

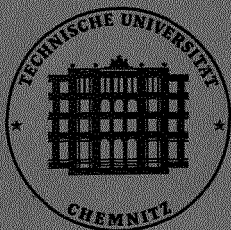
Fachbereich Maschinenbau II'

V.I. Mashukin / U. Semmler
P.V. Breslavskij / L.Ju. Takoeva

**Mathematische Modellierung des
Laserschmelzens und -verdampfens
homogener Materialien**

Preprint Nr.208/5.Jg./1991

**TECHNISCHE UNIVERSITÄT
CHEMNITZ**



Inhaltsverzeichnis

1. Einführung.....	3
2. Physikalische Analyse und Aufgabenstellung.....	8
2.1. Schmelzen.....	8
2.2. Verdampfung.....	10
2.3. Freisetzung der Energie in der Oberfläche bzw. im Volumen.....	12
2.4. Optische und thermophysikalische Material- charakteristiken.....	13
2.5. Aufgabenstellung.....	15
3. Lösungsmethode.....	17
4. Lösungsalgorithmus.....	24
5. Literatur.....	27

Zusammenfassung

Betrachtet werden Probleme der mathematischen Modellierung von Schmelz- und Verdampfungsprozessen homogener Materialien infolge Lasereinwirkung. Diesen Prozessen liegen solche moderne Technologien wie Schneiden, Bohren, Abtragen und Schweißen mit dem Laserstrahl zugrunde. In der Arbeit erfolgt die physikalische Analyse der Dynamik von Phasenübergängen und deren mathematische Beschreibung. Realisiert wurde das Stefan-Problem mit einer bzw. zwei Phasenübergängen für nichtstationäre, räumlich eindimensionale Aufgabenstellungen. Aufgestellt und analysiert werden numerische Lösungsmethoden für das Stefan-Problem.

Die Arbeit hat zum Ziel, effektive Methoden der numerischen Lösung derartiger Aufgaben zu zeigen und sie als Werkzeug der mathematischen Modellierung und der Schaffung ingenieurmäßiger Berechnungsschemata in Lasermaterialbearbeitungsprozessen einzusetzen. Für die numerische Lösung der Stefan-Probleme werden adaptive Finite-Differenzen-Verfahren (bewegliche, dynamisch mit der Lösung verbundene Differenzenschemata) vorgeschlagen.

Ein weiterer Preprint wird der konkreten numerischen Lösung der hier betrachteten Aufgaben und Modelle mit dem Anwenderprogramm-paket LASTEC-1 gewidmet sein.

1. Einführung

Die schnelle Entwicklung der Laser- und Elektronenstrahltechnik führte zur Ausarbeitung und technischen Realisierung prinzipiell neuer Verfahren, gezielt auf die Lösung moderner wissenschaftlich-technischer Probleme. Diese sind eng verbunden mit gestiegenen Forderungen an Qualität und Energieökonomie der technologischen Operationen, an Reinheit und an die Erzielung physikalisch-chemischer und mechanischer Eigenschaften der zu bearbeitenden Materialien. Konzentrierte Energiestöme sind ein universelles Werkzeug zur Bearbeitung von Metallen, Dielektriken und Halbleitern. Sie gewährleisten sowohl hohe Bearbeitungsgeschwindigkeiten, als auch Präzision und kleine Einflußbereiche, was ihre breite Anwendung in der Metallbearbeitung, im Maschinenbau, in der Mikroelektronik und in anderen modernen Industriezweigen begründet.

Lasertechnologien sind einzigartige Verfahren der Materialbearbeitung. Die Unikalität resultiert größtenteils aus den Besonderheiten des Laserstrahl als Wärmeenergiequelle. Unter den Besonderheiten ist in erster Linie die hohe chemische Reinheit zu nennen, da die Lasereinwirkung eine kontaktfreie Energieübertragung darstellt, was eine Verunreinigung der Bearbeitungsfläche durch die Energiequelle ausschließt. Die Laserbearbeitung erfordert im Unterschied zu Elektronenstrahlbearbeitung kein Vakuum. Das bringt in einer Reihe von Fällen technologische Vorteile. Laser unterschiedlicher Wellenlänge kann man für unterschiedliche Ziele nutzen. Die Fokussierung des Laserstrahls in einem Bereich sehr kleinen Durchmessers erlaubt die örtliche Zerstörung praktisch beliebigen Materials. Damit wird die Bearbeitung superharter und schwer schmelzbarer Materialien ermöglicht. Parallel zur Innovation der Lasertechnik erfolgen intensive Forschungen zu den in der bestrahlten Zone ablaufenden physikalisch-chemischen Prozessen. Die Erweiterung des Wissens auf diesem Gebiet ist einerseits wichtig für das fundamentale theoretische Verständnis der in der Regel

nicht im thermodynamischen Gleichgewicht ablaufenden Prozesse, andererseits ist die Erforschung der physikalischen Erscheinungen wichtig für die Bestimmung optimaler technologischer Prozesse, aber auch für die Vervollkommnung und Schaffung neuer Bearbeitungsregimes.

Um neue Erkenntnisse zu gewinnen, hat der heutige Forscher drei Mittel zur Verfügung: Experimente, analytische Methoden und die Methoden der mathematischen Modellierung. Gegenstand der Experimente an der Natur kann die Erforschung der Prozesse im Ganzen oder einzelner ihrer Elemente sein. In den Aufgaben der Lasereinwirkung auf kondensierte Stoffe sind in der Regel nur indirekte Messungen und die Erfassung von Nachwirkungen und integralen Größen möglich, die teilweise für die Auswertung eine zusätzliche mathematische Verarbeitung erfordern. Unzulänglich beim experimentellen Herangehen sind die beschränkten Möglichkeiten der Untersuchung der Prozeßdynamik, die Kompliziertheit und die hohen Kosten der Experimentaltechnik. Gleichzeitig sind aber experimentelle Daten Kriterium für die Richtigkeit beliebiger theoretischer Überlegungen, weil die Anwendbarkeit der Theorie solange in Frage steht, solange sie nicht experimentell bestätigt wurde.

Durch analytisches Herangehen sind verhältnismäßig schnell Lösungen in geschlossener Form zu erhalten. Diese erfordern aber in der Regel einfache mathematische Modelle mit einschneidenden vereinfachenden Annahmen, die sich in der Idealisierung der physikalischen Prozesse und der Geometrie der realen Objekte äußern. Somit kann man mit Hilfe analytischer Methoden, die übrigens die Grundlage der meisten ingenieurwissenschaftlichen Berechnungen bilden, nur eine eingeschränkte Information über ein stark idealisiertes Bild physikalischer Prozesse erhalten.

Die mathematische Modellierung ist in ihrem Wesen eine universelle Technologie wissenschaftlicher Forschungen, die unbestritten eine

Reihe von Vorzügen besitzt. Die bei ihr verwendeten mathematischen Modelle erfordern nicht derartig vereinfachende Annahmen. Sie erlaubt qualitative und quantitative Informationen über beliebige Seiten der modellierten Erscheinung unter unterschiedlichen Bedingungen der Experimentdurchführung. Die Rolle der mathematischen Modellierung wächst bei Aufgaben, die die Dynamik komplizierter Erscheinungen beschreiben. In die mathematischen Modelle kann man leicht die auf experimentellem Wege gewonnenen empirischen Daten aufnehmen und somit die Lösung maximal dem Naturexperiment annähern.

