

81



Препр  
А-22

Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М.В. Келдыша.  
Академии Наук СССР

Ф.В. Бункин, Н.А. Кириченко, С.П. Курдюмов,  
Г.Г. Малинецкий, А.А. Самарский

ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
ИМЕНИ М.В. КЕЛДЫША  
АКАДЕМИИ НАУК СССР

АВТОВОЛНОВЫЕ ПРОЦЕССЫ В ЛАЗЕРНОЙ ТЕРМОХИМИИ

Препринт № 81 за 1983 г.

Москва

### Аннотация

В работе рассматриваются простейшие математические модели процессов, изучаемых лазерной термохимией. Изучается класс задач, где важную роль играют процессы теплопроводности. При исследовании таких задач эффективным оказывается использование методов и представлений, развиваемых теорией диссипативных структур (синергетикой).

Проведенные расчеты показали, что в ряде случаев изучаемые процессы приводят к формированию стационарных эффективно локализованных распределений продуктов реакции. В системе возможны также автоволновые процессы различных типов.

Исследования теплового действия лазерного излучения на химически активные среды привели к появлению нового направления, часто называемого "лазерная термохимия" (ЛТХ) [1,2]. Оказалось, что динамика протекания термохимических процессов может быть чрезвычайно сложной даже при воздействии на среду непрерывного лазерного излучения небольшой мощности. Это обстоятельство обусловлено в основном двумя факторами. Во-первых, неизотермичностью процессов: поскольку скорости химических процессов сильно зависят от температуры, а лазерное излучение непрерывно вводит в систему тепловую энергию, то скорость реакций может меняться. При этом, если скорость изменения температуры выше скорости протекания реакций, то характер течения процесса будет резко отличаться от изотермического ("макроскопическая неравновесность"). Во-вторых, существенным является наличие обратной связи между скоростью изменения температуры и темпом протекания реакций. Возникновение этой обратной связи может быть обусловлено либо тепловым эффектом самих реакций, либо изменением оптических свойств среды при изменении химического состава в ходе реакции. В последнем случае изменяются поглощательные характеристики среды, регулируя количество вводимой в систему энергии. В частности, если поглощательная способность растет в ходе реакции ("положительная обратная связь"), в системе развивается термохимическая неустойчивость — темп роста температуры резко нарастает [1]. В обратном случае температурное поле стабилизируется (например, в реакциях восстановления металлов из окислов, где в ходе процесса поглощательная способность поверхности убывает [3]).

Из сказанного следует, что лазерное излучение может использоваться как эффективное средство управления химическими процессами. Лазерное управление особенно эффективно, если реакции в системе могут идти по нескольким каналам или если выделение (поглощение) тепла в реакции может быть велико. При этом оказывается возможным "переключать" систему из одного режима в другой лишь слегка варьируя мощность излучения. В этой связи представляет интерес задача о выборе такого временного хода мощности излучения, при котором процесс протекает оптимальным образом. Например, можно минимизировать энергозатраты на нагрев мишени до заданной температуры [4].

Наконец, отметим, что высокая способность химически активных систем к самоорганизации может использоваться и в химической тех-

нологии. Например, как показано в [5], выход полиимида в реакции твердофазной имидизации полиамидокислоты в поле лазерного излучения оказывается значительно выше по сравнению со случаем проведения той же реакции в изотермических условиях (данная реакция представляет большой практический интерес в связи с тем, что ее продукт - важный для промышленности термостойкий полимер). К настоящему моменту выполнено значительное число работ по исследованию процессов в точечных системах, когда зависимость параметров от координат можно пренебречь. Этот случай описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{d u_i}{d t} &= F_i(u_1, \dots, u_n; T), \quad i = 1, \dots, n \\ \frac{d T}{d t} &= P(t) A(u_1, \dots, u_n; T) + P_T(u_1, \dots, u_n, T). \end{aligned} \quad (I.I)$$

Здесь  $u_i$  - концентрации компонентов реакции,  $T$  - температура,  $A(u_1, \dots, u_n, T)$  - поглощательная способность системы,  $P_T(u_1, \dots, u_n, T)$  - разность между тепловым эффектом реакции и теплопотерями,  $P(t)$  - мощность лазерного излучения.

Если слагаемые  $F_i$  и  $P_T$  в правых частях уравнений (I.I) - обычные для описания кинетики химической реакции, то величина  $PA$  описывает специфически лазерное действие. Функции  $F_i$ , описывающие скорости изменения концентрации компонент  $u_i$ , зависят от температуры, благодаря чему и удается, воздействуя на "тепловую степень свободы", менять характер протекания процессов в системе. В этой связи отметим, что величина поглощательной способности

чувствительна к таким параметрам излучения, как длина волны и поляризация. Как показано в [1,6], это позволяет осуществить селективное управление реакциями, перестраивая длину волны излучения (т.е. вводя энергию в систему только через какой-либо фиксированный компонент реакции).

Поскольку скорости реакции по отдельным каналам зависят от температуры обычно по закону Аррениуса  $\sim \exp(-T_a/T)$ , то уравнения (I.I) оказываются сильно нелинейными и для их исследования следует применять методы теории нелинейных колебаний [7]. С учетом сказанного выше уже простейшие термохимические процессы описываются системой из двух обыкновенных дифференциальных уравнений (см. (I.I): одно уравнение химической кинетики и одно уравнение теплового баланса). При этом в зависимости от начальных условий и вида правых частей (I.I) (т.е. в зависимости от типа реакции и динамики изменения поглощательной способности) система мо-

жет переходить либо в стационарное состояние ( $du/dt = 0$ ,  $dT/dt = 0$ ), либо в автоколебательный режим.

Разнообразие динамических режимов резко возрастает при увеличении числа каналов реакции. Уже при наличии двух каналов (в (II) - два независимых уравнения химической кинетики и одно уравнение для температуры) возможно появление сложных аperiodических режимов, связанных с появлением странных аттракторов [8]. Очевидно, что воздействие даже малых доз лазерного излучения на такие системы может быть чрезвычайно сильным.

