

© П.В. БРЕСЛАВСКИЙ, В.И. МАЖУКИН, А.А. САМОХИН

О ГИДРОДИНАМИЧЕСКОМ ВАРИАНТЕ ЗАДАЧИ СТЕФАНА ДЛЯ ВЕЩЕСТВА В МЕТАСТАБИЛЬНОМ СОСТОЯНИИ

(Представлено академиком А.А. Самарским 17 VII 1991)

Теоретическое описание динамики фазовых превращений первого рода в общем случае является достаточно сложной задачей. Новые проблемы, связанные с фазовыми переходами, возникли при исследовании импульсного воздействия концентрированных потоков энергии на конденсированные среды. Характер фазовых превращений в этих условиях определяется в первую очередь возникновением метастабильных состояний, проявляющихся, например, в кратковременном перегреве твердой фазы при плавлении и в переохлаждении жидкой при кристаллизации. Теоретическое рассмотрение динамики фазовых превращений первого рода с неизбежностью приводит к различным вариантам задачи Стефана [1].

Классический вариант задачи Стефана, сформулированный еще в прошлом веке для фазовых переходов типа плавления или затвердевания, сводится к уравнению теплопроводности в области с заранее неизвестной подвижной границей Γ_{sl} , разделяющей твердую s и жидкую l фазы. На межфазной границе выполняются так называемое дифференциальное условие Стефана

$$(1) \quad \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = L_m \rho_s v_{sl}$$

и условие, налагаемое на температуру на этой границе. В задачах плавления или кристаллизации чистого вещества принимается, что температура на границе раздела фаз непрерывна и равна равновесной температуре перехода T_m , которая обычно полагается постоянной величиной:

$$(2) \quad T_s = T_l = T_m.$$

В общем случае значение температуры T_m не является постоянным. Изменение ее может быть обусловлено, например, изменением внешнего давления p , скоростью движения фронта и другими факторами.

В случаях, когда физические условия допускают возникновение перегретых или переохлажденных состояний, применение классического варианта становится проблематичным по следующей причине. Известное [1] и широко используемое автомодельное решение для задачи о плавлении твердого полуограниченного образца, начальная температура которого T_{s0} превышает температуру плавления T_m , в начальный момент времени является нефизическим, поскольку скорость движения фазовой границы имеет зависимость $v_{sl} \sim at^{-1/2}$ и при $t \rightarrow 0$ обращается в бесконечность. Возникает закономерный вопрос: имеет ли в целом данное решение физический смысл или же оно является чисто математическим результатом. Отметим, что сингулярное поведение решения на малых временах требует внесения изменений в исходную математическую модель фазового перехода.

Описание динамики быстрых фазовых превращений может быть реализовано при различных модификациях соотношения (2). Вместо равенства (2), исходя из общей теории кинетики фазовых превращений [2, 3], выписывают условие, связанное с кинетикой фазового перехода:

$$(3) \quad v_{sl}(T) = C \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta G}{RT}\right)\right],$$

где C – константа, Q – энергия активации, ΔG – изменение свободной энергии. В математическом моделировании этот подход пока еще не получил широкого распространения и применялся [4, 5] в основном для описания процесса кристаллизации. Ограничения в кинетическом подходе в основном связаны с отсутствием надежного экспериментального подтверждения предлагаемых теоретических функциональных зависимостей для $v_{sl}(T)$ и используемых параметров Q и C [6–8].

В настоящей работе приводятся результаты математического моделирования динамики плавления сильно перегретого в исходном состоянии вещества. Такое состояние может быть реализовано в том случае, если процесс плавления начинается после прохождения волны разгрузки через быстро нагретый приповерхностный слой вещества. В используемой модели учитывается зависимость температуры плавления от давления p , которое связано с изменением плотности вещества при фазовом переходе и ограничивает скорость движения фронта плавления на начальном интервале времени.

