

P11-2002-78

И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, И. В. Пузынин,
Т. П. Пузынина, И. Сархатов*

**О ВЛИЯНИИ ФОРМЫ ИСТОЧНИКА
В МОДЕЛИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В МЕТАЛЛАХ,
ОБЛУЧАЕМЫХ ИМПУЛЬСНЫМИ ПУЧКАМИ
ИОНОВ**

*Таджикский государственный национальный университет, Душанбе

1. Введение

Взаимодействие мощных импульсных пучков заряженных частиц с твердым телом активно исследуется на протяжении последних десятилетий [1]-[8], что связано с изучением возможности технологического применения импульсных пучков для модификации физико-химических свойств материалов, задачей формирования структурно-фазового состояния облученной поверхности. Одна из наиболее важных задач – это моделирование тепловых механизмов диссипации энергии заряженных частиц в твердом теле, а также процессов превращения (фазовые переходы).

Теоретическое рассмотрение динамики фазовых переходов первого рода (плавление, затвердевание) приводит к различным вариантам задачи Стефана [9, 10], которая в том или ином виде входит практически во все модели, описывающие воздействие ионных и электронных пучков на изучаемые материалы (см., например, [4],[11]).

Поэтому разработка эффективных методов численного решения такой задачи является весьма актуальной проблемой. В частности, при численном решении этой задачи нередко используется модификация исходного уравнения, в которой влияние фазового перехода учитывается с помощью сингулярной добавки к теплоемкости в точке фазового перехода [12]-[14].

В работе [15] был представлен алгоритм численного решения задачи Стефана, основанный на неявной схеме второго порядка с переменным шагом по времени и использованием встречной прогонки на каждом временном слое. С использованием этого подхода был выполнен численный анализ динамики фазовых переходов (скорость движения фазовой границы, глубина проплава или затвердевания) в зависимости от формы и мощности источника.

Однако ряд особенностей представленной в [15] схемы не позволяет применить ее в модели эволюции термоупругих волн под воздействием импульсного потока ионов, исследовавшейся в работах [16]-[19].

В настоящей работе рассматривается более совершенный алгоритм решения задачи Стефана в рамках той же постановки задачи. В работе дается описание предложенной вычислительной схемы, обсуждаются вопросы точности и результаты численных экспериментов по изучению влияния формы и мощности источника облучения и начальной температуры образца на конфигурацию и скорость перемещения межфазовой границы.

2. Постановка задачи

Как уже было сказано выше, мы будем использовать ту же постановку задачи, что и в [15], которая сводится к уравнению теплопроводности в образце толщиной l_0 с неизвестной подвижной границей $\xi = \xi(t)$ внутри него, разделяющей твердую и жидкую фазы:

$$\rho_i c_{pi} \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x} \right) + Q_i; \quad i = 1, 2, \quad (1)$$

где ρ_i – плотность, c_{pi} – теплоемкость, λ_i – коэффициент теплопроводности и Q_i – объемная мощность тепловых источников. Пусть $i = 1$ – жидкая фаза, $i = 2$ – твердая фаза. На межфазовой границе выполняется так называемое условие Стефана:

$$\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} - \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} = \rho_2 L \frac{d\xi}{dt}, \quad (2)$$

где $\frac{d\xi}{dt}$ – скорость движения межфазовой границы, L – удельная теплота плавления металла.

Кроме соотношения (2), на межфазовой границе задается еще одно условие:

$$T_1 = T_2 = T_{\text{пл}}, \quad (3)$$

где $T_{\text{пл}}$ – температура плавления (или затвердевания), которую во многих случаях можно считать постоянной величиной. Задача (1)-(3) дополняется граничными и начальными условиями.

Предполагая, что образец нагревается со стороны $x = 0$ и его боковые поверхности термоизолированы, и переходя к безразмерным величинам и независимым переменным по формулам $T_i = T_i/T^*$ ($T^* = 293 \text{ K}$), $x = x/l_0$, $t = t/\tau$ (здесь τ – время действия источника на образец), мы получаем следующую постановку задачи.

При $T_2 \leq T_{\text{пл}}$ мы имеем одно уравнение

$$\frac{\partial T_2}{\partial t} = k_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} + q(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t \leq t_{\text{пл}}, \quad (4)$$

с начальными и граничными условиями

$$T_2(x, 0) = T_0, \quad 0 \leq x \leq 1; \quad \frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{x=1} = 0, \quad t > 0, \quad (5)$$

где $t_{\text{пл}}$ – момент начала плавления, который определяется из условия $T_2(0, t_{\text{пл}}) = T_{\text{пл}}$.

При $t_{\text{пл}} < t < \infty$ задача формулируется в виде системы

$$e \frac{\partial T_1}{\partial t} = k_1 \frac{\partial^2 T_1}{\partial x^2} + q(x, t), \quad 0 < x < \xi(t), \quad (6)$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial t} = k_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} + q(x, t), \quad \xi(t) < x < 1 \quad (7)$$

с граничными условиями

$$\frac{\partial T_1}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{x=1} = 0, \quad t > t_{\text{пл}}, \quad (8)$$

и условиями Стефана

$$T_1 \Big|_{x=\xi} = T_2 \Big|_{x=\xi} = T_{\text{пл}}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{x=\xi} - \frac{\partial T_1}{\partial x} \Big|_{x=\xi} = A \frac{d\xi}{dt}, \quad (10)$$

где

$$e = \frac{c_1 \rho_1}{c_2 \rho_2}, \quad A = \frac{\rho_2 L l_0^2}{\lambda_2 T^* \tau}, \quad k_2 = \frac{\lambda_2 \tau}{\rho_2 c_2 l_0^2}, \quad k_1 = \frac{\lambda_1 \tau}{\rho_2 c_2 l_0^2}.$$

Мы будем исследовать рассматриваемую модель в приближении $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$, т.е. $k_1 = k_2$.

Функция $q(x, t)$, описывающая влияние пучка заряженных частиц на образец (функция источника), будет определяться следующим выражением [18]:

$$q(x, t) = q_0 \tilde{q}(x, t),$$

где

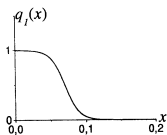
$$q_0 = \frac{E_0 j_{\text{max}} \tau}{2 Z e R_0 c_2 \rho_2 T^*} \quad (11)$$

есть безразмерная постоянная, которая выражает мощность теплового источника; E_0 , j_{max} , $Z e$ – энергия, плотность тока и заряд ионов соответственно.

