

Диффузия в пленке

- Диффузия через мембрану

$$c(0, t) = c_1 \quad c(l, t) = c_2 = 0$$

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

Диффузия в пленке

- Диффузия через мембрану

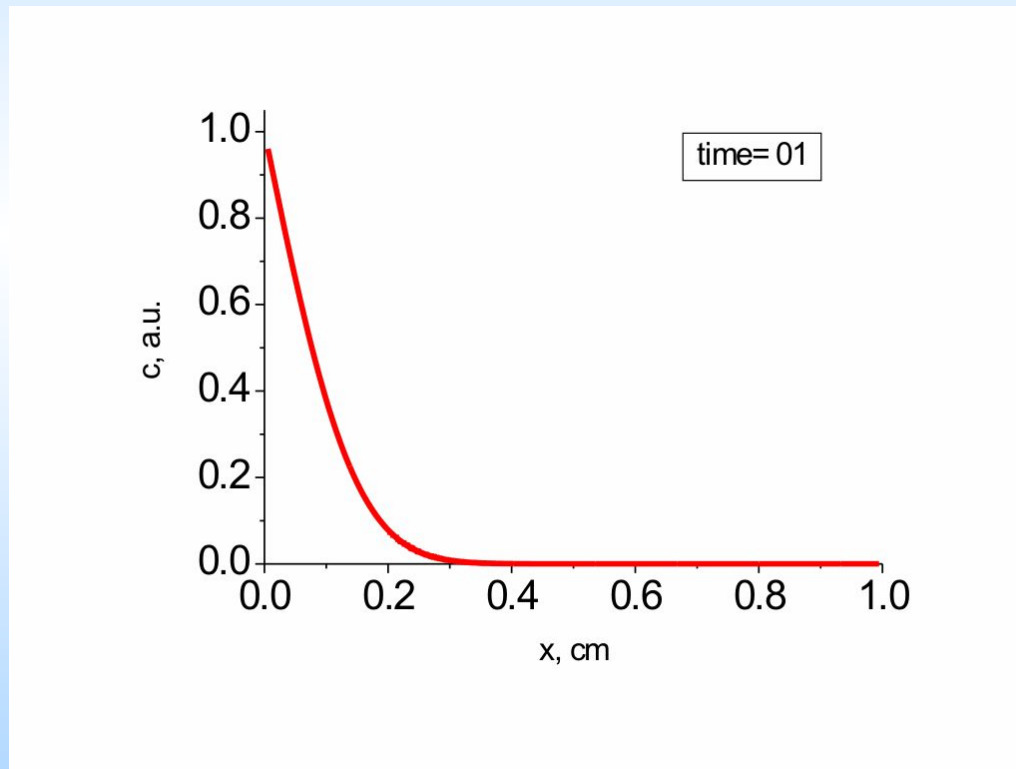
$$c(0, t) = c_1 \quad c(l, t) = c_2 = 0 \quad c(x, 0) = 0$$

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

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

Диффузия в пленке

- Диффузия через мембрану



Диффузия в пленке

- Диффузия через мембрану

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

$$M_{pass} = \int_0^t j(x, \tau) \Big|_{x=l} d\tau = \int_0^t -D \frac{\partial c(x, \tau)}{\partial x} \Big|_{x=l} d\tau =$$
$$= c_1 \frac{D}{l} \left\{ t - \frac{l^2}{6D} - \frac{2l^2}{\pi^2 D} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m^2} \exp \left[-\frac{m^2 \pi^2 D t}{l^2} \right] \right\}$$

