

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ
И
ПРОЦЕССЫ УПРАВЛЕНИЯ
N. 4, 2024
Электронный журнал,
per. Эл № ФС77-39410 om 15.04.2010
ISSN 1817-2172

http://diffjournal.spbu.ru/
e-mail: jodiff@mail.ru

<u>Численное моделирование</u>

Две краевые одномерные задачи нелинейной теории диффузии

Грезина А.В. 1,* , Метрикин В.С. 1,** , Панасенко А.Г. 1,***

¹Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

e-mail:

*aleksandra-grezina@yandex.ru

v.s.metrikin@mail.ru

a.g.panasenko@ yandex.ru

Аннотация. Работа является продолжением проведенных авторами исследований, которые связаны с нелинейной теорией распространения примеси в твердом теле. В настоящей работе впервые рассматриваются две нелинейные математические модели, которые представляют собой дифференциальные уравнения в частных производных. В отличие от линейной математической модели они предсказывают конечную скорость распространения примеси в твердом теле. Найденные решения определяют динамику распределения примеси в полубесконечном однородном теле с изолированной боковой поверхностью и неизменным вдоль длины поперечным сечением в двух случаях - с конечным источником примеси на границе и с постоянной плотностью потока примеси. Применяя подход, основанный на правиле размерности, удалось с помощью специальной замены преобразовать нелинейные дифференциальные уравнения в частных производных в нелинейные обыкновенные дифференциальные уравнения (НОДУ). Предложены методики нахождения начальных условий для решения НОДУ и критерии достоверности найденных решений. Полученные решения позволяют определить в произвольный момент времени концентрационный профиль и конечную скорость распределения примеси. Показано, что метод замены переменных, основанный на правиле размерности, эффективен и в линейной теории диффузии.

Ключевые слова: дифференциальные уравнения в частных производных, математическая модель, численное моделирование, нелинейная теория диффузии, правило размерности, распространение примеси в твердом теле.

1.Введение

Изучение диффузионных процессов необходимо как для понимания естественных процессов в природе, так и для управления перераспределением примесей в технологических процессах. Среди работ, посвященных теории диффузии с широким охватом различных областей применения, можно отметить, например, работы [1,2]. К более узко специализированным, относятся работы [3-21]. Так в работе [3] исследуются упруго диффузионные возмущения в материалах, а в работах [4,8] - диффузия при высоких температурах, когда контактируемые материалы могут полностью растворяться друг в друге и образовывать зону с непрерывным рядом твердых растворов. Скорость диффузии в объеме и по границам зерен существенно различается, что приводит к изменению со временем структуры материалов и проявляется в таких явлениях, как ползучесть [9], спекание [10], рекристаллизация [11,12]. Различие в скорости диффузии наблюдается даже при комнатных температурах. Ускоренная диффузия по границам в тонких металлических пленках приводит к их деградации и функциональным изменениям элементов микроэлектроники [13,14]. Особенно сильно проявляется эффект диффузии по границам зерен в материалах с ультрамелкозернистой структурой [15,16]. При изучении диффузии в однородных средах с простой геометрией эффективны аналитические методы [22], а для сложной геометрии – численно-аналитические [23]. Основой этих методов является закон Фика [24] и предположения, что коэффициент диффузии является постоянной, не зависящей от концентрации примеси величиной. В результате для описания диффузии получаются удобные линейные дифференциальные уравнения. Но недостатком этой теории является бесконечная скорость диффузии, что противоречит реальным физическим процессам.

Чтобы снять это противоречие в работе [28] была предложена и обоснована нелинейная модель диффузии и решена одномерная краевая задача для полупространства, на границе которого поддерживается постоянная концентрация примеси. С помощью замены, учитывающей правило размерности, дифференциальное уравнение с частными производными было преобразовано в нелинейное обыкновенное дифференциальное уравнение и найдено его решение, не противоречащее конечной скорости диффузии.

В настоящей работе рассматриваются случаи с конечным источником примеси на границе и с постоянным потоком. Для выяснения эффективности метода перехода от дифференциального уравнения с частными производными к обыкновенному дифференциальному уравнению эти же задачи решаются и в рамках линейной модели.

