

Отчёт о проделанной работе на кластере NUSC  
Р.В. Галёвым, аспирантом ИТПМ СО РАН  
≍  
(для продления доступа на кластер NUSC)

Р.В. Галёв<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск*

УДК: 537.876.23, 537.872.32, 532.5.032

Всвязи с окончанием аспирантуры для продления доступа Галёву Р.В. к кластеру НГУ («NUSC») по требованию ведущего инженера НГУ Калюжного В.А. предоставляется отчет о проделанной, с использованием «NUSC», работе в рамках написания кандидатской диссертации.

**Ключевые слова:** NUSC, уравнения Максвелла, FDTD, MPI.

## 1 Тема работы

Исследование процессов поглощения и преобразования лазерного излучения в твердых и жидкокристаллических сплошных средах

## 2 Состав коллектива (с указанием места учёбы/работы, учёных степеней и званий)

Галёв Роман Владимирович, аспирант ИТПМ СО РАН, лаборант ИТПМ СО РАН.

## 3 Научное содержание работы

Работа Галёва Р.В. посвящена численному исследованию взаимодействия лазерного излучения с пространственно неоднородными изотропными и анизотропными материальными средами применительно к задачам лазерной обработки материалов, конструирования новых оптоволоконных лазерных систем с управляющими элементами на основе жидких кристаллов, поиска эффективных способов генерации оптических вихрей. Автором разработаны вычислительные программы для решения на современных многопроцессорных ЭВМ уравнений Максвелла для неоднородной, в общем случае анизотропной сплошной среды, уравнений геометрической оптики и материальных уравнений, описывающих ориентационную динамику нематических жидкокристаллических сред и процессы теплопроводности в таких средах. Разработанные программы применены для решения ряда конкретных задач: о распространении и поглощении электромагнитного излучения в каверне, образующейся при лазерной резке металлов, его взаимодействии с зернистым слоем, преобразовании светового пучка, распространяющегося по оптоволокну, при прохождении через плоский слой или цилиндрический объем жидкого кристалла, включающий дисклинацию, генерации «закрученного света» вследствие термоориентационного эффекта в жидкокристаллической среде.

---

Работа выполнена в рамках кандидатской диссертации

### **3.1 Постановка задач**

#### **3.1.1 Задача о лазерной резке**

Расчёт распределения плотности потока тепла по поверхности реза в процессе лазерной резки металла.

#### **3.1.2 Задача о лазерном сверлении**

Расчёт распределения плотности тепловой энергии в объеме металла вблизи поверхности на начальном этапе процесса лазерного сверления металла.

#### **3.1.3 Задача о селективном лазерном спекании**

Расчёт распределения плотности тепловой энергии в объеме зернистого слоя на начальном этапе процесса селективного лазерного спекания.

#### **3.1.4 Оптоволокно с цилиндрическим отверстием, заполненным жидким кристаллом**

Расчёт распределения электромагнитного поля лазерного излучения, распространяющегося в оптоволокне, в объеме оптоволокна в виде цилиндрической полости занятой нематическим жидким кристаллом с дисклинацией и его окрестности.

#### **3.1.5 Оптоволокно со слоем жидкого кристалла**

Расчёт распределения электромагнитного поля лазерного излучения, распространяющегося в оптоволокне, в объеме оптоволокна в виде плоскопараллельного слоя занятого нематическим жидким кристаллом с дисклинацией и его окрестности.

#### **3.1.6 Генерация оптического вихря с использованием жидкого кристалла**

Расчёт распределения в объеме электромагнитного поля в виде гауссова пучка круговой поляризации, распространяющегося в пространстве, в области, занятой жидким кристаллом с дисклинацией, и её окрестности.

### **3.2 Современное состояние проблем**

В областях промышленной лазерной резки и селективного лазерного спекания материалов имеется задача повышения качества обработки, которая влечет необходимость расчёта поглощения электромагнитного излучения веществом при различных характеристиках излучения, вещества и геометрии. Задачи поглощения излучения веществом традиционно решаются в приближении геометрической оптики. Альтернативное решение точных уравнений Максвелла в более полной мере отражает реальную картину поглощения.

