

На правах рукописи

Быковская Елена Николаевна

**Метод динамической адаптации в численном решении уравнений  
Бюргера и Кортевега - де - Вриза и математическом моделировании  
процессов лазерной фрагментации металлов**

Специальность 1.2.2 — математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва — 2025

Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук".

Научный руководитель: **Мажукин Владимир Иванович**,  
доктор физико-математических наук,  
профессор, главный научный сотрудник ИПМ  
им. М.В. Келдыша РАН

Официальные оппоненты: **Богомолов Сергей Владимирович**  
доктор физико-математических наук, доцент,  
профессор кафедры вычислительных методов  
факультета вычислительной математики и  
кибернетики МГУ им. М.В. Ломоносова (г.  
Москва)

**Колдоба Александр Васильевич**  
доктор физико-математических наук,  
профессор, ФГАОУ ВО "Московский физико-  
технический институт (национальный  
исследовательский университет)", заведующий  
кафедрой моделирования и технологий  
разработки нефтяных месторождений (г.  
Долгопрудный)

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего  
образования «Национальный  
исследовательский ядерный университет  
«МИФИ» (г. Москва)

Защита состоится 5 июня 2025 г. в 11:00 часов на заседании диссертационного  
совета 24.1.237.01, созданного на базе ИПМ им. М.В. Келдыша РАН,  
расположенного по адресу: 125047, г. Москва, Миусская пл., д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИПМ  
им. М.В. Келдыша РАН  
[https://keldysh.ru/council/3/D00202403/bykovskaya\\_en\\_diss.pdf](https://keldysh.ru/council/3/D00202403/bykovskaya_en_diss.pdf)

Автореферат разослан « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2025 г.

Учёный секретарь диссертационного совета 24.1.237.01  
к.ф.-м.н.

М.А. Корнилина

## **Общая характеристика работы**

**Актуальность темы исследования и степень её научной разработанности.** Необходимость разработки новых эффективных методов и подходов решения уравнений математической физики, в частности уравнений Бюргерса и Кортевега - де Вриза, определяется ростом уровня сложности современных проблем. Для решения этой проблемы используют математическое моделирование физических процессов на ЭВМ, неотъемлемой частью которого являются численные методы. Выбор того или иного метода численного решения во многом определяет качество моделирования. Необходимо также иметь в виду, что далеко не безразлично, за счет каких вычислительных затрат достигается конечный результат моделирования. Поэтому вполне естественно на вычислительные алгоритмы наложить требование не только устойчивости, но и вычислительной эффективности и простоты реализации.

В связи с чем, актуальными становятся не только традиционные проблемы повышения точности разностной аппроксимации уравнений, но и методы построения адаптирующихся расчетных сеток для широкого класса задач математической физики.

### **Целями и задачами данной диссертации являются:**

дальнейшее развитие методов динамически адаптирующихся сеток на примере решения модельных уравнений Бюргерса и Кортевега -де Вриза;

построение, исследование и сравнение 2-х и 3-х слойных разностных схем записанных в стационарных и подвижных системах координат;

применение метода динамической адаптации к численному решению прикладной задачи в области лазерной абляции металлической мишени ультракоротким лазерным излучением.

**Основным элементом научной новизны** является дальнейшее развитие ранее полученных и разработка новых методов и подходов к построению адаптирующихся к решению сеток на примере хорошо известных модельных задач Бюргерса и Кортевега - де Вриза. Впервые в методе динамической адаптации использовались трехслойные разностные схемы для решения уравнения Бюргерса и двухслойные для Кортевега - де Вриза.

Также метод динамической адаптации, позволяющий получать решения задач с произвольным числом подвижных границ и гидродинамических разрывов, был применен к численному решению явлений лазерной фрагментации металлической мишени ультракоротким лазерным излучением. Построена математическая модель плавления перегретого Al под воздействием фемтосекундного лазерного излучения. Кинетика плавления перегретого металла анализируется на основе неравновесной континуальной модели, которая явно связывает гомогенные и гетерогенные механизмы плавления.

### **Теоретическая и практическая ценность исследования.**

Все теоретические принципы и подходы, которые были разработаны для модельных уравнений Бюргерса и Кортевега - де Вриза были использованы в решении прикладной задачи о лазерном воздействии на металлическую мишень.

Использование в качестве источника энергии ультракоротких (фемтопикосекундной длительности) лазерных импульсов открывает новые возможности практического применения процессов фрагментации в областях наноструктурирования, нанометаллических покрытий, генерации наночастиц и наноструктур для нужд медицины и биологии и др.

#### **Методология и методы исследования.**

Для улучшения диссипативно - дисперсионных свойств разностных схем используется метод динамической адаптации.

Для исследования механизмов ультракороткой лазерной абляции алюминия используется односкоростная неравновесная двухтемпературная континуальная (гидродинамическая) модель.

Реализация осуществляется с помощью разработанного вычислительного алгоритма и созданных программных комплексов на языке C++ для решения уравнений Бюргерса и Кортевега - де Вриза и для прикладной задачи лазерной абляции металлов.

**Апробация результатов.** Материалы диссертации докладывались на 17-м и 18-м Международных Междисциплинарных научных Семинарах “Математические Модели и Моделирование в Лазерно-Плазменных Процессах и Передовых Научных Технологиях” (03.06-10.06 2017г.; 29.09-5.10 2019г., Петровац, Черногория); на Международной конференции “27th International Advanced Laser Technologies Conference” (ALT-2019), Prague, Czech Republic, September 15-20, 2019; на Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2021»

**Публикации.** По материалам диссертации опубликовано 5 научных работ, в том числе 5 работ в периодических журналах, рекомендованных ВАК и 3 работы в изданиях, входящих в системы цитирования в Web of Science и Scopus.

#### **Основные положения, выносимые на защиту:**

- 1) Применение метода динамической адаптации позволяет существенно улучшить качество разностных схем и с одинаковым успехом использовать двухслойные и трёхслойные схемы при решении уравнения Бюргерса. При этом двухслойные схемы позволяют осуществлять интегрирование с меньшими вычислительными затратами.
- 2) Применение метода динамической адаптации к решению уравнения Кортевега –де Вриза позволяет избавиться от дисперсии практически во всей области неясности двухслойных схем. Явные схемы при этом остаются абсолютно неустойчивыми. В решении задачи о распространении солитона метод динамической адаптации позволяет производить интегрирование с увеличенным на 2 порядка шагом по времени.
- 3) Разработана односкоростная неравновесная двухтемпературная континуальная (гидродинамическая) модель ультракороткого лазерного воздействия на металлическую мишень. С помощью метода динамической адаптации выполнено математическое моделирование задач с произвольным числом подвижных границ и гидродинамических разрывов. Проведено

исследование гомогенного и гетерогенного механизмов плавления, и фрагментации металлической мишени (Al) лазерным излучением. Получено хорошее совпадение с экспериментальными и теоретическими данными.

4) Разработаны вычислительные алгоритмы и созданы программные комплексы на языке C++ для решения уравнений Бюргерса и Кортевега - де Вриза и для прикладной задачи лазерной абляции металлов.

**Достоверность и обоснованность.** Обоснованность полученных результатов следует из корректности поставленных задач, использовании стандартных численных методов и использования классической континуальной модели. Достоверность результатов следует из валидации (согласия с экспериментальными данными) и верификации (сравнения с теоретическими данными) других авторов.

**Личный вклад автора.** Содержание диссертационной работы и основные положения, выносимые на защиту, полностью отражают вклад автора в представленные исследования.

**Структура работы.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. В заключение каждой из глав сформулированы результаты, в дальнейшем входящие в **Основные положения, выносимые на защиту**. Список литературы содержит 212 источников. Объем диссертации составляет 109 страниц и включает в себя 26 рисунков.

## Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертации, сформулирована цель, изложена научная новизна, кратко представлено содержание работы и представлены конференции, на которых происходила апробация работы.

**В первой главе** представлен краткий обзор основных методов построения расчетных сеток, таких как вариационные методы и дифференциальные подходы, методы построения адаптивно встраивающихся сеток и сеток, динамически адаптирующихся к решению. Также рассмотрены основные достоинства и недостатки подобных подходов. Особое внимание уделяется методам с автоматическим преобразованием координат. Во второй части данной главы представлен краткий анализ разностных схем, наиболее часто используемых для решения уравнений Бюргерса и Кортевега - де Вриза. Например, уравнение Кортевега - де Вриза численно решалось различными методами, такими как методы коллокаций, метод Галеркина, метод конечных элементов, конечно-разностный метод и др.. Уравнение Бюргерса широко используется в качестве модельного для тестирования различных конечно-разностных схем как двухслойных, так и трёхслойных. Среди трехслойных можно выделить широко используемую хорошо известную трехслойную схему Кабаре. Третья часть главы посвящена обзору методов исследования динамической фрагментации в ударно нагруженных металлах и оценке

геометрических и кинематических свойств полученных фрагментов. Данная задача является актуальной, как для фундаментальной, так и прикладной науки.

**Во второй главе** на примере численного решения модельной задачи с нелинейным уравнением Бюргера исследуется качество аппроксимации исходного уравнения двух и трёхслойными разностными схемами, выписанными на сетках с фиксированными и подвижными узлами.

С учетом начальных и граничных условий проблема Бюргера формулируется следующим образом:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{u^2}{2} \right) = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

начальное условие задавалось в виде асимметричной синусоиды

$$t = 0: \quad u^0(x) = u(x, 0) = \sin(2\pi x) + 0.5 \sin(\pi x) \quad (2)$$

$$x = x_0: \quad u(x_0, t) = 0 \quad (3)$$

$$x = x_R: \quad u(x_R, t) = 0 \quad (4)$$

где коэффициент  $\mu$  имеет смысл вязкости.

Для получения решения в данной работе использовались семейство двухслойных схем второго порядка по пространству ( $0 < \sigma < 1$ ) и трехслойная схема Кабаре [1], с введенной искусственно процедурой монотонизации решения.

Применение двухслойной схемы Кранка - Николсон ( $\sigma = 0.5$ ) на 2500 узлах показало, что начальные паразитные колебания на верхней части фронта появляются при  $\mu = 10^{-3}$  (рис. 1а). В то же время в решении  $u(x)$ , полученном из трехслойной схемы с коррекцией потоков колебания полностью отсутствуют (рис. 1б).

