

УДК: 51-72

## **Использование программного комплекса Turbulence Problem Solver (TPS) для численного моделирования взаимодействия лазерного излучения с металлами**

**В. В. Шепелев, С. В. Фортова, Е. И. Опарина**

Институт автоматизации проектирования РАН,  
Россия, 123056, г. Москва, ул. 2-я Брестская, д. 19/18

E-mail: vadim.aries@gmail.com

*Получено 22.05.2018, после доработки — 18.09.2018.*

*Принято к публикации 21.09.2018.*

Работа посвящена использованию программного пакета Turbulence Problem Solver (TPS) для численного моделирования широкого спектра лазерных задач. Возможности пакета продемонстрированы на примере численного моделирования взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с металлическими пленками. Разработанный авторами программный пакет TPS предназначен для численного решения гиперболических систем дифференциальных уравнений на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью. Пакет представляет собой современный и расширяемый программный продукт. Архитектура пакета дает исследователю возможность моделировать различные физические процессы единообразно, с помощью различных численных методик и программных блоков, содержащих специфические для каждой задачи начальные условия, граничные условия и источники компоненты. Пакет предоставляет пользователю возможность самостоятельно расширять функциональность пакета, добавляя новые классы задач, вычислительных методов, начальных и граничных условий, а также уравнений состояния вещества. Реализованные в программном пакете численные методики тестировались на тестовых задачах в одномерной, двумерной и трехмерной геометрии, в состав которых вошли задачи Римана о распаде произвольного разрыва с различными конфигурациями точного решения.

Тонкие пленки на подложках — важный класс мишеней для наномодификации поверхностей в плазмонике или сенсорных приложениях. Этой тематике посвящено множество статей. Большинство из них, однако, концентрируются на динамике самой пленки, уделяя мало внимания подложке и рассматривая ее просто как объект, поглощающий первую волну сжатия и не влияющий на возникающие вследствие облучения поверхностные структуры. В работе подробно описан вычислительный эксперимент по численному моделированию взаимодействия единичного ультракороткого лазерного импульса с золотой пленкой, напыленной на толстую стеклянную подложку. Использовалась равномерная прямоугольная сетка и численный метод Годунова первого порядка точности. Представленные результаты расчетов позволили подтвердить теорию об ударно-волновом механизме образования отверстий в металле при фемтосекундной лазерной абляции для случая тонкой золотой пленки толщиной около 50 нм на толстой стеклянной подложке.

Ключевые слова: пакет прикладных программ, уравнения газовой динамики, фемтосекундные лазеры, уравнения состояния

UDC: 51-72

## **Application of Turbulence Problem Solver (TPS) software complex for numerical modeling of the interaction between laser radiation and metals**

**V. V. Shepelev, S. V. Fortova, E. I. Oparina**

Institute for Computer Aided Design of RAS,  
19/18 Vtoraya Brestskaya st., Moscow, 123056, Russia

E-mail: vadim.aries@gmail.com

*Received 22.05.2018, after completion — 18.09.2018.*

*Accepted for publication 21.09.2018.*

The work is dedicated to the use of the software package Turbulence Problem Solver (TPS) for numerical simulation of a wide range of laser problems. The capabilities of the package are demonstrated by the example of numerical simulation of the interaction of femtosecond laser pulses with thin metal bonds. The software package TPS developed by the authors is intended for numerical solution of hyperbolic systems of differential equations on multiprocessor computing systems with distributed memory. The package is a modern and expandable software product. The architecture of the package gives the researcher the opportunity to model different physical processes in a uniform way, using different numerical methods and program blocks containing specific initial conditions, boundary conditions and source terms for each problem. The package provides the opportunity to expand the functionality of the package by adding new classes of problems, computational methods, initial and boundary conditions, as well as equations of state of matter. The numerical methods implemented in the software package were tested on test problems in one-dimensional, two-dimensional and three-dimensional geometry, which included Riemann's problems on the decay of an arbitrary discontinuity with different configurations of the exact solution.

Thin films on substrates are an important class of targets for nanomodification of surfaces in plasmonics or sensor applications. Many articles are devoted to this subject. Most of them, however, focus on the dynamics of the film itself, paying little attention to the substrate, considering it simply as an object that absorbs the first compression wave and does not affect the surface structures that arise as a result of irradiation. The paper describes in detail a computational experiment on the numerical simulation of the interaction of a single ultrashort laser pulse with a gold film deposited on a thick glass substrate. The uniform rectangular grid and the first-order Godunov numerical method were used. The presented results of calculations allowed to confirm the theory of the shock-wave mechanism of holes formation in the metal under femtosecond laser action for the case of a thin gold film with a thickness of about 50 nm on a thick glass substrate.

**Keywords:** application software package, gas dynamics equations, femtosecond lasers, equations of state

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2018, vol. 10, no. 5, pp. 619–630 (Russian).

## 1. Введение

Стремительное развитие современных вычислительных технологий дает возможность существенно увеличить скорость моделирования требуемого процесса, что позволяет предсказывать различные сценарии развития рассматриваемого явления в зависимости от исходных данных, а также оптимизировать разработки новых конструкций. В настоящее время для исследования процессов в области течения жидких и газообразных сред разработано большое количество коммерческих пакетов программ (ANSYS CFX, COSMOS FLOWWORKS, FLOW 3D, FAST FLOW, а также российские пакеты FlowVision и ЛОГОС) [*Parallels*; *Wikipedia*]. Численное моделирование, основанное на использовании данных программных продуктов, применяется в основном в коммерческих целях в аэрокосмической, автомобильной, энергетической и нефтяной отраслях. Большинство этих комплексов позволяют качественно решать задачи обтекания и перемешивания, но при этом не предоставляют пользователю возможность вносить поправки и усовершенствования в программный код. Таким образом, указанные пакеты программ не являются расширяемыми. Часто эти программные продукты используют ограниченное количество численных методов, что не позволяет пользователю сравнить возможности различных вычислительных методик и сделать выбор в пользу наиболее подходящей для исследуемой задачи. При проведении фундаментальных исследований требуется более гибкий подход к созданию вычислительного комплекса, позволяющий, например, вносить изменения в разностные схемы и усовершенствовать модели, описывающие конкретные явления. Известно, что не существует универсальной численной методики для расчета всех встречающихся в природе течений жидкости и газа. Для исследования каждого конкретного явления обычно ищется оптимальный численный метод.

