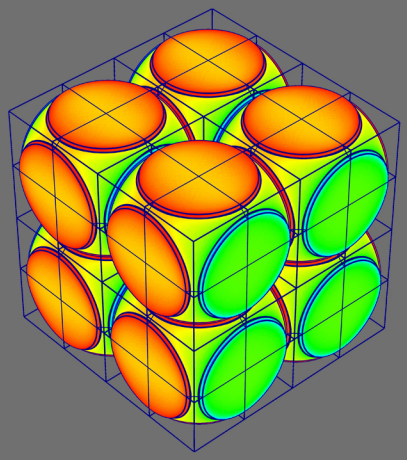
ISSN 2309-3684



Математическое моделирование и численные методы

Буланов А.В., Шепелев В.В. Фортова С.В. Численное моделирование распространения индуцированной лазером ударной волны в алюминии. Математическое моделирование и численные методы, 2024, № 4, с. 66–77.

Источник: https://mmcm.bmstu.ru/articles/358/

Параметры загрузки:
IP: 216.73.217.22
18.11.2026 12:59:46

УДК 519.63 DOI: 10.18698/2309-3684-2024-4-6677

Численное моделирование распространения индуцированной лазером ударной волны в алюминии

© А.В. Буланов, В.В. Шепелев, С.В. Фортова

ИАП РАН, Москва, 123056, Россия

В данной работе исследуется задача об облучении алюминиевой мишени фемтосекундным лазерным импульсом. Проведён расчёт задачи конечно-элементным лагранжевым методом. Результаты сравниваются с расчётами методом типа Годунова и методом молекулярной динамики. Гидродинамические расчёты показывают практически полное соответствие. Использование метода с подвижной сеткой позволяет точно определить границу материала. В области волн разрежения методы гидродинамики показывают гораздо большую амплитуду отрицательных давлений, чем расчёты методом молекулярной динамики. Предложена модель отрыва, позволяющая учитывать возможные разрывы материала. Использование модели отрыва в расчетах улучшает соответствие с молекулярно-динамическими моделями и предотвращает образование второй ударной волны.

Ключевые слова: *фемтосекундный лазерный импульс, ударная волна, гидродинамическое моделирование, модель отрыва*

Введение. Лазерные технологии нашли применение в различных областях, породив специализированные научные и технологические направления. Значительные исследования были посвящены лазерному структурированию поверхности материалов, в особенности индуцированным лазером периодическим поверхностным структурам [1], выборочному лазерному плавлению в аддитивном производстве [2] и лазерной абляции в жидкости для производства наночастиц [3, 4]. Лазерное ударное упрочнение с помощью наносекундных лазерных импульсов [5] позволяет в несколько раз увеличить срок службы металлических деталей.

Фемтосекундные ($1\ \text{фс} = 10^{-15}\ \text{с}$) лазерные импульсы имеют ряд преимуществ, в сравнении с наносекундными импульсами. Ультракороткая длительность фемтосекундных импульсов позволяет доставлять высокие пиковые мощности с минимальной тепловой диффузией в окружающий материал. Эта характеристика делает фемтосекундные лазеры предпочтительными для использования в областях, требующих высокой точности и минимальных зон теплового воздействия.

В процессе лазерного упрочнения поверхность материала обрабатывается лазерным импульсом, который создаёт интенсивную ударную волну внутри материала. Эта волна распространяется в материале и вызывает пластическую деформацию и пластическую пе-

рестройку микроструктуры. В результате происходит сжатие поверхностного слоя материала, улучшение его механических свойств, таких как усталостная прочность и сопротивление трещинам.

В последнее десятилетие использование фемтосекундных лазерных импульсов для ударного упрочнения было предложено и опробовано [6-8], но лежащие в основе фемтосекундного упрочнения физические механизмы до конца не ясны и продолжают быть предметом исследований.

Эффект упрочнения напрямую связан с величиной напряжений в подповерхностном слое, поэтому расчёт пространственной эволюции напряжений при индуцированной лазером ударной волне в металлах имеет первостепенное значение.

В данной работе численное моделирование основано на лагранжевом подходе, преимуществом которого является перемещение сетки вместе с веществом. Это позволяет отслеживать контактную границу естественным образом, без применения специальных модификацией методов.

Постановка задачи. Выполняется гидродинамическое моделирование задачи распространения ударной волны в алюминиевой мишени, облучаемой единичным ультракоротким лазерным импульсом.

