

# From Atomistic to Hydrodynamic Description of Shock Induced Ejecta from Metals

S. Dyachkov<sup>1,2,3</sup>, M. Egorova<sup>1</sup>, A. Parshikov<sup>1</sup>, V. Zhakhovsky<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> *Dukhov Research Institute of Automatics, Moscow, 127055, Russia*

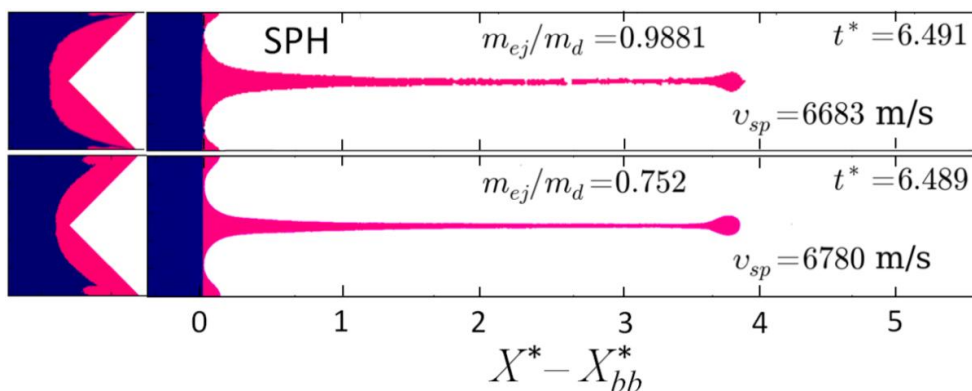
<sup>2</sup> *Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Moscow Region, 141700, Russia*

<sup>3</sup> *Landau Institute for Theoretical Physics, Chernogolovka, Moscow Region, 142432, Russia*  
serj.dyachkov@gmail.com

## Abstract

The machining of materials produces regular micrometer-sized surface corrugations. The microscopic cumulative jets can be generated from such surface under shock loading. It is too difficult to resolve space-time evolution of such jets in experimental conditions. The details of jet formation can be observed in molecular dynamics (MD) and smoothed particle hydrodynamics (SPH) simulations. We demonstrate that for strong enough shocks the scaling provides the similar jet velocity profiles and mass distributions obtained by both methods. But for weaker shocks and small surface perturbations the scaling does not work well which may lead to discrepancies between MD and SPH results.

Keywords: ejecta, shock waves, surface tension.



Material distributions in SPH and MD simulations are shown for the initial sample in the left insets at  $t=0$ , and for well-developed jets on the right parts of snapshots. Red color indicates material involved in the ejecta. Snapshots were aligned to the position of jet base (bubble boundary). Linear spatial velocities distribution complies with modern conception of cumulation effect. The fact that results of SPH and MD modeling are in good match for velocities and mass distributions validates an idea of jet similarity on micro- and macro-scales

УДК 539.87

# От атомистического к гидродинамическому описанию пыления поверхностей металлов при ударно-волновом нагружении

С. А. Дьячков<sup>1,2,3</sup>, М. С. Егорова<sup>1</sup>, А. Н. Паршиков<sup>1</sup>, В. В. Жаховский<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им.Н.Л. Духова, Россия, Москва, 127055, ул. Суцневская, 22*

<sup>2</sup> *Московский физико-технический институт (Государственный университет), Россия, Долгопрудный, 141700, Институтский пер., 9*

<sup>3</sup> *Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау, Россия, Черноголовка, 142432, просп. Академика Семенова, 1-А.  
serj.dyachkov@gmail.com*

## Аннотация

При механической обработке материалов на поверхности материалов остаются регулярные углубления микрометрового размера. Микроскопические кумулятивные струи могут возникать при выходе ударной волны на такую поверхность. Довольно сложно получить пространственно-временную развертку процесса образования таких струй в эксперименте. Тем не менее, детальная информация о формировании струй может быть получена с помощью методов молекулярной динамики (MD) и сглаженных частиц (SPH). Мы показали, что для довольно сильных ударных волн такое масштабирование приводит к аналогичным профилям скорости и распределениям массы в обоих методах. Но для слабых ударных волн и небольших амплитуд гофрировки поверхности масштабирование перестает хорошо работать и может приводить к различиям между результатами MD и SPH.

Ключевые слова: пыление поверхности, ударные волны, поверхностное натяжение.

