Диффузия в пленке

- Диффузия через мембрану

$$\boxed{c(0,t) = c_1 \qquad c(l,t) = c_2 = 0}$$

$$\boxed{\begin{aligned} c(x,t) = c_1\left(1-\frac{x}{l}\right) - 2\sum_{m=1}^{\infty}\exp\left[-\frac{m^2\pi^2 Dt}{l^2}\right]\sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)\times \\ \times\left\{\frac{c_1}{\pi m} - \frac{1}{l}\int_0^l c(\xi,0)\sin\left(\frac{m\pi\xi}{l}\right)d\xi\right\} \end{aligned}}$$

Диффузия в пленке

- Диффузия через мембрану

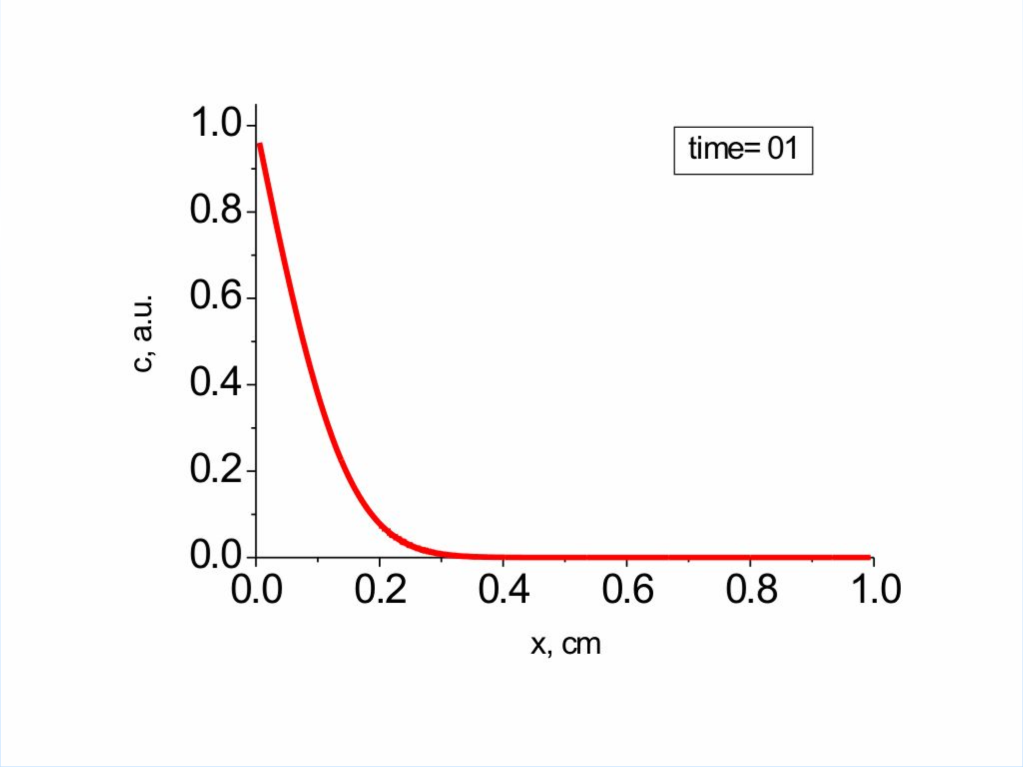
$$\boxed{c(0,t) = c_1 \qquad c(l,t) = c_2 = 0 \qquad c(x,0) = 0}$$

$$\boxed{c(x,t) = c_1 \left\{ \left(1 - \frac{x}{l}\right) - \frac{2}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m} \exp\left[-\frac{m^2 \pi^2 Dt}{l^2} \right] \sin\left(\frac{m\pi x}{l} \right) \right\}}$$

$$\boxed{j = -D \frac{\partial c}{\partial x} = c_1 \frac{D}{l} \left\{ 1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{m^2 \pi^2 Dt}{l^2} \right] \cos\left(\frac{m\pi x}{l} \right) \right\}}$$

Диффузия в пленке

- Диффузия через мембрану



Диффузия в пленке

- Диффузия через мембрану

$$j = -D\left.\frac{\partial c}{\partial x}\right|_{x=l} = c_1 \frac{D}{l}\left\{1 + 2\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^m \exp\left[-\frac{m^2\pi^2 Dt}{l^2}\right]\right\}$$

$$M_{pass} = \int_0^t j(x,\tau)\big|_{x=l}\, d\tau = \int_0^t -D\left.\frac{\partial c(x,\tau)}{\partial x}\right|_{x=l} d\tau =$$

$$= c_1 \frac{D}{l}\left\{t - \frac{l^2}{6D} - \frac{2l^2}{\pi^2 D}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(-1)^m}{m^2}\exp\left[-\frac{m^2\pi^2 Dt}{l^2}\right]\right\}$$

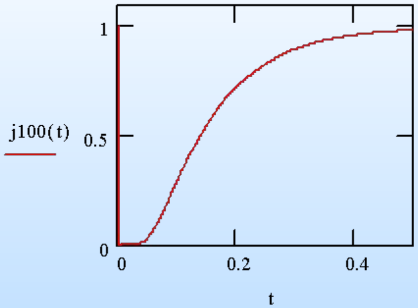
Диффузия в пленке

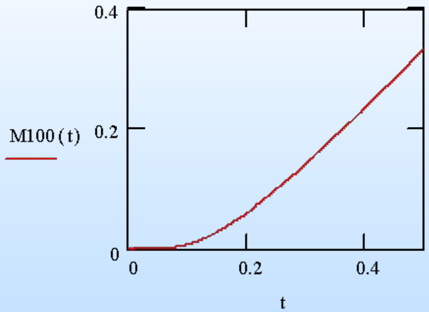
- Диффузия через мембрану

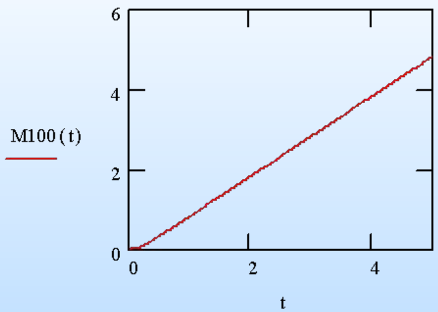
$$D := 1 \qquad l := 1$$

$$j100(t) := \frac{D}{l}\cdot\left[1 + 2\cdot\sum_{m=1}^{100}(-1)^m\cdot\exp\left(\frac{-m^2\cdot\pi^2\cdot D\cdot t}{l^2}\right)\right]$$

$$M100(t) := \frac{D}{l}\cdot\left[t - \frac{l^2}{6\cdot D} - \frac{2\cdot l^2}{\pi^2\cdot D}\cdot\sum_{m=1}^{100}\frac{(-1)^m}{m^2}\cdot\exp\left(\frac{-m^2\cdot\pi^2\cdot D\cdot t}{l^2}\right)\right]$$

