



УСКОРЕНИЕ И ЗАМЕДЛЕНИЕ ДИФФУЗИИ В СРЕДЕ ПУТЕМ ВРЕМЕННОЙ МОДУЛЯЦИИ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ

Е.Л. Панкратов

На основании разработанного ранее подхода к оценке временных характеристик процессов массопереноса определено время установления концентрации примеси в среде с нестационарным коэффициентом диффузии. На основе спектрального разложения определены условия, которым должен удовлетворять коэффициент диффузии, позволяющий максимально ускорить или замедлить процесс диффузии.

Введение

Актуальной проблемой теории массопереноса является определение временных характеристик процесса диффузии в средах с параметрами, зависящими от координаты и времени. Изменение коэффициента диффузии во времени может быть осуществлено, например, изменением температуры среды [1,2]. Зависимость коэффициента диффузии от координаты определяется пространственной структурой исследуемого объекта [1].

В представленной работе исследуется влияние изменения во времени коэффициента диффузии на время установления стационарного распределения примеси. На основе разработанного ранее [3,4] подхода к оценке временных характеристик процессов массопереноса получены соотношения для вычисления времени установления концентрации примеси и выявлены условия, которым должен удовлетворять коэффициент диффузии, соответствующий максимальному ускорению или замедлению диффузии.

Постановка задачи

Рассмотрим одномерную среду $0 \leq x \leq L$ с отражающими границами и переменным во времени коэффициентом диффузии $D(t)$. В момент времени $t=0$ в среду внедряется примесь единичной массы с заданным распределением концентрации $C(x,0)=f(x)$. С течением времени концентрация примеси приходит к стационарному распределению $C(x,\infty)=1/L$. Целью настоящей работы является определение времени установления стационарной концентрации примеси в произвольной точке среды x и оптимизация закона изменения коэффициента

диффузии во времени для получения минимально и максимально возможных времен установления примеси.

Метод решения

Закон изменения концентрации примеси описывается уравнением диффузии [1,2,4]

$$\partial C(x,t)/\partial t = D(t)\partial^2 C(x,t)/\partial x^2 = -\partial G(x,t)/\partial x, \quad (1)$$

где $G(x,t) = -D(t)\partial C(x,t)/\partial x$ - поток примеси. Уравнение диффузии дополняется начальным $C(x,0) = f(x)$ и граничными $G(0,t) = G(L,t) = 0$ условиями. Не представляет труда найти решение уравнения (1) [2]. Но переходные процессы установления концентрации имеют сложную временную зависимость, и определить время установления концентрации примеси из решения уравнения (1) в общем виде не представляется возможным. В наиболее интересном с практической точки зрения случае, когда начальная концентрация примеси сосредоточена на одной границе среды, а время установления определяется в точке, расположенной на другой границе ($f(x) = \delta(x-0)$, $x=L$, где $\delta(x-0)$ - односторонняя дельта-функция [5]), концентрация изменяется во времени монотонно. В этом случае время установления удобно определять с помощью известного [4,6] интегрального критерия в виде равновеликого по площади прямоугольника

$$\Theta(x) = [C(x,0) - C(x,\infty)]^{-1} \int_0^\infty [C(x,t) - C(x,\infty)] dt. \quad (2)$$

Данный критерий является асимптотически оптимальным [7], то есть минимизирует среднеквадратичную ошибку (в асимптотике бесконечно большого времени наблюдения t_N за процессом диффузии по сравнению со временем установления концентрации примеси), возникающую при аппроксимации функции $C(x,t)$ (в фиксированной точке среды x) ступенчатой функцией, которая в асимптотике $t_N \gg \Theta$ переходит в равновеликий по площади прямоугольник.

С целью упрощения определения условий, которым должен удовлетворять коэффициент диффузии для максимального ускорения или замедления процесса диффузии ограничимся случаем малых изменений коэффициента диффузии. В приближении малых отклонений процесс диффузии в первом приближении описывается средним значением коэффициента диффузии D_0 . По этой причине закон изменения $D(t)$ удобно представить в виде суммы его среднего значения и отклонения от него, учитывающего относительное изменение коэффициента диффузии во времени $D(t) = D_0[1 + \mu v(t)]$, $0 \leq \mu \ll 1$, $|v(t)| \leq 1$. Введение малого параметра μ и ограничения $|v(t)| \leq 1$ позволяет использовать метод Пуанкаре и искать функцию $C(x,t)$ в виде ряда по малому параметру [3,4]

