



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

Препринты ИПМ • Препринт № 114 за 2018 г.



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

**Вичев И.Ю., Цыгвинцев И.П.,  
Ярцев Б.Л., Кривокорытов М.С.,  
Медведев В.В.**

Численное моделирование  
поведения струи после  
воздействия лазерного  
импульса

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Численное моделирование поведения струи после воздействия лазерного импульса / И.Ю.Вичев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 114. 25 с. doi:[10.20948/prepr-2018-114](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-114)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-114>

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

**И.Ю. Вичев, И.П. Цыгвинцев, Б.Л. Ярцев,  
М.С. Кривокорытов, В.В. Медведев**

**Численное моделирование  
поведения струи после воздействия  
лазерного импульса**

**Москва — 2018**

***Вичев И.Ю., Цыгвинцев И.П., Ярцев Б.Л., Кривокоритов М.С., Медведев В.В.***

## **Численное моделирование поведения струи после воздействия лазерного импульса**

В работе описана методика моделирования поведения струи после воздействия лазерного импульса. Предварительно проводились расчеты взаимодействия излучения с веществом, для которых использовалась трехмерная радиационно-гидродинамическая программа 3DLINE. Дальнейшее движение струи с учетом поверхностного натяжения моделировалось в открытой интегрируемой платформе OpenFOAM. Анализируется согласие с экспериментом.

**Ключевые слова:** лазерная плазма, экстремальный ультрафиолет, радиационная газодинамика, поверхностное натяжение

***Ilya Yurievich Vichev, Ilya Pavlovich Tsygvintsev, Boris Leonidovich Iartsev, Mikhail Sergeevich Krivokorotov, Vyacheslav Valerievich Medvedev***

## **Numerical modeling of tin jet motion after interaction with laser pulse**

In current work the approach of jet motion modeling after interaction with laser is described. At first the calculations of interaction between material and pulsed laser were made with the use of three dimensional program 3DLINE which is based on radiative gas dynamic model. The following jet motion was modeled with considering of the surface tension in open integrated platform OpenFOAM. The agreement with experiment was analyzed.

**Key words:** laser produced plasma, extreme ultraviolet, radiative gas dynamic, surface tension

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

## **Оглавление**

Введение .....	3
Постановка задачи .....	4
Математическая модель .....	7
Дискретизация .....	9
Алгоритм interFOAM .....	13
Численное моделирование .....	14
Заключение .....	23
Список литературы .....	24

## Введение

Источники коротковолнового излучения, обладающие высокой яркостью, находят свое применение в различных отраслях. Высокояркостные источники рентгеновского излучения ( $\lambda \sim 0,1$  нм) востребованы в томографии [1]. Источники мягкого рентгена ( $\lambda \sim 1$  нм) находят применения в микроскопии и томографии клеток. Источники экстремального ультрафиолета ( $\lambda \sim 10$  нм) находят применение в полупроводниковой промышленности [2,3]. Построение таких источников основано на использовании лазерной и разрядной плазмы. Во всех перечисленных архитектурах источников при повышении яркости и мощности излучения возникает проблема тепловых нагрузок. По этой причине скорость теплоотвода является важным параметром при проектировании данных систем. В частности, параметр теплоотвода важен при проектировании системы подачи материала мишени для создания источников излучения на основе лазерной плазмы. Использование жидкометаллических струй в качестве возобновляемой мишени для создания лазерной плазмы позволяет существенно повысить эффективность теплоотвода.

Использование жидкометаллических струй в вышеописанных источниках излучения подразумевает возможность образования потоков капельного мусора (или вторичных капель, или капельной фазы). Так, например, в плазменных источниках капли могут возникать в результате фрагментации струи под воздействием импульсов давления плазмы. Для оптимальной работы источника необходимо подавлять потоки капель, поэтому разрабатываются специальные механические системы защиты [4,5], для проектирования которых необходимо знать угловое и энергетическое распределение потоков жидкого вещества.

В настоящей работе представлены первые результаты моделирования динамики жидкометаллической струи под воздействием лазерного импульса и сравнение этих результатов с экспериментальными данными, полученными в Институте спектроскопии РАН (ИСАН) [6].

Ввиду существенного различия физических механизмов, определяющих динамику мишени на этапе воздействия лазерного импульса (поглощение лазерного импульса, теплопроводность, перенос излучения, фазовый переход жидкость–газ, ионизация) и последующего инерциального разлёта (поверхностное натяжение) моделирование проводилось в два этапа. Для моделирования взаимодействия лазерного излучения с веществом использовался программный комплекс 3DLINE [7,8], основанный на радиационно-гидродинамическом приближении. Для моделирования процессов поглощения лазерного излучения в нём используется гибридная модель на основе геометрической оптики [9], перенос собственного теплового излучения плазмы рассчитывается в многогрупповом диффузионном приближении. Фазовый переход жидкость–газ и динамика ионизации описываются в квазистационарном приближении по модели FEOS [10]. Эффекты, связанные с поверхностным натяжением, отсутствуют.

На стадии инерциального движения вещества мишени существенную роль играет поверхностное натяжение. При этом относительная малость температуры и давления позволяют использовать приближение несжимаемой жидкости. Однако для хорошего описания динамики мишени на этом этапе необходимо существенно более подробное пространственное разрешение. Ввиду этих факторов моделирование на этом этапе проводится в программной платформе OpenFOAM [11], используемой для решения задач механики сплошных сред CFD (Computational Fluid Dynamics).

Авторами был разработан специальный алгоритм передачи полученных с помощью 3DLINE полей скорости и плотности на момент окончания взаимодействия лазера с веществом в OpenFOAM в качестве начальных данных для последующего моделирования эволюции струи с соблюдением законов сохранения массы и импульса.

## Постановка задачи

В ИСАН был проведен эксперимент по генерации EUV-излучающей плазмы. Плазма индуцировалась при помощи лазера, падающего на жидкометаллическую струйную мишень под прямым углом (геометрия эксперимента представлена на рис. 1). В качестве вещества мишени использовался эвтектический сплав олова (Sn) и индия (In) (стехиометрический состав смеси 48%/52%) со следующими физическими параметрами:

- плотность  $7056 \text{ кг/м}^3$ ;
- поверхностное натяжение  $560 \text{ мН/м}$ ;
- динамическая вязкость  $1,7 \text{ мПа}\cdot\text{с}$ ;
- температура плавления  $119^{\circ} \text{ С}$ .