Жидкие кристаллы, обладая анизотропией и нелинейностью физических свойств, чрезвычайно чувствительны к внешним воздействиям, что обуславливает их практическую значимость. В частности, в лазерной технике попытки создания миниатюрных оптоволоконных управляющих устройств, использующих нелинейные свойства жидких кристаллов, влекут за собой задачи о распределении и распространении электромагнитного излучения в окрестности области, занятой жидким кристаллом. Особенностью задач о распространении электромагнитного излучения в малой области оптоволокна является то, что характерные геометрические размеры задачи по всем трем координатам сравнимы с длиной волны излучения. Эта особенность делает предпочтительным использование метода решения точных уравнений Максвелла перед приближенными методами.

«Оптические вихри» или «закрученный свет» — это пучки света, имеющие ненулевой орбитальный момент, переносящие момент импульса. Такие пучки в настоящее время начинают применяться для повышения скорости передачи информации через оптоволокно. Кроме того имеются эксперименты, где показана возможность вращать таким пучком микрообъекты. Генерация оптических вихрей производится различными способами. В ряде экспериментов показано, что для генерации можно использовать жидкий кристалл. Для рассмотрения процессов, сопровождающих генерацию оптического вихря в жидком кристалле, требуется проведение численных расчетов на основе уравнений Максвелла, решаемых совместно с уравнениями, описывающими ориентационную динамику нематического жидкого кристалла и процессы теплопроводности в анизотропной сплошной среде.

### 3.3 Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы

#### 3.3.1 Решаемые уравнения

Уравнения Максвелла

$$\begin{aligned}\varepsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \text{rot } \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) - \{i\omega\varepsilon(\mathbf{r}) + \sigma(\mathbf{r})\} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{J}_e(\mathbf{r}, t), \\ \mu(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= -\text{rot } \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \{i\omega\mu(\mathbf{r}) + \sigma^*(\mathbf{r})\} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t),\end{aligned}\quad (1)$$

где  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ ,  $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$  — искомые комплексные «амплитуды» электромагнитного поля,  $\varepsilon(\mathbf{r})$ ,  $\mu(\mathbf{r})$ ,  $\sigma(\mathbf{r})$  — задаваемые тензорные параметры среды, зависящие от  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{J}_e(\mathbf{r}, t)$  — задаваемый сторонний ток (для источника излучения),  $\omega$  — задаваемая выделенная частота,  $\sigma^*(\mathbf{r})$  — параметр, задаваемый для реализации полностью согласованного слоя «PML».

Уравнение «движения»:

$$\boxed{\frac{d\mathbf{n}}{dt} = \mathbf{h}/\gamma}, \quad (2)$$

где  $\mathbf{h} \equiv \mathbf{H} - \mathbf{n}(\mathbf{nH})$ ,  $\mathbf{H}$  — молекулярное поле:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_S + \mathbf{H}_T + \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{st} + \mathbf{H}_{din} + \mathbf{H}_{thr}.$$

При этом

$$\begin{aligned}\mathbf{H}_S &= K_1 \nabla (\text{div } \mathbf{n}), \\ \mathbf{H}_T &= -K_2 \{A \text{rot } \mathbf{n} + \text{rot}(A\mathbf{n})\}, \quad \text{где } A = \mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n}, \\ \mathbf{H}_B &= K_3 \{\mathbf{B} \times \text{rot } \mathbf{n} + \text{rot}(\mathbf{n} \times \mathbf{B})\}, \quad \text{где } \mathbf{B} = \mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n}, \\ \mathbf{H}_{st} &= \frac{\varepsilon_{\parallel}^{\circ} - \varepsilon_{\perp}^{\circ}}{4\pi} \text{RE}[\mathbf{E}^{\circ}(\mathbf{n}, \mathbf{E}^{\circ})] + (\chi_{\parallel}^{\circ} - \chi_{\perp}^{\circ}) \text{RE}[\mathbf{H}^{\circ}(\mathbf{n}, \mathbf{H}^{\circ})], \\ \mathbf{H}_{din} &= \frac{\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}}{8\pi} \text{RE}[\mathbf{E}(\mathbf{n}, \mathbf{E})], \\ \mathbf{H}_{thr} &= \alpha_a \nabla T (\nabla T, \mathbf{n}).\end{aligned}$$