## 1. Введение

Процесс пыления обычно рассматривается как предельный случай развития неустойчивости Рихтмайера – Мешкова [1, 2]. При прохождении ударной волны через возмущенную границу раздела двух сред А и В (рис. 1) струи вещества А проникают в вещество В. Число Атвуда на границе раздела металл-газ в предельном случае [3] полагается равным  $A = (\rho_B - \rho_A)/(\rho_B + \rho_A) \sim 1$ . Системой отсчёта в данном случае обычно считают положение невозмущенной границы раздела двух сред, называемой свободной поверхностью в рассматриваемом предельном случае.

Такие характеристики процесса пыления как скорости струй и пузырей могут быть измерены непосредственно в эксперименте методом лазерной велосиметрии [4], а также по снимкам, полученным методами протонной радиографии и рентгенографии [5, 6]. Модель Рихтмайера [1], которая позволяет описывать выход ударной волны на границу жидкостей или газов, является линейной, и может быть использована для описания процесса пыления только на ранних этапах эволюции струй. Поэтому для описания результатов экспериментов разрабатываются более сложные полуэмпирические модели, учитывающие нелинейность процесса.

При построении нелинейных моделей, подробный обзор которых дан в [7], в исходную линейную модель вводятся нелинейные параметры с неизвестными коэффициентами.

Коэффициенты могут быть определены на основе результатов экспериментов, а также по данным гидродинамического и молекулярно-динамического моделирования. В последнем случае скорости струй зачастую оказываются меньше экспериментальных, и одна из целей данной работы выявить причины такого поведения моделируемых систем.

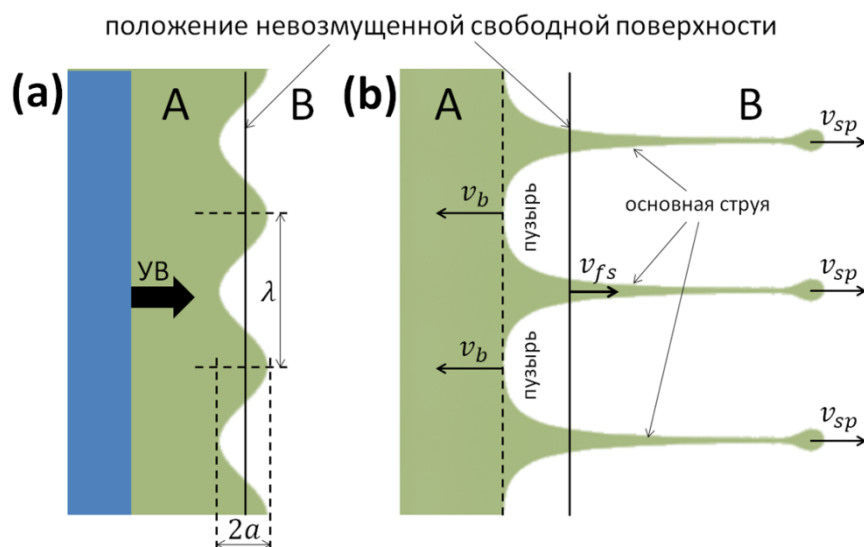


Рис. 1. Схема процесса пыления в терминах неустойчивости Рихтмайера-Мешкова. Граница между средами А и В имеет регулярное возмущение с длиной волны  $\lambda$  и амплитудой (а). Ударная волна подходит к границе раздела и создает струи из углублений (б) при переходе через границу. Положение невозмущенной свободной поверхности, рассчитанное для образца с плоской свободной границей, используется как плоскость, отделяющая струи и пузыри

Широко обсуждается также задача распада струй на отдельные фрагменты, а также определение распределения фрагментов по размерам и массам. В гидродинамическом моделировании параметры таких фрагментов зависят от используемой модели разрушения [8]. В атомистическом моделировании [9] характеристики вещества полностью определяются межатомным потенциалом взаимодействия, поэтому фрагментация струй происходит естественным образом. Однако в настоящее время линейный размер MD образца ограничен величиной 1 мкм, что определяется доступными вычислительными ресурсами. На таких масштабах существенное влияние на процесс фрагментации начинает оказывать поверхностное натяжение и прочность материала при высоких скоростях деформации. В связи с этим, результаты MD расчётов не удаётся напрямую масштабировать с нанометровых размеров на микрометровые, используемые в эксперименте. Параметры задачи, определяющие возможность такого масштабирования также выявляются в данной работе.