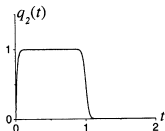
Функция $\tilde{q}(x, t)$ описывает форму и способ воздействия источника и задается из физических соображений, с учетом характеристик пучка и свойств мишени. Как и в работе [19], мы будем пользоваться следующим источником $\tilde{q}(x, t)$:

$$\tilde{q}(x, t) = q_1(x) q_2(t), \quad (12)$$

где $q_1(x)$ – потери энергии ионом как функция от координаты x , $q_2(t)$ – временная зависимость плотности тока ионов:



$$q_1(x) = \frac{1}{1 + e^{\mu_1(x - x_1)}}, \quad 0 \leq x \leq 1; \quad (13)$$



$$q_2(t) = \frac{1 - e^{-\mu_3 t}}{1 + e^{\mu_2(t - 1)}}, \quad 0 < t < \infty, \quad (14)$$

где $\mu_1 = 100$, $\mu_2 = \mu_3 = 50$. В дальнейшем, оставляя $q_1(x)$ без изменения, мы будем задавать по-разному функцию $q_2(t)$, которая описывает способ действия источника.

В настоящей работе, как и в работах [16]-[19], мы будем моделировать условия эксперимента [4] по облучению образца железа мощным импульсным пучком ионов углерода. Поэтому мы полагаем $l_0 = 10^{-5}$ м (толщина облучаемого образца), $\tau = 3 \cdot 10^{-7}$ сек (время действия источника). Остальные параметры задачи также выбираем для мишени из железа, а именно: $\rho_2 = 7870$ кг/м³, $c_2 = 456$ Дж/кгК, $\lambda_2 = 78,2$ Вт/мК, $L = 2,7 \cdot 10^5$ Дж/кг, $T_{пл} = 1799$ К, $\rho_1 = 7566$ кг/м³, $c_1 = 700$ Дж/кгК, $\lambda_1 = 78,2$ Вт/мК (параметры жидкого железа), и для ионного пучка углерода, для которого

$$E_0 = 250 - 350 \text{ кэВ}; \quad j_{\max} = 200 - 1000 \text{ А.см}^2; \quad Z = 1; \quad e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл.}$$

Тогда постоянные A , k_2 , q_0 принимают следующие приближенные значения:

$$A \simeq 30,91; \quad k_2 \simeq 6,54 \cdot 10^{-2}; \quad q_0 \simeq 59,44250.$$

Глубина проникновения ионов в образец x_1 составляет 0,07 ($x_1 = R_0/l_0$, $R_0 = 7 \cdot 10^{-7}$ м — длина свободного пробега ионов).

3. Метод численного решения

Введем равномерную прямоугольную сетку $\{x_i = ih_x (i = 0, 1, \dots, m), t_j = jh_t (j = 0, 1, \dots, n)\}$; h_x и h_t – соответственно шаги по переменным x и t . Для решения систем уравнений (4)-(5), (6)-(10) будем использовать следующую неявную конечно-разностную схему [20]:

$$e_i \frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{h_t} = k_2 \frac{T_{i+1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i-1}^{j+1}}{h_x^2} + q_i^{j+\frac{1}{2}}; \quad i = 1, 2, \dots, m-1, \quad (15)$$

$$\frac{T_1^{j+1} - T_0^{j+1}}{h_x} - \frac{h_x}{2k_2} (e_0 \frac{T_0^{j+1} - T_0^j}{h_t} - q_0^{j+\frac{1}{2}}) = 0; \quad i = 0, \quad (16)$$

$$\frac{T_m^{j+1} - T_{m-1}^{j+1}}{h_x} + \frac{h_x}{2k_2} (e_m \frac{T_m^{j+1} - T_m^j}{h_t} - q_m^{j+\frac{1}{2}}) = 0; \quad i = m, \quad (17)$$

$$T_i^0 = 1; \quad i = 0, 1, \dots, m, \quad (18)$$

где

$$T_i^j = T(x_i, t_j), \quad q_i^{j+\frac{1}{2}} = q(x_i, t_j + 0, 5h_t).$$

Здесь опущен индекс принадлежности температуры к данной фазе; l – номер узла, до которого дошло плавление; т.е. до плавления $e_i = 1$ при $i = 0, 1, \dots, m$, при плавлении $e_i = e$ при $i \leq l$ (жидкая фаза) и $e_i = 1$ при $i > l$ (твердая фаза).

Данная схема является монотонной [21], безусловно устойчивой и имеет порядок аппроксимации $O(h_x^2 + h_t)$. Применение неявной монотонной схемы первого порядка по t в данном случае является оправданным, поскольку, как будет показано ниже, на межфазовой границе производная от температуры по времени терпит разрыв.

После начала плавления нам надо найти неизвестную кривую $\xi = \xi(t)$, которая является границей между жидкой и твердой фазами (задача (6)-(10)). Задача (6)-(10) аппроксимируется исходной дискретной схемой (15)-(17) с добавлением дискретной аппроксимации условий Стефана.

В работе [15] настоящая задача решалась при переменных шагах h_t в предположении, что на каждом временном слое граница проплава перемещается на h_x , т.е. каждый раз проплав попадает в узел. Хотя такой способ решения задачи Стефана дает неплохие результаты при вычислении физических параметров задачи (глубина и скорость проплава, определение профиля температуры, определение временной зависимости температуры на разных глубинах металла и т.д.), однако при этом шаг h_t всегда больше h_x , а в области начала затвердевания намного превосходит шаг h_x . Поэтому этот метод нельзя применить непосредственно для решения задачи о влиянии фазовых переходов

на распространение термоупругих волн (см. [17],[18],[19]), так как при ее решении должно выполняться условие Куранта $v_s h_t / h_x < 1$ (здесь v_s — скорость движения термоупругих волн).

В настоящей работе мы предлагаем другой способ решения задачи Стефана, при котором шаги дискретной сетки h_x и h_t являются заранее заданными постоянными величинами. Если в работе [15], используя условие Стефана, мы получали трансцендентное уравнение для нахождения шага h_t , то в настоящей работе вводится новый параметр y , который определяет положение границы проплава внутри ячейки $[x_l, x_{l+1}]$, и получается трансцендентное уравнение уже для этого нового параметра. При таком подходе граница проплава может находиться внутри любой ячейки, и не обязательно, чтобы она совпала с узлом дискретной сетки. После каждого шага по времени граница проплава меняет свое положение. При этом она может переходить или в правую (при плавлении), или в левую (при затвердевании) соседнюю ячейку, или продолжать находиться в той же самой ячейке (рис.1).