Опираясь на тот факт, что для широкого круга задач механики сплошных сред система исследуемых уравнений в частных производных оказывается гиперболической [Ландау, 1953; Лойцянский, 1978], авторы создали пакет прикладных программ Turbulence Problem Solver (TPS) [Фортова, 2013], в котором реализован обобщенный подход к построению вычислительных программ. Основными представителями уравнений гиперболического типа являются: уравнения гидро- и аэродинамики, акустики, упругости, магнитной гидродинамики, уравнения «мелкой воды» и другие. Характерное свойство гиперболичности заключается в возможности расщепить локально в каждой точке пространства систему  $N$ -го порядка на  $N$  независимых уравнений в характеристических переменных [Ковеня, 1981]. Данное свойство системы позволило авторам объединить некоторые задачи газодинамики для единообразного численного решения в рамках рассматриваемого пакета. Для решения задач, описывающих различные физические процессы, пакет предоставляет пользователю несколько численных схем и программные блоки, содержащие специфические для задачи начальные, граничные условия и массовые силы. Кроме того, пакет является расширяемым программным продуктом и позволяет пользователю внедрять свои разработки в программный код.

Программный пакет TPS представляет собой программный каркас, то есть набор функций, интерфейсов и классов, позволяющий реализовать нужный для конкретной задачи вычислительный код. В пакете используется стандартный интерфейс обмена сообщениями MPI, что позволяет использовать его на разных платформах, под управлением различных операционных систем, не модифицируя при этом программный код, написанный на языке C++.

Пакет тестировался на платформах Intel, Param, MBC-1000 с ОС Windows, Solaris, Linux. Представленная методика имеет государственную регистрацию программы для ЭВМ № 2013618035 и достаточно подробно описана авторами в статье [Фортова, 2013].

Цель данной работы — продемонстрировать возможности программного продукта TPS применительно к моделированию взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с тонкими металлическими пленками.

## 2. Вычислительная модель и код

Кратко остановимся на описании методики, используемой при создании пакета TPS.

Задачи, описываемые уравнениями гиперболического типа, могут быть обобщены и формализованы для единообразного численного решения следующим образом. Запишем систему уравнений в частных производных гиперболического типа:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A \frac{\partial U}{\partial x} + B \frac{\partial U}{\partial y} + C \frac{\partial U}{\partial z} = S, \quad (1)$$

где  $U$  — вектор основных расчетных переменных;  $x, y, z$  — любые независимые координаты в области;  $A, B, C$  — матрицы Якоби функций, определяющих потоки  $U$  по каждому координатному направлению. К данной системе логично применить метод расщепления по физическим процессам и пространственным переменным [Ковеня, 1981]. Метод заключается в последовательном вычислении влияния каждого из потоков при условии, что все остальные потоки отсутствуют или заморожены. При этом решение системы гиперболических уравнений сводится при переходе к характеристическим переменным к решению нескольких уравнений переноса. Предположим, необходимо решить систему уравнений  $\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0$ . Система может быть

записана в виде  $\frac{\partial U}{\partial t} + A \frac{\partial U}{\partial x} = 0$ , где  $A = \frac{\partial F}{\partial U}$  — матрица Якоби. Зафиксировав матрицу  $A$  в каждой точке и решая в каждой точке систему линейных уравнений с частными производными, мы получим аппроксимацию исходного уравнения. Поскольку система уравнений является гиперболической, то матрицу  $A$  заменой координат можно привести к диагональному виду. Аналогичная процедура применяется к матрицам  $B$  и  $C$ . Таким образом, система распадается на  $N$  линейных уравнений переноса, каждое из которых соответствует своей характеристике. Уравнение переноса  $f_t + \lambda f_x = 0$  может решаться различными методами, в числе которых присутствуют группа приближенных римановских методов [Roe, 1981] и группа гибридных методов [Магомедов, 1987]. Общим свойством всех рассматриваемых методов является то, что они могут быть записаны в консервативном виде, представляющем конечно-разностную аппроксимацию уравнения переноса:  $f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{\tau}{h}(\lambda f_{i+1/2} - \lambda f_{i-1/2})$ , где вычисление потока

$F_{i+1/2} = \lambda f_{i+1/2}$  зависит от метода. Шаг по времени  $\tau$  выбирается из условия Куранта  $\frac{\tau}{h}|\lambda| = C < 1$

равномерно по всем характеристикам. Далее для решения уравнения переноса могут использоваться различные численные схемы.

В рамках данной методики разработано несколько взаимозаменяемых солверов на основе приближенного римановского подхода (Roe2, Roe [Roe, 1986]; TVD2, Harten [Harten, 1983]; Uno3, Yang [Yang, 1991]; MUSCL-TVD2, van Leer [van Leer, 1979]), гибридного подхода (HYBRID2, сеточно-характеристическое обобщение гибридной схемы для уравнения переноса [Опарин, 2000]), а также метод крупных частиц (LPM [Белоцерковский, 1982]) и метод Мак-Кормака (МКМ [Флетчер, 1991]).

Для описания указанных выше солверов на языке программирования используется объектный подход [Буч, 1992]. При использовании данного подхода каждая часть методики (в том числе вид расщепления по пространственным переменным, выбор типа осреднения, энтропийная коррекция, конечно-разностная схема и др.) описывается отдельным программным классом. Это позволяет удобно комбинировать существующие программные блоки, описанные в виде классов, в необходимую именно для данного расчета программу.

