

ДИФФУЗИЯ В ТВЁРДЫХ ТЕЛАХ И ЕЁ ТОЧЕЧНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Выполнил ученик группы Л10-1:
Никитин Александр;
Научный руководитель:
учитель математики Исаева Е.В.

ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

Цель:

Научиться точно смоделировать процесс диффузии, используя полученные в ходе его изучения знания и данные научных источников.

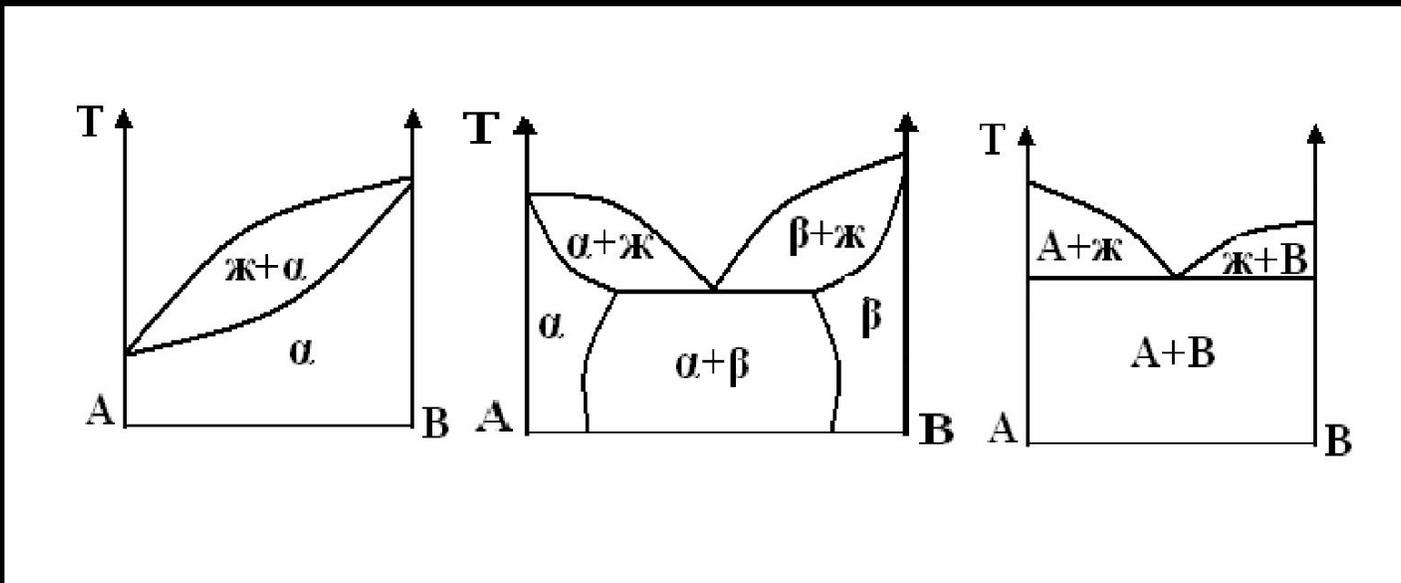
Задачи:

1. Изучить процесс диффузии;
2. Рассмотреть варианты протекания диффузии;
3. Изучить способы моделирования процесса диффузии;
4. Начать моделирование через нахождение уравнения субдиффузии