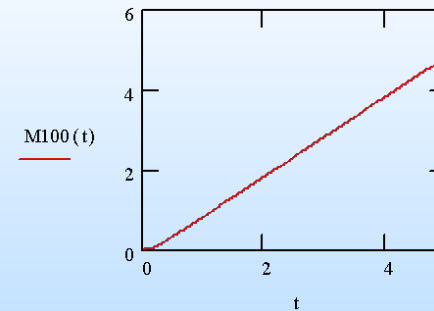
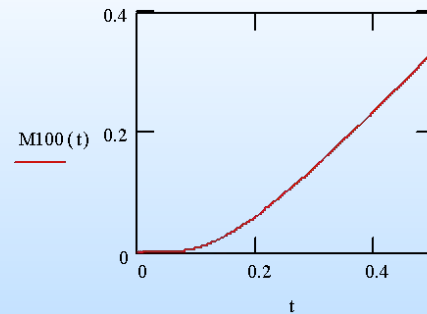
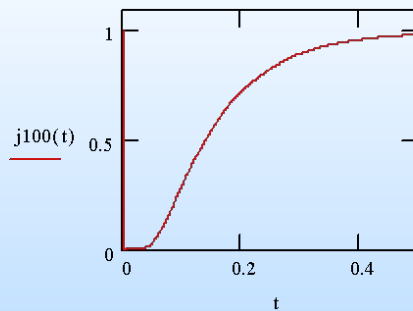
Диффузия в пленке

- Диффузия через мембрану

$$D := 1 \quad l := 1$$

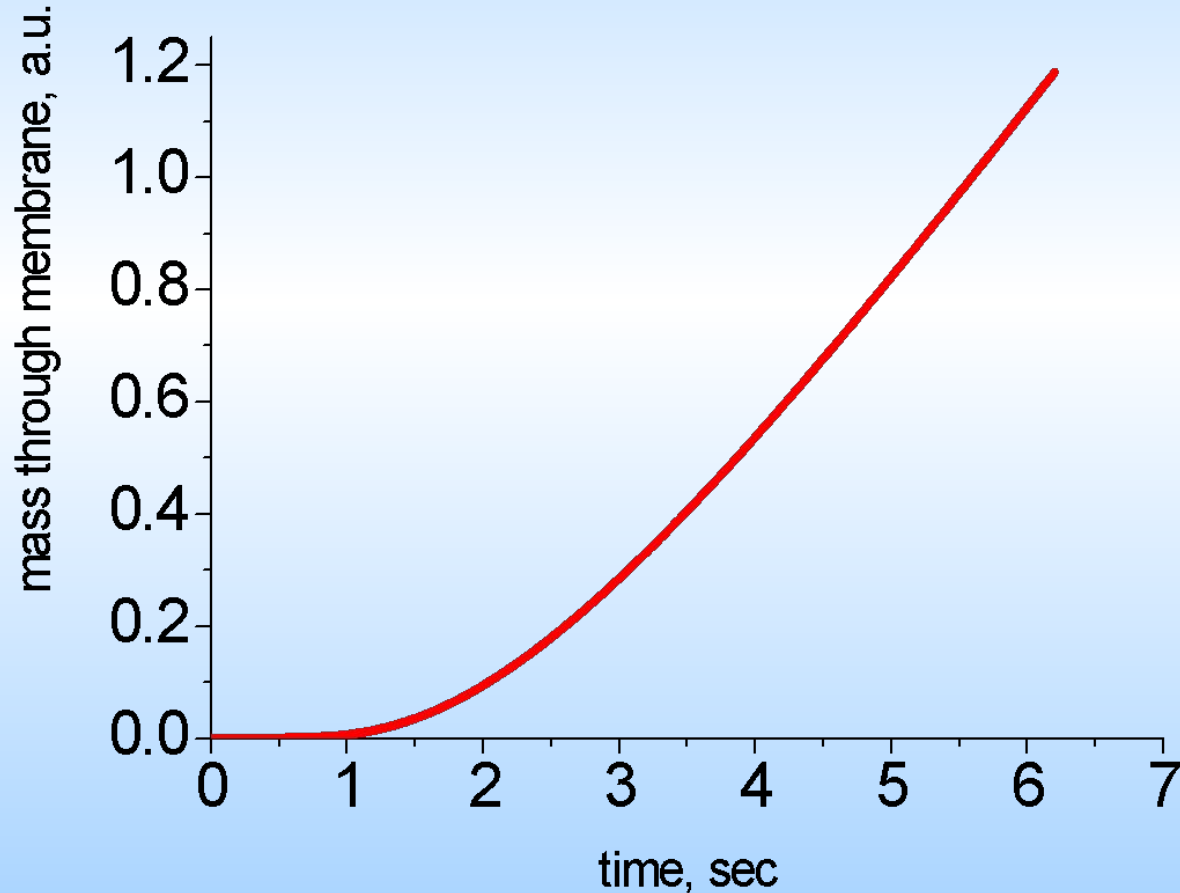
$$j_{100}(t) := \frac{D}{l} \cdot \left[1 + 2 \cdot \sum_{m=1}^{100} (-1)^m \cdot \exp\left(\frac{-m^2 \cdot \pi^2 \cdot D \cdot t}{l^2}\right) \right]$$