Таким образом, мы видим, что химические процессы в поле лазерного излучения отличаются весьма сложным динамическим поведением даже в точечных системах. В действительности приближение "точечной системы" далеко не всегда является удовлетворительным и необходимо учитывать зависимость параметров от координат. Это особенно ясно в случае систем с неустойчивостью, где темп нарастания скорости реакции в разных точках сильно отличается. В результате этого могут возникать, в частности, стационарные и нестационарные неоднородные пространственные распределения продуктов реакции и т.д. [9].

Можно условно выделить два класса термохимических процессов в распределенных системах. К первому классу относятся гетерогенные процессы, где считается, что химические реакции идут преимущественно на границе раздела (например, на поверхности металла - окисление).

Соответствующая краевая задача имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{du_i}{dt} &= F_i(u_1, \dots, u_n; T), & u_i|_{t=0} &= u_{ni} \\ \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} &= \Delta T, & T|_{t=0} &= T_n \\ -\kappa \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_S &= I \cdot A(\bar{n}; u_1, \dots, u_n, T) + I_R(u_1, \dots, u_n, T) - I_{\text{пот}}(T). \end{aligned} \quad (\text{I.2})$$

Здесь  $\alpha$  и  $\kappa$  - коэффициенты температуро- и теплопроводности,  $I$  - интенсивность излучения,  $S$  - поверхность вещества,  $\partial T / \partial n|_S$  - производная по нормали к поверхности, поглощательная способность  $A$  в общем случае зависит также и от угла падения излучения на поверхность вещества;  $I_{\text{пот}}(T)$  - интенсивность теплопотерь, которая в общем случае складывается из конвективных и радиационных потерь:

$$I_{\text{пот}}(T) = \eta (T - T_n) + \sigma_0 \sigma (T^4 - T_n^4), \quad (1.3)$$

$\sigma_0$  - степень черноты,  $\sigma$  - постоянная Стефана-Больцмана,  $\eta$  - константа конвективного теплообмена,  $T_n$  - начальная температура среды;  $I_R(u_1, \dots, u_n, T)$  - тепловой эффект реакции. Отметим, что в данной задаче поглощение излучения учитывается в граничном условии к уравнению теплопроводности. Значение же интенсивности излучения может зависеть от координаты (в частности, в затененных участках  $I(\vec{r}) = 0$ ).

Ко второму классу термохимических процессов относятся процессы в гомогенных системах. При этом излучение поглощается в объеме системы и четко выделенной границы раздела компонентов реакции нет. Динамика таких процессов описывается системой уравнений химической кинетики (с учетом диффузии компонентов), теплопроводности и уравнений Максвелла, описывающих изменение состояния лазерного пучка в среде по мере протекания реакции. При исследовании этого класса процессов были обнаружены многие интересные явления, в частности, явления "химической" самофокусировки излучения, деления пучка на "нити" и т.д. [1, 2, 10].

К настоящему моменту было выполнено значительное число исследований специального класса систем нелинейных уравнений диффузионного типа

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = \sum_j \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} (D_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_k}) + Q_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1.4)$$

где источники  $Q_i$  и матрица коэффициентов диффузии  $D_{ij}$  являются функциями от  $u_1, \dots, u_n$  (см., например, [11, 12] и цитированную там литературу).

Уравнения такого типа появляются при моделировании ряда процессов в биологии, физике плазмы, физике горения и т.д. Важной особенностью таких систем является образование диссипативных структур (пространственно-временное упорядочение) в результате совместного действия нелинейных источников и диссипативных процессов [11-15]. Особую группу процессов составляют режимы с обострением, т.е. такие режимы, когда одна или несколько величин за конечное время  $t_f$  неограниченно возрастают. При этом решение существует в интервале  $0 \leq t < t_f$ .

Режимы с обострением могут возникать в системах, описываемых одним нелинейным уравнением теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \text{div} [\kappa(T) \text{grad } T] + Q(T), \quad (1.5)$$

последнее уравнение иногда называют моделью тепловых структур. Основные закономерности формирования структур в модели (1.5) были выяснены на примере степенных нелинейностей  $\kappa(T) = \kappa_0 T^\beta$ ,  $Q(T) = Q_0 T^\beta$ ,  $\kappa_0, Q_0 > 0, \beta > 1$  [12, 16, 17]. Важнейшей особенностью таких структур является свойство локализации: существует расстояние  $L_f$ , начиная с которого удаленные одна от другой и от границ системы на  $L_f$  отдельные структуры практически не влияют друг на друга и не зависят от краевых условий.

Тепловые структуры описываются автомодельными решениями уравнения (1.5) вида  $T(\bar{x}, t) = q(t) f(\bar{x}/\varphi(t))$ ,  $q(t) \xrightarrow[t \rightarrow t_f]{\infty}$ . Здесь функция  $q(t)$  характеризует закон изменения амплитуды,  $\varphi(t)$  — полуширины решения, функция  $f$  определяет форму решения. Если  $\varphi(t) \rightarrow 0, t \rightarrow t_f$  (а),  $\varphi(t) \rightarrow \text{const}, t \rightarrow t_f$  (б) и  $\varphi(t) \rightarrow \infty, t \rightarrow t_f$  (в), то говорят, что реализуются, соответственно, LS (а), S (б) и HS (в) — режимы с обострением. Этим режимам соответствуют диапазоны параметров  $\beta$  и  $\beta$ : (а)  $\beta > \beta + 1$ , (б)  $\beta = \beta + 1$  и (в)  $\beta < \beta + 1$ . В HS — режиме локализованных структур нет и в среде распространяются тепловые волны растущей амплитуды.

Помимо этого механизма локализации тепла (связанного с конкуренцией нелинейного источника и нелинейной теплопроводности) исследован и другой механизм, обусловленный наличием стоков — отрицательных слагаемых в  $Q(T)$  [18, 19].

В нелинейной среде могут возникать простые и сложные структуры. Простой структуре соответствует решение, у которого функция  $f$  имеет один максимум. Сложные структуры представляют собой сходящиеся к общему центру волны горения. Этим решениям соответствует функция  $f$ , имеющая несколько экстремумов [12, 17].

Полученные результаты были обобщены на многомерный случай [20, 21], на пространственно неоднородные системы [22], на многокомпонентные системы [23]. Было показано также, что локализованные структуры различных типов могут возникать и в случаях, когда режимов с обострением нет (в частности, в средах с триггерными свойствами [24]). Наконец, исследование модели тепловых структур и ее обобщений позволило развить новые математические методы [25, 26].

