УДК 517.946

А.Г. Петрова

О математической модели жидкостной эпитаксии из тройного раствора*

Ключевые слова: фазовый переход, обратная задача, автомодельное решение.
Key words: phase transition, inverse problem, self-similar solution.

1. Построение модели и постановка задач. Будем рассматривать одномерный процесс роста пленки $A_xB_{1-x}C$ в двух вариантах: неподвижный жидкий раствор, из которого растет пленка, занимает в момент t ограниченную область $0 < x < s(t)$, сужающуюся в ходе процесса (задача 1); и жидкий раствор занимает полубесконечный интервал $x > s(t)$, граница которого движется вправо в процессе роста пленки (задача 2). Диффузией компонент пленки пренебрегаем. Перенос компонент в жидкости подчиняется закону Фика с постоянными коэффициентами диффузии (D_1 и $D_2 = kD_1$). Температуру системы считаем заданной функцией времени: $\theta = \theta(t)$. На фронте роста пленки $x = s(t)$ ставятся условия сохранения массы компонент и задается зависимость их концентрации от температуры θ, выражающая условия равновесия фаз. Обозначим массы компонент AC и BC в единице объема пленки через ρ_1 и ρ_2, а плотности твердых бинарных составляющих AC и BC – через ρ_1^* и ρ_2^*. Плотность $\rho_1 + \rho_2$ пленки $A_xB_{1-x}C$ предполагается зависящей линейно от y (y есть функция от x):

$$\rho_1 + \rho_2 = y\rho_1^* + (1-y)\rho_2^*.$$

При этих предположениях процесс роста пленки в задаче 1 описывается следующей начально-краевой задачей с неизвестными функциями $c_i(x,t)$ $(i = 1,2)$, $s(t)$, $y(t)$:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2}, \quad 0 < x < s(t); \qquad (1.1)$$

$$\begin{gathered} D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} = s'(t)(\kappa_i \rho_i - c_i), \\ c_i = \lambda_i(t) = \mu_i(\theta(t)), \ x = s(t); \end{gathered} \qquad (1.2)$$

$$s(0) = 1, c_i(x,0) = \varphi_i(x), 0 < x < 1; \qquad (1.3)$$

$$c_i(0,t) = c_{i0}; \qquad (1.4)$$

$$\begin{gathered} \rho_1 + \rho_2 = y\rho_1^* + (1-y)\rho_2^*, \\ y = \rho_1(\rho_1 + \gamma\rho_2)^{-1}. \end{gathered} \qquad (1.5)$$

В задаче 2 уравнения (1.1) выполняются в другой области:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2}, \quad x > s(t); \qquad (1.1)'$$

начальные условия (1.3) принимают вид:

$$s(0) = 0, c_i(x,0) = \varphi_i(x), 0 < x < \infty; \qquad (1.3)'$$

краевые условия (1.4) заменяются на следующие:

$$c_i(\infty,t) = c_{i\infty.} \qquad (1.4)'$$

В задачах 1 и 2 функции $c_i(x,t)$ представляют собой массу компоненты с номером i в единице объема раствора; κ_i – заданные положительные постоянные, а постоянная γ есть отношение молекулярных весов первой и второй компонент; $\varphi_i(x), \mu_i(\theta), \theta(t)$ – заданные непрерывно дифференцируемые функции своих аргументов, такие, что $\mu'(\theta) \ge 0, \theta'(t) \le 0,$ причем в задаче 1 $\varphi_i'(x) \le 0,$ а в задаче 2 $\varphi_i'(x) \ge 0,$ и выполнены следующие условия:

$$\begin{gathered} 0 \le \lambda_i(t) \le 1, \\ \lambda_1(0) + \lambda_2(0) < \min(\rho_1^*, \rho_2^*); \end{gathered} \qquad (1.6)$$

$$\varphi_i(x) \ge \lambda_i(0), i = 1,2. \qquad (1.7)$$

Также считаются выполненными условия согласования граничных и начальных данных, необходимые для классической разрешимости задач. В случае задачи 2 на бесконечности ставятся условия ограниченности функций $c_i(x,t)$.

