

**Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ**

УДК 536.2

**Численное решение температурных эффектов  
в полимерных материалах при обработке их  
импульсными ионными пучками с учетом  
релаксационного параметра потоков тепла****Л. А. Комар**

Институт механики сплошных сред УрО РАН; Пермь, Россия

**e-mail: komar@icmm.ru; ORCID: 0000-0003-3837-3016, AuthorID: 10928**

В рамках одномерной постановки задачи проведено численное моделирование движения тепловой волны в материале, поверхность которого обрабатывается импульсным ионным пучком. Действие импульса учтено через функцию источника, которая задана линейной зависимостью от времени и глубины проникновения иона в материал. Приведенное уравнение теплопроводности представляет собой нелинейное дифференциальное уравнение с присутствующим в нем параметром, отражающим время релаксации потока тепла. Уравнение теплопроводности дополняется уравнением изменения во времени теплового потока, предложенное Каттанео и Вернотте. Полученная система уравнений для температуры и теплового потока решена численно с применением метода конечных разностей. Показано существенное влияние значения параметра релаксации на формирование температурных профилей в окрестности обрабатываемой поверхности материала.

**Ключевые слова:** полимер; теплопроводность; релаксация потока; численное моделирование; метод конечных разностей.

Поступила в редакцию 12.05.2022, принята к опубликованию 27.07.2022

**Temperature Effects in Polymer Materials Numerical  
Solution with Using Material Process by a Pulsed Ion Beams  
Taking Into Account the Heat Flows Relaxation Parameter****L. A. Komar**

Institute of Continuum Media Mechanics UB RAS; Perm, Russia

**e-mail: komar@icmm.ru; ORCID: 0000-0003-3837-3016, AuthorID: 10928**

A one-dimensional problem numerical simulation of the thermal wave motion in a material is carried out. The material surface is processed by a pulsed ion beam. The pulse action as a source function is given by a linear dependence on a time and an ion penetration depth into the material. The above heat-conduction equation is a non-linear differential equation with a parameter which presents the relaxation time of the heat flux. The heat-conduction equation is supplemented by the heat flow change in time equation, which was proposed by Cattaneo and Vernotte. The temperature and heat flux equations system is numerically solved with using the finite difference method. A significant relaxation parameter value influence on the temperature profiles formation in the treated material surface vicinity is shown.

**Keywords:** polymer; thermal conductivity; flow relaxation; numerical simulation; finite difference method.

Received 12.05.2022, accepted 27.07.2022

DOI: 10.17072/1993-0550-2022-3-38-48



Эта работа © 2022 Комар Л. А. лицензируется под CC BY 4.0. Чтобы просмотреть копию этой лицензии, посетите <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

## Введение

Современные технологии обработки поверхностей материалов энергетическими источниками различного вида сопровождаются преобразованием энергии в тепловую с целью придания поверхностному слою особых свойств [1].

Обычно этот процесс протекает одновременно с качественным изменением структуры во вновь образовавшемся слое [2–7]. Глубина процесса и толщина слоя могут характеризоваться от мезо- до наноуровня. Несмотря на разнообразие энергетических источников, применяемых в различных областях промышленности, подходы в математическом моделировании этих процессов часто имеют общую основу [8–14]. Особенно это касается процессов, близких к изотермическим, сопровождающихся низкоэнергетическим потоком ионов. При этом математические модели опираются на уравнения неразрывности, движения и баланса массы. В некоторых случаях в уравнении баланса массы необходимо отразить инерционность процессов диффузии, когда конечность времени релаксации становится важной [15–16].

Второй объединяющей чертой в разработке математических моделей является необходимость в описании реальных источников более простыми видами функций [17–19]. В конечном счете описание подобных процессов сводится к хорошо известному классу параболических или гиперболических уравнений. Однако получение решения этих уравнений готовыми и широко распространенными комплексами программ является затруднительным. Причина заключается в существенной разномасштабности течения диффузионного процесса в пространстве и времени. Временной интервал может измеряться в секундах, а пространственный – на уровне нанометров.

Поэтому целесообразно в данном случае применять конечно-разностные методы с тщательной проверкой точности полученных решений [20–22].

## 1. Нелинейная система дифференциальных уравнений

Подробное описание построения уравнения теплопроводности для упругой среды с релаксирующим потоком тепла приведено в статье [23].

В эластомерном материале упругое сопротивление внешней нагрузке происходит за счет изменения энтропии без изменения внутренней энергии. Ограничимся при решении задачи только вопросом изменения температуры тела  $\theta$  и будем полагать, что в материале деформации малы и ими можно пренебречь. Это означает, что массовая плотность свободной энергии  $f$  должна быть представлена в виде

$$f = c_{\theta} \theta (1 - \ln \theta) + \frac{\tau(\mathbf{q} \cdot \mathbf{q})}{2\rho c_{\theta} \theta},$$

а уравнения изменения во времени теплового потока  $\mathbf{q}$  определяется формулой

$$\tau \frac{d\mathbf{q}}{dt} = -\mathbf{q} - c_{\theta} \text{grad} \theta. \quad (1)$$

В работе [23] показано, что уравнение теплопроводности в этом случае принимает вид

$$\rho c_{\theta} \left( 1 - \frac{\tau(\mathbf{q} \cdot \mathbf{q})}{\rho c_{\theta} c_{\theta} \theta^2} \right) \frac{d\theta}{dt} = -\frac{\tau}{c_{\theta} \theta} \frac{d(\mathbf{q} \cdot \mathbf{q})}{dt} - \text{div} \mathbf{q} + \rho r, \quad (2)$$

где  $t$  – время,  $\rho$  – плотность материала,  $c_{\theta}$  – удельная теплоемкость,  $\tau$  – характерное время релаксации теплового потока,  $c_{\theta}$  – коэффициент теплопроводности,  $r$  – массовая плотность источников тепла.