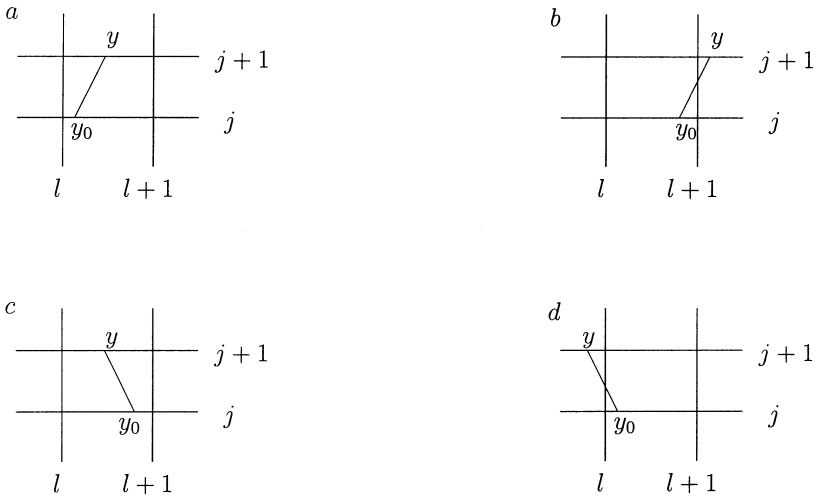


Рис. 1. Положение границы проплава при плавлении (a,b) и при затвердевании (c,d)

Обозначим координату границы проплава через $x_{пл} = x_l + y$, тогда $T(x_{пл}, t) = T_{пл}$. Используя значения температуры в дискретных точках

$x_{l-2}, x_{l-1}, x_l, x_{l+1}, x_{l+2}, x_{l+3}$, составим полином Лагранжа для температур в области жидкой ($x < x_{\text{пл}}$) и твердой ($x > x_{\text{пл}}$) фаз:

$$T^{\text{ж}}(x) = T_{\text{пл}} \frac{(x-x_l)(x-x_{l-1})(x-x_{l-2})}{y(h_x+y)(y+2h_x)} - T_l \frac{(x-x_{\text{пл}})(x-x_{l-1})(x-x_{l-2})}{2yh_x^2} +$$

$$+ T_{l-1} \frac{(x-x_{\text{пл}})(x-x_l)(x-x_{l-2})}{(h_x+y)h_x^2} - T_{l-2} \frac{(x-x_{\text{пл}})(x-x_{l-1})(x-x_l)}{2(y+2h_x)h_x^2}, \quad (19)$$

$$T^{\text{т}}(x) = -T_{\text{пл}} \frac{(x-x_{l+1})(x-x_{l+2})(x-x_{l+3})}{(h_x-y)(2h_x-y)(3h_x-y)} + T_{l+1} \frac{(x-x_{\text{пл}})(x-x_{l+3})(x-x_{l+2})}{2(h_x-y)h_x^2} -$$

$$- T_{l+2} \frac{(x-x_{\text{пл}})(x-x_{l+1})(x-x_{l+3})}{(2h_x-y)h_x^2} + T_{l+3} \frac{(x-x_{\text{пл}})(x-x_{l+2})(x-x_{l+1})}{2(3h_x-y)h_x^2}. \quad (20)$$

Найдем производные от температуры на границе плавления со стороны жидкой и твердой фаз:

$$\frac{\partial T^{\text{ж}}}{\partial x} \Big|_{x=x_{\text{пл}}} = T_{\text{пл}} \left(\frac{1}{y} + \frac{1}{h_x+y} + \frac{1}{2h_x+y} \right) - T_l \frac{(h_x+y)(2h_x+y)}{2yh_x^2} +$$

$$+ T_{l-1} \frac{(2h_x+y)y}{(h_x+y)h_x^2} - T_{l-2} \frac{(h_x+y)y}{2(y+2h_x)h_x^2}, \quad (21)$$

$$\frac{\partial T^{\text{т}}}{\partial x} \Big|_{x=x_{\text{пл}}} = -T_{\text{пл}} \left(\frac{1}{h_x-y} + \frac{1}{2h_x-y} + \frac{1}{3h_x-y} \right) + T_{l+1} \frac{(2h_x-y)(3h_x-y)}{2(h_x-y)h_x^2} -$$

$$- T_{l+2} \frac{(3h_x-y)(h_x-y)}{(2h_x-y)h_x^2} + T_{l+3} \frac{(2h_x-y)(h_x-y)}{2(3h_x-y)h_x^2}. \quad (22)$$

Предположим, что положение границы проплава на j -ом временном слое было y_0 , на $(j+1)$ -ом временном слое — y , и при этом граница проплава не выходит из ячейки $[x_l, x_{l+1}]$ (рис.1(a,c)). Тогда условие Стефана (10) можно записать в следующей дискретной форме:

$$\frac{\partial T^{\text{т}}}{\partial x} \Big|_{x=x_{\text{пл}}} - \frac{\partial T^{\text{ж}}}{\partial x} \Big|_{x=x_{\text{пл}}} = A \frac{y-y_0}{h_t}. \quad (23)$$

Формула (23) остается верной и для случая, когда имеется переход границы проплава в соседнюю ячейку (рис.1(b,d)), просто в этом случае следует провести замены $l \rightarrow l+1$, $y_0 \rightarrow y_0 - h_x$ при переходе в правую ячейку (когда идет плавление) или $l \rightarrow l-1$, $y_0 \rightarrow y_0 + h_x$ при переходе в левую ячейку (т.е. при затвердевании).