Рассмотрим одномерный твердотельный стержень конечной длины L с начальной температурой T_{s0} , существенно превышающей равновесную температуру плавления T_m . Корректное математическое описание процесса плавления с учетом зависимости $T_m(p)$ требует привлечения, в отличие от классического варианта задачи Стефана, полной системы гидродинамических уравнений и уравнения энергии, описывающих перенос энергии и изменение скорости и плотности. Система уравнений имеет вид:

$$(4) \quad \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) = 0 \right]_i,$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2) = -\frac{\partial p}{\partial x} \right]_i,$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \left(E + \frac{u^2}{2} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho u \left(E + \frac{u^2}{2} \right) \right) = -\frac{\partial}{\partial x} (p u) + \frac{\partial}{\partial x} \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right]_i,$$

$$i = s, l,$$

$$x_0 < x < \Gamma_{sl}, \quad i = s,$$

$$\Gamma_{sl} < x < x_N, \quad i = l.$$

Граничные условия:

$$(5) \quad x = x_0: \quad u = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0;$$

$$x = x_N: \quad p = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0;$$

$$x = \Gamma_{sl}: \quad \rho_s v_{sl} = \rho_l (u_s - u_l + v_{sl}),$$

$$\rho_s v_{sl}^2 + p_s = \rho_l (u_s - u_l + v_{sl})^2 + p_l,$$

$$\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = L_m \rho_s v_{sl},$$

$$T_{sl} = T_m(p_s).$$

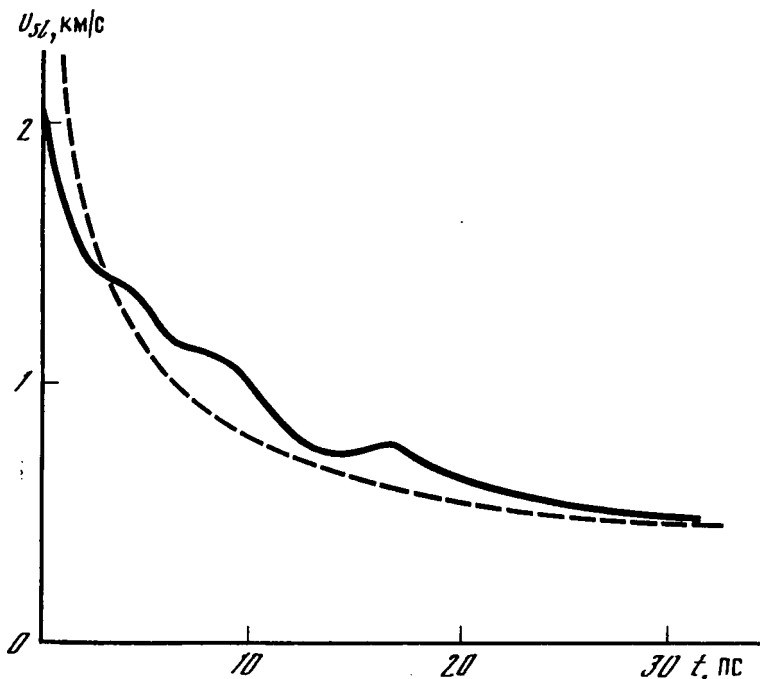


Рис. 1

Начальные условия:

$$(6) \quad \begin{aligned} i = s: & \quad u(0, x) = 0, \quad \rho(0, x) = \rho_s, \quad T(0, x) = T_{s0} > T_m; \\ i = l: & \quad u(0, x) = u_l, \quad \rho(0, x) = \rho_l, \quad T(0, x) = T_{s0}, \end{aligned}$$

где ρ , u , p — плотность, гидродинамическая скорость, давление; λ — теплопроводность, L_m — теплота плавления. Математическая задача (4) — (6) дополнялась соответствующими уравнениями состояния:

$$\begin{aligned} E_i &= (C_p T)_i; \\ p_s &= 3/2 P_{s0} (z^{7/3} - z^{5/3}) (1 + \alpha [z^{2/3} - 1]) + 3R\rho(T_{s0} - T) (\gamma + 4[z - 1]); \\ p_l &= P_{l0} (z - 1 + \beta [T - T_{s0}]), \quad z = \rho/\rho_i, \quad i = s, l, \end{aligned}$$

в которых C_p , R — теплоемкость и газовая постоянная, а P_{s0} , P_{l0} , α , β , γ — константы.

Для исследования использовался набор параметров, характерных для алюминия [9]: $T_m = 933,6$ К, $\rho_s = 2,7$ г/см³, $\rho_l = 2,382$ г/см³, $R = 0,30793$ Дж/(г · К), $P_{s0} = 7,27 \cdot 10^5$ бар, $P_{l0} = 10^5$ бар, $\alpha = 0,225$, $\gamma = 2,136$, $\beta = 3 \cdot 10^{-5}$ К⁻¹. В качестве функции $T_{sl} = T_m(p_s)$ взята экспериментальная зависимость [10], которая аппроксимировалась выражением

$$(7) \quad T_{sl} = T_m + 0,00644 p_s.$$

Численное решение задачи (4) — (6) осуществлялось с помощью конечно-разностного метода с динамически адаптирующимися сетками [11, 12]. Для расчетов задавали следующие значения. Толщина L_s и начальная температура T_{s0} твердой фазы равнялись $L_s = 10^{-4}$ см, $T_{s0} = 1070$ К, т.е. величина перегрева составляла около 140 К. Толщина жидкой фазы L_l варьировалась в диапазоне 5–20 Å. На результаты расчетов эта вариация не оказывала заметного влияния. Начальные значения гидродинамической скорости u_{l0} и температуры T_{l0} в жидкой фазе определяли из законов сохранения (5).