В одномерной постановке, когда координатная ось совпадает с направлением движения иона, задача может быть приведена к нелинейной системе дифференциальных уравнений 1-го порядка по времени и пространству:

$$\left( 1 - c_x \frac{q_*^2}{\theta_*^2} \right) \frac{\partial \theta_*}{\partial t_*} = 2c_x \frac{q_*}{\theta_*} \frac{\partial \theta_*}{\partial x_*} + 2c_x \frac{q_*^2}{\theta_*} - c_x \frac{\partial q_*}{\partial x_*} + (1 - x_*) H_{\text{hev}} (1 - x_*) H_{\text{hev}} (1 - t_*) \quad (3)$$

$$\frac{\partial q_*}{\partial t_*} = -q_* - \frac{\partial \theta_*}{\partial x_*},$$

которая записана относительно безразмерных величин  $t_*$ ,  $x_*$ ,  $\theta_*(t_*, x_*)$  и  $q_*(t_*, x_*)$ , которыми обозначены, соответственно, независимые момент времени и точка на координатной оси, зависимые температура и тепловой поток.

Процедуру обезразмеривания величин  $t$ ,  $x$ ,  $\theta(t, x)$  и  $q(t, x)$  в уравнениях (1) и (2) осуществим с помощью релаксационного параметра  $\tau$ , материальных констант  $\rho$ ,  $c_Q$ ,  $c_\theta$  и характерных параметров ионной обработки ( $\Delta t_{ion}$  – время подачи импульсного пучка ионов;  $e$  – кинетическая энергия иона;  $h$  – максимальная глубина проникновения иона;  $N$  – количество ионов, которые во время одного импульса проходят через единицу площади поверхности образца;  $\alpha$  – та часть кинетической энергии, которая тратится на разогрев материала и может быть меньше 1, если часть кинетической энергии идет на разрушение полимерных цепей):

$$t = \tau t_*, \quad x = h x_*, \quad \theta = \frac{c_r \tau}{\rho c_Q} \theta_*, \quad q = \frac{c_\theta c_r \tau}{\rho c_Q h} q_*,$$

где

$$c_r = \frac{2\alpha N e}{\Delta t_{ion} h}, \quad c_x = \frac{c_\theta \tau}{\rho c_Q h^2}.$$

Источник тепла управляется функциями Хевисайда  $H_{hev}(1-x_*)$ ,  $H_{hev}(1-t_*)$ .

Для решения системы уравнений (3) используем устойчивую конечно-разностную схему [20] с постоянными шагами по времени и координатам  $h_t$  и  $h_x$ . Для избежания нагромождения вновь образованных индексов у всех безразмерных величин будет опущен индекс в виде звездочки. С учетом этого примечания перепишем систему уравнений (3) в виде конечно-разностных уравнений с постоянными коэффициентами для моментов времени  $t_i$ ,  $t_{i+1}$  и координатных точек  $x_{k-1}$ ,  $x_k$ ,  $x_{k+1}$ :

$$\begin{aligned} & \left(1 - c_x \frac{q^2}{\theta^2}\right) \left(\frac{\theta_k^{i+1} - \theta_k^i}{\Delta t}\right) = 2c_x \frac{q}{\theta} \left(\frac{\theta_{k+1}^{i+1} - \theta_{k-1}^{i+1}}{2\Delta x}\right) + \\ & 2c_x \frac{q^2}{\theta^2} - c_x \left(\frac{q_{k+1}^{i+1} - q_{k-1}^{i+1}}{2\Delta x}\right) + \\ & (1-x)H_{hev}(1-x)H_{hev}(1-t) \\ & \frac{q_k^{i+1} - q_k^i}{\Delta t} + \frac{\theta_{k+1}^{i+1} - \theta_{k-1}^{i+1}}{2\Delta x} = -q, \end{aligned} \quad (4)$$

где величинам  $\theta$  и  $q$  присваиваются значения, определенные на предыдущем шаге по времени по всей координатной сетке. Для начального шага по времени они определяются из начальных условий.

Список искоемых величин в системе (4) для момента времени  $t_{i+1}$  перечислим в следующем порядке:  $\theta_{k-1}^{i+1}$ ,  $\theta_k^{i+1}$ ,  $\theta_{k+1}^{i+1}$ ,  $q_{k-1}^{i+1}$ ,  $q_k^{i+1}$ ,  $q_{k+1}^{i+1}$ .

Такой порядок позволяет из системы уравнений (4) получить алгебраическую систему уравнений с диагональной матрицей, у которой каждые две строки соответствуют одному моменту времени и могут быть представлены в общем виде:

$$\begin{aligned} & a_{11}\theta_{k-1}^{i+1} + a_{12}\theta_k^{i+1} + a_{13}\theta_{k+1}^{i+1} + \\ & a_{14}q_{k-1}^{i+1} + a_{15}q_k^{i+1} + a_{16}q_{k+1}^{i+1} = b_1 \\ & a_{21}\theta_{k-1}^{i+1} + a_{22}\theta_k^{i+1} + a_{23}\theta_{k+1}^{i+1} + \\ & a_{24}q_{k-1}^{i+1} + a_{25}q_k^{i+1} + a_{26}q_{k+1}^{i+1} = b_2, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$a_{11} = c_x \frac{q}{\theta} \frac{1}{\Delta x}; \quad a_{12} = \left(1 - c_x \frac{q^2}{\theta^2}\right) \frac{1}{\Delta t}; \quad a_{13} = -a_{11};$$

$$a_{14} = -c_x \frac{1}{2} \frac{1}{\Delta x}; \quad a_{15} = 0; \quad a_{16} = -a_{14};$$

$$a_{21} = -\frac{1}{2} \frac{1}{\Delta x}; \quad a_{22} = 0; \quad a_{23} = -a_{21}; \quad a_{24} = 0;$$

$$a_{25} = \frac{1}{\Delta t}; \quad a_{26} = 0;$$

$$b_1 = \left(1 - c_x \frac{q^2}{\theta^2}\right) \frac{1}{\Delta t} \theta_k^i + 2c_x \frac{q^2}{\theta} +$$

$$(1-x)H_{hev}(1-x)H_{hev}(1-t);$$

$$b_2 = \frac{1}{\Delta t} q_k^i - q.$$

Следует заметить, что в таком виде система уравнений (5) не является полной.