$$C(x,t) = \sum_{k=0}^{\infty} \mu^k C_k(x,t). \quad (3)$$

Подстановка (3) в уравнение (1) и группировка слагаемых с одинаковыми степенями параметра μ в обеих частях уравнения диффузии приводит к системе уравнений

$$\begin{cases} \partial C_0(x,t)/\partial t = D_0 \partial^2 C_0(x,t)/\partial x^2, \\ \partial C_k(x,t)/\partial t = D_0 \partial^2 [C_k(x,t) + v(t)C_{k-1}(x,t)]/\partial x^2, \quad k \geq 1. \end{cases} \quad (4)$$

Начальное и граничные условия для функций $C_k(x,t)$ с учетом (3) принимают вид

$$\begin{aligned} \partial C_{k \geq 0}(x,t)/\partial x|_{x=0} = \partial C_{k \geq 0}(x,t)/\partial x|_{x=L} = 0, \\ C_0(x,0) = f(x), C_{k \geq 1}(x,0) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Линейность критерия (2) относительно концентрации $C(x,t)$ с учетом разложения (3) позволяет записать

$$\Theta(x) = \Theta_0(x)(1 + \sum_{k=1}^{\infty} \mu^k \tau_k(x)), \quad (6)$$

где $\Theta_0(x)$ - нулевое приближение времени установления, а функции $\tau_k(x)$ будем называть относительными поправками ко времени установления $\Theta(x)$. Функции $\Theta_0(x)$ и $\tau_1(x)$ определяются соотношениями

$$\Theta_0(x) = [6D_0 d(x)(1 - Lf(x))]^{-1}, \quad (7)$$

где $d(x) = [6Lx F_0(x) - 3F_2(L) + 6L(F_1(L) - F_1(x)) - 2L^2 - 3x^2]^{-1}$, $F_i(x) = \int_0^x y^i f(y) dy$,

$$\tau_1(x) = 6D_0 d(x) (L u_0(x) - \int_0^L u_0(y) dy), \quad (8)$$

где $u_0(x) = \int_0^{\infty} v(t) C_0(x,t) dt$. Условия малости μ и ограниченности по модулю функции $v(t)$ позволяют пренебречь членами рядов (3) и (6) второго и более высоких порядков малости по параметру μ по сравнению с первыми (линейными) приближениями.

Пример

Линейность поправки (8) по $v(t)$ позволяет пользоваться спектральным разложением [5] функции $v(t)$, что упрощает расчет поправки $\tau_1(x)$ [4]. При спектральном анализе наиболее часто используется функция $v(t) = \cos(\omega t + \varphi)$. Линейность соотношения (8) по $v(t)$ и одно из известных тригонометрических соотношений [5] позволяют представить поправку $\tau_{1\cos(\omega t + \varphi)}(x)$, соответствующую функции $v(t) = \cos(\omega t + \varphi)$, в виде суперпозиции поправок $\tau_{1\sin}(x)$ и $\tau_{1\cos}(x)$, соответствующих функциям $v(t) = \sin \omega t$ и $v(t) = \cos \omega t$

$$\tau_{1\cos(\omega t + \varphi)}(x) = \tau_{1\cos}(x) \cos \varphi - \tau_{1\sin}(x) \sin \varphi.$$

При вычислении поправок $\tau_{1\sin}(x)$ и $\tau_{1\cos}(x)$ ограничимся случаем $f(x) = \delta(x-0)$ и $x=L$

$$\begin{aligned} \tau_{1\sin \delta}(L) = 3z \{ [a_1 \cos(\gamma L) \operatorname{ch}(\gamma L) + a_2 \sin(\gamma L) \operatorname{sh}(\gamma L)] / 2\psi - \\ - \operatorname{sh}(\gamma L) \cos(\gamma L) + \sin(\gamma L) \operatorname{ch}(\gamma L) - z \}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \tau_{1\cos \delta}(L) = 3z \{ [a_1 \cos(\gamma L) \operatorname{ch}(\gamma L) + a_2 \sin(\gamma L) \operatorname{sh}(\gamma L)] / 2\psi - \\ - \operatorname{sh}(\gamma L) \cos(\gamma L) - \sin(\gamma L) \operatorname{ch}(\gamma L) \}, \end{aligned} \quad (10)$$

где $\gamma = \omega^{1/2} (2D_0)^{-1/2}$, $\psi = \operatorname{ch}^2(\gamma L) - \cos^2(\gamma L)$, $z = (\gamma L)^{-1}$, $a_1 = \operatorname{sh}(2\gamma L) - \sin(2\gamma L)$, $a_2 = \operatorname{sh}(2\gamma L) + \sin(2\gamma L)$.

