j}] - \frac{\Delta t^n}{\Delta y} [\mathbf{G}_{i,j+1/2} - \mathbf{G}_{i,j-1/2}] + \mathbf{H}_{i,j}^n \bar{\alpha}_x + \mathbf{S}_{i,j}^n \bar{\alpha}_y.$$

Здесь $\mathbf{F}_{i+1/2,j}$, $\mathbf{G}_{i,j+1/2}$, $\mathbf{F}_{i-1/2,j}$, $\mathbf{G}_{i,j-1/2}$ — численные аппроксимации потоков сквозь соответствующую стенку ячейки. Для их расчета используется HLLC (Harten-Lax-van Leer Contact) — подобный метод для двумерной системы уравнений Баера—Нунциато. Для повышения порядка аппроксимации использовалась minmod-реконструкция решения. Данный метод подробно описан и верифицирован, например, в [13] и основан на теоретической работе [14], а также [15], [16]. Выбор численного метода особенно важен для задач с явной границей между областями, занятыми только одним из нескольких веществ. Известно, что метод HLL (Harten-Lax-van Leer) для уравнений Баера—Нунциато не способен сохранять стационарный разрыв объемной доли, т.е. даже в отсутствии скоростей и перепадов давлений разрыв объемной доли будет "расползаться". Такое явление неприемлемо в исследуемом типе задач. Повышение порядка пространственной аппроксимации также служит в основном для более точного передания положения границы между веществами.

Ниже приведены формулы для численной аппроксимации потока в x -направлении $\mathbf{F}_{i+1/2,j}$ (выражения для потока в y -направлении полностью аналогичны):

$$\mathbf{F}_{i+1/2,j} = \begin{bmatrix} \Phi_{i+1/2,j} \\ \Phi_{i+1/2,j} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U}_{i,j} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{i,j} \\ \overline{\mathbf{W}}_{i,j} \end{bmatrix},$$

$$\Phi_{i+1/2,j} = \begin{cases} \Phi_{i,j}, & \text{если } S_{i+1/2,j}^- \geq 0, \\ \Phi_{i,j} + S_{i+1/2,j}^- (\mathbf{Q}_*^- - \mathbf{W}_{i,j}), & \text{если } S_{i+1/2,j}^- < 0, S_{i+1/2,j}^* \geq 0, \\ \Phi_{i+1,j} + S_{i+1/2,j}^+ (\mathbf{Q}_*^+ - \mathbf{W}_{i+1,j}), & \text{если } S_{i+1/2,j}^* < 0, S_{i+1/2,j}^+ \geq 0, \\ \Phi_{i+1,j}, & \text{если } S_{i+1/2,j}^+ \leq 0, \end{cases}$$

$$S_{i+1/2,j}^+ = \max(v_{i,j} + c_{i,j}, v_{i+1,j} + c_{i+1,j}), \quad S_{i+1/2,j}^- = \min(v_{i,j} - c_{i,j}, v_{i+1,j} - c_{i+1,j}),$$

$$S_{i+1/2,j}^* = \frac{p_{i+1,j} - p_{i,j} + \varrho_{i,j} u_{i,j} (S_{i+1/2,j}^- - u_{i,j}) - \varrho_{i+1,j} u_{i+1,j} (S_{i+1/2,j}^+ - u_{i+1,j})}{\varrho_{i,j} (S_{i+1/2,j}^- - u_{i,j}) - \varrho_{i+1,j} (S_{i+1/2,j}^+ - u_{i+1,j})},$$

$$\mathbf{Q}_*^- = \begin{bmatrix} C^- \\ C^- S_{i+1/2,j}^* \\ C^- v_{i,j} \\ C^- \left(\frac{p_{i,j}}{\varrho_{i,j}} + (S_{i+1/2,j}^* - u_{i,j}) \left(S_{i+1/2,j}^* + \frac{p_{i,j}}{\varrho_{i,j} (S_{i+1/2,j}^- - u_{i,j})} \right) \right) \end{bmatrix},$$

$$C^- = \frac{\alpha_{i,j} \varrho_{i,j} (S_{i+1/2,j}^- - u_{i,j})}{(S_{i+1/2,j}^- - S_{i+1/2,j}^*)},$$

