

УДК 517.28+678.011

Л. Ф. ИВАНОВ, кандидат технических наук, Институт механики металлополимерных систем имени В. А. Белого НАНБ, Гомель, Беларусь; А. З. СКОРОХОД, кандидат технических наук, Белорусский государственный университет транспорта, г. Гомель, Беларусь

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПОСТАНОВКА КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ ВОЛОКНИСТО-ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ ПТФЭ

Рассматривается краевая задача для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), описывающих распределение интенсивности оптического излучения в пространстве между источником (лазером) и зеркалом, заполненным некоторой средой. Средства СКА Mathcad, реализующие алгоритм «стрельбы», позволяют решать краевые задачи для систем ОДУ, в которых часть граничных условий поставлена в начальной точке интервала, а остальная часть – в его конечной точке. Предложенный алгоритм определения недостающего граничного условия позволяет давать практические инженерные рекомендации при выборе геометрических размеров вакуумной камеры и расположенных в ней мишени и подложки.

Одной из приоритетных задач на современном этапе развития производства является его техническое перевооружение, интенсификация технологических процессов, создание новых видов техники, что выдвигает повышенные требования к эффективности очистки жидких и газообразных сред. Поэтому в настоящее время интенсивно проводятся исследования по разработке новых технологий для получения волокнисто-пористых материалов (ВПМ) и изделий из них с повышенными эксплуатационными характеристиками [1].

Политетрафторэтилен (ПТФЭ) относится к биостабильным полимерам и благодаря своей высокой химической инертности и гидрофобности, широко используется в различных отраслях науки и техники [2]. Получение ПТФЭ в виде ВПМ [3, 4] значительно расширило круг задач, в которых он может быть использован в качестве биологических барьерных элементов, обтураторов, изолирующих и перевязочных средств. Эти материалы весьма эффективны для очистки газов от водяных, масляных и кислотных аэрозолей.

Воздействие лазерного излучения высокой интенсивности на полимеры в вакууме во многих случаях сопровождается абляцией, выделением газообразных продуктов разложения и в ряде случаев кластеров частично деструктурированного полимера. В настоящее время термин «абляция» означает унос вещества с поверхности твердого тела под действием потока энергии. При этом имеется в виду любой вид энергетического воздействия (высокой температуры, электромагнитного излучения, потоков ускоренных частиц, горячего газа, твердых частиц и т. п.); унос вещества в любой форме (атомы, молекулы пары, атомные кластеры, их смеси) [5].

Аномальным поведением в таком процессе отличается ПТФЭ, который при воздействии непрерывного излучения CO₂-лазера разлагается с высокой скоростью, а кластеры имеют форму волокон. В результате при определенных режимах образуется гидрофобный ВПМ.

Особенностью объекта исследования (стержень ПТФЭ под действием лазерного излучения) является то, что его состояние описывается краевой задачей для системы однородных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка. Если предположить, что коэффициенты ослабления и рассеяния зависят от интенсивности излучения, модель станет нелинейной. Физически

это будет соответствовать изменению оптических свойств среды под действием лазерного излучения. Эта специфика значительно усложняет как процесс построения математической модели оптимизации параметров действия лазерного излучения на стержень ПТФЭ, так и ее использование для повышения качества протекания абляционного процесса. А с учетом того, что в процессе абляции ПТФЭ под действием луча лазера давление в камере поддерживается в диапазоне 20–30 Па, зависимость коэффициентов ослабления и рассеяния от интенсивности излучения можно пренебречь. Поэтому анализ исследования по обеспечению корректной постановки краевой задачи весьма важен с точки зрения обеспечения адекватности оптимизационной математической модели.

Отметим, что математическая модель оптимизации параметров подвижных источников (мощность и время действия источника, траектория и скорость сканирования, геометрические характеристики носителя источника (пятна) и др.) основывается на корректной постановке исходной краевой задачи. То есть необходимо обеспечить существование и единственность решения краевой задачи, при этом малым изменениям исходных данных должны соответствовать малые (в соответствующей метрике) изменения решения краевой задачи.

Несмотря на кажущуюся близость краевых задач для ОДУ к задачам Коши, их решение на компьютере значительно отличается. Алгоритмы решения задач Коши можно отнести к *методам бегущего счета*: для них достаточно, отталкиваясь от известных начальных условий, просто пересчитать искомые значения функций в узлах сетки через (уже известные) значения в предыдущих узлах. Для краевых задач это уже не так. Если выписать разностные уравнения, аппроксимирующие ОДУ, то окажется, что неизвестные значения в узлах сетки связаны посредством системы линейных или нелинейных алгебраических уравнений. Численное решение такой системы представляет собой отдельную, иногда весьма непростую, задачу.