Пусть M_A, M_B – атомные веса элементов A, B, а M_{AC}, M_{BC} – молекулярные веса AC, BC. В случае $\kappa_1 = M_A/M_{AC}$, $\kappa_2 = M_B/M_{BC}$ задача (1.3), (1.4) моделирует рост пленки из раствора с компонентами *A, B, C*. Значениям $\kappa_1 = 1$, $\kappa_2 = M_B/M_{BC}$ соответствует рост из раствора *AC, B, C*.

Если $\kappa_1 = 1$, $\kappa_2 = 1$, то имеем рост из раствора AC, BC, C.

Сформулированные задачи 1, 2 служат для определения состава растущей пленки $y(x)$ в зависимости от заданной рабочей температуры процесса $\theta(t)$ и начального распределения концентраций $\varphi_i(x)$. Назовем эти задачи «прямыми».

Поставим также задачу определения рабочей температуры процесса $\theta(t)$ по заданному составу образовавшейся пленки $y(x)$ и начальной концентрации компонент $\varphi_i(x)$: требуется найти функции $c_i(x,t)$, $s(t)$, $\theta(t)$, удовлетворяющие уравнени-

* *Работа выполнена при поддержке программы «Развитие научного потенциала Высшей школы 2009–2010 гг.» (проект 2.2222.2.4.4278).*

ям (1.1) – (1.5), в которых $\varphi_i(x)$ и $y(x)$ со значениями из интервала *(0,1)* являются заданными функциями. Назовем такую задачу «обратной задачей 1». Аналогично ставится «обратная задача 2». Отметим, что обратные задачи 1 и 2 в нашем случае, в отличие от обратных задач кристаллизации бинарного сплава [2], являются корректными в смысле Адамара и отличаются формально от соответствующих прямых условиями на свободной границе, которые приобретают вид:

$$c_2 = \alpha, \quad c_1 + \delta, \; D_i \frac{\partial c_i}{\partial x} = s'(t)(\kappa_i \rho_i - c_i), \; i = 1, \; 2,$$

где $\rho_i > 0$, $i = 1, \; 2$ – известные функции; α, δ – положительные константы.

Оба типа задач представляют собой задачи со свободной границей для системы двух параболических уравнений. При этом «прямые» задачи представляют собой так называемые переохлажденные задачи Стефана [3]. В них уравнения «перевязаны» алгебраическим условием на свободной границе, тогда как «обратные» близки к задаче затвердевания бинарного сплава: если интерпретировать $c_i(x,t)$ как температуру и концентрацию, то три равенства (1.8) представляют собой условие термодинамического равновесия (линия «ликвидус» на диаграмме фазового состояния) и пару условий Стефана для случая нулевых коэффициентов теплопроводности и диффузии в твердой фазе.

2. Прямая задача в ограниченной области. Заметим, что в случае

$$\lambda_i(t) \equiv c_{i,0} = const,$$

задача 1 (1.1) – (1.6) имеет решение только в случае $\varphi_i(x) = \lambda_i$, и это решение есть

$$s(t) \equiv 1, \; c_i(x,t) \equiv c_{i,0} \; (i = 1, 2), \; y(x),$$

где $y(x)$ – произвольная функция.

Будем считать в дальнейшем, что $\lambda_i(t) \neq const$ для $i = 1$ или $i = 2$ и выполнены условия на характер поведения входных функций, а также неравенства (1.6), (1.7). Кроме того, будем исследовать разрешимость задачи в предположении

$$c_{1,0} + c_{2,0} < \min(\rho_1^*, \rho_2^*). \qquad (2.1)$$

Лемма 2.1. При выполнении соответствующих условий на гладкость входных функций, неравенства $\varphi_1'(0) \cdot \varphi_2'(0) \neq 0$ и необходимых условий согласования начальных и граничных данных задача 1 разрешима в гельдеровских классах функций на достаточно малом интервале времени. При этом $s(t)$ – невозрастающая функция и справедливы неравенства $\rho_i(s(t)) > \lambda_i(t)$.

Доказательство этой леммы базируется на применении теоремы Шаудера о неподвижной точке к оператору, построенному по задаче аналогично [4]. Монотонность свободной границы $x = s(t)$ устанавливается при помощи принципа максимума и условия (1.6). После этого неравенства $\rho_i(s(t)) \geq \lambda_i(t)$ очевидны.