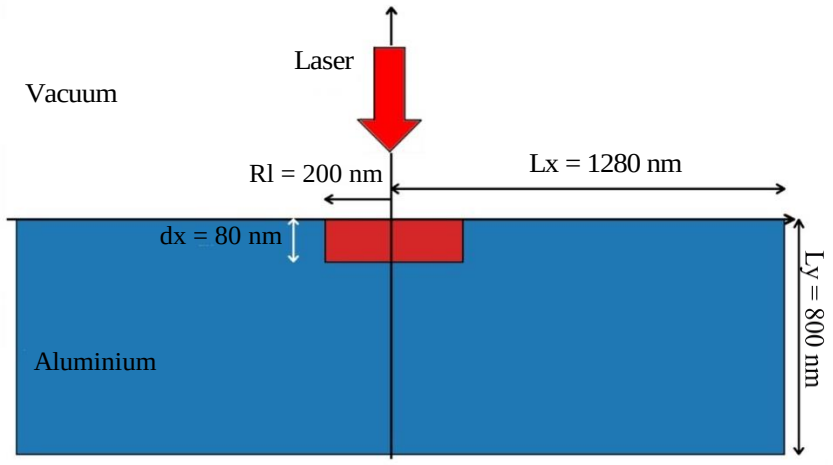


Рис. 1. Конфигурация задачи лазерного облучения объёмной алюминиевой мишени. L_x — полуширина мишени, L_y — толщина мишени, R_l — радиус светового пятна, d_x — глубина первоначального нагрева

Начало координат связано с центром светового пятна на металлической поверхности. Ось x направлено вправо вдоль поверхности, а ось y - вдоль оси лазерного луча, перпендикулярного поверхности. Полуширина мишени составляет $L_x = 1280$ нм, толщина — $L_y = 800$ нм. Все моделируемые процессы происходят в прямоугольнике $\left[-L_x, L_x\right] \times \left[-L_y, 0\right]$.

Задача двухтемпературного нагрева облучаемого металла, включающая распространение тепла от скин слоя в мишень за счёт электронной теплопроводности, выравнивание температур электронов и ионов благодаря электронно-ионному обмену и практически изохорное формирование профиля давления изучена в работах [9-11].

В качестве начального условия давления выбрана прямоугольная ступенчатая функция, по параметрам близкая к итоговому типовому профилю сжатия. Температура и давление внутри прямоугольника $2R_l \times d_x$ повышены, и равняются $T = 20$ кК, $p = 35.6$ ГПа. Это соответствует интенсивности падающего импульса порядка $I_{inc} \sim 10^{15}$ Вт/см^2 длительностью $\tau_L = 0.1$ пс. В остальной области $p = 0$. Плотность алюминия одинакова во всей мишени и равняется $\rho_0 = 2413$ кг/м^3.

Для алюминия используется полуэмпирическое уравнение состояния в форме Ми-Грюнайзена. Уравнение имеет вид:

$$p = p_{cold}(\rho) + \rho \cdot G(\rho) \cdot (e - e_{cold}(\rho)), \tag{1}$$

где

$$p_{cold}(\rho) = \begin{cases} p_0 \dfrac{\rho}{\rho_0}\left[\dfrac{1}{a}\left(\dfrac{\rho}{\rho_0}\right)^a - \dfrac{1}{b}\left(\dfrac{\rho}{\rho_0}\right)\right], & \dfrac{\rho}{\rho_0} \geq 1, \\ p_g\left[\left(\dfrac{\rho}{\rho_0}\right)^{\beta+1} - 1\right], & \dfrac{\rho}{\rho_0} < 1 \end{cases} \tag{2}$$

и

$$e_{cold}(\rho) = \begin{cases} \dfrac{p_0}{\rho_0}\left[\dfrac{1}{a}\left(\dfrac{\rho}{\rho_0}\right)^a - \dfrac{1}{b}\left(\dfrac{\rho}{\rho_0}\right)^b\right], & \dfrac{\rho}{\rho_0} \geq 1, \\ \dfrac{p_0}{\rho_0}\left[\dfrac{1}{\beta+1}\left(\dfrac{1}{\beta}\left(\dfrac{\rho}{\rho_0}\right)^\beta + \dfrac{\rho_0}{\rho}\right) - \dfrac{1}{\beta} - \dfrac{1}{ab}\right], & \dfrac{\rho}{\rho_0} < 1 \end{cases} \tag{3}$$

$$\beta = \frac{p_0}{p_g}(a - b) - 1.$$

Алюминий хорошо описывается параметрами: ρ_0 = 2750 кг/м, p_0 = 560.964 ГПа, p_g = 15 ГПа, a = 1.12657, b = 0.975511. Параметр Грюнайзена G принимается постоянным и равным 1.2. Обоснование используемых коэффициентов дано в [12].