Целью настоящей работы является математическое моделирование и постановка краевой задачи (с ее решением на компьютере) при получении волокнисто-пористых материалов под воздействием лазерной абляции ПТФЭ. Необходимо определить граничное условие

на второй границе и интенсивность излучения, поглощенного на зеркале и в камере.

Методика проведения эксперимента. Использовали CO₂-лазер с длиной волны 10,6 мкм. Мощность излучения $P = 100$ Вт. Диаметр пятна – 10 мм. Давление в вакуумной камере 20–30 Па. Интенсивность излучения $I = P/S$, где S – площадь пятна излучения. Таким образом, интенсивность излучения луча лазера $I_{Lz} = 1,27$ МВт/м². При этом будем полагать, что диаметр пятна на длине в 1 м не зависит от расстояния.

Для определения распределения интенсивности оптического излучения в пространстве между источником (лазером) и зеркалом, заполненным некоторой средой (рисунок 1), будем считать, что от зеркала отражается большая часть падающего излучения (т. е. его коэффициент отражения равен R), а среда как поглощает излучение с коэффициентом ослабления, $\sigma(x)$, так и рассеивает его. Причем коэффициент рассеяния против хода падающего излучения равен $r(x)$ [6].

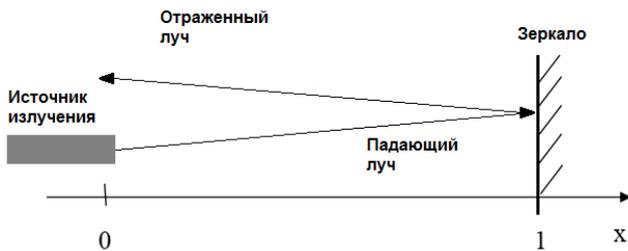


Рисунок 1 – Модель краевой задачи

В этом случае закон изменения интенсивности $I_0(x)$ излучения, распространяющегося вправо, и интенсивности $I_1(x)$ излучения влево определяется системой двух однородных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{dI_0(x)}{dx} &= -\sigma(x)I_0(x) + r(x)I_1(x); \\ \frac{dI_1(x)}{dx} &= \sigma(x)I_1(x) - r(x)I_0(x). \end{aligned} \quad (1)$$

Для правильной постановки задачи требуется помимо уравнений задать такое же количество граничных условий. Одно из них будет выражать известную интенсивность излучения I_0 , падающего с левой границы при $x = 0$, а второе – закон отражения на его правой границе при $x = 1$:

$$I_0(x) = I_{Lz};$$

$$I_1(1) = RI_{Lz}.$$

Решение будем искать при помощи СКА MathCad методом Рунге – Кутты, т. е. используя численные алгоритмы и метод «стрельбы».

Суть метода «стрельбы» заключается в пробном задании недостающих граничных условий на левой границе интервала и решении полученной задачи Коши хорошо известными методами. В нашем примере не хватает начального условия для $I_1(0)$, поэтому сначала зададим его произвольное значение, например, $I_1(0) = 6 \cdot 10^5$ МВт/м². Конечно, такой выбор не совсем случаен, поскольку из физических соображений ясно, что, во-первых, интенсивность излучения – величина заведомо положительная, и

во-вторых, принятая нами интенсивность отраженного излучения составляет 50 % от интенсивности падающего.

Решение задачи Коши с помощью функции *rkfixed* приведено в следующем листинге:

$$\begin{aligned} r(x) &:= 0.01 & \sigma(x) &:= 0.1 \\ D(x, I) &:= \begin{pmatrix} -\sigma(x) \cdot I_0 + r(x) \cdot I_1 \\ \sigma(x) \cdot I_1 - r(x) \cdot I_0 \end{pmatrix} & I_0 &:= 1.27 \cdot 10^6 \\ I_{kr} &:= \begin{pmatrix} I_0 \\ 6 \cdot 10^5 \end{pmatrix} & M &:= 700 \\ I &:= \text{rkfixed}(I_{kr}, 0, M, 100, D) \end{aligned}$$

Здесь I_{kr} – вектор начальных условий; $[0-M]$ – граничные значения отрезка решения задачи; 100 – число интервалов разбиения отрезка $[0-M]$; $D(x, I)$ – вектор-функция, содержащая правые части первых производных, записанные в символьном виде.

Численное решение задачи Коши с помощью функции *rkfixed* приведено на рисунке 2. Согласно рисунку 2 кривые нигде не пересекаются, т. е. правое краевое условие не выполнено, из чего следует, что полученный результат не является решением поставленной краевой задачи.