Уравнение теплопроводности:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} cT = \text{div} \{ \kappa_{\perp} \nabla T + (\kappa_{\parallel} - \kappa_{\perp}) (\nabla T, \mathbf{n}) \mathbf{n} \} + \frac{\mathbf{h}^2}{\gamma} + \rho^*}, \quad (3)$$

где  $\gamma$  — вязкостная константа,  $\rho^* = \sigma_{\perp} |\hat{\mathbf{E}}|^2 + \sigma_a \left| (\mathbf{n}, \hat{\mathbf{E}}) \right|^2$ .

#### 3.3.2 Используемые алгоритмы

Для решения уравнений Максвелла (1) используется широко известный численный метод «Finite Difference Time Domain» (FDTD) (схема явная, второй порядок точности), адаптированный для анизотропной среды. Граничные условия задаются широко известным методом «Perfectly Matched Layer» (PML). Источник излучения задается при помощи распределения амплитуды и фазы стороннего тока на некоторой плоскости.

Уравнение ориентационной динамики нематического жидкого кристалла (2) и уравнение теплопроводности анизотропной среды (3) решаются совместно. Для аппроксимации пространственных производных применяется широко известная центральноразностная схема второго порядка на 19-ти точечном шаблоне. Условие единичной длины вектора-директора  $\mathbf{n}$  обеспечивается использованием формулы, связывающей скорость единичного вектора с частотой вращения:  $\dot{\mathbf{n}} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{n}$ .

Коды распараллелены с использованием широко известной библиотеки «Message Passing Interface» (MPI).

### 3.4 Полученные результаты

В задаче лазерной резки проведено теоретическое исследование влияния состояния поляризации излучения на качество лазерно-кислородной резки низкоуглеродистой стали CO<sub>2</sub>-лазером; изучена зависимость нагрева поверхности реза от параметров резки при круговой и линейной поляризации.

В задаче лазерного сверления показано, что картина поглощения, рассчитанная уравнениями Максвелла сложнее, чем предсказывает геометрическая оптика; сделан вывод о существенном влиянии длины волны излучения на качество сверления.

В задаче селективного лазерного спекания, сделано предположение, объясняющее причину наблюдаемого в эксперименте отличия в процессе разогрева зерен; сделан вывод о существенном влиянии длины волны излучения на процесс разогрева зерен; получены данные об объемном распределении выделения тепла для задания источника тепла при решении уравнения теплопроводности.

В задаче о взаимодействии лазерного излучения с цилиндрическим объемом ЖК показано, что круглое сечение отверстия приводит к фокусировке и рассеянию излучения; сделан вывод о существенном влиянии формы объема, заполненного ЖК, на появление нежелательных для лазерной волоконной техники явлений, предложено отказаться от практического использования цилиндрической формы объема.

В задаче со слоем ЖК показано, что в системе отсутствуют особенности фокусировки и рассеяния, присутствующие в системе с цилиндрическим отверстием; выявлено появление новых мод распространения излучения в оптоволокне после прохождения объема, заполненного ЖК; исследован характер дополнительной возможности управления параметрами системы за счет изменения толщины слоя.

В задаче о генерации оптического вихря проведены предварительные расчеты, указывающие на возможность генерации. Работа не окончена.

## 4 Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Большая геометрия задач в совокупности с используемым методом высокого пространственного разрешения (FDTD) влечет большой объем одновременно обрабатываемых данных. Памяти персональных ЭВМ для этого недостаточно и поэтому использование кластера необходимо.

## 5 Перечень публикаций, содержащих результаты работы (если есть). Указать импакт-фактор журнала (Thomson Reuters, РИНЦ,...)

