

**И.В.Амирханов, Е.В.Земляная, И.В.Пузынин,
Т.П.Пузынина, И.Сархадов¹**

**НЕЯВНАЯ СХЕМА ВТОРОГО ПОРЯДКА
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕРМОУПРУГИХ
ЭФФЕКТОВ В МЕТАЛЛАХ ПРИ ИХ ОБЛУЧЕНИИ
ИМПУЛЬСНЫМИ ПУЧКАМИ ИОНОВ²**

В работе рассматривается система двух нелинейных уравнений в частных производных, возникающая при моделировании термоупругих эффектов в металлах при их облучении импульсными пучками ионов. Мы представляем реализацию конечно-разностной аппроксимации этой математической модели на основе неявных абсолютно устойчивых схем второго порядка и решение полученных алгебраических уравнений методом матричной прогонки. Дано описание разработанных вычислительных схем и полученных численных результатов.

**I.V.Amirkhanov, E.V.Zemlyanaya, I.V.Puzynin,
T.P.Puzynina, I.Sarhadov**

**The second order implicit scheme for the numerical study of the
thermoelastic effects in metals irradiated by pulsed ion beams**

We study the system of two nonlinear partial differential equations simulating the thermoelastic effects in metals irradiated by pulsed ion beams. We present a finite-difference approximation of this system on the basis of the absolutely stable implicit second order schemes and solution of the corresponding algebraic system by means of the matrix sweep. Description of the developed computational schemes and numerical results are given in the paper.

¹Таджикский государственный национальный университет, Душанбе.

²Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 99-01-01101, 0001 00617).

1 Введение

Одним из перспективных направлений пучковой технологии с точки зрения модификации свойств материалов является воздействие на них концентрированных потоков энергии (см. обзор [1] и ссылки в нем). Формирование термоупругих волн в металлах при воздействии интенсивных пучков ионов рассматривалось авторами в предыдущих работах [2, 3]. В этих работах была дана математическая постановка задачи в виде системы двух нелинейных уравнений в частных производных и представлены численные результаты, полученные при дискретной аппроксимации исходной математической модели с помощью условно устойчивых явных схем.

Поскольку ограничения на шаг по времени в условно устойчивых конечно-разностных схемах создают определенные трудности при усложнении модели, в частности, при численном моделировании фазовых переходов в рассматриваемой задаче, нашей целью было создание программы, более удобной с этой точки зрения и к тому же более высокого по сравнению с [3] порядка точности, на основе абсолютно устойчивых неявных схем, которая могла бы быть использована как часть программного комплекса для дальнейшего изучения и развития математической модели исследуемой физической проблемы.

Таким образом, настоящая работа является продолжением исследований, выполненных в работах [2, 3]. Мы здесь представляем реализацию дискретной аппроксимации той же математической модели с использованием неявных абсолютно устойчивых дискретных схем и решение полученных алгебраических уравнений методом матричной прогонки. Программа матричной прогонки реализована в общем виде для алгебраических систем любого порядка, поэтому представляет собой самостоятельный интерес и может быть использована в других аналогичных задачах.

В работе дано описание вычислительных схем и представлены численные результаты, согласующиеся с [3] и подтверждающие второй порядок дискретной аппроксимации изучаемых уравнений в разработанных алгоритмах и программах.

2 Постановка задачи

Как и в [2, 3], мы рассматриваем систему уравнений [4] ($\sigma = \sigma(x, t)$, $T = T(x, t)$, $q = q(x, t)$):

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = v_s^2 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} - \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}, \quad (1)$$

$$(1 + g_0 T) \frac{\partial T}{\partial t} = k_0 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \beta T \frac{\partial \sigma}{\partial t} + q \quad (2)$$

при $0 < x < 1$, $t > 0$ со следующими начальными и граничными условиями:

$$T(x, 0) = \text{const}; \quad \sigma(x, 0) = \frac{\partial \sigma(x, 0)}{\partial t} = 0; \quad 0 \leq x \leq 1; \quad (3)$$

$$\sigma(0, t) = \sigma(1, t) = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial x}|_{x=0} = \frac{\partial T}{\partial x}|_{x=1} = 0, \quad t \geq 0, \quad (4)$$

которые означают, что до момента включения источника в образце отсутствуют термоупругие волны и образец термоизолирован.