Таким образом, трёхслойные разностные схемы Cabaret, выписанные на расчетных сетках с фиксированными узлами, на первый взгляд, имеют явное преимущество по дисперсионным свойствам перед двухслойной схемой Кранка-Николсон.

Однако, как отмечалось в работе [1] монотонизация решения после каждой итерации в области больших градиентов приводит к отклонению результата от аналитического решения исходной системы нелинейных разностных уравнений и может препятствовать сходимости итерационного процесса.

В рассматриваемой модельной задаче (1) - (4) этот недостаток наиболее ярко проявляется в замедлении движения фронта численного решения. Отклонение решения в области больших градиентов вызвано применением монотонизации,

что подтверждается сравнением результатов расчетов, выполненных с монотонизацией решения и без неё (рис. 2).

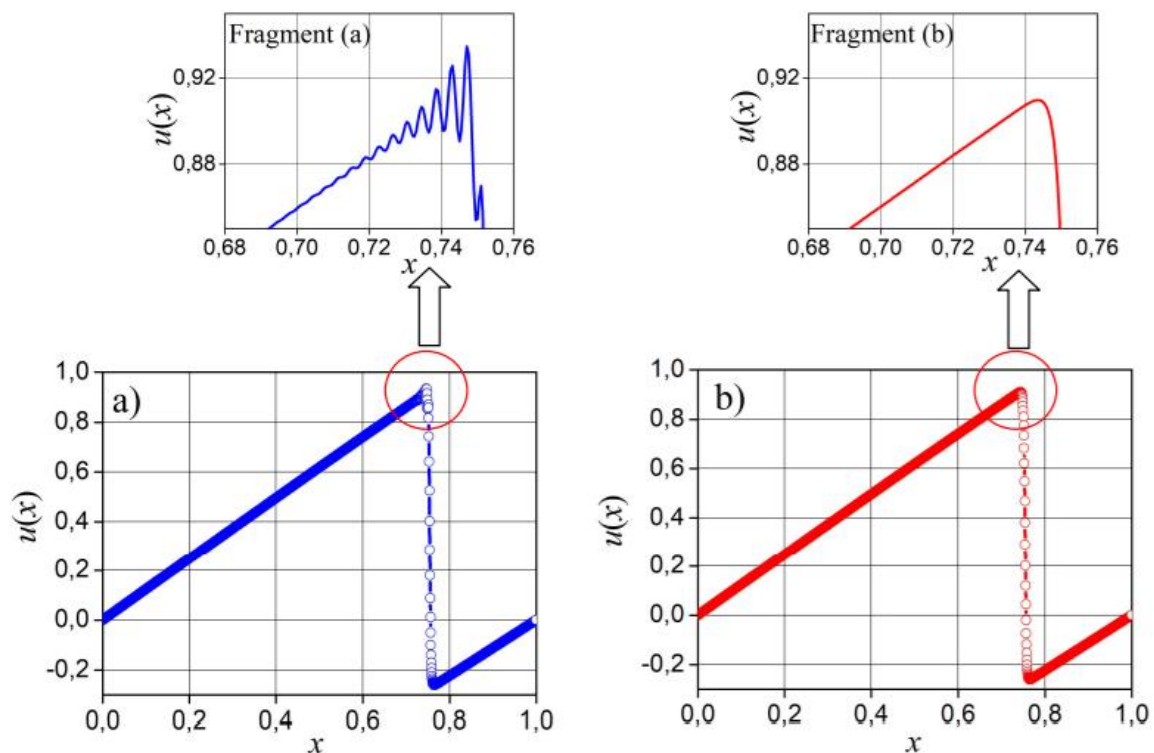


Рис. 1. 2-х слойная (a) и 3-х слойная (b) схемы,  $\mu = 10^{-3}$  в момент времени  $t = 0.75$ ;  $N = 2500$

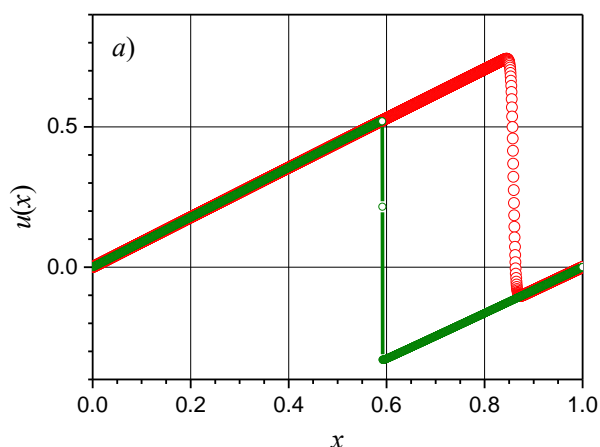


Рис. 2. Решение, полученное с помощью трехслойной схемы с монотонизацией (зелёная линия с маркерами) и без монотонизации (красная линия с маркерами) в момент времени  $t=1$  для достаточно большого значения  $\mu = 10^{-3}$ ;  $N = 2500$

В настоящей работе в качестве альтернативы уменьшение погрешности аппроксимации предлагается осуществлять с помощью метода динамической адаптации расчетных сеток [2].

В основу метода динамической адаптации положена процедура перехода из физического пространства  $\Omega_{x,t}$  с декартовой системой координат и переменными  $(x, t)$  в некоторое расчетное пространство  $\Omega_{q,\tau}$  с произвольной нестационарной системой координат и переменными  $(q, \tau)$ . Якобианом такого преобразования является функция  $\psi = \partial x / \partial q$ .

Частные производные зависимых переменных выражаются следующим образом:

$$\frac{\partial \cdot}{\partial t} = \frac{\partial \cdot}{\partial \tau} + \frac{Q}{\psi} \frac{\partial \cdot}{\partial q}; \quad \frac{\partial \cdot}{\partial x} = \frac{1}{\psi} \frac{\partial \cdot}{\partial q}; \quad \frac{\partial^2 \cdot}{\partial x^2} = \frac{1}{\psi} \frac{\partial \cdot}{\partial q} \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \quad (5)$$

$\partial x / \partial \tau = -Q$ , характеризует скорость движения нестационарной системы координат. Функция  $Q$  заранее неизвестна. Определяется из принципа квазистационарности [2] и принимается равной :

$$Q = - \left( u - \frac{\partial}{\partial q} \left( \frac{\mu}{\psi} \right) \right) \quad (6)$$

В результате перехода к произвольной нестационарной системе координат исходная дифференциальная модель (1) – (4) трансформируется в расширенную модель дивергентного вида:

$$\frac{\partial(\psi u)}{\partial \tau} = - \frac{\partial(Q \cdot u)}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q} \left( \frac{u^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial q} \frac{\mu}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = - \frac{\partial Q}{\partial q}, \quad q_0 < q < q_R, \quad \tau > 0 \quad (8)$$

Уравнения (7), (8) дополним начальными и граничными условиями

$$u(q, 0) = \sin(2\pi q) + 0.5 \sin(\pi q) \quad \psi(q, 0) = 1 \quad (9)$$

$$\begin{aligned} q = q_0: u(q_0, \tau) = Q(q_0, \tau) = 0 \\ q = q_R: u(q_R, \tau) = Q(q_R, \tau) = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

С помощью построенной математической модели (7) - (10) производилось сравнение решений, полученных с помощью двухслойной схемы Кранка-Николсон и трехслойной схемы Кабаре. Результаты расчётов показали хорошее совпадение между собой и аналитическим решением. Профили функции  $u(x)$  полностью свободны от паразитных колебаний, *Рис.3*.

При этом трёхслойная схема не содержит процедуры монотонизации. Как и в случае использования двухслойной схемы в трёхслойной схеме улучшение



качества решения достигается за счёт управляемого распределения узлов сетки, движение которых полностью согласовано с искомым решением.

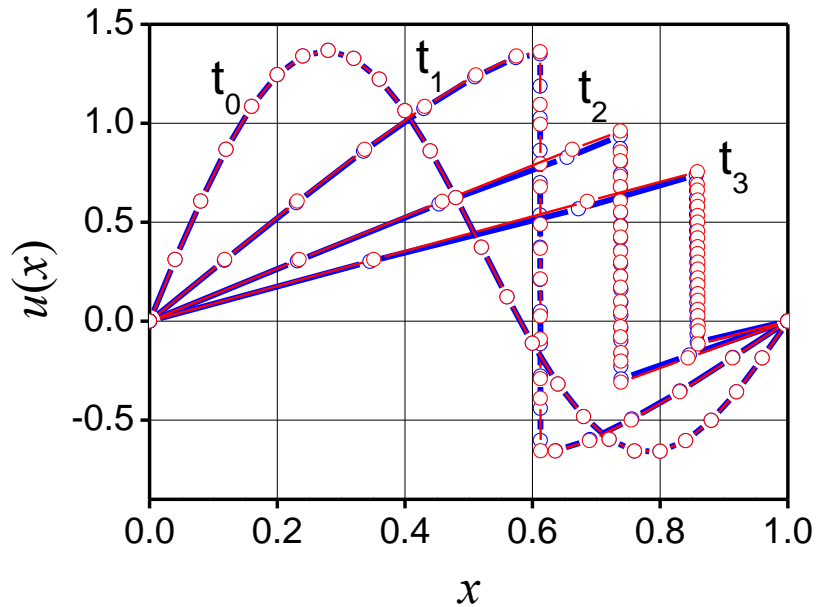


Рис. 3. Пространственное распределение функции  $u(x)$  в различные моменты времени для двухслойной (синяя линия с маркерами) и трёхслойной (красная линия с маркерами) схем, для  $\mu = 10^{-4}$  в моменты времени  $t_{1-4} = 0, 0.25, 0.63, 1.$ ;  $N = 25$ .