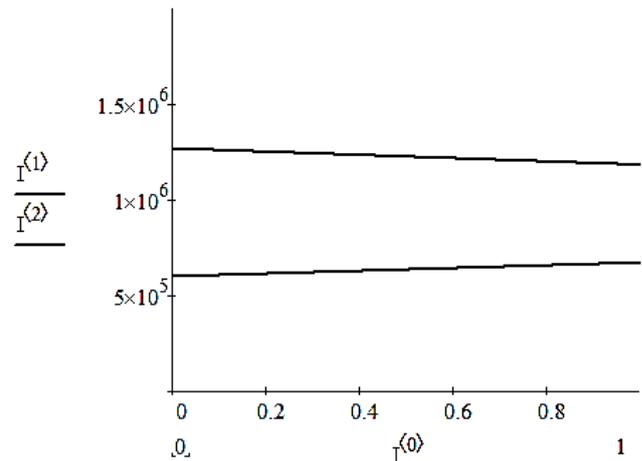


Рисунок 2 – Численное решение системы ОДУ (1) при значении $I_1(0) = 6 \cdot 10^5$ МВт/м²

В целях лучшего выполнения этого граничного условия выберем значение $I_1(0)$ больше. Например, $1,1 \cdot 10^6$ МВт/м², что составляет 86,6 % от начальной интенсивности. Решение приведено в следующем листинге:

$$\begin{aligned} r(x) &:= 0.01 & \sigma(x) &:= 0.1 \\ D(x, I) &:= \begin{pmatrix} -\sigma(x) \cdot I_0 + r(x) \cdot I_1 \\ \sigma(x) \cdot I_1 - r(x) \cdot I_0 \end{pmatrix} & I_0 &:= 1.27 \cdot 10^6 \\ I_{kr} &:= \begin{pmatrix} I_0 \\ 1.1 \cdot 10^6 \end{pmatrix} & M &:= 700 \\ I &:= \text{rkfixed}(I_{kr}, 0, M, 100, D) \end{aligned}$$

На рисунке 3 приведена вторая попытка численного решения задачи Коши.

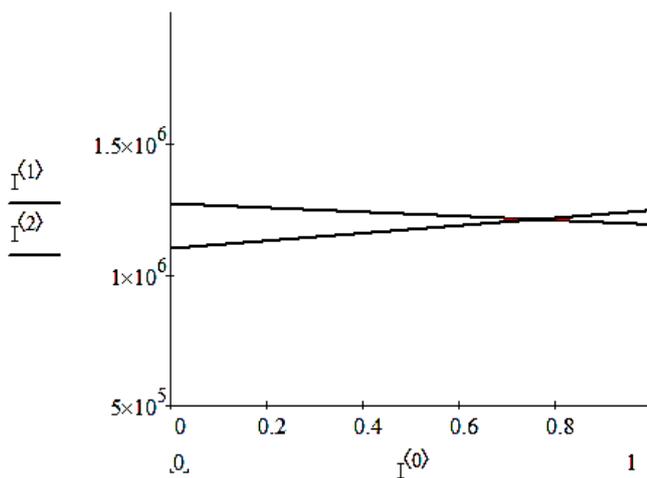


Рисунок 3 – Вторая попытка численного решения задачи Коши

Из рисунка 3 видно, что кривые пересекаются не по правому краю, т. е. в произвольной точке, потому и этот результат не является решением поставленной задачи.

Продолжая подобным образом «пристрелку» для недостающего начального условия, возможно, отыскать правильное решение краевой задачи с достаточной точностью. Выберем теперь значение $I_1(0)$, МВт/м^2 , в интервале $[6 \cdot 10^5 - 1,1 \cdot 10^6]$, например, $1,05 \cdot 10^6$. Решение приведено в следующем листинге:

```

r(x) := 0.01  σ(x) := 0.1
D(x,I) := ( -σ(x)·I0 + r(x)·I1 )
           ( σ(x)·I1 - r(x)·I0 )      I0 := 1.27·106
Ikr := ( I0 )
           ( 1.05·106 )      M := 700
I := rkfixed(Ikr,0,M,100,D)

```

На рисунке 4 приведена третья попытка численного решения задачи Коши.