Система уравнений (1),(2) с начальными и граничными условиями (3),(4) записана в безразмерных величинах. Здесь $\sigma = \sigma(x, t)/\sigma_0$ ($\sigma_0 = 2,2 \cdot 10^6$ Па) – напряжение,

$T = T(x, t)/T_0$ ($T_0 = 293$ K) – температура, $x = x/l_0$ ($l_0 = 10^{-5}$ – толщина облучаемого образца) – расстояние от поверхности образца, время $t = t/\tau$ ($\tau = 3 \cdot 10^{-7}$ – время действия источника; при $t = 1$ источник выключается).

Безразмерные постоянные v_s^2 , α , g_0 , k_0 , β определяются физическими свойствами образца по формулам

$$v_s^2 = \frac{E\tau^2}{\rho_0 l_0^2}, \quad \alpha = \frac{E\alpha_T T_0}{\sigma_0}, \quad g_0 = \frac{E\alpha_T^2 T_0}{c_0 \rho_0}, \quad k_0 = \frac{\lambda_0 \tau}{c_0 \rho_0 l_0^2}, \quad \beta = \frac{\alpha_T \sigma_0}{c_0 \rho_0}, \quad (5)$$

где E – модуль Юнга, ρ_0 – плотность, α_T – коэффициент объемного расширения, c_0 – удельная теплоемкость, λ_0 – теплопроводность металла, и имеют следующие приближенные значения: $v_s = 151, 2338$, $\alpha = 319, 6363$, $g_0 = 2, 35136761 \cdot 10^{-3}$, $k_0 = 6, 5371497 \cdot 10^{-2}$, $\beta = 7, 356383 \cdot 10^{-6}$.

Функция $q(x, t)$ описывает влияние пучка заряженных частиц на образец (функция источника). В работах [2, 3] дано несколько видов задания функции $q(x, t)$ с разными свойствами. Здесь отметим только, что ее начальное значение $q(x, 0) = 0$.

3 Метод численного решения

Введем равномерную прямоугольную сетку $\{x_i = ih_x \ (i = 0, 1, \dots, N), \ t_j = jh_t \ (j = 0, 1, \dots)\}$; h_x и h_t – соответственно шаги по переменным x и t . Для аппроксимации уравнения (1) будем использовать конечно-разностную схему вида [5](с.427) с весом ξ . Эта схема имеет точность $O(h_x^2 + h_t^2)$ и является абсолютно устойчивой при $1/4 \leq \xi \leq 1/2$. Для аппроксимации второго уравнения используется симметричная схема [5](с.369) с удвоенным шагом по времени, также абсолютно устойчивая и имеющая второй порядок сходимости по x и t . Таким образом, конечно-разностная аппроксимация системы (1),(2) на каждом j -м слое имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_i^{j+1} - 2\sigma_i^j + \sigma_i^{j-1}}{h_t^2} &= \frac{v_s^2}{h_x^2} [\xi(\sigma_{i+1}^{j+1} - 2\sigma_i^{j+1} + \sigma_{i-1}^{j+1}) + \\ &+ (1 - 2\xi)(\sigma_{i+1}^j - 2\sigma_i^j + \sigma_{i-1}^j) + \xi(\sigma_{i+1}^{j-1} - 2\sigma_i^{j-1} + \sigma_{i-1}^{j-1})] - \\ &- \frac{\alpha}{h_t^2} (T_i^{j+1} - 2T_i^j + T_i^{j-1}), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} (1 + g_0 T_i^j) \frac{T_i^{j+1} - T_i^{j-1}}{2h_t} &= \frac{k_0}{2h_x^2} (T_{i+1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i-1}^{j+1} + \\ &+ T_{i+1}^{j-1} - 2T_i^{j-1} + T_{i-1}^{j-1}) - \beta T_i^j \frac{\sigma_i^{j+1} - \sigma_i^{j-1}}{2h_t} + q_i^j, \end{aligned} \quad (7)$$

$$i = 1, \dots, N - 1; \ j = 1, 2, \dots$$

Все представленные ниже формулы и численные результаты сделаны для случая $\xi = 1/4$, поскольку, как показали расчеты, это значение обеспечивает для данной задачи наилучшую устойчивость вычислений на длинных интервалах времени.