Лемма 2.2. Пусть, помимо (2.1) и условий леммы 2.1, выполнены следующие условия:

$$\varphi_i(x) \leq H_i \cdot (1-x) + \lambda_i(0)x, \; 0 \leq x \leq 1,$$

$$s_T = \inf_{(0,T)} (s(t)) > 0,$$

и существует постоянная $d \in (0, s_T)$, такая, что $c_{i,0} > H_i d + \lambda_i(0)(1-d)$. Тогда $|s'(t)|$ ограничена на $(0,T)$ постоянной, зависящей от d, s_T, $\lambda_i(0)$, ρ_i^*, $c_{i,0}$.

Доказательство проводится при помощи теоремы сравнения и принципа максимума.

Предположение о неограниченности скорости свободной границы ведет к противоречию с условиями (1.2) и (2.1).

Замечание. В случае $H_i = c_{i0}$ для классического решения, в силу принципа максимума, справедлива оценка $c_i(x,t) \leq c_{i0}(1-x) + \lambda_i(0)x$.

Аналогично можно получить оценку для $|s'(t)|$ в явном виде.

Теорема 2.1. При выполнении условий на характер поведения входных функций, сформулированных в п. 1, неравенств (1.6), (1.7), (2.1) и условий лемм 2.1 и 2.2 с $H_i = c_{i0}$ задача (1.1) – (1.6) имеет классическое решение на интервале времени $(0,T)$, где *T*– время окончания процесса (т.е. $s(T) = 0$).

Доказательство. Заметим, что для рассматриваемой задачи (1.1) – (1.5), поскольку она относится к типу задач с переохлаждением, имеют место следующие три возможности:

1) классическое решение существует для всех $t > 0$;

2) существует время окончания процесса T_B такое, что $\lim_{t \to T_B^-} s(t) = 0$;

3) существует $T_C > 0$ такое, что $\lim_{t \to T_C^-} s(t) \geq 0$ и $\inf_{(0,T_C)} s'(t) = -\infty$.

Умножая уравнения (1.1) на *x*, затем интегрируя по *x* на $(0, s(t))$ и по *t* на $(0,t)$, получим

$$\int_0^{s(t)} x c_i(x,t) dx - \int_0^1 x \varphi_i(x) dx =$$

$$= \int_0^t s(t) s'(t) \rho_i(s(t)) dt + \qquad (2.2)$$

$$+ D_i \int_0^t (c_{i0} - \lambda_i(t)) dt.$$

Последний интеграл неограниченно растет при $t \to \infty$, так как $\lambda_i(t)$ – убывающие функции, тогда как остальные слагаемые ограничены, следо-

вательно, случай (А) невозможен. В силу леммы 2.2 случай (С) тоже невозможен. Таким образом, реализуется случай (В). Отметим, что в условиях теоремы

$$\int_0^1 x(\varphi_1(x)+\varphi_2(x))dx < \min\{\rho_1^*,\rho_2^*\}.$$

Теорема 2.2. Если

$$\int_0^1 x(\varphi_1(x)+\varphi_2(x))dx \ge \max\{\rho_1^*,\rho_2^*\}, \qquad (2.3)$$

то имеет место случай (С).

Доказательство. Суммируя равенства (2.2) и принимая во внимание условие (2.3), получим

$$D_1\int_0^t (c_{1,0}-\lambda_1(t))dt + D_2\int_0^t (c_{2,0}-\lambda_2(t))dt =$$

$$= -\int_0^1 x(\varphi_1(x)+\varphi_2(x))\ \ dx -$$

$$-\int_0^t s(t)s'(t)(\rho_1(s(t))+\rho_2(s(t)))\ dt +$$

$$+\int_0^{s(t)} x(c_1(x,t)+c_2(x,t))\ \ dx \le -\max\{\rho_1^*,\rho_2^*\} -$$

$$-\max\{\rho_1^*,\rho_2^*\}(s^2(t)-1) +$$

$$+\int_0^{s(t)} x(c_1(x,t)+c_2(x,t))\ \ dx.$$

Поскольку случай (А) исключен, а в случае (В) $s(T_B)=0$, то последнее неравенство при $t=T_B$ противоречит условию $0\le\lambda_i(t)\le c_{i,0}$, что и завершает доказательство.

