

3月29日汇报PPT

汇报人：尹冀尧

学号：2070257



目录

CONTENT



- 1 ABAQUS Mass Diffusion模块
- 2 Fick定律
- 3 氢扩散有限元仿真

1. ABAQUS Mass Diffusion模块



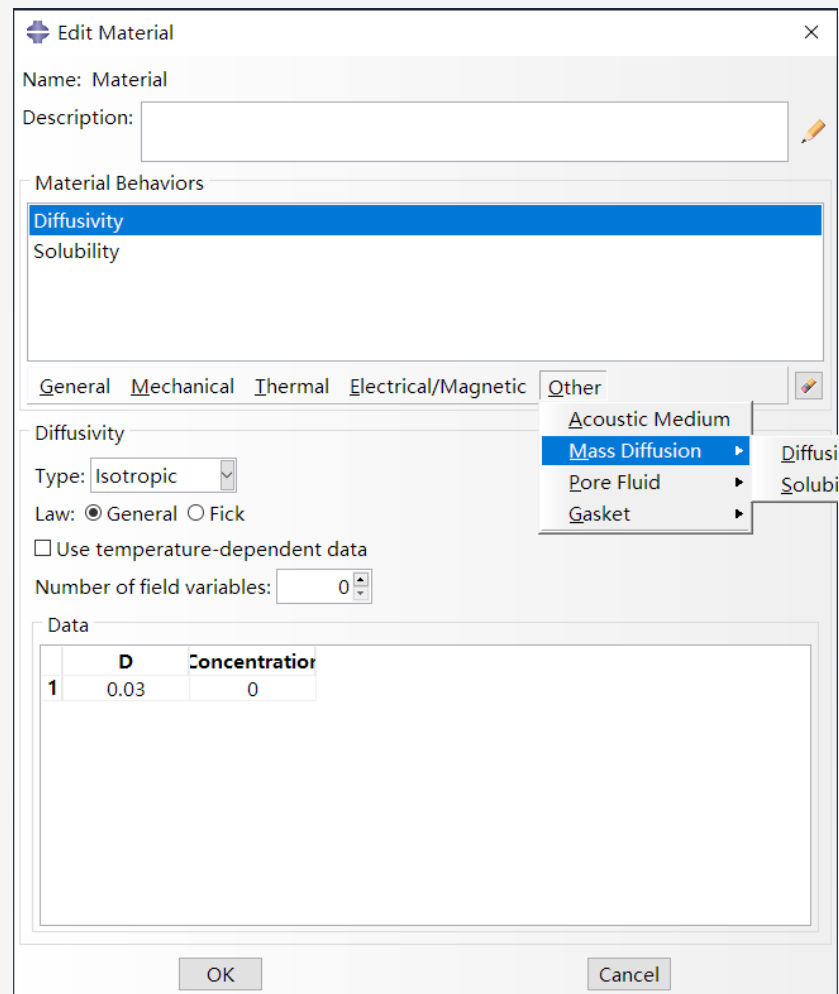
1 ABAQUS Mass Diffusion 模块

ABAQUS 质量扩散模块 (Mass Diffusion, 简称 MD) 内置 Fick 方程(1)、广义化学扩散控制方程(2), 可考虑温度 (Soret) 效应、压力效应, 可以研究一维到三维的扩散问题, 其一维形式分别为:

$$\frac{\partial C_x}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C_x}{\partial x} \right) \quad (1)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -sD \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \phi}{\partial x} + \kappa_s \frac{\partial}{\partial x} \ln(\theta - \theta^z) + \kappa_p \frac{\partial p}{\partial x} \right] \quad (2)$$

式中: D 为扩散系数; C_x 为扩散物质浓度; s 为溶解度; ϕ 为归一化扩散物质浓度; κ_s 为温度 (Soret) 效应系数; κ_p 为压力效应系数; θ 为摄氏温度, θ^z 为绝对零度的摄氏温度; p 为压强。



2. Fick定律



2.1 简述

菲克定律包括两个内容：

(1) 早在1855年，菲克就提出了：在单位时间内通过垂直于扩散方向的单位截面积的扩散物质流量（称为扩散通量Diffusion Flux，用 J 表示）与该截面处的浓度梯度(Concentration gradient)成正比，也就是说，浓度梯度越大，扩散通量越大。这就是**菲克第一定律**。

$$J \equiv \frac{dm}{A dt} = -D \left(\frac{\partial C}{\partial X} \right)$$

式中， D 称为扩散系数(m^2/s)， C 为扩散物质（组元）的体积浓度(原子数/ m^3 或 kg/m^3)， $\partial C/\partial x$ 为浓度梯度，“-”号表示扩散方向为浓度梯度的反方向，即扩散组元由高浓度区向低浓度区扩散。扩散通量 J 的单位是 $\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$ 。