2. Математическая модель

Рассмотрим однородный стержень с примесью, которая перераспределяется в нем. Тогда, в предположении, что боковая поверхность стержня изолирована, а исходное распределение примеси в стержне и поступающей примеси через торец стержня не зависит от координат y, z, математическую модель диффузии примеси в твердом теле в одномерном случае можно представить следующим образом [28]

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \beta \frac{\partial}{\partial x} \left(C \frac{\partial C}{\partial x} \right) = 0 \tag{1}$$

с граничными и начальными условиями, например, вида

$$C(0,t) = C_0$$
, $C(x,0) = 0$, $0 \le x < \infty$, $t \ge 0$, (2)

в которых C = C(x, t) - концентрация примеси, $\beta > 0$ - коэффициент нелинейной диффузии.

В теории распространения примеси в твердом теле известны решения линейного уравнения, соответствующего уравнению (1) с граничными условиями (2), которые широко используются для интерпретации экспериментальных работ, а также так называемая диффузия с точечным источником и постоянным потоком примеси [26].

2.1. Модель с «точечным» источником

В этом случае предполагается, что на торец стержня при t=0 наносится тонкий слой примеси с поверхностной плотностью σ . Введем новую безразмерную переменную

$$\xi = \frac{x}{(\sigma \beta t)^{1/3}} \tag{3}$$

и C(x,t) выразим через новую функцию $\phi(\xi)$ в виде

$$C(x,t) = \left(\frac{\sigma^2}{\beta t}\right)^{\frac{1}{3}} \Phi(\xi). \tag{4}$$

Для определения функции $\phi(\xi)$ подставим (4) в уравнение (1) и получим для t>0 обыкновенное дифференциальное уравнение вида

$$3\frac{d}{d\xi}\left(\Phi\frac{d\Phi}{d\xi}\right) + \xi\frac{d\Phi}{d\xi} + \Phi = 0,\tag{5}$$

которое можно переписать следующим образом

$$\frac{d}{dx}(3\phi\frac{d\phi}{d\xi} + \xi\phi + const) = 0. \tag{6}$$

Решением этого уравнения, удовлетворяющее начальному условию и требованию $\phi \ge 0$ будет функция

$$\phi(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{6} (\xi_0^2 - \xi^2), \xi < \xi_0 \\ 0, \xi > \xi_0 \end{cases}$$
(7)

Отметим, что полученное решение совпадает по форме с решением аналогичной задачи о теплопроводности в [27].

Для определения константы ξ_0 учтем факт сохранения полного количества примеси в виде

$$\int_{0}^{\infty} C(x,t)dx = \sigma. \tag{8}$$

Или, используя (4) перепишем (8) в виде

$$\int_{0}^{\infty} \Phi(\xi) d\xi = 1. \tag{9}$$

Подставляя (7) в (9), получим, что $\xi_0 = 9^{1/3}$, которое, в частности, определяет максимальное расстояние x_m , на которое распространяется примесь за время t

$$x_m = \xi_0 (\sigma \beta t)^{1/3}. \tag{10}$$

Найденное решение (7) полностью определяет значение C(x,t) для t>0, что достаточно для практического применения. Для численного решения уравнения (5) нужны начальные значения $\varphi(\xi)$ и $\frac{d\varphi}{d\xi}$, которые приведут к физическому решению: $\varphi(\xi)=0$, если $\xi>\xi_{max}$ и определят ξ_{max} . Для установления связи между $\varphi(\xi=0)$ и $\frac{d\varphi}{d\xi}(\xi=0)$ проинтегрируем (5) от нуля до бесконечности и получим

$$\left(3\phi\frac{d\phi}{d\xi} + \xi\phi\right)|_0^\infty = 0. \tag{11}$$

Так как
$$\phi(\infty) = 0$$
, (12)

$$\text{TO } \phi(0) \frac{d\phi(0)}{d\xi} = 0 \tag{13}$$

и остается подобрать лишь такое значение $\phi(0)$, чтобы оно давало решение, удовлетворяющее условию (9). На рис. 1 приведены результаты численного расчета $\phi(\xi)$ с $\phi(0)=0.72$.

Из рис. 1 видно, что $\xi_0=2.080084$, что соответствует аналитическому решению, а расчет интеграла (9) дает единицу.