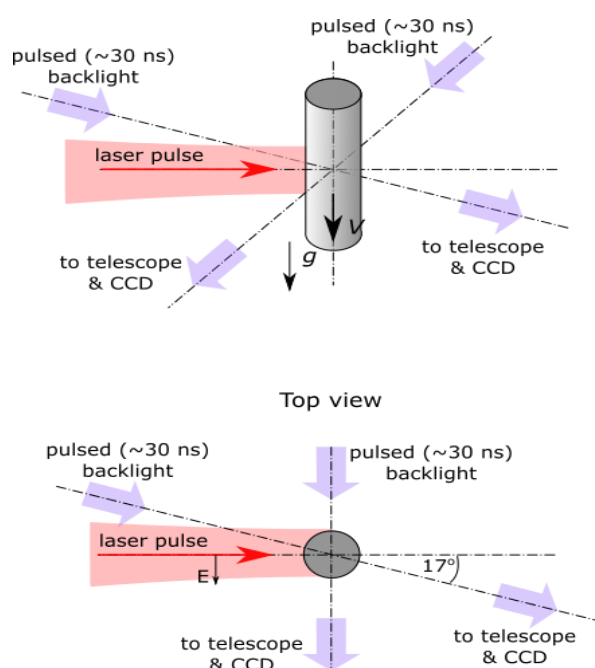


Рис. 1. Постановка эксперимента

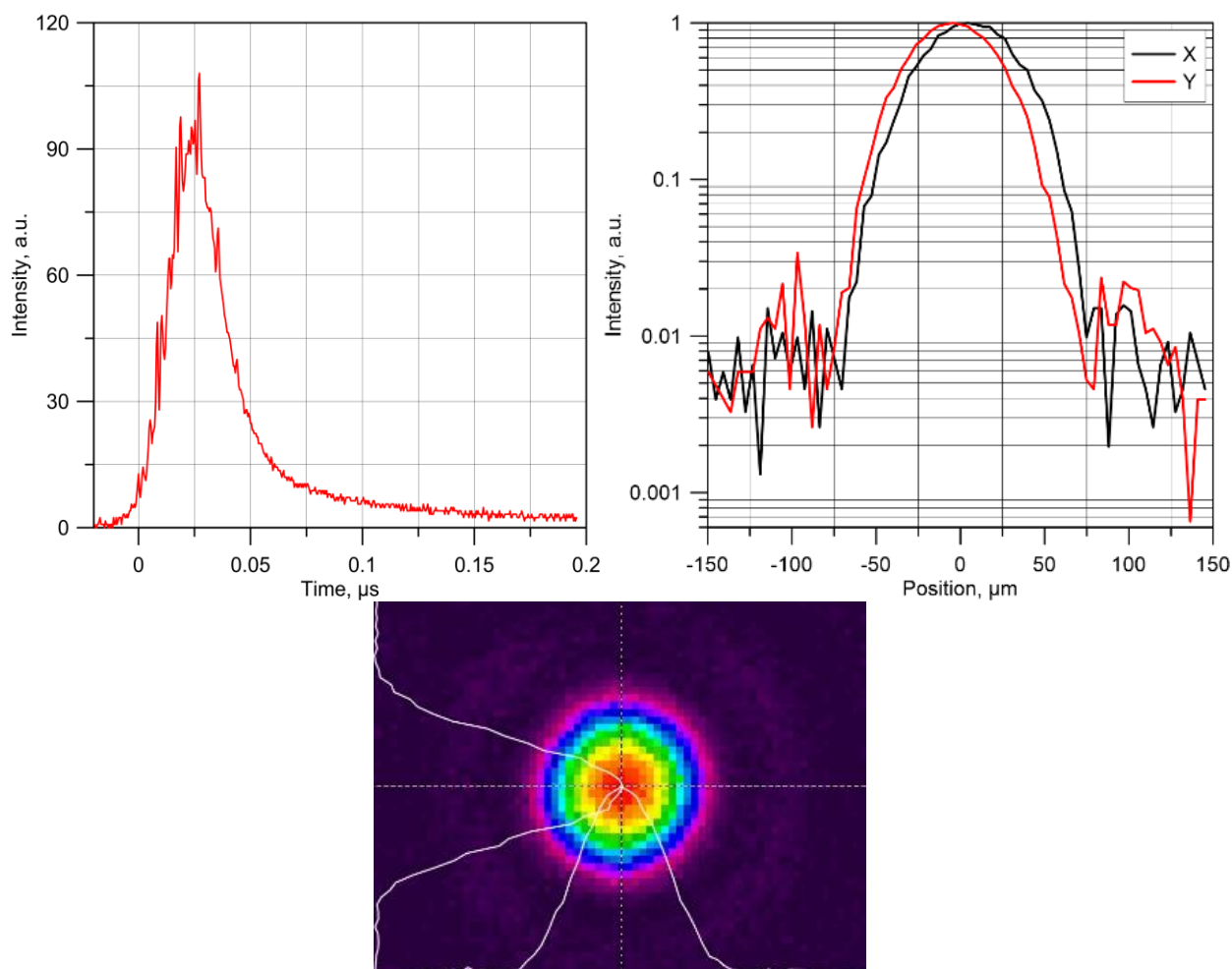


Рис. 2. Пространственный и временной профили лазерного импульса

Эксперимент проводился в вакуумной камере с давлением остаточных газов, не превышающим  $10^{-7}$  атм. Температура материала струи поддерживалась на уровне  $150^{\circ}\text{C}$ , что обеспечивало его жидкое агрегатное состояние, диаметр и скорость истечения струи варьировались.

В эксперименте используется Nd:YAG лазерная система, состоящая из задающего генератора и усилителя мощности, производства компании “Lotis TP” [5]. Длина волны лазерного излучения 1,064 мкм. Эффективная длительность импульса (полная ширина на половине высоты) составила  $\sim 28$  нс, однако из-за длинного "хвоста" импульса интенсивность оставалась выше порога абляции на протяжении существенно больших времён (см. рис. 2). Пространственный профиль лазерного пятна с хорошей точностью можно считать гауссовым, диаметр и энергия в импульсе варьировались.

В эксперименте исследовался гидродинамический отклик струи на воздействие лазерным импульсом. Для визуализации струи и ее поведения после воздействия использовался метод стробоскопической теневой фотографии. За счет короткого времени подсветки  $\sim 30$  нс фотографии можно

считать мгновенными. Варьируя задержку между лазерным импульсом и подсветкой, можно получать фотографии струи в различные моменты времени после воздействия. Пространственное разрешение составляло  $\sim 2,2$  мкм (обусловлено увеличением телескопа и размером пикселей CCD матрицы).

В данной работе для моделирования была выбрана серия экспериментов для струи с диаметром  $(55 \pm 2,2)$  мкм. В моделируемой серии экспериментов ширина пучка (диаметр на  $e^2$ ) на мишени составила 100 мкм (см. рис. 2Рис.), полная энергия в импульсе — 12,5 мДж и 2,5 мДж. Соответствующие фронтальные теневые фотографии приведены на рис. 3 и рис. 4, теневые фотографии заднего вида — на рис. 5 и рис. 6.

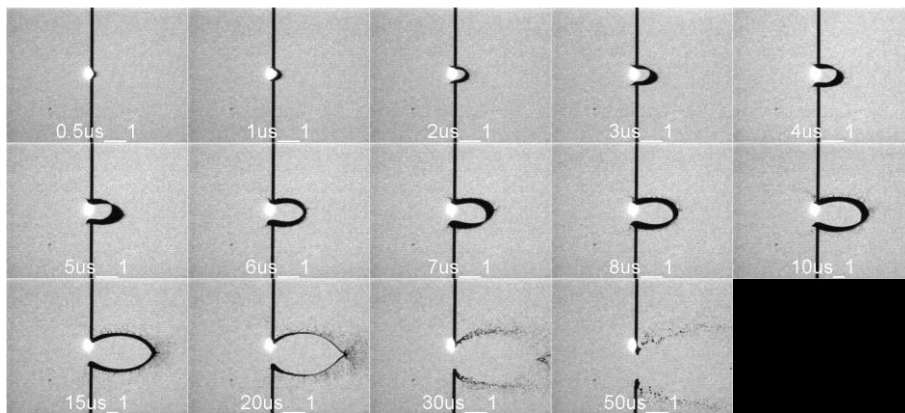


Рис. 3. Теневая фотография эксперимента (фронтальный вид, случай с энергией лазерного импульса  $12,5 \pm 0,4$  мДж)

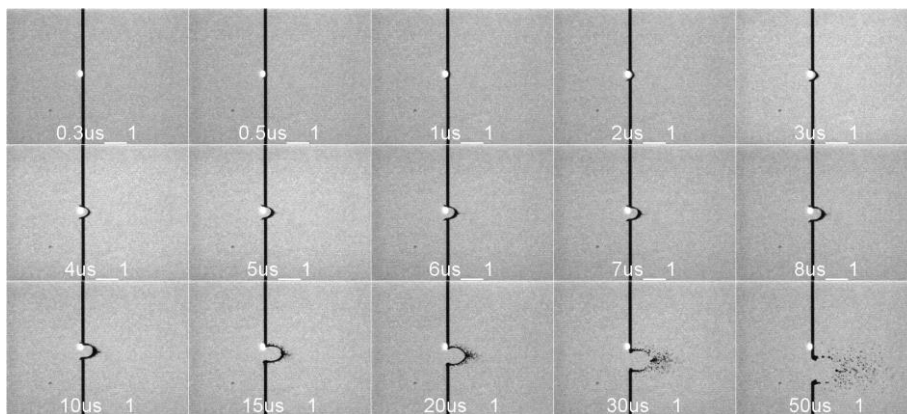


Рис. 4. Теневая фотография эксперимента (фронтальный вид, случай с энергией лазерного импульса  $2,5 \pm 0,4$  мДж)

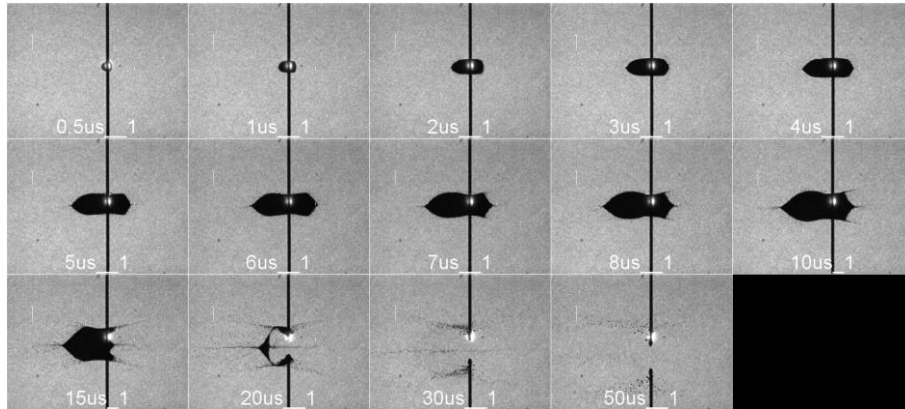


Рис. 5. Теневая фотография эксперимента (задний вид, случай с энергией лазерного импульса  $12,5 \pm 0,4$  мДж)

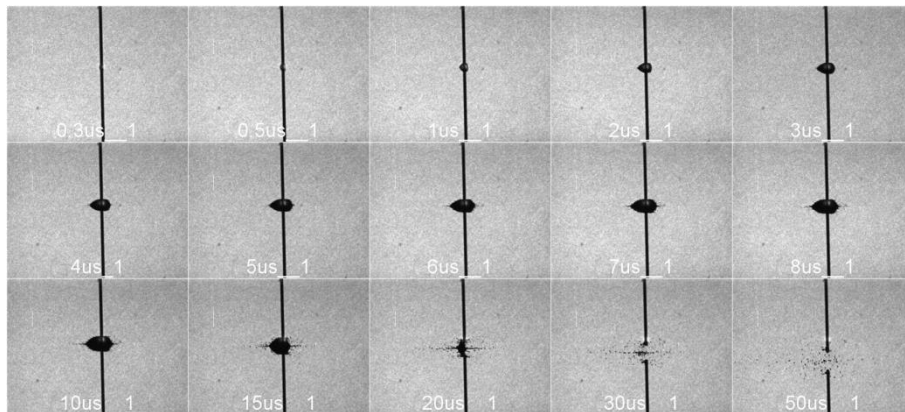


Рис. 6. Теневая фотография эксперимента (задний вид, случай с энергией лазерного импульса  $2,5 \pm 0,4$  мДж)

## Математическая модель

После воздействия лазерного импульса на струю одной из ключевых характеристик, влияющих на дальнейшую эволюцию струи, является поверхностное натяжение. Одна из простейших гидродинамических моделей для систем из двух жидкостей с учетом поверхностного натяжения – несжимаемые, несмешивающиеся жидкости. Именно на основе такой модели создан решатель *interFOAM*, использованный для расчетов в текущей работе.