Приведем пояснения к этому замечанию. Обозначим количество точек на интервале времени величиной  $N_t + 1$ , на координатной сетке величиной  $N_x + 1$ . В этом случае в системе (5) индекс  $i$ , привязанный ко времени, может пробегать значения от 1 до  $N_t$ , а индекс  $k$ , привязанный к координате, от 2 до  $N_x$ .

Отсюда следует, что система (5) состоит из  $2(N_x - 1)$  уравнений, так как для каждого значения  $k$  сформулировано два уравнения. Однако общее количество искоемых величин равно  $2(N_x + 1)$ .

Перечислим их:

$$\theta_1^{i+1}, \theta_2^{i+1}, \dots, \theta_{N_x}^{i+1}, \theta_{N_x+1}^{i+1}, \\ q_1^{i+1}, q_2^{i+1}, \dots, q_{N_x}^{i+1}, q_{N_x+1}^{i+1}.$$

Для полноты системы уравнений (5) не хватает четырех уравнений. Дополним ее за счет граничных условий, которые зададим, исходя из следующих соображений. Предположим, что на границах значение теплового потока равно 0, тогда для выполнения второго уравнения системы (3) должно выполняться условие

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = 0.$$

Такие граничные условия для крайних точек  $k=1$  и  $k=N_x+1$  дополняют систему уравнений (5) следующими недостающими четырьмя связями:

$$\theta_2^{i+1} - \theta_1^{i+1} = 0; \theta_{N_x+1}^{i+1} - \theta_{N_x}^{i+1} = 0; \\ q_1^{i+1} = 0; q_{N_x+1}^{i+1} = 0.$$

В качестве начальных условий зададим комнатную температуру и нулевой тепловой поток.

## 2. Линеаризация системы дифференциальных уравнений (3)

Для избежания трудностей получения решения нелинейной системы уравнений, связанных с необходимостью проверки сходимости численной схемы на достаточно длительных интервалах времени, рассмотрены условия, позволяющие осуществить линеаризацию нелинейной системы. В данной работе применена процедура линеаризации нелинейной системы при малых значениях параметра релаксации.

Рассмотрим процессы (1, 2), при которых характерное время релаксации  $\tau$  имеет настолько малое значение, что выполняются следующие неравенства:

$$\frac{\tau}{\rho c_Q c_\theta \theta^2} \ll \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}, \quad \frac{\tau}{c_\theta \theta} \ll \frac{d(\mathbf{q} \cdot \mathbf{q})}{dt}. \quad (6)$$

В этом случае система уравнений (3) может быть приведена к линейному виду:

$$\frac{\partial \theta_*}{\partial t_*} = -c_x \frac{\partial q_*}{\partial x_*} + (1-x_*)H_{\text{hev}}(1-x_*)H_{\text{hev}}(1-t_*), \quad (7)$$

$$\frac{\partial q_*}{\partial t_*} = -q_* - \frac{\partial \theta_*}{\partial x_*}.$$

Описание процедуры построения конечно-разностных уравнений для этой системы будет опущено, так как оно идентично с приведенным в предыдущем параграфе. При этом воспользуемся аналогичной оговоркой, а именно: для того чтобы исключить нагромождение вновь образованных индексов, у всех безразмерных величин опустим индекс в виде звездочки. Приведем систему уравнений (7) к виду, аналогичному системе (5), получим следующий список коэффициентов:

$$a_{11} = 0; a_{12} = \frac{1}{\Delta t}; a_{13} = 0; \\ a_{14} = -c_x \frac{1}{2} \frac{1}{\Delta x}; a_{15} = 0; a_{16} = -a_{14}; \\ a_{21} = -\frac{1}{2} \frac{1}{\Delta x}; a_{22} = 0; a_{23} = -a_{21}; a_{24} = 0; \\ a_{25} = \frac{1}{\Delta t}; a_{26} = 0; \\ b_1 = \frac{1}{\Delta t} \theta_k^i + (1-x)H_{\text{hev}}(1-x)H_{\text{hev}}(1-t); \\ b_2 = \frac{1}{\Delta t} q_k^i - q.$$

Очевидно, что коэффициенты  $a_{2j}$  и свободный член  $b_2$  после линеаризации остались неизменными.

## 3. Применение конечно-разностных схем к формированию профилей тепловых потоков в полиуретане, поверхность которого подвергается одним импульсом ионов азота

Конечно-разностную схему (5), соответствующую системам уравнений (3) и (7), применим для моделирования профилей тепловых потоков, возникающих на поверхности полиуретанового материала, обрабатываемого ионами азота с энергией  $e=20$  кэВ до флюенса  $10^{16}$  ион/см<sup>2</sup>, достигнутого за 200000 импульсов с частотой 100 Гц. В данном случае следует отметить, что в реальных процессах имеет место неоднородность концентрации распределения ионов в потоке. Поэтому рассматривался участок материала, в котором количество ионов азота  $N$ , проходящих во время одного импульса через единицу площади поверхности, превышает задаваемое в эксперименте значение в 5 раз. Глубина проникновения ионов равнялась 80 нм. Длительность импульса  $\Delta t_{ion}$  задавалась равной 20 микросекунд.