Умножим уравнение (6) на $h_x^2 h_t^2$, уравнение (7) на $h_x^2 h_t$ и соберем коэффициенты при $\sigma_l^{j+1}, T_l^{j+1}, l = i - 1, i, i + 1$. Получим систему:

$$a_{11}\sigma_{i-1}^{j+1} + b_{11}\sigma_i^{j+1} + c_{11}\sigma_{i+1}^{j+1} + b_{12}T_i^{j+1} = d_{1i}, \quad (8)$$

$$a_{22}T_{i+1}^{j+1} + b_{21}\sigma_i^{j+1} + b_{22}T_i^{j+1} + c_{22}T_{i-1}^{j+1} = d_{2i}, \quad (9)$$

где

$$a_{11} = c_{11} = -\frac{v_s^2 h_t^2}{4}, \quad a_{22} = c_{22} = -\frac{k_0 h_t}{2}, \quad b_{11} = h_x^2 + \frac{v_s^2 h_t^2}{2}, \quad (10)$$

$$b_{12} = \alpha h_x^2, \quad b_{21} = \beta T_i^j h_x^2 / 2, \quad b_{22} = (1 + g_0 T_i^j) h_x^2 / 2 + k_0 h_t, \quad (11)$$

$$d_{1i} = (2\sigma_i^j - \sigma_i^{j-1})h_x^2 + \frac{v_s^2 h_t^2}{4}(\sigma_{i+1}^{j-1} - 2\sigma_i^{j-1} + \sigma_{i-1}^{j-1} + 2(\sigma_{i+1}^j - 2\sigma_i^j + \sigma_{i-1}^j)) - \alpha h_x^2(-2T_i^j + T_{i-1}^j), \quad (12)$$

$$d_{2i} = (1 + g_0 T_i^j)T_i^{j-1}h_x^2 / 2 + \frac{k_0 h_t}{2}(T_{i+1}^{j-1} - 2T_i^{j-1} + T_{i-1}^{j-1}) + \beta h_x^2 \sigma_i^{j-1} T_i^j + q_i^j h_x^2 h_t. \quad (13)$$

Итак, на каждом слое $j + 1$ ($j = 1, 2, \dots; i = 1, \dots, N - 1$) получаем систему

$$\tilde{a}_i \vec{z}_{i-1} + \tilde{b}_i \vec{z}_i + \tilde{c}_i \vec{z}_{i+1} = \vec{d}_i, \quad (14)$$

где

$$\vec{z}_i = \begin{pmatrix} \sigma_i^{j+1} \\ T_i^{j+1} \end{pmatrix}, \quad (15)$$

а элементы матриц

$$\tilde{a}_i = \tilde{c}_i = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 \\ 0 & a_{12} \end{pmatrix}, \quad \tilde{b}_i = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \quad (16)$$

и вектора

$$\vec{d}_i = \begin{pmatrix} d_{1i} \\ d_{2i} \end{pmatrix} \quad (17)$$

определяются из формул (10)–(13).

Для аппроксимации начальных и граничных условий (3),(4) будем использовать выражения

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

$$\sigma_0^j = \sigma_N^j = 0; \quad T_0^j = \frac{4T_1^j - T_2^j}{3}; \quad T_N^j = \frac{4T_{N-1}^j - T_{N-2}^j}{3}; \quad j = 2, 3, \dots \quad (19)$$

Граничные условия (19) можно записать в аналогичном системе (14) виде. Левые краевые условия ($x = 0, i = 0$) примут вид

$$\tilde{a}_0 \vec{z}_0 + \tilde{b}_0 \vec{z}_1 + \tilde{c}_0 \vec{z}_2 = \vec{d}_0, \quad (20)$$

правые краевые условия ($x = 1, i = N$) примут вид

$$\tilde{a}_N \vec{z}_{N-2} + \tilde{b}_N \vec{z}_{N-1} + \tilde{c}_N \vec{z}_N = \vec{d}_N, \quad (21)$$

где матрицы $\tilde{a}_i, \tilde{b}_i, \tilde{c}_i$ и вектор \vec{d}_i имеют вид:

$$\tilde{a}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad \tilde{a}_N = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{b}_0 = \tilde{b}_N = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -4 \end{pmatrix}, \quad (22)$$

$$\tilde{c}_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{c}_N = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad \vec{d}_0 = \vec{d}_N = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (23)$$

4 Метод матричной прогонки

Рассмотрим алгоритм решения системы (14). Из краевого условия (20) и первого уравнения ($i = 1$) системы (14)

$$\begin{cases} \tilde{a}_0 \vec{z}_0 + \tilde{b}_0 \vec{z}_1 + \tilde{c}_0 \vec{z}_2 = \vec{d}_0, \\ \tilde{a}_1 \vec{z}_0 + \tilde{b}_1 \vec{z}_1 + \tilde{c}_1 \vec{z}_2 = \vec{d}_1, \end{cases} \quad (24)$$