Задачу (15)-(23) будем решать методом встречной прогонки. Граничные условия в точках $x=0$ (16), $x=1$ (17) позволяют найти значения прогоночных коэффициентов $\vec{V}_0, \vec{U}_0, \vec{V}_m, \vec{U}_m$:

$$\vec{V}_0 = a/(e+a), \quad \vec{U}_0 = \vec{V}_0 (eT_0^j + q_0^{j+\frac{1}{2}} h_t)/a,$$

$$\vec{V}_m = a/(1+a), \quad \vec{U}_m = \vec{V}_m (eT_m^j + q_m^{j+\frac{1}{2}} h_t)/a.$$

Остальные левые и правые прогоночные коэффициенты находим из следующих рекуррентных соотношений:

$$\vec{V}_i = \frac{1}{b_1 - \vec{V}_{i-1}}; \quad \vec{U}_i = \vec{V}_i (\vec{U}_{i-1} + 2F_i/a); \quad i = 1, 2, \dots, l-1,$$

$$\overleftarrow{V}_i = \frac{1}{b - \overleftarrow{V}_{i+1}}; \quad \overleftarrow{U}_i = \overleftarrow{V}_i (\overleftarrow{U}_{i+1} + 2F_i/a); \quad i = m-1, m-2, \dots, l+2.$$

Здесь

$$a = 2k_0 h_t / h_x^2, \quad b_1 = 2(1 + e/a), \quad b = 2(1 + 1/a), \quad F_i = e_i T_i^j + q_i^{j+\frac{1}{2}} h_t.$$

После подстановки указанных прогоночных коэффициентов в условие Стефана (23) (точка встречи $x = x_{\text{пл}}$) получаем уравнение, содержащее три неизвестных величины: T_l , T_{l+1} , y . Чтобы исключить из условия Стефана T_l и T_{l+1} , поступим следующим образом.

Определим вторые производные по x от температуры $T^{\text{ж}}$ в точке $x = x_l$ на временном слое $j+1$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 T^{\text{ж}}}{\partial x^2} \Big|_{x=x_l} = T_{\text{пл}} \frac{6h_x}{y(h_x+y)(2h_x+y)} - T_l^{j+1} \frac{2(3h_x-y)}{2yh_x^2} + \\ + T_{l-1}^{j+1} \frac{2(2h_x-y)}{(h_x+y)h_x^2} - T_{l-2}^{j+1} \frac{(h_x-y)}{(y+2h_x)h_x^2}. \end{aligned} \quad (24)$$

Согласно уравнению теплопроводности

$$\frac{\partial^2 T^{\text{ж}}}{\partial x^2} \Big|_{x=x_l} = \left[\left(e \frac{\partial T^{j+1}}{\partial t} \right)_l - q_l^{j+\frac{1}{2}} \right] / k_2.$$

Отсюда получим формулу для нахождения T_l^{j+1} :

$$\begin{aligned} T_{\text{пл}} \frac{6h_x}{y(h_x+y)(2h_x+y)} - T_l^{j+1} \frac{2(3h_x-y)}{2yh_x^2} + T_{l-1}^{j+1} \frac{2(2h_x-y)}{(h_x+y)h_x^2} - \\ - T_{l-2}^{j+1} \frac{(h_x-y)}{(y+2h_x)h_x^2} = \left(e \frac{T_l^{j+1} - T_l^j}{h_t} - q_l^{j+\frac{1}{2}} \right) / k_2. \end{aligned} \quad (25)$$

Теперь выразим T_{l-1}^{j+1} , T_{l-2}^{j+1} через правые прогоночные коэффициенты \vec{U}_{l-1} , \vec{V}_{l-1} , \vec{U}_{l-2} , \vec{V}_{l-2} и температуру T_l^{j+1} :

$$T_{l-1}^{j+1} = \vec{V}_{l-1} T_l^{j+1} + \vec{U}_{l-1},$$

$$T_{l-2}^{j+1} = \vec{V}_{l-2} (\vec{V}_{l-1} T_l^{j+1} + \vec{U}_{l-1}) + \vec{U}_{l-2}.$$

После исключения $T_{l-1}^{j+1}, T_{l-2}^{j+1}$ из уравнения (25) находим T_l^{j+1} . Аналогичным путем находим температуру T_{l+1}^{j+1} . Подставляя найденные значения T_l^{j+1} и T_{l+1}^{j+1} в условие Стефана, получаем трансцендентное уравнение, которое зависит только от y . Теперь, меняя y внутри ячейки $[x_l, x_{l+1}]$ с мелким шагом, можно добиться выполнения условия Стефана (23) с заданной точностью.

После определения параметра y по известным значениям T_l^{j+1}, T_{l+1}^{j+1} и значениям левых и правых прогоночных коэффициентов находим температуру во всех точках жидкой и твердой фаз по формулам

$$T_i^{j+1} = \vec{V}_i T_{i+1}^{j+1} + \vec{U}_i, \quad i = l-1, l-2, \dots, 0,$$

$$T_i^{j+1} = \overleftarrow{V}_i T_{i-1}^{j+1} + \overleftarrow{U}_i, \quad i = l+2, l+3, \dots, m.$$

Таким образом, алгоритм решения задачи (15)-(23) следующий. Пока $T_0^j < T_{\text{пл}}$, мы решаем задачу (4)-(18) методом прогонки. Когда температура достигает точки плавления, т.е. когда $T_0^j \geq T_{\text{пл}}$, вводится параметр y , который определяет границу проплава. Решая для него на каждом временном слое трансцендентное уравнение, найдем, где находится граница проплава. Признаком наступающего затвердевания является то, что на каком-то временном слое скорость перемещения межфазовой границы меняет знак и становится отрицательной ($\frac{d\xi}{dt} < 0, y < y_0$).

4. Проверка точности вычислительной схемы

Для проверки точности схемы (15)-(23) проводился численный эксперимент на вдвое сгущающихся сетках при начальных шагах $h_x = 0,002$ и $h_t = 0,0001$. Вычисления на сетках с шагами h_x и $h_x/2$ дали близкие результаты. Так, максимальное отклонение в моменты времени $t = 1$ и $t = 5$ равно соответственно: $\max |T_{h_x}(x, 1) - T_{h_x/2}(x, 1)| = 4,42 \cdot 10^{-3}$ при $x = 0$ и $\max |T_{h_x}(x, 5) - T_{h_x/2}(x, 5)| = 1,36 \cdot 10^{-3}$ при $x = 0,466$. Для $\xi(t)$ получено: $\max |\xi_{h_x}(t) - \xi_{h_x/2}(t)| = 9,07 \cdot 10^{-4}$ в интервале $0,16 \leq t \leq 1$ в точке $t = 0,162$; $\xi = 0,019$ и $\max |\xi_{h_x}(t) - \xi_{h_x/2}(t)| = 1,38 \cdot 10^{-3}$ в интервале $0,16 \leq t \leq 4,5$ в точке $t = 4,5$; $\xi = 0,093$.