Данная математическая модель основывается на методе объема жидкости VOF (Volume of Fluid) [12]. Метод VOF базируется на специальной функции-индикаторе  $\gamma$ , или фазовой доле, которая используется для определения соотношения заполнения жидкостями некоторой области пространства. При таком подходе физические свойства системы, состоящей из двух фаз, определяется как взвешенное среднее. Например, плотность  $\rho$  и динамическая вязкость  $\mu$  системы с фазами  $l$  и  $g$  определяются соответствующим образом

$$\rho = \rho_l \gamma + \rho_g (1 - \gamma),$$



$$\mu = \mu_l \gamma + \mu_g (1 - \gamma).$$

В текущей модели данное обстоятельство справедливо в том числе и для скоростей:

$$\vec{U} = \gamma \vec{U}_l + (1 - \gamma) \vec{U}_g.$$

В рамках VOF эволюционное уравнение на фазовую долю имеет вид

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{U} \gamma) + \nabla \cdot [\vec{U}_r \gamma (1 - \gamma)] = 0, \quad (1)$$

где

$$\vec{U}_r = \vec{U}_l - \vec{U}_g \quad (2)$$

вектор относительной скорости (скорости сжатия).

Сила поверхностного натяжения вычисляется с помощью модели CFS (Continuum Surface Force) [13]. В случае постоянного коэффициента поверхностного натяжения  $\sigma$  она равна

$$\vec{f}_\sigma = \sigma \kappa \nabla \gamma,$$

где  $\kappa$  – средняя кривизна свободной поверхности, определяемая выражением

$$\kappa = -\nabla \cdot \left( \frac{\nabla \gamma}{|\nabla \gamma|} \right).$$

Для упрощения определения граничных условий вводится модифицированное давление

$$p_d = p - \rho \vec{g} \cdot \vec{\chi},$$

где  $\vec{\chi}$  – радиус-вектор рассматриваемой точки, а  $\vec{g}$  – ускорение свободного падения. При этом сумма градиента гидродинамического давления и силы тяжести, действующих на единицу массы жидкости, записывается в виде

$$-\nabla p + \rho \vec{g} = -\nabla p_d - (\vec{g} \cdot \vec{\chi}) \nabla \rho.$$

В связи с тем, что рассматриваются несжимаемые жидкости, уравнение неразрывности эквивалентно условию

$$\nabla \cdot \vec{U} = 0. \quad (3)$$

И, наконец, с учетом сказанного выше, приведем уравнение количества движения в рамках модели VOF (в индексной записи):

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial \chi_k}(\rho U_i U_k) - \frac{\partial}{\partial \chi_k} \left( \mu \frac{\partial U_i}{\partial \chi_k} \right) - \frac{\partial U_k}{\partial \chi_i} \frac{\partial \mu}{\partial \chi_k} = \\
& = -\frac{\partial p_d}{\partial \chi_i} - g_k \chi_k \frac{\partial \rho}{\partial \chi_i} + \sigma \kappa \frac{\partial \gamma}{\partial \chi_i}.
\end{aligned} \tag{4}$$

Таким образом, математическая модель состоит из эволюционного уравнения на фазовую долю (1), уравнения непрерывности (3) и уравнения движения (4). Отметим, что необходимым условием является ортогональность скорости сжатия (2) границе раздела фаз (интерфейсу).

## Дискретизация

Для численного решения системы уравнений, приведенной выше, использовался метод конечных объемов FVM (Finite Volume Method) [14–16]. Как и другие методы дискретизации, FVM трансформирует систему дифференциальных уравнений в соответствующую систему линейных алгебраических уравнений. Подробное описание метода конечных объемов выходит за рамки текущей работы, поэтому будут приведены только основные положения. Данный метод базируется на таких понятиях, как центр тяжести ячейки (или грани) и контрольные объемы, на которые разбивается пространство. Положение центра тяжести ячейки  $\vec{\chi}_P$  определяется следующим образом:

$$\int_{V_P} (\vec{\chi} - \vec{\chi}_P) dV = 0.$$

В этом методе дискретизации уравнения рассматриваются в интегральной форме по времени и пространству. Далее, используя линейное разложение по пространству (в окрестности центра тяжести ячейки) и времени (в окрестности некоторого фиксированного момента времени) и воспользовавшись теоремой Остроградского–Гаусса, дифференциальные уравнения приводятся к дискретизованной форме. Переход к дискретизованной системе уравнений с помощью метода FVM осуществляется с соблюдением закона сохранения массы.

Приведем систему дифференциальных уравнений (1), (3), (4) в дискретизированной форме. Уравнение движения (4) имеет вид

$$a_p'' \vec{u}_P = \vec{H}(\vec{u}) - \nabla p_d - (\vec{g} \cdot \vec{\chi}) \nabla \rho + \sigma \kappa \nabla \gamma, \tag{5}$$

где  $a_p''$  – диагональные коэффициенты матрицы уравнения движения, а слагаемое  $\vec{H}(\vec{u})$  состоит из недиагональной части этой матрицы и дискретизованных временных членов.  $\vec{\chi}$  – радиус-вектор точки в рассматриваемой ячейке.

Это же уравнение с учетом уравнения непрерывности (3):

$$\nabla \cdot \left\{ [a_p^u]^{-1} \nabla p_d \right\} = \nabla \cdot \left\{ [a_p^u]^{-1} \left[ \bar{H}(\bar{u}) - (\bar{g} \cdot \bar{\chi}) \nabla \rho + \sigma \kappa \nabla \gamma \right] \right\}. \quad (6)$$

И, наконец, потоки, удовлетворяющие уравнению непрерывности:

$$F = -\left(a_p^u\right)^{-1} \bar{S}_f \cdot \nabla p_d + \left(a_p^u\right)^{-1} \bar{S}_f \cdot \left[ \bar{H}(\bar{u}) - (\bar{g} \cdot \bar{\chi}) \nabla \rho + \sigma \kappa \nabla \gamma \right]. \quad (7)$$

Здесь  $\bar{S}_f$  – вектор, направленный вдоль внешней нормали к поверхности и имеющий длину, равную площади поверхности.

Эволюционное уравнение на фазовую долю дискретизируется тем же образом в рамках метода FVM, за исключением “скорости сжатия” (2). Как было сказано ранее, необходимо, чтобы “скорость сжатия” была перпендикулярна интерфейсу. После дискретизации значение “скорости сжатия” в центреиде грани ячейки имеет вид

$$U_{r,f} = n_f \left[ C_\gamma \frac{|\phi|}{|\bar{S}_f|}, \max \left( \frac{|\phi|}{|\bar{S}_f|} \right) \right],$$

где  $\phi$  – объемный поток через грань ячейки,  $C_\gamma$  – константа и  $n_f$  – вектор нормали к интерфейсу, вычисленный в центреиде грани ячейки с помощью градиента фазовой доли следующим образом:

$$n_f = \frac{(\nabla \gamma)_f}{|(\nabla \gamma)_f| + \delta_n}.$$

Здесь  $\delta_n$  – малая величина, необходимая для стабилизации вычислений в случае малости градиента фазовой доли.

Данный подход полностью опирается на определение “скорости сжатия”. Если движение газообразного вещества мало в окрестности свободной поверхности, то относительная скорость, или “скорость сжатия”, будет равна скорости жидкой фазы. В случае, когда скорости фаз по модулю примерно одинаковые, интенсивность сжатия свободной поверхности контролируется константой  $C_\gamma$ . Если эта константа равна нулю, то сжатия не происходит, умеренное сжатие, если равна единице, и усиленное сжатие, если значение больше единицы. Стоит отметить, что поток  $\phi$  здесь вычисляется не через интерполяцию скорости, а определяется как консервативный поток, полученный в процессе решения согласованной системы скорость – давление, которая была описана выше.

В процессе численного решения в OpenFOAM используется адаптивный временной шаг. Величина временного шага регулируется в начале каждой итерации цикла по времени, опираясь на значение числа Куранта:

$$Co = \frac{\vec{U}_f \cdot \vec{S}_f}{\vec{d} \cdot \vec{S}_f} \Delta t.$$

Здесь  $\vec{d}$  – это вектор между точками соседних контрольных объемов, где проводятся вычисления, и  $\Delta t$  – временной шаг. Значение локального максимума числа Куранта  $Co^0$  определяется с использованием величин  $\vec{U}_f$  и  $\Delta t$  с предыдущего временного слоя выражением:

$$\Delta t^n = \min \left\{ \frac{Co_{\max}}{Co} \Delta t^0, \left( 1 + \lambda_1 \frac{Co_{\max}}{Co} \right) \Delta t^0, \lambda_2 \Delta t^0, \Delta t_{\max} \right\},$$

где  $\Delta t_{\max}$  и  $Co_{\max}$  – ограничивающие величины для временного шага и числа Куранта соответственно. Согласно такому определению новый временной шаг уменьшается, если  $Co$  превышает  $Co_{\max}$ , и увеличивается в обратном случае. Во избежание осцилляций, приводящих к неустойчивости, увеличение временного шага контролируется затухающими факторами  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ .

Существуют различные подходы к решению систем алгебраических уравнений, аналогичных рассматриваемой системе. В interFOAM используется подход раздельного решения уравнений, при котором уравнения системы решаются последовательно. Отметим, что в этом случае важным условием является согласованность уравнений системы. PISO [17], SIMPLE [18] и их вариации – самые популярные методы решения подобных систем, в которых решена проблема согласования давление–скорость. Алгоритм SIMPLE используется для решения задач об установившихся течениях. Поэтому для получения временных зависимостей в данной работе используется алгоритм PISO, который состоит из следующих частей (см. рис. 7).

- а) Решение уравнения движения. Точное значение градиента давления неизвестно на данном этапе, вместо него используется поле давления с предыдущего временного шага. Эта стадия решения называется предиктором количества движения (momentum predictor). Решение уравнения задает аппроксимацию нового поля скорости.
- б) С помощью поля скорости, полученного на предыдущей стадии, составляется оператор  $\vec{H}(\vec{u})$  и формулируется уравнение на давление. Этот шаг называется определением давления (pressure solution).
- в) Выражение (7) задает новый набор потоков, согласованных с новым полем давления. Поле скоростей также необходимо скорректировать в силу нового распределения давления. Корректировка поля скоростей

проводится в явном виде с помощью уравнения (5). Это стадия явной корректировки скорости (explicit velocity correction stage).

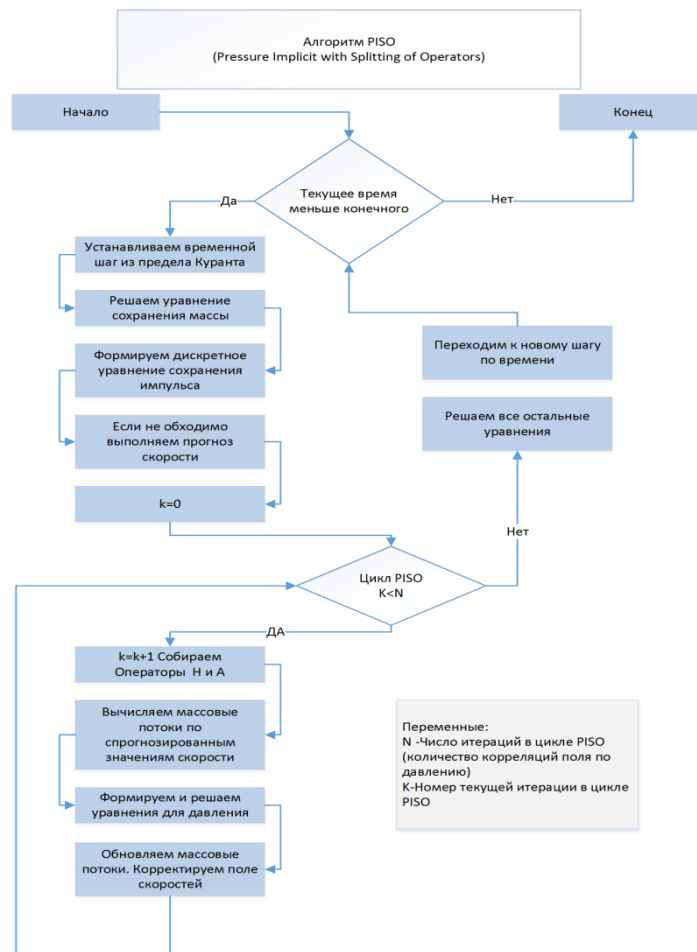


Рис. 7. Блок-схема алгоритма PISO

Рассмотрим граничные условия в рамках метода FVM. В связи с тем, что вычислительная сетка содержит набор граней, совпадающих с границами физической области, граничные условия также дискретизируются с помощью метода конечных объемов. Условно граничные условия можно разделить на два типа: физические и численные, причем за каждым физическим условием стоит набор численных условий. Из физических условий будет использоваться условие прилипания (slip) при отсутствии трения, которое согласно [19] задаётся уравнениями (8), (9). Также будет использоваться условие симметрии относительно плоскости (symmetryPlane), описанное в [20], задаётся уравнениями (8), (10). Из численных условий будет использоваться равенство нулю нормальной к границе компоненты градиента (zeroGradient).

$$\vec{U} \cdot \vec{n} = 0, \quad (8)$$

$$\vec{\tau} \cdot T \cdot \vec{n} = 0, \quad (9)$$

где  $\vec{\tau}$  и  $\vec{n}$  – тангенциальный и вектор внешней нормали к поверхности соответственно,  $T$  – тензор напряжений.

$$\nabla \phi \cdot \vec{n} = 0. \quad (10)$$

Здесь  $\phi$  – переменная потока (например, фазовая доля и давление).

## Алгоритм interFOAM

Основываясь на математической модели и методе дискретизации, заложенных в решателе interFOAM, в данном разделе будет приведена схема решения данной гидродинамической задачи с помощью interFOAM. В описании будут опущены внутренние этапы работы программы (такие как подключение библиотек и создание объектов), а также различные опции решения, предоставляемые OpenFOAM. Опишем одну глобальную итерацию по времени.

Из начального положения вещества в пространстве конструируется начальное пространственное распределение функции-индикатора  $\gamma$ . Согласно принятой математической модели, по известному распределению фазовой доли определяются физические свойства вещества – распределение плотности и кинематической вязкости в пространстве. Из последних двух распределений определяется динамическая вязкость.

Далее решается уравнение на фазовую долю с применением метода дискретизации FVM. Сначала вычисляется скорость сжатия в центроидах граней ячеек и определяется нормаль к интерфейсу. В связи с тем, что рассматриваемое уравнение неявно задает  $\gamma$ , решение проводится итерационным образом с заданным количеством итераций, определяющим необходимое количество корректировок. Каждое слагаемое уравнения представляется в виде потока для того, чтобы продолжить решение с помощью специальной техники MULES [21], введенной в OpenCFD. Отметим, что данная техника гарантирует ограниченность решения вне зависимости от выбранной численной схемы. После решения уравнения корректируются кривизна свободной поверхности  $\kappa$  и распределение плотности. Распределение фазовой доли и плотности в совокупности с суммарным объемным потоком позволяют восстановить поле массового потока.

Следующим шагом является решение уравнения давления, уравнения непрерывности и их связи через PISO цикл, который был описан ранее. В связи с тем, что в данной работе не использовался momentum predictor, сразу начинается цикл PISO по уравнению давления с указанным количеством итераций, т.е. числом необходимых корректировок решения. Цикл начинается с вычисления обратных диагональных элементов матрицы уравнения движения. Затем с помощью схемы центральной производной через интерполяцию

вычисляются значения этих элементов в центроидах граней ячеек, согласно методу FVM. Теперь необходимо “собрать” аргумент дивергенции в правой части уравнения давления (6). Затем вычисляется суммарный поток, и происходит согласование входных и выходных потоков с уравнением непрерывности. После чего задается опорное давление и, наконец, определяется решение уравнения давления. Корректируется объемный поток, и восстанавливается поле скоростей. Завершающим шагом является корректировка поля скоростей, чтобы оно соответствовало граничным условиям.

## Численное моделирование

Далее будут приведены результаты численного моделирования эксперимента по генерации EUV-излучающей плазмы, описанного ранее. Напомним, что для численного решения последовательно использовались программа 3DLINE и решатель interFOAM.

При моделировании рассматривалось олово с плотностью  $6340 \text{ кг/м}^3$ , поверхностным натяжением  $540 \text{ мН/м}$  и динамической вязкостью  $0,15 \text{ мПа}\cdot\text{с}$ .

Моделирование инерциального разлета начинается с подготовки расчетной области. Решается задача об эволюции струи жидкого олова по начальному распределению плотности и поля скоростей. Данные распределения возникают после взаимодействия лазерного излучения с веществом, которое обчисляется с помощью 3DLINE, как было сказано ранее. Полученные распределения переносятся в среду OpenFOAM с помощью метода объемно-взвешенной (Cell Volume Weighted (CVW)) [22] интерполяции.

Для описания движения струи нет необходимости рассматривать её целиком в силу симметрии. Целесообразно ввести упрощения, не влияющие на результат в рамках задачи, но уменьшающие время расчета. От целой струи выделяется  $\frac{1}{4}$  часть: делаются 2 разреза (одна плоскость разреза параллельна высоте, другая – перпендикулярна), каждый из которых делит струю на 2 равные части. При этом на одну из плоскостей разреза (параллельную высоте) накладывается граничное условие симметрии (8), (10). На оставшуюся плоскость (перпендикулярную высоте) накладывается граничное условие свободного проскальзывания без трения (8), (9), физически аналогичное условию симметрии.