Zu einem unverzichtbaren Forschungswerkzeug wird die mathematische Modellierung in Aufgaben der Lasermaterialbearbeitung. Die Mehrheit der Anwendungen des Laserstrahls in der Materialbearbeitung ist mit dem Auftreten von Phasenübergängen erster Art verbunden. Unter den Lasermaterialbearbeitungsprozessen seien die wichtigsten hier erwähnt: Schneiden, Bohren, Beschriften, Abtragen, Mikroumschmelzen, Laserbeschichten, Mikroschweißen (dabei auch das Schweißen von Werkstücken größerer Abmessungen). Alle genannten technologischen Operationen sind entweder mit Schmelz-Kristallisations-Prozessen, oder mit Verdampfen bzw. Sublimation verbunden (oder mit einer Kombination von beidem). Wir betonen, daß die Phasenübergänge erster Art eine außerordentlich wichtige Rolle im für die Technik der Materialbearbeitung relevanten Bereich von $10^4 \dots 10^9$ W/cm² der Laserstrahlintensität spielen. Jedoch erlaubt die vorhandene allgemeine Theorie der Phasenübergänge noch nicht, eine Antwort auf einige wesentliche Fragen selbst bei den anscheinend weitgehend bekannten Prozessen des Schmelzens und Verdampfens zu geben. Eine intensive Untersuchung der Phasenübergänge bei impulsförmiger Einwirkung beginnt gerade erst, und hierbei gibt es noch viele ungeklärte Fragen und sich widersprechende Resultate. Vom Standpunkt des Technologen sind Phasenübergänge einer der nicht vollständig verständlichen Faktoren, die auf den technologischen Prozeß einwirken. Deshalb sind für die Bestimmung optimaler

Laserregimes weitere Ausarbeitungen und Forschungen notwendig. Praktisch relevante Ergebnisse der Erforschung nichtgleichgewichtiger Phasenübergänge sind ohne die Anwendung der mathematischen Modellierung kaum zu erhalten. Mit Hilfe moderner Computer lassen sich auf Grundlage der mathematischen Modelle die nichtlinearen Situationen bis zum Beginn der praktischen Experimente "durchspielen".

Die Entwicklung leistungsfähiger Personalcomputer erlaubt zudem, den Prozeß der mathematischen Modellierung maximal nahe an die Experimentaltechnik und die technologischen Linien heranzubringen. Die Ergebnisse der Modellierung können somit unmittelbar für die nachfolgende Korrektur des technologischen Prozesses genutzt werden. In diesem Zusammenhang wird das Problem der Automatisierung der Berechnungen und somit der Entwicklung komfortabler Anwendungsprogramme aktuell.

Hier sei noch auf eine wichtige Tatsache hingewiesen. Die Modellierung der Prozesse der Lasermaterialbearbeitung selbst in vereinfachter thermophysikalischer Beschreibung (hydrodynamische Effekte werden nicht berücksichtigt) führt auf die Betrachtung nichtlinearer Gleichungen, was ihre ingenieurmäßige Anwendung nicht gerade begünstigt. Außerdem erschwert das Vorhandensein einer Reihe schwer zu steuernder Parameter (wie der Absorptionsfähigkeit A und die räumliche Verteilung der Laserintensität G) den Vergleich der Berechnungen mit experimentellen Daten. Wegen der starken Temperaturabhängigkeit der optischen (Absorptionsfähigkeit der Oberfläche $A=A(T)$) und thermophysikalischen (Wärmekapazität $C_p=C_p(T)$ und Wärmeleitfähigkeit $\lambda=\lambda(T)$) Materialparameter würde eine Linearisierung des Wärmeleitungsproblems und der Stefan-Aufgabe zu beträchtlichen Genauigkeitsverlusten führen (100-300%). Wie bekannt ist, bilden gerade Linearisierungen die Grundlage ingenieurmäßiger Berechnungen, wobei aber eine Genauigkeit von 5-10% erreicht werden soll. Deshalb werden die meisten Aufgaben der Lasererwärmung

empirisch gelöst und die Absorptionsfähigkeit $A(T)$ wird z.B. als abzustimmender Parameter genommen. Trotzdem ist die Zahl von Publikationen, in denen eine gute Übereinstimmung der Berechnungen mit den Experimenten konstatiert wird, recht gering. Einerseits erklärt sich das aus der geringen Genauigkeit, mit der z.B. solche Parameter wie die Temperatur der kondensierten Phase bestimmt werden können, andererseits sind sichere Vergleichsmethoden nicht ausgearbeitet. In der Regel erfolgt die Gegenüberstellung der Berechnungsergebnisse mit dem Experiment anhand der Isothermen der Schmelzphase [1]. Deshalb gibt es in Grunde keine systematischen Vergleiche von Berechnungsergebnissen der Temperatur mit Experimenten für unterschiedliche Materialien und für Regimes, bei denen Phasenübergänge nicht auftreten.

Für Aufgaben der Lasertechnologie ist die Entwicklung von ingenieurmäßigen Berechnungsformeln wenig sinnvoll und kaum möglich. Die Aufgabe der Ingenieurberechnungen müssen bei der Einwirkung von konzentrierten Energieströmen abgeschlossene, hocheffektive, auf PC orientierte Programmpakete übernehmen. Diese müssen es ermöglichen, die nichtlinearen Aufgabenstellungen mit Hilfe experimentell in einem breitem Temperaturbereich bestimmter Materialcharakteristiken $C_p(T)$, $\lambda(T)$ und $A(T)$ zu realisieren.

Ein weiterer Preprint beschreibt das Programmpaket LASTEC-1. Es ist das erste einer Serie unter dem einheitlichen Namen LASTEC (LASer TEChnology) ist: LASTEC-1 (wie auch die folgenden Pakete) wurde von den Autoren für verschiedene Aufgaben der Lasermaterialbearbeitung ausgearbeitet. Das Paket dient der Untersuchung der Dynamik von Phasenübergängen und anderer thermophysikalischer Prozesse, die in kondensierten Stoffen unter Einwirkung von Laserstrahlung ablaufen. Charakteristische Aufgaben mit schnellbeweglichen Phasengrenzen in Metallen, Dielektriken (Keramiken) und Halbleitern wurden modelliert, und die Resultate der mit LASTEC-1 durchgeführten numerischen Experimente werden vorgestellt.

Der vorliegende, mehr theoretisch orientierte Preprint beschreibt

- die physikalische Analyse der Prozesse und die mathematische Aufgabenstellung instationärer, räumlich eindimensionaler Aufgaben der Lasererhitzung, begleitet von Phasenübergängen erster Art, sowie
- die Algorithmen der Lösung von Stefan-Aufgaben mit mehreren Phasen.