Пыление поверхности металла при ударно-волновом воздействии сопровождается сильной деформацией материала, вовлеченного в образование струи. Это приводит к большим скоростям деформации, фазовым переходам и образованию пространственных неоднородностей в распределении массы. Эти особенности должны учитываться при выборе эффективного метода моделирования. В данной работе гидродинамическое моделирование проводится лагранжевым бессеточным методом SPH [10, 11]. Преимущества метода при моделировании гетерогенных сред и задач кумуляции продемонстрированы в [12, 13]. Для атомистического моделирования используется параллельный MD код (MD-MPD<sup>3</sup> [14]) с автоматической балансировкой, основанный на динамической декомпозиции моделируемого образца на полигоны Вороного.

MD и SPH моделирование пыления поверхности проводилось для образцов из олова с параметрами, близкими к используемым в экспериментах [4], а также образцов из меди с пилообразной гофрировкой в случае сильных ударных волн. Гидродинамическое подобие в

атомистическом моделировании имеет место при использовании достаточного большого количества атомов. Скорости струй и распределение выброшенной массы вдоль струи рассматриваются как основные характеристики процесса пыления, сравнение которых в MD и SPH позволит определить возможности масштабирования результатов атомистического моделирования на экспериментальные. Для согласованного сравнения SPH и MD результаты параметры уравнения состояния, используемого для SPH моделирования в форме Ми – Грюнайзена с ударной адиабатой вида  $U_s = C_a + S_a U_p$ , определяются по данным MD-моделирования олова и меди (табл. 1).

Таблица 1

Физико-механические характеристики олова и меди

Материал	Олово	Медь
Плотность $\rho_0$ , кг/м <sup>3</sup>	7206	8960
Параметр Грюнайзена $\gamma_s$	1	2.14
Коэффициент ударной адиабаты $S_a$	1.548	1.443
Коэффициент ударной адиабаты $C_a$	2.366	3.8185
Изотермический модуль объемного сжатия $K$ , ГПа	58	151.3
Предел текучести $Y_0$ , МПа	9	230

## 2. Пыление меди. Сравнительное SPH и MD моделирование.

В моделировании использовались медные образцы, гофрированными выемками треугольного профиля. Размеры образцов выбирались с идентичными пропорциями: в молекулярно-динамических расчётах  $x \times y \times z = l \times \lambda = 300 \times 100 \times 16$  нм ( $\sim 40$  млн. атомов), в SPH-расчётах  $x \times y = l \times \lambda = 300 \times 100$  мкм ( $\sim 10^5$  частиц). При этом угол  $\alpha$  (рис. 2) составлял  $90^\circ$ . Физико-механические характеристики меди (см. табл. 1) были получены по данным молекулярно-динамического моделирования и использовались при расчётах методом SPH.

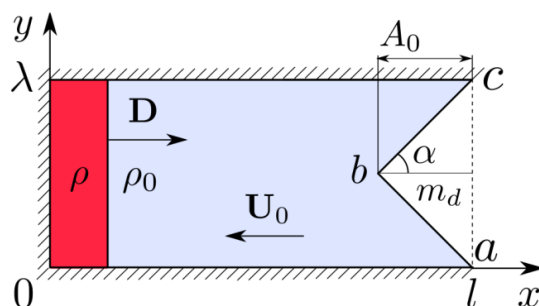


Рис. 2. Постановка задачи пыления поверхности медного образца с пилообразной гофрировкой. Образец налетает справа со скоростью  $U_0$  на жесткую стенку (потенциальный барьер в MD). При этом возникает ударная волна и распространяется со скоростью  $D$ .  $\rho$  – плотность вещества за фронтом УВ;  $m_d$  – масса вещества, удаленного при обработке;  $A_0$  – глубина выемки;  $\alpha$  – угол раствора выемки;  $\lambda$  – длина волны гофрировки

После соударения с жесткой стенкой (потенциальным барьером) со скоростью  $U_0$  в образце возникает ударная волна и распространяется по направлению к гофрированной поверхности. После достижения поверхности из углубления на поверхности начинает развиваться струя. Характеристики струи определяются амплитудой УВ, параметрами гофрировки и характеристиками материала.

На рис. 3 приведены результаты моделирования пыления меди на один момент безразмерного времени  $t^* = tC_s/\lambda$ , где  $C_s$  – скорость звука в меди. В этой серии расчётов используются плавающие ударные волны, получаемые для трех скоростей  $U_0$  удара образца о стенку: 1000 м/с, 2000 м/с и 3000 м/с. Результирующие струи, таким образом, представляют собой жидкий расплавленный материал образца. На концах струй формируются капли, по обе стороны от основной струи возникают вторичные струи, образованные за счёт схождения волн, отраженных от треугольного выреза. Материал сформированной струи выделен цветом и определена область его залегания в исходном образце (слева на каждом рисунке).