### 5.1 Журнальные публикации

Kovalev O.B. and Gal'ov R.V. The application of Maxwell's equations for numerical simulation of processes during laser treatment of materials // J. Phys. D: Appl. Phys. 2015. V.48. 305501. (Impact Factor: 2.772)

Галёв Р.В., Ковалев О.Б. Об использовании уравнений Максвелла при численном моделировании взаимодействия лазерного излучения с материалами // Вестник НГУ. Серия: Физика. 2014. Т. 9, вып. 2. С. 55–64. (Impact Factor: нет)

### 5.2 Подготовлена к печати

Оришич А.М., Шулятьев В.Б., Гольшев А.А., Галёв Р.В., Кудрявцев А.Н. Влияние состояния поляризации излучения на качество поверхности при резке стали CO<sub>2</sub>-лазером // Journal of Laser Applications. (Impact Factor: 1.078)

### 5.3 Материалы конференций и препринты

Trashkeev S.I., Nyushkov B.N., Galev R.V., Kolker D.B., Denisov V.I. Optical trigger based on a fiber-coupled liquid crystal // 17th International Conference «Laser Optics 2016» (St. Petersburg, Russia, 27 June — 1 July, 2016).

Галёв Р.В., Кудрявцев А.Н., Трашкеев С.И. Численное моделирование взаимодействия лазерного излучения с дисклинациями в нематическом жидком кристалле // Труды Международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики-2015», 19-23 октября 2015, Новосибирск. 2015.

Галёв Р.В., Трашкеев С.И., Кудрявцев А.Н. Численное моделирование электромагнитных процессов на основе нового формализма двух потенциалов для уравнений Максвелла // Устный доклад на конференции. Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики, Новосибирск, Академгородок, 08-11 июня 2014. (АМСА2014)

Галёв Р.В., Лукашов В.П. Экспериментальное исследование процессов переноса, осаждения и преобразования углерода в дуговом разряде под поверхностью воды между графитовыми электродами // Тезисы доклада на IX Всероссийской конференции молодых ученых, 23-25 апреля 2012 года, Новосибирск. 2012.

Галёв Р.В., Ковалев О.Б. Применение численных решений уравнений Максвелла к моделированию процессов лазерной обработки материалов // Препринт, № 1-2013. ИТПМ СО РАН, Новосибирск: Параллель. 2013.

## 6 Ваши впечатления от работы вычислительной системы и деятельности ИВЦ НГУ, а также Ваши предложения по их совершенствованию

В целом приятно и удобно работать. Хотелось бы иметь возможность задействовать большее количество памяти под временное хранение данных.

## 7 Иллюстрации, визуализация результатов

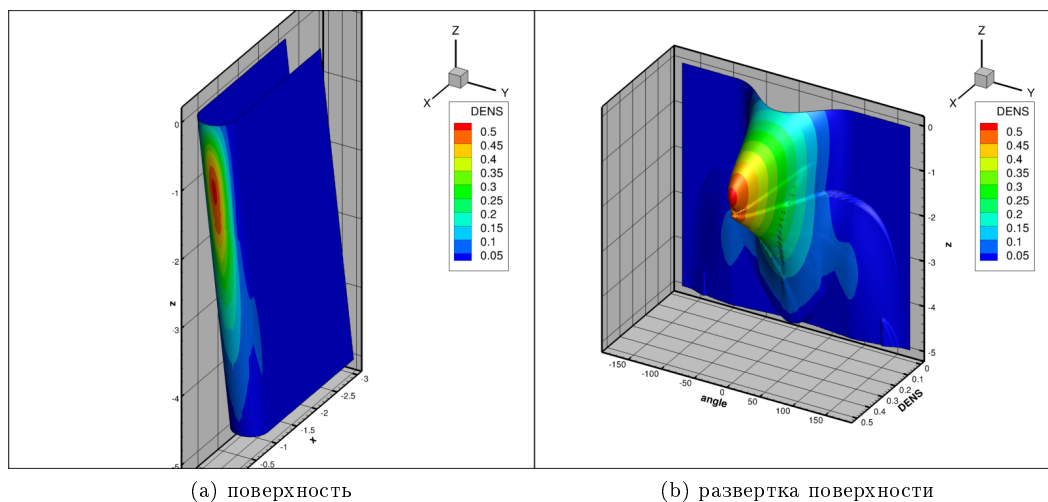


Рис. 1: Пример распределения плотности теплового потока по поверхности реза.