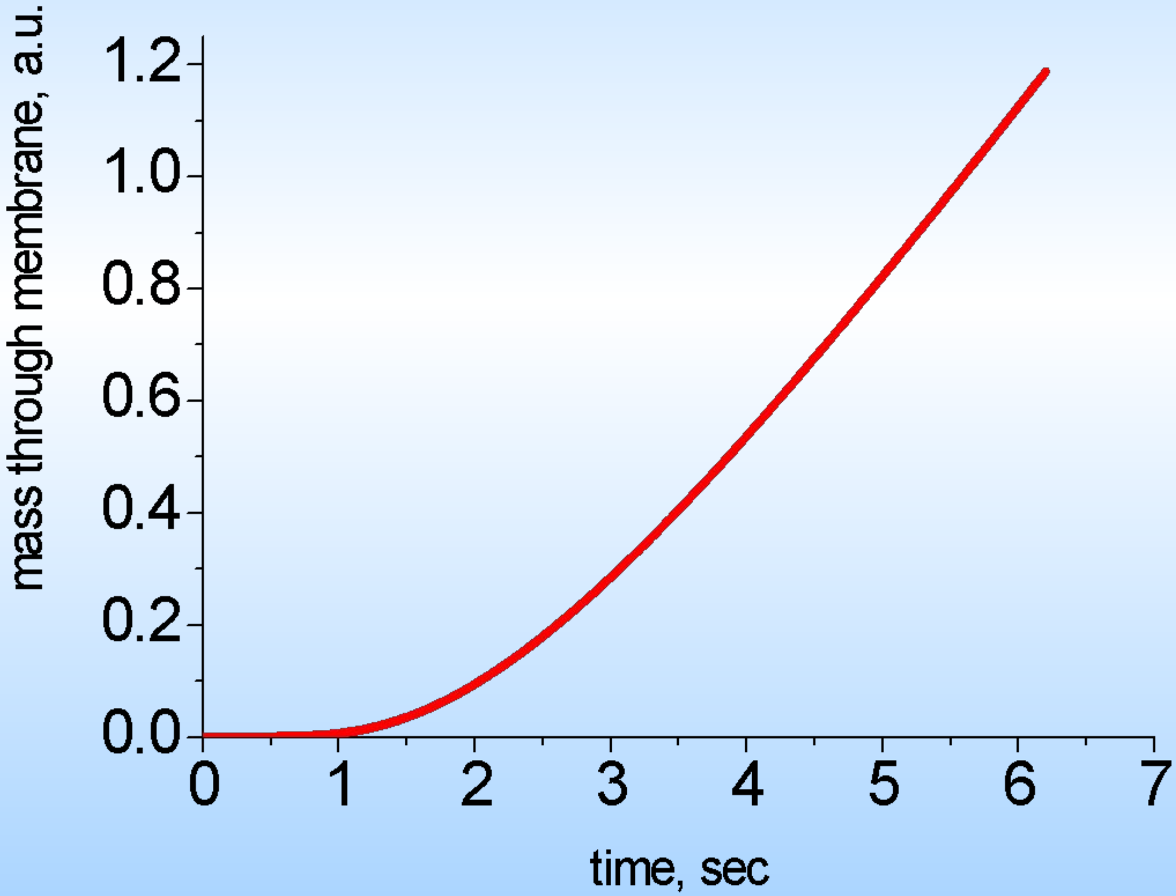






Диффузия в пленке

- Диффузия через мембрану



Диффузия в пленке

- постоянные концентрации на границах

$$\boxed{\begin{aligned} c(0,t) &= c_1 \\ c(l,t) &= c_2 \end{aligned}} \xrightarrow{\boxed{\tilde{c}(x,t) = c(x,t) + (c_1 - c_2)\frac{x}{l} - c_1}} \boxed{\begin{aligned} \tilde{c}(0,t) &= 0 \\ \tilde{c}(l,t) &= 0 \end{aligned}}$$

$$\tilde{c}(\xi,0) = c(\xi,0) + (c_1 - c_2)\frac{\xi}{l} - c_1$$

$$\tilde{c}(x,t) = \frac{2}{l}\sum_{m=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{m^2\pi^2 Dt}{l^2}\right] \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \int_0^l \tilde{c}(\xi,0) \sin\left(\frac{m\pi\xi}{l}\right) d\xi$$

$$\boxed{\begin{aligned} c(x,t) = c_1 + (c_2 - c_1)\frac{x}{l} + \frac{2}{l}\sum_{m=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{m^2\pi^2 Dt}{l^2}\right] \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \times \\ \times \left\{ \frac{l}{\pi} \frac{(-1)^m c_2 - c_1}{m} + \int_0^l c(\xi,0) \sin\left(\frac{m\pi\xi}{l}\right) d\xi \right\} \end{aligned}}$$

Диффузия в пленке

- Теорема Дюамеля

$$c(0,t) = f_1(t) \qquad c(l,t) = f_2(t) \qquad c(x,0) = 0$$

$$F_1(x,t-\tau) = 1 - \frac{x}{l} - \frac{2}{\pi}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m}\exp\left[-\frac{m^2\pi^2 D(t-\tau)}{l^2}\right]\sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)$$

$$F_2(x,t-\tau) = \frac{x}{l} + \frac{2}{\pi}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(-1)^m}{m}\exp\left[-\frac{m^2\pi^2 D(t-\tau)}{l^2}\right]\sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)$$

$$c(x,t) = \int_0^t\left[f_1(\tau)\frac{\partial}{\partial t}F_1(x,t-\tau) + f_2(\tau)\frac{\partial}{\partial t}F_2(x,t-\tau)\right]d\tau =$$

Диффузия в пленке

- Теорема Дюамеля

$$c(x,t)=\frac{2\pi D}{l^2}\sum_{m=1}^{\infty} m\exp\left[-\frac{m^2\pi^2 Dt}{l^2}\right]\sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)\times$$
$$\times\int_0^t\left[f_1(\tau)-(-1)^m f_2(\tau)\right]\exp\left[\frac{m^2\pi^2 D\tau}{l^2}\right]d\tau$$

$$M(x,t)=\frac{4D}{l}\sum_{k=0}^{\infty}\exp\left[-\frac{(2k+1)^2\pi^2 Dt}{l^2}\right]\times\int_0^t\left[f_1(\tau)+f_2(\tau)\right]\exp\left[\frac{(2k+1)^2\pi^2 D\tau}{l^2}\right]d\tau$$

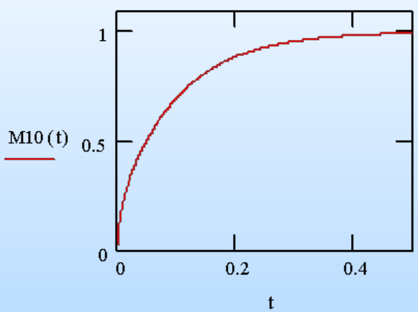
Диффузия в пленке

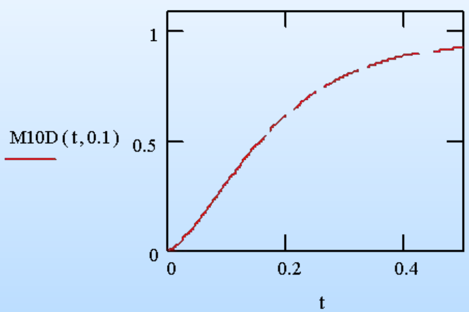
- Теорема Дюамеля

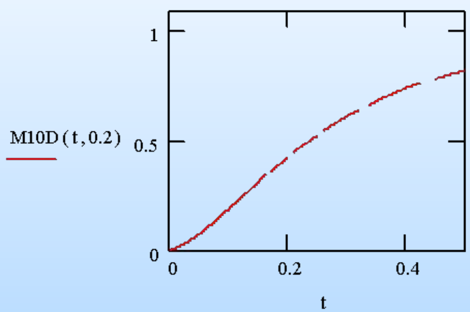
$$D := 1 \quad l := 1 \qquad f1(\tau,\alpha) := 1 - \exp\left(\frac{-\tau}{\alpha}\right) \quad f2(\tau,\alpha) := 1 - \exp\left(\frac{-\tau}{\alpha}\right)$$