Ключевым моментом является идея рассматривать солверы как абстрактные типы данных и, соответственно, построить дерево наследования классов, реализующих всевозможные солверы. Используя абстрактные типы данных, можно одинаково рассматривать и объединить

в рамках одной программы даже такие разные методы, как метод крупных частиц и какой-либо из сеточно-характеристических методов. Несмотря на то что данные методы имеют разные алгоритмы и разные наборы параметров, они являются реализациями одного абстрактного типа данных, представленного классом HMethod, и для других частей программы имеют один и тот же интерфейс.

Архитектура пакета схематично изображена на рис. 1. Главные из классов — HApplication, HProblem, HMethod и HState. HApplication отвечает за инициализацию/деинициализацию пакета и предоставляет метод calcLoop() — входную точку для выполнения вычислений. HProblem описывает физическую постановку задачи. Класс HMethod представляет численный метод для решения задачи моделирования. Сами данные хранятся в классе HState, агрегирующем поля компонент (объекты класса HField), представляющих решение в настоящий и предыдущий моменты времени, а также параметры, определяющие текущий момент времени (класс HMoment).

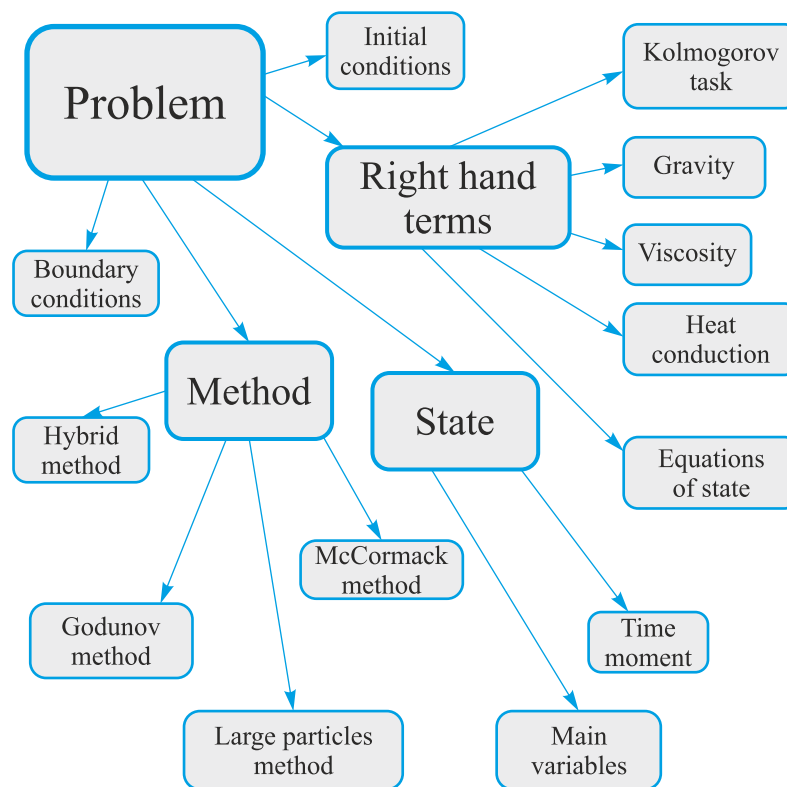


Рис. 1. Архитектура пакета программного комплекса TPS

Класс HProblem, описывающий физическую постановку задачи, включает следующие компоненты: координаты, размер сетки, количество расчетных компонент, параметры декомпозиции, начальные условия, граничные условия, вид уравнений и правую часть. Начальные условия чаще всего задаются пользователем, который для этого наследует абстрактный класс HInitialValues. Правую часть пользователь задает таким же образом сам, наследуя класс HRightHandTerms, либо использует предоставленные пакетом классы: HGravity, определяющий силу тяжести Земли, HViscosity, учитывающий вязкие члены, и HHeatTransfer, задающий теплопроводность, HGaussBeamAbsorbtion и HSquareAbsorbtion для поглощения соответственно гауссовых и прямоугольных лазерных импульсов. Вид уравнений задается через матрицы Якоби частных производных потоков по расчетным переменным. Для этого предоставляются три объекта класса HJacobiMatrix, вычисляющие матрицы. Пакетом также предоставляются стандартные типы граничных условий: непротекание (класс HWallBoundary), прилипание (класс HAdhesionBoundary), снос (класс HShiftBoundary), свободная граница (класс HFreeBoundary),

периодические (класс `HPeriodicBoundary`); но пользователь может и сам задавать новые типы граничных условий, наследуя абстрактный класс `HBoundaryType`. Координаты описываются базовым классом `HCoord` и бывают двух типов: генерируемые, которые можно взять из внешнего источника — наследники класса `HGeneratedCoord`, и вычисляемые, такие как полярные, сферические, разрежение сетки — наследники класса `HCalculatedCoord`.

Базовым классом для всех численных методов является абстрактный класс `HMethod`, имеющий виртуальный метод `calcStep()`, вызываемый на каждой временной итерации программы. В пакете реализовано несколько методов, использующих расщепление по пространственным переменным; для всех них используется единственная реализация класса `HMethod` — класс `HSpatialVariablesSplittingMethod`. Отдельно от этих методов стоит метод крупных частиц, использующий совершенно другой тип расщепления: на эйлеров и лагранжьев шаг. Данный метод представлен классом `HLargeParticlesMethod`, агрегирующим в себе два указанных метода для расчета на каждом этапе, описываемых классами `HEulerStep` и `HLagrangianStep`.

Процесс решения нелинейной системы законов сохранения построен так, что она на каждом шаге по времени на этапе расчета потоков линеаризуется. Поэтому главной составляющей частью большинства методов является конечно-разностный метод для решения линейного уравнения переноса, который определяется в классе `HSolver`. Данный класс представляет собой абстрактный класс с единственным методом `step()`, вычисляющим значение компонент на новом временном шаге в одной точке расчетной сетки. Большинство используемых схем формулируются в виде схем с расчетом потоков. Класс `HTwoFluxSolver` имеет виртуальные методы `calcLeftFlux()` и `calcRightFlux()` для расчета потоков слева и справа. Однако для консервативных схем более экономно производить в каждой точке расчет только одного потока, например справа, а поток слева брать из результатов расчета предыдущей ячейки. Указанный подход реализован в классе `HFluxSolver`. Данный класс имеет виртуальный метод `calcFlux()`, который определяется в классах, реализующих различные разностные схемы: `HBGKSolver`, `HHolodovSolver`, `HTVD2Solver`, `HUNO3Solver`, `HCO3Solver`, `HMUSCLSolver`, `HRoeSolver`.