2. Physikalische Analyse und Aufgabenstellung

Die Einwirkung einer Laserstrahlung auf ein kondensiertes Material führt (nach teilweiser Reflexion an der Oberfläche) zur Absorption elektromagnetischer Energie in der randnahen Schicht, deren Dicke dem Reziprokwert des Absorptionskoeffizienten κ entspricht. Die absorbierte Energie wird danach in Wärme umgesetzt, die bei ausreichender Energiemenge Schmelzen und Verdampfen des Materials hervorruft. Die wichtigsten Charakteristiken des Laserimpulses sind dessen Intensität G und dessen Dauer τ (halbe Impulslänge). In der vorliegenden Arbeit wird der sogenannte technologische Bereich mit Intensitäten von $10^4 \leq G \leq 10^9 \text{ W/cm}^2$ und Impulsdauern von $10^{-9} \leq \tau \leq 1 \text{ s}$ betrachtet. Dieser Bereich ist für Prozesse mit Phasenübergängen typisch.

2.1. Schmelzen

Die theoretische Betrachtung der Dynamik der Phasenübergänge führt auf unterschiedliche Varianten des Stefan-Problems [2]. Für die Phasenübergänge Schmelzen-Kristallisation in reinen Stoffen wird meistens die klassische Form der Stefan-Aufgaben benutzt. In der einfachen, räumlich eindimensionalen Näherung führt diese Variante auf die Wärmeleitgleichung im Berechnungsgebiet mit a-priori unbekannter beweglicher Phasengrenze $\Gamma_{s,l}$ zwischen der festen (s) und

flüssigen (1) Phase.:

$$(1) \quad \left[\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} \right]_k = \left[\frac{\partial}{\partial x} \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right]_k + \kappa G_k, \quad k=s, l$$

mit ρC_p - Wärmekapazität,
 λ - Wärmeleitfähigkeit,
 $G_k = \kappa G_k$ - Wärmequellendichte.

Auf der Phasengrenze Γ_{sl} gilt die sogenannte Stefan-Bedingung:

$$(2) \quad \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho_s L_m v_{sl}$$

mit folgender einfachen physikalischen Interpretation: Die Bewegungsgeschwindigkeit v_{sl} der Phasengrenze wird durch den Wärmestrom definiert, der an dieser Grenze durch die Wärmemenge $\rho_s L_m$ des Phasenüberganges entzogen oder freigesetzt wird.

Außer der Stefan-Bedingung gilt an der Phasengrenze noch eine Randbedingung, die mit der Kinetik des Phasenüberganges verbunden ist. In der klassischen Form wird für Aufgaben des Schmelzen bzw. der Kristallisation angenommen, daß an der Phasengrenze die Temperatur stetig und gleich der (in den meisten Fällen als konstant angenommenen) Temperatur des Phasenübergangs ist

$$(3) \quad T_s = T_l = T_m .$$

Die Veränderung von T_m kann z.B. durch die Veränderung des äußeren Druckes oder der Zusammensetzung des Materials bedingt sein. Die Annahme einer konstanten Phasenübergangstemperatur ist bei verhältnismäßig kleinen Laserintensitäten, denen langsame Temperaturveränderungen entsprechen, gerechtfertigt. Bei der Beschreibung von Prozessen, die bei hohen Intensitäten ablaufen, ist es notwendig, die Beziehung (3) durch eine entsprechende kinetische Bedingung zu ersetzen, die die Bewegungsgeschwindigkeit v_{sl} der Phasengrenze mit ihrer Temperatur koppelt [3].

2.2. Verdampfung

Der Verdampfungsprozeß ist der Übergang des Materials aus seiner kondensierten Form in den Gaszustand. In Vergleich mit dem Schmelzen ist er durch hohe Energiekapazität und hohen Volumenanteil charakterisiert. Im unterkritischen Bereich von Temperatur und Druck (bei dem eine klar erkennbare Grenze Flüssigkeit-Gas existiert), kann das Laserverdampfen von Metall in zwei völlig unterschiedlichen Regimen verlaufen:

In dem einen Regime ist die Verdampfungsgeschwindigkeit gleich der Schallgeschwindigkeit. Das ist charakteristisch für die Verdampfung im Vakuum oder in Medien, deren Druck gegenüber dem Sättigungsdampfdruck vernachlässigbar klein ist. In diesem Fall haben gasdynamische Erscheinungen in dem Dampf keinerlei Einfluß auf das Verhalten der kondensierten Phase, was die Beschreibung des Verdampfungsprozesses wesentlich vereinfacht [4], da die Aufgaben im Kondensat und in der Gasphase voneinander unabhängig sind, so daß man beide Modelle separat betrachten kann.

In dem zweiten Regime kann die Verdampfungsgeschwindigkeit (wie es für Verdampfungsprozesse unter Druck charakteristisch ist) kleiner als die Schallgeschwindigkeit sein, so daß der gasdynamische Faktor eine bestimmende Rolle spielen kann [5]. Die Lösung wird in diesem Fall wesentlich komplizierter, da die Prozesse in Gas und im Kondensat miteinander gekoppelt sind.

In der vorliegenden Arbeit wird das erste Verdampfungsregime mit einer Verdampfungsgeschwindigkeit gleich der Schallgeschwindigkeit betrachtet.

Zur Beschreibung des Prozesses der Oberflächenverdampfung wird gewöhnlich die Einphasen-Variante des Stefan-Problems verwendet [6], bei der die Temperatur der Übergangsfrent schwach (logarith-

misch) von der Frontgeschwindigkeit v_{lv} abhängt. Die Wärmeleitgleichung wird im Stefan-Problem durch die drei Erhaltungssätze für Masse, Impuls und Energie ergänzt

$$\rho_l v_{lv} = \rho_v (v_{lv} - u)$$

$$(4) \quad p_l + \rho_l v_{lv}^2 = p_v + \rho_v (v_{vl} - u)^2$$

$$- \lambda_l \frac{\partial T_L}{\partial x} = G - \rho_l L_m v_{lv}$$

(u - gasdynamische Geschwindigkeit) sowie durch zwei weitere Beziehungen, die die Kinetik des Phasenüberganges und den Ungleichgewichtszustand der Verdampfungsprozesse insgesamt charakterisieren. In der Näherung für die Knudsen-Schicht [4] haben diese Beziehungen folgende Gestalt [7] (der Index v bedeutet Zugehörigkeit zur Gasphase):

$$T_v = T_l \cdot \left\{ \left[1 + f \frac{\gamma-1}{\gamma+1} M^2 \right]^{1/2} - f \frac{\gamma-1}{\gamma+1} m \right\}^2$$

$$(5) \quad \rho_v = \frac{1}{2} \rho_H \left\{ \left[\frac{T_l}{T_v} \right]^{1/2} \left[(\gamma M^2 + 1) e^{b^2 M^2} \operatorname{erfc}(bM) - \frac{4f}{\pi} M \right] + \right.$$

$$\left. + \frac{T_l}{T_v} \left[1 - 2f^{1/2} M e^{b^2 M^2} \operatorname{erfc}(bM) \right] \right\}$$

$$b = (\gamma/2)^{1/2}, \quad f = \left(\frac{\pi \gamma}{8} \right)^{1/2}, \quad M = \frac{u}{u_c}, \quad u_c = (\gamma R T_l)^{1/2}$$

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi$$

mit u_c - Schallgeschwindigkeit,
 ρ_f - Dichte des gesättigten Dampfes,
 γ, R - gasdynamische Konstanten.