Моделирование показало, что в начальный момент времени скорость фазового фронта v_{sl} из-за огромных температурных градиентов на границе раздела резко

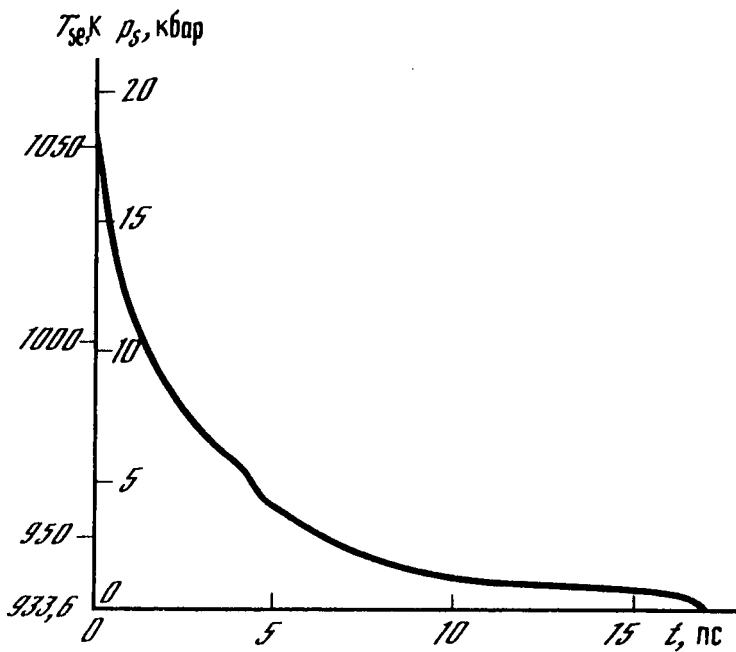


Рис. 2

возрастает. Однако величина ее ограничивается значением $\sim 2,2$ км/с. Быстрый рост скорости v_{sl} генерирует на поверхности твердой фазы давление p_s порядка нескольких десятков килобар, а так как температура на межфазной границе является функцией давления, то его быстрое повышение вызывает столь же быстрое повышение T_{sl} , что приводит к выравниванию градиентов температуры и уменьшению скорости v_{sl} (рис. 1). Таким образом, скорость фазового фронта максимальна в начальный момент времени, а затем быстро, но немонотонно падает. Немонотонный характер поведения v_{sl} обусловлен влиянием сложного гидродинамического процесса в твердой и жидкой фазах. Ввиду взаимосвязанности величин v_{sl} , p_s и T_{sl} поведение давления на поверхности твердой фазы p_s и температуры на межфазной границе T_{sl} имеет такой же характер (рис. 2), что и скорость v_{sl} .

Полученная из численного решения зависимость $v_{sl}(t)$ сравнивалась с автомоделным решением (штриховая линия рис. 1). В отличие от автомоделного решения величина v_{sl} , а соответственно и p_s , в начальные моменты времени ограничена. Максимальные значения v_{sl}^{\max} и p_s^{\max} определяются величиной первоначально заданного перегрева $\Delta T = T_{s0} - T_m$ твердой фазы. Так для $\Delta T = 70$ К $v_{sl}^{\max} \approx 1,7$ км/с, $p_s^{\max} \approx 10$ кбар, а для $\Delta T = 270$ К $v_{sl}^{\max} \approx 3,7$ км/с, $p_s^{\max} \approx 40$ кбар.

На рис. 3 представлены пространственные профили температуры $T(x, t)$ в различные моменты времени. На всех кривых, за исключением $t = t_8$, имеется явно выраженный минимум, соответствующий положению межфазной границы G_{sl} . По мере распространения фазового фронта температура в твердой и жидкой фазах понижается, и в момент времени $t \approx t_8$ температура на межфазной границе достигает равновесного значения $T_{sl} = T_m$. Давление на поверхности твердой фазы p_s стремится при этом к нулю, а скорость v_{sl} приближается к автомоделному профилю. Время выхода на автомоделное решение составило для рассматриваемого варианта ~ 30 пс, и величина его существенно зависит от степени первоначального перегрева. При $\Delta T = 70$ К это время равнялось ~ 7 пс, а при $\Delta T = 270$ К $t \sim 90$ пс.