Для уравнений состояния вещества выделено отдельное поддерево классов. От абстрактного базового класса `HEOS` унаследованы классы `HEOSIdeal`, `HEOSBin`, `HEOSMieGruneisen`, `HEOSTable`, реализующие соответственно уравнение состояния (УРС) идеального газа, двухчленное УРС, УРС Ми–Грюнайзена и табличные полуэмпирические УРС.

Следует отметить, что предложенная формализация задач и методов позволяет описывать новые задачи и методы их решения путем настройки универсальной методики на конкретные параметры. Также использование данного пакета позволяет сократить срок разработки новых программных приложений и эффективно использовать многопроцессорные вычислительные системы.

Все реализованные в пакете вычислительные методики тестировались на уже ставших стандартными тестовых задачах из [Того, 2009] в одномерной, двумерной и трехмерной геометрии. Эти тестовые задачи включают в себя ряд типовых задач о распаде произвольного разрыва в конфигурациях с двумя ударными волнами, двумя волнами разрежения, одной ударной волной и одной волной разрежения. Производилось также тестирование сеточной сходимости и измерение порядка сходимости методом Рунге.

Основной метод распараллеливания, используемый для задач математической физики и, в частности, численной гидродинамики, — декомпозиция расчетной области на подобласти, обрабатываемые различными процессорами. Такой метод удобен при распараллеливании программ для компьютеров с распределенной памятью, поскольку каждый процессор может производить вычисления в своей подобласти, находящейся в своей локальной памяти. Поскольку расчетная область чаще всего представляет собой в некоторой системе координат прямоугольник, параллелепипед или область, ограниченную отрезками, параллельными осям координат, наиболее удобным для реализации является разбиение на области, представляющие собой одинаковые прямоугольники/параллелепипеды. На рис. 2 показана одно-, двух- и трехмерная декомпозиция трехмерной области, т. е. разбиение на прямоугольные области соответственно

по одной, двум и трем координатам со схемой обмена данными, изображенной на рис. 3. В пакете реализована декомпозиция по трем пространственным переменным, приводящая к объему коммуникаций порядка  $3\sqrt[3]{N}$  вместо  $N$ , при декомпозиции по одной пространственной переменной. Это позволяет улучшить масштабируемость кода по числу процессоров.

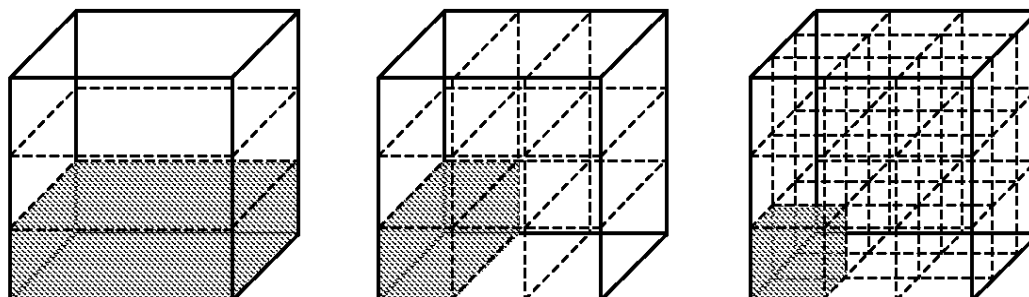


Рис. 2. Одно-, двух- и трехмерная декомпозиция трехмерной расчетной области

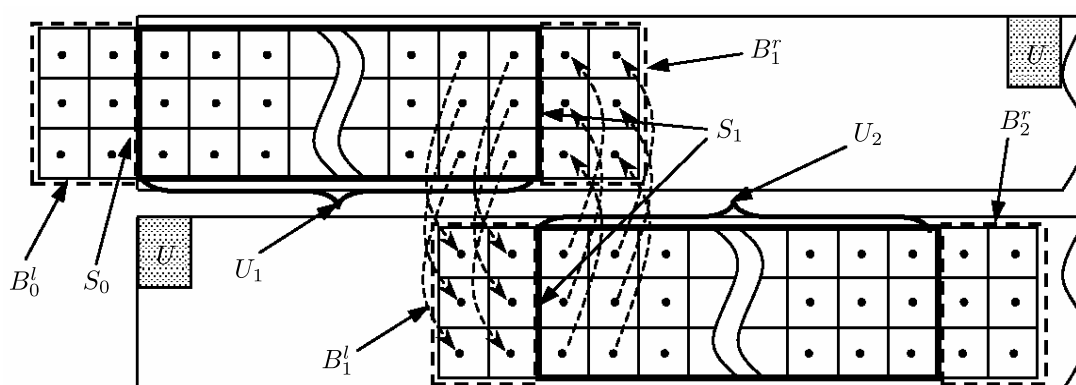


Рис. 3. Схема обмена данными

Тестирование производилось на задаче подъема приповерхностного термика в стратифицированной атмосфере. Задача неоднократно рассматривалась в литературе [Андрущенко, 1992; Конюхов, 1994], независимо были получены близкие результаты. Замеры производились на суперкомпьютере МВС-1000-М с 768 процессорами по среднему расчетному времени одной итерации. Была проведена серия замеров для одно-, двух- и трехмерной декомпозиции на сетке размером  $120^3$ . При расчете на 100 процессорах удалось достичь 60-кратного ускорения. Подробно расчетные характеристики и результаты моделирования изложены в [Белоцерковский, 2003]. Помимо приведенной задачи, с помощью пакета TPS успешно решались задачи о численном моделировании неустойчивости Рэля–Тейлора, соударения металлов, сдвигового слоя в трехмерной постановке и многие другие.