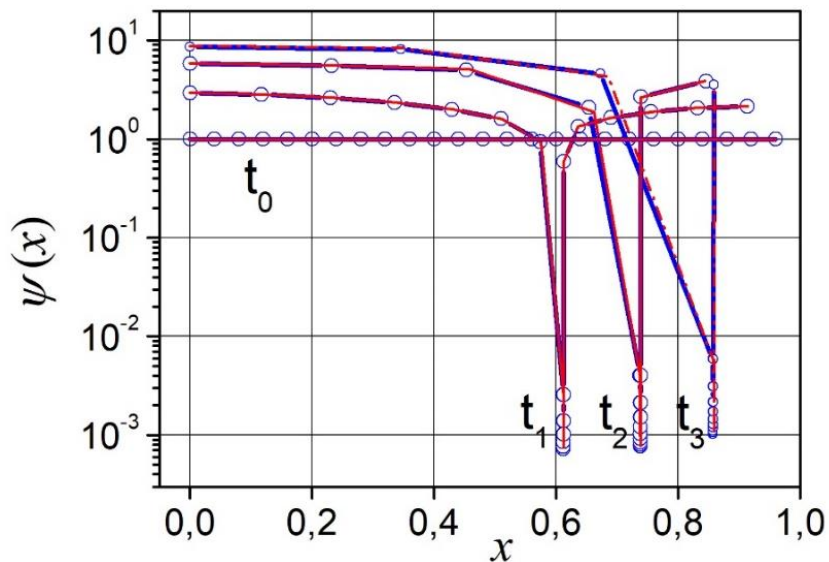


Рис. 4. Пространственное распределение функции  $\psi(x)$  в различные моменты времени для двухслойной (синяя линия с маркерами) и трёхслойной (красная линия с маркерами) схем, для  $\mu = 10^{-4}$  в моменты времени  $t_{1-4} = 0, 0.25, 0.63, 1.$ ;  $N = 25$

Динамика распределения узлов сетки в физическом пространстве  $\Omega_{x,t}$  с переменными  $(x, t)$  характеризуется функцией  $\psi(x)$ , *Рис.4*. Функция  $\psi(x)$ , представляющая собой отношение  $\psi(x) \approx \Delta x / \Delta q$ , и с учётом того, что  $\Delta q$  не меняется со временем, характеризует собой безразмерный пространственный шаг сетки в пространстве  $\Omega_{x,t}$ . Функция  $\psi(x)$  показывает степень изменения пространственного шага сетки  $\Delta x(t)$  в каждый момент времени.

Пространственные профили  $u(x)$  и  $\psi(x)$  свидетельствуют о плавном сгущении узлов сетки в область (фронта) наибольшего градиента функции  $u(x)$ , что соответствует уменьшению шага сетки на 3 порядка, *Рис.4*, при одновременном увеличении шага сетки в 2-9 раз в области медленного изменения решения. При этом шаг интегрирования по времени для трехслойной схемы оказывается в 2-4 раза меньше по сравнению с шагом для двухслойной схемы Кранка-Николсон. Динамика изменения шага интегрирования по  $\tau$  приведена на *Рис.5*.

Благодаря полной согласованности с искомым решением динамическая адаптация оказалась более тонким и гибким механизмом уменьшения погрешности аппроксимации разностных схем по сравнению с методом нелинейной монотонизации. Таким образом, метод динамической адаптации существенно снижает требование к качеству разностных схем с сохранением высокой точности решения.

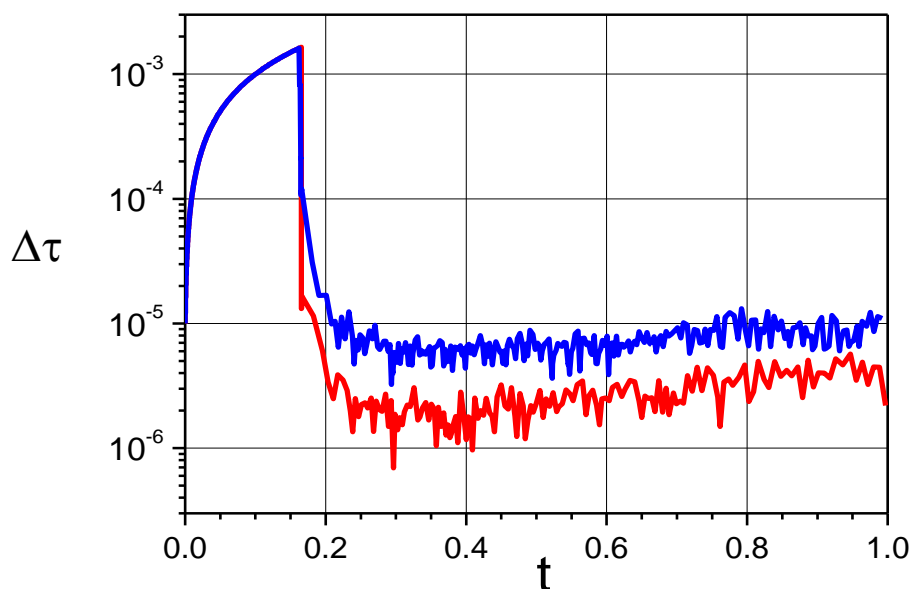


Рис. 5. Динамика изменения шага интегрирования с течением времени. (Синим цветом обозначен шаг для двухслойной схемы Кранка-Николсон. Красным цветом обозначен шаг для трехслойной схемы.)

**В третьей главе** представлено численное и аналитическое исследование семейства двухслойных разностных схем на эйлеровой и подвижной сетках для уравнения Кортевега – де Вриза (КдВ).

Уравнение Кортевега – де Вриза (КдВ) можно представить следующим образом

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \alpha u \frac{\partial u}{\partial x} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0, \quad t > 0, \quad -\infty < x < +\infty \quad (11)$$

По общепринятой терминологии второй член в уравнении (11) называют нелинейным, а третий – дисперсионным.

Уравнение Кортевега - де Вриза имеет несколько классов решений: квазисинусоидальные колебания малой амплитуды, кноидальные волны и солитонные решения. Большой интерес представляет солитонное решение, которое образуются, когда нелинейный член в уравнении (11) уравновешивается дисперсионным:

$$\alpha \frac{u^2}{2} \sim \beta u_{xx}$$

и представляет собой стационарный бегущий однополярный импульс [3]

$$u(x, t) = \frac{A}{\operatorname{ch} \left[ \frac{(x - x_0 - Vt)}{\delta} \right]^2} \quad (12)$$

с амплитудой  $A = \frac{3V}{\alpha}$ , полушириной  $\delta = \sqrt{\frac{4\beta}{V}}$  на уровне  $0.42A$ , движущийся в направлении оси  $X$  со скоростью  $V$ . В дальнейшем именно солитонное решение (12) будет использоваться в качестве начального условия.

С учетом граничных и начальных условий задача о распространении солитона формулируется следующим образом:

$$\begin{aligned} u \frac{\partial u}{\partial t} + \alpha u \frac{\partial u}{\partial x} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} &= 0 \\ t > 0, \quad -\infty < x < +\infty \end{aligned} \quad (13)$$

Начальное условие:

$$t = 0: \quad u(x, 0) = \frac{A}{\operatorname{ch} \left[ \frac{(x - x_0)}{\delta} \right]^2} \quad (14)$$

Граничные условия:

$$\begin{aligned}
 x = 0: \quad & \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \\
 x = x_R: \quad & u = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x} = 0
 \end{aligned}
 \tag{15}$$

Особенностью солитонов является перемещение на большие расстояния с постоянной скоростью  $V$ . Эту особенность не каждая схема может легко моделировать. Для исследования транспортных свойств была выбрана достаточно большая расчетная область  $[0, x_R]$ , исключая влияние границ на решение.

В первой части данной главы было проведено исследование семейства двухслойных разностных схем для уравнения Кортевега-де Вриза на эйлеровой разностной сетке. Для этого использовалось семейство стандартных двухслойных схем с весовым коэффициентом  $\sigma$ , который определяет степень “неявности” разностной схемы, его значения задаются в пределах от 0 для полностью явной до 1 для полностью неявной схемы. Был реализован 2-ой порядок аппроксимации по пространству как первой, так и третьей производных.

Для всех значений  $\sigma \neq 0.5$  схема имеет 1-й порядок аппроксимации по времени. При  $\sigma = 0.5$  выражение представляет собой неявную разностную схему Кранка-Николсон со вторым порядком аппроксимации по времени.

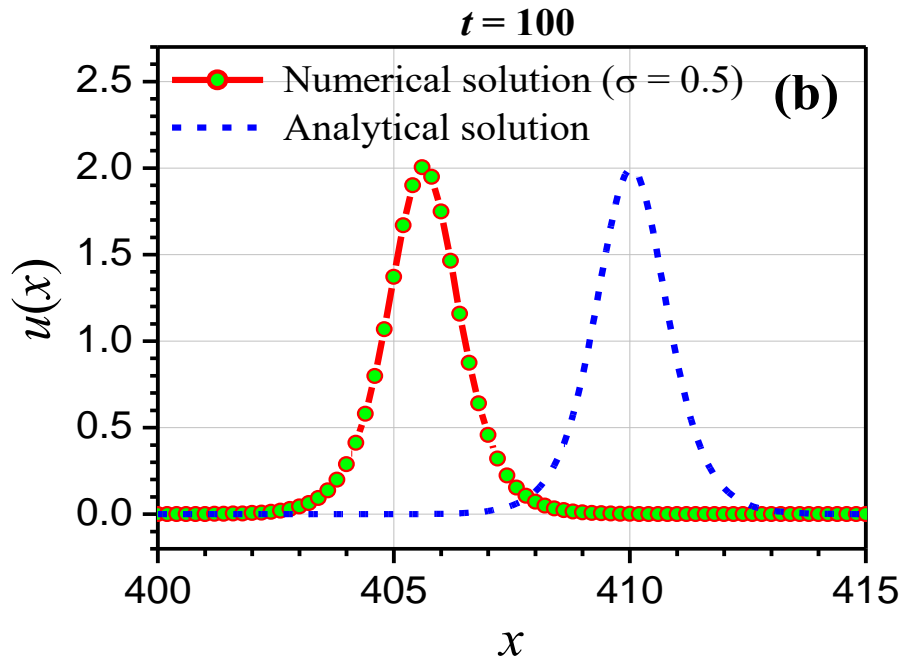


Рис.6. Наилучший результат, полученный при переносе солитона на эйлеровой сетке с помощью схемы Кранка-Николсон ( $\sigma = 0.5$ ) на момент времени  $t = 100$ : численное решение (красная линия с зелеными маркерами), аналитическое (синяя пунктирная линия).