Если изменить начальные условия, выбрав $\phi(0)$, например, равное 0.8, то получим распределение примеси, представленное на рис. 2. Отметим, что интеграл (9) в этом случае равен 1.1519.

Из сравнения результатов, представленных на рис. 1 и рис. 2, видно, что критерий (9) позволяет достаточно точно определять начальное условие.

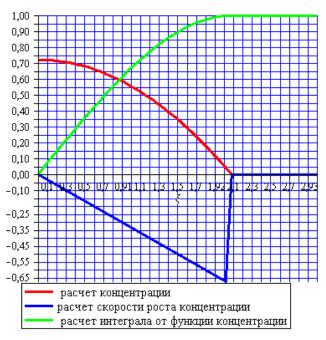


Рис. 1. Осциллограммы $\phi(\xi)$ для $\phi(0) = \frac{1}{6} 9^{1/3} \approx 0.72$ и $\frac{d\phi}{d\xi} = 0$

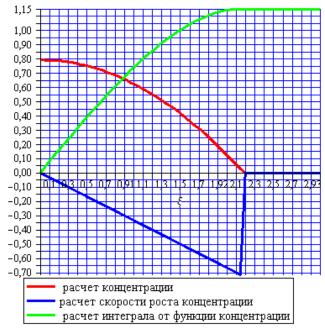


Рис. 2. Осциллограммы $\phi(\xi)$ для $\phi(0) = 0.8$

2.2. Модель с постоянной плотностью q потока примеси на границе

Введем новую безразмерную переменную

$$\xi = \frac{x}{(q\beta t^2)^{1/3}} \tag{14}$$

и выразим концентрацию C(x,t) через новую функцию $\phi(\xi)$ в виде

$$C(x,t) = \left(\frac{q^2 t}{\beta}\right)^{\frac{1}{3}} \Phi(\xi). \tag{15}$$

Подставив (15) в (1), получим обыкновенное дифференциальное уравнение для определения функции $\phi(\xi)$ для времен t>0 в виде

$$3\frac{d}{d\xi}\left(\Phi\frac{d\Phi}{d\xi}\right) + 2\xi\frac{d\Phi}{d\xi} - \Phi = 0. \tag{16}$$

Связь между начальными условиями для (16) $\phi(0)$ и $\phi'(0)$ найдем из условия (при x=0)

$$q = -\beta C \frac{\partial C}{\partial x}. ag{17}$$

Из (17) следует, что если подставить в него соотношение (15), то получим связь между $\varphi(\xi)$ и $\frac{d\varphi}{d\xi}$ при $\xi=0$,

$$\phi(\xi) \frac{d\phi}{d\xi} = -1. \tag{18}$$

Таким образом, для численного решения уравнения (16) нужно выбрать лишь начальное значение $\phi(0)$. Для начального условия C(x,0)=0, очевидно, следует выбрать такое значение $\phi(0)$, которое приводит к решению $\phi(\xi)=0$ при $\xi>\xi_0$, где ξ_0 - предельное значение распространения примеси в стержне и удовлетворяет соотношению

$$qt = \int_0^\infty C(x, t) dx,$$

которое приводит к условию (9).

Используя (16) и (18), можно получить приближенное значение $\phi(0)\approx 3^{1/3}$. Так на рис. 3 приведены осциллограммы $\phi(\xi)$ и $\frac{d\phi}{d\xi}$.

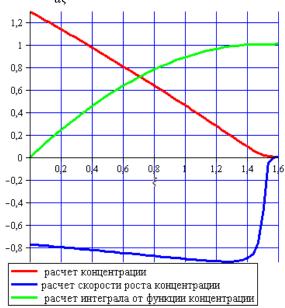


Рис. 3. Осциллограммы распространения концентрации примеси по стержню для $\phi(0) = 0.3^{1/3}$, $\phi'(0) = -\phi(0)^{-1}$

Отметим, что в этом случае интеграл (9) равен единице.

начально значение $\phi(0) = 0.3^{1/3} - 0.134408535434$, то получим распределение примеси в стержне, представленное на рис. 4.