$$M10(t) := 1 - \frac{8}{\pi^2} \cdot \sum_{k=0}^{10} \frac{1}{(2 \cdot k + 1)^2} \cdot \exp\left[\frac{-(2 \cdot k + 1)^2 \cdot \pi^2 \cdot D \cdot t}{l^2}\right]$$

$$M10D(t,\alpha) := \frac{4 \cdot D}{l} \cdot \sum_{k=0}^{10} \exp\left[\frac{-(2 \cdot k + 1)^2 \cdot \pi^2 \cdot D \cdot t}{l^2}\right] \cdot \int_0^t (f1(\tau,\alpha) + f2(\tau,\alpha)) \cdot \exp\left[\frac{(2 \cdot k + 1)^2 \cdot \pi^2 \cdot D \cdot \tau}{l^2}\right] d\tau$$







Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия:

$$\boxed{\begin{aligned} -D\frac{\partial c}{\partial x} + kc &= q_1 \qquad x = 0 \\ D\frac{\partial c}{\partial x} + kc &= q_2 \qquad x = l \end{aligned}}$$

$$\boxed{c(x,t) = u(x) + w(x,t)}$$

$$\boxed{u(x) = \frac{1}{lk + 2D}\left[(q_2 - q_1)x + q_1\left(\frac{D}{k} + l\right) + q_2\frac{D}{k}\right]}$$

$$w(x,t) = 2\sum_{m=0}^{\infty} \exp(-\lambda_m^2 Dt)\frac{\lambda_m D^2 \cos\lambda_m x + kD\sin\lambda_m x}{(\lambda_m^2 D^2 + k^2)l + 2kD} \times$$

$$\times\int_0^l \big(c(x,0) - u(x)\big)\Big(\lambda_m \cos\lambda_m x + \frac{k}{D}\sin\lambda_m x\Big)dx$$

$$\tan\lambda_m l = \frac{2kD\lambda_m}{\lambda_m^2 D^2 - k^2}$$

Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, численные методы:

$$-D\frac{c_1^j - c_{-1}^j}{2h} + kc_0^j = kc_{eq}$$

$$\frac{c_0^{j+1} - c_0^j}{\tau} = D\frac{(c_1^j - 2c_0^j + c_{-1}^j)}{h^2}$$

$$D\frac{c_{N+1}^j - c_{N-1}^j}{2h} + kc_N^j = kc_{eq}$$

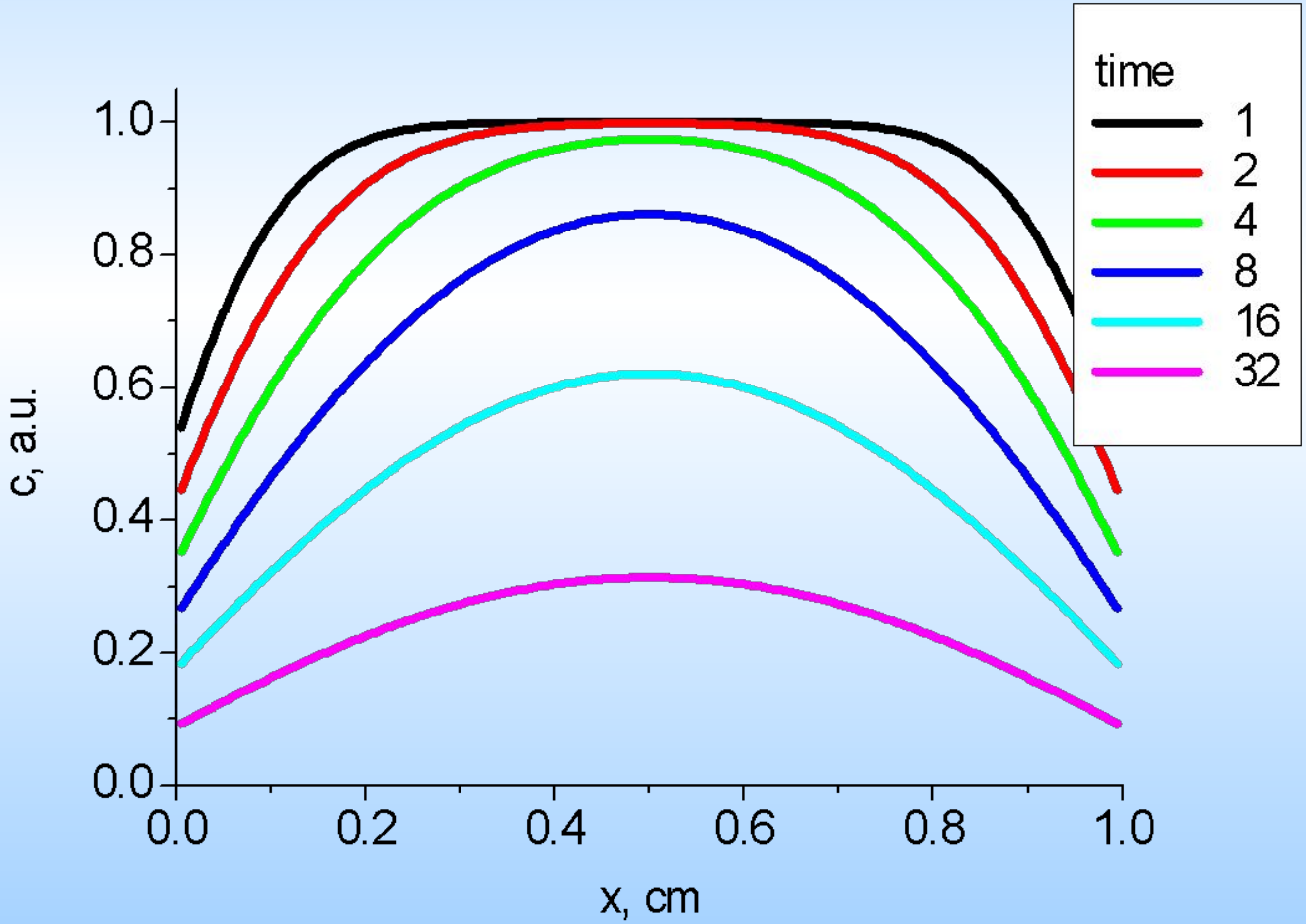
$$\frac{c_N^{j+1} - c_N^j}{\tau} = D\frac{(c_{N+1}^j - 2c_N^j + c_{N-1}^j)}{h^2}$$

$$c_0^{j+1} = c_0^j + \frac{2D\tau}{h^2}\left(c_1^j - c_0^j\right) + \frac{2\tau k}{h}(c_{eq} - c_0^j)$$

$$c_N^{j+1} = c_N^j + \frac{2D\tau}{h^2}\left(c_{N-1}^j - c_N^j\right) + \frac{2\tau k}{h}(c_{eq} - c_N^j)$$