Стоит заметить, что для слабой ударной волны (рис. 3а) струя в MD находится в худшем согласии с SPH. Это обусловлено прочностными свойствами материала на нанометровых масштабах. Выброшенная масса в MD в данном случае представляет собой только расплавленный материал, в то время как в эксперименте [4] наблюдаются пластические струи, которые хорошо воспроизводятся методом SPH.

Для сравнения распределения масс образцов с разными размерами используется нормировка массы струи на извлеченную массу [3]. Приведенные массы  $m^* = m_{ej}/m_d$  в MD и SPH заметно отличаются ( $m_{ej}$  – масса струи, а  $m_d$  – масса материала, удаленного с поверхности при обработке). На рис. 4 приведены профили распределения массы в струе от её головной части к основанию. Видно, что вдоль большей части струи массы струй совпадают, а различия имеют место лишь в основании струи. Этот различия может быть обусловлена наличием в MD поверхностного натяжения, которое изменяет форму основания, однако для этого требуется дополнительное исследование.

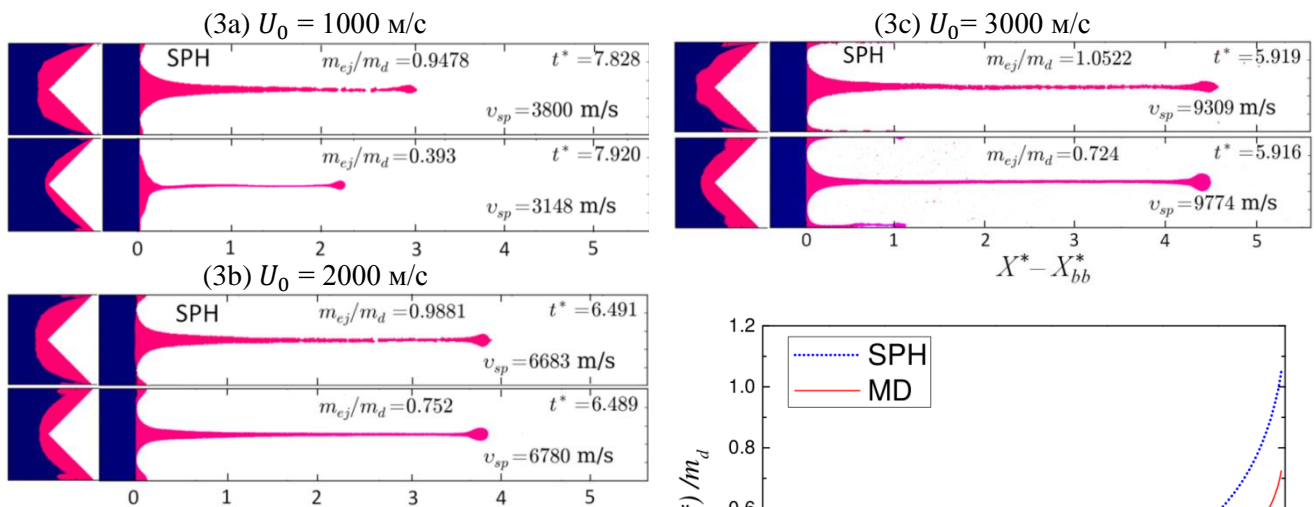


Рис. 3. Сравнительное моделирование пыления меди методами MD и SPH с ударными волнами разной амплитуды. Изображения сделаны в один момент безразмерного времени  $t^*$ . Слева на каждом рисунке изображено распределение массы, формирующей струю. В случаях (b) и (c) наблюдается наилучшее согласие: на конце струи образуется капля, по краям возникает небольшая вторая струя, скорости струй в хорошем согласии. Различия в выброшенной массе обусловлены разной толщиной струи в основании, масса которого также учитывается. В случае слабой ударной волны (а) различия более существенны и определяются прочностными свойствами материала на нанометровых масштабах в MD

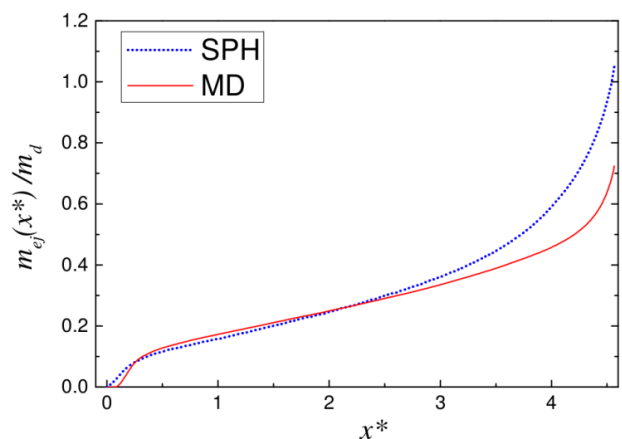


Рис. 4. Распределение массы вдоль струй, начиная от головной части к основанию для случая (3с). Видно, что массы большей части струи в MD и SPH находятся в хорошем согласии, однако основание струи в SPH толще, что может быть обусловлено отсутствием в модели поверхностного натяжения

Скорости струй, как видно из рис. 3b и 3c, находятся в хорошем согласии в случае сильных ударных волн.