Математическая модель и описание численного метода. В работе используется конечно-элементный многофазный лагранжев метод [13].

Решаются уравнения Эйлера в лагранжевой системе отсчёта:

$$\frac{dx}{dt} = v, \tag{4}$$

- уравнение движения,

$$\frac{d\alpha_k}{dt} = \eta_k, \tag{5}$$

- уравнение изменения объемной доли,

$$\frac{1}{\alpha_k \rho_k} \frac{d(\alpha_k \rho_k)}{dt} = -\nabla \cdot v, \tag{6}$$

- закон сохранения массы,

$$\left(\sum_k \alpha_k \rho_k \right) \frac{dv}{dt} = \nabla \cdot \sum_k \alpha_k \sigma_k, \tag{7}$$

-закон сохранения импульса,

$$\alpha_k \rho_k \frac{de}{dt} = \alpha_k \sigma_k : \nabla v, \tag{8}$$

-закон сохранения энергии.

$$\sigma_k = -p_k(\rho_k, e_k) I, \tag{9}$$

- уравнение состояния,

где x — радиус-вектор координат, v — вектор скорости, α — объёмная доля, η — скорость изменения объёмной доли, ρ — плотность, σ_k — тензор напряжений, e — удельная внутренняя энергия, p – давление, индекс k определяет различные материалы, I — единичный тензор, ∇ — дифференциальный набла-оператор. В законе сохранения энергии оператор ":" означает свертку тензоров.

Метод конечных элементов основывается на слабой форме уравнений Эйлера [14]. Вариационная формулировка определяется двумя пространствами конечной размерности на начальной области Ω_0. Скорость материалов v и радиус-вектор x дискретизируются в конечно-элементном пространстве $V \subset \left[H_1(\Omega_0) \right]^d$ с базисом $\{\omega_i\}$, удельные внутренние энергии e_k различных материалов k в пространстве $E \subset L_2(\Omega_0)$ дискретизируются с базисом $\{\omega_j\}$.

Плотность ρ вычисляется поточено от преобразования к исходным позициям: для точки

$$x = x(x_0, t),\ \rho_k(x,t) = \rho_{0,k}(x_0) \cdot \rho_{0,k}(x_0) \big/ (\rho_k(x,t) \cdot |J(x_0,t)|),$$

где α — объёмная доля, J — якобиан лагранжевого преобразования.

В слабой формулировке используются матрицы масс $\mathbf{M}_V$ и $\mathbf{M}_{E,k}$, а также матрица сил $\mathbf{F}_k$, определяемые как

$$\mathbf{M}_v = \int_{\Omega(t)} \left(\sum_k \alpha_k \rho_k \right) \mathbf{w}\mathbf{w}^{\mathbf{T}}, \tag{10}$$

$$\mathbf{M}_{\boldsymbol{\varepsilon},\mathbf{k}} \equiv \int_{\Omega(t)} \alpha_k \rho_k \boldsymbol{\varphi}\boldsymbol{\varphi}^T, \tag{11}$$

$$(\mathbf{F}_k)_{ij} = \int_{\Omega(t)} (\sigma_k : \nabla w_i) \varphi_j, \tag{12}$$

где $\mathbf{w}$ — вектор-столбец кинематических базисных функций $\{w_i\}$, $\boldsymbol{\varphi}$ — вектор-столбец термодинамических базисных функций $\{\varphi_i\}$.

Уравнения (4)-(8) в слабой форме имеют вид:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v} \tag{13}$$

- уравнение движения,

$$\frac{d\alpha_k}{dt} = \eta_k \tag{14}$$

- уравнение изменения объемной доли,

$$\mathbf{M}_{\mathbf{v}} \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\sum_k \mathbf{F}_k \cdot 1 \tag{15}$$

-закон сохранения импульса,

$$\mathbf{M}_{\boldsymbol{\varepsilon},\mathbf{k}} \frac{de_k}{dt} = \mathbf{F}_{\mathbf{k}}^{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{v} \tag{16}$$

-закон сохранения энергии.