АКТУАЛЬНОСТЬ

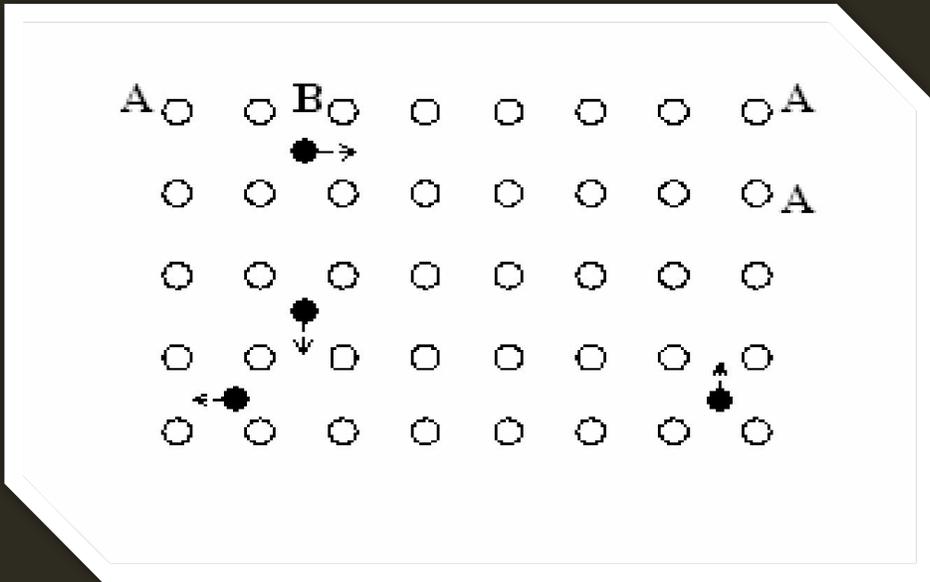
Важно понимать, что, несмотря на свою неполноценность в общем смысле, все хорошие модели совершенно полноценны для нужд, ради которых они создавались. Именно поэтому мне стало интересно узнать побольше о диффузии и способах ее моделирования как процесса, чтобы иметь больший запас знаний в этом вопросе, а также опыт в моделировании подобных процессов.

ДИФФУЗИЯ В ТВЁРДЫХ ТЕЛАХ

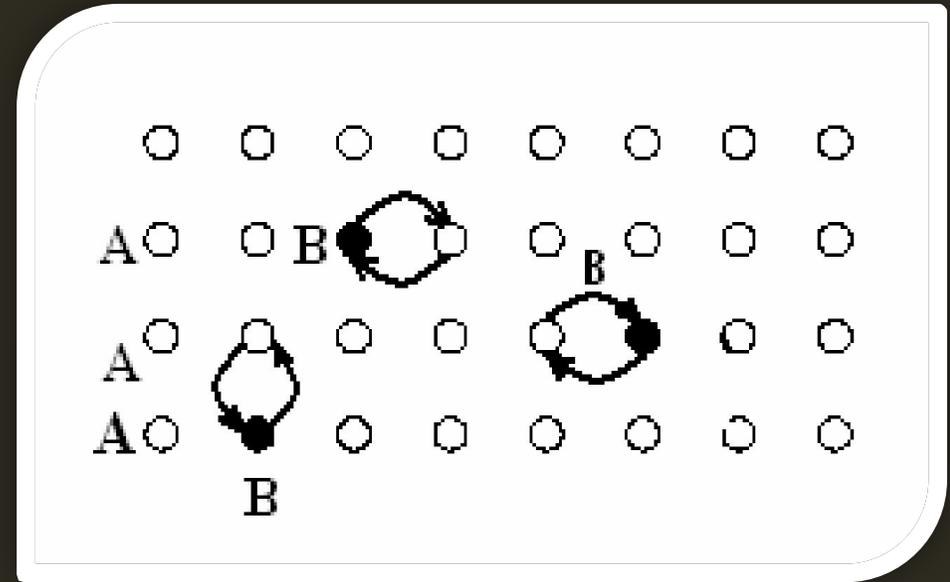


Диаграммы состояния

Процесс обмена мест в ходе гетеродиффузии



Механизм обмена мест в твердых растворах замещения



$$W \sim W_i \cdot W_j \sim e^{-\left(\frac{E_a}{kT}\right)_i} \cdot e^{-\left(\frac{E_a}{kT}\right)_j}$$