Для подтверждения указанной выше точности аппроксимации на сгущающихся сетках проверялось выполнение правила Рунге для уравнения теплопроводности без учета плавления образца по формуле

$$K = \frac{T_h - T_{h/2}}{T_{h/2} - T_{h/4}},$$

где h – начальный шаг вычисления величины T для одной переменной при постоянном шаге по другой переменной. На рис.2 приведены

графики изменения этих коэффициентов от соответствующей переменной при начальных шагах $h_x = 0,004$; $h_t = 0,0001$.

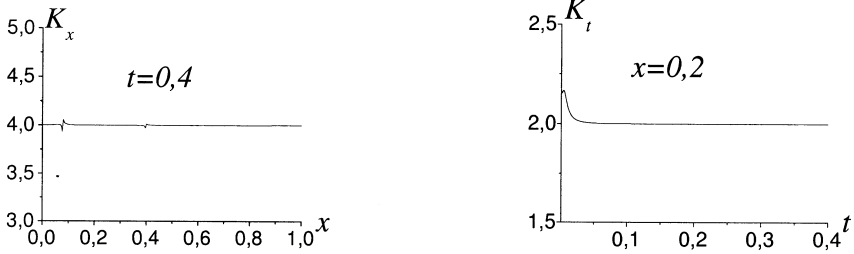


Рис. 2

Как видно из рис. 2, $K_t \sim 2$ и $K_x \sim 4$, что соответствует теоретическому порядку аппроксимации $O(h_x^2 + h_t)$. Небольшие отклонения наблюдаются лишь там, где источник резко меняется по времени или координате.

Поскольку вдоль кривой $\xi = \xi(t)$ температура не меняется, то очевидно, что

$$dT = \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_x = \xi dt + \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_x = \xi d\xi = 0.$$

Откуда

$$\frac{d\xi}{dt} = - \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_x = \xi / \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_x = \xi. \quad (26)$$

Последняя формула позволяет по значениям частных производных от температуры по времени и по координатам на кривой $\xi = \xi(t)$ вычислить значения скорости перемещения межфазовой границы $\xi = d\xi/dt$ [9], а потом сравнить их со скоростью, найденной по формуле

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{y - y_0}{h_t}.$$

В формуле (26) значения производных от температур могут быть взяты и со стороны жидкой, и со стороны твердой фаз.

При удовлетворении условия Стефана нами были вычислены значения производных $\frac{\partial T^{\text{ж}}}{\partial x} \Big|_{x=x_{\text{пл}}}$ и $\frac{\partial T^{\text{т}}}{\partial x} \Big|_{x=x_{\text{пл}}}$, а значения $\frac{\partial T^{\text{ж}}}{\partial t} \Big|_{x=x_{\text{пл}}}$ и $\frac{\partial T^{\text{т}}}{\partial t} \Big|_{x=x_{\text{пл}}}$ вычисляются с помощью формулы первого порядка аппроксимации. Результаты численного эксперимента показывают, что

$$\left| \frac{d\xi}{dt} + \left(\frac{\partial T^{\text{ж}}}{\partial t} / \frac{\partial T^{\text{ж}}}{\partial x} \right)_{x=x_{\text{пл}}} \right| = 2,48 \cdot 10^{-3},$$

$$\left| \frac{d\xi}{dt} + \left(\frac{\partial T^{\text{т}}}{\partial t} / \frac{\partial T^{\text{т}}}{\partial x} \right)_{x=x_{\text{пл}}} \right| = 5,89 \cdot 10^{-3}$$

в точке $\xi = x_{пл} = 0,01635$. Кроме этого,

$$\frac{\partial T^ж}{\partial t}|_{x=x_{пл}} - \frac{\partial T^т}{\partial t}|_{x=x_{пл}} = 3,363. \quad (27)$$

Таким образом, производная от температуры по времени на межфазовой границе терпит разрыв.

5. Численный эксперимент и обсуждение его результатов

При исследовании тепловых процессов в твердых телах под действием мощных импульсных пучков заряженных частиц главным образом представляют интерес такие характеристики, как пространственно - временная конфигурация полей температур, скорости нагрева и охлаждения, максимальный размер области проплава, временная зависимость местоположения межфазовой границы и т.д. [22].

Мы проводили численные эксперименты для источников разной формы. На рис.3 приведены варианты функции $q_2(t)$, которые описывают способ действия источника.

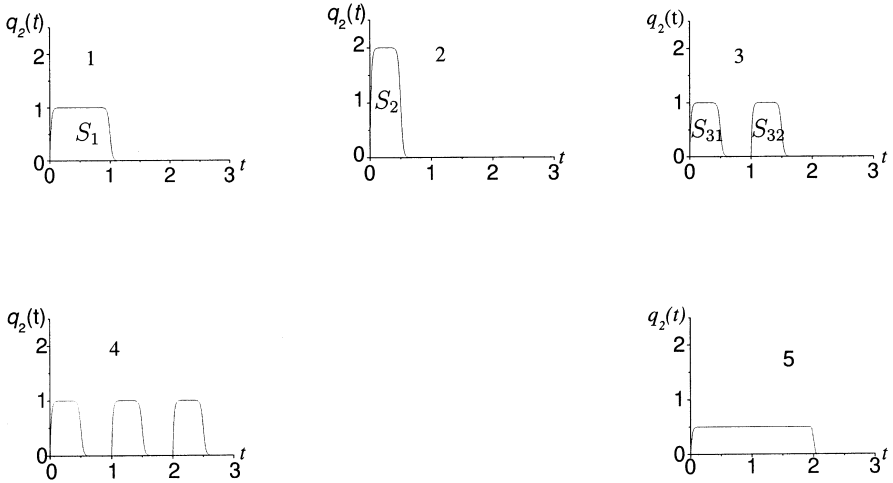


Рис.3. Разные варианты временной зависимости функции источника

В вариантах 1,2,3 выполняются условия $S_1 = S_2 = S_{31} + S_{32}$, что соответствует одинаковым флюенсам (S_i – площадь под i -ой кривой)

На рис.4а,б приведены графики временной зависимости перемещения межфазовой границы $\xi = \xi(t)$ (на рис.4а начальная часть кривой

$\xi = \xi(t)$ изображена в более крупном масштабе) и на рис.4с,d координатная и временная зависимости скорости перемещения межфазовой границы при источнике 1. В области действия источника скорость перемещения межфазовой границы сначала резко растет, потом резко уменьшается, по мере удаления из этой области более плавно уменьшается, а затем меняется слабо. После выключения источника скорость перемещения межфазовой границы быстро уменьшается. В точке поворота кривой $\xi = \xi(t)$ ($\dot{\xi} = 0$) плавление заканчивается и начинается процесс затвердевания.