### 3. Масштабирование скоростей струй в олове

Более детальный анализ влияния размера моделируемого образца на характеристики процесса пыления был проведен для образцов из олова, подобных используемым в экспериментах [4]. По данным, полученным методами лазерной велосиметрии и протонной радиографии были выявлены основные зависимости. Обнаружено, что скорости струй растут с увеличением амплитуды ударной волны и амплитуды гофрировки. Прочностные свойства материала также важны в процессе формирования струй. Например, пыления может не быть при ударно-волновом воздействии на медный образец, однако, те же параметры гофрировки и ударной волны приводят к пылению образца из олова.

При переходе к атомным масштабам свойства материала также сильно меняются. Здесь существенны два эффекта: поверхностное натяжение расплавленного материала и динамический предел текучести, растущий с увеличением скорости деформации. В моделировании олово плавится при разгрузке, в связи с чем выброшенный материал представляет собой жидкие струи. На ранних этапах формирования струй, когда поверхность претерпевает существенные изменения и искривляется, часть энергии струи уходит на работу против сил поверхностного натяжения, что приводит в дальнейшем к падению ее скорости. В атомистическом моделировании кривизна поверхности при кумуляции на 3 порядка больше, чем в экспериментальной постановке, поэтому влиянием сил поверхностного натяжения не удается пренебречь [15]. Однако, увеличивая размер образца, можно добиться требуемого гидродинамического подобия.

Для демонстрации влияния масштабирования MD образца на характеристики струй были проведены несколько серий расчётов с размерами  $3\lambda \times \lambda \times 15 \text{ нм}^3$  в периодических граничных условиях по осям Y и Z. При этом ширина образца вдоль оси Y есть длина волны гофрировки, которая варьировалась в следующем диапазоне:  $\lambda = 50, 100, 150$  и  $200 \text{ нм}$ . Амплитуды гофрировки  $a$  пропорционально уменьшены, чтобы соответствовать экспериментальным значениям  $ak = 2\pi a/\lambda = \{0.12, 0.35, 0.75, 1.5\}$  для амплитуды ударной волны  $P = 22 \text{ ГПа}$ , а также  $ak = \{0.25, 0.5, 1.0, 2.0\}$  для  $P = 27 \text{ ГПа}$ . Перед ударным сжатием образец приводится в состояние термодинамического равновесия в термостате Ланжевена. Затем, образец получает подходящую скорость по направлению к поршню, представляющему собой жесткий потенциальный барьер. После удара о поршень ударная волна начинает распространяться по направлению к гофрированной поверхности. Двумерное моделирование методом SPH с похожей геометрией проводится для экспериментальной длины  $\lambda = 550 \text{ мкм}$  и длиной образца  $3\lambda$ .

Увеличение скорости струи при масштабировании представлено на рис. 5 для случая  $ak = 0.75$  и  $P = 22 \text{ ГПа}$ . Видно, что скорости струй вырастают до  $500 \text{ м/с}$  при увеличении размера образца и имеется некоторая асимптотика, соответствующая гидродинамическому режиму. Однако она не достигается даже для довольно большого MD-образца с размером  $\lambda = 200 \text{ нм}$ .

На рис. 6 представлены скорости струй для всех исследуемых образцов в MD и SPH в сравнении с экспериментами [4]. Видно, что для больших MD-образцов согласие между MD и SPH становится хорошим во всех случаях. Тем не менее, результаты моделирования отличаются от экспериментальных. К уменьшению скоростей струй также могут приводить вязкие эффекты, обсуждаемые в [7]. Кроме того, форма реальной гофрированной поверхности в экспериментальных условиях может иметь дополнительные неоднородности, приводящие к возникновению фрагментов пыли с большими скоростями.