Численно показано, что наилучшие результаты получаются при использовании неявной разностной схемы Кранка-Николсон ( $\sigma = 0.5$ ) 2-го порядка аппроксимации по времени и пространству, *Рис.б*.

Полностью неявная двухслойная схема 1-го порядка по времени и 2-го по пространству, хотя и является абсолютно устойчивой, тем не менее из-за большой схемной вязкости существенно искажает решение.

Решение с использованием явной двухслойной схемы ни разу не удалось довести до конца, т.к. всегда наступал момент потери устойчивости, даже при очень малом шаге по времени. Хотя до этого момента решение было вполне приемлемым.

Аналитическое исследование с помощью дифференциального приближения полностью подтвердило результаты численных экспериментов. Кроме того, оно позволило сделать заключение об абсолютной неустойчивости семейства схем в случае “преобладания явности” ( $\sigma < 1/2$ ).

При всех достоинствах схемы Кранка-Николсон на эйлеровой сетке происходит достаточно большое отставание от аналитического решения.

Во второй части главы применим метод динамической адаптации для решения этой задачи [2].

После перехода в динамическую систему координат постановка задачи в переменных ( $q, \tau$ ) принимает вид:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} + \frac{\partial \left( \alpha \frac{u^2}{2} \right)}{\partial q} - \frac{\partial (Qu)}{\partial q} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial q^3} = 0 \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \tau} &= Q \\ 0 < q < q_R, \quad \tau > 0 \end{aligned} \quad (17)$$

Граничные и начальные условия:

$$\tau = 0: \quad u(q, 0) = \frac{A}{\text{ch}[(q - q_0)/\delta]^2}$$

$$q = 0: \quad \frac{\partial^2 u}{\partial q^2} = 0, \quad Q(0, \tau) = V$$

$$q = q_R: \quad u = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial q} = 0, \quad Q(q_R, \tau) = V$$

Для выбора управляющей функции  $Q$  был также использован принцип квазистационарности. Положив производную по времени в уравнении (16)

равной нулю и используя выражение для солитона (14), было получено  $Q = V$ , где  $V$  - скорость солитона

Как и в предыдущей части главы для построения решения использовалась двухслойная разностная схема с весовым множителем  $\sigma$ , определяющим степень неявности разностной схемы.

На *Рис.7* показано решение с использованием схемы типа Кранка-Николсон ( $0.5 \leq \sigma \leq 1$ ) на момент времени  $t=100$ , когда солитон сместился из начального положения на расстояние  $400\delta$ . Численный эксперимент показал, что, выбирая функцию  $Q$  из соотношения (12) можно значительно улучшить качество решения. Отставание от аналитического решения составило примерно  $\delta$ , в то время как на эйлеровой сетке отставание составило  $\approx 4\delta$ . Таким образом, было показано, что численное решение с гораздо лучшей точностью сохраняет амплитуду солитона в течение всего расчетного времени.

Применение подвижных сеток с динамической адаптацией позволило получить численные решения высокой точности не только для схем Кранка-Николсон, но и практически избавиться от дисперсии во всей области неявиности двухслойных схем, независимо от степени неявности для семейства схем 1-го порядка по времени  $t$  и 2-го по пространству. При этом схемы с преобладанием явности по  $t$  - прежнему неустойчивы.

Удалось значительно примерно в 8.5 раз увеличить величину шага по времени.

Таким образом, применение динамической адаптации существенно повышает качество разностных схем и позволяет адаптироваться к совершенно различным особенностям.

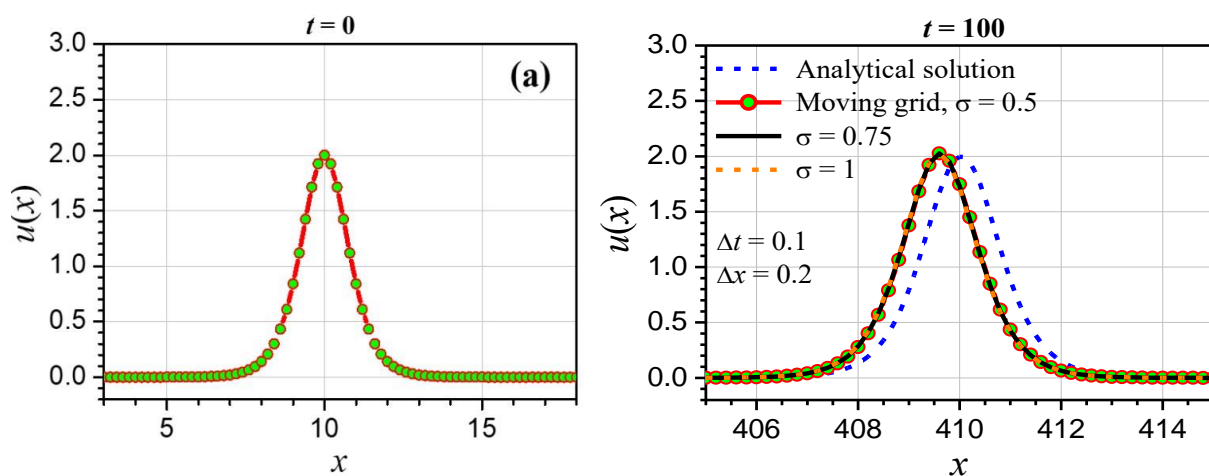


Рис.7. (а) начальное условие ( $t=0$ ); Сравнение численного решения с аналитическим на момент времени  $t=100$  при (б)  $0.5 \leq \sigma \leq 1$

**Четвертая глава** посвящена математическому моделированию процессов гетеро-гомогенного плавления с последующей фрагментацией расплава, лежащих в основе неравновесной лазерной абляции металла (Al). Исследование механизмов плавления и фрагментации осуществляется в рамках континуального подхода с использованием неравновесной гидродинамической модели [4].

Воздействие мощных лазерных импульсов на металлические мишени, инициируют в них ряд взаимосвязанных процессов с нелинейным характером развития. Описание их поведения осуществляется системой уравнений гидродинамики, двумя уравнениями баланса энергии электронной и ионной подсистем и уравнением переноса лазерного излучения. Система уравнений записывается в областях разделенных тремя подвижными границами  $\Gamma_{sh,s}(t)$ ,  $\Gamma_{sl}(t)$ ,  $\Gamma_{lv}(t)$  и одной неподвижной  $\Gamma_s$ .

Полная математическая формулировка приводится ниже в следующем виде:

$$\left( \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial x} = 0 \\ \rho_e = z \frac{m_e}{m_i} \rho_i \\ \frac{\partial(\rho_e \varepsilon_e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_e \varepsilon_e u)}{\partial x} = - \left( P_e \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial W_e}{\partial x} + g(T_e)(T_e - T_i) + \frac{\partial G}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i u)}{\partial x} = - \left( P_i \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial W_i}{\partial x} - g(T_e)(T_e - T_i) \right) \\ \frac{\partial G}{\partial x} - \alpha(T_e)G = 0 \end{array} \right)_{k=s,\ell,v} \quad (18)$$

где уравнения состояния представляются в виде:

$$P(\rho, T) = P_e(\rho_e, T_e) + P_i(\rho_i, T_i), \quad \text{где } \rho = \rho_e + \rho_i.$$

$$\varepsilon_e = \varepsilon_e(T_e, \rho_e), \quad \varepsilon_i = \varepsilon_i(T_i, \rho_i),$$

(\*конкретный вид уравнений состояния представлен в полном тексте диссертации)

Область определения решения:

$$t > 0, \quad [\Gamma_s < x < \Gamma_{sh,s}(t)] \cup [\Gamma_{sh,s}(t) < x < \Gamma_{sl}(t)] \cup [\Gamma_{sl}(t) < x < \Gamma_{lv}(t)]$$

Принятые обозначения: Индексы  $s, \ell, v$  - обозначают принадлежность величин соответственно к твердой, жидкой и паровой фазам,  $e, i$  - к электронной и ионной подсистемам.  $\rho, u, \varepsilon, T, P$  - плотность, газодинамическая скорость, внутренняя энергия, температура и давление соответственно,  $z$  - степень ионизации (для металлов валентность),  $m_e, m_i$  - массы электрона и ионна,  $G$  -

плотность потока лазерного излучения,  $\alpha(T_e)$  – коэффициент объёмного поглощения (знак "-" в уравнении для  $G$  соответствует направлению распространения лазерного излучения справа налево, т.е. против оси  $X$ ),  $R(T_e)$  – отражательная способность поверхности,  $\lambda_e(T_e, T_i)$ ,  $\lambda_i(T_i)$  – электронный и ионный коэффициенты теплопроводности,  $g(T_e)$  – электрон-ионный фактор энергообмена,  $W_e = -\lambda_e(T_e, T_i) \partial T_e / \partial x$ ,  $W_i = -\lambda_i(T_i) \partial T_i / \partial x$  – тепловые потоки.

В качестве краевых условий используются начальные условия в момент времени  $t = 0$  и граничные условия в точках  $x = \Gamma_s, \Gamma_{sh,s}(t), \Gamma_{sl}(t), \Gamma_{kv}(t)$ .