Алгоритм реализован в виде программного кода на языке программирования C++. Для ускорения работы кода на многоядерных процессорах в код включена многопоточность с помощью библиотеки OpenMP.

Модель отрыва. Использование многофазного решателя позволяет использовать объёмную долю α_k в качестве инструмента для определения отрыва материала.

В исследуемой задаче присутствует только один материал – алюминий. Изменение объёмной доли алюминия приводит к образованию пустого пространства.

Пусть в определённой точке происходит отрыв алюминия. Уменьшение объёмной доли алюминия приводит к увеличению его плотности, что позволяет повысить давление. Уравнение для изменения объёмной доли алюминия имеет вид:

$$\eta_{Al} = \frac{1}{\tau}\left(p_{Al} - p^*\right)\frac{\alpha_{Al}}{k_{Al}} \tag{17}$$

где τ — время релаксации, $p*$ — равновесное давление и $k_{Al} = \rho_{Al} \cdot c_{Al}{}^2$ — модуль всестороннего сжатия алюминия. Так как вакуум означает отсутствие вещества, равновесное давление $p*$ является постоянным и равным нулю. Время релаксации τ определяется как:

$$\tau = C_\tau \frac{h}{c_{Al}}, \tag{18}$$

где C_τ — произвольная константа, h — характерный размер ячейки. Цель времени релаксации — уменьшить скорость изменения объёмной доли для обеспечения стабильности расчёта.

Отрыв происходит при достижении давления отрыва $p_{sep} = -1$ ГПа.

Численные результаты. Проведён расчёт задачи облучения лазерным импульсом алюминиевой мишени с использованием модели отрыва и без неё. Расчёт производился на процессоре Intel Core i7-10700K на восьми ядрах. В качестве расчётной области взята половина мишени $x \in [0,\ 1280\ \text{нм}]$. Условие на левой границе (оси симметрии мишени) — стенка со скольжением. Верхняя граница — свободная, на правой и нижней стоит условие свободного вытекания.

На рисунке 2 показано сравнение двумерных диаграмм давления, полученных лагранжевым конечно-элементным методом без модели отрыва на сетке 320×200. Результаты сравниваются с расчётами методом типа Годунова с решателем HLLC на сетке 640×400 и результатов метода молекулярной динамики взятыми из [12].

На рисунке 3 показаны профили давления в одномерном срезе мишени, сделанном по оси симметрии мишени $x = 0$.

Расчёт методом конечных элементов практически полностью совпадает с расчётом метода типа Годунова. Использование метода с подвижной сеткой позволяет точно определить границу между алюминием и вакуумом. У гидродинамических расчётов наблюдается хорошее соответствие распространения ударной волны до финального момента времени. Но в области волн разрежения методы гидродинамики показывают гораздо большую амплитуду отрицательных давлений. Это приводит к последующему образованию второй ударной волны.