2.3. Freisetzung der Energie in der Oberfläche bzw. im Volumen

Bei der Erwärmung unterscheidet man in Abhängigkeit vom Verhältnis des Absorptionskoeffizienten κ thermischen Einflusstiefe $l_T = (a/t)^{1/2}$ zwischen volumenmäßiger und oberflächenförmiger Energiefreisetzung. Wenn die thermische Einflusstiefe t_T bedeutend größer ist als die Quantenlänge $l_q = \kappa^{-1}$ ist ($l_T \gg l_q$), so hat der Mechanismus der Umwandlung der Strahlung in Wärmeenergie oberflächenförmigen Charakter. Im entgegengesetzten Fall $l_T \leq l_q$ erfolgt die Energiefreisetzung volumenmäßig. Die volumenmäßige Erwärmung des Stoffes durch Laserstrahlung ist beim Vorhandensein von Phasenübergängen auch dann möglich, wenn die Beziehung $\kappa a / v_{g1} \leq 1$ gilt, d.h., wenn die Energiefreisetzung nicht klein ist im Verhältnis zur Tiefe des Temperatureinflusses.

Die volumenmäßige Absorption der Laserstrahlung wird durch ein System aus Energie- und Strahlungstransportgleichung beschrieben

$$(6) \quad C_p(T) \rho(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial G}{\partial x}$$

$$(7) \quad \frac{\partial G}{\partial x} + \kappa G = 0$$

Auf der bestrahlten Oberfläche $x=x_L$ lauten die Randbedingungen für dieses Gleichungssystem

$$(8) \quad x=x_L: \lambda \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad G = A(T_g) G_g$$

Bei oberflächenförmiger Energiefreisetzung entfällt in der Wärmeleitgleichung das Glied $\partial G/\partial x$, folglich ist auch die Transportgleichung nicht erforderlich. Der Einfluß der Laserquelle wird mit folgender Randbedingung berücksichtigt:

$$(9) \quad -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = A(T_s) G_s$$

2.4. Optische und thermophysikalische Materialcharakteristiken

Wie bereits erwähnt, wird bei der Einwirkung eines Laserstrahls auf die Oberfläche kondensierter Stoffe ein Teil des Energiestromes reflektiert, der verbleibende Teil in der oberflächennahen Schicht absorbiert. Den Anteil der absorbierten Energie kann man mittels des Oberflächenabsorptionskoeffizienten A (häufig Absorptionsfähigkeit genannt) beschreiben. Für den Reflexionskoeffizienten R gilt folglich $R+A=1$. Die Werte A und R hängen wesentlich von der Wellenlänge des einfallenden Lichts ab. Während für infrarote Strahlung mit der Wellenlänge $\lambda=10.6 \mu\text{m}$ die Absorptionsfähigkeit von Metallen bei Zimmertemperatur nur wenige Prozent beträgt, liegt sie bei $\lambda=1.06 \mu\text{m}$ wesentlich höher (10-40%). Außerdem hängen die Werte von A und R von dem Zustand der bearbeiteten Oberfläche, ihrer Rauigkeit, Verschmutzungen und dem eventuellen Vorhandensein einer Oxidschicht ab, sofern die Bearbeitung in oxidierender Umgebung verläuft. Mit der Veränderung der Temperatur bis hin zur ausgebildeten Verdampfung kann sich die Absorptionsfähigkeit um ein Vielfaches verändern.

Die Absorptionsfähigkeiten kann für die meisten Materialien bei normalem Einfall der Laserstrahlung durch die bekannten Werte der optischen Konstanten bestimmt werden:

$$A = \frac{4n}{(n+1)+k^2}$$

mit n - Beugungszahl, k - Absorptionskoeffizient.

Wesentlich schwieriger ist es, die Temperaturabhängigkeit $A(T)$ zu bestimmen. Bei Berücksichtigung des anormalen Skin-Effekt wurde in [9] gezeigt, daß für die meisten Metalle A linear von der Temperatur abhängt:

$$A = A_0 + BT, \quad A_0, B - \text{const.}$$

Die Analyse experimenteller Daten zeigt, daß die Annahme einer linearen Temperaturabhängigkeit in bestimmten Temperaturbereichen für viele Materialien berechtigt ist. Am wenigsten untersucht ist der Bereich hoher Temperaturen in der Umgebung der Phasenübergänge. Es ist bekannt, daß sich beim Schmelzen der Wert A für Metalle sprunghaft vergrößert.

Der Absorptionskoeffizient κ des Materials verändert sich gewöhnlich wenig mit der Temperatur, so daß man eine Temperaturabhängigkeit nicht berücksichtigen braucht. Die Größe κ kann man in der Form $\kappa = 4\pi k/\lambda$ bestimmen. Für Metalle liegt κ im Bereich $10^5 - 10^6 \text{ cm}^{-1}$, für Dielektrika ist $\kappa = 10-10^4 \text{ cm}^{-1}$ typisch.

Für die meisten Metalle hängen die Wärmeleitfähigkeit $\lambda(T)$ und die Wärmekapazität $\rho(T)C_p(T)$ linear von der Temperatur ab:

$$\lambda(T) = \lambda_0 + \alpha T$$

$$C_p(T) = C_{p_0} + \beta T$$

Im Bereich hoher Temperaturen sind genaue Werte für λ , ρ und C_p in der Regel nicht bekannt. In der Literatur wird weiterhin auf die starken Sprünge der thermophysikalischen Koeffizienten im Bereich der Phasenübergänge verwiesen [10].

2.5 Aufgabenstellung

Im Bild 1 ist das räumliche Berechnungsmodell dargestellt. In den Punkten $x=x_l=x_{lv}$ und $x=x_{sl}$ befinden sich die Phasengrenzen Γ_{lv} und Γ_{sl} zwischen Gas und Flüssigkeit bzw. Flüssigkeit und Festkörper:

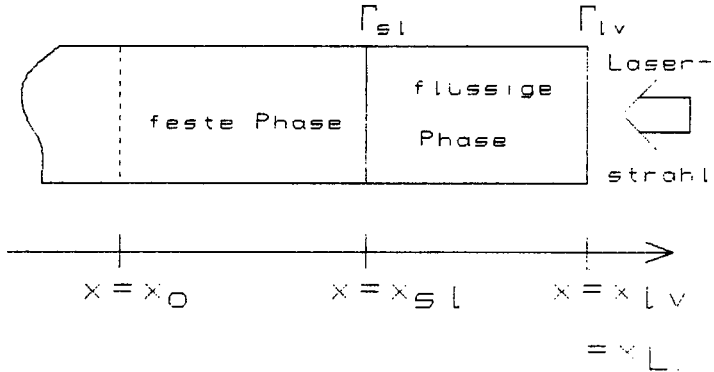


Bild 1: Räumliches Berechnungsmodell

Der auf die Oberfläche auftreffende Laserstrahl ruft in Abhängigkeit von seiner Intensität und Dauer Erwärmung, Schmelzen oder Verdampfen hervor. Für die mathematische Beschreibung wird das sogenannte thermische Modell verwendet, das das klassische und das Einphasen-Modell der Stefan-Aufgabe kombiniert. Im Falle von volumenmäßigem Wärmeeintrag hat die räumlich eindimensionale instationäre Aufgabe für Schmelz- und Verdampfungsprozeß die Form:

$$(10) \quad \left[C_p(T) \rho \frac{\partial T}{\partial t} \right]_k = \left[\frac{\partial}{\partial x} \lambda \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial G}{\partial x} \right]_k, \quad k=s,l$$

$$(11) \quad \left[\frac{\partial G}{\partial x} + \kappa G \right]_k = 0, \quad x_0 < x < x_L$$

mit folgenden Bedingungen zum Anfangszeitpunkt $t=0$ und an den Gebiets- und Phasengrenzen:

$$t=0: T(x, 0) = T_0$$

$$(12) \quad x=x_0: \lambda \frac{\partial T}{\partial x} = 0$$

$$(13) \quad x=x_{s1}: \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho_s L_m v_{s1}, \quad T_s = T_l = T_x$$

$$x=x_{1v}:$$

$$(14) \quad \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho_l L_v v_{1v}, \quad G = A(T) G_0 e^{-(t/\tau)^2}$$

$$\rho_l v_{1v} = \rho_v (v_{1v} - u)$$

$$P_l + \rho_l v_{1v}^2 = P_v + \rho_v (v_{1v} - u)^2$$

$$T_v = T_l \cdot \left\{ \left[1 + f \frac{\gamma-1}{\gamma+1} M^2 \right]^{1/2} - f \frac{\gamma-1}{\gamma+1} m \right\}^2$$

$$(15) \quad \rho_v = \frac{1}{2} \rho_H \left\{ \left[\frac{T_l}{T_v} \right]^{1/2} \left[(\gamma M^2 + 1) e^{b^2 M^2} \operatorname{erfc}(bM) - \frac{4f}{\pi} M \right] + \right.$$

$$\left. + \frac{T_l}{T_v} \left[1 - 2f^{1/2} M e^{b^2 M^2} \operatorname{erfc}(bM) \right] \right\}$$

$$P_H = R \rho_H T_l, \quad P_H = P_b e^{\frac{L_v}{R T_l} \left(1 - \frac{T_b}{T_l} \right)}, \quad P_v = R \rho_v T_v$$

mit P_H - Sättigungsdampfdruck,

P_b - Sättigungsdampfdruck unter Normaltemperatur,

T_b - Verdampfungstemperatur unter Normaltemperatur.

Im Falle der Absorption in der Oberfläche verändert sich das mathematische Modell (10)-(15) folgendermaßen: Die Wärmeleitgleichung hat die Form

$$(16) \quad \left[C_p(T) \rho \frac{\partial T}{\partial t} \right]_k = \left[\frac{\partial}{\partial x} \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right]_k, \quad k=s, l$$

Die Transportgleichung für die Strahlung entfällt. Die Randbedingung (14) verändert sich wie folgt:

$$(17) \quad -\lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = A(T_s) G - \rho_l L_v v_{vl}, \quad G = G_o e^{-(\tau/\tau)^2}$$

Die übrigen Bedingungen bleiben unverändert.

3. Lösungsmethode

Eine der grundlegenden Besonderheiten des Stefan-Problems ist, wie bereits erwähnt, das Fehlen einer expliziten Darstellung für $v_{sl}(t)$. Somit ist die Aufgabe (10) bzw. (16) mit den entsprechenden Randbedingungen auch dann nichtlinear, wenn die thermophysikalischen und optischen Parameter konstant sind, so daß analytische Lösungen nur für wenige Spezialfälle bekannt sind.

Die bisher bekannten numerischen Lösungsverfahren für das Stefan-Problem kann man (mit Einschränkungen) in zwei Klassen einteilen: Methoden mit expliziter Erfassung der Phasengrenzen und Methoden der "durchgängigen" Berechnung.

Die erste Klasse unterscheidet eine Vielzahl unterschiedlicher Herangehensweisen. Die verbreitetsten sind:

- Das Einfangen der Front in einem Diskretisierungsknoten [11], bei denen iterativ der Zeitintegrationsschritt so bestimmt wird, daß sich dabei die Phasengrenze gerade um einen räumlichen Diskretisierungspunkt bewegt.

- Die Linienmethode [12,13].
- Die Methode der Linearisierung der Fronten [14], die auf der Substitution der Ortskoordinate x in der Form $x=\xi\eta$ beruht (η beschreibt gerade die Lage der Phasengrenze).
- Methoden, die auf verschiedenen Formen der Interpolation beruhen [15].
- Methoden der Isothermen-Migration [16,17], in denen die abhängigen und die unabhängigen Variablen miteinander vertauscht werden.

In der Regel erfassen diese Methoden die Phasengrenze mit ausreichender Genauigkeit, sind aber algorithmisch kompliziert und erfordern insbesondere bei Mehrphasenproblemen und mehrdimensionalen Aufgaben eine hohe Rechenzeit.

In der zweiten Klasse von Methoden wird anstelle der Stefan-Bedingung (13) eine Glättungsfunktion verwendet, in der der Einfluß des Phasenüberganges mittels einer im Punkt der Phasengrenze singulären Zusatzfunktion zur Wärmekapazität berücksichtigt wird. Diese Methoden sind insbesondere bei der mathematischen Modellierung mehrdimensionaler Aufgaben effektiv, wenn nur thermophysikalische Effekte berücksichtigt werden und die Lage der Phasengrenze keine wesentliche Rolle spielt. Nachteilig bei diesen Methoden sind die ungenaue Bestimmbarkeit der Lage der Phasengrenze und die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Wahl des Glättungsparameters [22], dessen apriori-Bestimmung in einer Reihe von Fällen schwierig ist.

Weiterhin ist bei den Methoden der zweiten Klasse darauf hinzuweisen, daß die Glättung der (in Wirklichkeit an der Phasengrenze sich sprunghaft ändernden) Funktion des Wärmehalts die Klasse der Lösungen der Aufgaben (10) bzw. (13) einschränkt. So wird in der Modellierung der Prozesse die Möglichkeit des Auftretens von Überhitzung und Unterkühlung des Kondensates von vornherein ausgeschlossen. In solchen Fällen, in denen die physikalischen

Bedingungen zum Auftreten überhitzter bzw. unterkühlter Zustände führen bzw. in denen der Einfluß der Hydrodynamik der Flüssigphase untersucht wird, kann die Verwendung von Glättungsfunktionen zu Fehlern bei der Bestimmung der Temperaturverteilung und der Phasenbewegungsgeschwindigkeiten führen.

Spezielle für das Stefan-Problem ausgearbeitete numerische Methoden, die auf der dynamisch an die Lösung angepaßten Adaption beruhen [23-25], überwinden diese Nachteile.