Некоторые результаты и методы этих работ могут быть перенесены в область лазерной термхимии. Однако, для анализа ряда термо-

химических процессов в поле ИК-излучения необходима разработка принципиально новых подходов или значительные модификации существующих. Это связано с двумя особенностями: во-первых, при описании гетерогенных термохимических процессов источники входят не в уравнения, а в граничные условия (излучение поглощается на границе раздела "газ - твердое тело"), а во-вторых, для инициирования ряда процессов используется пучок излучения, размеры которого малы по сравнению с размерами системы. Тем самым в задачу явно вводится пространственная неоднородность, т.е.  $D_{ij}$  и  $Q_i$  явно зависят от координат; при этом симметрия исходной задачи оказывается более низкой. В итоге динамические режимы неоднородной и однородной систем (I.4) (в том смысле, как это сказано выше) могут сильно отличаться.

Поскольку аналитическое решение уравнений вида [I.4] может быть получено лишь в простейших случаях, то исследование большинства проблем в лазерной термохимии требует самого широкого привлечения современных численных методов [27,28]. На наш взгляд только соединение качественного анализа и вычислительного эксперимента позволит построить теорию термохимических процессов в распределенных системах в поле лазерного излучения.

Данная работа посвящена исследованию нагрева металлической пластины ограниченным пучком лазерного излучения. При ее нагреве в воздухе на поверхности будет образовываться окисная пленка, которая может испаряться (такая ситуация характерна, например, для вольфрама и молибдена).

Динамика соответствующей точечной системы обсуждалась в [2,29], где было показано, что в результате конкуренции роста и испарения окисла система может (в зависимости от мощности излучения и массы мишени) переходить либо в стационарное состояние, либо в автоколебательный режим горения.

## 2. Постановка задачи

В общем случае задача лазерного нагрева металлической мишени излучением описывается уравнением теплопроводности с граничными условиями на всех поверхностях. Однако, в частном случае термически тонкой пластины  $h^2 \ll \alpha \tau$ ,  $h$  - толщина пластины,  $\tau$  - характерное время изменения температуры,  $\alpha$  - коэффициент теплопроводности краевая задача упрощается. Для круглой пластины радиуса  $R$  имеем



$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial z} \left( z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{\kappa h} \left[ A I_0 e^{-\frac{z^2}{z_0^2}} + \frac{\rho \omega d_0}{X} e^{-\frac{T_d}{T}} - \rho L v_0 e^{-T_v/T} - I_{\text{пот}}(T) \right] \quad (2.1)$$

$$\frac{dX}{dt} = \frac{d_0}{X} e^{-T_d/T} - v_0 e^{-T_v/T}, \quad T|_{t=0} = T_H, \quad X|_{t=0} = X_H$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=R} = 0.$$

Условие при  $z=R$  отвечает теплоизоляции. В уравнении для толщины  $X$  окисного слоя первое слагаемое описывает рост, а второе - испарение окисла ( $d_0$ ,  $T_d$  и  $v_0$ ,  $T_v$  - соответствующие константы),  $\rho$  - плотность окисла,  $\omega$  - удельная теплота реакции окисления,  $L$  - теплота сублимации окисла,  $\kappa$  - коэффициент теплопроводности мишени, а интенсивность теплотеря дается формулой (1.3) (в дальнейшем для упрощения расчетов пренебрежем радиационными теплотерями и примем  $T_H = 0$ , что не меняет качественных результатов). Распределение интенсивности излучения по поверхности мишени записано в гауссовском виде

$$I(z) = I_0 \exp(-z^2/z_0^2),$$

где  $I_0$  и  $z_0$  - константы, характеризующие интенсивность и характерный радиус пучка. Считаем, что поглощательная способность мишени меняется незначительно  $A(T, X) = A$ .

В системе уравнений (2.1) удобно перейти к новым переменным

$$\begin{aligned} t_1 &= \frac{\alpha t}{z_0^2}, & z_1 &= \frac{z}{z_0}, & T_1 &= \frac{T}{T_d} \\ x &= \frac{T_v}{T_d}, & \alpha &= \frac{\rho \omega d_0 z_0^2}{\kappa h T_d}, & \beta &= \frac{\rho L v_0 z_0^2}{\kappa h T_d}, & \delta &= \frac{\eta z_0^2}{\kappa h} \\ \gamma &= \frac{v_0 z_0^2}{\alpha}, & d &= \frac{d_0 z_0^2}{\alpha}, & I &= \frac{A I_0 z_0^2}{\kappa h T_d}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Отбрасывая в дальнейшем индекс "1", перепишем (2.1) в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial z} \left( z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + I e^{-z^2} + \frac{\alpha}{X} e^{-x/T} - \beta e^{-z/T} - \delta T \\ \frac{dX}{dt} &= \frac{d}{X} e^{-x/T} - \gamma e^{-z/T} \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=R} = 0, \quad T \Big|_{t=0} = 0, \quad X \Big|_{t=0} = 0.$$

Как известно [11], для исследования поведения системы с диффузией необходимо изучить соответствующую точечную систему, урав-

нения для которой в нашем случае мы запишем (для  $\tau = 0$ ) следующим образом:

$$\frac{dT}{dt} = I + \frac{\alpha}{X} e^{-1/T} - \beta e^{-\alpha/T} - \delta T \quad (2.4)$$

$$\frac{dX}{dt} = \frac{d}{X} e^{-1/T} - \gamma e^{-\alpha/T}$$

Стационарные состояния системы (2.4) определяются точками пересечения нуль-изоклин:

$$X = f(T) \equiv \alpha \exp(-1/T) \cdot [\beta \exp(-\alpha/T) + \delta T - I]^{-1} \quad (2.5)$$

$$X = g(T) \equiv \frac{d}{\gamma} \exp\left(\frac{\alpha-1}{T}\right).$$

Наибольший интерес представляет случай, когда нуль-изоклина  $X = f(T)$  имеет  $N$ -образный вид, а  $X = g(T)$  - возрастающая функция ( $\alpha < 1$  или  $T_d > T_v$ ).