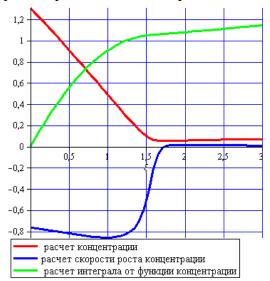


Рис. 4. Осциллограммы распространения концентрации примеси по стержню для $\phi(0) = 0.3^{1/3} - 0.134408535434$, $\phi'(0) = -\phi(0)^{-1}$

Из рис.4 видно, что интеграл (9) стал больше единицы и растет с ростом ξ .

Так как $\phi(\xi)$ при $\xi \ge 1.7$ принимает значение $\phi(\xi) > 0$, то это значит, что выбранное начальное условие $\phi(0)$ описывает процесс с начальным условием $C(x,0) = C_0 > 0$.

3. Линейная модель

Переход к безразмерной переменной, сконструированной из переменных и параметров задачи на основе правила размерностей, позволил в нелинейной модели существенно упростить задачу диффузионного процесса. В линейной модели этот метод широко применялся для решения задачи диффузии с фиксированной концентрацией примеси на границе $C(0,t) = C_0 = const.$

Представляет методический интерес рассмотреть случаи точечного источника и постоянного потока примеси в линейном приближении.

3.1. Случай точечного источника частиц

Линейное уравнение диффузии, как известно, имеет вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0, 0 \le x < \infty, t \ge 0.$$
 (19)

Начальные и граничные условия совпадают с условиями в нелинейной модели. Здесь D коэффициент диффузии. Размерность коэффициента диффузии м²/с. Поэтому безразмерную переменную для линейного уравнения диффузии можно выбрать в виде

$$\xi = \frac{x}{\sqrt{Dt}},\tag{20}$$

а решение искать в виде

$$C(x,t) = \frac{\sigma}{\sqrt{Dt}} \Phi(\xi). \tag{21}$$

 $\phi(\xi)$ является решением уравнения

$$\frac{d^2\Phi}{d\xi^2} + \xi \frac{d\Phi}{d\xi} + \Phi = 0. \tag{22}$$

при условии

$$\frac{d\Phi}{d\xi} + \xi\Phi = C_1 \,. \tag{23}$$

Начальным условиям соответствует постоянная $C_1=0$, для которой получается решение вида

$$\Phi(\xi) = Ae^{-\xi^2/2}.\tag{24}$$

Подставив решение (24) в соотношение (21) и определив константу A, используя факт сохранения количества примеси

$$\int_{0}^{\infty} C(x,t)dx = \sigma,$$
(25)

получим распределение примеси от точечного источника в виде соотношения

$$C(x,t) = \frac{\sigma}{\sqrt{\pi Dt}} e^{\left(-x^2/4Dt\right)}.$$
 (26)

Распределение примеси (26) можно получить методом интегральных представлений. Подобная задача рассмотрена, например, в [26].

3.2. Случай постоянного источника частиц (q = const)

В этом случае C(x,t) представляется в виде

$$C(x,t) = q\sqrt{\frac{t}{D}}\Phi(\xi), \tag{27}$$

где ξ определяется из выражения (20).

Для функции $\phi(\xi)$ из уравнения (15) получаем после соответствующих преобразований дифференциальное уравнение второго порядка вида

$$2\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + \xi \frac{d\phi}{d\xi} - \phi = 0. \tag{28}$$

В уравнении (28) введем новую переменную $u(\xi) = \phi(\xi)/\xi$, аналогичную, как и в работе [25], а также временно введём в переменную ξ множитель $\frac{1}{\sqrt{2}}$, тогда получим дифференциальное уравнение

$$\xi \frac{d^2 u}{d\xi^2} + (2 + \xi^2) \frac{du}{d\xi} = 0, \tag{29}$$

которое, очевидно, приводится к дифференциальному уравнению с разделяющимися переменными вида

$$\frac{dv}{v} = -\frac{(2+\xi^2)}{\xi} d\xi, v = \frac{du}{d\xi},\tag{30}$$

решением которого является функция

$$v = A\xi^{-2}e^{-\xi^2/2},\tag{31}$$

где А является постоянной величиной. Используя (30) и (31), находим

$$u = -A(\xi^{-1}e^{-\frac{\xi^2}{2}} + \sqrt{\frac{\pi}{2}}\phi(\frac{\xi}{\sqrt{2}}) + B),\tag{32}$$

где

$$\Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\alpha^2} d\alpha, B - const.$$