**Начальные условия:**

$$t = 0: \quad u(0, x) = 0, \quad p = 0, \quad \rho = \rho_0, \quad T_e = T_i = T_0 = 293\text{K}. \quad (19)$$

**Граничные условия:**

В качестве граничных условий используются следующие соотношения:

1) На левой неподвижной границе  $x = \Gamma_s$  используется условие равенства нулю потока массы и тепла:

$$\rho_s u_s = 0, \quad W_T = 0 \quad (20)$$

2) **Фронт плавления  $x = \Gamma_{sl}(t)$ :** В качестве граничных условий на подвижной межфазной границе (фронт плавления)  $\Gamma_{sl}(t)$  используется модель гетерогенного плавления – кристаллизации [5], сформулированная в условиях сильного отклонения от состояния локального термодинамического равновесия и состоящего из 3-х законов сохранения – массы, импульса и энергии, записанных в неподвижной (лабораторной) системе координат:

$$\begin{aligned} \rho_s(u_s - v_{sl}) &= \rho_l(u_l - v_{sl}) \\ P_s + \rho_s(u_s - v_{sl})^2 &= P_l + \rho_l(u_l - v_{sl})^2 \\ \left(\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x}\right)_\ell - \left(\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x}\right)_s &= L_m^{ne} \rho_s(u_s - v_{sl}) \end{aligned} \quad (21)$$

где:

$$L_m^{ne} = L_m(T_m(P_s)) + (C_{P\ell} - C_{Ps})(T_{sl} - T_m) + \left[ \frac{\rho_s + \rho_\ell}{2\rho_\ell\rho_s} - \frac{1 - T_m\alpha_\ell}{\rho_\ell} \right] (P_s - P_\ell)$$

Принятые обозначения:  $u_s, u_l, P_s, P_l, \rho_s, \rho_l, C_{ps}, C_{pl}$ , - гидродинамические скорости, давление, плотность, теплоёмкость при постоянном давлении,  $L_m^{ne}$  - неравновесная теплота плавления,  $\alpha_\ell = -\frac{1}{\rho_\ell} \left( \frac{\partial \rho_\ell}{\partial T} \right)_P$  – коэффициент объёмного теплового расширения жидкости, его величина определяется из термического уравнения состояния  $P = P_\ell(\rho_\ell, T_\ell)$ .

Закон сохранения энергии дополняется зависимостями равновесной температуры плавления от давления  $T_m(P_s) = T_0 + kP_s$  и кинетической скорости  $v_{sl}(\Delta T_{sl})$  фронта плавления/кристаллизации от величины



перегрева/переохлаждения  $\Delta T_{s\ell} = T_{s\ell} - T_m(P_s)$  [6], где  $T_m(P_s)$  - равновесная температура плавления, зависящая от давления,  $L_m$ - равновесная теплота плавления,  $v_{s\ell}$ ,  $T_{s\ell}$  - скорость фронта и температура плавления/ кристаллизации на подвижной фазовой границе.

В лабораторной системе координат температурная зависимость скорости фронта плавления/кристаллизации в модели с диффузионным ограничением выражается уравнением [7]:

$$\begin{aligned} V_{s\ell}(\Delta T_{s\ell}) &= u_s \pm v(\Delta T_{s\ell}) \\ &= u_s \pm D \exp\left[-\frac{A}{kT_{s\ell}}\right] \left\{ \exp\left[\left(\frac{L_m m_i}{k_B T_{s\ell}} + \beta\right) \frac{\Delta T_{s\ell}}{T_m(P_s)}\right] - 1 \right\} \end{aligned} \quad (22)$$

Уравнение содержит 3 константы  $D$ ,  $A$ ,  $\beta$ , две из которых  $D$  и  $A$ , - размерные, одна  $\beta$  - безразмерная. Их значения определялись с помощью молекулярно-динамического моделирования [8]. Для Al образца:  $D = 2.699 \cdot 10^2$  [м/с],  $A = 2.251 \cdot 10^{-2}$  [эВ],  $\beta = 3.693$ .

Предполагается, что электронная компонента при переходе через границу раздела фаз является непрерывной по отношению к тепловому потоку и электронной температуре  $T_e$

$$\begin{aligned} \left(\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x}\right)_s &= \left(\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x}\right)_\ell \\ T_{e,s} &= T_{e,\ell} \end{aligned} \quad (23)$$

**3) Фронт испарения  $x = \Gamma_{kv}(t)$ :** В качестве граничных условий на подвижной межфазной границе  $\Gamma_{kv}(t)$  используется модель поверхностного испарения, записанная в приближении Кнудсеновского слоя. Модель состоит из 3-х законов сохранения и 3-х дополнительных параметров на внешней стороне Кнудсеновского слоя ( $T_v$ ,  $\rho_v$ ,  $u_v$ ). В общем случае два из этих параметров (обычно  $T_v$ ,  $\rho_v$ ) определяются с использованием определенных аппроксимационных соотношений, [9], а третий обычно число Маха  $M = u_v/u_{sound}$ , находится из уравнений газовой динамики. Поскольку в данной работе считается, что испарение происходит в вакуум, то  $M=1$ .

Три закона сохранения на испаряющейся поверхности, записанные в неподвижной (лабораторной) системе координат имеют вид:

$$\begin{aligned} x = \Gamma_{kv}(t): \quad \rho_k(u_k - v_{kv}) &= \rho_v(u_v - v_{kv}) \\ P_k + \rho_k(u_k - v_{kv})^2 &= P_v + \rho_v(u_v - v_{kv})^2, \\ \left(-\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x}\right)_k &= \rho_k(u_k - v_{kv})L_v^{ne} \end{aligned} \quad (24)$$

Выписанные законы сохранения дополняются следующими условиями:

$$\begin{aligned}
\rho_v &= \alpha_\rho(M) \rho_{sat}, \quad T_v = \alpha_T(M) T_k \\
P_{sat}(T_k) &= P_b \exp \left[ \frac{L_v m_i}{k_B T_k} \left( \frac{\Delta T_k}{T_b} \right) \right] \\
\rho_{sat} &= P_{sat}(T_k) \frac{m_i}{k_B T_k} \\
\Delta T_k &= T_k - T_b
\end{aligned} \tag{25}$$

где  $k = s, \ell$  - индексы, указывающие на возможность испарения с поверхности твердого тела или жидкости,  $\alpha_\rho(M)$ ,  $\alpha_T(M)$  - коэффициенты Крута [10],  $\rho_{sat}$ ,  $P_{sat}$  - плотность и давление насыщенного пара,  $L_v$  - равновесная теплота испарения,  $P_b$ ,  $T_b$  - давление и температура кипения при нормальных условиях.

По аналогии с определением неравновесной теплоты плавления  $L_m^{ne}$ , определяется неравновесная теплота испарения  $L_v^{ne}$ . Энтальпии фаз в этом случае раскладываются в ряд Тейлора в точке  $(P_{sat}(T_k), T_k)$  с учётом разрыва температуры на фронте. В результате  $L_v^{ne}$  принимает следующее выражение:

$$L_v^{ne} = L_v(T_k) + C_{P_v}(T_v - T_k) + \frac{\rho_k + \rho_v}{2\rho_v\rho_k} (P_k - P_v) - \frac{1 - T_k \alpha_k}{\rho_k} (P_k - P_{sat})$$

Для электронной компоненты граничное условие имеет вид:

$$-\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x} = \sigma T_e^4 \tag{26}$$

Граничное условие для уравнения переноса лазерного излучения формулируются в следующем виде:

$$G(\Gamma_{kv}(t)) = (1 - R_{kv}(T_e)) G_0 \exp(- (t/\tau)^2) \tag{27}$$

где  $\sigma$  - постоянная Стефана-Больцмана,  $R_{kv}$  - отражательная способность поверхности мишени,  $\tau$  - полуширина лазерного импульса.

**4) Фронт ударной волны:**  $x = \Gamma_{sh}(t)$ . В задаче рассматривается возникновение и распространение ударной волны по конденсированной фазе. На подвижном фронте ударной волны  $x = \Gamma_{sh}(t)$  выписываются три закона сохранения, так называемые соотношения Рэнкина - Гюгонио:

$$\begin{aligned}
x = \Gamma_{sh}(t): \quad j_{sh}^m &= \rho_1(u_1 - v_{sh}) = \rho_0(u_0 - v_{sh}) \\
j_{sh}^i &= P_1 + \rho_1(u_1 - v_{sh})^2 = P_0 + \rho_0(u_0 - v_{sh})^2 \\
j_{sh}^e &= W_1 + j_{sh}^m \left[ \varepsilon_{i,1} + \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{(u_1 - v_{sh})^2}{2} \right] =
\end{aligned} \tag{28}$$

$$= W_0 + j_{sh}^m \left[ \varepsilon_{i,0} + \frac{P_0}{\rho_0} + \frac{(u_0 - v_{sh})^2}{2} \right]$$

где  $j_{sh}^m, j_{sh}^i, j_{sh}^e$  – потоки массы, импульса и энергии. Величины с индексом 0 относятся к значениям со стороны фона УВ, а 1 – ударной волны.

С помощью замены переменных общего вида (5) дифференциальная модель (18) – (28) в переменных  $(q, \tau)$  представляется в виде:

$$\left( \begin{array}{l} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = - \frac{\partial Q}{\partial q} \\ \frac{\partial}{\partial \tau} [\psi \rho_i] + \frac{\partial}{\partial q} [\rho_i (u + Q)] = 0 \\ \frac{\partial}{\partial \tau} [\psi \rho_i u] + \frac{\partial}{\partial q} [P + \rho_i u (u + Q)] = 0 \\ \frac{\partial}{\partial \tau} [\psi \rho_e \varepsilon_e] + \frac{\partial}{\partial q} [\rho_e \varepsilon_e (u + Q)] = - \left( P_e \frac{\partial u}{\partial q} + \frac{\partial W_e}{\partial q} + \psi g(T_e)(T_e - T_i) + \frac{\partial G}{\partial q} \right) \\ \frac{\partial [\psi \rho_i \varepsilon_i]}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial q} [\rho_i \varepsilon_i (u + Q)] = - \left( P_i \frac{\partial u}{\partial q} + \frac{\partial W_i}{\partial q} - \psi g(T_e)(T_e - T_i) \right) \\ \frac{\partial G}{\partial q} - \psi \alpha(T_e) G = 0 \end{array} \right) \quad (29)$$

$$\tau > 0, [\Gamma_s < q < \Gamma_{sh,s}] \cup [\Gamma_{sh,s} < q < \Gamma_{s\ell}] \cup [\Gamma_{s\ell} < q < \Gamma_{lv}]$$

Где:

$$W_{i,e} = - \frac{\lambda_{i,e}}{\psi} \frac{\partial T_{i,e}}{\partial q} - \text{тепловые потоки}$$

Таким образом, переход из физического пространства  $\Omega_{x,t}$  в расчетное пространство с произвольной нестационарной системой координат  $\Omega_{q,\tau}$  сопровождается трансформацией исходной дифференциальной системы уравнений (18) в расширенную систему (29), с дополнительным уравнением, являющимся уравнением обратного преобразования. Тип, свойства и вид краевых условий для этого уравнения зависят от конкретного вида функции преобразования  $Q$ . Соответственно для этого уравнения в начальные и граничные условия вносятся необходимые дополнения. Соответствующим образом видоизменяются начальные и граничные условия в остальных уравнениях.