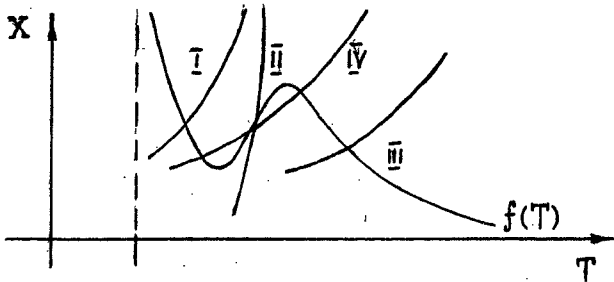


Рис. 2.1

На рис. 2.1 представлены типичные взаимные расположения изоклин  $f(T)$  и  $g(T)$  (линии I-IV).

Отметим, что кривая  $X = f(T)$  имеет  $N$ -образный вид, если  $I < F(T_m)$ ,  $F(T) = \beta(1-\alpha)e^{-\alpha/T} + \delta T(1-T)$ , (2.6) где  $T_m$  - точка максимума  $F(T)$ .

При этом имеется область, где  $df/dT > 0$ ; нетрудно проверить, что при малых  $T$  (возле полюса  $f(T)$ ), и при больших  $T$  функция  $f(T)$  убывает.

Как известно [30], пересечением изоклин I, III на рис. 2.1 отвечает "жудий", пересечение IV - триггерный режимы. Если  $T$  - "быстрая" переменная (т.е. величины  $I, \alpha, \beta, \delta$  - достаточно велики), то пересечение II нуль-изоклин на рис. 2.1 отвечает автоколебательный режим поведения системы (единственная точка пересечения неустойчива). При уменьшении же  $I, \alpha, \beta, \delta$  (или, что то же, толщины пластики  $h$ ; см. (2.2)), точка пересечения

может стать устойчивой, что отвечает отсутствию автоколебаний. При неоднородном распределении излучения в системе могут быть представлены все четыре случая пересечения нуль-изоклин одновременно (в разных точках). Это обстоятельство и обуславливает специфику рассматриваемой задачи.

### 3. Формирование стационарных структур

Пусть в фазовой плоскости системы (2.4) есть только одна устойчивая точка-фокус или узел с координатами  $X^*$ ,  $T^*$ . Поведение решений (2.4) при малых  $X$ ,  $T$  и на бесконечности таково, что при любых начальных данных должен происходить выход функций  $X$  и  $T$  на значения  $X^*$ ,  $T^*$ .

Посмотрим, как будут идти процессы в системе, описываемой уравнениями (2.3).

1. Начальная стадия процесса. Типичная картина начальной стадии представлена на рисунках 3.1 а, б, в. В системе есть два характерных времени. Первое  $T_T$  - время формирования поля температур. Когда  $t > T_T$ , поле температур практически не меняется (см. рис. 3.2). Толщина окисла вблизи оси симметрии при этом растет по закону, близкому к параболическому (см. рис. 3.2). Обратим внимание на то, что полуширина распределения окисла при росте его толщины практически не меняется. Видим также, что существует характерный для данной системы размер  $L_T$  порядка радиуса пучка (см. рис. 3.1, г), такой что при  $z > L_T$  толщина окисла остается почти такой же, как в начальный момент, а температура практически не отличается от той, которая была бы в отсутствие излучения.

2. Формирование диссипативной структуры. Второе характерное время в рассматриваемом случае - это время формирования слоя окисла  $T_X$ . Когда  $t > T_X$ , толщина слоя  $X$  в центре практически не меняется. Распределение параметров системы при этом близко к стационарному. Его типичный вид представлен на рисунке 3.3. Расчеты показывают, что с увеличением длины области и изменением начального профиля температуры это распределение (в пределах области  $L_T$ ) не меняется.

Такой процесс в определенном смысле можно рассматривать как формирование диссипативной структуры [31], то есть структуры, возникновение упорядоченности в которой связано с действием диссипативных процессов в термодинамически открытой системе [31].

При этом диссипация обусловлена процессами теплопроводности, как и в случае других диссипативных структур - детали начальных данных оказываются "забытыми" системой.

Возникающая структура оказывается эффективно локализована. Поясним последнее. Описывая процессы с характерными временами  $\tau_x$ , мы часто пользовались словами "практически не меняется" в отношении пространственных распределений  $T$  и  $X$ . Это означало следующее. Пусть в вычислительном или натурном эксперименте мы можем измерить температуру и толщину окисла с точностью  $\epsilon$ . Если мы увеличивали длину образца  $R > L_T$  и профили  $T$  и  $X$  менялись не более, чем на  $\epsilon$ , мы и говорили, что распределения практически не меняются (в качестве  $\epsilon$  в расчетах удобно взять значения  $0,01 \bar{X}(\tau_x)$ ,  $0,01 \bar{T}(\tau_x)$ , где  $\bar{X}$  и  $\bar{T}$  - толщина окисла и температура в отсутствие излучения). Эффективно локализовано не только влияние краевых условий, но и возникающих структур друг на друга. Если у нас есть два одинаковых луча, оси которых находятся на расстоянии  $2L_T$ , то обе возникающие структуры не более чем на  $\epsilon$  будут отличаться от случая, когда луч один.

Отметим, что аналогичные определения эффективной локализации вводились при исследовании диссипативных структур в двухкомпонентных средах с триггерными свойствами, где были также получены оценки области эффективной локализации. Эти среды описываются уравнениями вида (1.4).

Процессы оказываются эффективно локализованы и на начальной стадии процесса. Здесь, по-видимому, могут быть использованы методы и представления, развитые при исследовании модели тепловых структур (1.5).