получаем

$$\vec{z}_1 = \tilde{A}_1 \vec{z}_2 + \tilde{B}_1, \quad (25)$$

где

$$\tilde{A}_1 = -[\tilde{a}_1 \tilde{b}_0 - \tilde{a}_0 \tilde{b}_1]^{-1} [\tilde{a}_1 \tilde{c}_0 - \tilde{a}_0 \tilde{c}_1], \quad (26)$$

$$\tilde{B}_1 = -[\tilde{a}_1 \tilde{b}_0 - \tilde{a}_0 \tilde{b}_1]^{-1} [-\tilde{a}_0 \vec{d}_1]. \quad (27)$$

Далее получаем систему

$$\begin{cases} \tilde{a}_i \vec{z}_{i-1} + \tilde{b}_i \vec{z}_i + \tilde{c}_i \vec{z}_{i+1} = \vec{d}_i, \\ \vec{z}_{i-1} = \tilde{A}_{i-1} \vec{z}_i + \tilde{B}_{i-1}, \end{cases} \quad (28)$$

из которой для каждого $i = 2, \dots, N-1$ следует выражение для прогонки

$$\vec{z}_i = \tilde{A}_i \vec{z}_{i+1} + \tilde{B}_i, \quad (29)$$

где

$$\tilde{A}_i = [\tilde{b}_i + \tilde{a}_i \tilde{A}_{i-1}]^{-1} [-\tilde{c}_i], \quad (30)$$

$$\tilde{B}_i = [\tilde{b}_i + \tilde{a}_i \tilde{A}_{i-1}]^{-1} [\vec{d}_i - \tilde{a}_i \tilde{B}_{i-1}]. \quad (31)$$

Из системы, составленной из правого краевого условия (21) и двух последних уравнений ($i = N-2$ и $i = N-1$) системы (29),

$$\begin{cases} \tilde{a}_N \vec{z}_{N-2} + \tilde{b}_N \vec{z}_{N-1} + \tilde{c}_N \vec{z}_N = \vec{d}_N, \\ \vec{z}_{N-2} = \tilde{A}_{N-2} \vec{z}_{N-1} + \tilde{B}_{N-2}, \\ \vec{z}_{N-1} = \tilde{A}_{N-1} \vec{z}_N + \tilde{B}_{N-1}, \end{cases} \quad (32)$$

находим

$$\begin{aligned} z_N &= [(\tilde{a}_N \tilde{A}_{N-2} + \tilde{b}_N) \tilde{A}_{N-1} + \tilde{c}_N]^{-1} \times \\ &\times [\vec{d}_N - \tilde{a}_N \tilde{B}_{N-2} - (\tilde{a}_N \tilde{A}_{N-2} + \tilde{b}_N) \tilde{B}_{N-1}]. \end{aligned} \quad (33)$$

Значения \vec{z}_i для $i = N-1, \dots, 2$ определяются по формуле (29) (обратная прогонка); значение \vec{z}_1 – по формуле (25); \vec{z}_0 находим из краевого условия (20).

5 Проверка точности разностных схем и анализ численных результатов

Для проверки работы схемы проводилось сравнение с результатами, полученными в [3].

Согласно [5, 6] представленная здесь схема (6),(7),(18),(19) должна иметь порядок аппроксимации $O(h_x^2 + h_t^2)$ при непрерывных коэффициентах системы (1),(2). Таким образом, точность вычислений существенно зависит от того, как выбрана функция источника. При использовании разрывной функции в качестве источника $q(x, t)$

точность схемы будет снижаться. Это подтвердилось при расчетах с функцией источника, которая использовалась в работах [2, 3]:

$$q(x, t) = q_0 q_1(x) q_2(t), \quad (34)$$

где

$$q_1(x) = \begin{cases} 1, & 0 \leq x < x_1 \\ 0, & x_1 \leq x \leq 1, \end{cases} \quad q_2(t) = \begin{cases} 0, & t = 0, \\ 1, & 0 < t < 1, \\ 0, & 1 \leq t < \infty. \end{cases}$$

Здесь и ниже $q_0 = 59,4392$, $x_1 = 0,07$.

Функция (34) имеет разрывы в точках $x = x_1$, $t = 0$ и $t = 1$. Поэтому схема с таким источником имеет первый порядок аппроксимации по x и по t , хотя вычисления с ним дали те же результаты, что и в [3] по явной схеме. При этом, как и в [3], наблюдались осцилляции за бегущей волной σ (так называемая разболтка [5]), возникающие из-за того, что функция $q(x, t)$ разрывна.