### 3. Постановка задачи и результаты численного моделирования

Работа посвящена актуальной физической задаче о качественном исследовании механизма образования отверстий при фемтосекундной лазерной абляции золотой пленки, напыленной на толстую стеклянную подложку [Shepelev, 2018]. В результате теоретической и экспериментальной работы сформулирована гипотеза о механизме образования отверстий при абляции. Представленная в работе газодинамическая модель явления опирается на представление пленки, подложки и вакуума в виде идеальной трехслойной среды. Рассмотрим подробно произведенный численный эксперимент в плоской двумерной геометрии.

Расчетная область, изображенная на рис. 4, представляет собой прямоугольник  $[-1200; 1050] \times [-1200; 1200]$  нанометров (нм). Для удобства описания численного эксперимента разобьем эту область на части. Будем полагать, что верхняя часть расчетной зоны заполнена средой с плотностью  $200 \text{ кг/м}^3$ , что соответствует слою вакуума в реальном эксперименте. Толщина зоны составляет 1000 нм, давление внутри области — 100 ГПа. Точкой отсчета для давления является величина, равная 100 ГПа. Давление, большее 100 ГПа, характеризует сжатие, а меньшее — растяжение среды. Такой подход был выбран для получения качественной картины эффекта и сложностей моделирования растягивающих напряжений в идеальной среде. Следующая часть расчетной зоны толщиной 50 нм соответствует слою золота с плотностью среды, соответствующей реальной плотности золота, —  $19\,300 \text{ кг/м}^3$ . Давление зависит от координаты  $x$  и рассчитывается исходя из возмущения температуры:  $T(x, y) = T_M + T_H \exp\left(-\frac{x^2}{R_L^2}\right)$ ,

где  $T_M = 43\,804 \text{ К}$ ,  $T_H = 400\,000 \text{ К}$ ,  $R_L = 250 \text{ нм}$ . Значения температур подобраны таким образом, чтобы максимум давления в центре слоя достигал 1000 ГПа, а минимум на границах равнялся 100 ГПа. Нижняя зона описывает слой стекла толщиной 1200 нм, плотностью  $2300 \text{ кг/м}^3$  и постоянным давлением 100 ГПа.

Процесс образования отверстий при фемтосекундной лазерной абляции золотой пленки, напыленной на толстую стеклянную подложку, развивается в течение 100 пикосекунд (пс).

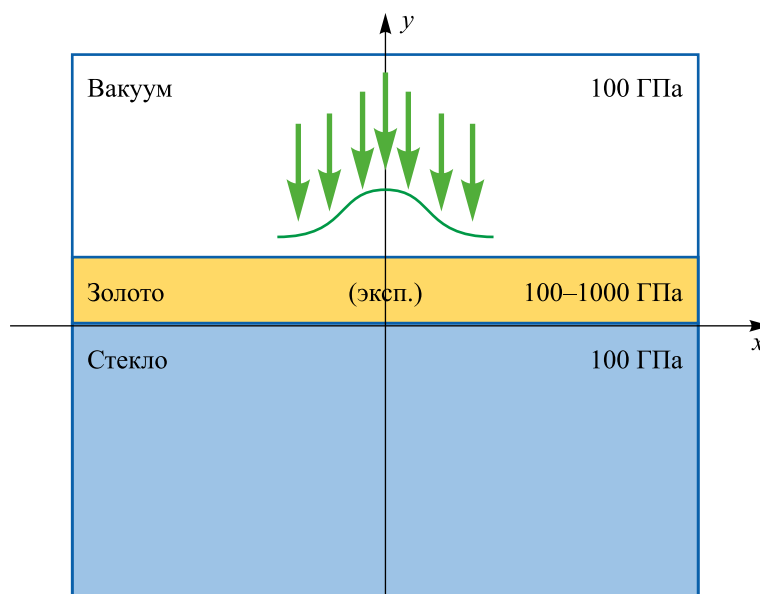


Рис. 4. Вычислительная область. Цветная версия рисунка доступна на сайте журнала

Для численного моделирования данного процесса используется известный метод Годунова первого порядка [Годунов, 1976], межсеточные потоки рассчитываются на основе точного решения задачи о распаде разрыва. Вычисления проводятся на равномерной прямоугольной сетке размерами  $480 \times 450$  ячеек. Значение числа CFL равно 0.5.

На рис. 5–10 показана эволюция профилей плотности и давления. В первые пикосекунды происходит распространение ударных волн от металла в вакуум (фиктивная волна, образовавшаяся из-за ненулевой плотности) и в стекло, а также «соединение» зоны металла волнами разрежения. Затем происходит сферизация ударной волны, распространяющейся из золота в стекло. В работе [Shepelev, 2018] показано, что именно краевой эффект от прохождения этой волны приводит к постепенному отрыву слоев золота от подложки и образованию отверстий.



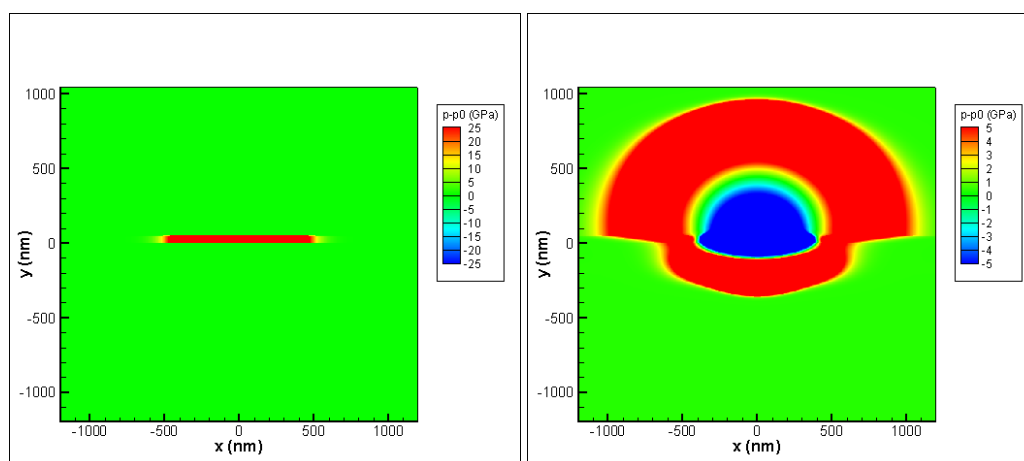


Рис. 5. Профили давления  $p-p_0$ ,  $p_0 = 100$  ГПа при  $t = 0$  (слева) и  $t = 20$  пс (справа).  $p$  — давление,  $p_0$  — «фоновое» давление. Давления, большие  $p_0$ , характеризуют сжатие вещества. Давления, меньшие  $p_0$ , — растяжение. Цветная версия рисунка доступна на сайте журнала