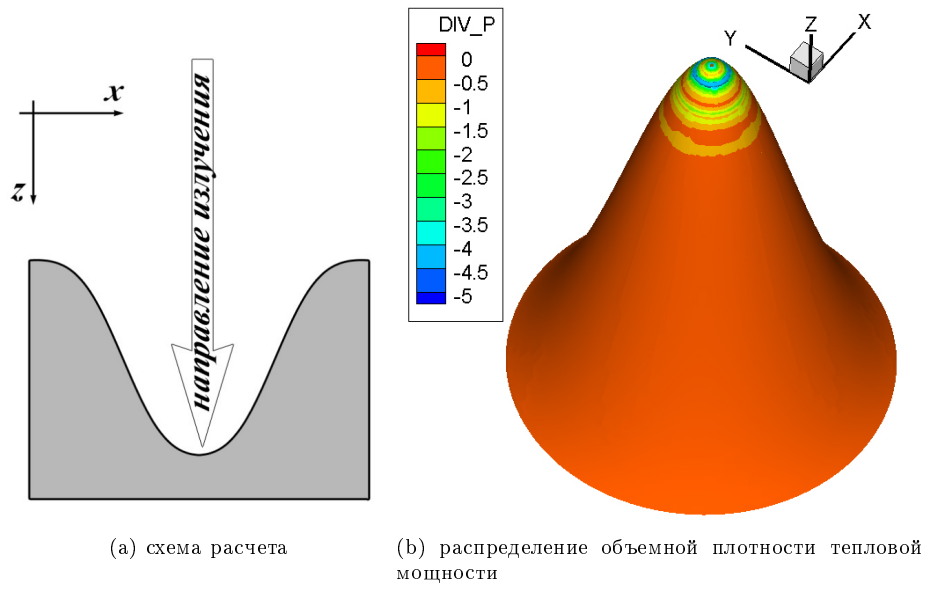


Рис. 2: Пример распределения плотности тепловой мощности в объеме металла.

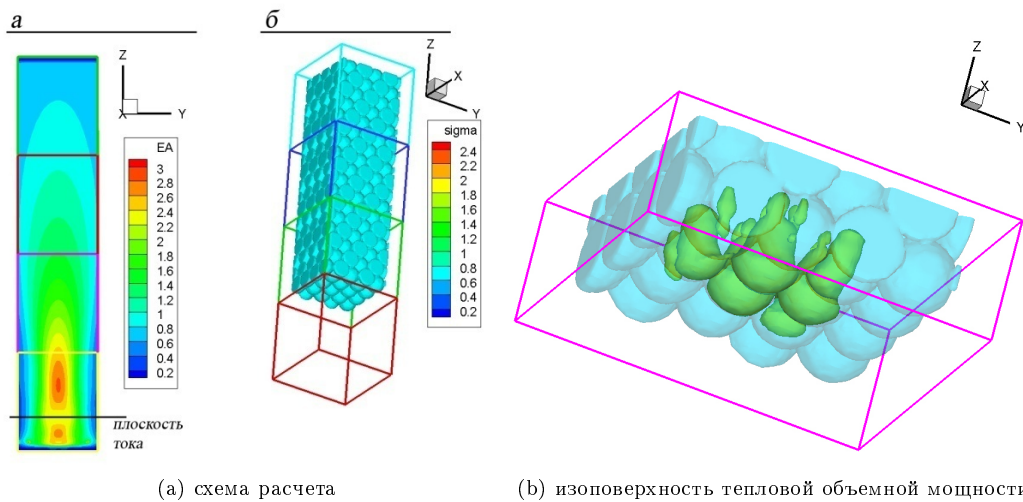


Рис. 3: Пример распределения плотности тепловой мощности в объеме зернистого слоя.