Изменение времени установления стационарной концентрации путем выбора закона изменения коэффициента диффузии

Проанализируем зависимость поправки $\tau_1(L)$ от параметров изменения коэффициента диффузии с целью нахождения условий на закон изменения коэффициента диффузии, при которых процесс диффузии максимально ускоряется или замедляется по сравнению со случаем постоянного коэффициента диффузии D_0 . Таким образом, требуется найти такие условия на закон изменения коэффициента диффузии, при которых поправка $\tau_1(L)$ будет максимальной по модулю. Ускорение процесса соответствует отрицательной поправке, замедление - положительной.

Следует отметить немонотонность частотной зависимости поправки $\tau_{1\sin}(L)$ (сплошная линия на рисунке). Максимум модуля этой зависимости достигается на частоте $\omega_0 \approx 2\pi/4.13\Theta_0(L)$ и равен (-0.55) при любых значениях D_0 и L . Интересно отметить, что в случае существования в среде с постоянным коэффициентом диффузии периодического во времени потенциального барьера $\Phi(x,t)$, временные характеристики транспорта примеси в такой среде также являются немонотонной функцией частоты [8] резонансного вида. Частотная зависимость поправки $\tau_{1\cos}(L)$ практически монотонна (см. рисунок). Как и следовало ожидать, максимальное по модулю (отрицательное) значение поправки $\tau_{1\cos}(L)$ достигается на частоте $\omega=0$. На частоте $\omega_1 \approx 2/1.21\Theta_0(L)$ рассматриваемая частотная зависимость равна нулю. В области частот $\omega > \omega_1$ поправка $\tau_{1\cos}(L)$ достигает своего положительного максимального значения равного 0.012, на частоте $\omega_2 \approx 2/0.88\Theta_0(L)$.

Нетрудно выявить с помощью спектрального анализа, что возрастающей по модулю в начальный момент времени периодической функции $v(t)$ соответствует частотная зависимость поправки $\tau_1(L)$ с четко выраженным экстремумом. Не возрастающей по модулю в начальный момент времени периодической функции $v(t)$ соответствует монотонная или почти монотонная частотная зависимость поправки $\tau_1(L)$.

Начальная фаза коэффициента диффузии, соответствующая максимальному различию между $\Theta(L)$ и $\Theta_0(L)$, удовлетворяет условию $d\tau_1(\varphi)/d\varphi=0$ и равна $\varphi_0 = -\arctg[\tau_{1\sin}(L)/\tau_{1\cos}(L)]$. Величины поправок $\tau_{1\sin}(L)$ и $\tau_{1\cos}(L)$ определяются с помощью выражений (9) и (10).

Пределы применимости полученных результатов

Следует отметить, что решение уравнения (1) можно найти точно при любой глубине изменения коэффициента диффузии во времени [2]. Подстановка точного решения в выражение (2) дает точное соотношение для времени установления. В данной работе ограничимся только частным случаем $f(x)=\delta(x-0)$ и $x=L$

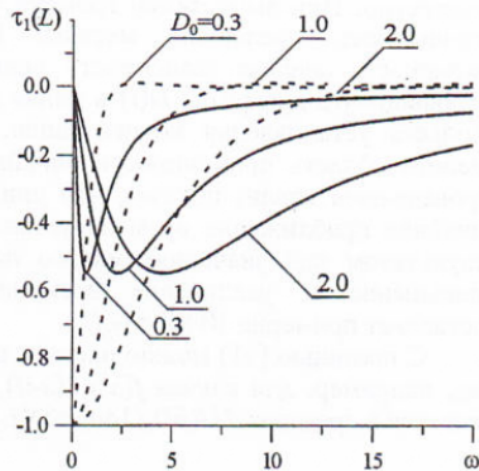


Рис. Зависимости поправки $\tau_1(L)$ от частоты коэффициента диффузии. Сплошные линии соответствуют закону изменения $v(t)=\sin\omega t$, пунктирные - $v(t)=\cos\omega t$

$$\Theta(L) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \int_0^{\infty} \exp\{-(\pi n/L)^2 \int_0^t D(u) du\} dt. \quad (11)$$