Das Wesen der dynamischen Lösungsadaption besteht im Übergang zu einem nichtstationären Koordinatensystem, wobei die Transformation automatisch mit Hilfe der Lösung erfolgt. Durch den Übergang zu dem instationären Koordinatensystem entfällt das Problem des beweglichen Randes, aber unbekannt sind in diesem Fall nicht mehr nur die Werte der Lösung in den Gitterpunkten, sondern auch die Lage der Gitterpunkte selbst. Die Bewegung der Gitterpunkte wird durch partielle Differentialgleichungen beschrieben (ihre Zahl entspricht der Anzahl der unabhängigen Ortskoordinaten), um die das mathematische Ausgangsmodell zu ergänzen ist. Die Adaption erfolgt in der vorgeschlagenen Methode auf der Ebene der Differentialgleichungen und ist somit unabhängig von der numerischen Diskretisierungsmethode (FDM, FEM, ...). Die Lösung der zusätzlichen Gleichungen hängt wesentlich von der Dynamik der die physikalischen Prozesse beschreibenden Gleichungen ab. Ausführlicher sind die Prinzipien der Konstruktion von Methoden der dynamischen Adaption für instationäre Randwertaufgaben in [26] dargelegt.

Es erfolgt nun die Beschreibung der numerischen Methoden mit dynamischer Adaption, angewandt auf Mehrphasenprobleme. Der Übergang des Ortskoordinatensystems x in ein beliebiges instationäres System q und umgekehrt erfolgt über die Koordinatentransformationen

$$(18) \quad x = f(q, \tau), \quad t = \tau$$

$$q = \Phi(x, t), \quad \tau = t$$

Für die partiellen Ableitungen gilt dann:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial q}{\partial \tau} \frac{\partial}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\partial x}{\partial \tau} \frac{\rho}{\Psi} \frac{\partial}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{Q}{\Psi} \frac{\partial}{\partial q}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial q}{\partial x} \frac{\partial}{\partial q} = \frac{\rho}{\Psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad \Psi = \frac{\partial x}{\partial q}$$

mit: $\partial x / \partial \tau = -Q/\rho$ - Bewegungsgeschwindigkeit des Koordinatensystems

Q - beliebige, im allgem. von der gesuchten Lösung abhängende Funktion

Ψ - metrischer Koeffizient (Transformationskoeffizient), der für jeden Zeitpunkt angibt, wievielfach sich das Integrationsgebiet gegenüber dem Anfangszeitpunkt geändert hat.

Die Transformation des mathematischen Modells (10), (11) in das Koordinatensystem (q, τ) unter Nutzung von (18) ergibt folgendes Differentialgleichungssystem in divergenter Form:

$$(19) \quad \left[\frac{\partial(H\Psi)}{\partial \tau} \right]_k = \left[\frac{\partial W}{\partial q} - \frac{\partial(Q\Psi)}{\partial q} - \frac{\partial G}{\partial q} \right]_k, \quad H = C_p T$$

$$(20) \quad \left[\frac{\partial G}{\partial q} + \kappa \Psi G \right]_k = 0, \quad W = - \frac{\lambda \rho}{\Psi} \frac{\partial T}{\partial q}$$

$$(21) \quad \left[\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} \right]_k = \left[- \frac{\partial Q}{\partial q} \right]_k, \quad \Psi = \rho \frac{\partial x}{\partial q}, \quad k=s, l, \quad q_0 < q < q_L$$

mit den Anfangs- und Randbedingungen

$$t=0: T(q, 0) = T_0$$

$$(22) \quad q=q_0: \frac{\lambda \rho}{\Psi} \frac{\partial T}{\partial q} = 0, \quad Q = 0$$

$$(23) \quad q=q_{s1}: T_s = T_1 = T_m, \quad Q_{s1} = -\rho_s v_{s1}, \quad Q_{s1} = -\frac{W_s - W_1}{L_m}$$

$q=q_{1v}$:

$$(24) \quad \frac{\lambda_1 \rho_1}{\Psi_1} \frac{\partial T_1}{\partial x} = -L_v Q_{1v}, \quad G = A(T) G_0 e^{-(t/\tau)^2}$$

$$\rho_1 v_{1v} = \rho_v (v_{1v} - u), \quad Q_{1v} = -\rho_{1v} v_{1v}$$

$$p_1 + \rho_1 v_{1v}^2 = p_v + \rho_v (v_{1v} - u)^2$$

$$T_v = T_1 \cdot \left\{ \left[1 + f \frac{\gamma-1}{\gamma+1} M^2 \right]^{1/2} - f \frac{\gamma-1}{\gamma+1} M \right\}^2$$

$$(25) \quad \rho_v = \frac{1}{2} \cdot \rho_H \left\{ \left[\frac{T_1}{T_v} \right]^{1/2} \left[(\gamma M^2 + 1) e^{b^2 M^2} \operatorname{erfc}(bM) - \frac{4f}{\pi} M \right] + \right. \\ \left. + \frac{T_1}{T_v} \left[1 - 2f^{1/2} M e^{b^2 M^2} \operatorname{erfc}(bM) \right] \right\}$$

Die Gleichung (21) beschreibt die Rücktransformation. Die Funktion Q in dieser Gleichung hängt, wie bereits gesagt, von der Gestalt der gesuchten Lösung ab, ist aber in hohem Maße frei wählbar und vom Anwender vorzugeben. An dieser Stelle gehen wir nicht näher auf die verschiedenen Möglichkeiten und Methoden der Vorgabe von Q ein (siehe dazu [26]). Erwähnt sei lediglich, daß durch eine konkrete Vorgabe von Q unterschiedliche Transformationsformen ermöglicht

werden. Zum Beispiel erreicht man dadurch, daß Q vom Gradienten der Lösung abhängig gewählt wird, eine Verdichtung der Netzknoten in der Nähe großer Lösungsgradienten [26,27]. Wie die Erfahrung der Modellierung zeigt, ist in Aufgaben mit beweglichen Rändern die Form $Q = -D(\partial \Psi / \partial q)$ am geeignetsten. Dieser Ansatz gewährleistet bei ausreichend großem Koeffizienten D ein quasireguläres Netz mit unveränderlicher Knotenzahl auf jedem Zeitschritt. Das Problem beweglicher Phasengrenzen führt somit auf die Bestimmung der Größen $Q_{s,i}$ und $Q_{j,r}$.

Zur Konstruktion der diskreten Modell für die Approximation der stetigen Aufgabenstellung (19)-(25) werden auf jedem Teilgebiet die Netze ω_i^j eingeführt. In der Festkörperphase ist das Netz ungleichmäßig mit der Schrittweite h_i für die Ortskoordinate q und $\Delta \tau^j$ für die Zeitkoordinate τ :

$$\omega_i^j = \{ (q_i, \Delta \tau^j), (q_{i+1/2}, \Delta \tau^j), q_{i+1} = q_i + h_i, q_{i+1/2} = q_i + 0.5 h_i \\ \tau^{j+1} = \tau^j + \Delta \tau^j, i=0,1,\dots,N, j=0,1,\dots,J \}$$

In der Flüssigphase wird ein in der Ortskoordinatenrichtung gleichmäßiges Gitter verwendet.