Подставляя в (27) $\phi = \xi u$ и учитывая начальное условие C(x,0) = 0, получим

$$C(x,t) = -q\sqrt{\frac{t}{D}}A(\xi^{-1}e^{-\frac{\xi^2}{2}} + \xi\sqrt{\frac{\pi}{2}}(C(\frac{\xi}{\sqrt{2}}) - 1)).$$
(33)

Константу интегрирования A находим из условия постоянства потока на границе

$$q = -D\frac{\partial c}{\partial x}|_{x=0}. {34}$$

Окончательно, возвращаясь к переменной ξ , определённой из выражения (20), будем иметь

$$C(x,t) = 2q\sqrt{\frac{t}{\pi D}}e^{\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)} + q\frac{x}{D}(\Phi\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) - 1). \tag{35}$$

Найденное решение в форме (35) может быть получено стандартным методом интегральных представлений [26].

Рассмотренные в разделе 3 случаи различных граничных условий показывают, что метод замены переменных, учитывающий правило размерности, эффективен не только в нелинейной теории, но и полезен при рассмотрении классических задач.

4. Заключение

- 1. Разработаны две математические модели, описывающие процесс распространения примеси в полубесконечном однородном теле с изолированной боковой поверхностью и неизменным вдоль длины поперечным сечением.
- 2. Предложена методика отыскания решения нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих процесс распространения примеси в твердом теле.
- 3. Полученные решения позволяют определить в произвольный момент времени концентрационный профиль и конечную скорость распределения примеси.
- 4. Предложены методики нахождения начальных условий для решения нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений и критерии достоверности найденных решений.
- 5. Показано, что метод замены переменных, основанный на правиле размерности, эффективен и в линейной теории диффузии.

5. Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, соглашение No. FSWR- 2023-0036.

Литература

- [1] Готтштайн Г. Физико-химические основы материаловедения. Пер. с англ. / Г. Готтштайн. Москва: БИНОМ; Лаборатория знаний, 2011. 400 с.
- [2] Мерер Х. Диффузия в твердых телах. Пер. с англ. / Х. Мерер. Москва: Интеллект, 2011. 536 с.
- [3] Земсков А.В., Тарпаковский Д.В. Полярно-симметричная задача упругой диффузии для многокомпонентной среды. Проблемы прочности и пластичности. 2018. Т80. №1.
- [4] Теория и технология азотирования / Ю. М. Лахтин, Я. Д. Коган, Г.И. Шпис, З. Бемер. Москва: Металлургия, 1991. 320 с.
- [5] Лахтин Ю. М. Химико-термическая обработка металлов /Ю. М. Лахтин, Б.Н. Арзамасом. Москва: Металлургия, 1985. —256 с.
- [6] Процессы взаимной диффузии в сплавах / И. Б. Боровский, К. П. Гуров, И. Д. Марчукова, Ю. Э. Угасте. Москва: Наука, 1973. 360 с.
- [7] Гуров К. П. Взаимная диффузия в многофазных металлических системах: учебное пособие / К. П. Гуров, Б. А. Карташкин, Ю. Э. Угасте. Москва: Наука, 1981. 350 с.
- [8] Попов А. А. Теоретические основы химико-термической обработки стали / А. А. Попов. Москва: Металлургиздат, 1962. —120 с.
- [9] Cobble R. // J. Appl. Phys.1963. V.34. P.1679.
- [10] Гегузин Я.Е. Физика спекания. М.: Наука. 1976.
- [11] Горелик С.С. Рекристаллизация металлов и сплавов. М.: Металлургия. 1978.
- [12] Бокштейн С.З., Гинзбург С.С., Кишкин С.Т., Разумовский И.М., Строганов Б.Г. Авторадиография поверхностей раздела и структурная стабильность сплавов. М.: Металлургия.1987. 272с.
- [13] Поут Дж., Ту К., Мейер Дж. Тонкие плёнки. Взаимная диффузия и реакции; Пер. с англ. -М.; Мир.1982. 338с.