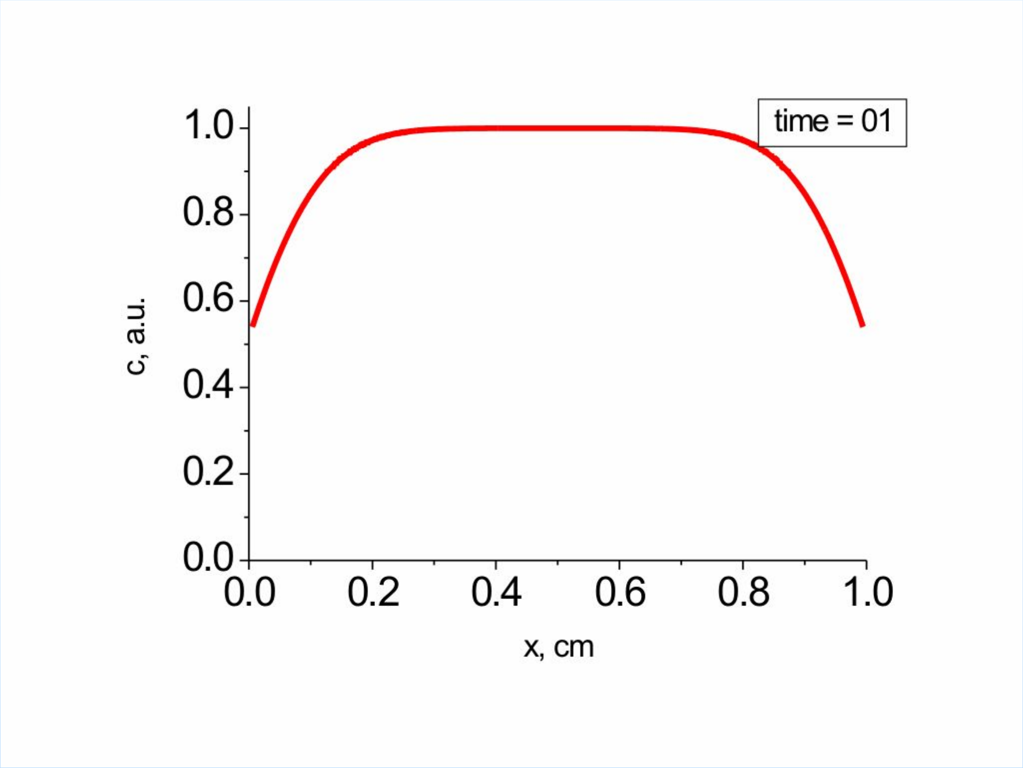
Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, ЧМ, десорбция



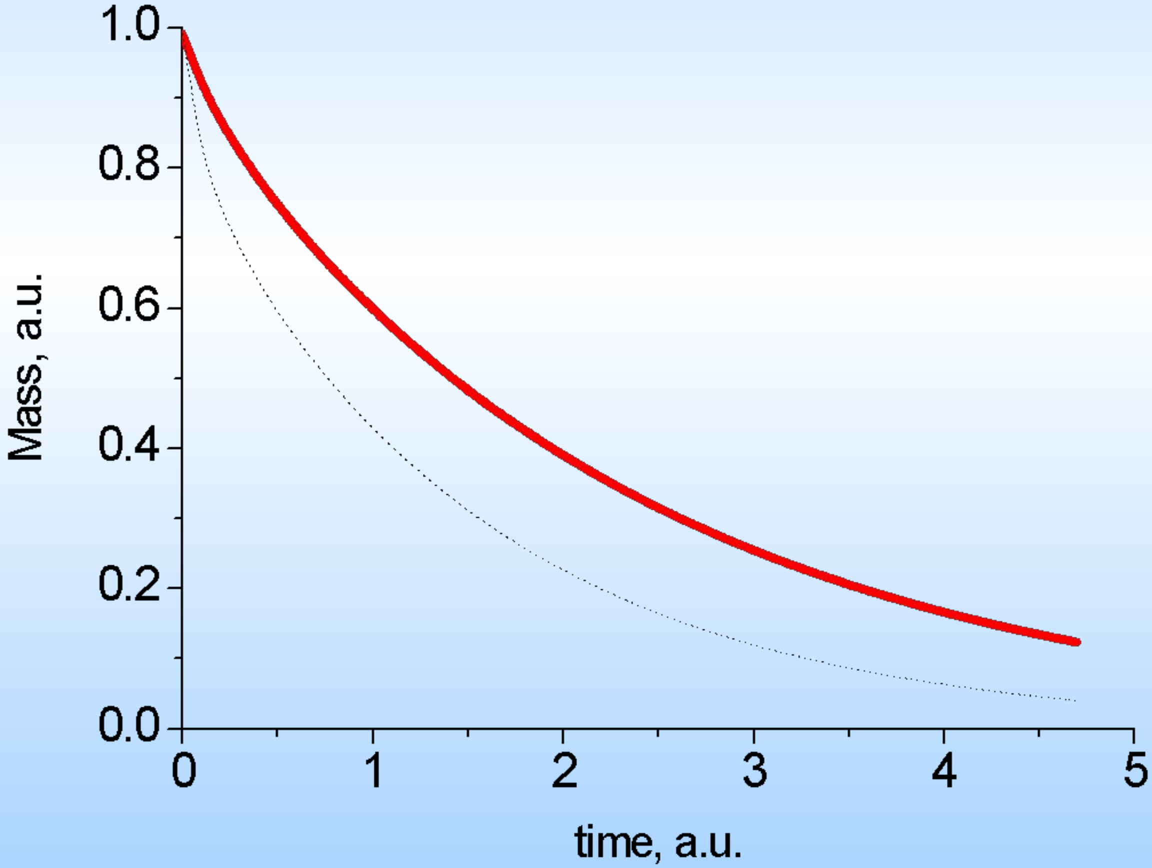
Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, ЧМ, десорбция