Zur Konstruktion der diskreten Modelle werden implizite, konservative, mit der Integro-Interpolations-Methode [28] aufgestellte Differenzenmethoden verwendet:

$$(26) \quad \left[\frac{(\Psi H)_{i+1/2}^{j+1} - (\Psi H)_{i+1/2}^j}{\Delta \tau^j} \right]_k = \left[- \frac{W_{i+1}^{j+1} - W_i^{j+1}}{h_i} - \frac{(QH)_{i+1}^{j+1} - (QH)_i^{j+1}}{h_i} \right]_k$$

$$\left[\frac{\Psi_{i+1/2}^{j+1} - \Psi_{i+1/2}^j}{\Delta \tau^j} \right]_k = \left[- \frac{Q_{i+1}^{j+1} - Q_i^{j+1}}{h_i} \right]_k, \quad k=s, l$$

$$\frac{x_{i+1}^{j+1} - x_i^{j+1}}{h_i} = \frac{\Psi_{i+1/2}^{j+1}}{\rho_{i+1/2}^{j+1}}, \quad Q_i^j = -D \frac{\Psi_{i+1/2}^j - \Psi_{i-1/2}^j}{0.5(h_i + h_{i+1})},$$

$$W_i^j = \left[\frac{\lambda_i \rho_i}{\Psi_i} \left(\frac{T_{i+1/2} - T_{i-1/2}}{0.5(h_i + h_{i-1})} \right) \right]^j, \quad i=1, 2, \dots, N-1$$

In den Gitterpunkten ("ganze" Punkte) werden die Gitterfunktionen W_i^j , Q_i^j , x_i^j , λ_i^j und $C_{p,i}^j$, in den Zwischenpunkten ("halbe" Punkte) die Gitterfunktionen $T_{i+1/2}^j$ und $\Psi_{i+1/2}^j$ berechnet.

Die Werte T_i^j und Ψ_i^j in den ganzen Punkten werden mittels folgender Interpolationsformel aus den Werten in den halben Gitterpunkten bestimmt:

$$y_i^j = \left[\frac{h_{i-1/2} \Psi_{i-1/2} \rho_{i+1/2} y_{i+1/2} + h_{i+1/2} \Psi_{i+1/2} \rho_{i-1/2} y_{i-1/2}}{h_{i-1/2} \Psi_{i-1/2} \rho_{i+1/2} + h_{i+1/2} \Psi_{i+1/2} \rho_{i-1/2}} \right]^j$$

$$h_{i+1/2} = q_{i+1/2} - q_{i-1/2}$$

Die Differenzennäherungen der Randbedingungen (22)-(25) lauten:

$$q=q_0: \quad W_0^j = 0, \quad Q_0^j = 0$$

$$q=q_{s1}: \quad T_s^j = T_1^j = T_n, \quad Q_{s1}^j = -\rho_s^j v_{s1}^j, \quad v_{s1}^j = -\frac{W_s^j - W_1^j}{\rho L_n}$$

$$Q = Q_{IV}:$$

$$W_I^j = -L_v Q_{IV}^j, \quad Q_{IV}^j = -\rho_I^j v_{IV}^j, \quad G^j = A(T^j) G_0 e^{-(t^j/\tau)^2}$$

$$\rho_I v_{IV}^j = \rho_v (v_{IV}^j - u), \quad Q_{IV}^j = -\rho_{IV}^j v_{IV}^j$$

$$P_I^j = P_v^j + \rho_v^j (v_{IV}^j - u)^2 - \rho_I^j v_{IV}^j$$

$$T_v^j = T_I^j \cdot \left\{ \left[1 + f \frac{\gamma-1}{\gamma+1} M^2 \right]^{1/2} - f \frac{\gamma-1}{\gamma+1} M \right\}^2$$

$$\rho_v^j = \frac{1}{2} \rho_H^j \left\{ \left[\frac{T_I^j}{T_v^j} \right]^{1/2} \left[(\gamma M^2 + 1) e^{b^2 M^2} \operatorname{erfc}(bM) - \frac{4f}{\pi} M \right] + \right. \\ \left. + \frac{T_I^j}{T_v^j} \left[1 - 2f^{1/2} M e^{b^2 M^2} \operatorname{erfc}(bM) \right] \right\}$$

$$P_H^j = R \rho_H^j T_I^j, \quad P_H^j = P_b \exp \left[\frac{L_v}{R T_I^j} \left(1 - \frac{T_b}{T_I^j} \right) \right], \quad P_v^j = R \rho_v^j T_v^j$$

4. Lösungsalgorithmus

Beim Übergang von der Zeitschicht τ^j zur Schicht τ^{j+1} kommt ein implizites Verfahren zur Anwendung, wobei die Zuwächse

$$T_I^{j+1} = T_I^j + \delta T_I^j$$

$$\Psi_I^{j+1} = \Psi_I^j + \delta \Psi_I^j$$

iterativ berechnet werden.

Die Bestimmung der Zuwächse δT_i^j und $\delta \Psi_i^j$ aus den linearen Gleichungssystemen in jeder Iteration erfolgt mit dem Progonka-Verfahren.

Der globale Lösungsalgorithmus besteht aus zwei Etappen.

1. Etappe

Bis zum Erreichen der Schmelztemperatur T_m wird nur das Integrationsgebiet der Festkörperphase betrachtet, in dem somit die Prozesse des Einphasen-Stefan-Problems betrachtet werden.

In der ersten Iteration $s=1$ wird aus der Randbedingung für die Knudsen-Schicht der Startwert für die Geschwindigkeit v_{lv} ermittelt und aus den Gleichungen für Ψ_i^j mittels Progonka der Zuwachs $\delta \Psi_i^s$ bestimmt, danach aus der Gleichung für T_i^j der Temperaturzuwachs δT_i^s und schließlich $T_i^{s+1} = T_i^s + \delta T_i^s$, $\Psi_i^{s+1} = \Psi_i^s + \delta \Psi_i^s$ und v_{sl}^{s+1} .

Die Iterationen werden bis zur Erfüllung der Bedingungen

$$|\delta \Psi_i^s| = |\Psi_i^{s+1} - \Psi_i^s| < \epsilon_1 \Psi_i^s + \epsilon_2$$

$$|\delta T_i^s| = |T_i^{s+1} - T_i^s| < \epsilon_3 T_i^s + \epsilon_4, \quad \epsilon_1 \dots \epsilon_4 = 10^{-3} \dots 10^{-6}$$

fortgesetzt.

2. Etappe

Nach Erreichen der Schmelztemperatur T_m an der Oberfläche erscheint ein zweites Integrationsgebiet für die Flüssigphase, so daß ab diesem Zeitpunkt die Prozesse als Zweiphasen-Stefan-Problem betrachtet werden. Die Bestimmung der Lösung erfolgt wie oben beschrieben.