- [14] Glickman E.E., Nathan M.//J.Appl.Phys.1999. V. 85. P. 3185.
- [15] Gleiter H.//Progress Mater. Sci. 1989. V. 33(4). P. 223.
- [16] Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов. /Под ред. Ю.Р. Колобова, Р.З. Валиева. Новосибирск; Наука. 2001. 232с.
- [17] Болтакс Б.И. Диффузия в полупроводниках. М. Гос. изд-во физ.-мат. лит. 1961. 462 с.
- [18] Ваксман Ю.Ф., Ницук Ю.А., Яцун В.В., Насибов А.С., Шапкин П.В. Оптическое поглощение и диффузия железа в монокристаллах ZnSe // Физика и техника полупроводников. 2010. Т.44. вып.4. С. 463-466.
- [19] Umit Demirbas, Alphan Sennaroglu. Mehmet Somer. Synthesis and characterization of diffusion-doped Cr2+: ZnSe and Fe2+: ZnSe // Optical Materials. 2006. V28. P.231-240.
- [20] Ильичев Н.Н., Шапкин П.В., Гулямова Э.С., Кулевский Л.А., Насибов А.С. Определение коэффициента диффузии Fe2+ в монокристаллическом ZnSe // Неорганические материалы. 2010. Т. 46. № 2. С.149-153. Дифференциальные уравнения и процессы управления, N. 4, 2022. Электронный журнал. http://diffjournal.spbu.ru/124
- [21] Русаков Г.М., Лобанов М.Л., Ларионова К.В. Расчёт коэффициентов примесной диффузии методом разложения концентрационного профиля в ряд Фурье//Физика металлов и металловедение. 2001. Т. 91. С.14-16. [22] Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М. «Наука». Глав. ред. физ.-мат. лит., 1966. 724 с.
- [22] Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М. «Наука». Глав. ред. физ.-мат. лит., 1966. 724 с.
- [23] Игумнов Л.А., Грезина А.В., Метрикин В.С., Панасенко А.Г. Численно аналитическое моделирование диффузионных процессов в ограниченных многокомпонентных твердых телах.//Проблемы прочности и пластичности. Издательство Нижегородского университета. Т. 80, № 3, 2018. С. 336-348.
- [24] Кучерук І. М., Горбачук І. Т., Луцик П. П. Загальний курс фізики. Київ: Техніка, 2006. Т. 2.
- [25] Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям, 6 изд., М.: Наука, 1976. 703 р.
- [26] Будак Б.М., Самарский А.А., Тихонов А.П. Сборник задач по математической физике. четвертое издание, исправленное М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.-688с.
- [27] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Учебное пособие. В 10 т. Т. VI. Гидродинамика. 3-е изд., перераб. М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1986. 736 с.
- [28] Грезина А.В., Метрикин В.С., Панасенко А.Г. Нелинейные эффекты в теории диффузии примеси в твердом теле// Дифференциальные уравнения и процессы управления 2022, N. 4. С.115-125.

Two one-dimensional boundary value problems of nonlinear diffusion theory

Grezina A.V.^{1*}, Metrikin V.S.^{1**}, Panasenko A.G.^{1***}

¹Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod

e-mail:

*aleksandra-grezina@yandex.ru **v.s.metrikin@mail.ru ***a.g.panasenko@yandex.ru

Abstract. This work is an extension of the authors' earlier investigations into a nonlinear theory of propagation of impurities in solids. Two mathematical models governed by partial differential equations are studied in this paper. Both models describe the dynamics of the impurities' propagation in a simi-infinite prismatic solid with an impenetrable side surface. The difference between the models is associated with the impurity source that is located at the boundary of the solid. In the first case the source is assumed to be present during a finite time interval, whereas in the second case the impurity source is assumed to be stationary and provide a constant impurity flow. An approach is presented in this paper that allows to transform the nonlinear partial differential equations into nonlinear ordinary differential equations and derive solutions to the latter. A methodology is presented for the formulation of the initial conditions for the nonlinear ordinary differential equations and criteria are formulated for evaluation of the correctness of those conditions. The obtained solutions provide information regarding the time-dependent concentration of the impurities and their finite propagation speed. It is also shown in the paper that the proposed solution approach is also efficient in application to the linear theory of diffusion.

Keywords: partial differential equations, mathematical model, numerical modeling, nonlinear diffusion theory, dimensional rule, impurity propagation in a solid.

Acknowledgements This study was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of Russian Federation (agreement No. FSWR- 2023-0036).