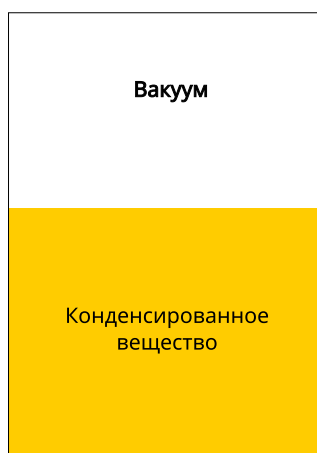
$$\mathbf{Q}_*^+ = \begin{bmatrix} C^+ \\ C^+ S_{i+1/2,j}^* \\ C^+ v_{i+1,j} \\ C^+ \left(\frac{p_{i+1,j}}{\varrho_{i+1,j}} + (S_{i+1/2,j}^* - u_{i+1,j}) \left(S_{i+1/2,j}^* + \frac{p_{i+1,j}}{\varrho_{i+1,j} (S_{i+1/2,j}^+ - u_{i+1,j})} \right) \right) \end{bmatrix},$$

$$C^+ = \frac{\alpha_{i+1,j} \varrho_{i+1,j} (S_{i+1/2,j}^+ - u_{i+1,j})}{(S_{i+1/2,j}^+ - S_{i+1/2,j}^*)}.$$

Здесь c — скорость звука, определяемая с помощью уравнения состояния соответствующей фазы. Записанные выше выражения для расчета численного потока подсистемы газовой фазы обобщаются и на подсистему конденсированной фазы с помощью элементарной замены величин без черты на величины с чертой. В этом смысле используемый солвер является симметричным относительно фаз.

5. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

В настоящей работе рассматриваются результаты численного моделирования задач о взаимодействии фемтосекундного лазерного излучения с мишенями из твердых материалов. Важно подчеркнуть, что используемая математическая модель не подразумевает прямого моделирования лазерного пучка и первоначальной стадии



Фиг. 1. Схематическая постановка первой модельной задачи.

поглощения энергии излучения мишенью. Эти процессы происходят на существенно меньших временных масштабах, поэтому вполне обоснованным является рассмотрение волновых процессов в системе в предположении уже полностью установившегося в начальный момент времени распределения температуры (давления и плотности) внутри мишени.

5.1. Центрированная волна разрежения

Для первоначальной верификации модели была рассмотрена одномерная задача разгрузки нагретого слоя конденсированной фазы фторида лития (мишень) на границе с вакуумом. Данная задача изучена и представляет собой хороший способ верификации модели. Известно, что для конденсированного вещества распределения плотности и давления при расширении в вакуум имеют четкую ступеньку, что отличает этот случай от расширения газа в вакуум, где распределения давления и плотности в волне гладкие. Геометрическая постановка задачи показана на фиг. 1.