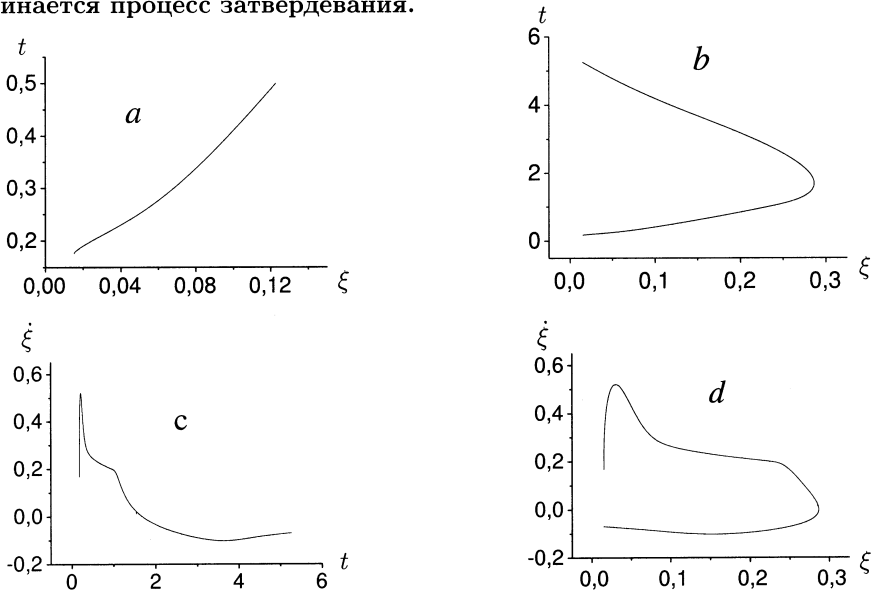


Рис.4. Временные зависимости перемещения межфазовой границы и скорости ее перемещения (a,b,c) и координатная зависимость скорости перемещения (d) при источнике 1

На рис. 5a,b приведены графики профиля температуры и скорости ее изменения в моменты начала плавления, выключения источника, начала и конца затвердевания, а на рис.5с,d приведены их временные зависимости на поверхности $x = 0$ и на разных глубинах образца ($x = 0,1; 0,2; 0,3$ соответственно). Максимальная скорость перемещения межфазовой границы находится в области действия источника. Как известно из условия Стефана, на межфазовой границе пространственная производная от температуры терпит разрыв. Из рисунка 5b,d и из выражения (27) видно, что на границе межфазового перехода производная от температуры по времени также терпит разрыв.

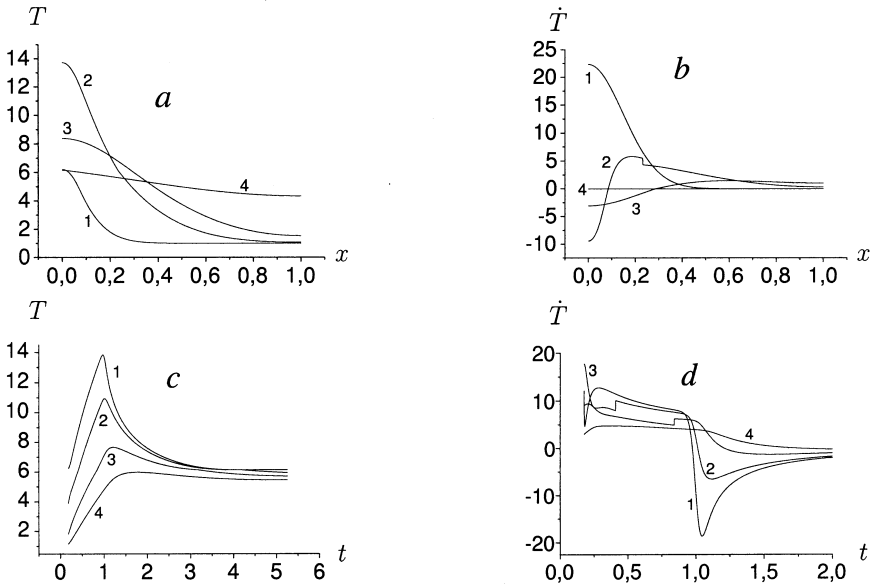


Рис.5. Профиль температуры и скорости ее изменения в моменты начала плавления (1), выключения источника (2), начала затвердевания (3), конца затвердевания (4) (a,b) и их временные зависимости (c,d) на разных глубинах образца ($x = 0; 0,1; 0,2; 0,3$ соответственно)

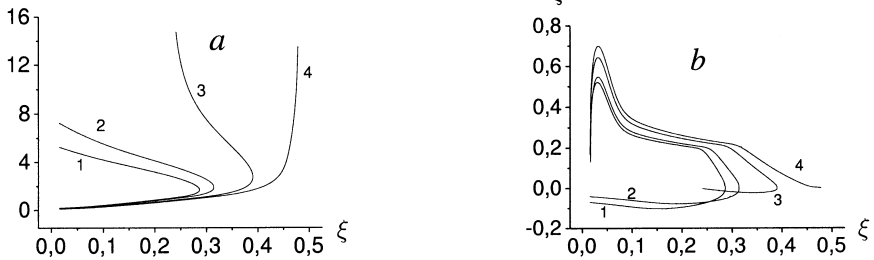


Рис.6. Зависимости $\xi = \xi(t)$ (a) и $\dot{\xi} = \dot{\xi}(t)$ (b) для образцов металла с различными значениями начальной температуры: $T_0 = 1$ – кривая 1, $T_0 = 1,5$ – кривая 2, $T_0 = 2,5$ – кривая 3, $T_0 = 3$ – кривая 4

В некоторых экспериментах [11] изучается влияние на фазовые переходы различной начальной температуры образца. В нашем случае это эквивалентно выбору различных значений T_0 . Мы проводили численный эксперимент для $T_0 = 1; 1,5; 2; 3$ (источник варианта 1). Результаты представлены на рис.6.