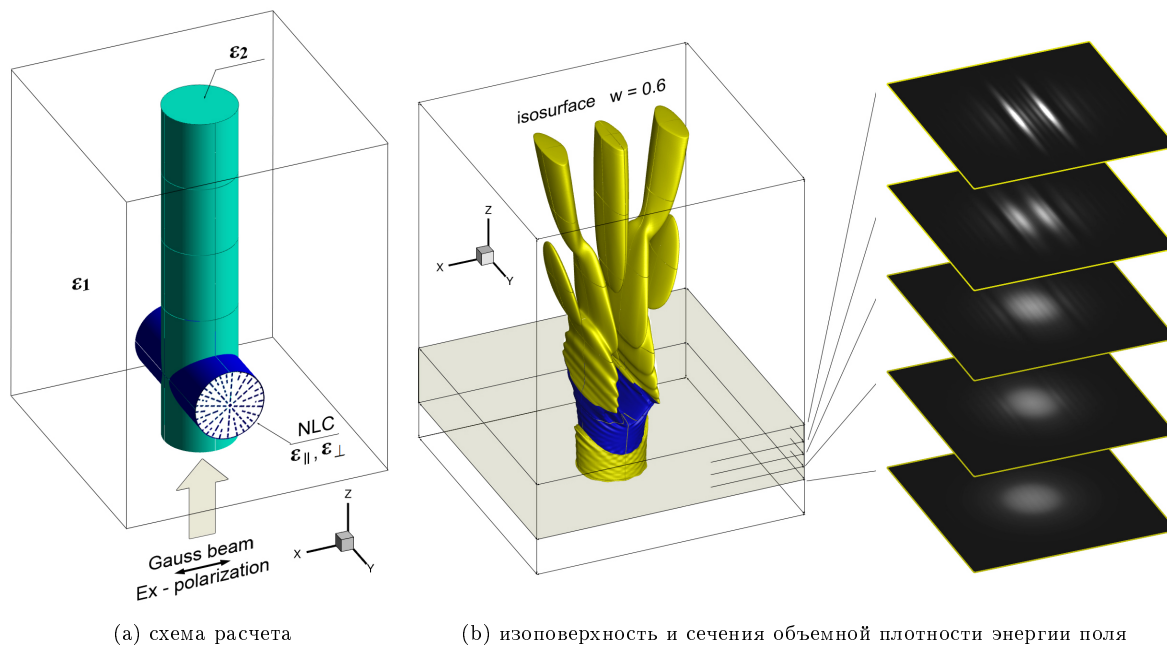


Рис. 4: Пример распределения электромагнитного поля в объеме оптоволокна.

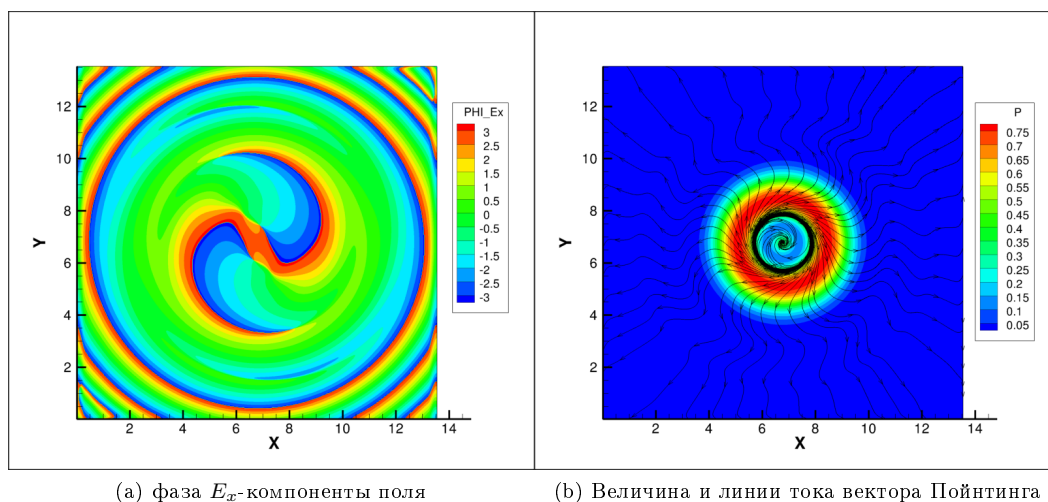


Рис. 5: Пример генерации оптического пучка. Данные в плоскости за жидким кристаллом