ДЕФЕКТЫ ШОТТКИ

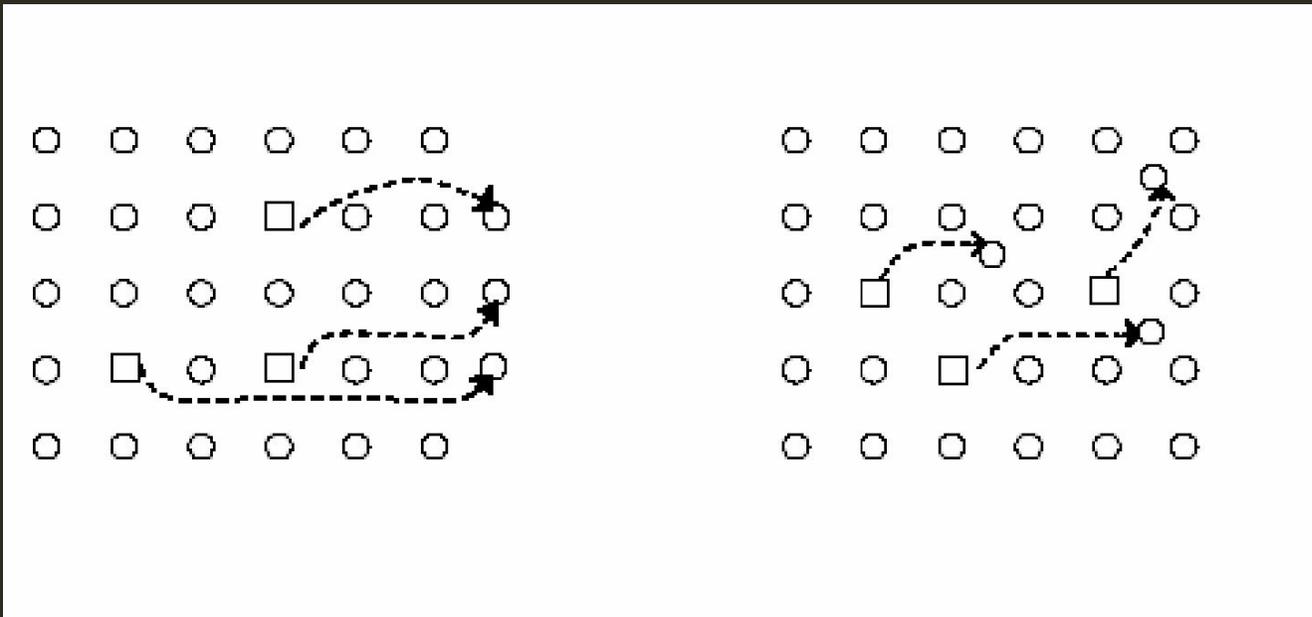
$$N_{\text{способ.}} = \frac{N(N-1)(N-2) \dots (N-n+1)}{n!} = \frac{N!}{(N-n)!n!}$$

Для металлов $E_i \approx 1 \text{ эВ}$, тогда при $T=1000 \text{ К}$ получим:

$$\frac{N_i}{N} \sim 1 \cdot 10^{-5}$$

При $T=T_{\text{пл}}$:

$$\frac{N_i}{N} \sim 1 \cdot 10^{-4}$$



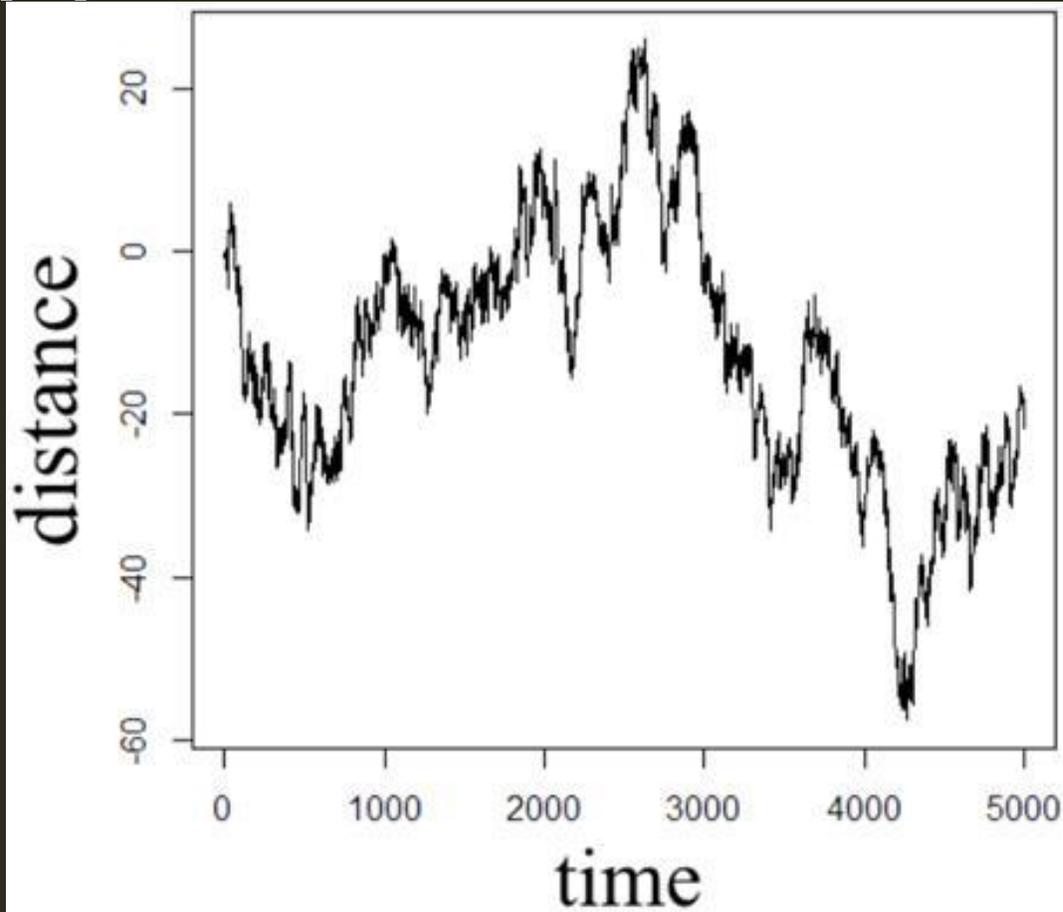
АНОМАЛЬНАЯ ДИФФУЗИЯ

$$\langle r^2(t) \rangle \sim t^a, t \gg 0, a > 0$$

Анализ результата нахождения α :

- При $\alpha = 1$ диффузия есть нормальная (не аномальная)
- при $\alpha < 1$ диффузия называется субдиффузией, такое распространение характеризуется крайне долгим сроком. К ней относят диффузию в поровой среде, и диффузию в среде с довольно большим, зачастую вязким, трением
- при $\alpha > 1$ – супердиффузией (аномально быстрой)

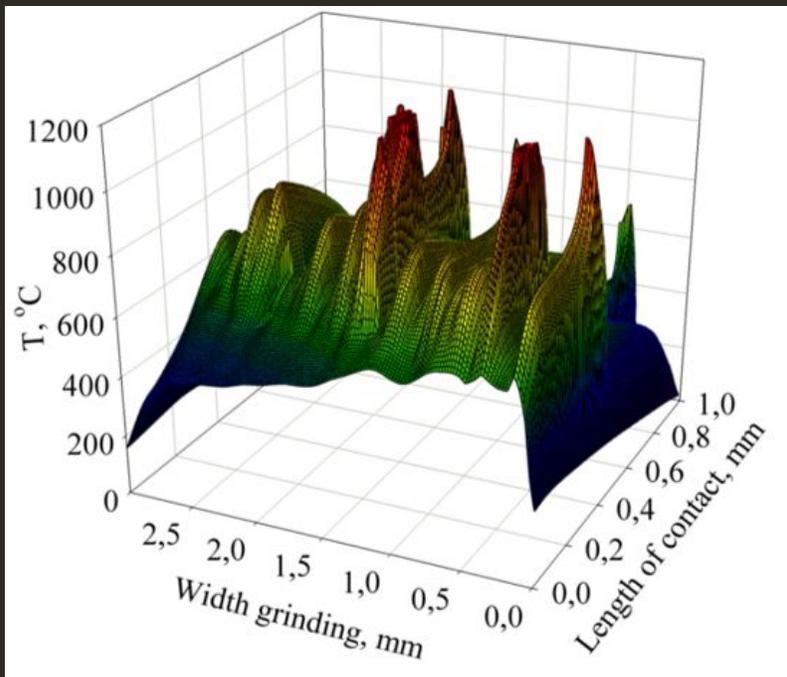
МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИФФУЗИИ



Моделирование
случайного блуждания
Броуновского движения,
с помощью STRW-
модели

АКСИОМАТИКА STRW-МОДЕЛИ

Существуют два основных способа моделирования STRW-модели: решением сложного интегрально-дифференциального уравнения и прямой стохастической реализацией



Стохастическая модель
теплофизического процесса
измельчения

УРАВНЕНИЕ СУБДИФФУЗИИ

Существует общее уравнение CTRW-модели:

$$p(\bar{x}, t) = \int_0^t f(t') \partial t' \int_{R^n} \lambda(\bar{x}') p(\bar{x} - \bar{x}', t - t') \partial \bar{x}' + p_0(\bar{x}) F(t), F(t) = 1 - \int_0^t f(\tau) \partial \tau$$

Носитель плотности

$$\lambda(\bar{x}) = \frac{1}{4} \left(\sigma_1 \sum_{i=1}^2 (\delta(\bar{x} - \bar{e}_i h) + \delta(\bar{x} + \bar{e}_i h)) + \sigma_2 \sum_{i=1}^2 (\delta(\bar{x} - \sqrt{2} \bar{e}_i h) + \delta(\bar{x} + \sqrt{2} \bar{e}_i h)) \right)$$

Функцию плотности вероятности задержек

$$f(\tau) = \frac{aK}{(K^{1/2} + \tau)^{a+1}}, K = \frac{2h^2(1-2\sigma_1+4\sigma_2)}{D_a \gamma(1+a) \gamma(1-a)}$$

ИТОГОВОЕ УРАВНЕНИЕ

Итоговое интегрально-дифференциальное уравнение будет иметь вид:

$$p(\bar{x}, t) = p_0(\bar{x})F(t) + \frac{1}{4} \int_0^t \left(\sigma_1 \cdot \sum_{i=1}^2 \left(p(\bar{x} - \bar{e}_i h, t - t') + p(\bar{x} + \bar{e}_i h, t - t') \right) + \sigma_2 \cdot \sum_{i=1}^2 \left(p(\bar{x} - \sqrt{2}\bar{e}_i h, t - t') + p(\bar{x} + \sqrt{2}\bar{e}_i h, t - t') \right) \right) \cdot f(t') dt'$$

Уравнение имеет сложное алгоритмическое решение, а изменение исходного шаблона неосуществимо

ВЫВОД

Мне удалось изучить процесс диффузии и способы его моделирования, а также выбрать из них наиболее удобный и при этом точный метод прямого стохастического моделирования, основанный на построении STRW-модели, которая также была рассмотрена в проекте.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- 1) <http://www.nizrp.narod.ru/fizchem.pdf>
- 2) Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: ФМ, 1963.
- 3) И.А.Васильева. Теплофизические свойства твердых тел (часть II) Учебное пособие
- 4) Селезнев В. А. Метод случайных блужданий в моделировании субдиффузии / В. А. Селезнев, Л. В. Пехтерева, Е. В. Исаева // Марчуковские научные чтения – 2017 : тез., Новосибирск, 25 июня – 14 июля 2017 г. – Новосибирск, 2017. – С. 82. - 410 экз. - ISBN 978-5-91907-041-2.
Персональные сайты авторов: [Селезнев В. А.](#), [Пехтерева Л. В.](#), [Исаева Е. В.](#)
- 5) <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fphy.2015.00011/full>

ДИФФУЗИЯ В ТВЁРДЫХ ТЕЛАХ И ЕЁ ТОЧЕЧНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Выполнил ученик группы Л10-1:
Никитин Александр;
Научные руководитель:
учитель математики Исаева Е.В.