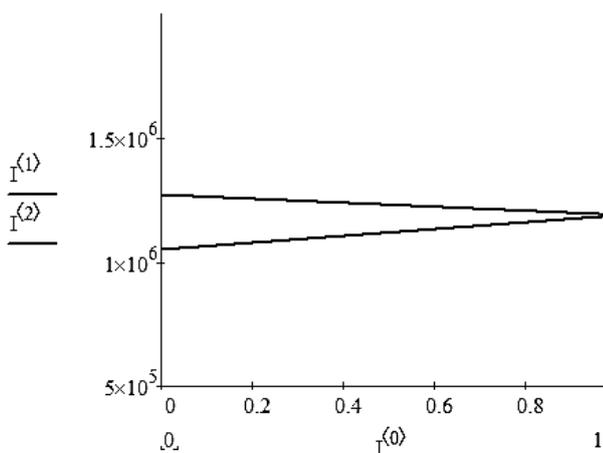


Рисунок 4 – Третья попытка решения задачи Коши при помощи функции *rkfixed*

Продолжая «пристрелку», находим методом пошагового приближения правильное решение краевой задачи с достаточной точностью.

На рисунке 4 видно, что кривые пересеклись на границе правого интервала, а следовательно, значение $I_1(0)$, равное $1,05 \cdot 10^6$ МВт/м^2 , является решением поставленной задачи.

Таким образом, установлено, что потеря энергии луча лазера на зеркале и в камере не превышает 20 %. Потерю энергии на зеркале можно оценить, измерив его температуру. Зная потерю мощности луча лазера в камере, можно конструктивно оптимизировать технологию получения ВПМ. В этом и состоит принцип алгоритма стрельбы. Выбирая пробные начальные условия (проводя «пристрелку») и решая соответствующую серию задач Коши, можно найти то решение системы ОДУ, которое (с заданной точностью) удовлетворит граничному условию (или, в общем случае, условиям) на другой границе расчетного интервала.

Приведенные выше расчеты и выводы подтверждаются экспериментальными данными, полученными при прямом измерении мощности излучения CO_2 -лазера длиной волны 10,6 мкм термомпарным измерителем мощности ТИ-3. На оптической схеме (рисунок 5) отмечены точки, в которых проводили замеры.

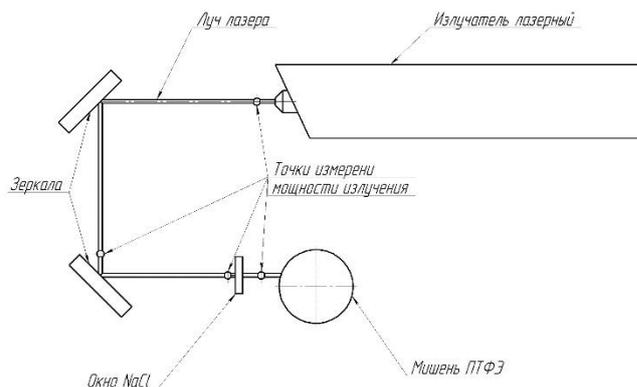


Рисунок 5 – Измерение мощности излучения CO_2 лазера

Общие потери мощности составили не более 5 %, что согласуется с данными по отражающей способности алюминиевых зеркал (98 %).

Список литературы

- Иванов, Л. Ф. Физика и технология лазерной переработки политетрафторэтилена в волокнисто-пористые материалы : дис. ... канд. техн. наук / Л. Ф. Иванов. – Гомель, 1998. – 136 с.
- Destruction of polytetrafluoroethylene under the action of carbon dioxide laser radiation at low pressure / E. M. Tolstopyatov [et al.] // Proc. SPIE. – 1998. – Vol. 3343. – Part. 2. – P. 1010–1017.
- Лазерная абляция политетрафторэтилена / П. Н. Гракович [и др.] // Российский химический журнал. – 2008. – Т. ЛП, № 3. – С. 97–105.
- О механизме образования волокон при лазерной абляции политетрафторэтилена / Е. М. Толстопятов [и др.] // Вопросы химии и химической технологии. – 2002. – № 3. – С. 128.
- Толстопятов, Е. М. Лазерная абляция полимеров // Полимерные материалы и технологии. – 2016. – Т. 2, № 1. – С. 6–20.
- Вельмисов, П. А. Дифференциальные уравнения в Mathcad : учеб. пособие / П. А. Вельмисов, С. В. Киреев. – Ульяновск : УлГТУ, 2016. – 109 с.

L. F. Ivanov, A. Z. Skorokhod. Mathematical modeling and formulation of the boundary value problem in producing fibrous-porous materials under the influence of laser ablation of ptfе.

A boundary value problem is considered for ordinary differential equations (ODE) that describe the distribution of the intensity of optical radiation in the space between the source (laser) and the mirror filled with some medium. The SKA Mathcad tools, which implement the “shooting” algorithm, allow solving boundary value problems for ODE systems, in which part of the boundary conditions are set at the starting point of the interval, and the rest at its end point. The proposed algorithm for determining the missing boundary condition makes it possible to give practical engineering recommendations when choosing the geometric dimensions of the vacuum chamber and the target and substrate located in it.