Эти данные соответствуют значениям величин в проводимых в ИМСС УрО РАН экспериментах. Объемная плотность полиуретана, его удельные теплоемкость и теплопроводность имели значения

$$\rho = 1200 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}, \quad c_Q = 1380 \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-2} \cdot \text{К}^{-1},$$

$$c_\theta = 028 \text{ кг} \cdot \text{м} \cdot \text{с}^{-3} \cdot \text{К}^{-1}.$$

По имеющимся в литературе данным релаксационный параметр  $\tau$  меняется в очень широком диапазоне от пикосекунд [24] до нескольких секунд [25, 26]. Предпримем попытку определить, какие значения  $\tau$  можно считать малыми в рамках поставленной задачи. Для начальных расчетов примем значение  $\tau$  равное 0.0001 секунде, рассчитанное теоретически и приведенное в работе [27] для наножидкостей. Так же оценим, как изменятся результаты расчетов при  $\tau = 0.001$  и  $0.01$  с.

### 3.1. Проверка точности вычислительной схемы

Для проверки точности схемы (5) проводились вычисления на вдвое сгущающейся сетке при начальном шаге  $h_x = 0.01$  и постоянном шаге  $h_t = 0.01$  на интервале времени  $t = [0; \Delta t]$ . Вычисления на сетках с шагами  $h_x$ ,  $h_x / 2$  и  $h_x / 4$  показали сходимость результатов, выраженных в уменьшении значений величин  $Z_\theta$  и  $Z_q$  (табл. 1, 2):

$$Z_\theta = \max \frac{|\Delta\theta_{h_x}(\Delta t, x) - \Delta\theta_{h_x/2}(\Delta t, x)|}{\Delta\theta_{h_x}(\Delta t, x)},$$

$$Z_q = \max \frac{|\Delta q_{h_x}(\Delta t, x) - \Delta q_{h_x/2}(\Delta t, x)|}{\Delta q_{h_x}(\Delta t, x)}.$$

Величина  $\Delta\theta_{h_x}(\Delta t, x)$  равна разности полученных решений систем (4) и (7) на сетке  $h_x$ .

Таблица 1

Сходимость результатов для нелинейной системы (3)		
$\tau = 0.0001$ с		
$h_x$	$Z_\theta$	$Z_q$
0.010	0.00986952	0.010007657
0.005	0.00488403	0.004965185
$\tau = 0.001$ с		
0.010	0.00992625	0.005155702
0.005	0.00493693	0.002564946
$\tau = 0.01$ с		
0.010	0.00620040	$1.30749 \cdot 10^{-5}$
0.005	0.00304604	$4.13950 \cdot 10^{-6}$

Таблица 2

Сходимость результатов для линеализованной системы (7)		
$\tau = 0.0001$ с		
$h_x$	$Z_\theta$	$Z_q$
0.010	0.010108938	0.009993954
0.005	0.005002969	0.004951791
$\tau = 0.001$ с		
0.010	0.009811711	0.005332388
0.005	0.004873712	0.002565516
$\tau = 0.01$ с		
0.010	0.006184282	$4.54843 \cdot 10^{-7}$
0.005	0.003038161	0.00000000

Данные в таблицах подтверждают стабильное уменьшение значений величин  $Z_\theta$  и  $Z_q$  при сгущении сетки, поэтому дальнейшее численное моделирование проводилось при  $h_x = 0.01$  и  $h_t = 0.01$ .