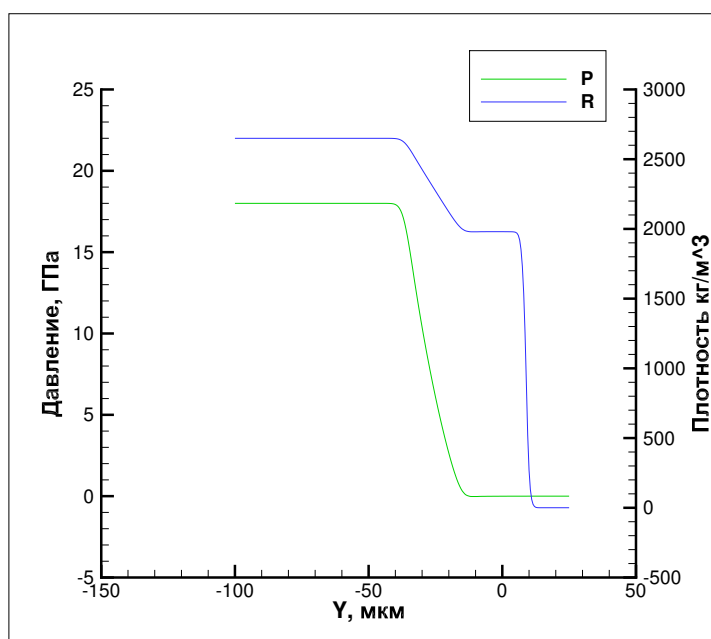
Начальное давление конденсированной фазы — 18 ГПа, в начальный момент граница между мишенью и вакуумом находится в нуле координат. Плотность вещества в начальный момент времени равна 2650 кг/м³. Толщина мишени — 100 мкм, слой вакуума над мишенью — 25 мкм. С обеих сторон поставлены неотражающие граничные условия. На фиг. 2 показаны пространственные распределения давления и плотности на момент времени 7 нс. Отчетливо видна характерная для ЦВР в конденсированных средах "ступенька" плотности, образовавшаяся на месте первоначальной границы. В полном соответствии с известными результатами находится и тот факт, что на этой "ступеньке" давление обращается в нуль. Таким образом, можно утверждать, что распространение волны разрежения в вакуум моделируется корректно, что позволяет перейти к более сложным верификационным задачам.

5.2. Динамика тонкого нагретого слоя

Особый интерес в контексте исследуемых задач представляет динамика тонкого нагретого слоя вещества (фторида лития), который, с одной стороны, контактирует с вакуумом, а с другой — с холодным веществом. В такой постановке внутрь нагретого слоя будут распространяться две волны разрежения: со стороны свободной поверхности и со стороны холодного вещества. При взаимодействии двух волн разгрузки в веществе появится зона растягивающих напряжений, которая при должной амплитуде может привести к потере сплошности веществом — отрыву. Для моделирования отрыва в настоящей работе использовался простой алгоритм. При падении скорости звука вещества до значений ниже 1 км/с в ячейке предполагалось нарушение сплошности, что выражалось в уменьшении объемной доли вещества с одновременным увеличением плотности для сохранения массы в ячейке:

$$\begin{aligned}\bar{\alpha}_i^s &= 0.9\bar{\alpha}_i, \text{ если } \bar{c}_i < 1 \text{ км/с,} \\ \bar{\rho}_i^s &= \bar{\alpha}_i\bar{\rho}_i/\bar{\alpha}_i^s.\end{aligned}\tag{1}$$

Здесь величины с верхним индексом s соответствуют значениям в ячейке после процедуры моделирования откола. Вследствие уменьшения объемной доли в дальнейшем механизм релаксации давления приводит давление в такой ячейке к нулевому. Как будет видно из результатов моделирования, такой алгоритм, хоть и не



