01;05

Альтернативные аналитические решения уравнения диффузии (теплопроводности) для произвольного исходного распределения концентрации (температуры)

© Р.Ш. Малкович

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург

Поступило в Редакцию 20 июня 2002 г.

Приводятся альтернативные аналитические решения уравнения диффузии (теплопроводности), обеспечивающие быструю сходимость при малых значениях Dt/l^2 (или $\alpha t/l^2$). Здесь D — коэффициент диффузии, α — температуропроводность, t — время, l — размер тела. Решения носят общий характер — они справедливы в случае произвольного исходного распределения концентрации (температуры).

Известные аналитические решения уравнения диффузии (теплопроводности)

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \qquad \left(\text{или} \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha\,\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right) \tag{1}$$

(c — концентрация, T — температура, x — координата, t — время, D — коэффициент диффузии, α — температуропроводность) обычно выражаются для конечного тела (размером l) в виде ряда, сходимость которого зависит от величины Dt/l^2 (или at/l^2): чем больше эта величина, тем лучше сходимость ряда. При малых значениях этой величины ряд сходится медленно.

В настоящем сообщении указываются альтернативные аналитические решения уравнения диффузии (теплопроводности), обеспечивающие быструю сходимость при малых значениях величины Dt/l^2 (или at/l^2), например на ранних стадиях процесса. Отметим, что эти решения носят общий характер — они справедливы в случае произвольного исходного распределения концентрации (температуры). Насколько нам известно, общие решения такого рода отсутствуют в литературе.

Будем далее рассматривать только уравнение диффузии, поскольку полученные результаты могут быть непосредственно перенесены на случай уравнения теплопроводности.

Ниже рассматривается конечное тело $0 \leqslant x \leqslant l$ с поглощающими, $c(0,t) = c(l,t) = 0$, $t > 0$, и с непроницаемыми границами, $\frac{\partial c}{\partial x}(0,t) = \frac{\partial c}{\partial x}(l,t) = 0$, $t > 0$.

Используя преобразование Лапласа

$$w(x) = \int_0^\infty \exp(-pt) c(x,t) dt, \tag{2}$$

представим уравнение (1) в виде

$$D \frac{d^2 w}{dx^2} - pw + c(x,0) = 0, \tag{3}$$

где $c(x,0)$ — начальное распределение концентрации. Решение уравнения (3), как нетрудно показать, имеет вид:

$$w(x) = \frac{1}{2qD \sinh ql} \left\{ \int_0^x c\,(\xi,0) \left[\cosh q(l - x + \xi) \mp \cosh q(l - x - \xi)\right] d\xi \right.$$
$$\left. + \int_x^l c(\xi,0) \left[\cosh q(l + x - \xi) \mp \cosh q(l - x - \xi)\right] d\xi \right\}, \tag{4}$$

где $q = \sqrt{p/D}$. Верхний знак соответствует при этом поглощающим, нижний — непроницаемым границам. Разлагая величину $\frac{\cosh qz}{\sinh ql}$ (z — параметр) в ряд по экспонентам и переходя к оригиналу, находим:

$$c(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D t}} \int_0^l c(\xi,0) \left\{ \left[\exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right) \mp \exp\left(-\frac{(\xi + x)^2}{4Dt}\right) \right] \right.$$
$$+ \sum_{k=1}^\infty \left[\exp\left(-\frac{(2kl + x - \xi)^2}{4Dt}\right) + \exp\left(-\frac{(2kl - x + \xi)^2}{4Dt}\right) \right.$$
$$\left. \left. \mp \exp\left(-\frac{(2kl + x + \xi)^2}{4Dt}\right) \mp \exp\left(-\frac{(2kl - x - \xi)^2}{4Dt}\right) \right] \right\} d\xi. \tag{5}$$

Как и выше, верхний знак соответствует поглощающим, нижний — непроницаемым границам.

Полученное выражение (5) обеспечивает быструю сходимость в области малых значений величины Dt/l^2. Так, в случае диффузии в тело с непроницаемыми границами из бесконечно-тонкого слоя, расположенного в плоскости $x = 0$, при $Dt/l^2 = 0.01$ получение точного значения $c(0, t) = 5.641896Q/l$ (Q — количество вещества в слое) по традиционной формуле [1–3] требует использования двенадцати членов ряда, тогда как это же значение по формуле (6) получается уже из первого члена суммы.

При $\frac{l}{\sqrt{Dt}} = \infty$ выражение (5) переходит в известные выражения для диффузии в полуограниченном теле, $0 \leqslant x \leqslant \infty$, с поглощающей, $c(0, t) = 0$, $t > 0$, или с непроницаемой границей, $\frac{\partial c}{\partial x}(0, t) = 0$, $t > 0$ [1–3].

В дополнение к случаям диффузии при произвольном исходном распределении концентрации рассмотрим случай диффузии в теле $0 \leqslant x \leqslant l$, в котором в начальный момент времени примесь отсутствовала, но на обеих границах которого при всех временах $t > 0$ поддерживаются постоянные концентрации: $c(x, 0) = 0$; $c(0, t) = c_1$, $c(l, t) = c_2$, $t > 0$.

Решение уравнения (3) имеет в рассматриваемом случае вид

$$w(x) = \frac{c_1}{p}\,\frac{\sinh q(l-x)}{\sinh ql} + \frac{c_2}{p}\,\frac{\sinh qx}{\sinh ql}. \tag{6}$$

Разлагая величину $\frac{\sinh qz}{\sinh ql}$ в ряд по экспонентам и переходя к оригиналу, получаем:

$$\begin{aligned} c(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \Bigg\{ & c_1 \left[\operatorname{erfc} \frac{2kl + x}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{2(k+1)l - x}{2\sqrt{Dt}}\right] \\ & + c_2 \left[\operatorname{erfc} \frac{(2k+1)l - x}{2\sqrt{Dt}} - \operatorname{erfc} \frac{(2k+1)l + x}{2\sqrt{Dt}}\right]\Bigg\}. \end{aligned} \tag{7}$$

Выражение (7), как и (5), обеспечивает быструю сходимость при малых Dt/l^2. Так, при $Dt/l^2 = 0.01$, $c_1 = 1$, $c_2 = 2$ получение точного значения $c(0.05l, t) = 0.723674$ по традиционной формуле [1–3] требует одиннадцати членов ряда, тогда как при использовании выражения (7) достаточен всего лишь один член.

Список литературы

[1] *Crank J.* The mathematics of diffusion. Oxford: Clarendon Press, 1956.
[2] *Carslaw H.S., Jaeger J.C.* Conduction of heat in solids. Oxford: Clarendon Press, 1956. (Пер. Г. Карслоу и Д. Егер. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964).
[3] *Малкович Р.Ш.* Математика диффузии в полупроводниках. СПб.: Наука, 1999.