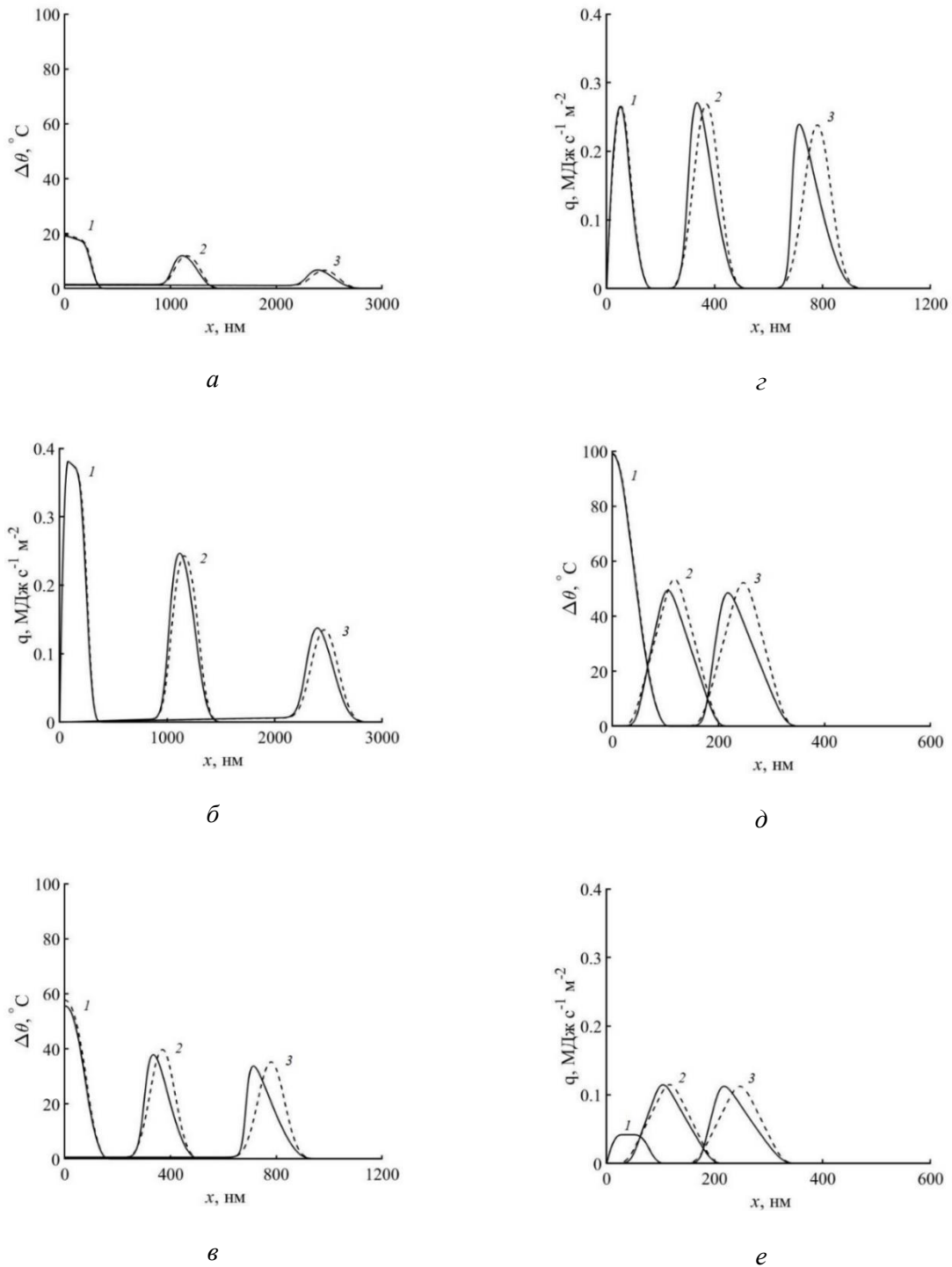
## 4. Обсуждение результатов

Полученные системы уравнений (3) и (7), сведенные к виду (5), решались методом матричной прогонки (рис. 1). Расчеты проводились для трех разных значений параметра  $\tau$ , последовательно равных 0.0001, 0.001 и 0.01 секундах, с целью получения оценки влияния этого параметра на температурно-волновые процессы, проходящие вблизи к обрабатываемой поверхности материала.

Следует заметить, что построенные температурные и тепловые профили в материале представляют собой движущуюся волну от поверхности в глубину материала с отрывом в момент времени прекращения действия импульса. Несмотря на появление тепловой волны, передача тепла всегда происходит от границы материала в глубь образца, и с течением времени волна уходит дальше в глубину материала.

С другой стороны, на рисунках хорошо видно, что увеличение значения величины  $\tau$  приводит к повышению температуры на обрабатываемой поверхности материала. При этом изменение температурных профилей сопровождается ярко выраженным уменьшением длины волны.

Чем больше значение параметра релаксации, тем медленнее идет движение тепловой волны в глубину материала.



**Рис. 1.** Профили изменения температуры (а, в, д) и теплового потока (б, г, е) для моментов времени  $\Delta t_{\text{ion}}$  (линии 1),  $5\Delta t_{\text{ion}}$  (линии 2),  $10\Delta t_{\text{ion}}$  (линии 3). Решение нелинейных уравнений (3) показано сплошными линиями, линеализованной (7) – пунктирными линиями.  $\tau = 0.0001 \text{ с}$  (а, б);  $\tau = 0.001 \text{ с}$  (в, г);  $\tau = 0.01 \text{ с}$  (д, е)

Это означает, чем больше  $\tau$ , тем ощутимее колебательные температурно-волновые процессы возникают вблизи к поверхности материала, которые, вероятно, способны повлечь

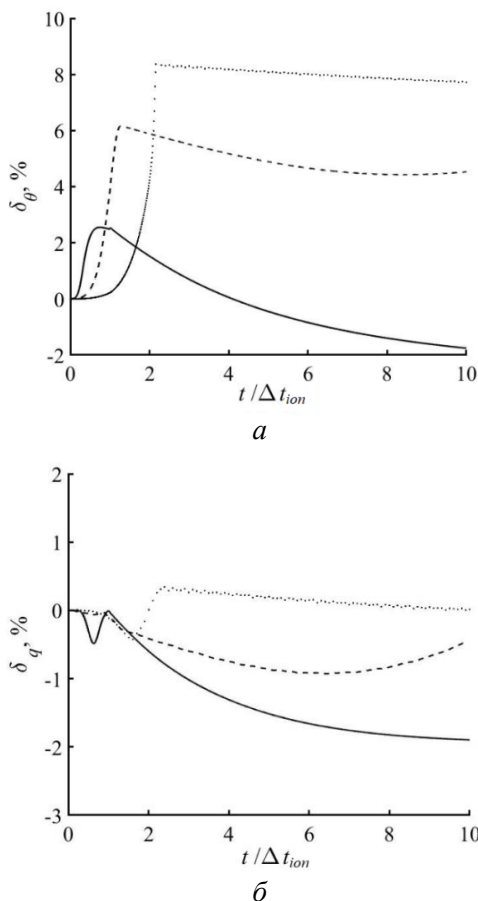
за собой возникновение более высокого напряженно-деформированного состояния в этом слое. При сравнении результатов решений нелинейной (3) и линеализованной (7) систем

дифференциальных уравнений визуально обнаружилось расхождение температуры и теплового потока.

Для оценки расхождения введем величину  $\delta_\theta$ , представляющую собой относительную погрешность вычислений приращения температуры:

$$\delta_\theta = \frac{\Delta\theta_F(t, x) - \Delta\theta_L(t, x)}{\Delta\theta_F(t, x)} 100\%, \quad (8)$$

где  $\Delta\theta_F(t, x)$  и  $\Delta\theta_L(t, x)$  – максимальные значения повышения температуры во всем материале в момент времени  $t$ , полученные, соответственно, с помощью систем уравнений (3) и (7). Изменение значений погрешностей  $\delta_\theta$  и  $\delta_q$  для разных  $\tau$  приведены на рис. 2. Величиной  $\delta_q$  оценивается погрешность вычисления теплового потока, определяемая по аналогии с формулой (8).