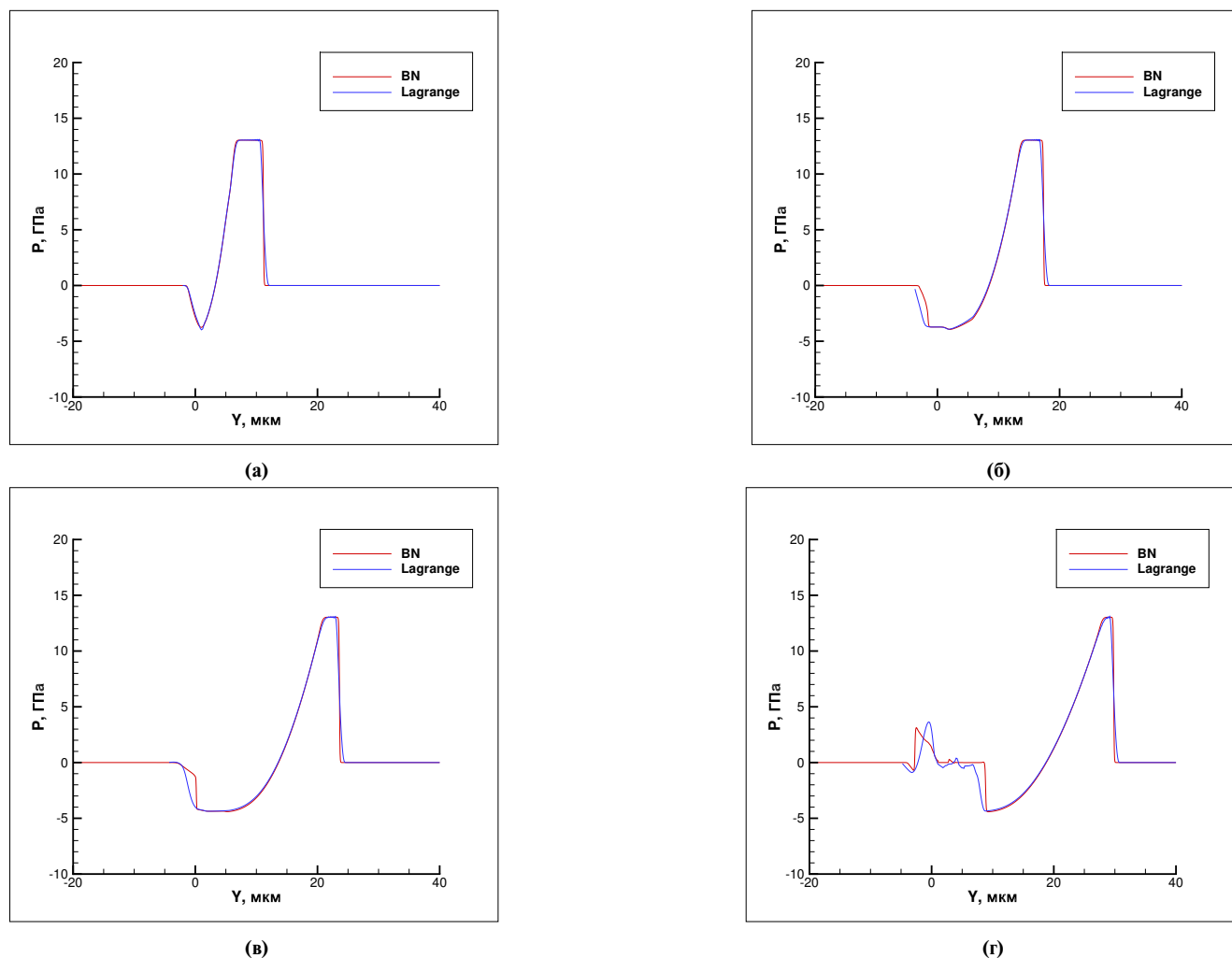
Фиг. 2. Результаты верификационного расчета.



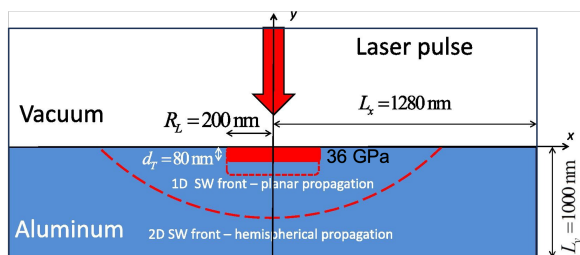
Фиг. 3. Схематичная постановка второй модельной задачи.

претендует на абсолютную корректность с физической точки зрения, показывает качественно и количественно соответствующие другим моделям результаты.