Далее подробно рассмотрим расчеты, проведенные в OpenFOAM. Размеры сетки и расчетной области будут приведены далее при описании результатов моделирования. Граничные условия схематически изображены на рис. 8. На переднюю грань параллелепипеда накладывается граничное условие (8), (10). На верхнюю и нижнюю грань – условие (8), (9), которое обеспечивает свободное проскальзывание жидкости на границе. На остальные грани – условие отсутствия нормальной компоненты градиента, обеспечивающее свободный вылет из расчетной области.

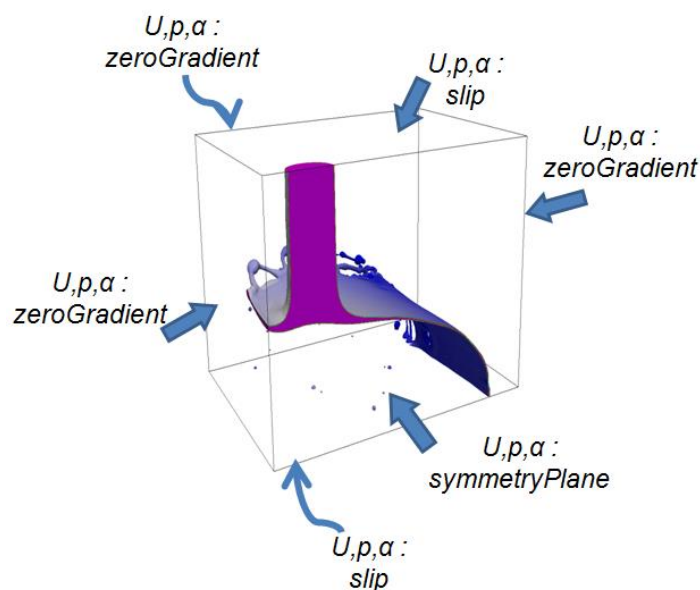


Рис. 8. Граничные условия

Численное моделирование было проведено для двух значений энергии лазера: 12,5 мДж и 2,5 мДж на гибридном вычислительном комплексе К-100 [23]. Расчеты проводились на 192 процессорах для двух вариантов сеток: фиксированной и с динамическим отслеживанием границы. Цель проведения расчетов на таких двух сетках – проанализировать зависимость решения от размера ячейки. Для случая 12,5 мДж расчеты заняли 4,5 и 14,5 часов для фиксированной сетки и сетки с динамическим отслеживанием границы соответственно. Для случая 2,5 мДж — заняли 7 и 8,5 часов для фиксированной сетки и сетки с отслеживанием границы соответственно. Расчеты на подробной фиксированной сетке проводились с помощью решателя *interFOAM*, а на сетке с динамическим отслеживанием границы – с помощью альтернативного решателя *interDyMFOAM* с функцией локальной динамической адаптации сетки.

Для расчетов на фиксированной сетке в случае с энергией лазера 12,5 мДж была выбрана область размера  $250 \times 250 \times 300$  мкм<sup>3</sup> (по осям  $x, y, z$  соответственно) с линейным размером ячейки 1 мкм, таким образом общее количество ячеек  $18 \cdot 750 \cdot 000$ . Для расчетов на сетке с отслеживанием границы в этом же случае область –  $250 \times 250 \times 350$  мкм<sup>3</sup>, начальный размер ячейки – 2 мкм, минимальный – 0,25 мкм (на границе раздела фаз) (рис. 9).



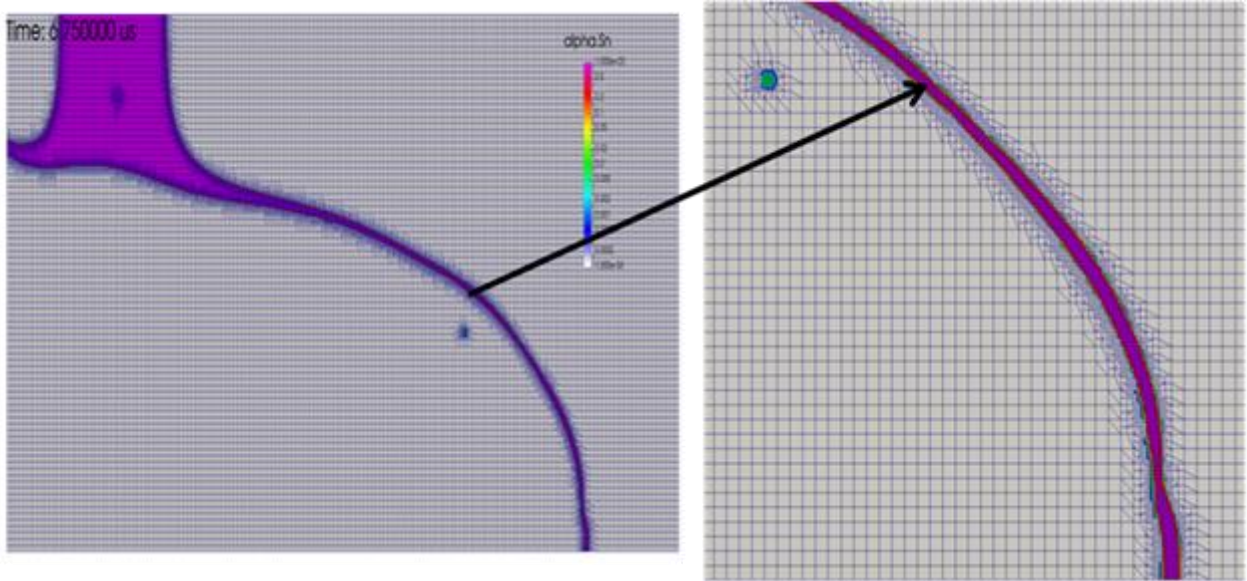


Рис. 9. Локальная адаптация сетки

Фронтальный вид разлета струи для фиксированной сетки и сетки с отслеживанием границы приведен на рис. 10 и рис. 11 на моменты времени 0,5 мкс, 1 мкс и 2 мкс. Также на рис. 12 и 13 приведен вид сзади на те же самые моменты времени для соответствующих сеток.

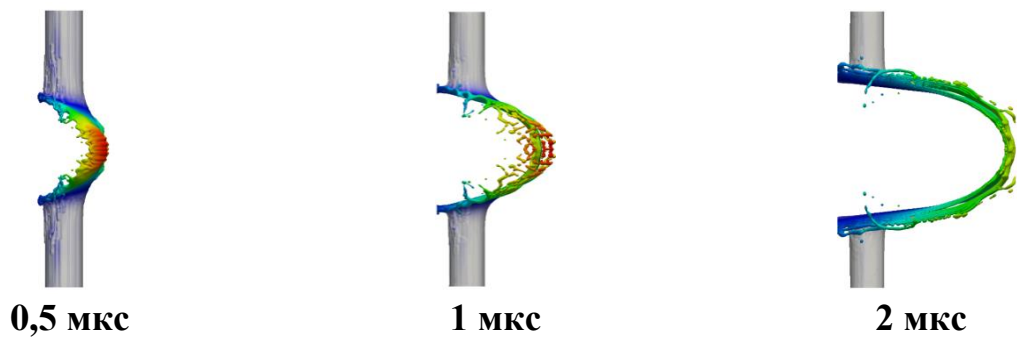


Рис. 10. Фронтальный вид разлета струи (фиксированная сетка, 12,5 мДж)

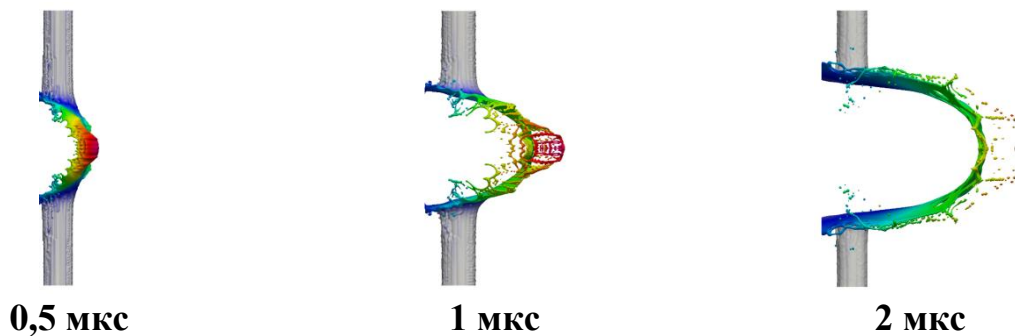


Рис. 11. Фронтальный вид разлета струи (сетка с отслеживанием границы, 12,5 мДж)

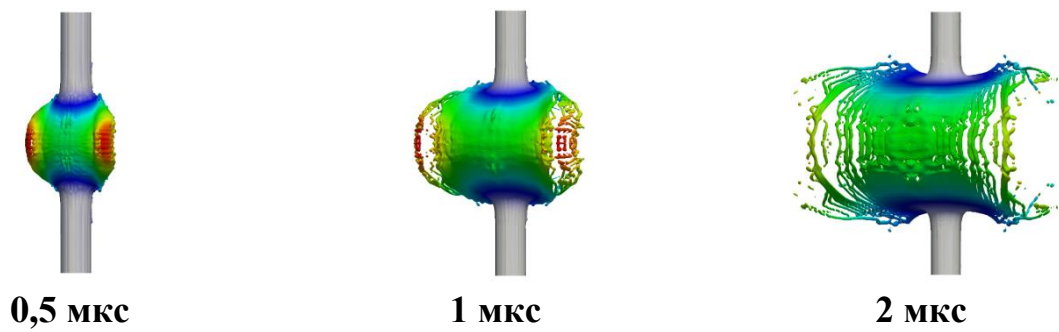


Рис. 12. Задний вид разлета струи (фиксированная сетка, 12,5 мДж)