**Рис. 2.** Относительные погрешности вычислений температуры и потока  $\delta_\theta$  (а) и  $\delta_q$  (б).  $\tau = 0.0001$  с (сплошные линии);  $\tau = 0.001$  с (пунктирные линии);  $\tau = 0.01$  с (точечные линии)

Анализируя значения погрешностей  $\delta_\theta$  и  $\delta_q$ , можно оценить правомерность линеаризации системы уравнений (3), следующее из определения значений величины  $\tau$ , при которых незначительно искажается решение нелинейной системы уравнений (рис. 2).

Однозначно можно отметить следующее. Линеаризация системы (3) и увеличение  $\tau$  в пределах расчетного интервала времени  $t = [0; 10\Delta t_{ion}]$  слабо сказываются на значениях теплового потока  $q$ , на значениях же температуры  $\theta$  – довольно существенно.

На рис. 2а показано, что при  $\tau = 0.01$  секунд погрешность  $\delta_\theta$  продолжает расти даже после выключения потока ионов и к моменту времени  $t > 2\Delta t_{ion}$  достигает значения более 8%. Очевидно, что при таком значении  $\tau$  не следует пользоваться решением линеаризованной системы.

В дополнение к этому, следует обратить внимание на значительное расхождение пиков волн на координатной сетке при сравнении решений нелинейной и линеаризованной систем (рис. 1).

Исследование причины появления этого расхождения в рамках данной работы не проводилось, поскольку главная цель заключалась в демонстрации зависимости рассматриваемых явлений от параметра релаксации, которая выразилась в тенденции роста значения температуры на поверхности и снижения значения теплового потока с ростом значения параметра релаксации.

## Выводы

На основе нелинейного уравнения теплопроводности с релаксирующим потоком тепла произведены расчеты изменения температуры и теплового потока в поверхностном слое материала, обрабатываемом импульсным ионным пучком. Численные решения получены с применением метода конечных разностей.

Исследование влияния параметра релаксации показало, что увеличение его значения приводит к повышению температуры на обрабатываемой поверхности материала. При этом изменение температурных профилей сопровождается ярко выраженным уменьшением длины волны. Чем больше значение параметра релаксации, тем медленнее идет движение тепловой волны в глубину материала.

Изложен способ линеаризации уравнения теплопроводности. Проведенный анализ степени различия полученных решений до и после линеаризации уравнения теплопроводности в зависимости от значения параметра релаксации показал, что наиболее ярко расхождение в данных проявляется в несовпадении пиков волн на координатной сетке после выключения импульса. Пики волн, соответствующие нелинейной системе, имеют тенденцию отклоняться в сторону обрабатываемой поверхности.

При увеличении значения параметра релаксации в 100 раз погрешность вычислений температуры после линеаризации растет даже после выключения импульса и превышает 8%. Возможно, что это значение параметра релаксации следует назвать предельным и при дальнейшем его повышении не следует пользоваться решением линеаризованной системы уравнений.

### Список литературы

1. Солоненко О.П., Алхимов А.П., Марусин В.В., Оршич А.М. Высокоэнергетические процессы обработки материалов. Новосибирск: Наука, Сиб. издат. фирма РАН, 2000. 425 с.
2. Kondyurina I., Nechitailo G.S., Svistkov A.L., Kondyurin A., Bilek M. Urinary catheter with polyurethane coating modified by ion implantation // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2015. Vol. 342. P. 39–46. DOI: 10.1016/j.nimb.2014.09.011.
3. Kurella A., Dahotre N.B. Review paper: Surface Modification for Bioimplants: The Role of Laser Surface Engineering // J. Biomater. Appl. 2005. Vol. 20, № 1. P. 5–50. DOI: 10.1177/0885328205052974.
4. Morozov I.A., Kamenetskikh A.S., Scherban M.G. The challenges of creating deformable plasma coatings on the surface of elastic polymers // AIP Conference Proceedings 2176. 2019. N.040009. DOI: 10.1063/1.5135158.
5. Hauert R., Thorwarth K., Thorwarth G. An overview on diamond-like carbon coatings in medical applications // Surface and Coatings Technology. 2013. Vol. 233. P. 119–130. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2013.04.015.
6. Chudinov V., Kondyurina I., Terpugov V., Kondyurin A. Weakened foreign body response to medical polyurethane treated by plasma immersion ion implantation // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2019. Vol. 440, № 4. P. 163–174. DOI: 10.1016/j.nimb.2018.12.026.
7. Ляникова А.В. Моделирование процессов образования наноструктур при плазменном напылении пористопорошковых гидроксидатитовых покрытий // Известия Саратовского университета. Сер. Физика. 2011. Т. 11, вып. 1. С. 37–41.
8. Князева А.Г. Моделирование физических и химических явлений в процессах обработки поверхностей материалов высокоэнергетическими источниками // Математическое моделирование систем и процессов. 2009. № 17. С. 66–84.
9. Витохин Е.Ю., Бабенков М.Б. Численное и аналитическое исследование распространения термоупругих волн в среде с учетом релаксации теплового потока // Прикладная механика и техническая физика. 2016. Т. 57, № 3. С. 171–185.
10. Курсанов Ю.А., Курсанов А.Ю., Юдахин А.Е. Метод измерения тепловой релаксации в твердом теле // Теплофизика высоких температур. 2018. Т. 56, № 3. С. 446–454. DOI: 10.7868/S0040364418030183.
11. Курсанов Ю. А., Курсанов А. Ю. Описание кратковременного процесса уравнением теплопроводности с дробными производными // Труды Академэнерго. 2020. № 3. С. 7–19.
12. Ordóñez-Miranda J., Alvarado-Gil J.J. Thermal wave oscillations and thermal relaxation time determination in a hyperbolic heat transport model // International Journal of Thermal Sciences. 2009. Vol. 48, № 11. P. 2053–2062. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2009.03.008.
13. Vedavarz A., Kumar S., Moallemi M. K. Significance of Non-Fourier Heat Waves in Conduction // Journal of Heat Transfer. 1994. Vol. 116. P. 221–224. DOI:10.1115/1.2910859.
14. Бабенков М. Б. Анализ распространения гармонических возмущений в термоупругой среде с релаксацией теплового потока // Прикладная механика и техническая физика. 2013. Т. 54, № 2. С. 126–137.
15. Ильина Е.С., Демидов В.Н., Князева А.Г. Особенности моделирования диффузионных процессов в упругом теле при его поверхностной модификации частицами // Вестник ПНИПУ. Механика. 2012. № 3. С. 25–49.
16. Amirkhanov I.V., Sarker N.R., Sarkhadov I. Numerical simulation of thermal processes occurring in materials under the action of femtosecond laser pulses // Discrete and Continuous