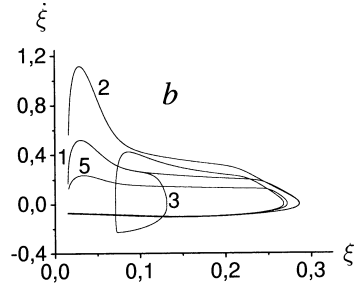
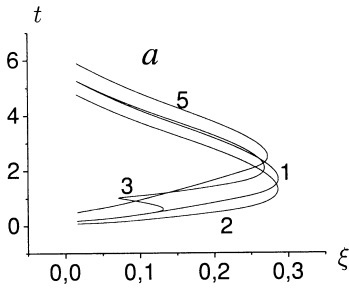


Рис.7. Временная зависимость положения межфазовой границы $\xi(t)$ (а) и координатная зависимость скорости перемещения межфазовой границы $\xi(\xi)$ (б) при действии источника вариантов 1,2,3,5 (рис. 3)

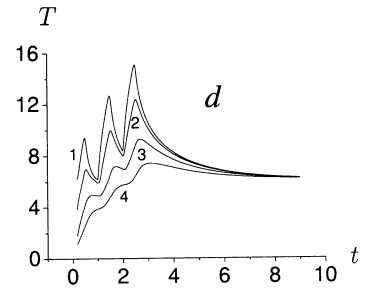
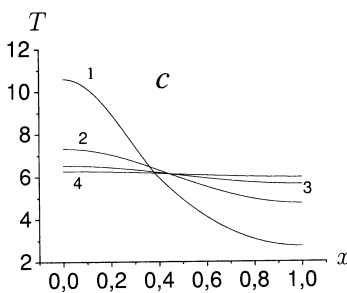
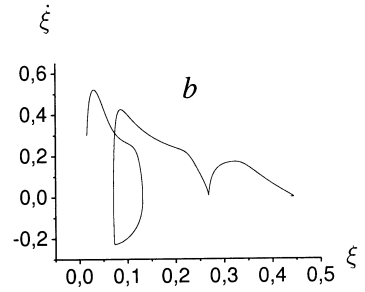
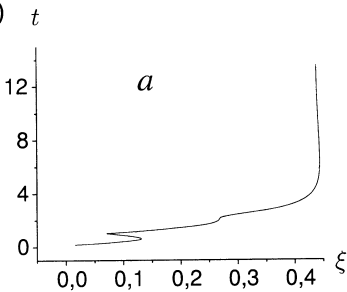


Рис.8. Временные зависимости положения межфазовой границы $\xi = \xi(t)$ и скорости ее перемещения $\xi = \xi(t)$ (а,б), профиль температуры при разных временах ($t = 3; 5; 7; 9$) и временная зависимость температуры на разных глубинах образца $x = 0; 0,1; 0,2; 0,3$ (с,д) при действии источника варианта 4 (см. рис. 3)

Теперь рассмотрим, как влияет способ задания $q_2(t)$ на фазовые переходы в образце. На рис.7 приведены кривые $\xi(t)$ и $\xi(\xi)$ для источников, когда функции $q_2(t)$ выбраны в виде 1,2,3,5 (см. рис. 3).

Для первых двух источников глубина проплава практически оди-

накова, но они отличаются временами продолжительности плавления и затвердевания. Для источника 3 глубина проплава меньше, два раза происходит плавление и затвердевание. При этом затвердевание образца второй раз заканчивается так же, как при источнике 1. Кривая 5 относится к источнику 5, у которого интенсивность в два раза меньше, чем у источника 1, но время его действия в два раза больше. Как видно, глубина проплава зависит от способа действия источника и его мощности при одинаковых флюенсах.

На рис.8(a,b,c,d) представлены результаты, полученные для варианта 4 задания функции $q_2(t)$ (см. рис.3), у которого больше флюенс.

На рис. 9 приведены кривые временных зависимостей перемещения межфазовой границы $\xi = \xi(t)$ для разных интенсивностей источника q_0 (рис. 9a) и разных параметров (A, c_1, c_2 , рис. 9b).

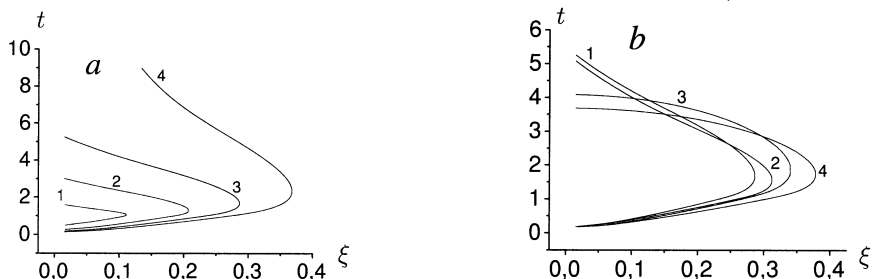


Рис.9. (а) – временные зависимости положения межфазовой границы $\xi = \xi(t)$ при разных значениях интенсивности источника 1 $q_0 = 30; 45; 60; 75$; (б) – аналогичная зависимость при фиксированном значении $q_0 \simeq 60$, но разных значениях параметров A, c_1, c_2 ($A \simeq 31, c_1 > c_2$ – кривая 1, $c_1 = c_2$ – кривая 2, $A = 0, c_1 > c_2$ – кривая 3, $c_1 = c_2$ – кривая 4)

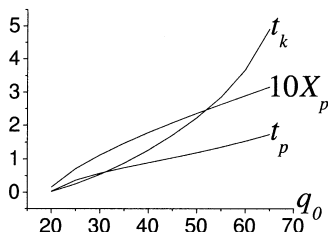


Рис. 10

При небольших интенсивностях источника в течение времени t_p происходит плавление некоторой части образца, а потом в течение

времени t_k полное затвердевание этой части образца. Назовем эти времена соответственно длительностью плавления и затвердевания. Максимальную глубину проплава обозначим через X_p . Пусть t_{np} – момент начала плавления, t_{nk} – момент начала затвердевания (т.е. когда $\dot{\xi} = 0$) и t_{kk} – момент конца затвердевания. Тогда

$$t_p = t_{nk} - t_{np}; \quad t_k = t_{kk} - t_{nk}.$$

На рис. 10 приведены графики зависимостей длительности плавления t_p , длительности затвердевания t_k и глубина проплава X_p от интенсивности источника q_0 .

Следует подчеркнуть, что при больших q_0 либо отсутствует затвердевание, либо происходит неполное затвердевание образца и вышеприведенные величины теряют смысл.

6. Заключение

В работе представлен метод численного решения задачи Стефана для металлического образца, облучаемого сильноточным источником ионов углерода. Проведен численный анализ точности вычислительной схемы. Выполнено численное исследование зависимости межфазовой границы $\xi(t)$ от формы, интенсивности и кратности действия источника.