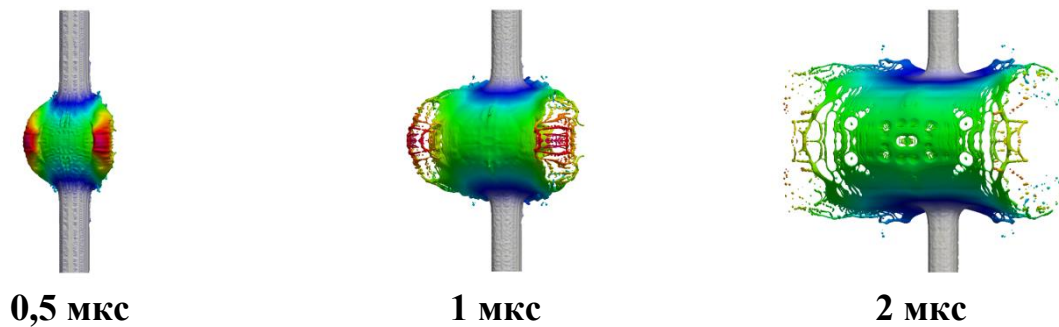


Рис. 13. Задний вид разлета струи (сетка с отслеживанием границы, 12,5 мДж)

В случае с энергией лазера 2,5 мДж области и размеры ячеек для расчетов на тех же сетках были выбраны идентичными случаю 12,5 мДж. Фронтальный вид разлета струи для фиксированной сетки и сетки с динамическим отслеживанием границы приведен на рис. 14 и рис. 15 соответственно. Также на рис. 16 и рис. 17 приведен вид сзади на те же моменты времени для соответствующих сеток.

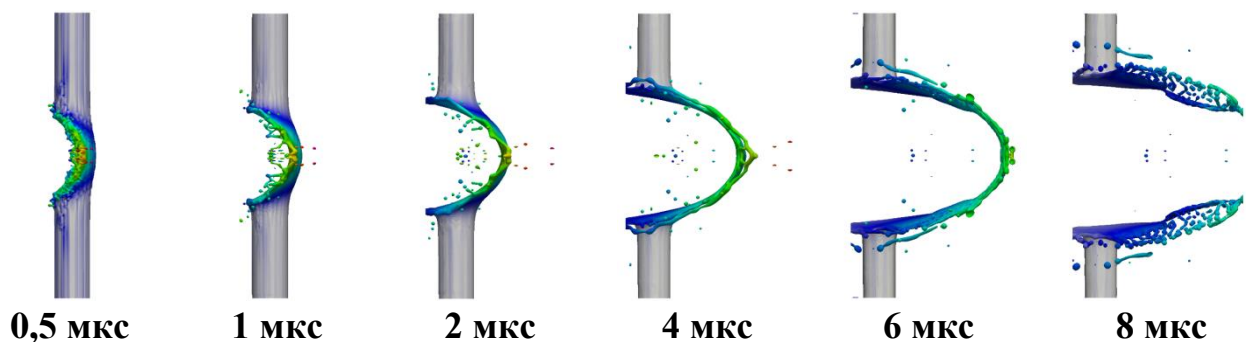


Рис. 14. Фронтальный вид разлета струи (фиксированная, 2,5 мДж)

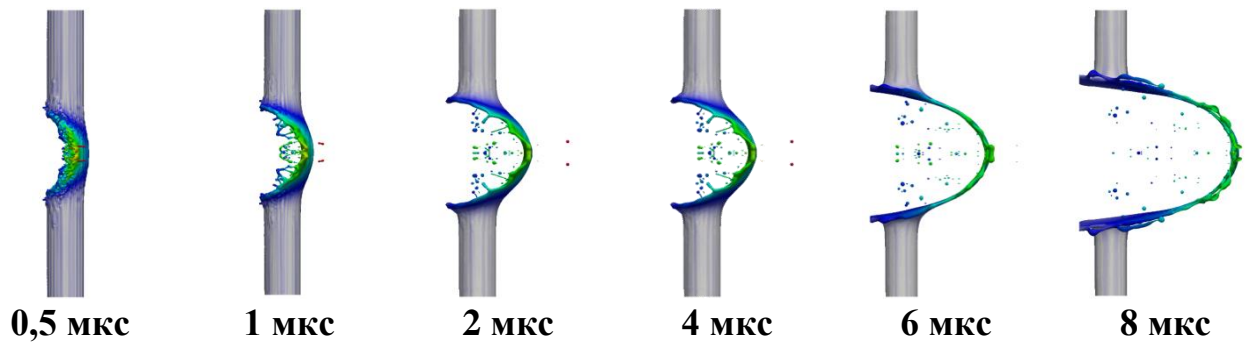


Рис. 15. Фронтальный вид разлета струи (сетка с отслеживанием границы, 2,5 мДж)

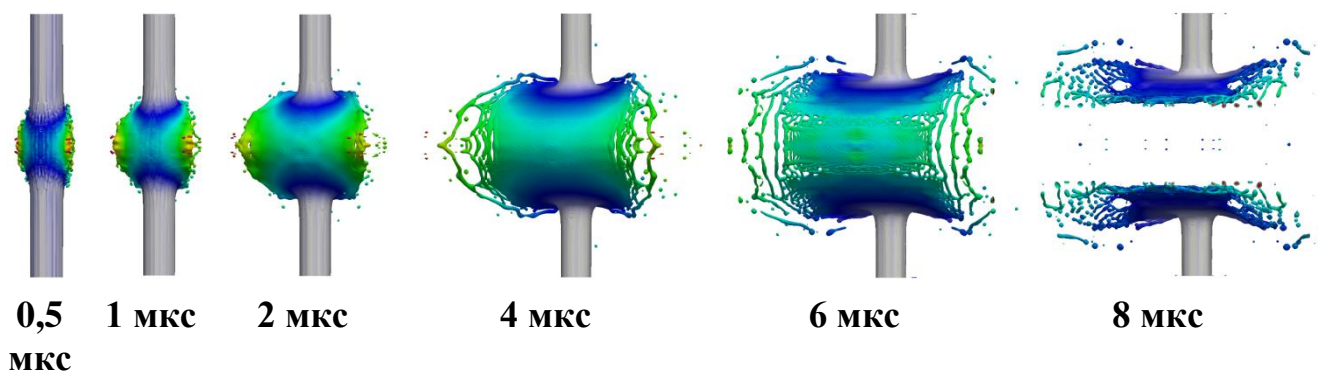


Рис. 16. Задний вид разлета струи (фиксированная сетка, 2,5 мДж)

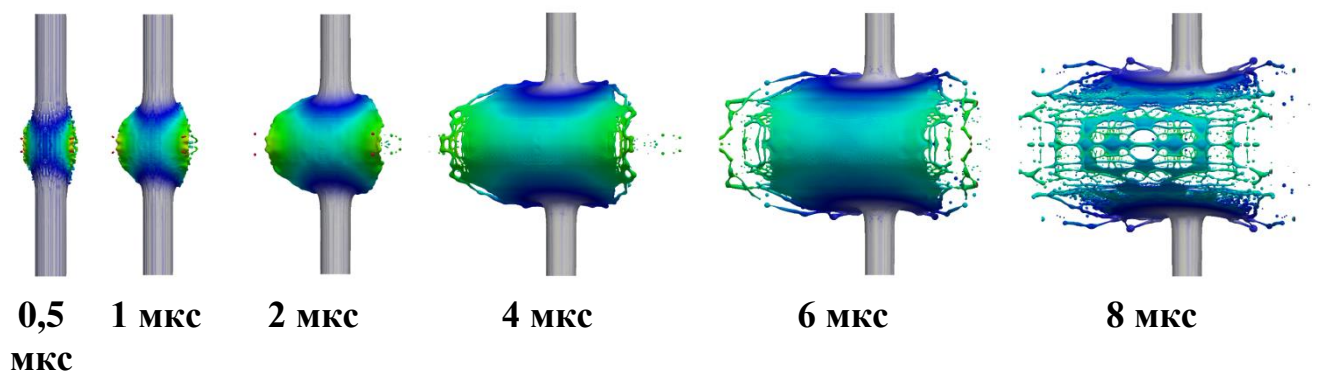


Рис. 17. Задний вид разлета струи (сетка с отслеживанием границы, 2,5 мДж)

Для определения точности численного моделирования и применимости выбранной модели в условиях рассматриваемого эксперимента необходимо выделить основные характеристики, которые будут сопоставлены с соответствующими экспериментальными данными. В качестве этих характеристик были выбраны: профиль струи, отклонение слоя от главной оси струи, момент времени разрыва струи. Примечательно, что результаты моделирования на постоянной и динамической сетке практически совпадают. Из этого следует, что интегральная картина разлета не зависит от размера ячейки, но на динамику отрыва влияет количество ячеек, приходящихся на толщину отрывающегося слоя.