Таким образом, была рассмотрена одномерная модельная задача, схематичная постановка которой изображена на фиг. 3. В качестве референса использовались результаты численного эксперимента, проведенного с помощью модели, основанной на лагранжевом формализме. Начальное давление горячей области — 25 ГПа, плотность вещества в начальный момент времени равна 2650 кг/м^3 во всем объеме фторида лития, толщина горячей области — 5 мкм. Результаты численного моделирования представлены на фиг. 4. Представленные результаты показывают отличное количественное совпадение уходящей вглубь вещества ударной волны. Небольшие различия вызваны разными численными методами, используемыми для решения задач. На контакте с вакуумом различия более заметны, однако не меняют картину течения качественно. Важным элементом этого теста является обработка откольных явлений. В момент времени приблизительно 3.1 нс в области отрицательных давлений вещество достигает состояния откола. Как видно из фиг. 4г, оба метода показывают качественно и количественно совпадающие результаты. Полученные результаты позволяют сделать вывод о возможности представленной модели для исследования многофазных задач с присутствием границы с вакуумом.



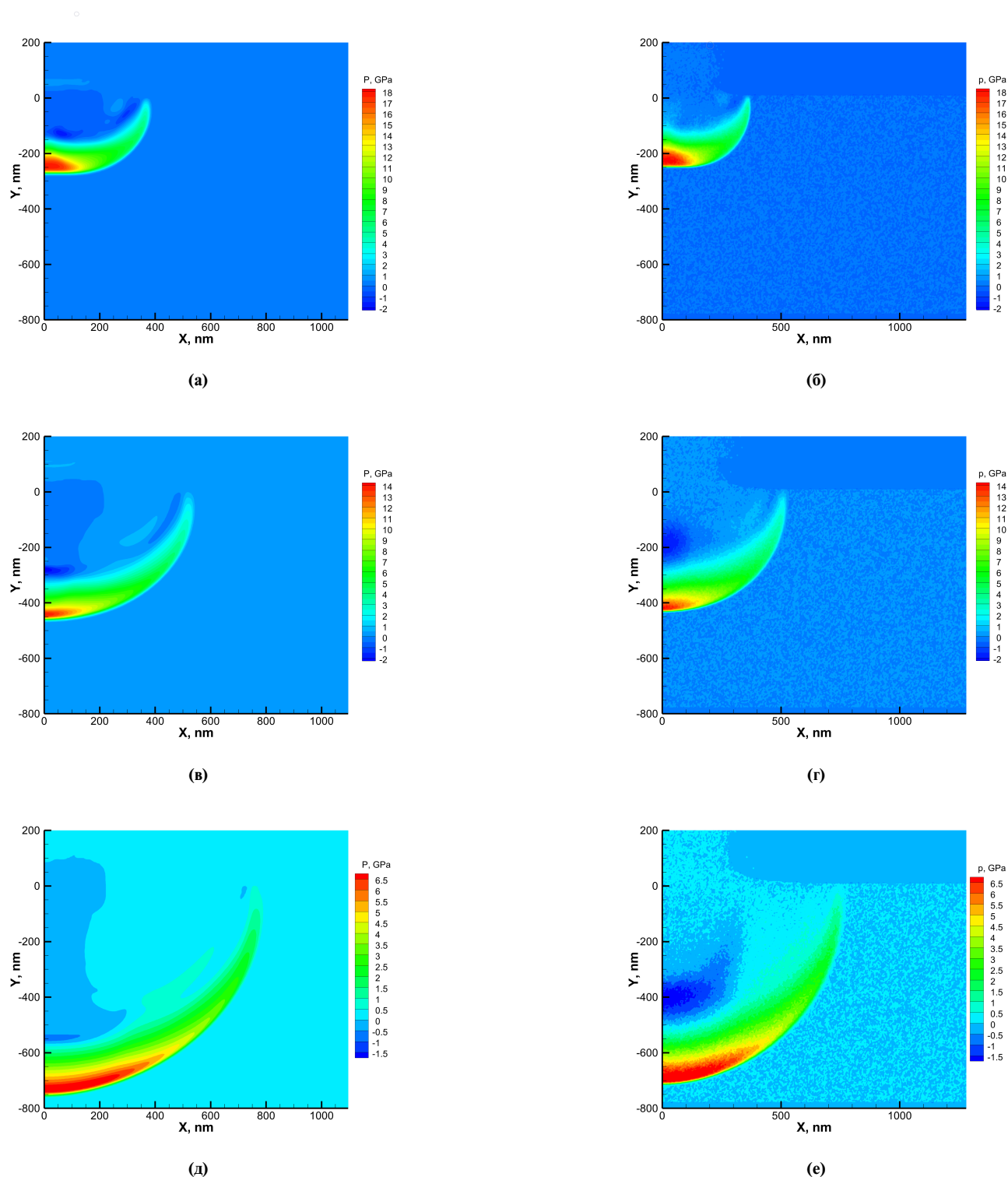
Фиг. 4. Пространственные распределения давления в моменты времени 1 нс (а), 2 нс (б), 3 нс (в), 4 нс (г).