В работе [3] предлагалась сглаженная функция источника вида

$$q(x, t) = q_0 \bar{q}_1(x) \bar{q}_2(t), \quad (35)$$

где

$$\bar{q}_1(x) = [1 + \exp(\mu_1(x - x_1))]^{-1}, \quad 0 \leq x \leq 1, \\ \bar{q}_2(t) = \begin{cases} 0, & t = 0, \\ [1 + \exp(\mu_2(t - 1))]^{-1}, & t > 0, \end{cases}$$

$\mu_1 = \mu_2 = 200$. Однако и эта функция имеет разрыв в точке $t = 0$.

Поэтому правильнее выбрать источник в виде непрерывной функции

$$q(x, t) = q_0 \tilde{q}_1(x) \tilde{q}_2(t), \quad (36)$$

где

$$\tilde{q}_1(x) = [1 + \exp(\mu_1(x - x_1))]^{-1}, \quad 0 \leq x \leq 1, \\ \tilde{q}_2(t) = [1 - \exp(-\mu_3 t)][1 + \exp(\mu_2(t - 1))]^{-1}, \quad t \geq 0.$$

Эта функция непрерывна по x и t , при $t = 0$ она равна 0, что соответствует выключенному источнику, с ростом t она быстро возрастает до q_0 , а при $t \sim 1$ быстро убывает.

Коэффициенты μ_1 , μ_2 , μ_3 в (36) можно выбрать так, чтобы с нужной точностью аппроксимировать источник (34) при сохранении второго порядка сходимости схемы. Расчеты показали, что при $\mu_1 = 200$, $\mu_2 = 35000$, $\mu_3 = 10000$ мы практически повторяем сценарий эволюции решений σ и T во времени, описанный в [3]. В момент включения источника температура T начинает постепенно увеличиваться (рис.1) и в облучаемом образце возникает термоупругая волна σ , которая движется по образцу от одного конца к другому со скоростью, близкой к v_s , и амплитудой около 4 в абсолютном значении, меняя знак при каждой смене направления движения (рис.2). В момент выключения источника возникает еще один импульс. Двигаясь в противоположных направлениях, эти импульсы постепенно уменьшаются в амплитуде и затухают.

При этом расчеты по представленной схеме (6),(7),(18),(19) с источником (36) не дают разболтки и обеспечивают совпадение результатов при различном выборе шагов дискретной сетки в силу абсолютной устойчивости схемы.

Второй порядок точности по x и t представленной схемы (6),(7),(18),(19) подтверждают расчеты на последовательности трех одновременно вдвое сгущающихся по x и t сеток для непрерывного представления функции источника (36) при указанных выше значениях параметров и при $\xi = 1/4$. Результаты этих расчетов представлены в таблицах 1 и 2 для момента времени $t = 1,0051$, $h_x = 0,0005$, $h_t = 6,2817 \cdot 10^{-6}$. Здесь

$$\kappa(Y) = [Y_{h_x, h_t} - Y_{h_x/2, h_t/2}] / [Y_{h_x/2, h_t/2} - Y_{h_x/4, h_t/4}].$$

Таблица 1.

x	σ_{h_x, h_t}	$\sigma_{h_x/2, h_t/2}$	$\sigma_{h_x/4, h_t/4}$	$\kappa(\sigma)$
0,06	-0,0141182	-0,0140348	-0,0140142	4,03
0,12	-0,0170936	-0,0170332	-0,0170133	3,37
0,18	-0,0471208	-0,0470028	-0,0469843	4,36
0,24	-0,0802826	-0,0804186	-0,0803903	4,08
0,30	-0,1152519	-0,1296822	-0,1296113	10,1
0,42	-0,7261036	-0,1240096	-0,1360526	4,27
0,48	-1,4164877	-1,2448516	-1,2240558	8,25
0,54	-2,8951394	-3,0174036	-3,0410472	4,17
0,60	-0,5848898	-0,6056519	-0,6146549	4,31
0,66	1,5463806	1,5476172	1,5477995	3,78
0,78	3,9684946	3,9766695	3,9788955	3,67
0,84	0,6938983	0,6940753	0,6941214	3,84
0,90	0,1188945	0,1188660	0,1188589	3,97
0,96	0,0461464	0,0461495	0,0461502	4,01

Таблица 2.