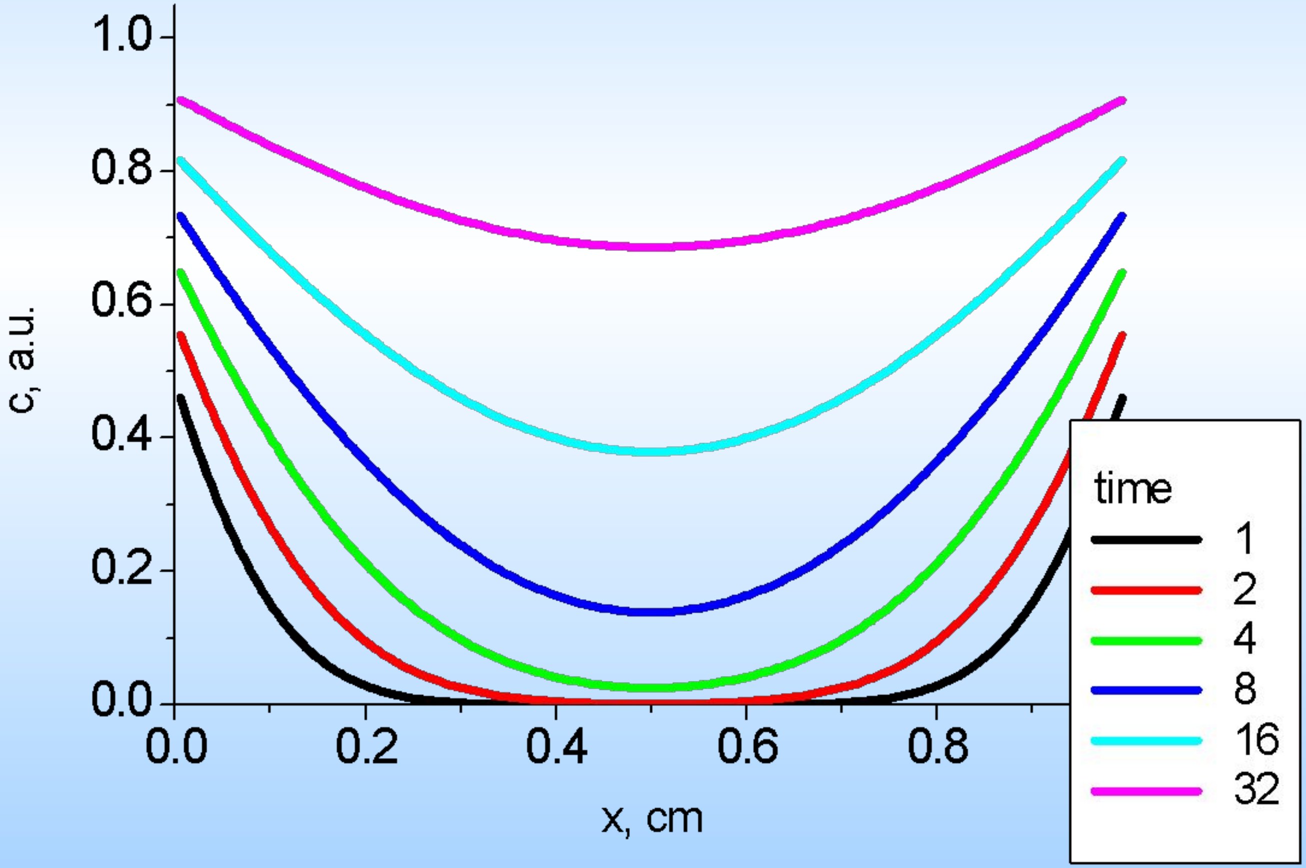
Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, ЧМ, десорбция



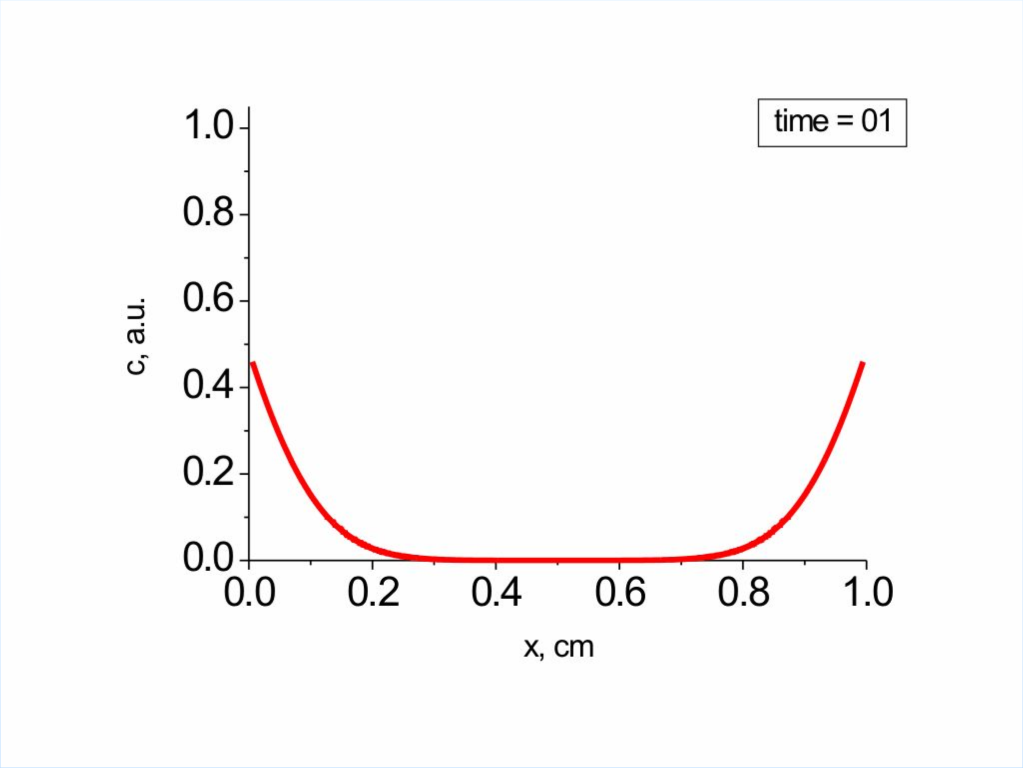
Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, ЧМ, сорбция



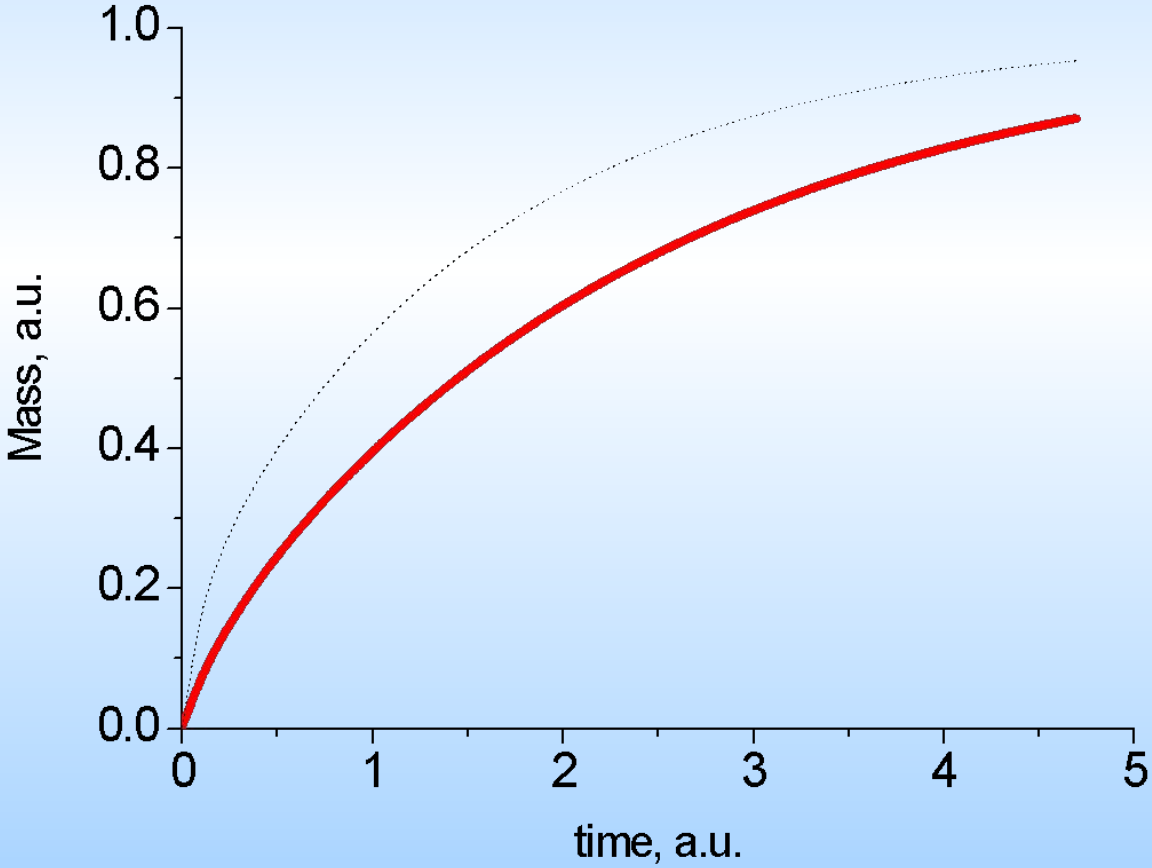
Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, ЧМ, сорбция



Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, ЧМ, сорбция



Диффузия в пленке

- Ограничение потока

$$j(x,t) = -D\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{-4c_0 D}{l}\sum_{k=0}^{\infty}\exp\left[-\frac{(2k+1)^2\pi^2 Dt}{l^2}\right]\cos\left[\frac{(2k+1)\pi x}{l}\right]$$

$$j(x,t) = -D\frac{\partial c}{\partial x} = c_0\sqrt{\frac{D}{\pi t}}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\left[-\exp\left(-\frac{\left((2k+1)l-x\right)^2}{4Dt}\right)+\exp\left(-\frac{\left((2k+1)l+x\right)^2}{4Dt}\right)\right]$$

$$j(x,t)\big|_{x=l} = -D\frac{\partial c}{\partial x} = c_0\sqrt{\frac{D}{\pi t}}\left\{1+2\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\exp\left(-\frac{k^2l^2}{Dt}\right)\right\}$$

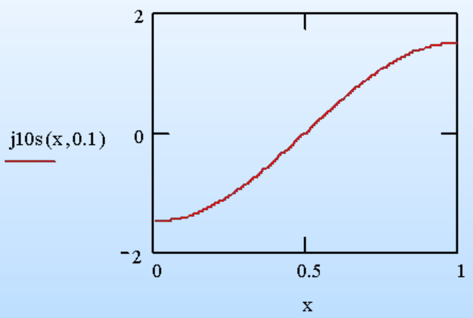
Диффузия в пленке

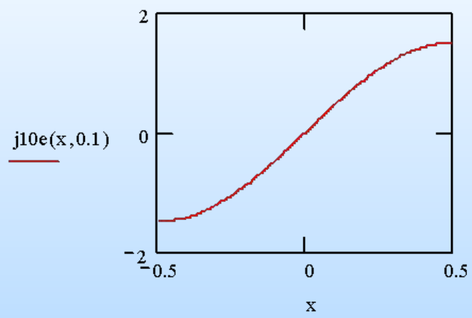
- Ограничение потока

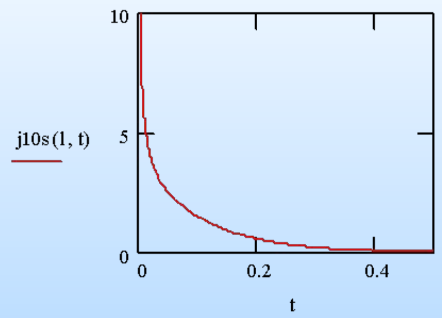
$$D := 1 \qquad l := 1$$

$$j10s(x,t) := \frac{-4D}{l} \cdot \sum_{k=0}^{100} \exp\left[\frac{-(2 \cdot k + 1)^2 \cdot \pi^2 \cdot D \cdot t}{l^2}\right] \cdot \cos\left[\frac{(2 \cdot k + 1) \cdot \pi \cdot x}{l}\right]$$

$$j10e(x,t) := -\sqrt{\frac{D}{\pi \cdot t}} \cdot \sum_{k=0}^{100} (-1)^k \cdot \left[-\exp\left[-\frac{\left[(2 \cdot k + 1) \cdot \frac{1}{2} - x\right]^2}{4 \cdot D \cdot t}\right] + \exp\left[-\frac{\left[(2 \cdot k + 1) \cdot \frac{1}{2} + x\right]^2}{4 \cdot D \cdot t}\right]\right]$$







Диффузия в пленке

- Граничные условия: ограничение потока

$$\boxed{\left| D \frac{\partial c}{\partial x} \right| \le \alpha}$$

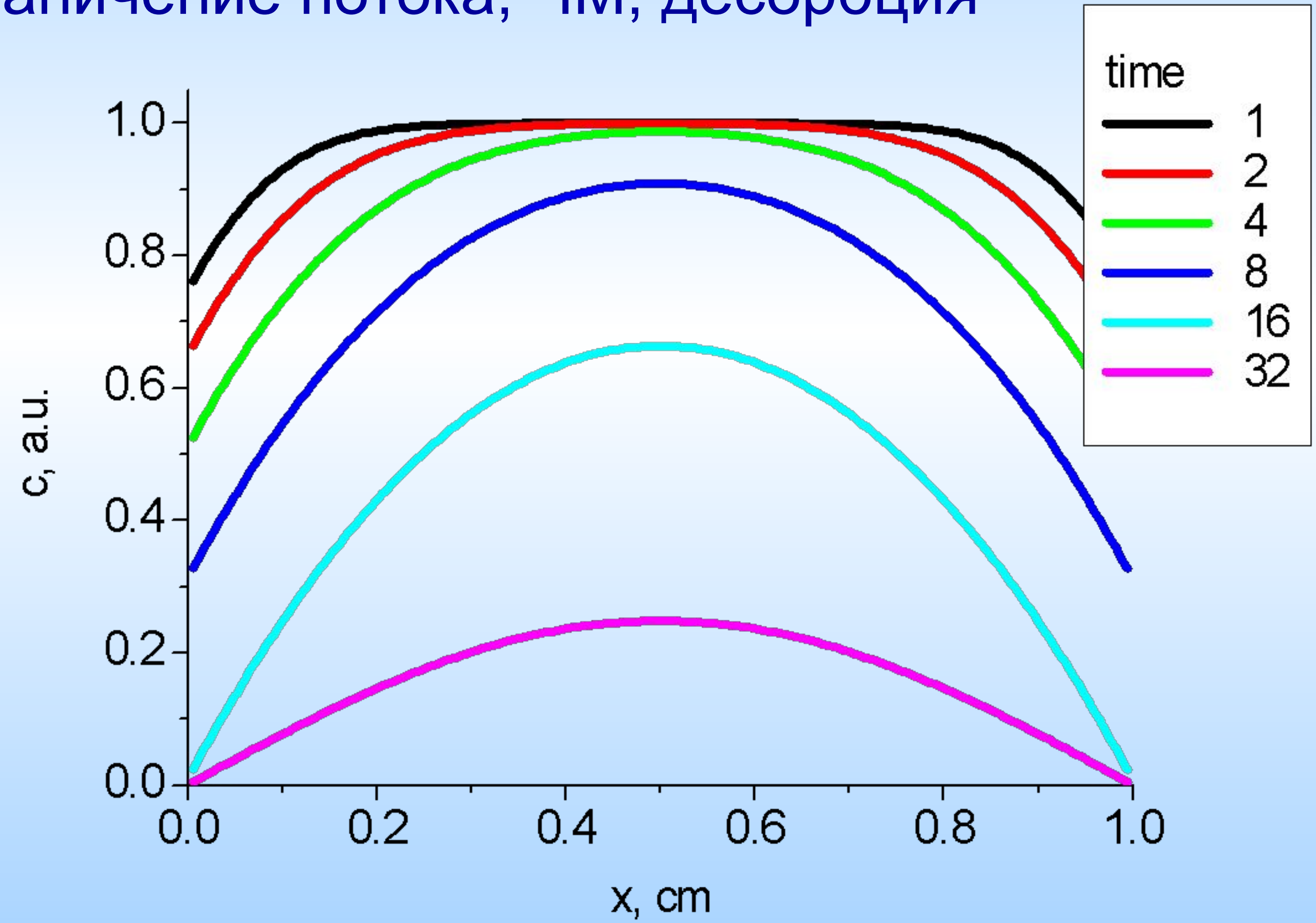
- Численные методы, десорбция:

$$\boxed{c_0 = \begin{cases} 0 & c_1 - 0 < \alpha h / D \\ c_1 - \alpha h / D & c_1 - 0 > \alpha h / D \end{cases}}$$

$$\boxed{c_N = \begin{cases} 0 & c_{N-1} - 0 < \alpha h / D \\ c_{N-1} - \alpha h / D & c_{N-1} - 0 > \alpha h / D \end{cases}}$$

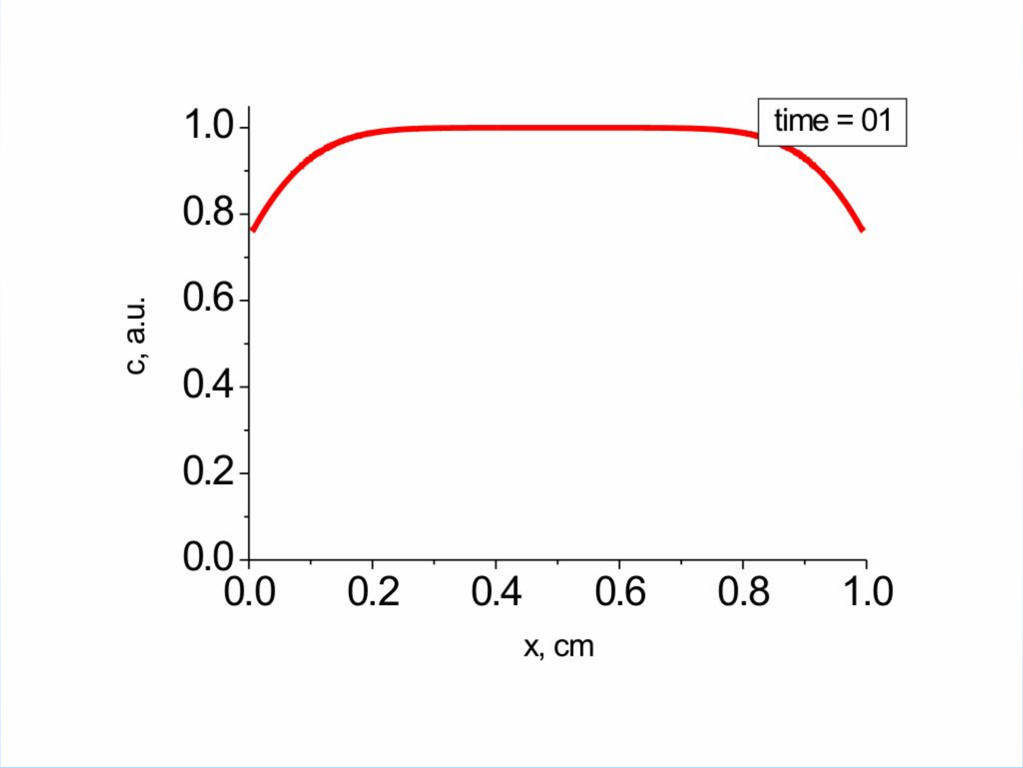
Диффузия в пленке

- Ограничение потока, ЧМ, десорбция



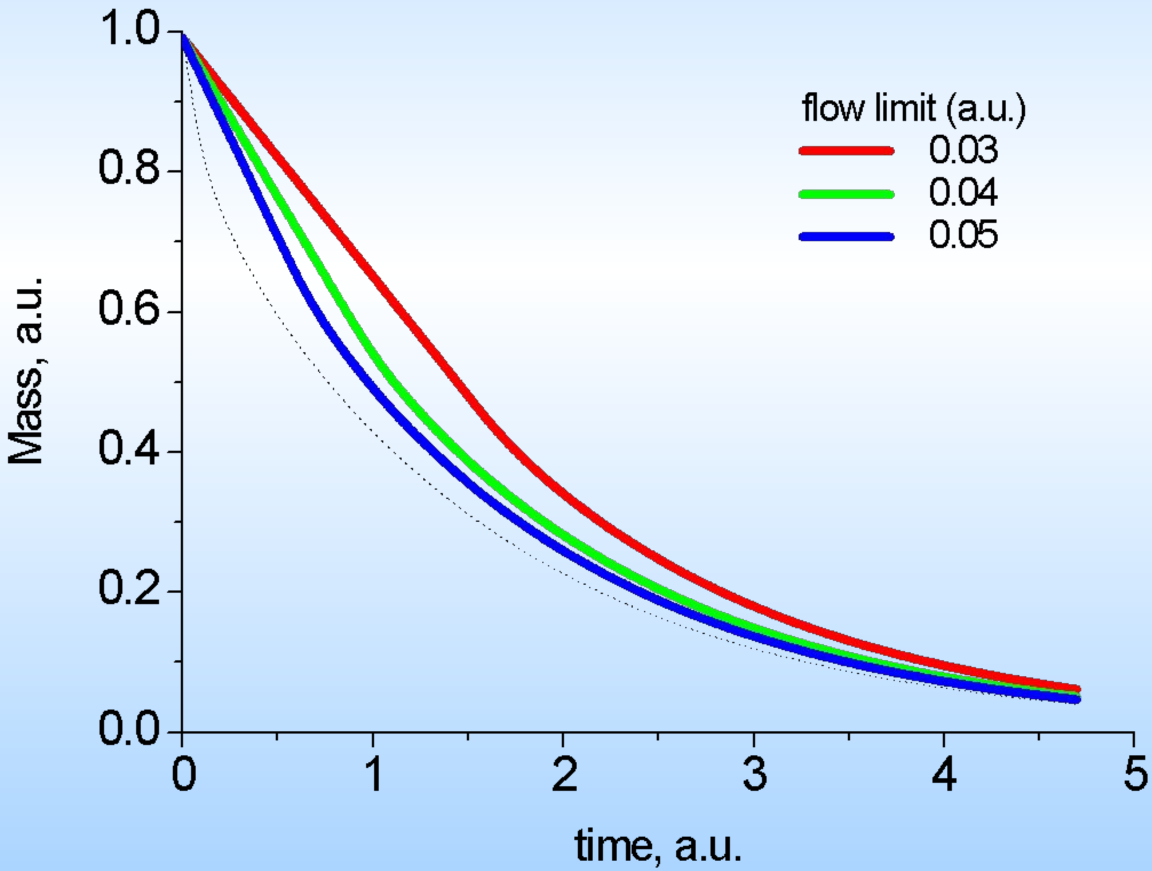