- Models and Applied Computational Science. 2021. Vol. 29, № 1. P. 5–13. DOI: 10.22363/2658-4670-2021-29-1-5-13.
17. *Амирханов И.В., Дидык А.Ю., Земляная Е.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. и др.* Численное исследование температурных эффектов в материалах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий в рамках уравнений теплопроводности для электронов и решетки // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 1(130). С. 63–75.
  18. *Waligorski M.R.P., Hamm R.N., Katz R.* The radial distribution of dose around the path of a heavy ion in liquid water // Nucl. Tracks Radiat. Meas. 1986. Vol. 11. P. 306–319.
  19. *Князева А.Г., Тян А.В.* Численное моделирование электронно-лучевой обработки материалов с учетом поверхностной активации и внутренних механических напряжений // Вычислительные технологии. 2010. Т. 15, № 3. С. 82–98.
  20. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. 258 с.
  21. *Самарский А.А., Гулин А.В.* Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973. 308 с.
  22. *Турчак Л.И.* Основы численных методов. М.: Наука, 1987. 277 с.
  23. *Комар Л. А., Свистков А. Л.* Термодинамика упругого материала с релаксирующим потоком тепла // Известия РАН. Механика твердого тела. 2020. № 4. С. 152–157. DOI: 10.31857/S0572329920040066.
  24. *Matsunaga R. H., Santos I.* Measurement of the Thermal Relaxation Time in Agar-gelled Water // 34th Annual International Conference of the IEEE EMBS. 2012. P. 5722–5725.
  25. *Mitra K., Kumar S., Vedavarz A., Moallemi M.K.* Hyperbolic Heat Conduction in Processed Meat // Journal of Heat Transfer. 1995. Vol. 117. P. 568–573.
  26. *Roetzel W., Putra N., Das S.K.* Experiment and analysis for non-Fourier conduction in materials with non-homogeneous inner structure // International Journal of Thermal Sciences. 2003. Vol. 2. P. 541–552. DOI: 10.1016/S1290-0729(03)00020-6.
  27. *Khayat R.E., de Bruyn J., Niknami M., Stranges D.F., Khorasany R.M.H.* Non-Fourier effects in macro- and micro-scale non-isothermal flow of liquids and gases. Review // International Journal of Thermal Sciences. 2015. Vol. 97. P. 163–177. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2015.06.007.
- ## References
1. *Colonenko O.P., Alhimov A.P., Marusin V.V., Orishich A.M.* Vysokoenergeticheskie processy obrabotki materialov. Novosibirsk: Nauka, Sib. izdat. firma RAN, 2000. 425 s.
  2. *Kondyurina I., Nechitailo G.S., Svisnikov A.L., Kondyurin A., Bilek M.* Urinary catheter with polyurethane coating modified by ion implantation // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2015. Vol. 342. P. 39–46. DOI: 10.1016/j.nimb.2014.09.011.
  3. *Kurella A., Dahotre N.B.* Review paper: Surface Modification for Bioimplants: The Role of Laser Surface Engineering // J. Biomater. Appl. 2005. Vol. 20, № 1. P. 5–50. DOI: 10.1177/0885328205052974.
  4. *Morozov I.A., Kamenetskikh A.S., Scherban M.G.* The challenges of creating deformable plasma coatings on the surface of elastic polymers // AIP Conference Proceedings 2176. 2019. 040009. DOI: 10.1063/1.5135158.
  5. *Hauert R., Thorwarth K., Thorwarth G.* An overview on diamond-like carbon coatings in medical applications // Surface and Coatings Technology. 2013. Vol. 233. P. 119–130. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2013.04.015.
  6. *Chudinov V., Kondyurina I., Terpugov V., Kondyurin A.* Weakened foreign body response to medical polyurethane treated by plasma immersion ion implantation // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2019. Vol. 440, № 4. P. 163–174. DOI: 10.1016/j.nimb.2018.12.026.
  7. *Lyasnikova A.V.* Modelirovanie processov obrazovaniya nanostruktur pri plazmennom napylenii poristoporoshkovykh gidroksiapatitovykh pokrytij // Izvestiya Saratovskogo universiteta. Ser. Fizika. 2011. T. 11. Vyp. 1. S. 37–41.
  8. *Knyazeva A.G.* Modelirovanie fizicheskikh i himicheskikh yavlenij v processah obrabotki poverhnostej materialov vysokoenergeticheskimi istochnikami // Matematicheskoe modelirovanie sistem i processov. 2009. № 17. S. 66–84.
  9. *Vitohin E. YU., Babenkov M.B.* Chislennoe i analiticheskoe issledovanie rasprostraneniya termouprugih voln v srede s uchetom relaksacii teplovogo potoka // Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika. 2016. T. 57, № 3. S. 171–185.