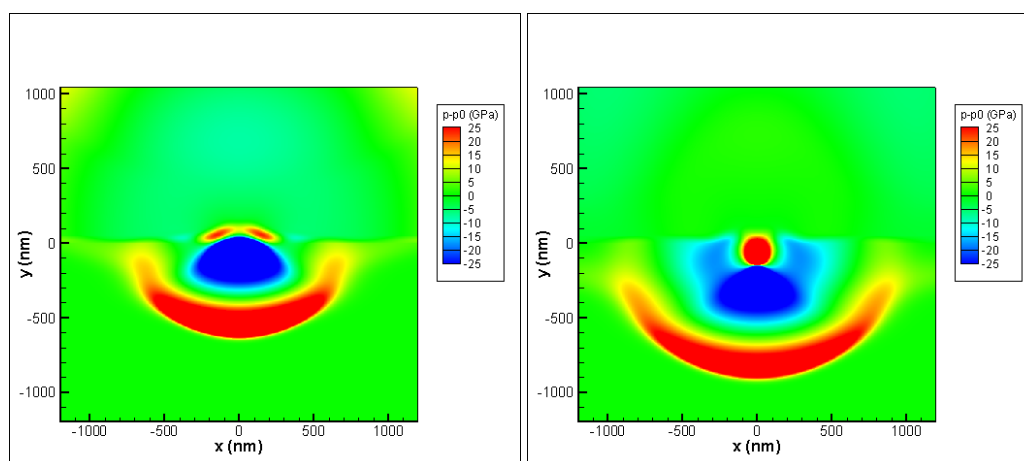


Рис. 6. Профили давления  $p-p_0$ ,  $p_0 = 100$  ГПа при  $t = 40$  пс (слева) и  $t = 60$  пс (справа).  $p$  — давление,  $p_0$  — «фоновое» давление. Давления, большие  $p_0$ , характеризуют сжатие вещества. Давления, меньшие  $p_0$ , — растяжение. Цветная версия рисунка доступна на сайте журнала

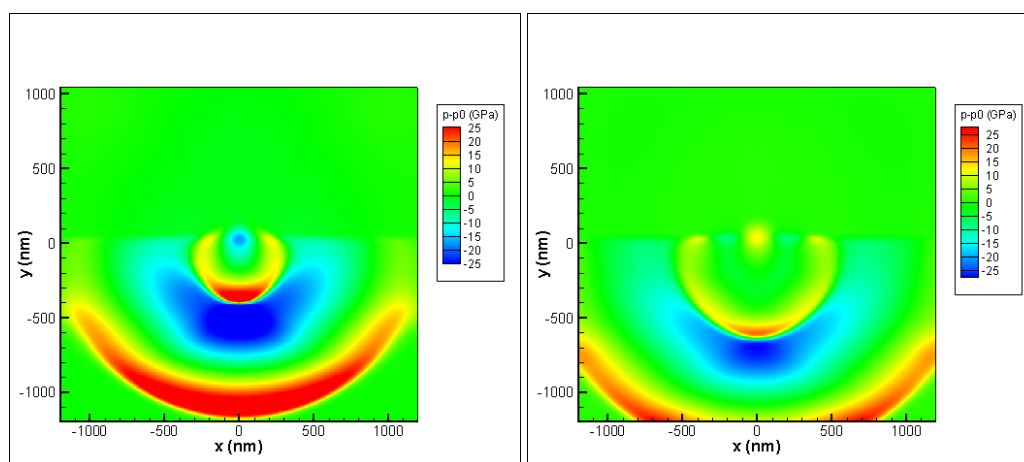


Рис. 7. Профили давления  $p-p_0$ ,  $p_0 = 100$  ГПа при  $t = 40$  пс (слева) и  $t = 60$  пс (справа).  $p$  — давление,  $p_0$  — «фоновое» давление. Давления, большие  $p_0$ , характеризуют сжатие вещества. Давления, меньшие  $p_0$ , — растяжение. Цветная версия рисунка доступна на сайте журнала

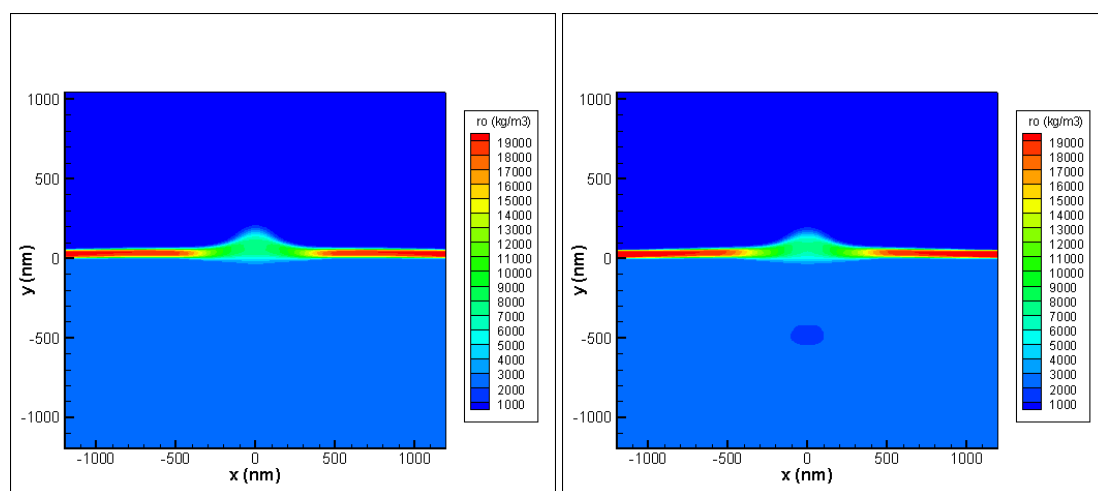


Рис. 8. Профили плотности (величина  $\rho_0$  на диаграмме) при  $t = 0$  (слева) и  $t = 20$  пс (справа). Цветная версия рисунка доступна на сайте журнала