**3. Особенности эффективной локализации.** Допустим, что толщина окисла постоянна и равна  $X_0$ . В отсутствие излучения температура образца будет равна  $T_0$ . Когда есть лазерное излучение, то  $T(z, t) \rightarrow T_0$ , причем выход на фон происходит с высокой точностью уже на расстоянии  $L_T$ . Чтобы понять причину этого, linearизуем первое уравнение в окрестности решения  $T = T_0$ . Мы увидим, что его правая часть оказывается эквивалентной стoku (т.е. с увеличением координаты  $z$  отклонение  $\Delta T$  от значения  $T_0$  будет уменьшаться). Поскольку коэффициент при линейном члене остается ненулевым,  $\Delta T$  убывает с ростом  $z$  по закону, близкому к экспоненциальному. Следовательно, и в случае окисла постоянной толщины должна иметь место эффективная локализация по-

ля температур (та же ситуация имела место в [18,19]) . Приближенные окисла постоянной толщины хорошо работает на начальной стадии при  $t < \tau_T$  и на временах  $\sim \tau_X$  при  $z > L_T$  (см. рис. 3.1,3.3)

Пусть теперь нам дано постоянное поле температур, зависящее от координаты  $z$ ,  $T(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} T_0$ . Выясним, как при этом будет меняться толщина окисла. Согласно второму уравнению в (2.3), скорости окисления и испарения в интересующем нас диапазоне параметров могут на много порядков возрастать при увеличении температуры в несколько раз. В результате за время  $t \sim \tau_X$  в пределах области  $L_X$ , где температура достаточно сильно отличается от  $T_0$ , функция  $X(z, t)$  быстро растет, выходя на стационарное значение. В остальной части пространства она меняется медленно.

Это приводит к следующему. Если отключить лазерное излучение в момент  $t_1$ , то в течение длительного времени  $\bar{T} = \kappa \tau_X$ ,  $\kappa \gg 1$  профиль функции  $X$  будет близок к тому, который был сформирован к моменту  $t_1$ . То есть, изучаемая среда обладает "памятью": мы можем записать на ее поверхности некоторую информацию и "хранить" ее в течение времени  $\kappa \tau_X$ . В пределе же при  $t \rightarrow \infty$  распределение  $X(z, t)$  станет, естественно, стационарным и пространственно-однородным.

4. Случай триггерных свойств динамической системы. Пусть у динамической системы (2.4) есть две устойчивых особых точки (фокусы или узлы)  $\{X^*, T^*\}$ ,  $\{X^{**}, T^{**}\}$ . Тогда из теории индекса [7] следует, что при этом есть по крайней мере еще одна простая особая точка, которая является седлом. Вид изоклин, соответствующих этому случаю, показан на рис. 3.4 (кривые  $g_1$ ,  $f_1$ ). При этом с одного класса начальных данных происходит выход на одно устойчивое состояние равновесия, с другого класса - на другое. То есть, система обладает триггерными свойствами. Посмотрим, как ведут себя решения задачи (2.3) в этом случае.

На рис. 3.5 представлено распределение, на которое происходит выход в этом случае. Здесь в окрестности оси симметрии значения температуры и толщины окисла близки к  $X^*$ ,  $T^*$  (здесь  $X^* < X^{**}$ ,  $T^* < T^{**}$ ) и оумещует характерное расстояние  $L_T$ , на котором действие лазерного луча эффективно локализовано. В отличие от предыдущих расчетов, начальные данные здесь таковы, что функция  $X(z, t)$  немонотонна по пространству.

Пусть теперь начальное распределение однородно по пространству и близко к значениям  $X^{**}$ ,  $T^{**}$ . Естественно было бы ожидать,

что произойдет выход на стационарное решение, в котором

$$T(0, t) \approx T^{**}, \quad X(0, t) = X^{**}.$$

В проведенных расчетах при значениях параметров, указанных на рисунке 3.5, наблюдается совершенно другая картина. Распределение температуры оказывалось таким же, как в предыдущем случае. Можно указать характерный размер  $L_x$ ,  $L_x < L_T$ , в пределах которого близки и профили окисла. На больших расстояниях от лазерного луча  $\tau \gg 1$   $X \rightarrow X^{**}$ .

Таким образом, когда динамическая система обладает триггерными овойствами, ее свойства оказываются близки к случаю, когда в фазовой плоскости есть единственная устойчивая особая точка: действие лазерного излучения оказывается эффективно локализовано в пределах области радиуса  $L_T$ . Лазерный луч в зависимости от начальной толщины слоя окисла может приводить как к увеличению, так и к уменьшению толщины последнего.

5. Об автоволновых процессах в системе. Рассмотрим случай, когда в фазовой плоскости системы (2.4) есть одна особая точка — неустойчивый узел или фокус и когда асимптотику решений определяет устойчивый предельный цикл. Исследуем поведение системы (2.3) для этого случая.

Начнем со случая термически малого объема, для исследования которого достаточно рассмотреть поведение динамической системы (2.4). Параметры динамической системы приведены на рис. 3.6. Здесь в первом уравнении мы пренебрегаем членами, которые связаны с поглощением теплоты при испарении окисла. Вид изоклин показан на рис. 3.4 (кривые  $f_1$ ,  $g_2$ ). Для решений этой динамической системы характерно следующее поведение: существует большой участок ( $0 < t < 20$ , см. рис. 3.5), где температура практически постоянна, и быстрый, где она возрастает более чем в 5 раз ( $20 < t < 30$ ). Можно сказать, что имеем здесь дело с релаксационными колебаниями. Обратим внимание на то, что коэффициенты первого уравнения примерно в  $M = 10$  раз больше, чем второго. Множитель  $M$  определяется толщиной образца. С ее уменьшением этот множитель возрастает и колебания становятся все ближе к разрывным, свойства которых подробно обсуждались в ряде работ [7, 8, 29]. С уменьшением  $M$  колебания приближаются к гармоническим. При малых  $M$  точка  $A$  становится устойчивой.

Рассмотрим теперь пример численного решения задачи в частных производных (2.3) (см. рис. 3.7). За времена, меньше  $t_1$ , рас-

пределение температуры становится немонотонным. От центра распространяется тепловая волна ( $t < t_c$ ), при этом температура в центральной области падает. Фронт распределения окисла все это время близок к фронту тепловой волны. Когда тепловая волна доходит до границы, ее амплитуда нарастает, толщина окисла во всей области становится постоянной ( $t = t_g$ ), далее температура уменьшается.

Длительное время профили, сформировавшиеся к моменту  $t_7$ , практически не меняются ( $t_g - t_7 \gg t_7$ ).