Wie bereits hingewiesen, führt das Stefan-Problem in einem instationären Koordinatensystem auf die Bestimmung der Größen Q_{sI} und Q_{IV} (d.h. der Geschwindigkeiten v_{sI} und v_{IV}), was keine besonderen Schwierigkeiten bereitet.

Der Iterationszyklus der zweiten Etappe erfolgt analog dem der ersten Etappe. Zuerst werden aus den Randbedingungen die Größen Q_{sI}^s und Q_{IV}^s , danach mittels Progonka die Zuwächse δT_i^s und $\delta \Psi_i^s$ für beide Gebiete bestimmt.

Das neue Gebiet wird wie folgt eingeführt: Bei der Erwärmung wird eine Überhitzung der Festkörperphase um nicht mehr als 0.2 Grad zugelassen. Es wird angenommen, daß die Energie, die für die Überhitzung notwendig ist, zur Bildung der Flüssigphase verwendet wird. Aus dem Vergleich mit L_s werden die Anfangsdicke der Flüssigkeit und die Anfangsnäherung v_{sI}^0 der Geschwindigkeit der Phasengrenze ermittelt. Die Temperatur der Phasengrenze wird so gewählt, daß die überflüssige Energie zum Schmelzen einiger atomarer Schichten ausreicht. Somit beträgt die Anfangsdicke der neuen Phase 8...100 Å.

5. Literatur

- [1] Рыкалин Н.Н.; Углов А.А.; Зуев И.В.; Кокора А.Н.:
Лазерная и электронно-лучевая обработка материалов.
Справочник, Москва, Машиностроение, 1985, 496 р.
- [2] Карлслю Г.; Егер Д.:
Теплопроводность твердых тел. Москва, Наука, 1964, 488р.
- [3] Кристиан Дж.:
Теория превращений в металлах и сплавах. Часть 1. Москва,
Мир, 1978, 806 р.
- [4] Анисимов С.И.; Имас Я.А.; Романов Г.С.; Ходико Ю.В.:
Действие излучения большой мощности в металлах. Москва,
Наука, 1970, 271 р.
- [5] Мажукин В.И.; Самохин А.А.:
Математическое моделирование фазовых переходов и
образование плазмы при действии лазерного излучения на
поглощающие конденсированные среды. В книге:
Математическое моделирование, нелинейные дифференциальные
уравнения математической физики. Москва, Наука, 1987, pp.
191-244
- [6] Masters J.I.:
Problem of intensive surface heating of a slab
accompanied by change of phase. J. Appl. Phys., 1956, V.
27, pp. 477-484
- [7] Knight C.J.:
Theoretical modelling of a rapid surface vaporization
with back pressure. AIAA Journ., V. 17, No. 5, pp. 519-
523
- [8] Мотулевич Г.П.:
Оптические свойства поливалентных переходных металлов.
УФН, 1969, v. 97, No. 2, pp. 211-256

- [9] Либенсон М.Н.; Романов Г.С.; Имас Я.А.:
Учет влияния температурной зависимости оптических постоянных металлов на характер его нагрева излучением ОКГ. ЖТФ, 1968, V.38, No.7, pp. 1116-1119
- [10] Зниновьев В.Е.; Полев В.Ф.; Талуц С.Г.; Гельц П.В.:
Аномалия температуропроводности и теплопроводности ванадия, ниобия и тантала вблизи точки плавления. Физика твердого тела, 1986, V.28, No.29, pp. 2914-2917
- [11] Васильев Ф.П.:
О методе конечных разностей для решения однородной задачи Стефана. ЖВМиМФ, 1963, V.3, No.5, pp. 861-873
- [12] Бачелис Р.Д.; Меламед В.Г.; Шляйфер Д.М.:
Решение задачи Стефана с помощью метода прямых. ЖВМиМФ, 1969, V.9, No.1, pp. 585-594
- [13] Davis M.; Kapadia P.; Dowden J.:
Solution of a Stefan problem in the theory of laser welding by the method of lines. J. Comp. Phys., 1985, V. 60, pp. 534-548
- [14] Успенский А.Б.:
О методе выпрямления фронтов для многофронтовых одномерных задач типа Стефана. ДАН СССР, 1967, V.172, No.2, pp. 61-64
- [15] M.A. Haftaoglu:
A numerical solution to moving boundary problems - Application to melting and solification. Int. J. Heat Mass Transfer, 1986, V. 29, No.3, 496-499
- [16] Crank J.; Gupta:
Isotherm migration method in two dimensions. Brunel Univ. Tech. Report, 1974, 42 p.
- [17] Biswajit B.; Date A.W.:
Numerical modelling and solidification problems - a review. Sadhana, 1988, V. 13, part 3, pp. 169-213 (printed in India)

[18] Самарский А.А.; Моисеенко Б.Д.:

Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана. ЖВМиФ, 1965, V.5, No.5, pp. 816-827

[19] Meyer G.H.:

The numerical solution of Stefan problems with front-tracking and smoothing methods. Appl. Math. and Comput., 1978, No. 4, pp. 283-306

[20] White B.R.E.:

A modified finite difference scheme for the Stefan problem. Math. of Comput., 1983, V. 41, No. 164, pp. 337-347

[21] Williams M.A.; Wilson D.G.:

Iterative solution of a nonlinear system arising in phase-change problems. SIAM J. Sci. Stat. Comput., 1990, V. 11, No. 6, pp. 1087-1101

[22] Мажукин В.И.; Повещенко Ю.А.; Попов С.Б.; Попов Ю.А.:

Об однородных алгоритмах численного решения задачи Стефана. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР, No.122, 1985

[23] Дарьни Н.А.; Мажукин В.И.:

Математическое моделирование задачи Стефана на адаптивных сетках. Дифф. уравнения, 1987, V.23, No.7, pp. 1154-1160

[24] Мажукин В.И.:

Математическое моделирование проблемы Стефана на адаптивной сетке. В книге: Heat and mass transfer - MIF. Проблемные доклады, Минск, 1988, pp. 125-139

[25] Бреславский П.В.; Мажукин В.И.:

Математическое моделирование процессов импульсного плавления и испарения металла с явным выделением фазовых границ. ИФЖ, 1989, V.57, No.1, pp. 107-114

[26] Мажукин В.И.; Такоева Л.Ю.:

Принципы построения динамически адаптирующихся к решению сеток. Математ. моделирование, 1990, V.2, No.3, pp. 101-118

[27] Дарьин Н.А.; Мажукин В.И.:

Об одном подходе к построению адаптивных разностных сеток. ДАН СССР, 1988, V.298, No.1, pp. 64-68

[28] Самарский А.А.:

Теория разностных схем. Москва, Наука, 1977, 601 p.

Autoren:

Dr.rer.nat. Vladimir I. Mashukin

Dipl.-Math. Pavel V. Breslavskij

Dipl.-Math. Ludmilla Ju. Takoeva

Allunionszentrum für Mathematische Modellierung der Akademie
der Wissenschaften der UdSSR

Miusskaja-Platz 2

125047 Moskva, UdSSR

Dr.rer.nat. Ulrich Semmler

Technische Universität Chemnitz

Fachbereich Maschinenbau II

PSF 964

O-9010 Chemnitz