Автомодельные решения задачи 1

Предположим, что в уравнениях (1.1)–(1.4)

$$\lambda_i(t)=\lambda_{i,0}=const<c_{i,0},\ \ y(x)=y_0=const.$$

Тогда $\rho_1(x)=\rho_1=const,\ \rho_2(x)=\rho_2=const,$ и вследствие уравнений (1.5)

$$\rho_1=\frac{(\rho_1^* y_0+\rho_2^*(1-y_0))\gamma y_0}{\gamma y_0+1-y_0},$$

$$\rho_2=\frac{(\rho_1^* y_0+\rho_2^*(1-y_0))(1-y_0)}{\gamma y_0+1-y_0}.$$

При подходящих начальных распределениях концентраций задача 1 имеет точное решение вида

$$s(t)=\sqrt{1-t/T}=\beta\sqrt{1-t/T},\ y(x)=y_0;$$

$$c_i(x,t)=A_i\int_{x/\sqrt{T-t}}^{\beta}\exp(x/4D_i)dx+\lambda_{i,0}$$

на интервале времени $(0,T)$. Константы $\beta=1/\sqrt{T},\ y_0,\ A_i,\ \rho_i,\ i=1,2$ определяются из следующей системы уравнений, полученной из условий на свободной границе (1.2), (1.3):

$$A_i\int_0^{\beta}\exp(\frac{x^2}{4D_i})dx=c_{i,0}-\lambda_{i,0},\ \ i=1,\ 2; \qquad (2.4)$$

$$A_i=(\rho_i-\lambda_{i,0})\frac{\beta}{2D_i}\exp(\frac{-\beta^2}{4D_i}),\ \ i=1,\ 2; \qquad (2.5)$$

$$\rho_1+\rho_2=\rho_1^*/(\rho_1+\gamma\rho_2)+\rho_2^*/(\rho_1+\gamma\rho_2). \qquad (2.6)$$

Покажем, что система (2.4)–(2.6) имеет положительное решение

$$\beta=1/\sqrt{T},\ y_0,\ \rho_i,\ A_i,\ i=1,2.$$

Для этого выразим ρ_i из первой пары уравнений, в которых в качестве A_i взяты правые части второй пары уравнений:

$$\rho_i=\frac{c_{i,0}-\lambda_i}{\frac{\beta}{2D_i}\exp(\frac{-\beta^2}{4D_i})\int_0^{\beta}\exp(\frac{x^2}{4D_i})dx}+\lambda_i. \qquad (2.7)$$

Очевидно, $\rho_i>\lambda_i$ для любых положительных β. Подставим выражения ρ_i из (2.7) в уравнение (2.6) и обозначим левую и правую части полученного выражения через $F_l(\beta)$ и $F_r(\beta)$ соответственно. Нетрудно проверить, что

$$\lim_{\beta\to 0+}F_l(\beta)=\infty,\ \ 0<\lim_{\beta\to 0+}F_r(\beta)<\infty,$$

$$\lim_{\beta\to\infty}F_l(\beta)=c_{1,0}+c_{2,0},$$

$$\lim_{\beta\to\infty}F_r(\beta)=\frac{\rho_1^*c_{1,0}+\rho_2^*c_{2,0}}{c_{1,0}+\gamma c_{2,0}}.$$

Очевидно, $F_l(0)>F_r(0)$.

Таким образом, для пересечения непрерывных кривых $F_l(\beta)$ и $F_r(\beta)$ достаточно потребовать выполнения неравенства $F_l(\infty)-F_r(\infty)<0$, которое в терминах входных данных $c_{i,0},\ \lambda_{i,0}$ приобретает вид

$$c_{1,0}+c_{2,0}<\rho_1^*c_{1,0}/(c_{1,0}+\gamma c_{2,0})+\rho_2^*c_{2,0}\gamma/(c_{1,0}+\gamma c_{2,0}).$$

Сформулируем полученный результат.

Теорема 2.3. При выполнении неравенств $0<\lambda_{i,0}=const<c_{i,0}$,

$$c_{1,0}+c_{2,0}<\rho_1^*c_{1,0}/(c_{1,0}+\gamma c_{2,0})+\rho_2^*c_{2,0}\gamma/(c_{1,0}+\gamma c_{2,0})$$

для подходящих начальных данных задача 1 имеет решение вида

$$s(t)=\beta\sqrt{T-t},\ \ y(x)=y_0;$$

$$c_i(x,t)=(\rho_i-\lambda_{i,0})\frac{\beta}{2D_i}e^{\frac{-\beta^2}{4D_i}}\int_{\frac{x}{\sqrt{T-t}}}^{\beta}e^{\frac{-x^2}{4D_i}}dx+\lambda_{i,0}$$

с положительным β. При этом $T=1/\beta^2$ есть время окончания процесса. Таким образом, реализуется случай (В).