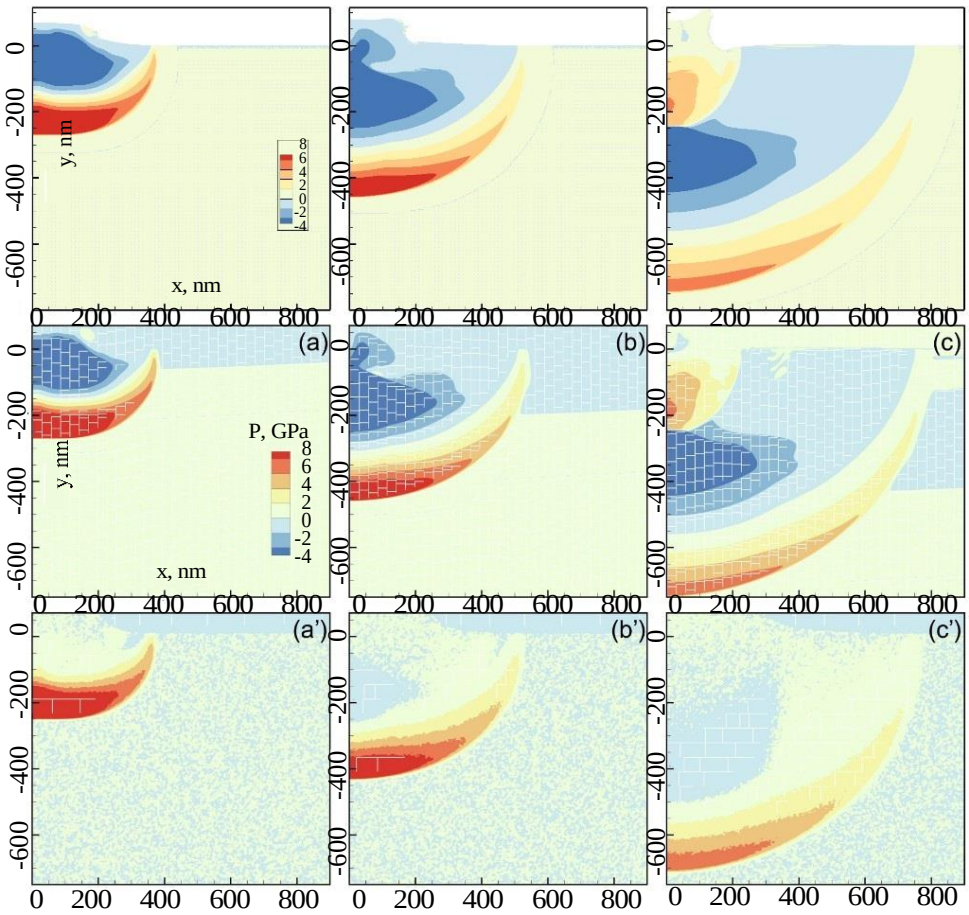


Рис. 2. Двумерные диаграммы давления в моменты времени $t = 28.8$ пс (слева), $t = 57.6$ пс (центр), $t = 105.6$ пс (справа). Диаграммы в первом ряду соответствуют расчёту лагранжевым конечно-элементным методом, во втором - методом типа Годунова, в третьем - методом молекулярной динамики

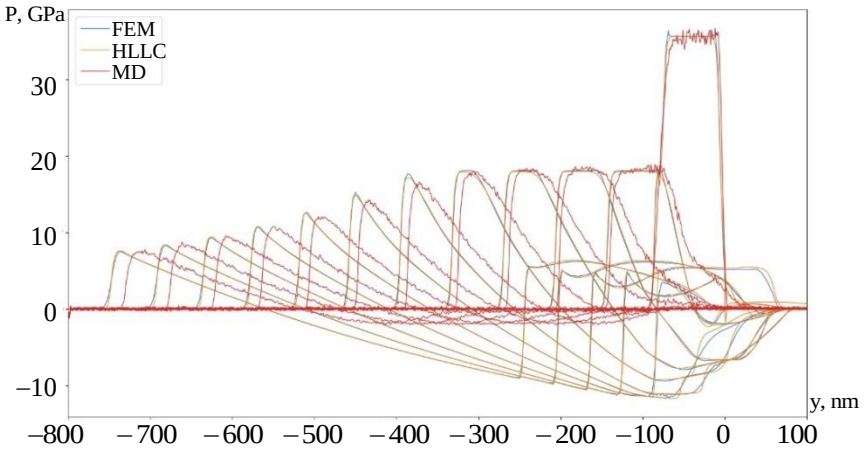


Рис. 3. Профили давления в одномерном срезе мишени, сделанном по оси симметрии мишени ($x = 0$)

В расчётах с моделью отрыва для констант использовались следующие значения: давление отрыва $p_{sep} = -1$ ГПа, $C_\tau = 1.0$.

На рисунке 4 представлено сравнение двух расчётов конечно-элементным лагранжевым решателем, верхние диаграммы соответствуют расчётам с моделью отрыва, нижние – без.