Затем в центральной области окисел начинает испаряться. Температура возрастает и далее меняется слабо. От центра при этом начинает двигаться волна, за фронтом которой толщина окисла уменьшается более чем в 10 раз (см. рис. 3.7). Характерные времена этого процесса по крайней мере на два порядка превышают время прохождения тепловой волны в начале процесса. Одновременно с движением рассматриваемой волны окисла его толщина в центре начинает медленно возрастать.

Таким образом, в переходном режиме по всему образцу распространяется тепловая волна. Далее, по истечении переходного режима, устанавливаются локализованные автоколебания: в пределах области порядка радиуса пучка температура вещества и толщина окисла меняются периодически со временем, тогда как вне этой области  $T$  и  $X$  практически постоянны.

#### 4. Заключение

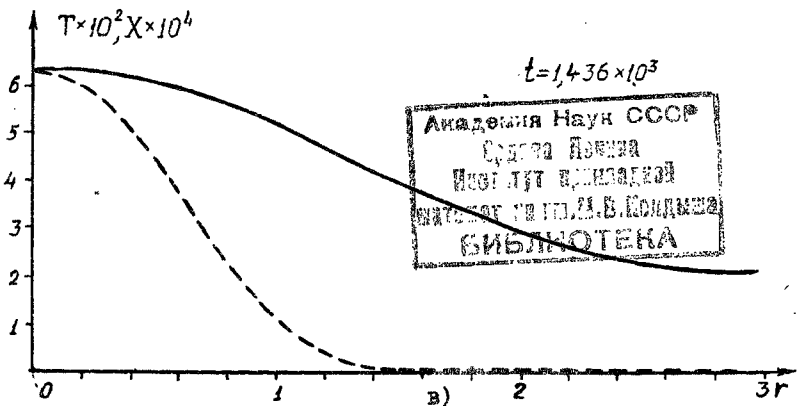
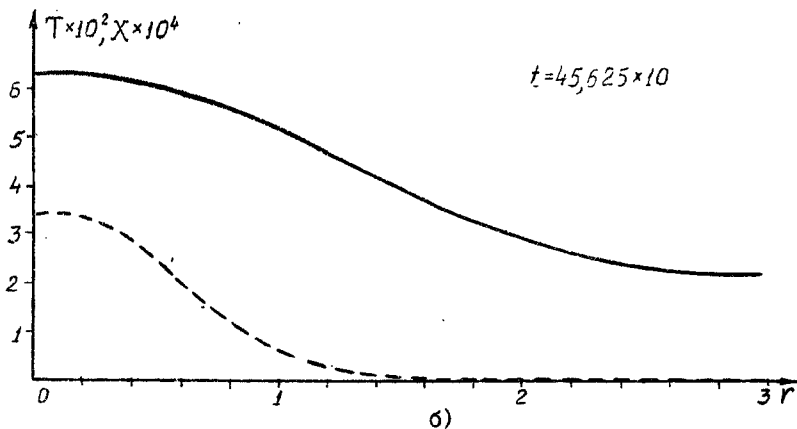
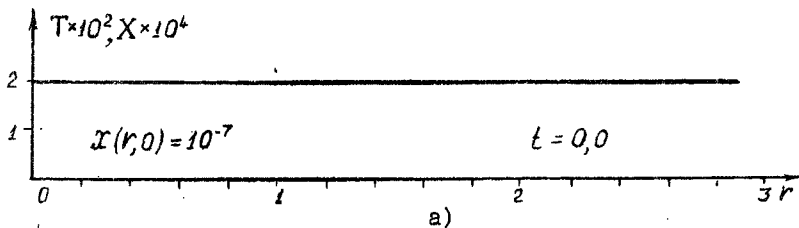
Как показали проведенные расчеты, динамика лазерного нагрева воспламеняющегося металла может быть весьма сложной: в зависимости от параметров мишени и излучения в системе либо формируются стационарные структуры с немонотонными распределениями параметров (например, толщины окисла), либо устанавливаются нестационарные автоволновые процессы со сложными переходными режимами. Существенно, что все эти режимы реализуются при простейших внешних воздействиях — в поле непрерывного лазерного излучения.

Что касается экспериментального наблюдения обнаруженных особенностей лазерного нагрева, то для случая точечных систем (эффекты теплопроводности несут существенны) все основные динамические режимы системы (2.4) рис. 2.1 — ждущий, триггерный, автоколебательный — были найдены при нагреве вольфрамовых мишеней излучением непрерывного  $\text{CO}_2$ -лазера в [2, 29]. Экспериментальное исследование распределенных систем представляет большие трудности. Однако, ис-

следования показали, при лазерном нагреве тонких, но широких пластинок из вольфрама и молибдена могут устанавливаться локализованные колебания температуры, подобные найденным численно в настоящей работе.

В заключение следует подчеркнуть, что здесь мы привели лишь один важный пример автоволновых процессов в лазерной термохимии, исследование которых имеет большое научное и практическое значение.





Академия Наук СССР  
 Сергей Павлович  
 Королёв  
 Институт космической  
 техники им. С.П. Королёва  
 Библиотека

Рис. 3.1. Начальная стадия процесса.

$$T_t = \frac{1}{2} (2T_z)_z + 0,1 e^{-z^2/2,25} - 2e^{-1/T} \cdot 10^{-3}/X - e^{-1,5/T} - T$$

$$X_t = 10^{-3} \cdot e^{-1/T}/X - e^{-1,5/T}$$

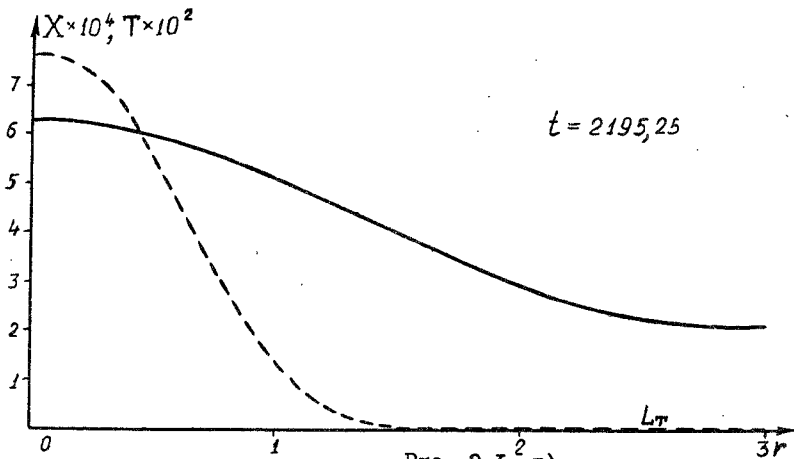


Рис. 3.1. г)