3. Прямая задача на полубесконечном интервале. Рассмотрим теперь задачу (1.1)' (1.2), (1.3)', (1.4)', (1.5)'. В этом случае растущая пленка занимает область $(0,s(t))$, а жидкая фаза – полубесконечный интервал $(s(t),\infty)$. Эта однофазная задача для системы уравнений также относится к типу за-

дач с «неправильным» знаком в условии Стефана, т.е. задач с переохлаждением, если пользоваться терминологией моделей плавления-затвердевания. В случае решения задачи на полубесконечном интервале имеются две принципиальные возможности поведения классического решения в зависимости от входных данных:

– (A)' классическое решение существует для всех $t>0$;

– (B)' классическое решение существует лишь на конечном интервале времени $(0,T)$.

Случай (A)' соответствует бесконечному по времени процессу роста, при этом скорость роста стремится к нулю с течением времени; случай (C)' означает, что рост прекращается за конечное время вследствие градиентной катастрофы, т.е. $\exists T>0$ такое, что $\lim\limits_{t\to T-} s(t)=s(T)<\infty$ и $\inf\limits_{(0,T_C)} s'(t)=\infty$.

Теорема 3.1. При выполнении условия

$$c_{1,\infty}+c_{2,\infty}<\min(\rho_1^*,\rho_2^*), \tag{3.1}$$

аналогичного условию (2.1), в задаче (1.1)' (1.2), (1.3)', (1.4)', (1.5)' классическое решение существует на любом интервале времени, т.е. реализуется (A)'.

Доказательство. Локальная по времени разрешимость задачи и монотонность свободной границы (в этом случае $s(t)$ возрастает) доказываются тем же способом, что и в лемме 2.1 со стандартными изменениями, связанными с неограниченностью области. Ограниченность $s'(t)$ доказывается методом, использованным в доказательстве леммы 2.2 с соответствующими изменениями неограниченности области. При этом выполнение условия (3.1) существенно для выбранного способа доказательства.

Теорема 3.2. Если выполнено условие

$$c_{1,\infty}+c_{2,\infty}\geq\max(\rho_1^*,\rho_2^*), \tag{3.2}$$

и $c_{i,\infty}-\phi_i(x)\in L_1(0,\infty)$, то классическое решение задачи 2 может существовать лишь конечное время, т.е. реализуется случай (C)'.

Доказательство. Проинтегрируем уравнения

$$(c_{i,\infty}-c(x,t))_t=D_i(c_{i,\infty}-c(x,t))_{xx}$$

по x от $x=s(t)$ до $x=\infty$, затем по t – от 0 до t. Принимая во внимание $(1.2),(1.3)'-(1.4)'$ и суммируя полученные равенства для $i=1,2$, приходим к тождеству

$$\int\limits_{s(t)}^{\infty}(c_{1,\infty}+c_{2,\infty}-c_1(x,t)-c_2(x,t))dx-$$

$$-\int\limits_0^{\infty}(c_{1,\infty}+c_{2,\infty}-\varphi_1(x,t)-\varphi_2(x,t))dx= \tag{3.3}$$

$$=\int\limits_0^t s'(t)(\rho_1+\rho_2-c_{1,\infty}-c_{2,\infty})dt.$$

Первый интеграл в левой части (3.3) неотрицателен для всех $t>0$, второй конечен, следовательно, выполнение условия (3.1) влечет ограниченность $s(t)$ для всех $t>0$.

Далее умножим обе части уравнений $(3.1)'$ на $\exp(-D_ip^2t-px),\ p>0$ и проинтегрируем по x от $x=s(t)$ до $x=\infty$, затем по t – от 0 до t. Принимая во внимание $(1.2),(1.3)'-(1.4)'$, и устремляя t к бесконечности, приходим к равенству

$$\int\limits_0^{\infty}(s'(t)\rho_i+D_ip\lambda_i)\exp(-D_ip^2t-ps(t))dt=$$

$$=\int\limits_0^{\infty}\varphi_i(x)\exp(-px)dx.$$

Предел левой части при p, стремящемся к нулю, в предположении ограниченности $s(t)$ для всех $t>0$ конечен, тогда как правая часть последнего равенства неограниченно возрастает при $p\to 0$. Полученное противоречие и завершает доказательство теоремы.