Таким образом, учет зависимости температуры плавления от давления (7) и одномерных гидродинамических эффектов, связанных с изменением плотности

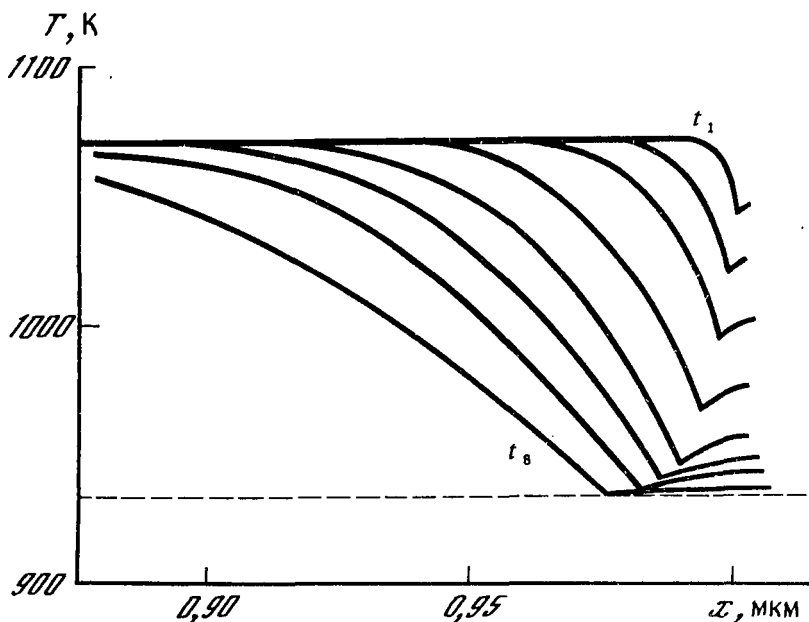


Рис. 3

вещества при фазовом переходе $\rho_s - \rho_l > 0$, устраняет нефизическую область вблизи $t = 0$, характерную для классической задачи Стефана о плавлении перегретого вещества. Отметим, что соотношение (7) накладывает, вообще говоря, менее жесткие ограничения на динамику плавления, чем зависимость (3). Решение вопроса о том, какую модификацию задачи Стефана необходимо использовать для описания быстрого плавления, требует дополнительного анализа с привлечением экспериментальных данных, в частности, о поведении акустических возмущений, которые генерируются в зоне перехода при изменении плотности вещества и движении фазового фронта [13].

Всесоюзный центр математического моделирования
Академии наук СССР
Москва

Поступило
22 VII 1991

ЛИТЕРАТУРА

1. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964. 488 с.
2. Кристьян Дж. Теория превращений в металлах и сплавах. М.: Мир, 1978, ч. 1. 806 с.
3. Современная кристаллография / Под ред. Б.К. Вайнштейна. М.: Наука, 1980, т. 3. 408 с.
4. Шкловский В.А. — Поверхность, 1986, № 6, с. 91–98.
5. Металлические стекла / Под ред. Г. Гюнтеродта, Г. Бека. М.: Мир, 1983. 376 с.
6. Алфинцев Г.А., Федоров А.П. — Металлофизика, 1981, т. 3, № 4, с. 114–118.
7. Kluge M.D., Ray J.R. — Phys. Rev. B, 1989, vol. 39, № 3, p. 1738–1746.
8. Tutczak C.J., Ray J.R. — Phys. Rev. Lett., 1990, vol. 64, N 11, p. 1278–1281.
9. Holian K.S. — J. Appl. Phys., 1986, vol. 59, № 1, p. 149–157.
10. Lees J., Williamson B.H.J. — Nature, 1965, vol. 208, № 16, p. 278–279.
11. Дарьин Н.А., Мажукин В.И. — Дифференц. уравнения, 1987, т. 23, № 7, с. 1154–1160.
12. Дарьин Н.А., Мажукин В.И., Самарский А.А. — ДАН, 1988, т. 302, № 5, с. 1058–1081.
13. Действие лазерного излучения на поглощающие конденсированные среды. Тр. ИОФАН / Под ред. А.М. Прохорова, М.: 1988, т. 13, с. 120 с.