(2) **菲克第二定律**是在第一定律的基础上推导出来的。菲克第二定律指出，在非稳态扩散过程中，在距离 x 处，浓度随时间的变化率等于该处的扩散通量随距离变化率的负值。

2. Fick定律



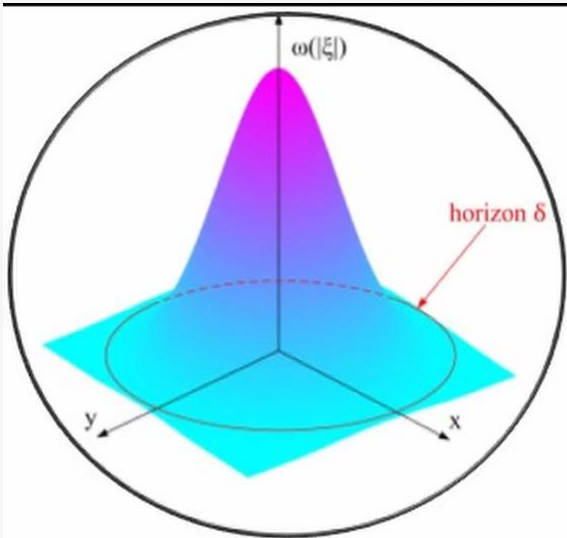
2.2 应用

菲克第一定律只适应于 J 和 C 不随时间变化——**稳态扩散(Steady-state diffusion)**的场合。所谓稳定扩散是指扩散过程中扩散物质的浓度分布不随时间变化的扩散过程，这类问题可直接用菲克第一定律解决。对于稳态扩散也可以描述为：在扩散过程中，各处的扩散组元的浓度 C 只随距离 x 变化，而不随时间 t 变化，每一时刻从前边扩散来多少原子，就向后边扩散走多少原子，没有盈亏，所以浓度不随时间变化。实际上，大多数扩散过程都是在非稳态条件下进行的。

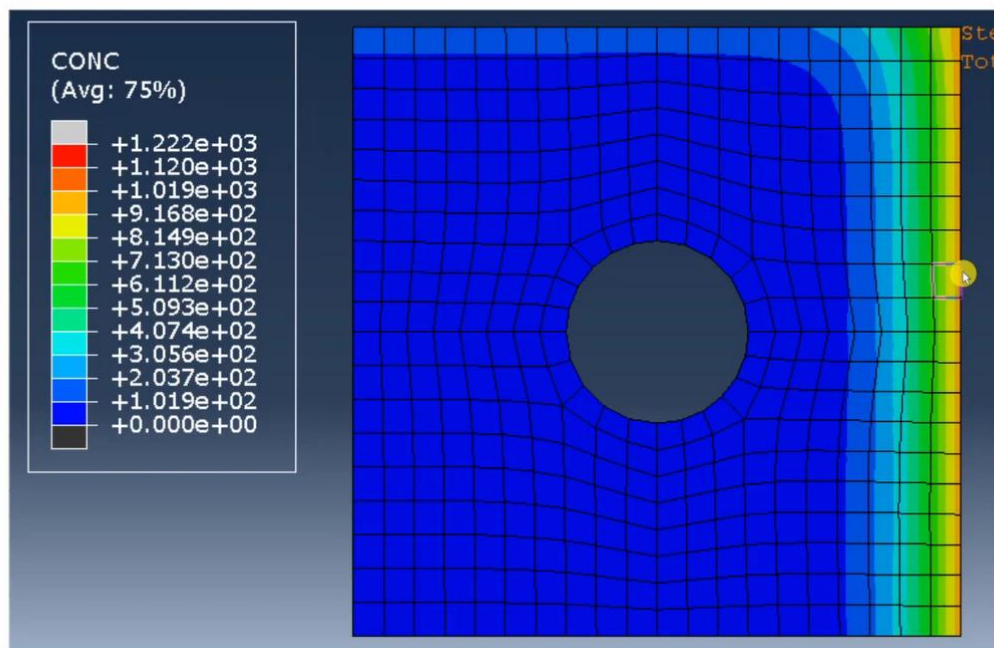
不稳定扩散是指扩散过程中扩散物质的浓度分布随时间变化的一类扩散过程。典型不稳定扩散中典型的边界条件可分为两种情况：第一种情况是在整个扩散中扩散质点在晶体表面的浓度 C_0 保持不变；第二种情况是一定量的扩散物质 Q 由表面向内部扩散。

不稳定扩散(Nonsteady-state diffusion)的特点是：在扩散过程中， J 随时间和距离变化。通过各处的扩散通量 J 随着距离 x 在变化，而稳态扩散的扩散通量则处处相等，不随时间而发生变化。对于非稳态扩散，就要应用菲克第二定律了。

3. 氢扩散有限元仿真



Not Real Engineering



汇报结束，谢谢