Автомодельные решения задачи 2. В предположениях

$$\lambda_i(t)=\lambda_{i,0}=const<c_{i,0},\quad y(x)=y_0=const$$

задача 2 имеет автомодельное решение вида

$$s(t)=\beta\sqrt{t},\quad y(x)=y_0;$$

$$c_i(x,t)=A_i\int\limits_{x/\sqrt{t}}^{\infty}\exp(x^2/4D_i)dx+c_{i,\infty},\quad i=1,\ 2,$$

где постоянные $\beta,\ y_0,\ A_i,\ i=1,2$ определяются из системы уравнений

$$A_i\int\limits_{\beta}^{\infty}\exp\left(\frac{-x^2}{4D_i}\right)dx+c_{i,\infty}=\lambda_{i,0},\quad i=1,\ 2; \tag{3.4}$$

$$-A_iD_i\exp\left(\frac{-\beta^2}{4D_i}\right)=(\rho_i-\lambda_{i,0})\frac{\beta}{2},\quad i=1,\ 2; \tag{3.5}$$

$$\rho_1+\rho_2=\rho_1^*y_0+\rho_2^*/(1-y_0),$$
$$y_0=\rho_1/(\rho_1+\gamma\rho_2). \tag{3.6}$$

Существование положительного β, положительного и не превышающего единицы y_0, а также отрицательных констант A_i при выполнении условия на входные данные, аналогичного условию теоремы 2.3, доказывается тем же способом, что и в вышеназванной теореме.

Таким образом, имеет место следующий аналог теоремы 2.3.

Теорема 3.3. При выполнении неравенств

$$0<\lambda_{i,0}<c_{i,\infty},$$

$$c_{1,\infty}+c_{2,\infty}<\frac{\rho_1^*c_{1,\infty}}{(c_{1,\infty}+\gamma c_{2,\infty})}+\frac{\rho_2^*c_{2,\infty}\gamma}{(c_{1,\infty}+\gamma c_{2,\infty})} \tag{3.7}$$

и при начальных условиях $\varphi_i(x)\equiv c_{i,\infty}$ прямая задача жидкостной эпитаксии на полубесконечном интервале имеет решение вида

$$s(t)=\beta\sqrt{t},\ y(x)=y_0;$$

$$c_i(x,t)=A_i\int\limits_{x/\sqrt{t}}^{\infty}\exp(x^2/4D_i)dx+c_{i,\infty},\ i=1,\ 2.$$

Более того, для исследования асимптотического поведения решения задачи со свободной границей на полубесконечном интервале нетрудно убедиться в справедливости следующей теоремы, характеризующей асимптотическое поведение границы растущей пленки в задаче 2.

Теорема 3.4. Пусть $\lambda_i(t)\to\lambda_{i,0}$ при $t\to\infty$, где $0<\lambda_{i,0}<c_{i,\infty}$. При выполнении условия (3.7) для решения задачи 2 имеет место асимптотическая формула

$$s(t)\sim\beta\sqrt{t},\,t\to\infty.$$

Замечание 3.1. Данные теоремы 3.3, очевидно, не удовлетворяют условиям согласования. Вместо автомодельных переменных $s(t)=\beta\sqrt{t},\,\xi=x/\sqrt{t}$ можно рассмотреть

$$s(t)=\beta\sqrt{t+\alpha},\,\xi=x/\sqrt{t+\alpha},\,\alpha>0$$

и получить серию точных решений, соответствующих начальным распределениям специального вида.