Фиг. 5. Постановка плоской задачи о взаимодействии лазерного импульса с алюминиевой мишенью.

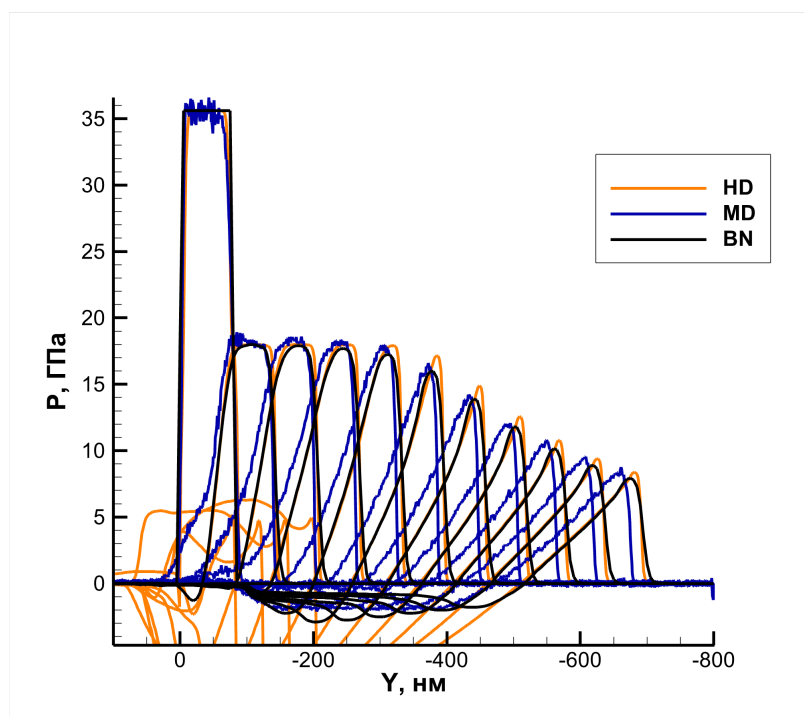
5.3. Объемная алюминиевая мишень

В настоящем разделе рассматривается численное исследование плоской задачи о взаимодействии фемто-секундного лазерного импульса с толстой алюминиевой мишенью. Постановка задачи отображена на фиг. 5. В начальный момент времени ширина нагретой области составляет 200 нм, глубина прогрева — 40 нм. Давление горячей зоны — 35.6 ГПа. Эта же задача была численно исследована с помощью алгоритма, основанного на молекулярно-динамическом подходе в приближении жидкого алюминия в работе [10]. Результаты сравнения представлены на фиг. 6. Изначальная область повышенной температуры порождает ударную волну (УВ), распространяющуюся по веществу. На протяжении первых пикосекунд процесса эта волна практически плоская, распространяющаяся параллельно оси X . Однако, с течением времени ее фронт изгибается и к моменту време-



Фиг. 6. Пространственные распределения давления в моменты времени: (а), (б) – 28.8 нс, (в), (г) – 57.6 нс, (д), (е) – 105.6 нс. Слева – BN, справа – MD.

ни 105 пс уже выглядит как дуга окружности. Амплитуда и положение фронта УВ показывают хорошее совпадение с результатами молекулярно-динамического моделирования на всех этапах процесса. Не менее важным процессом является распространение волн разгрузки (ВР). В прогретый участок входят три ВР: одна с поверхности, одна из холодного алюминия снизу и одна из холодного алюминия справа. После взаимодействия эти



Фиг. 7. Профили давления на оси канала для разных моделей.