В расчетном пространстве вводится стационарная сетка, а ее образ в физическом пространстве движется с местными скоростями -  $Q_{x,t}$ .

В итоге, в физическом пространстве неизвестными являются не только функции физических полей, но и координаты узлов сетки. После определения функции  $Q$  уравнение обратного преобразования используется для построения в физическом пространстве адаптирующей к решению сетки. Его разностный аналог описывает динамику узлов сетки, а функция  $Q$  осуществляет управляемое перемещение узлов сетки, согласованное с динамикой искомого решения. В расчетном пространстве узлы сетки и все разрывные и межфазные границы неподвижны. Значения функции  $Q$  на границах области определяются из граничных условий.

Функция  $Q$ , согласованная с искомым решением определяется из принципа квазистационарности [2]. Так как в уравнения баланса энергии входят все гидродинамические величины для определения функции  $Q$ , достаточно ограничиться двумя уравнениями энергии для  $\varepsilon_e$  и  $\varepsilon_i$  из системы (29), предположив, что  $\partial\varepsilon_e/\partial\tau = \partial\varepsilon_i/\partial\tau = 0$ . Тогда функция  $Q$  будет иметь вид:

$$Q = -u - \frac{2P \frac{\partial u}{\partial q} + \left( \frac{\partial W_e}{\partial q} + \frac{\partial W_i}{\partial q} + \frac{\partial G}{\partial q} \right)}{\rho_e \frac{\partial \varepsilon_e}{\partial q} + \rho \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial q} + re} \quad (30)$$

где  $re \approx 10^{-5}$  – константа, при разностной аппроксимации предотвращающая обращение знаменателя в ноль.

На границах при переходе в подвижную систему координат функция  $Q$  принимают следующие значения:  $Q_{s\ell} = -v_{s\ell}$  (для границы плавления),  $Q_{kv} = -v_{kv}$  (для границы испарения) и  $Q_{sh,s} = -v_{sh,s}$  (для фронта ударной волны). А в остальном граничные условия остаются прежними.

Аппроксимация исходной дифференциальной модели (18) – (28) осуществлялась семейством консервативных конечно-разностных схем, записанных на расчетных сетках с динамической адаптацией:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta\tau^j} (\psi_{i-1/2}^{j+1} - \psi_{i-1/2}^j) = -\frac{1}{h} (Q_i^{\sigma_1} - Q_{i-1}^{\sigma_1}) \\ & \frac{1}{\Delta\tau^j} (\psi_{i-1/2}^{j+1} \rho_{i-1/2}^{j+1} - \psi_{i-1/2}^j \rho_{i-1/2}^j) \\ & \quad = -\frac{1}{h} (\rho_{*i}^{\sigma_2} (Q_i^{\sigma_1} + u_i^{\sigma_3}) - \rho_{*i-1}^{\sigma_2} (Q_{i-1}^{\sigma_1} + u_{i-1}^{\sigma_3})) \\ & \frac{1}{2\Delta\tau^j} (u_i^{j+1} (\psi_{i-1/2}^{j+1} \rho_{i-1/2}^{j+1} + \psi_{i+1/2}^{j+1} \rho_{i+1/2}^{j+1}) - u_i^j (\psi_{i-1/2}^j \rho_{i-1/2}^j + \psi_{i+1/2}^j \rho_{i+1/2}^j)) \\ & \quad = \\ & = -\frac{1}{h} (P_{i+1/2}^{\sigma_4} - P_{i-1/2}^{\sigma_4}) - \frac{1}{2h} (\rho_{*i}^{\sigma_2} (Q_i^{\sigma_1} + u_i^{\sigma_3}) u_{i+1}^{\sigma_3} + \rho_{*i+1}^{\sigma_2} (Q_{i+1}^{\sigma_1} + u_{i+1}^{\sigma_3}) u_i^{\sigma_3}) + \\ & \quad + \frac{1}{2h} (\rho_{*i}^{\sigma_2} (Q_i^{\sigma_1} + u_i^{\sigma_3}) u_{i-1}^{\sigma_3} + \rho_{*i-1}^{\sigma_2} (Q_{i-1}^{\sigma_1} + u_{i-1}^{\sigma_3}) u_i^{\sigma_3}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\Delta\tau^j} \left( \left( \psi_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} \rho_{e,i-\frac{1}{2}}^{j+1} \varepsilon_{e,i-\frac{1}{2}}^{j+1} \right) - \left( \psi_{i-\frac{1}{2}}^j \rho_{e,i-\frac{1}{2}}^j \varepsilon_{e,i-\frac{1}{2}}^j \right) \right) = \\
& = -\frac{1}{h} \left( \rho_{*e,i}^{\sigma_2} \varepsilon_{*e,i}^{\sigma_5} (Q_i^{\sigma_1} + u_i^{\sigma_3}) - \rho_{*e,i-1}^{\sigma_2} \varepsilon_{*e,i-1}^{\sigma_5} (Q_{i-1}^{\sigma_1} + u_{i-1}^{\sigma_3}) \right. \\
& \quad \left. + P_{e,i-\frac{1}{2}}^{\sigma_4} (u_i^{\sigma_3} - u_{i-1}^{\sigma_3}) \right) + \\
& + \frac{2}{h^2} \left( \lambda_{e,i}^{\sigma_6} \frac{T_{e,i+\frac{1}{2}}^{\sigma_7} - T_{e,i-\frac{1}{2}}^{\sigma_7}}{\psi_{i+\frac{1}{2}}^{\sigma_8} + \psi_{i-\frac{1}{2}}^{\sigma_8}} - \lambda_{e,i-1}^{\sigma_6} \frac{T_{e,i-\frac{1}{2}}^{\sigma_7} - T_{e,i-\frac{3}{2}}^{\sigma_7}}{\psi_{i-\frac{1}{2}}^{\sigma_8} + \psi_{i-\frac{3}{2}}^{\sigma_8}} \right) - \psi_{i-\frac{1}{2}}^{\sigma_8} [g(T_e)^{\sigma_9} (T_e - T_i)^{\sigma_{10}}]_{i-\frac{1}{2}} \\
& \quad - \frac{1}{h} (G_i^{\sigma_{11}} - G_{i-1}^{\sigma_{11}}) \\
& \frac{1}{\Delta\tau^j} \left( \left( \psi_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} \rho_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} \varepsilon_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} \right) - \left( \psi_{i-\frac{1}{2}}^j \rho_{i-\frac{1}{2}}^j \varepsilon_{i-\frac{1}{2}}^j \right) \right) = \\
& - \frac{1}{h} \left( \rho_{*i}^{\sigma_2} \varepsilon_{*i}^{\sigma_5} (Q_i^{\sigma_1} + u_i^{\sigma_3}) - \rho_{*i-1}^{\sigma_2} \varepsilon_{*i-1}^{\sigma_5} (Q_{i-1}^{\sigma_1} + u_{i-1}^{\sigma_3}) + P_{i-1/2}^{\sigma_4} (u_i^{\sigma_3} - u_{i-1}^{\sigma_3}) \right) + \\
& + \frac{2}{h^2} \left( \lambda_i^{\sigma_{12}} \frac{T_{i+1/2}^{\sigma_{11}} - T_{i-1/2}^{\sigma_{11}}}{\psi_{i+1/2}^{\sigma_8} + \psi_{i-1/2}^{\sigma_8}} - \lambda_{i-1}^{\sigma_{12}} \frac{T_{i-1/2}^{\sigma_{11}} - T_{i-3/2}^{\sigma_{11}}}{\psi_{i-1/2}^{\sigma_8} + \psi_{i-3/2}^{\sigma_8}} \right) \\
& \quad + \psi_{i-1/2}^{\sigma_8} (g(T_e)^{\sigma_9} (T_e - T_i)^{\sigma_{10}})_{i-1/2}
\end{aligned}$$

Здесь  $f_{*i} = \frac{f_{i-1/2} \Psi_{i+1/2} + f_{i+1/2} \Psi_{i-1/2}}{\Psi_{i+1/2} + \Psi_{i-1/2}}$ , представляет процедуру получения

функции в целых узлах  $i$  путем интерполяции значений функции в полуцелых узлах  $i+1/2$ , а  $f^{\sigma_r} = \sigma_r f^{j+1} + (1 - \sigma_r) f^j$ , а  $\sigma_r = \sigma_1, \sigma_2, \dots$  весовые множители, определяющие степень неявности разностных схем. В рассматриваемых схемах значения весовых множителей равнялось  $\sigma_1 = \sigma_2 = \dots = \sigma_{11} = 0.5$ ,  $\rho \approx \rho_i$  (здесь  $i$  – индекс ионна), под  $T, P, \lambda$  без индекса подразумевается температура, давление и коэффициент теплопроводности для ионов соответственно, а под  $T_e, P_e, \lambda_e$  – для электронов.

Численное решение системы нелинейных сеточных уравнений (29) осуществлялось с помощью разработанного вычислительного алгоритма, схематично представленного на Рис.8, с вложенными итерационными циклами, состоящими из одного внешнего и двух внутренних циклов. В каждом из внутренних циклов используется итерационная процедура Ньютона. В первом внутреннем итерационном цикле из решения уравнения энергии определяется температура, а газодинамическая скорость и плотность считаются постоянными. Во втором наоборот – температура считается постоянной, а из решения уравнений движения и непрерывности соответственно находятся скорость и плотность. Кроме того, в каждом из двух внутренних циклов используется до

четырёх дополнительных итерационных циклов. В них итерационно решаются системы нелинейных уравнений, полученных из аппроксимации граничных условий на межфазных границах плавления, испарения и ударных волнах. Кроме того, после каждого внутреннего цикла давление пересчитывается через уравнение состояния.