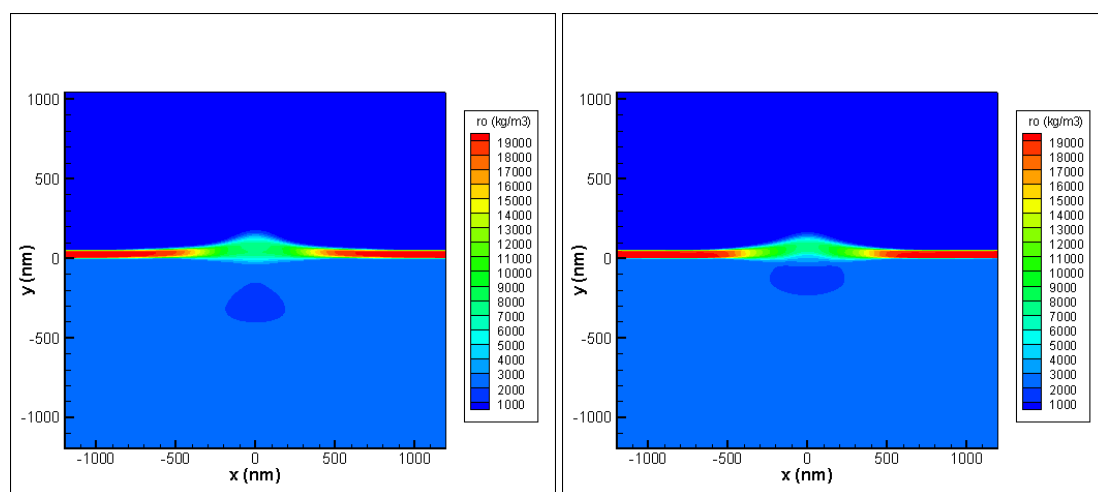


Рис. 9. Профили плотности (величина  $\rho_0$  на диаграмме) при  $t = 0$  (слева) и  $t = 20$  пс (справа). Цветная версия рисунка доступна на сайте журнала

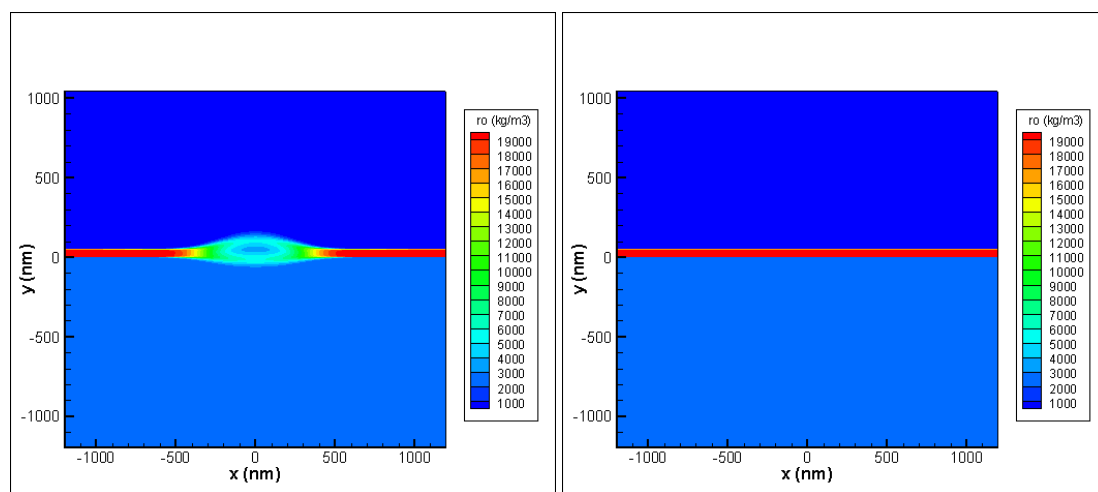


Рис. 10. Профили плотности (величина  $\rho_0$  на диаграмме) при  $t = 80$  пс (слева) и  $t = 100$  пс (справа). Цветная версия рисунка доступна на сайте журнала

## 4. Заключение

В работе описан программный пакет Turbulence Problem Solver (TPS). Представлены дополнения, внесенные в пакет, в том числе новые классы, добавленные в пакет для возможности работы с лазерными задачами. Проиллюстрировано применение пакета на примере численного эксперимента по реальной задаче качественного исследования механизма формирования отверстий при фемтосекундной лазерной абляции золотой пленки, напыленной на толстую стеклянную подложку.

Авторы благодарят Н. А. Иногамову за полезные обсуждения и помощь в разработке и верификации модели и кода.