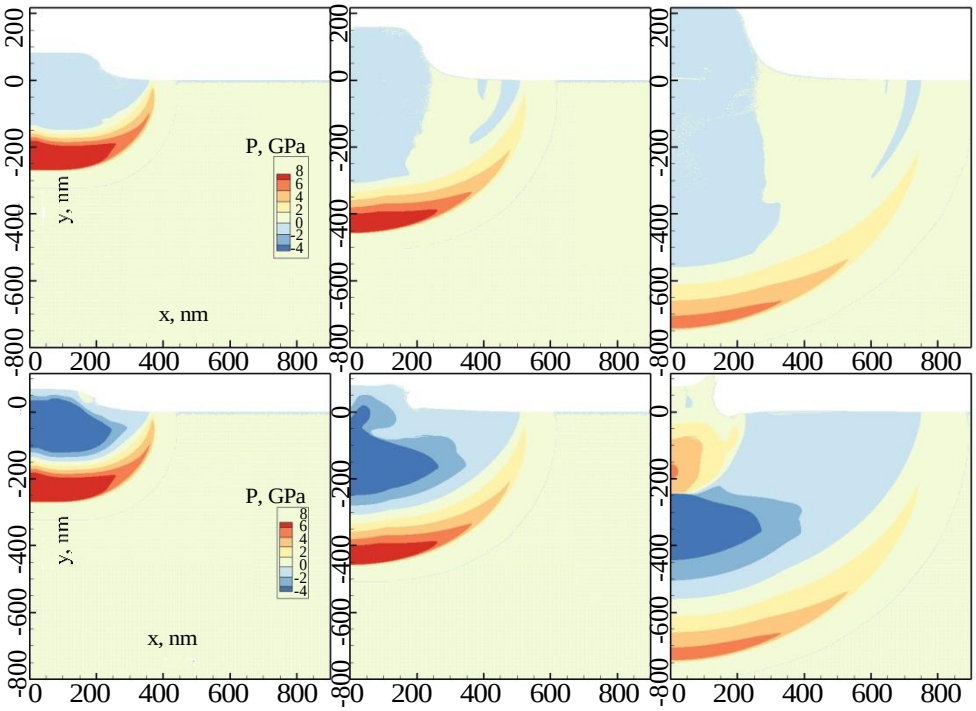


Рис. 4. Двумерные диаграммы давления в моменты времени $t = 28.8$ пс (слева), $t = 57.6$ пс (центр), $t = 105.6$ пс (справа). Диаграммы в первом ряду соответствуют расчёту лагранжевым конечно-элементным методом с модель ю отрыва, во втором – без модели отрыва

Использование модели отрыва убирает область с большими амплитудами низкого давления. Надо отметить, что модель отрыва не влияет на ударно-волновой фронт. Данная модель препятствует образованию второй ударной волны, из-за чего алюминий гораздо дальше распространяется в вакуум.

На рисунке 5 показано сравнение профилей давления в срезе, сделанном по оси симметрии мишени ($x = 0$) расчётов с моделью отрыва и методом молекулярной динамики. Наблюдается хорошее соответствие между методами как на ударном фронте, так и в области низкого давления.

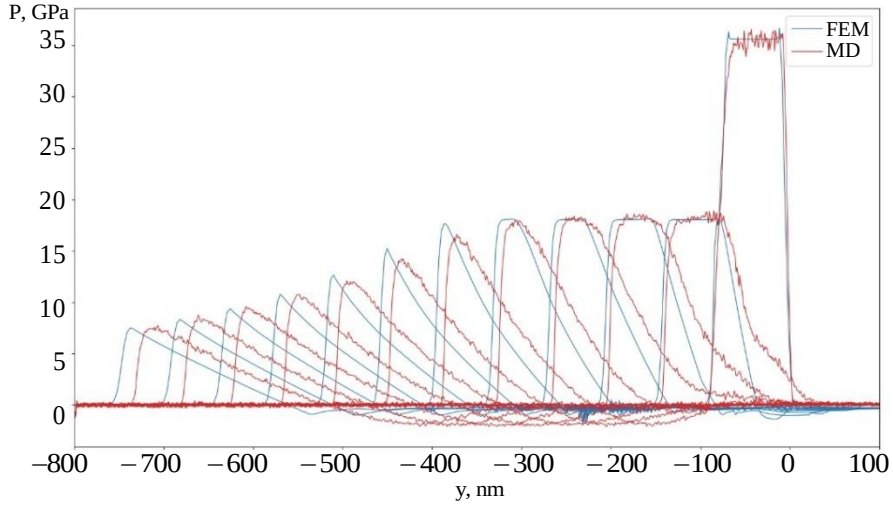


Рис. 5. Профили давления в одномерном срезе мишени, сделанном по оси симметрии мишени ($x = 0$)

Заключение. В данной работе рассмотрено применение лагранжевого метода для численного моделирования задачи об облучении алюминиевой мишени фемтосекундным лазерным импульсом. Приведено сравнение с расчетами по одножидкостной эйлеровой модели, основанной на методе типа Годунова и с молекулярно-динамическими расчетами. Наблюдается хорошее соответствие в области профиля индуцированной лазером ударной волны. В алгоритм включена полуэмпирическая модель отрыва. Ее применение обеспечивает существенное уточнение расчета по одножидкостной модели в области отрицательных растягивающих напряжений в задней части профиля ударной волны.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (госзадание 124022400174-3).