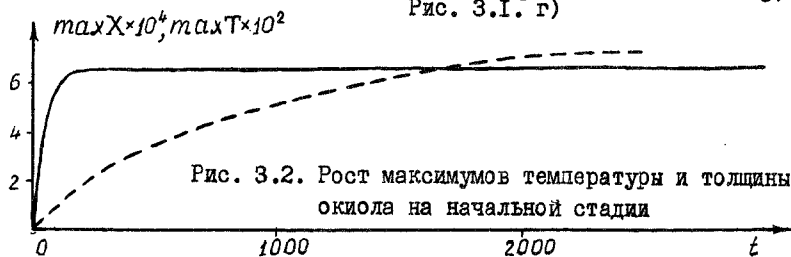


Рис. 3.2. Рост максимумов температуры и толщины окиола на начальной стадии

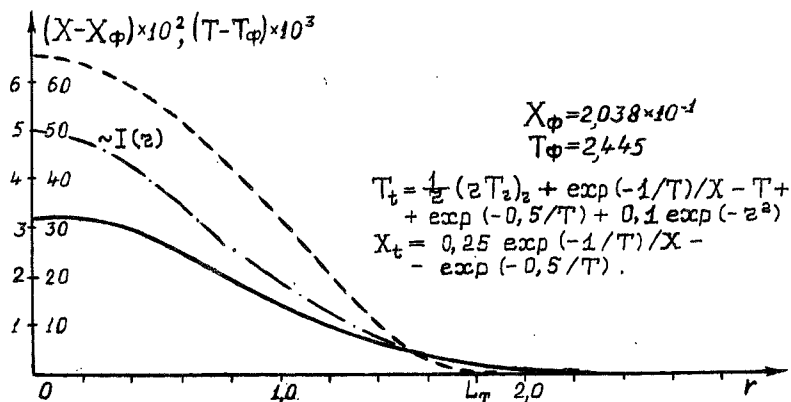


Рис. 3.3. Типичный вид стационарного распределения параметров в области эффективной локализации процесса.

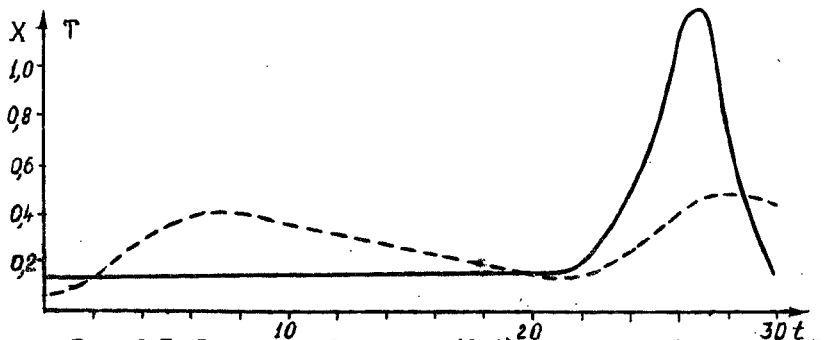
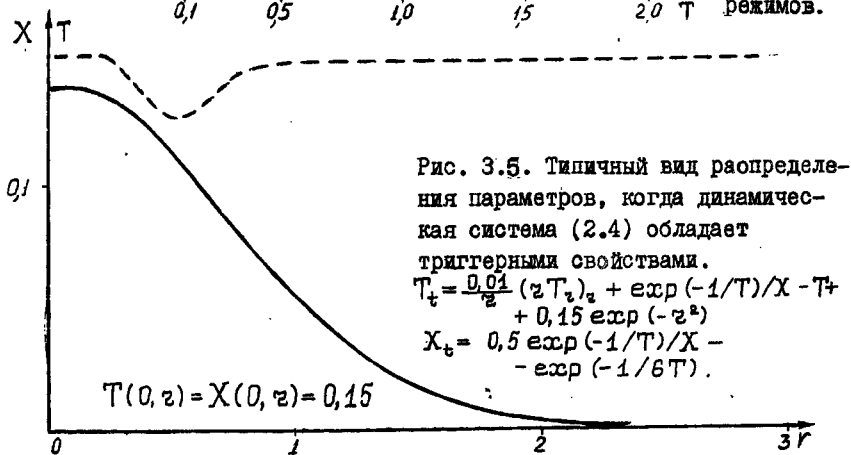


Рис. 3.5. Вид решений системы (2.4), когда в ней есть устоявшийся предельный цикл.

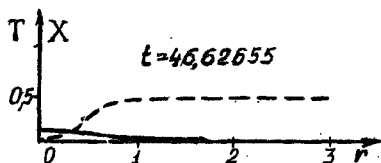
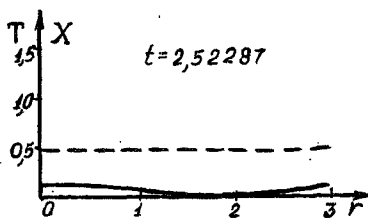
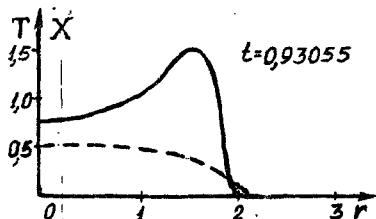
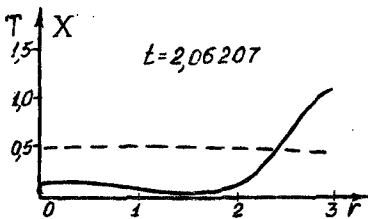
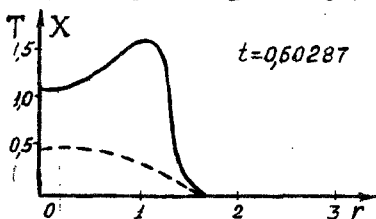
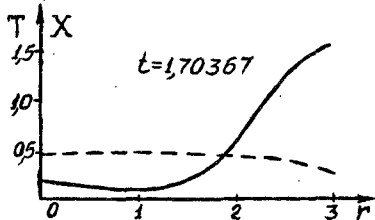
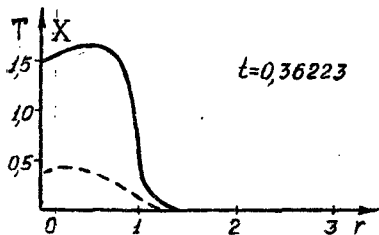
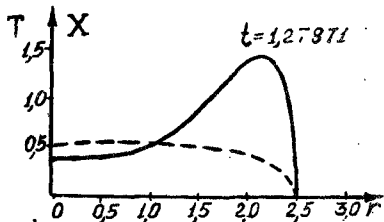
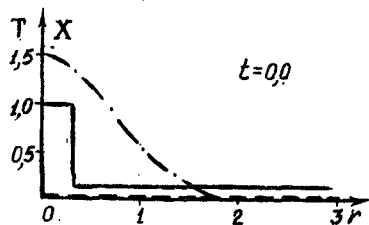