Диффузия в пленке

- Ограничение потока, ЧМ, десорбция



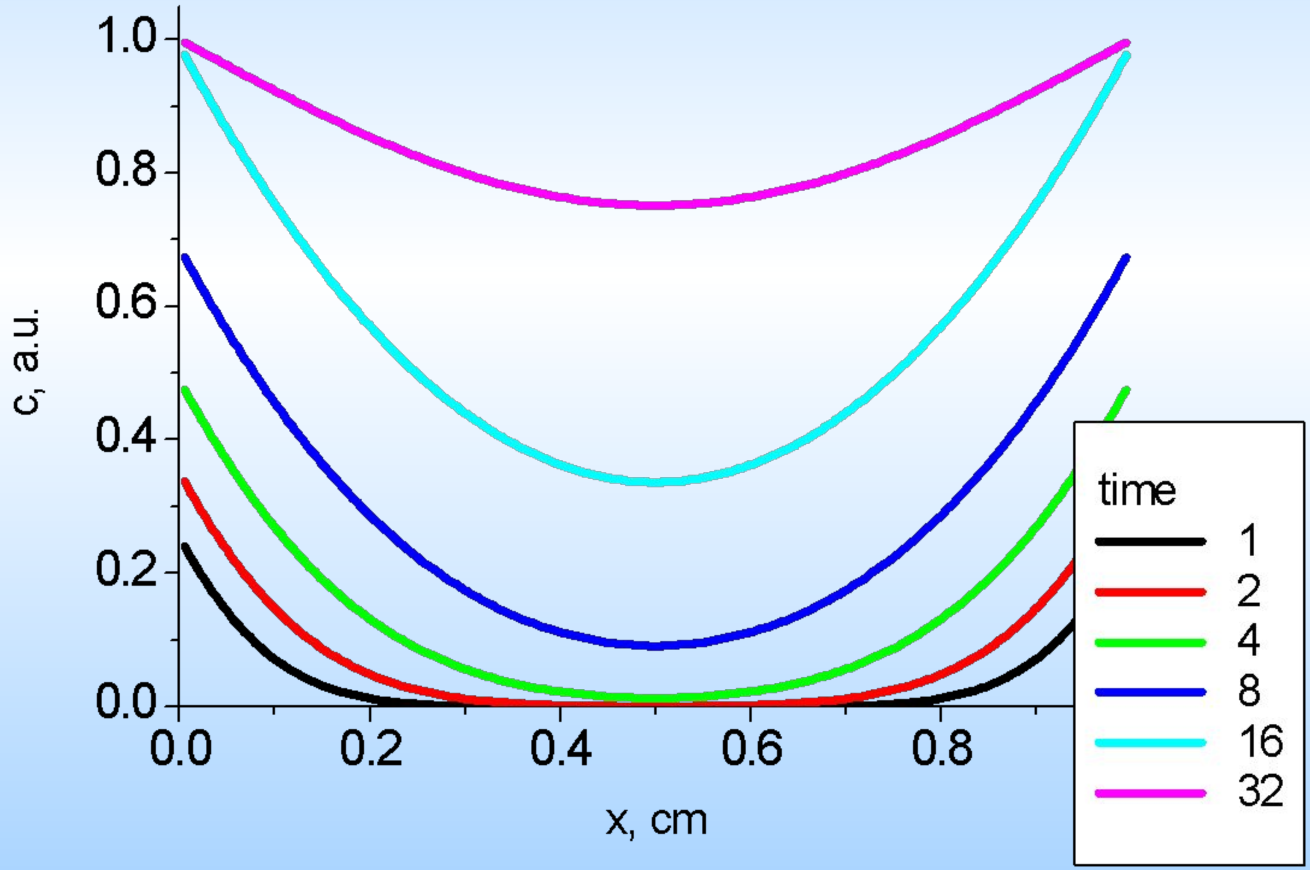
Диффузия в пленке

- Ограничение потока, ЧМ, десорбция



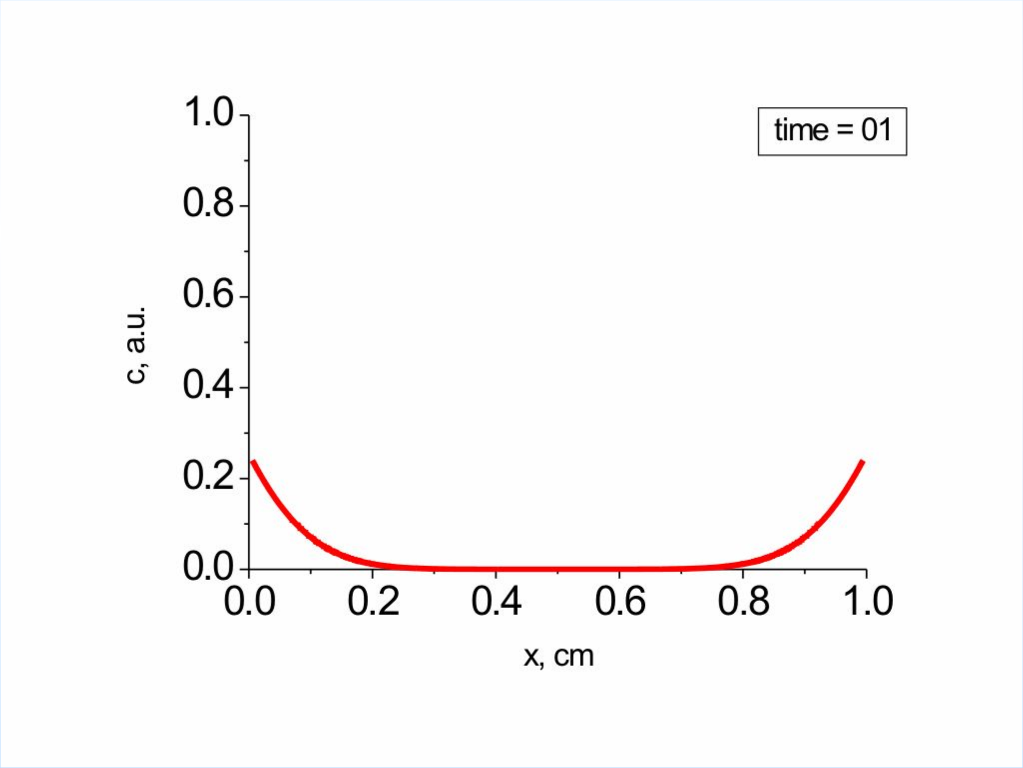
Диффузия в пленке

- Ограничение потока, ЧМ, сорбция



Диффузия в пленке

- Ограничение потока, ЧМ, сорбция



Диффузия в пленке

- Ограничение потока, ЧМ, сорбция