ЛИТЕРАТУРА

[1] Bonse J., Kruger J., Hohm S., Rosenfeid A. Femtosecond laser-induced periodic surface structures. *Journal of Laser Applications*, 2012, Vol. 24, No. 4, art. no. 042006.

[2] Leung C. L. A., Marussi S., Atwood R. C. et al. In situ x-ray imaging of defect and molten pool dynamics in laser additive manufacturing. *Nature Communications*, 2018, Vol. 9, No. 1, art. no. 1355.

[3] Stratakis E., Barberoglou M., Fotakis et al. Generation of al nanoparticles via ablation of bulk al in liquids with short laser pulses. Optics Express, 2009, Vol. 17, Iss. 15, pp. 12650-12659.

[4] Xiao J., Liu P., Wang C., Yang G. External field-assisted laser ablation in liquid: An efficient strategy for nanocrystal synthesis and nanostructure assembly. *Progress in Materials Science*, 2017, Vol. 87, pp. 140–220.

[5] Kim J., Kim Y., Kim J. Effects of simulation parameters on residual stresses for laser shock peening finite element analysis. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2013, Vol. 27, No. 7, pp. 2025–2034.

[6] Tsujino M., Sano T., Ogura T. et al. Formation of high-density dislocations and hardening in femtosecond-laser-shocked silicon. *Applied Physics Express*, 2012, Vol. 5, No. 2, art. no. 022703.
[7] Sano T., Eimura T., Kashiwabara R. et al. Femtosecond laser peening of 2024 aluminum alloy without a sacrificial over-lay under atmospheric conditions. *Journal of Laser Applications*, 2016, Vol. 29, No. 1, art. no. 012005.
[8] Trdan U., Sano T., Klobcar D. et al. Improvement of corrosion resistance of aa2024-t3 using femtosecond laser peening without protective and confining medium. *Corrosion Science*, 2018, Vol. 143, pp. 46–55.
[9] Zhakhovskii V., Inogamov N., Petrov Y. et al. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials. *Applied Surface Science*, 2009, Vol. 255, No. 24, pp. 9592–9596.
[10] Schafer C., Urbassek H. M., Zhigilei L. V. Metal ablation by picosecond laser pulses: A hybrid simulation. *Physical Review. B, Condensed Matter*, 2002, Vol. 66, No. 11, art. no. 115404.
[11] Zhigilei L. V., Lin Z. Atomistic modeling of short pulse laser ablation of metals: Connections between melting, spallation, and phase explosion. *Journal of Physical Chemistry*, 2009, Vol. 113, No. 27, pp. 11892–11906.
[12] Shepelev V., Petrov Yu., Inogamov N. et al. Attenuation and inflection of initially planar shock wave generated by femtosecond laser pulse. *Optics and Laser Technology*, 2022, Vol. 152, art. no. 108100.
[13] Dobrev V., Kolev Tz., Rieben R., Tomov V. Multi-material closure model for high-order finite element lagrangian hydrodynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2016, Vol. 82, No. 10, pp. 689–706.

Статья поступила в редакцию 18.07.2024

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:
Буланов А.В., Шепелев В.В. Фортова С.В. Численное моделирование распространения индуцированной лазером ударной волны в алюминии. *Математическое моделирование и численные методы,* 2024, № 4, с. 66–77.

Буланов Арсений Владимирович — бакалавр, Институт автоматизации проектирования РАН. e-mail: abulanov03@gmail.com

Шепелев Вадим Владимирович — с.н.с., доцент, к.ф.-м.н., Институт автоматизации проектирования РАН.