волны создают область растягивающих напряжений, которая в дальнейшем распространяется за фронтом УВ. Как будет показано далее, характер этой области не будет влиять на верное отображение УВ, однако неточности в моделировании этой зоны могут быть критичными при исследовании процессов образования кратеров и полостей, а также в целом мешать стабильности решения. Во все три момента времени, представленные на фиг. 6, можно заметить, что представленная в настоящей работе модель недостаточно точно передает характеристики факела — области, заполненной выброшенным из основной массы мишени веществом. Факел расположен непосредственно над зоной изначального прогрева и в молекулярно-динамическом расчете имеет более выраженную форму. Динамика в этой области в основном зависит от испарения и конденсации вещества мишени. Разработка и включение субмодели, позволяющей адекватно описывать указанные процессы в представленной модели является предметом дальнейшего исследования.

Для более точного сравнения результатов рассмотрим одномерные профили давления на оси симметрии. К имеющемуся набору данных были добавлены результаты расчета однофазным гидродинамическим кодом. Эти результаты представлены на фиг. 7. Относительно описания треугольной волны, бегущей вправо, оба гидродинамических кода показывают очень близкий результат, лишь немного отличаясь от молекулярно-динамического моделирования. Особый интерес представляет область за этой волной, в которой возникает “яма”, отрицательного давления. Описываемый в этой статье метод показывает удовлетворительное качественное и количественное соответствие с MD моделированием, что отличает его от однофазной модели, в которой возникают отрицательные давления во много раз большие. Более того, в результатах предлагаемого метода отсутствуют и нефизичные значительные колебания давления на месте первоначального контакта с вакуумом. Отметим еще одно преимущество рассматриваемой модели. В однофазной модели используется одно уравнение состояния на всей расчетной области. Это приводит к некорректному моделированию ударно-волновых процессов на межфазной границе. Используемая многофазная модель позволяет применять свое уравнение состояния для каждой из фаз, что приводит к получению физически верной волновой структуры решения.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе представлена математическая модель, основанная на многофазной модели Баера–Нунциато и использованная для решения ударно-волновых задач в конденсированных средах при наличии явной контактной границы с вакуумом. Эта математическая модель, совместно с конечно-объемным методом ее решения, были верифицированы на различных задачах динамики экстремальных состояний вещества и по-