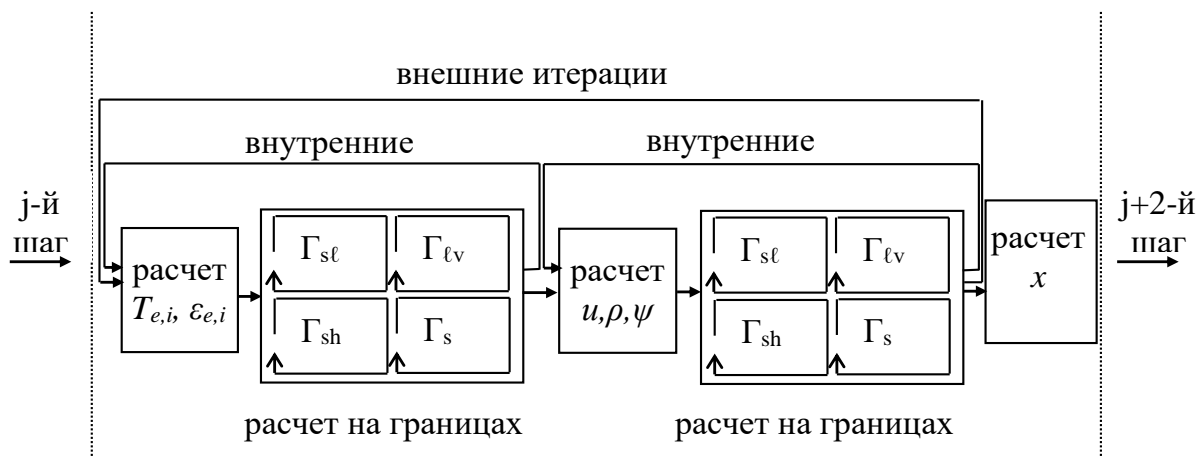


Рис.8. Схема вычислительного алгоритма.

### Анализ результатов моделирования

Нагрев алюминиевой мишени толщиной 200нм инициируется лазерным импульсом гауссовой формы с длиной волны  $\lambda_L = 0.8 \mu m$  с постоянной времени 100 фс, флюенсом  $0.35 \text{ Дж/см}^2$  и интенсивностью  $G_0 = 1.97 \times 10^{12} \text{ Вт/см}^2$ .

Поглощенная доля энергии  $fs$  – лазерного импульса выделяется, в электронной подсистеме металла, вызывая её быстрый нагрев до высоких температур  $T_e^{max} \approx 1.4 \cdot 10^4 K$  при практически холодной решетке. Медленный обмен энергией между компонентами металла приводит к большому различию температур между ними,  $T_e \gg T_i$ , Рис.9.

Плавление начинается в момент времени  $t \approx 70 \text{ fs}$  с формирования на облучаемой поверхности мишени гетерогенного фазового фронта  $\Gamma_{sl}(t)$ , распространяющегося со скоростью  $v_{sl} = v(T_{sl})$  вглубь твёрдого тела. Значительный перегрев плавящейся поверхности и большие пространственные градиенты температуры, обеспечивают высокую скорость распространения фронта плавления  $v_{sl} \sim 1-2 \text{ км/с}$ . Мощный поток вещества через границу раздела  $\Gamma_{sl}(t)$  и, продолжающийся объёмный нагрев решетки за счет энергии электронов, приводят к формированию температурного максимума в твердой фазе, для которого выполняются неравенства:  $T_s^{max}(P) \gg T_{sl} > T_m(P)$ , Рис. 10. При достижении температуры предельного перегрева в твердотельной фазе металла в метастабильной области сильно перегретого приповерхностного слоя создаются предпосылки для возникновения гомогенного механизма плавления.

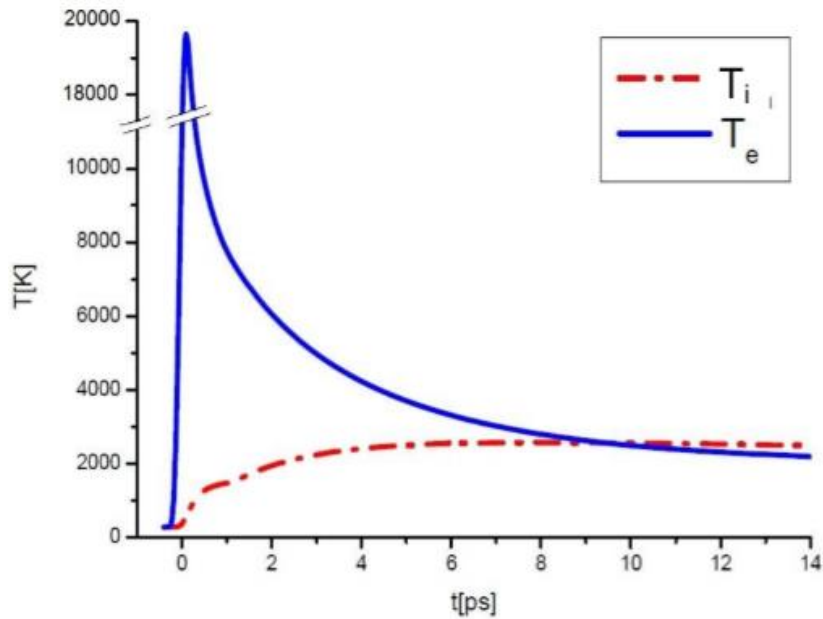


Рис.9. Временная зависимость температуры электронов и фононов на поверхности мишени.

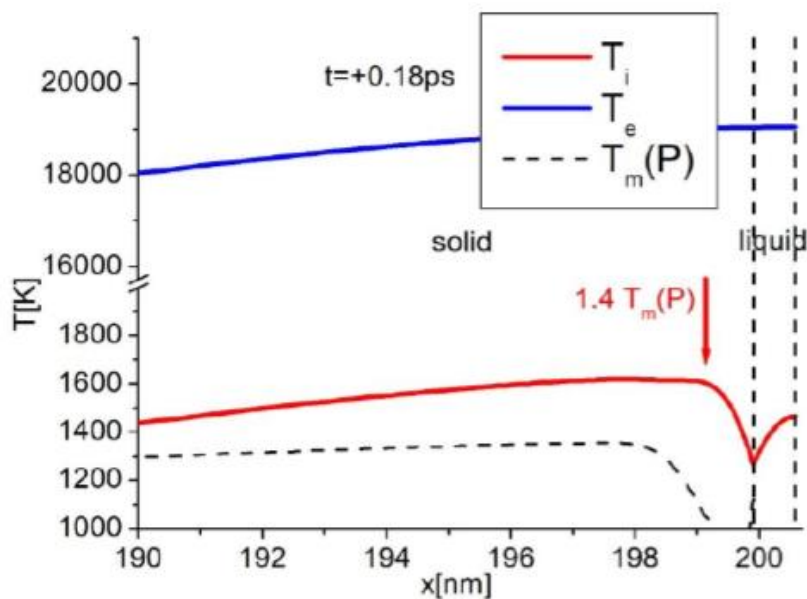


Рис. 10. Пространственные профили температуры и места внедрения первого квазизародыша

В данной работе механизм гомогенного плавления моделируется введением квазизародышей жидкой фазы в точку максимального перегрева с температурой  $T_s^{max} = 1.4T_m$  и размером  $\Delta x \approx (0.1 - 1) \text{ nm}$ . На границах квазизародыша выписываются кинетические условия гетерогенного плавления (21), (22), что обеспечивает появление двух новых фронтов плавления, распространяющихся в противоположных направлениях со скоростями  $v_{sl,2}$  и  $v_{sl,3}$ . В итоге, получаем систему с тремя границами (фазовыми фронтами), движущимися со скоростями

$v_{sl,1}$ ,  $v_{sl,2}$  и  $v_{sl,3}$ , Рис. 11. Перемещение всех границ реализуется в рамках метода динамической адаптации. Общее число квазизародышей для рассматриваемого режима составляет около 20.

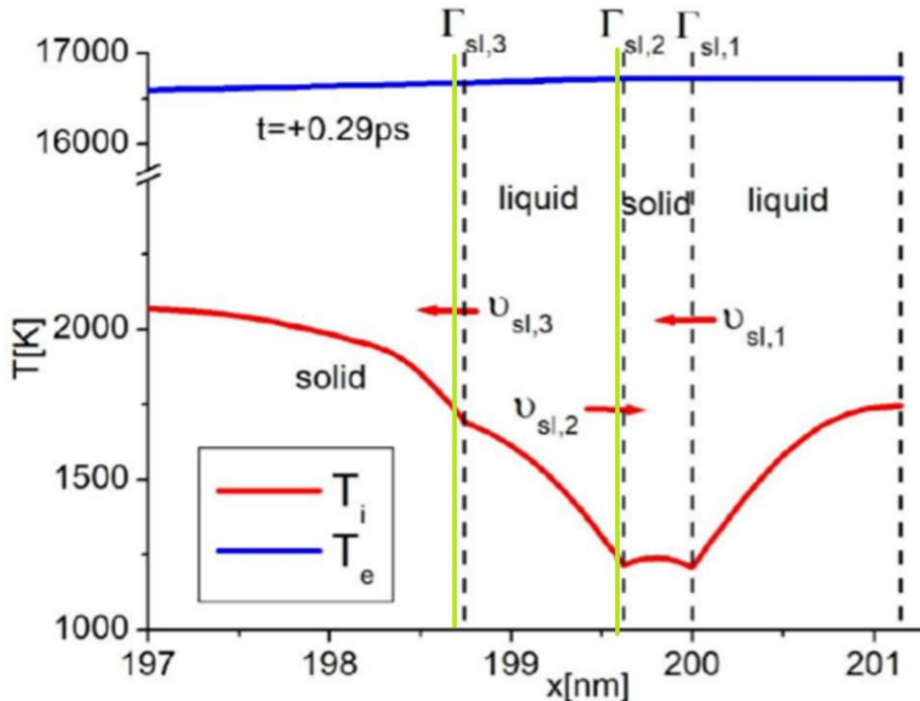


Рис. 11. Появление и развитие первого квазизародыша (представлено между двумя зелеными линиями). Движение гетерогенного фронта от поверхности.