Замечание 3.2. Если вместо второго неравенства (3.7) значения концентраций на бесконечности подчинены равенству

$$c_{1,\infty}+c_{2,\infty}=\frac{\rho_1^* c_{1,\infty}}{(c_{1,\infty}+\gamma c_{2,\infty})}+\frac{\rho_2^* c_{2,\infty}\gamma}{(c_{1,\infty}+\gamma c_{2,\infty})},$$

то для подходящих начальных распределений концентрации задача 2 имеет решение вида бегущей волны:

$$s(t)=Vt,\ y(x)=\frac{c_{1,\infty}}{c_{1,\infty}+\gamma c_{2,\infty}};$$

$$c_i(x,t)=(\lambda_{i,0}-c_{i,\infty})\exp\left(\frac{(Vt-x)V}{D_i}\right)+c_{i,\infty}.$$

4. Обратная задача. В п. 1. была сформулирована задача определения рабочей температуры процесса по заданному составу пленки в конце процесса в ограниченной области и названа «обратной» задачей 1. Здесь мы сосредоточим внимание на «обратной» задаче 2, т.е. на задаче управления составом пленки, занимающей в момент времени t область $(0,s(t))$, (соответственно жидкая фаза – полубесконечный интервал $(s(t),\infty)$) с помощью управляющего параметра – температуры процесса. Отметим, что эта задача является корректной и по своей математической природе близкой к задаче затвердевания бинарной смеси. «Обратной» она названа только по отношению к предыдущей задаче нахождения состава растущей пленки по заданной рабочей температуре процесса.

Итак, задача состоит в нахождении функций $\theta(t),\,s(t),\,c_i(x,t),\,i=1,2$, удовлетворяющих следующим уравнениям и условиям:

$$c_{it}=c_{ixx},\,i=1,2,\,x>s(t); \qquad (4.1)$$

$$D_i c_{ix}=s'(t)(\rho\kappa_i-c_i),\quad c_i=\lambda_i(\theta(t)),\ x=s(t); \qquad (4.2)$$

$$c_i(x,0)=\varphi_i(x),\,s(0)=0,\,t=0; \qquad (4.3)$$

$$\lim_{x\to\infty}c(x,t)=c_{i,\infty}; \qquad (4.4)$$

$$\rho_1+\rho_2=\rho_1^*\overline{y}+\rho_2^*/(1-\overline{y}),\quad \overline{y}=\rho_1/(\rho_1+\gamma\rho_2). \qquad (4.5)$$

Здесь $\overline{y}(x)$, $x\in(0,s(T))$, где T – время окончания процесса является заданной функцией, принимающей значения из интервала $(0,1)$. Эта функция характеризует состав пленки в точке x при $x<s(T)$. Отметим, что в предыдущих задачах фигурировала функция $y(t)$, связанная с нынешней простым соотношением $y(t)=\overline{y}(s(t))$. В этой задаче будем считать, что заданные функции $\lambda_i,\,i=1,2$ подчинены условию $\lambda_2=a\lambda_1+b$, где a, b – положительные константы.

Выразим ρ_1 и ρ_2 через $\overline{y}$ из уравнений (4.5):

$$\rho_1=\frac{(\rho_1^*\overline{y}+\rho_2^*(1-\overline{y}))\gamma\overline{y}}{1-\overline{y}+\gamma\overline{y}},\quad \rho_2=\frac{(\rho_1^*\overline{y}+\rho_2^*(1-\overline{y}))(1-\overline{y})}{1-\overline{y}+\gamma\overline{y}}. \qquad (4.6)$$

Теорему о разрешимость задачи (4.1)–(4.5) и примеры ее численного решения можно найти в работе [5].

Автомодельные решения «обратной» задачи. Автомодельная постановка задачи определения рабочей температуры процесса по заданному (постоянному в нашем случае) составу пленки соответствует заданию $y(x)=y=const$, или, в силу формул (4.6), постоянных плотностей ρ_1 и ρ_2 и постоянных начальных концентраций. Таким образом, автомодельная задача состоит в нахождении положительных констант β и λ_1 по заданным положительным константам $c_i^0=\varphi_i(x),\,\rho_i=\rho_i(x),\ i=1,2$. При этом

$$s(t)=\beta\sqrt{t},\ c_i(x,t)=c_i(x/\sqrt{t})$$

должны удовлетворять уравнениям (4.1) – (4.3), где $\lambda_2=a\lambda_1+b$.