казали качественное и количественное совпадение результатов как с теоретическими предсказаниями, так и с результатами других апробированных моделей. В отличие от однофазной гидродинамической модели, динамика контактной границы намного более приближена к реальности. Существенным преимуществом предложенной модели является простота реализации, возможность легкого введения дополнительных моделей, таких как горение, а также сравнительно малые вычислительные затраты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kaczmarek A., Denis P., Krajewski M., Moscicki T., Malolepszyand Hoffman M.* Improved Laser Ablation Method for the Production of Luminescent Carbon Particles in Liquids // *Materials*. 2021. V. 14. Iss. 9.
2. *Liao Yiliang, Ye Chang, Cheng G.J.* A review: Warm laser shock peening and related laser processing technique // *Optics & Laser Tech.* 2016. V. 78. Iss. 2. P. 15–24.
3. *Walsh N., Costello J.T., Kelly T.J.* Optical diagnostics of laser-produced aluminium plasmas under water // *Appl. Phys. B*. 2017. V. 123. Iss. 6. P. 179.
4. *Haiying Song, Liu Shi-Bing, Liu H., Wang Yang, Chen Tao, Dong Xiang-Ming* Mechanism for femtosecond laser-induced periodic subwavelength structures on solid surface: surface two-plasmon resonance //
5. *Petrovic S., Gakovic B., Perusko D., Stratakis E., Radovic I., Cekada M., Fotakis C., Jelenkovic B.* Femtosecond laser-induced periodic surface structure on the Ti-based nanolayered thin films // *J. Appl. Phys.* 2013. V. 114. P 233108.
6. *Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V., Ashitkov S.I., Petrov Yu.V., Agranat M.B., Anisimov S.I., Nishihara K., Fortov V.E.* Nanospallation induced by an ultrashort laser pulse // *J. Exp. Theor. Phys.* 2008. V. 107. Iss. 1. P 1–19.
7. *Иногамов Н.А., Перов Е.А., Жаховский В.В., Шепелев В.В., Петров Ю.В., Фортובה С.В.* Лазерная ударная волна: пластичность, толщина слоя остаточных деформаций и переход из упругопластического в упругий режим распространения // *Письма в ЖЭТФ*. 2022. Т. 115. № 2. С 80–88.
8. *Xu J., Xue D., Gaidai O., Wang Y., Shaolin Xu* Molecular dynamics simulation of femtosecond laser ablation of Cu50Zr50 metallic glass based on two-temperature model // *Processes*. 2023. V. 11. Iss. 6.
9. *Bauerhenne B., Zijlstra E.S., Garcia M.E.* Molecular dynamics simulations of a femtosecond-laser-induced solid-to-solid transition in antimony // *Appl. Phys. A*. 2017. V. 123. Iss. 9. P 608.
10. *Shepelev V.V., Petrov Yu.V., Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V., Perov E.A., Fortova S.V.* Attenuation and inflection of initially planar shock wave generated by femtosecond laser pulse // *Opt. Las. Tech.* 2022. V. 152. P 108100.
11. *Baer M.R., Nunziato J.W.* A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials // *Int. J. Multiphase Flow*. 1986. V. 12. Iss. 6. P. 861–889.
12. *Saurel R., Favrie N., Petitpas F., Lallemand M.-H., Gavriluk S.L.* Modelling dynamic and irreversible powder compaction // *J. Fl. Mech.* 2010. V. 664. P 348–396.
13. *Chuprov P., Poroshyna Ya., Utkin P.* Numerical simulation of the propagation of a shock wave above the dense layer of particles using the Baer-Nunziato system of equations. // *Comb. and Expl.* 2022. V. 15. Iss. 2. P. 67–74.
14. *Tokareva S.A., Toro E.F.* HLLC-type Riemann solver for the Baer–Nunziato equations of compressible two-phase flow // *J. Comp. Phys.* 2010. V. 229. Iss. 10. P. 3573–3604.
15. *Li Q.* Difference scheme for two-phase flow // *Appl. Math. Mech.* 2004. V. 25. P 536–545.
16. *Liang Shan, Liu Wei, Yuan Li* Solving seven-equation model for compressible two-phase flow using multiple GPUs // *Comp. Fluids*. 2014. V. 99. P 156–171.

NUMERICAL STUDY OF SHOCK WAVE PROCESSES IN MATERIALS UNDER THE INFLUENCE OF ULTRASHORT LASER PULSES USING THE BAER–NUNZIATO MODEL

P. A. Chuprov*, S. V. Fortova, V. V. Shepelev

133056, 19/18 2nd Brestskaya str., Moscow, Institute of Design Automation of the Russian Academy of Sciences, Russia

**e-mail: petchu@mail.ru*

Received: 29.02.2024

Revised: 08.04.2024

Accepted: 31.05.2024

Abstract. A mathematical model based on the Baer–Nunziato multiphase model is presented. The effectiveness of the model is demonstrated by the numerical solution of shock wave problems in condensed media in the presence of an explicit contact boundary with vacuum. The results of numerical simulation of problems of interaction of femtosecond laser radiation with an aluminum target are considered. The advantage of using the Baer–Nunziato model in comparison with the single-phase hydrodynamic model in calculating the dynamics of the contact boundary is shown. The simplicity of implementation and the possibility of easy introduction of additional submodels, such as ignition, makes this approach attractive for modeling high-energy processes in multiphase media.

Keywords: femtosecond laser radiation, hydrodynamics, metals.