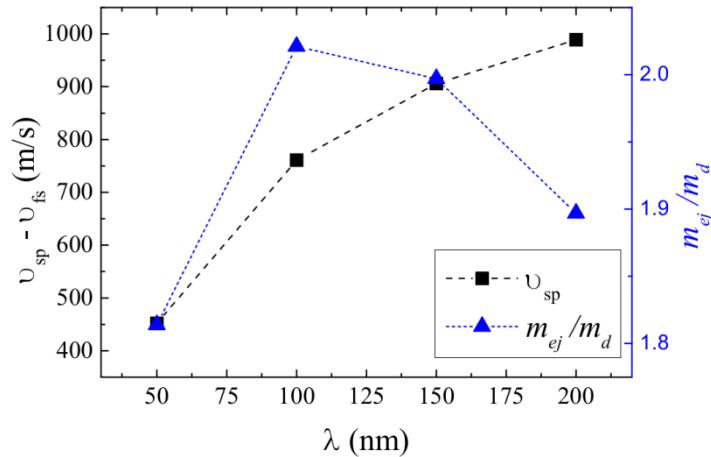


Рис. 5. Скорости струй растут с увеличением размера MD-образца из олова с параметрами  $ak = 0.75$ ,  $P = 22$  ГПа. Влияние поверхностного натяжения приводит к падению скорости до 600 м/с, однако масса струи меняется незначительно

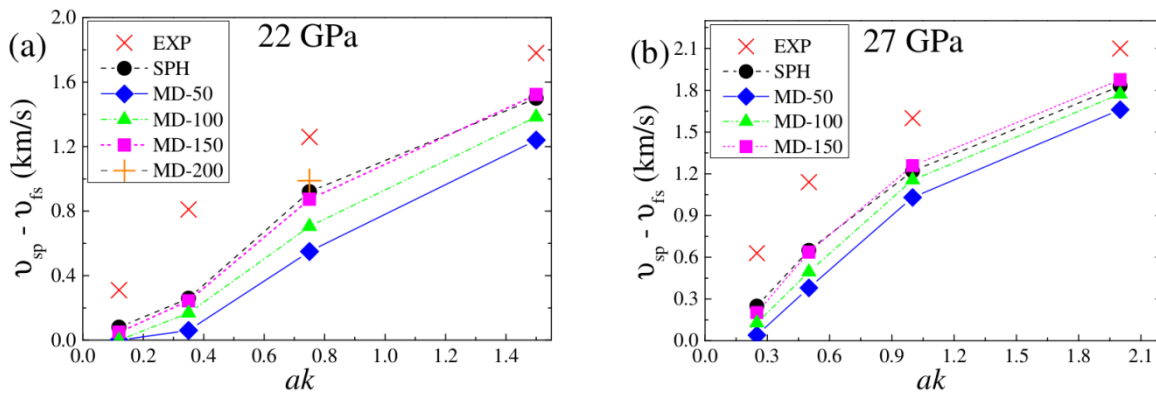


Рис. 6. Моделирование (данная работа) и экспериментальные значения [9] скоростей струй в образцах из олова как функция амплитуды гофрировки для ударных волн с амплитудами  $P=22$  ГПа (a) и  $P=27$  ГПа (b). MD-образцы имеют разную ширину, равную длине волны возмущения  $\lambda$  от 50 до 200 нм. Очень хорошее согласие между MD и SPH достигается для  $\lambda=150$  нм. Однако, различие с экспериментом остаётся, что может быть обусловлено вязкой диссипацией энергии в ходе формирования струи при высоких скоростях деформации [4]

#### 4. Распределение массы в олове

Другая важная характеристика процесса пыления это выброшенная масса и её распределение вдоль струи. Довольно сложно определить выброшенную массу на ранних стадиях образования струи. В данной работе масса струи вычисляется от границы пузыря до головной части струи. Такое определение даёт наиболее устойчивое значение массы по сравнению с другими способами определения. Например, выброшенная масса, вычисленная от положения свободной границы, показанной на рис. 1, может сильно изменяться в результате небольших флуктуаций положения этой границы, потому что в этом месте основание струи довольно широкое.

Рисунок 7 показывает, что нормированные массы  $m^* = m_{ej}/m_d$  в MD и SPH моделирования находятся в хорошем согласии для ударных волн с большей амплитудой ударных волн и гофрировки поверхности. Стоит отметить, что размер образца незначительно влияет на нормированную массу струй в MD моделировании (см. рис. 5). Для больших образцов струи становятся тоньше и длиннее, а для меньших толще и короче, но нормированная масса практически не изменяется.