В силу (4.1) и (4.3)

$$c_i=A_i\int\limits_{x/\sqrt{t}}^{\infty}\exp(-\xi^2/4D_i)d\xi+c_i^0,\,i=1,2. \qquad (4.7)$$

Из условий (4.2) получим систему для определения постоянных $\beta,\,\lambda_1,\,A_1,\,A_2$:

$$A_i\int\limits_{\beta}^{\infty}\exp(-\xi^2/4D_i)d\xi+c_i^0,\,i=1,2. \qquad (4.8)$$

$$-A_i D_i \exp(\beta^2 / 4D_i) = \\ = \beta / 2 \cdot (\kappa_i \rho_i - \lambda_i), i = 1, 2. \qquad (4.9)$$

Теорема 4.2. Пусть $b = 0$ и a лежит между числами c_2^0 / c_1^0 и $(c_2^0 - \kappa_2 \rho_2) / (c_1^0 - \kappa_1 \rho_1)$. Тогда существует автомодельное решение «обратной» задачи $\beta > 0, \lambda_1 > 0, \lambda_2 = a\lambda_1$. Если при этом $c_i^0 < \kappa_i \rho_i$, то $\lambda_i < c_i^0$ и градиенты концентраций в жидкой фазе положительны.

Действительно, разрешим систему (4.8)–(4.9) относительно λ_1, λ_2:

$$\lambda_1 = \frac{c_1^0 - \dfrac{\beta}{2D_1} \kappa_1 \rho_1 \exp\left(\dfrac{\beta^2}{4D_1}\right) \int\limits_\beta^\infty \exp\left(\dfrac{-\xi^2}{4D_1}\right) d\xi}{1 - \dfrac{\beta}{2D_1} \exp\left(\dfrac{\beta^2}{4D_1}\right) \int\limits_\beta^\infty \exp\left(\dfrac{-\xi^2}{4D_1}\right) d\xi}; \quad (4.10)$$

$$\lambda_2 = \frac{c_2^0 - \dfrac{\beta}{2D_2} \kappa_2 \rho_2 \exp\left(\dfrac{\beta^2}{4D_2}\right) \int\limits_\beta^\infty \exp\left(\dfrac{-\xi^2}{4D_2}\right) d\xi}{1 - \dfrac{\beta}{2D_2} \exp\left(\dfrac{\beta^2}{4D_2}\right) \int\limits_\beta^\infty \exp\left(\dfrac{-\xi^2}{4D_2}\right) d\xi}. \quad (4.11)$$

Обозначим правую часть (4.10) через $g_1(\beta)$, а правую часть (4.11) – через $g_2(\beta)$. В силу равенства $\lambda_2 = a\lambda_1$ имеем

$$g_2(\beta) / g_1(\beta) = a. \qquad (4.12)$$

При этом нетрудно убедиться в том, что

$$g_2(0) / g_1(0) = c_2^0 / c_1^0;$$

$$g_2(\infty) / g_1(\infty) = (c_2^0 - \kappa_2 \rho_2) / (c_1^0 - \kappa_1 \rho_1).$$

Следовательно, в силу принятых условий уравнение (4.12) имеет решение $\beta > 0$. Константы $\lambda_i, i = 1, 2$ находятся из уравнений (4.10), (4.11). Последнее же утверждение теоремы 4.2 следует из анализа формул (4.10), (4.11).

Библиографический список

1. Бадратинова, Л.Г. О задачах со свободной границей, моделирующих процесс жидкофазной эпитаксии из тройных растворов / Л.Г. Бадратинова, В.В. Кузнецов, А.Г. Петрова, В.В. Пухначев // Динамика сплошной среды. – Новосибирск, 1986. – Вып. 78.
2. Петрова, А.Г. Обратная задача затвердевания бинарного сплава / А.Г. Петрова // Известия АлтГУ. – Барнаул, 2009. – №1.
3. Petrova, A.G. The one-phase supercooled Stefan problem with temperature boundary conditions / A.G. Petrova, D.A. Tarzia, C.V. Turner // Advances in Math. Sciences and Applications. – 1994. – V. 4, №1.
4. Петрова, А.Г. Локальная разрешимость термодиффузионной задачи Стефана / А.Г. Петрова // Динамика сплошной среды. – Новосибирск, 1984. – Вып. 64.
5. Зальцман, Б.Б. Задача управления составом материала, получаемого методом жидкостной эпитаксии в условиях невесомости / Б.Б. Зальцман, А.Г. Петрова // Космическая наука и техника. – Киев, 1990. – Вып. 4.