Временные профили струи совпадают с экспериментом на качественном уровне. Количественное сравнение численных результатов с экспериментом проведено на основании временных зависимостей отклонения от центра струи (рис. 18 и 19). Отклонение от центра на произвольный момент времени вычислялось следующим образом. Примем, что разлет струи происходит вдоль оси  $Z$  в декартовой системе координат, тогда величина отклонения будет равняться модулю некоторой координаты  $z^*$  (рис. 20). При этом точкой отсчета будет  $z=0$  – положение центральной оси струи на начальный момент времени. На каждый последующий момент времени проводится плоскость, перпендикулярная оси  $Z$ , через точку  $z^*$  таким образом, что при малом смещении вдоль направления движения фазовая доля во всех точках плоскости обращалась в ноль. Иными словами, имеют место выражения (для  $x, y$  на рассматриваемой плоскости):

$$\forall x, y \quad \gamma(x, y, z^* + \Delta z) = 0, \Delta z \rightarrow 0$$

$$\exists x, y : \gamma(x, y, z^*) \neq 0$$

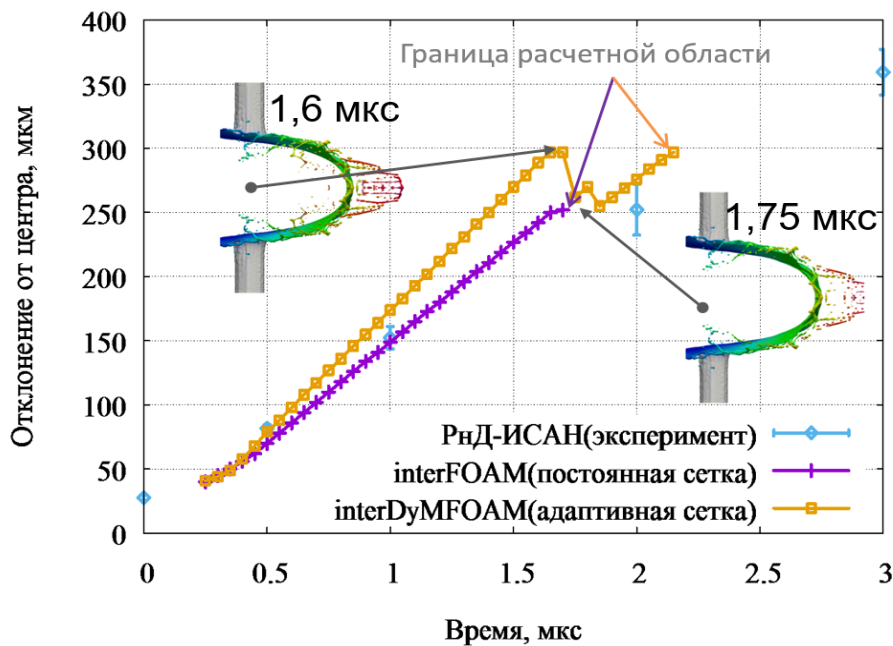


Рис. 18. Временная зависимость отклонения от центра (случай 12,5 мДж)

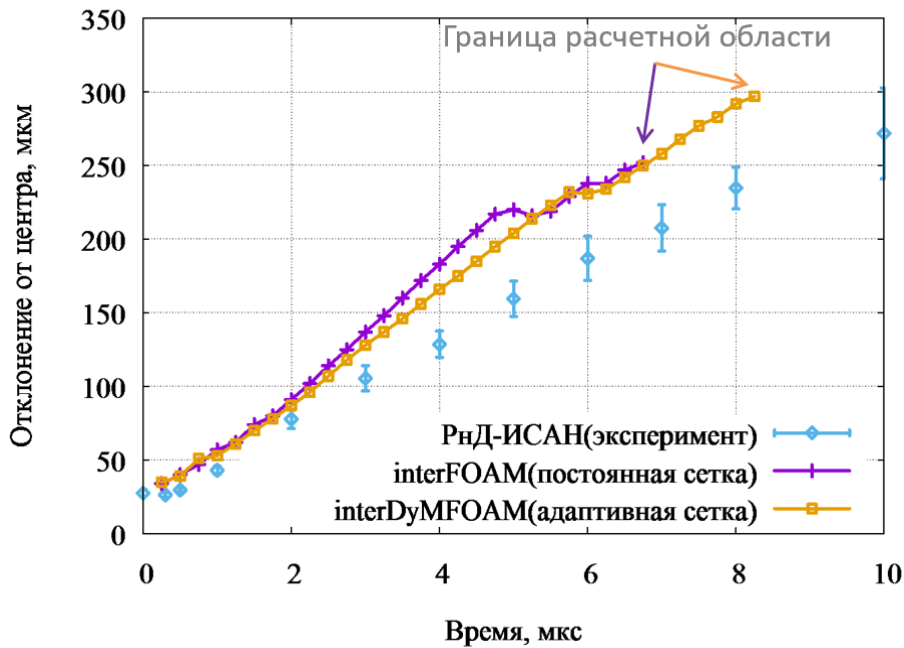


Рис. 19. Временная зависимость отклонения от центра (случай 2,5 мДж)

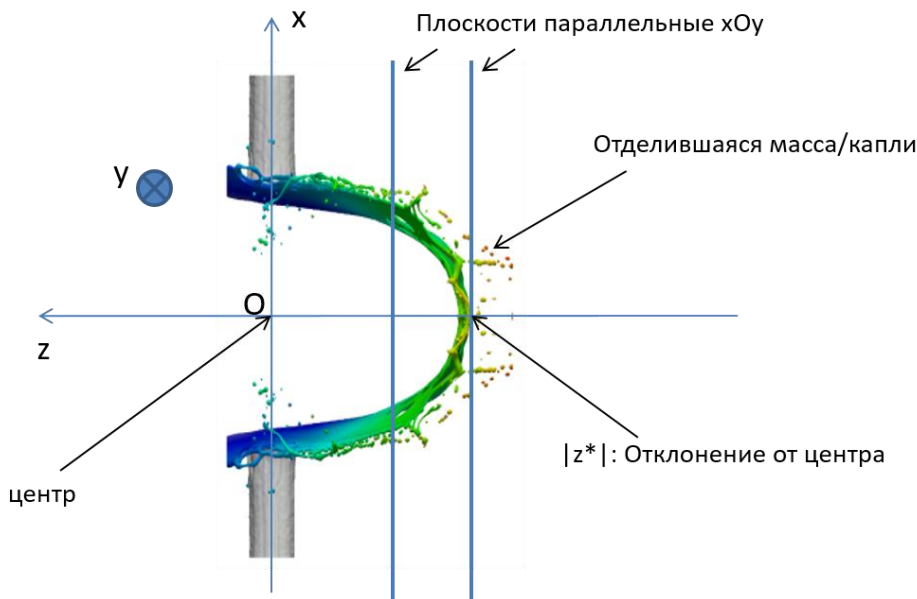


Рис. 20. Измерение отклонения от центра

Рассмотрим подробнее временные зависимости отклонений. Максимальное ограничение для отклонений связано с положением границ расчетных областей на оси  $z$ :  $(-250, 50)$  для случая с фиксированной сеткой и  $(-295, 55)$  – с сеткой с отслеживанием границы. При этом точка отсчета величины отклонения  $z=0$ , и движение происходит против оси  $z$  – отсюда и возникают ограничения для соответствующих случаев.

Теперь рассмотрим случаи с каждым значением энергии отдельно.

Случай с энергией лазера 12,5 мДж. Практически линейная зависимость величины отклонения от центра связана с плавным движением границы слоя. Количественно результаты практически вписываются в пределы погрешности экспериментальных данных на моменты времени, для которых уместно сравнение (учитывая выход за пределы расчетной области). Зависимость отклонения для случая с адаптивной сеткой имеет промежутки резкого спада и роста. Это связано с тем, что происходит резкий отрыв более легкой и быстрой массы жидкости от поверхности “основного” слоя.

Случай с энергией лазера 2,5 мДж. Аналогично предыдущему случаю участки с практически линейной зависимостью отклонения от времени отвечают плавному движению границы слоя. Перегибы связаны с отрывом более легкой и быстрой массы жидкости, но не таким резким, как было описано для случая с энергией 12,5 мДж. Полученные результаты практически не вписываются в экспериментальную погрешность. Существует несколько возможных причин неполного совпадения результатов моделирования с экспериментом: более низкая плотность вещества по сравнению с плотностью вещества из эксперимента, разные методы определения отклонения от центра: экспериментальная величина отклонения определяется с помощью мгновенной теневой фотографии по яркости, численно – с помощью методики, описанной выше. Также к причинам несовпадения результатов можно отнести довольно большую экспериментальную погрешность определения энергии лазера – она составляет 16% для случая 2,5 мДж.

В случае с энергией 12,5 мДж наблюдается более быстрый рост величины отклонения для случая с сеткой с отслеживанием границы по сравнению со случаем с фиксированной сеткой. Для случая с энергией 2,5 мДж наблюдается обратная ситуация. Это обстоятельство обусловлено тем, что в случае с энергией 12,5 мДж и сеткой с отслеживанием границы скорость более легкой массы струи довольно высокая, поэтому отклонение в течение некоторого времени растет быстрее, чем для фиксированной сетки. В случае с энергией 2,5 мДж такой быстрой массы нет.