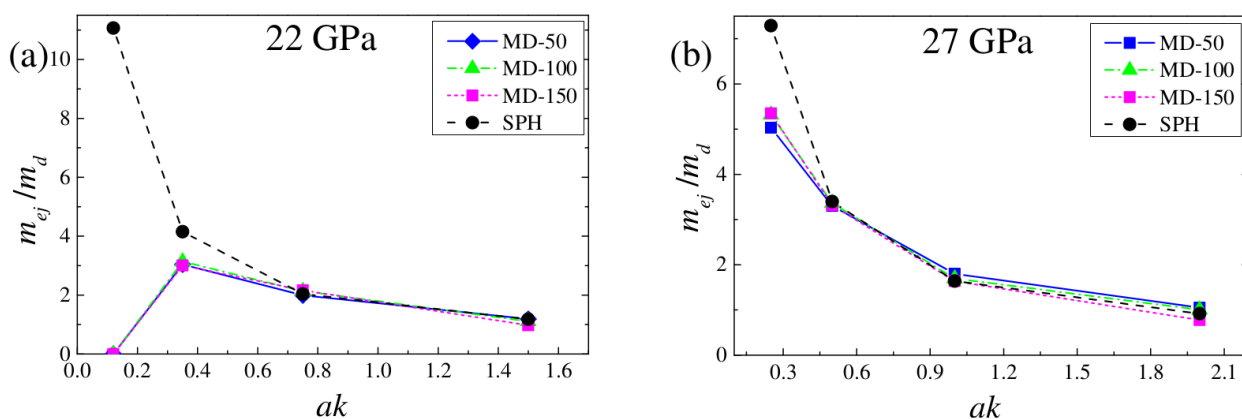


Рис. 7. Нормированная масса струй  $m^* = m_{ej}/m_d$ , рассчитанная для образцов из олова при амплитуде ударных волн 22 ГПа (а) и 27 ГПа (б), как функция амплитуды гофрировки в MD и SPH моделировании. Размеры MD-образцов представлены для различных длин волн гофрировки от 50 до 150 нм. Очень хорошее согласие между MD и SPH достигается для больших амплитуд гофрировки и более интенсивных ударных волн. Размеры MD-образцов практически не влияют на количество выброшенной массы

Чтобы восстановить распределение выброшенной массы внутри исходного образца, все атомы вблизи гофрированной поверхности помечаются с уникальными номерами и отслеживаются в процессе формирования струи, похожим образом как в работе [16]. В момент времени, когда масса струи перестает расти, помеченные атомы находятся в разных местах вдоль струи. Используя их положения для раскраски, как показано на рис. 8, мы можем построить распределение атомов в исходном образце. Мы обнаружили, что такое распределение представляет собой слоистую структуру. Моделирование показывает, что материал втекает в струю слой за слоем в процессе формирования струи.

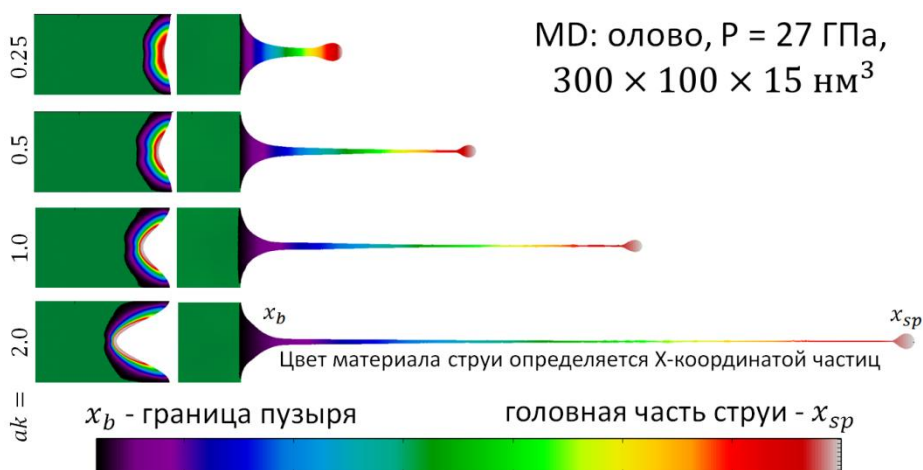


Рис. 8. Распределение массы струи в образце из олова с длиной волны  $\lambda = 100$  нм и различных значениях  $ak$ , сформированных при ударно-волновом нагружении с амплитудой  $P = 27$  ГПа. Материал струи помечен цветами в соответствии с положением атомов в сформированной струе, показанной на правом рисунке. Выброшенная масса имеет слоистую структуру в исходном образце, как показано на рисунках слева

## 5. Заключение

Сравнительное моделирование процесса пыления поверхности металлов методами молекулярной динамики и сглаженных частиц показывает хорошее масштабирование результатов при переходе от нанометровых к микрометровым размерам образцов. Однако MD моделирование олова показывает, что скорости жидких струй могут быть значительно



уменьшены поверхностным натяжением в процессе формирования струи. Увеличение размера моделируемых образцов, таким образом, позволяет значительно улучшить гидродинамическое подобие. При этом достигается хорошее согласие между MD и SPH, но различия с экспериментом [4] всё еще остаются, возможно, по причине вязкой диссипации энергии при высоких скоростях деформации [7].