## Список литературы (References)

- Андрущенко В. А., Горбунов А. А., Пасконов В. М., Чудов Л. А. Решение задачи о взаимодействии четырех приземных термиков на многопроцессорном комплексе ЕС 1037–ЕС 2706 // Матем. моделирование. — 1992. — Т. 4, № 3. — С. 40–52.
- Andrushchenko V. A., Gorbunov A. A., Paskonov V. M., Chudov L. A. Calculations for problem on four near-ground thermal vortexes interaction on multiprocessor complex EC 1037–EC 2706 // Matem. Mod. — 1992. — Vol. 4, No. 3. — P. 40–52 (in Russian).
- Белоцерковский О. М., Давыдов Ю. М. Метод крупных частиц в газовой динамике. — М.: Наука, 1982.
- Belotserkovskiy O. M., Davydov Yu. M. Metod krupnykh chastits v gazovoy dinamike [The method of large particles in gas dynamics]. — Moscow: Nauka, 1982 (in Russian).
- Белоцерковский О. М., Опарин А. М., Чечёткин В. М. Турбулентность. Новые подходы // Информатика: неограниченные возможности и возможные ограничения. — М.: Наука, 2003. — С. 103–112.
- Belotserkovskii O. M., Oparin A. M., Chechetkin V. M. Turbulence: New. Approaches. — Moscow: Nauka, 2002. — P. 103–112 (in Russian).
- Буч Г. Объектно-ориентированное проектирование с примерами применения / пер. с англ. — М.: Конкорд, 1992.
- Buch G. Ob'yektno-orientirovannoye proyektirovaniye s primerami primeneniya / per. s angl. [Object-oriented design with examples of applications]. — Moscow: Konkord, 1992 (in Russian).
- Годунов С. К., Забродин А. В., Яковлевич М. И., Крайко А. Н., Прокопов Г. Н. Численное решение многомерных задач газовой динамики. — М.: Наука, 1976. — С. 100–110.
- Godunov S. K., Zabrodin A. V., Yakovlevich M. I., Krayko A. N., Prokopov G. N. Chislennoye resheniye mnogomernykh zadach gazovoy dinamiki [Numerical solution of multidimensional problems of gas dynamics]. — Moscow: Nauka, 1976. — P. 100–110 (in Russian).
- Ковеня В. М., Яненко Н. Н. Метод расщепления в задачах газовой динамики. — Новосибирск: Наука, 1981.
- Kovenya V. M., Yanenko N. N. Metod rasshchepleniya v zadachakh gazovoy dinamiki [Splitting method in problems of gas dynamics]. — Novosibirsk: Nauka, 1981 (in Russian).
- Конюхов А. В., Мещеряков М. В., Утюжников С. В. Движение крупномасштабного турбулентного термика в стратифицированной атмосфере // ТВТ. — 1994. — Т. 32, № 2. — С. 236–241.
- Konukhov A. V., Meshcheryakov M. V., Utuzhnikov S. V. Motion of a large-scale turbulent thermal in a stratified atmosphere // High Temperature. — 1994. — Vol. 32, No. 2. — P. 224–228 (in Russian).
- Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика сплошных сред. — М.: Гостехтеориздат, 1953.
- Landau L. D., Lifshits E. M. Mekhanika sploshnykh sred [Mechanics of Continuous Media]. — Moscow: Gostekhteorizdat, 1953 (in Russian).
- Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. — М.: Наука, 1978.
- Loytsyanskiy L. G. Mekhanika zhidkosti i gaza [Mechanics of Fluids and Gas]. — Moscow: Nauka, 1978 (in Russian).

- Магомедов К. М., Холодов А. С.* Сеточно-характеристические численные методы. — М.: Наука, 1987.
- Magometov K. M., Kholodov A. S.* Setochno-kharakteristicheskiye chislennyye metody [Grid-characteristic numerical methods]. — Moscow: Nauka, 1987 (in Russian).
- Опарин А. М.* Численное моделирование проблем, связанных с интенсивным развитием гидродинамических неустойчивостей // Новое в численном моделировании: алгоритмы, вычислительные эксперименты, результаты. — М.: Наука, 2000. — С. 63–90.
- Oparin A. M.* Chislennoye modelirovaniye problem, svyazannykh s intensivnym razvitiyem gidrodinamicheskikh neustoychivostey [Numerical modeling of problems associated with intensive development of hydrodynamic instabilities] // Novoye v chislennom modelirovanii: algoritmy, vychislitelnye eksperimenty, rezul'taty. — Moscow: Nauka, 2000. — P. 63–90 (in Russian).
- Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкостей. — М.: Мир, 1991. — 552 с.
- Fletcher K.* Vychislitel'nyye metody v dinamike zhidkostey [Computational methods in the dynamics of liquids]. — Moscow: Mir, 1991. — 552 p. (in Russian).
- Фортова С. В., Крагинский Л. М., Чикиткин А. В., Опарина Е. И.* Программный пакет для решения гиперболических систем уравнений // Ж. Мат. Мод. — 2013. — Т. 25, № 5. — С. 123–135.
- Fortova S. V., Kraginskiy L. M., Chikitkin A. V., Oparina E. I.* Programmnyy paket dlya resheniya giperbolicheskikh sistem uravneniy [Software package for solving hyperbolic systems of equations] // Zh. Mat. Mod. — 2013. — Vol. 25, No. 5. — P. 123–135 (in Russian).
- Harten A.* High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // J. Comput. Phys. — 1983. — Vol. 49, No. 2. — P. 357–393.
- Parallel.ru* <https://parallel.ru/tech/engineering/pacet2.html> (дата обращения: 01.10.2018).
- Shepelev V. V., Inogamov N. A., Danilov P. A., Kudryashov S. I., Kuchmizhak A. A., Vitrik O. B.* Ultra-short pulse action onto thin film on substrate: Qualitative model of shock propagation in substrate explaining phenomenon of fast growth of a hole with increase of absorbed energy // Journal of Physics: Conference Series. — 2018 (in press).
- Toro E. F.* Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction. — Third Edition. — Springer, 2009. — 724 p.
- Roe P. L.* Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference scheme // J. Comput. Phys. — 1981. — Vol. 43. — P. 357–372.
- Roe P. L.* Characteristic-based schemes for the Euler equations // Ann. Rev. Fluid Mechanics. — 1986. — Vol. 18. — P. 337–365.
- van Leer B.* Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method // Journal of Computational Physics. — 1979. — Vol. 32. — P. 101–136.
- Wikipedia* [https://ru.wikipedia.org/wiki/Computer-aided\\_engineering](https://ru.wikipedia.org/wiki/Computer-aided_engineering) (дата обращения: 01.10.2018).
- Yang J. Y.* Third-order nonoscillatory schemes for the Euler Equations // AIAA Journal. — 1991. — Vol. 29, No. 10. — P. 1611–1618.