Результаты численного анализа позволяют сделать следующие выводы:

1. Скорость перемещения межфазовой границы имеет максимальное значение внутри области действия источника.

2. На межфазовой границе частная производная от температуры по времени терпит разрыв.

3. Установлена сильная зависимость формы $\xi(t)$ от начальной температуры образца.

4. Установлена сильная зависимость формы $\xi(t)$ от способа выбора действия источника (выбора $q_2(t)$).

Дальнейшее развитие модели мы связываем с учетом испарения образца и влияния фазовых переходов на формирование и распространение термоупругих волн в образце.

Авторы благодарны Э.А.Айряню и Т.Л.Бояджиеву за полезные обсуждения и помощь. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты N 0001 00617, N 02-01-00606.

Список литературы

- [1] В.И. Бойко, А.Н. Валяев, А.Д. Погребняк. УФН, 1999, т.169, N11, с.1243.
- [2] R.W. Stinet et.al. Thermal surface treatment using intense, pulsed ion beams. Proc. Materials Research Society Symp.: Materials Synthesis and Processing Using Ion Beams. Boston, 1994, v.316. p.521-532.
- [3] А.Н. Диденко, А.Е.Лигачев, И.Б.Куракин. Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1987.
- [4] С.А. Коренев. Импульсная взрывная ионная вакуумная конденсация. Препринт ОИЯИ Р13-89-615, Дубна, 1989.
- [5] С.И. Анисимов, Я.А. Имас, Г.С. Романов, Ю.В. Ходько. Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука, 1970.
- [6] Ю.А. Быковский, В.Н. Неволин, В.Ю. Фоминский. Ионная и лазерная имплантация металлических материалов. М.: Энергоатомиздат, 1991.
- [7] В.И. Бойко, В.В. Евстигнеев. Введение в физику взаимодействия сильноточных пучков заряженных частиц с веществом. М.: Энергоатомиздат, 1988, с.137.
- [8] В.И. Мажуркин, А.А. Самохин. Математическое моделирование. Под ред. А.А. Самарского, С.П. Курдюмова, В.И. Мажуркина. М.: Наука, 1987, с.191-244.
- [9] Г. Карлсруу, Д. Егер. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964.
- [10] Н.М. Беляев, А.А. Рядно. Методы теории теплопроводности. М.: Высшая школа, 1982. т. 1,2.
- [11] А.Ю. Дидык. Радиационное воздействие тяжелых ионов на хромоникелевую сталь при высоких температурах. Металлы, 1995, N3, с.128-135.
- [12] А.А. Самарский, Б.Д. Моисеенко. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана. ЖВМ и МФ, 1965, т.5, N5, с.816-827.
- [13] Б.М. Будак, Ф.П. Васильев, А.Б. Успенский. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задач Стефана. ЖВМ и МФ, 1965, т.5, N5, с.828-840.
- [14] Э.А.Айрян, С.И.Баструков, М.С.Касчиев, С.А.Коренев, Д.В.Подгайный, И.В.Пузынин, А.В.Федоров, А.М.Червяков.

Профиль температурного фронта и глубина проплава поверхности металла, облученной сильноточным ионным пучком. Изв. вузов, т.12,1998, с.13.

- [15] И.В. Амирханов, Е.В. Земляная, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, И. Сархадов. Сообщение ОИЯИ Р11-2001-164, Дубна, 2001.
- [16] Э.А. Айрян, И.В.Амирханов, Б.Ф.Костенко, Я.Прибиш, И.Сархадов. Сообщение ОИЯИ Р11-2000-271, Дубна, 2000.
- [17] И.В.Амирханов, И.В.Пузынин, В.Н.Самойлов, В.К.Федянин, Х.Т.Холмуродов. Сообщение ОИЯИ Р2-98-63, Дубна, 1998; Сообщение ОИЯИ Р2-98-201, Дубна, 1998.
- [18] И.В.Амирханов, Е.В.Земляная, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, И.Сархадов. Сообщение ОИЯИ Р11-2000-263, Дубна, 2000.
- [19] И.В.Амирханов, Е.В.Земляная, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, И.Сархадов. Сообщение ОИЯИ Р11-2002-24, Дубна, 2002.
- [20] А.А. Самарский. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983, с.258-276.
- [21] Н.Н.Калиткин. Численные методы. М.: Наука, 1978, с.370-374.
- [22] Г.А. Блейхер, В.П. Кривобоков, О.В. Пащенко. Тепломассоперенос в твердом теле под действием мощных пучков заряженных частиц. Новосибирск, Наука, 1999.

Получено 15 апреля 2002 г.

Амирханов И. В. и др.

P11-2002-78

О влиянии формы источника в модели фазовых переходов
в металлах, облучаемых импульсными пучками ионов

Проведено численное исследование влияния характеристик источника (интенсивность, продолжительность, кратность действия и т.д.) на форму межфазовой границы $\xi(t)$, разделяющей расплавленную и твердую части в образце, находящемся под воздействием сильноточного импульсного пучка ионов. Дано описание алгоритма численного решения соответствующей задачи Стефана первого рода, проведен анализ точности вычислительных схем и представлены полученные численные результаты, описывающие некоторые характеристики межфазовой границы $\xi(t)$ (глубина и скорость проплава, начало затвердевания и т.д.). Установлено, что на межфазовой границе $\xi(t)$ производная от температуры по времени терпит разрыв.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2002

Перевод М. В. Аристарховой

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2002-78

Influence of the Source's Form in the Model of Phase Moves
in Metals Exposed to Pulsed Ion Beams

A numerical study has been performed of the influence of the source's characteristics (intensity, duration, multiplicity of action, etc.) on the form of the interphase $\xi(t)$ that separates the melted and firm parts in a sample irradiated by a high current pulsed ion beam. An algorithm of a numerical solving of the corresponding Stephan's problem of the first kind is described. An analysis of the accuracy of the computational scheme has been done, and the obtained numerical results describing some characteristics of the interphase $\xi(t)$ are presented (melting depth, melting rate, beginning of hardening, etc.). It has been found that at the interphase $\xi(t)$ the temperature derivative with respect to time has a gap.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2002

Редактор *М. И. Зарубина*
Макет *Н. А. Киселевой*

ЛР № 020579 от 23.06.97.

Подписано в печать 31.05.2002.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,12. Уч.-изд. л. 1,25. Тираж 320 экз. Заказ № 53327.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.