Мы показали, что нормированная масса струй практически не зависит от размера образца в MD моделировании и хорошо согласуется с данными SPH. Обнаружено также, что распределение выброшенной массы в исходном образце имеет слоистую структуру. В процессе пыления последующие слои друг за другом вовлекаются в формирующуюся струю.

## Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект № 14-19-01599).

## Литература

1. Richtmyer R.D., Taylor instability in shock acceleration of compressible fluids // Commun. Pure Appl. Math. 13, 297–319 (1960).
2. Meshkov E.E., Instability of the interface of two gases accelerated by a shock wave // Sov. Fluid Dynamics 4, 101–105 (1969).
3. Zellner M.B. et al, Probing the underlying physics of ejecta production from shocked Sn samples // J. Appl. Phys. 103, p. 083521 (2008).
4. Buttler W.T. et al, Unstable Richtmyer – Meshkov growth of solid and liquid metals in vacuum // J. Fluid Mech. 703, 60–84 (2012).
5. Bazarov Y.B., Kuratov S.E., Meshkov D.E., Meshkov E.E., Ol'khov O.V., Sedov S.Y., Sivolgin V.S., Analysis of hydrodynamic instability growth in a 2D flow // Physica Scripta, Vol. 2010, No. 142, p. 014018, 2010.
6. Igonin V.V., Krasovsky G.B., Kuratov S.E., Lebedev A.I., Lebedeva M.O., Meshkov E.E., Myshkina I.Yu., Ol'khov O.V., Polovnikov A.A., Polovnikov E.A., Specific features of Richtmyer – Meshkov instability growth with 2D and 3D initial perturbation geometry // Physica Scripta, Vol. 2010, No. 142, p. 014019, 2010.
7. Dimonte G., Terrones G., Cherne F.J., and Ramaprabhu P., Ejecta source model based on the nonlinear Richtmyer-Meshkov instability // J. Appl. Phys. 113, p. 024905 (2013).
8. Михайлов А.Л., Огородников В.А., Сасик В.С. и др. Экспериментально-расчетное моделирование процесса выброса частиц с ударной нагруженной поверхности // ЖЭТФ, Т. 145, вып. 5, С. 892–905 (2014).
9. Durand O. and Soulard L., Power law and exponential ejecta size distributions from the dynamic fragmentation of shock-loaded Cu and Sn metals under melt conditions // J. Appl. Phys. 114, p. 194902 (2013).
10. Parshikov A.N., Medin S.A., Loukashenko I.I., and Milekhin V.A., Improvements in SPH Method by means of Interparticle Contact Algorithm and Analysis of Perforation Tests at Moderate Projectile Velocities // Int. J. Imp. Eng. 24, 779–796 (2000).
11. Parshikov A.N. and Medin S.A., Smoothed Particle Hydrodynamics Using Interparticle Contact Algorithms // J. Comp. Phys. 180, 358–382 (2002).
12. Паршиков А.Н., Лозицкий И.М. Численное моделирование кумулятивного эффекта в микроканале взрывчатого вещества//Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2011. Т. 11. 6с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2011-11/articles/180/>
13. Медин С.А., Паршиков А.Н. Численное моделирование структуры ударных волн в гетерогенных двухкомпонентных средах//Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2008. Т. 7. 7с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2008-7/articles/448/>
14. Zhakhovskii V.V., A new dynamical domain decomposition method for parallel molecular dynamics simulation // IEEE Proc. CCGrid 2005 2, 848–854 (2006).

15. Dyachkov S.A., Parshikov A.N., and Zhakhovsky V.V., Shock-produced ejecta from Tin: comparative study by molecular dynamics and smoothed particle hydrodynamics methods // J. Phys.: Conference Series, 653, p. 012043 (2015).
16. Jian-Li Shao, Pei Wang, An-Min He, Su-Qing Duan, and Cheng-Sen Qin, Atomistic simulations of shock-induced microjet from a grooved aluminium surface // J. Appl. Phys. 113, p. 153501 (2013).

Статья поступила в редакцию 20 ноября 2015 г.