Скорость гомогенного плавления определяется как производная по времени от суммарного пространственного размера множества жидких фаз. На Рис.12 показана скорость плавления. Участки кривой, обозначенные красными пунктирными линиями, соответствуют скорости гетерогенного плавления, а синей сплошной линией – гомогенного плавления.

Динамическая фрагментация состоит из совокупности термодинамических и механических процессов, приводящих при выполнении определённых условий, к возникновению напряжённых состояний превышающих прочность вещества. Разгрузка этих состояний при превышении порога прочности вещества приводит к механическим отколам, т е к фрагментации вещества в мишени.

На Рис.13 представлены 15 фрагментов жидкой фазы размерами от 2 до 37 нм. В целом в данном режиме воздействия произошло около 30 механических отколов; но часть из них соединялись друг с другом, образуя более крупные фрагменты. Общее количество фрагментированного материала в пересчете на плотность исходного твердого вещества составляет 92 нм.



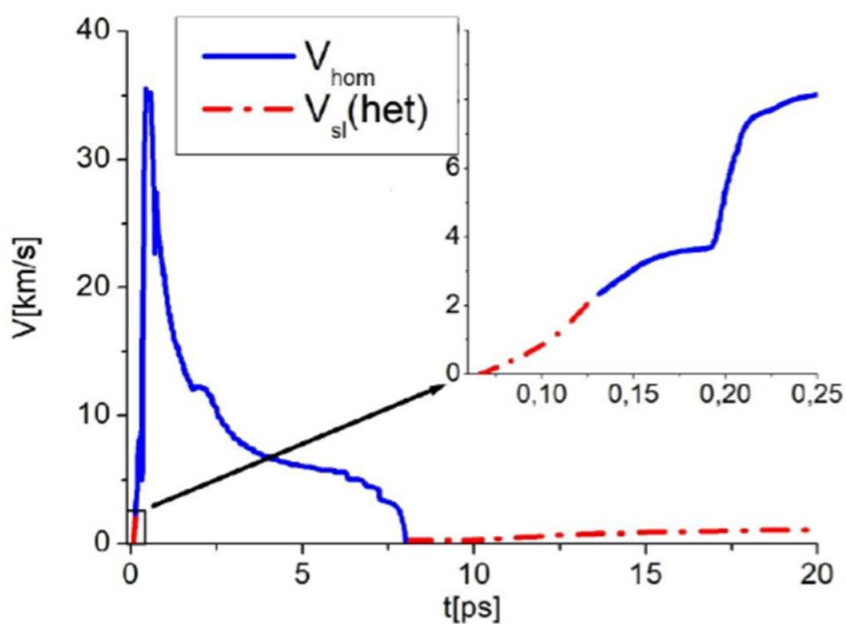


Рис.12. Скорость гетерогенного (красный пунктир) и гомогенного (синяя сплошная линия) плавления.

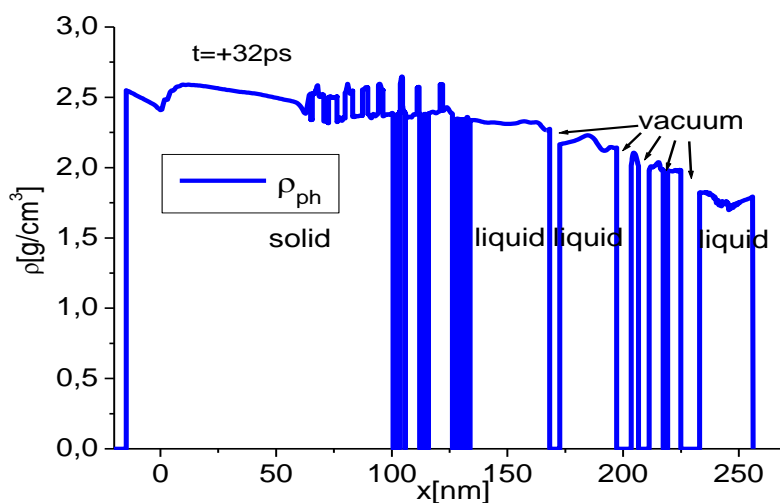


Рис.13. Пространственное распределение плотности  $\rho$  в Al мишени и отколовшихся фрагментах при  $t=+32$  пс.

Сравнение результатов данной работы с экспериментальными [11] и теоретическими [12] результатами производилось по количеству вынесенного вещества, пересчитанного затем на глубину кратера, *Рис.14*.

Выполненная валидация подтвердила, что результаты моделирования хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными [11]. Верификация также показала, что результаты моделирования находятся в разумном согласии с расчётами работы [12].

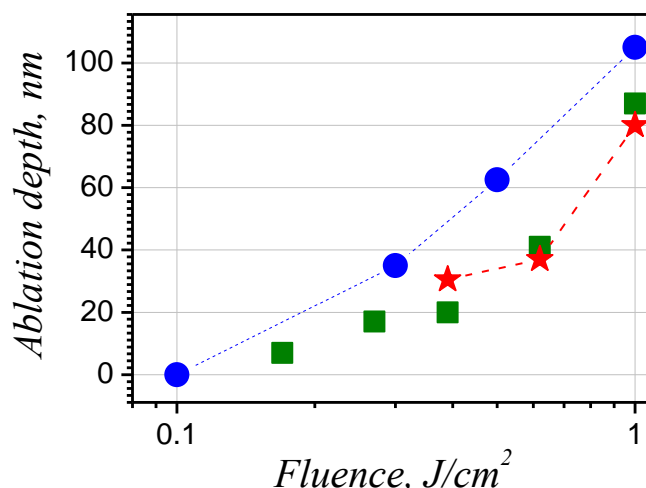


Рис.14. Зависимость глубины абляции от флюенса. Сравнение экспериментальных [11] и расчётных [12] данных (отмечены зеленым и синим цветом соответственно) с результатами, полученными в данной работе (отмечены красным цветом).

В **заключении** приведены основные результаты диссертационной работы и список литературы.

#### Список литературы:

1. Головизнин В.М., Горбачев Д.Ю., Колокольников А.М., Майоров П.А., Майоров П.А., Тлепсук Б.А. Неявные обратимые по времени схемы “кабаре” для квазилинейных уравнений мелкой воды // Выч. мет. Программирование. 2016. Т. 17, №4, С. 402–414.
2. Мажукин В.И., Самарский А.А., Шапранов А.В. Метод динамической адаптации в проблеме Бюргерса // Докл. Акад. Наука. 1993. Т. 333, №2, С. 165-169.
3. Рабинович М.И., Трубецков Д.И. “Введение в теорию колебаний и волн.” // НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”. 2000. С. 560.
4. Mazhukin, V.I.; Demin, M. M.; Shapranov, A.V.; Mazhukin, A.V. Role of electron pressure in the problem of femtosecond laser action on metals // Applied Surface Science. 2020. V. 530, 147227. Doi: 10.1016/j.apsusc.2020.147227
5. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Mazhukin A.V., Koroleva O.N. Mathematical formulation of a kinetic version of Stefan problem for heterogeneous melting/crystallization of metals // Math. Montis. 2016. V. 36, P. 58-77.
6. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Perezhigin V.E., Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Kinetic Melting and Crystallization Stages of Strongly Superheated and Supercooled Metals // Math. Models Comput. Simul. 2017. V. 9, № 4, P. 448-456. Doi: 10.1134/S2070048217040081
7. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Modification of the Wilson–Frankel kinetic model and atomistic simulation of the rate of melting/crystallization of metals // Matematicheskoe modelirovanie. 2023. V. 35, № 11, P. 103–121. Doi: <https://doi.org/10.20948/mm-2023-11-08>

8. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Koroleva O.N. Atomistic modeling of crystal-melt interface mobility of fcc (Al, Cu) and bcc (Fe) metals in strong superheating/undercooling states // *Math. Montis*. 2020. V.48, P. 70-85. Doi: 10.20948/mathmontis-2020-48-7
9. Mazhukin V.I., Samokhin A.A. Boundary conditions for gas-dynamical modeling of evaporation processes // *Math. Montis*. 2012. V.24, P. 8-17.
10. Crout D. An application of kinetic theory to the problems of evaporation and sublimation of monatomic gases // *J. Math. Phys.* 1936. № 15, P. 1–54.
11. Nedialkov N.N., Atanasov P.A., Amoroso S., Bruzzese R., Wang X. Laser ablation of metals by femtosecond pulses: Theoretical and experimental study // *Applied Surface Science*. 2007. V. 253, № 19, P. 7761–7766. Doi: 10.1016/j.apsusc.2007.02.083
12. Povarnitsyn M.E., Khishchenko K.V., Levashov P.R. Phase transitions in femtosecond laser ablation // *Applied Surface Science*. 2009. V. 255, № 10, P. 5120-5124. Doi: 10.1016/j.apsusc.2008.07.199

### **Публикации автора по теме диссертации:**

1. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Bykovskaya E.N. Comparative analysis of the quality of two- and three-layer difference schemes of the second order // *Mathematica Montisnigri*. 2018. V. 43. P. 31-51. (WoS, MathSciNet)
2. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Bykovskaya E.N. Two-layer finite-difference schemes for the Korteweg-de Vries equation in Euler variables // *Mathematica Montisnigri*. 2020. V. 49. P. 57-69. Doi: [10.20948/mathmontis-2020-49-5](https://doi.org/10.20948/mathmontis-2020-49-5) (WoS, MathSciNet)
3. Быковская Е.Н., Шапранов А.В., Мажукин В.И. Анализ погрешности аппроксимации двухслойных разностных схем для уравнения Кортевега – де Вриза // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. 2021. № 1. С. 17. Doi: <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-1> (РИНЦ)
4. Быковская Е.Н. Численное решение уравнения Кортевега-де Вриза на подвижной сетке с использованием двухслойных разностных схем // «Ученые записки физического факультета» Физический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова. 2022. № 1, 2210702. (Список ВАК)
5. Mazhukin V.I., Demin M.M., Shapranov A.V., Bykovskaya E.N. Continual modeling of processes of heterogeneous melting and fragmentation of metal by ultrashort laser pulse // *Mathematica Montisnigri*. 2023. V. LVIII, P. 80-93. Doi: [10.20948/mathmontis-2023-58-6](https://doi.org/10.20948/mathmontis-2023-58-6) (Scopus, MathSciNet)