Для более точного определения причин несовпадения с экспериментом был проведен дополнительный расчет для энергии 2 мДж (см. рис. 21). Результаты этого расчета совпадают с экспериментальными данными в пределах погрешности с довольно высокой точностью, что лишний раз подтверждает вышеперечисленные причины несовпадения результатов с экспериментальными значениями в случае с энергией 2,5 мДж.

На рис. 22 приведена динамика разлета струи на сетке с отслеживанием границы после воздействия лазерного импульса с энергией 2,5 мДж.



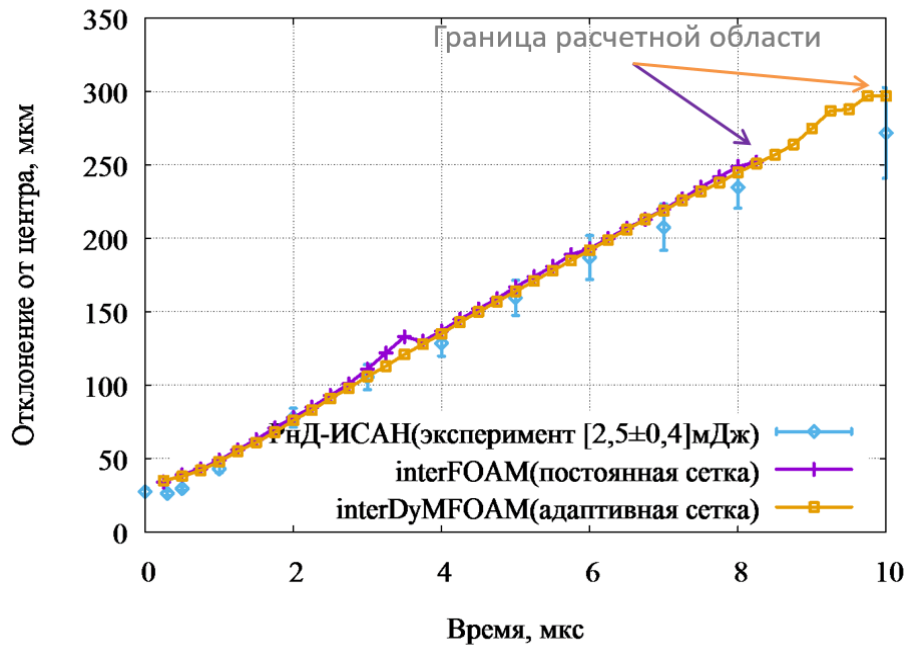


Рис. 21. Временная зависимость отклонения от центра (случай 2 мДж)

Time: 6.500000 us

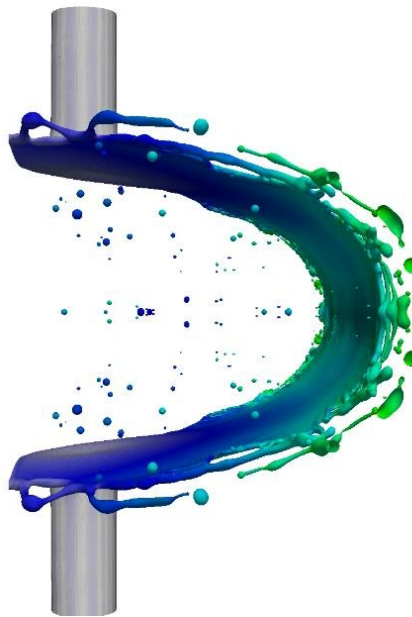
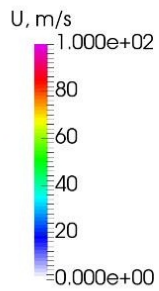


Рис. 22. Разлет струи после воздействия лазерного импульса с энергией 2,5 мДж  
(см. видео на <http://keldysh.ru/e-biblio/vichev/3d-line.ogv>)

## Заключение

На основании вышесказанного можно заключить, что принятая модель хорошо описывает эксперимент. Тем не менее, разрыв промоделированной струи происходит значительно раньше, чем в эксперименте. Например, для случая 12,5 мДж разрыв наблюдается в районе 2–4 мкс, в то время как в эксперименте – после 20 мкс. Несовпадение с экспериментальными данными может быть обусловлено несколькими факторами. Во-первых, вместо эвтектического сплава олова и индия с плотностью  $7056 \text{ кг/м}^3$  в расчетах использовалось олово с плотностью  $6340 \text{ кг/м}^3$ . Различие в плотности прямым образом влияет на распределение импульса, переданное лазерным излучением. Во-вторых, проблема точности численного решения, которая (точность) напрямую зависит от разрешения сетки. И, в-третьих, экспериментальная погрешность прибора, определяющего энергию лазерного излучения. Особенно сильно эта ошибка может оказать влияние в случае низких энергий (например, 2,5 мДж, где относительная погрешность составляет 16%).

Проблема повышения точности численного решения сводится к увеличению количества ячеек, приходящихся на толщину разлетающегося слоя струи. По мере разлета струи на разлетающийся слой приходится все меньше ячеек. В тот момент, когда количество ячеек становится маленьким (менее 4 ячеек на ширину слоя), происходит разрыв. Поэтому основной причиной раннего разрыва струи является недостаточное разрешение сетки. Улучшение разрешения сетки, в свою очередь, сильно увеличивает время расчета, следовательно, достижение очень высокой точности результата в рамках этой модели на данный момент не представляется возможным. Но в связи с постоянным ростом вычислительных мощностей уже в относительно недалеком будущем, используя эту модель, можно будет достаточно точно промоделировать рассматриваемый эксперимент.



## Список литературы

1. Thüring T. et al. X-ray grating interferometry with a liquid-metal-jet source // *Appl. Phys. Lett.* 2013. Vol. 103, № 9. P. 091105.
2. Koshelev K. et al. New type of discharge-produced plasma source for extreme ultraviolet based on liquid tin jet electrodes // *J. Micro/Nanolithography, MEMS, MOEMS.* 2012. Vol. 11, № 2. P. 021103-1.
3. Jansson P.A.C. et al. Liquid-tin-jet laser-plasma extreme ultraviolet generation // *Appl. Phys. Lett.* 2004. Vol. 84, № 13. P. 2256–2258.
4. Shmaenok L.A. et al. Demonstration of a foil trap technique to eliminate laser plasma atomic debris and small particulates / ed. Vladimirsky Y. 1998. P. 90.
5. Dolgov A. et al. Extreme ultraviolet (EUV) source and ultra-high vacuum chamber for studying EUV-induced processes // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2015. Vol. 24, № 3. P. 035003.
6. РНД-ИСАН [Electronic resource]. URL: <http://www.rnd-isan.ru/>.
7. Круковский А.Ю., Новиков В.Г., Цыгвинцев И.П. Программа 3DLINE: численное моделирование трёхмерных нестационарных задач радиационной газовой динамики // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша.* 2013. № 20. 24 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-20>
8. Круковский А.Ю., Новиков В. Г., Цыгвинцев И.П. Программа 3DLINE: моделирование воздействия несоосного лазерного импульса на оловянную каплю // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша.* 2015. № 63. 24 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-63>
9. Трёхмерное моделирование поглощения лазерного излучения в приближении геометрической оптики / И.П.Цыгвинцев [и др.] // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша.* 2012. № 41. 20 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-41>
10. Faik S. et al. Dynamics of volumetrically heated matter passing through the liquid–vapor metastable states // *High Energy Density Phys.* 2012. Vol. 8, № 4. P. 349–359.
11. OpenFOAM [Electronic resource]. URL: <https://openfoam.org/>.
12. Hirt C.W., Nichols B.D. Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries // *J. Comput. Phys.* 1981. Vol. 39. P. 201–225.
13. Brackbill J., Kothe D., Zemach C. A continuum method for modeling surface tension // *J. Comput. Phys.* 1992. Vol. 100, № 2. P. 335–354.
14. Jasak H. Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows // *Direct.* 1996. Vol. M, № June. P. 394.
15. Versteeg H.K., Malalasekera W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method // *Fluid flow handbook.* McGraw-Hill 1995. P. 267.
16. Ferziger J.H., Peric M. Computational Methods for Fluid Dynamics // *Vasa.* 2002. 423 p.
17. Issa R. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting // *J. Comput. Phys.* Academic Press, 1986. Vol. 62, № 1. P. 40–65.

18. Patankar S.V. Numerical heat transfer and fluid flow. VonS. V. Patankar. Hemisphere Publishing Corporation, Washington - New York - London. McGraw Hill Book Company, New York 1980. 1. Aufl., 197 S., 76 Abb., geb., DM 71,90 // Chemie Ing. Tech. WILEY- VCH Verlag, 1981. Vol. 53, № 3. P. 225–225.
19. Mucha P.B. On Navier–Stokes Equations with Slip Boundary Conditions in an Infinite Pipe // Acta Appl. Math. 2003. Vol. 76. P. 1–15.
20. Schäfer M. Computational engineering : introduction to numerical methods. Springer, 2006. 321 p.
21. Damián S.M. An Extended Mixture Model for the Simultaneous Treatment of Short and Long Scale Interfaces. 2013. P. 231.
22. Coetzee R.V. Volume weighted interpolation for unstructured meshes in the finite volume method. North-West University, 2005.
23. Гибридный вычислительный комплекс К-100 [Electronic resource]. URL: <http://www.kiam.ru/MVS/resourses/k100.html>.