Рис. 3.7. Простейшие автоволновые процессы, возможные в изучаемой системе.

$$T_t = \frac{0,1}{2} (2T_2)_t + 10 \cdot (e^{-1/T} / X + 0,15 - T)$$

$$X_t = 0,894 e^{-1/T} - e^{-0,6/T}$$

1. Ф.В. Бункин, Н.А. Кириченко, Б.С. Лукьянчук. УФН, 138, 45, 1982.
2. Ф.В. Бункин, Н.А. Кириченко, Б.С. Лукьянчук, Изв. АН СССР, Сер. физическая, 46, 1150, 1982.
3. Ф.В. Бункин, Н.А. Кириченко, Б.С. Лукьянчук, А.Н. Сапецкий. Поверхность. № 6, 98, 1982.
4. Ф.В. Бункин, Н.А. Кириченко, И.В. Краснов, Б.С. Лукьянчук, Н.Я. Шапарев, И.М. Шкедов. ДАН СССР, 256, 848, 1981; 268, 598, 1982.
5. Н.В. Карлов, Б.К. Карлова, Н.А. Кириченко, Б.С. Лукьянчук, О.В. Неклюдова, И.Я. Равич, А.Н. Сапецкий, Т.Н. Торопцева. Квантовая электроника, 9, 2049, 1982.
6. Ф.В. Бункин, Н.А. Кириченко, Б.С. Лукьянчук. Квантовая электроника, 7, 2658, 1980.
7. А.А. Андронов, А.А. Витт, С.Э. Хайкин. Теория колебаний, Наука, М., 1981.
8. Н.В. Бутенин, Ю.И. Неймарк, Н.А. Фурфурев. Введение в теорию нелинейных колебаний, Наука, М., 1976.
9. Ф.В. Бункин, Н.А. Кириченко, Б.С. Лукьянчук. Тез. докл. III Всесоюз. симпозиума по лазерной химии, с. 41, Звенигород, 1982.
10. Н.А. Кириченко. Препринт ФИАН СССР, № 196, М., 1982.
11. Сб.: "Автоволновые процессы в системах с диффузией", ИИФ АН СССР, Горький, 1981.
12. С.П. Курдюмов. В сб.: "Современные проблемы математической физики и вычислительной математики", Наука, М., 1982.
13. Г. Николис, И. Пригожин. Самоорганизация в неравновесных системах, Мир, М., 1979.
14. Г. Хакен. Синергетика. Мир, М., 1980.
15. С.П. Курдюмов, Г.Г. Малинецкий. Синергетика - теория самоорганизации. Идеи, достижения, перспективы. Знание, М., 1983.
16. А.А. Самарский, Н.В. Змитренко, С.П. Курдюмов, А.П. Михайлов, ДАН СССР, т. 227, с. 321, 1976.
17. А.А. Самарский, Г.Г. Еленин, Н.В. Змитренко, С.П. Курдюмов, А.П. Михайлов. ДАН СССР, т. 237, с. 1330, 1977.
18. Л.К. Мартинсон, К.Б. Павлов. ЖВМ и МФ, т. 12, с. 1048, 1972.
19. А.С. Калашников. ЖВМ и МФ, т. 14, с. 891, 1974.
20. С.П. Курдюмов, Г.Г. Малинецкий, Ю.А. Повещенко, Ю.П. Попов, А.А. Самарский. ДАН СССР, т. 251, с. 836, 1980.

21. С.П. Курдюмов, Е.С. Куркина, А.Б. Потапов. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР, 1982, № 75.
22. С.П. Курдюмов, Е.С. Куркина, Г.Г. Малинецкий, А.А. Самарский. ДАН СССР, т. 251, с. 587, 1980.
23. С.П. Курдюмов, Е.С. Куркина, Г.Г. Малинецкий, А.А. Самарский. ДАН СССР, т. 258, с. 1084, 1981.
24. С.П. Курдюмов, Г.Г. Малинецкий, Ю.А. Повещенко, Ю.П. Попов, А.А. Самарский. Диф. уравнения, т. 17, с. 1875, 1981.
25. В.А. Галактионов, С.П. Курдюмов, А.П. Михайлов, А.А. Самарский. Диф. уравнения, т. 17, с. 1826, 1981.
26. В.А. Галактионов, А.А. Самарский. Математический сборник, т. 118 160, с. 291-322, 435-455, 1982г.; т. 120 162, с. 3-21, 1983г.
27. А.А. Самарский. Введение в теорию разностных схем. Наука, М., 1971.
28. А.А. Самарский, Е.С. Николаев. Методы решения сеточных уравнений. Наука, М., 1978.
29. В.А. Бобырев, Ф.В. Бункин, Н.А. Кириченко, Б.С. Лукьянчук, А.В. Симакин. Тез. докл. XI Всесоюз. конфер. по когерентной и нелинейной оптике. Ереван, 1982, с. 690.
30. В.А. Васильев, Д.М. Романовский, В.Г. Яхно. УФН, т. 128, с. 625, 1979.
31. В. Эбелинг. Образование структур при необратимых процессах. Мир, М., 1979.
32. Г.Г. Малинецкий. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР, 1981, № 78.