

# МРІ РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В МАТЕРИАЛАХ, ОБЛУЧАЕМЫХ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ, В РАМКАХ МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА

Амирханов И. В., Тухлиев З. К., Шарипов З. А.

Объединенный институт ядерных исследований,  
Россия, Московская область, 141980 г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6,  
Тел.: +7(49621)64808, E-mail: [zafar@jinr.ru](mailto:zafar@jinr.ru)

В работе представлена МРІ реализация метода 2D и 3D расчетов эволюции температурных полей и динамики фазовых переходов, возникающих в материалах при облучении тяжелыми ионами высоких энергий. Используется модифицированная модель термического пика, основанная на системе двух связанных уравнений теплопроводности, описывающих тепловые процессы в электронной и ионной подсистемах облучаемого тяжелыми ионами образца. Численное решение этих уравнений осуществляется в цилиндрической системе координат как в аксиально симметричном случае (2D), так и с учетом нарушения аксиальной симметрии в моделируемой системе (3D). Моделирование динамики фазовых переходов реализовано на основе задачи Стефана в рамках энтальпийного подхода. Представлена математическая постановка задачи, приведены формулы, определяющие конечно-разностную вычислительную схему; обсуждаются особенности параллельной компьютерной реализации на базе технологии МРІ. Приведены численные результаты, подтверждающие эффективность разработанного подхода и соответствующей МРІ/С++ программы. Показано, что результаты численного моделирования согласуются с известными экспериментальными оценками размеров треков, образующихся в облучаемых тяжелыми ионами образцах.

## Литература

1. Амирханов И.В., Дидык А.Ю., Пузынин И.В. и др. Распыление твердых тел под действием тяжелых ионов и температурные эффекты в электронной и решеточной подсистемах //Физика элементарных частиц и атомного ядра том 37, номер 6, год 2006, Стр. 1592-1644.
2. М.П. Галанин, И.С. Ерхов, Е.Ю. Локтионов, Ю.Ю. Протасов. Численное моделирование динамики температурных полей на плоских мишенях при нестационарном интенсивном лазерном воздействии //Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, номер 61, Москва, год 2008.
3. Самарский А.А., Моисеенко Б.Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана //ЖВМ и МФ том 5, номер 5, год 1965, Стр. 816-827.