Фортова Светлана Владимировна — в.н.с., д.ф.-м.н., Институт автоматизации проектирования РАН. e-mail: sfortova@mail.ru

Numerical modelling of shock wave processes induced by femtosecond laser pulses

© A.V. Bulanov, V.V. Shepelev, S.V. Fortova

ICAD RAS, Moscow, 123056, Russia

In this paper, the problem of irradiating an aluminum target with a femtosecond laser pulse is investigated. The calculation of the problem is carried out using the finite element Lagrangian method. The results are compared with calculations by the Godunov

type method and the molecular dynamics method. Hydrodynamic calculations show almost complete compliance. Using the method with movable mesh allows you to accurately determine the boundary of the material. In the field of rarefaction waves, hydrodynamic methods show a much larger amplitude of negative pressures than calculations done with molecular dynamics method. A separation model is proposed, which takes into account possible ruptures of the material. The use of the separation model in calculations improves compliance with molecular dynamics models and prevents the formation of a second shock wave.

***Keywords**: femtosecond laser pulse, shock wave, hydrodynamics simulation, separation model*

REFERENCES

[1] Bonse J., Kruger J., Hohm S., Rosenfeid A. Femtosecond laser-induced periodic surface structures. *Journal of Laser Applications*, 2012, Vol. 24, No. 4, art. no. 042006.

[2] Leung C. L. A., Marussi S., Atwood R. C. et al. In situ x-ray imaging of defect and molten pool dynamics in laser additive manufacturing. *Nature Communications*, 2018, Vol. 9, No. 1, art. no. 1355.

[3] Stratakis E., Barberoglou M., Fotakis et al. Generation of al nanoparticles via ablation of bulk al in liquids with short laser pulses. Optics Express, 2009, Vol. 17, Iss. 15, pp. 12650-12659.

[4] Xiao J., Liu P., Wang C., Yang G. External field-assisted laser ablation in liquid: An efficient strategy for nanocrystal synthesis and nanostructure assembly. *Progress in Materials Science*, 2017, Vol. 87, pp. 140–220.

[5] Kim J., Kim Y., Kim J. Effects of simulation parameters on residual stresses for laser shock peening finite element analysis. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2013, Vol. 27, No. 7, pp. 2025–2034.

[6] Tsujino M., Sano T., Ogura T. et al. Formation of high-density dislocations and hardening in femtosecond-laser-shocked silicon. *Applied Physics Express*, 2012, Vol. 5, No. 2, art. no. 022703.

[7] Sano T., Eimura T., Kashiwabara R. et al. Femtosecond laser peening of 2024 aluminum alloy without a sacrificial over-lay under atmospheric conditions. *Journal of Laser Applications*, 2016, Vol. 29, No. 1, art. no. 012005.

[8] Trdan U., Sano T., Klobcar D. et al. Improvement of corrosion resistance of aa2024-t3 using femtosecond laser peening without protective and confining medium. *Corrosion Science*, 2018, Vol. 143, pp. 46–55.

[9] Zhakhovskii V., Inogamov N., Petrov Y. et al. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials. *Applied Surface Science*, 2009, Vol. 255, No. 24, pp. 9592–9596.

[10] Schafer C., Urbassek H. M., Zhigilei L. V. Metal ablation by picosecond laser pulses: A hybrid simulation. *Physical Review. B, Condensed Matter*, 2002, Vol. 66, No. 11, art. no. 115404.

[11] Zhigilei L. V., Lin Z. Atomistic modeling of short pulse laser ablation of metals: Connections between melting, spallation, and phase explosion. *Journal of Physical Chemistry*, 2009, Vol. 113, No. 27, pp. 11892–11906.

[12] Shepelev V., Petrov Yu., Inogamov N. et al. Attenuation and inflection of initially planar shock wave generated by femtosecond laser pulse. *Optics and Laser Technology*, 2022, Vol. 152, art. no. 108100.

[13] Dobrev V., Kolev Tz., Rieben R., Tomov V. Multi-material closure model for high-order finite element lagrangian hydrodynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2016, Vol. 82, No. 10, pp. 689–706.

Bulanov A. V., undergraduate, Institute for Computer-Aided Design Russian Academy of Sciences. e-mail: abulanov03@gmail.com

Shepelev V.V., PhD. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Associate Professor, Institute for Computer-Aided Design Russian Academy of Sciences.

Fortova S.V., Dr. Sc. (Phys.-Math.), Leading Researcher, Institute for Computer-Aided Design Russian Academy of Sciences. e-mail: sfortova@mail.ru