Аналитическое выражение суммы членов ряда в (11) в большинстве случаев неизвестно. При вычислении времени установления с помощью (11) приходится использовать численные методы. Их применение существенно снижает наглядность анализа зависимости времени установления от закона изменения коэффициента диффузии $D(t)$ в целях максимального ускорения или замедления процесса установления концентрации. Однако данное соотношение позволяет оценить область применимости линейного приближения времени установления. Проведенный анализ показал, что при гармоническом коэффициенте диффузии линейное приближение времени установления практически совпадает с точным результатом при значениях малого параметра $\mu \leq 0.1$. При этом максимальное уменьшение и увеличение времени установления концентрации примеси составляет примерно 10% от $\Theta_0(L)$.

С помощью (11) можно оценить интервал изменения времени установления. Так, например, для случая $f(x) = \delta(x-0)$, $x=L$, $v(t) = \cos(\omega t + \varphi)$ время установления меняется в пределах: $L^2/(6D_0(1+\mu)) \leq \Theta(L) \leq L^2/(6D_0(1-\mu))$.

Заключение

В настоящей работе исследована зависимость времени установления стационарной концентрации примеси в однородной среде от характера изменений во времени коэффициента диффузии. Выявлено, что динамика установления примеси определяется начальной фазой изменений коэффициента диффузии. По этой причине требуется синхронизация момента инъекции примеси с изменениями коэффициента диффузии. Получена оценка сверху и снизу времени установления концентрации примеси. В работе показано, что при некоторых периодических законах изменения коэффициента диффузии время установления является немонотонной функцией частоты, имеющей сходство с резонансной кривой.

Данная работа поддержана грантами РФФИ (№ 02-02-17517 и № 03-02-06158), НШ (№ 1729.2003.2) и INTAS (№ 2001-0450).

Библиографический список

1. Gillin W.P. and Dunstan D.J. Strain and interdiffusion in semiconductor heterostructures // Phys. Rev. B. 1994. Vol. 50. P. 7495.
2. Райченко А.И. Математическая теория диффузии в приложениях. Киев: Наукова Думка, 1981.
3. Мальцев А.А., Панкратов Е.Л. Время установления концентрации вещества в слабо неоднородной среде // Труды (пятой) научной конференции по радиофизике / Ред. А.В. Якимов. Н. Новгород: ННГУ, 2001. С. 211.
4. Дубков А.А., Мальцев А.А., Панкратов Е.Л. Эффективное время установления концентрации вещества в среде со слабо неоднородным коэффициентом диффузии // ЖТФ. 2002. Т. 72, № 11. С.14.
5. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1977.
6. Garanin D.A. Integral relaxation time of a single-domain ferromagnetic particles // Phys. Rev. E. 1996. Vol. 54. 3250.
7. Малахов А.Н., Панкратов Е.Л. Время установления концентрации веще-

ства в среде с произвольно меняющимися в пространстве коэффициентом диффузии и потенциалом // Изв. вузов. Радиофизика. 2001. Т. 44, № 4. С. 367.

8. *Malakhov A.N., Pankratov E.L.* Evolution times of probability distribution and averages-exact solutions of the Kramers' problem // Adv. Chem. Phys. 2002. Vol. 121. P. 356.

*Нижегородский государственный
университет*

*Поступила в редакцию 6.11.02
после доработки 17.02.03*

ACCELERATION AND DECELERATION OF DIFFUSION IN A MEDIUM BY TIME MODULATION OF DIFFUSION COEFFICIENT

E.L. Pankratov

On the base of recently elaborated approach to a estimating time characteristics of mass transport, the relaxation time of dopant concentration in a medium with nonstationary diffusion coefficient is determined. On the base of spectral decomposition, the conditions for the change law of diffusion coefficient when maximum acceleration or deceleration of diffusion process take place are determined.



Панкратов Евгений Леонидович - родился в Горьком (1977), окончил радиофизический факультет Нижегородского государственного университета (2001). После окончания поступил в аспирантуру ННГУ по специальности «Радиофизика». Опубликовал 11 научных работ по направлению своих исследований.