x	T_{h_x, h_t}	$T_{h_x/2, h_t/2}$	$T_{h_x/4, h_t/4}$	$\kappa(T)$
0,06	15,458502	15,458497	15,458496	4,01
0,12	12,744342	12,744346	12,744347	3,98
0,18	10,169043	10,169047	10,169048	3,98
0,24	8,0300467	8,0300495	8,0300502	4,01
0,30	6,2936171	6,2936191	6,2936197	3,87
0,36	4,9123174	4,9123188	4,9123192	3,34
0,42	3,8362518	3,8362543	3,8362549	4,13
0,48	3,0158390	2,4039920	2,4039925	5,08
0,60	1,9579017	1,9579021	1,9579023	3,65
0,66	1,6403569	1,6403566	1,6403565	3,53
0,72	1,2716096	1,2716094	1,2716093	3,96
0,96	1,0901312	1,0901310	1,0901309	3,98

Подтверждением абсолютной устойчивости схемы является рис.3, где для момента времени $t = 0.1$ даны результаты вычислений с шагом по времени $h_t = 0,95h_x/v_s = 6,2817 \cdot 10^{-6}$ (сплошные кривые), когда условие Куранта выполняется, и с шагом $h_t = 1,01h_x/v_s = 6,6784 \cdot 10^{-6}$ (точки), когда условие Куранта не выполнено.

Отметим однако, что в силу специфики данной задачи, а именно, из-за значительной скорости v_s термоупругой волны σ мы не можем сильно увеличивать шаг по времени [5]. Кроме того, затраты компьютерного времени на каждом временном слое в неявной

схеме больше по сравнению с явной схемой вида [3]. Поэтому в данном случае не следует ожидать ускорения счета по сравнению с явной схемой, и мы не ставили перед собой такой задачи. Преимуществами новой схемы по сравнению с [3] являются второй порядок точности и большая свобода выбора дискретной сетки.

Значительного ускорения вычислений можно добиться, используя возможности современных параллельных и векторных суперкомпьютеров. В частности, на суперкомпьютере SPP-2000 вычисления с третьим уровнем оптимизации, включающим векторизацию и автоматическое распараллеливание некоторых циклов, требуют в 5,5 раз меньше времени, чем без использования этих возможностей.

6 Заключение

Как уже было сказано, результаты численного моделирования с помощью представленной здесь схемы находятся в согласии с результатами работ [2, 3]. При этом важную роль играет правильный выбор функции источника. Таким образом, наши расчеты подтверждают и уточняют результаты этих работ и, с другой стороны, являются подтверждением правильной работы новой схемы.

В заключение отметим, что эти исследования были инициированы результатами описанного в [7] эксперимента, в ходе которого наблюдалось частичное разрушение кристаллической структуры облучаемого образца. Пока наши расчеты не объясняют этот эффект. Поэтому необходимо дальнейшее развитие модели, которое мы связываем с введением в систему (1),(2) факторов, моделирующих пластичность материалов, а также с изучением процессов плавления и кристаллизации, появляющихся при высоких температурах в образце. Некоторые исследования в этом направлении представлены в работе авторов [8]. Необходимо также в дальнейшем исследовать математическую модель с коэффициентами c_0 – удельная теплоемкость, λ_0 – теплопроводность металла, зависящими от температуры, т.е. в виде функций $c(T)$ и $\lambda(T)$.

Список литературы

- [1] Бойко В. И., Валяев А. Н., Погребняк А. Д. // УФН. 1999. Т. 169, N. 11, С. 1243.
- [2] Амирханов И. В., Пузынин И. В., Самойлов В. Н., Федянин В. К., Холмуродов Х. Т. // Сообщение ОИЯИ Р2-98-63. Дубна, 1998; Сообщение ОИЯИ Р2-98-201. Дубна, 1998.
- [3] Амирханов И. В., Земляная Е. В., Пузынин И. В., Пузынина Т. П., Сархадов И. // Сообщение ОИЯИ Р11-2000-263. Дубна, 2000.
- [4] Новацкий В. // Вопросы термоупругости. М.: Изд-во АН СССР, 1962.
- [5] Калиткин Н. Н. // Численные методы. М.: Наука, 1978.
- [6] Самарский А. А. // Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971.
- [7] Коренев С. А. // Препринт ОИЯИ Р13-89-615. Дубна, 1989.
- [8] Амирханов И. В., Земляная Е. В., Пузынин И. В., Пузынина Т. П., Сархадов И. // Сообщение ОИЯИ Р11-2001-164. Дубна, 2001.