10. Kirsanov YU. A., Kirsanov A. YU., YUdahin A.E. Metod izmereniya teplovoj relaksacii v tverdom tele // *Teplofizika vysokih temperatur*. 2018. T. 56, № 3. S. 446–454. DOI: 10.7868/S0040364418030183.
11. Kirsanov YU. A., Kirsanov A. YU. Opisaniye kratkovremennogo processa uravneniem teploprovodnosti s drobnymi proizvodnymi // *Trudy Akademenergo*. 2020. № 3. S. 7–19.
12. Ordóñez-Miranda J., Alvarado-Gil J. J. Thermal wave oscillations and thermal relaxation time determination in a hyperbolic heat transport model // *International Journal of Thermal Sciences*. 2009. Vol. 48, № 11. P. 2053–2062. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2009.03.008.
13. Vedavarz A., Kumar S., Moallemi M.K. Significance of Non-Fourier Heat Waves in Conduction // *Journal of Heat Transfer*. 1994. Vol. 116. P. 221–224. DOI: 10.1115/1.2910859.
14. Babenkov M.B. Analiz rasprostraneniya garmonicheskikh vozmushchenij v termouprugoj srede s relaksaciej teplovogo potoka // *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika*. 2013. T. 54, № 2. S. 126–137.
15. Il'ina E.S., Demidov V.N., Knyazeva A.G. Osobennosti modelirovaniya diffuzionnyh processov v uprugom tele pri ego poverhnostnoj modifikacii chasticami // *Vestnik PNIPU. Mekhanika*. 2012. № 3. S. 25–49.
16. Amirkhanov I.V., Sarker N.R., Sarkhadov I. Numerical simulation of thermal processes occurring in materials under the action of femtosecond laser pulses // *Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science*. 2021. Vol. 29, № 1. P. 5–13. DOI: 10.22363/2658-4670-2021-29-1-5-13.
17. Amirhanov I.V., Didyk A.YU., Zemlyanaya E.V., Puzynin I.V., Puzynina T.P. i dr. CHislennoe issledovanie temperaturnykh effektov v materialah pri obluchenii ih tyazhelymi ionami vysokih energij v ramkah uravnenij teploprovodnosti dlya elektronov i reshetki // *Pis'ma v ECHAYA*. 2006. T. 3, № 1(130). S. 63–75.
18. Waligorski M.R.P., Hamm R.N., Katz R. The radial distribution of dose around the path of a heavy ion in liquid water // *Nucl. Tracks Radiat. Meas.* 1986. Vol. 11. P. 306–319.
19. Knyazeva A.G., Tyan A.V. CHislennoe modelirovaniye elektronno-luchevoj obrabotki materialov s uchetom poverhnostnoj aktivacii i vnutrennih mekhanicheskikh napryazhenij // *Vychislitel'nye tekhnologii*. 2010. T. 15, № 3. S. 82–98.
20. Samarskij A.A. *Teoriya raznostnyh skhem*. M.: Nauka, 1983. 258 s.
21. Samarskij A.A., Gulin A.V. *Ustojchivost' raznostnyh skhem*. M.: Nauka, 1973. 308 s.
22. Turchak L.I. *Osnovy chislennykh metodov*. M.: Nauka, 1987. 277 s.
23. Komar L.A., Svistkov A.L. Termodinamika uprugogo materiala s relaksiruyushchim potokom tepla // *Izvestiya RAN. Mekhanika verdogotela*. 2020. № 4. C. 152–157. DOI: 10.31857/S0572329920040066.
24. Matsunaga R. H., Santos I. Measurement of the Thermal Relaxation Time in Agar-gelled Water // *34th Annual International Conference of the IEEE EMBS*. 2012. P. 5722–5725.
25. Mitra K., Kumar S., Vedavarz A., Moallemi M.K. Hyperbolic Heat Conduction in Processed Meat // *Journal of Heat Transfer*. 1995. Vol. 117. P. 568–573.
26. Roetzel W., Putra N., Das S.K. Experiment and analysis for non-Fourier conduction in materials with non-homogeneous inner structure // *International Journal of Thermal Sciences*. 2003. Vol. 42. P. 541–552. DOI: 10.1016/S1290-0729(03)00020-6.
27. Khayat R.E., de Bruyn J., Niknami M., Stranges D.F., Khorasany R.M.H. Non-Fourier effects in macro- and micro-scale non-isothermal flow of liquids and gases. Review // *International Journal of Thermal Sciences*. 2015. Vol. 97. P. 163–177. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2015.06.007.

#### Благодарности

Работа выполнена в рамках госзадания ПФИЦ рО РАН (№ АААА-А20-120022590044-7).

#### Acknowledgements

The work is supported by Perm Federal Research Center of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences (No. ААААА20-120022590044-7).

**Просьба ссылаться на эту статью:**

*Комар Л.А.* Численное решение температурных эффектов в полимерных материалах при обработке их импульсными ионными пучками с учетом релаксационного параметра потоков тепла // Вестник Пермского университета. Математика. Механика. Информатика. 2022. Вып. 3(58). С. 38–48. DOI: 10.17072/1993-0550-2022-3-38-48.

**Please cite this article as:**

*Komar L.A.* Temperature Effects in Polymer Materials Numerical Solution with Using Material Process by a Pulsed Ion Beams Taking Into Account the Heat Flows Relaxation Parameter // Bulletin of Perm University. Mathematics. Mechanics. Computer Science. 2022. Issue 3(58). P. 38–48. DOI: 10.17072/1993-0550-2022-3-38-48.