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



Диффузия в пленке

- Диффузия через мембрану



Диффузия в пленке

- постоянные концентрации на границах

$$\begin{aligned} c(0, t) &= c_1 \\ c(l, t) &= c_2 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \tilde{c}(0, t) &= 0 \\ \tilde{c}(l, t) &= 0 \end{aligned}$$

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

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

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

Диффузия в пленке

- Теорема Дюамеля

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

$$F_1(x, t - \tau) = 1 - \frac{x}{l} - \frac{2}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m} \exp\left[-\frac{m^2 \pi^2 D(t - \tau)}{l^2}\right] \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)$$
$$F_2(x, t - \tau) = \frac{x}{l} + \frac{2}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m} \exp\left[-\frac{m^2 \pi^2 D(t - \tau)}{l^2}\right] \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)$$

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

Диффузия в пленке

- Теорема Дюамеля

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

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

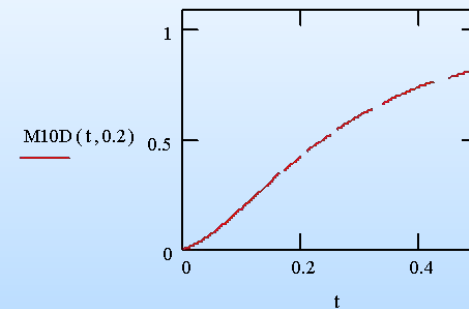
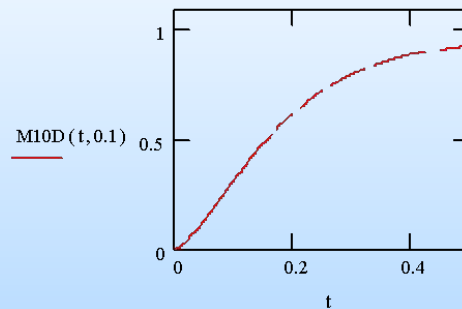
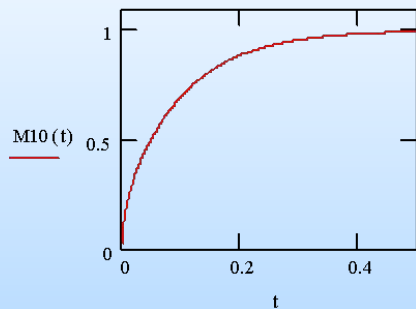
Диффузия в пленке

- Теорема Дюамеля

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

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

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



Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия:

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

$$c(x, t) = u(x) + w(x, t)$$

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

$$\begin{aligned} w(x, t) &= 2 \sum_{m=0}^{\infty} \exp(-\lambda_m^2 Dt) \frac{\lambda_m D^2 \cos \lambda_m x + kD \sin \lambda_m x}{(\lambda_m^2 D^2 + k^2)l + 2kD} \times \\ &\times \int_0^l (c(x, 0) - u(x)) \left(\lambda_m \cos \lambda_m x + \frac{k}{D} \sin \lambda_m x \right) dx \\ \tan \lambda_m l &= \frac{2kD\lambda_m}{\lambda_m^2 D^2 - k^2} \end{aligned}$$

Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, численные методы:

$$-D \frac{c_1^j - c_{-1}^j}{2h} + kc_0^j = kc_{eq}$$
$$\frac{c_0^{j+1} - c_0^j}{\tau} = D \frac{(c_1^j - 2c_0^j + c_{-1}^j)}{h^2}$$

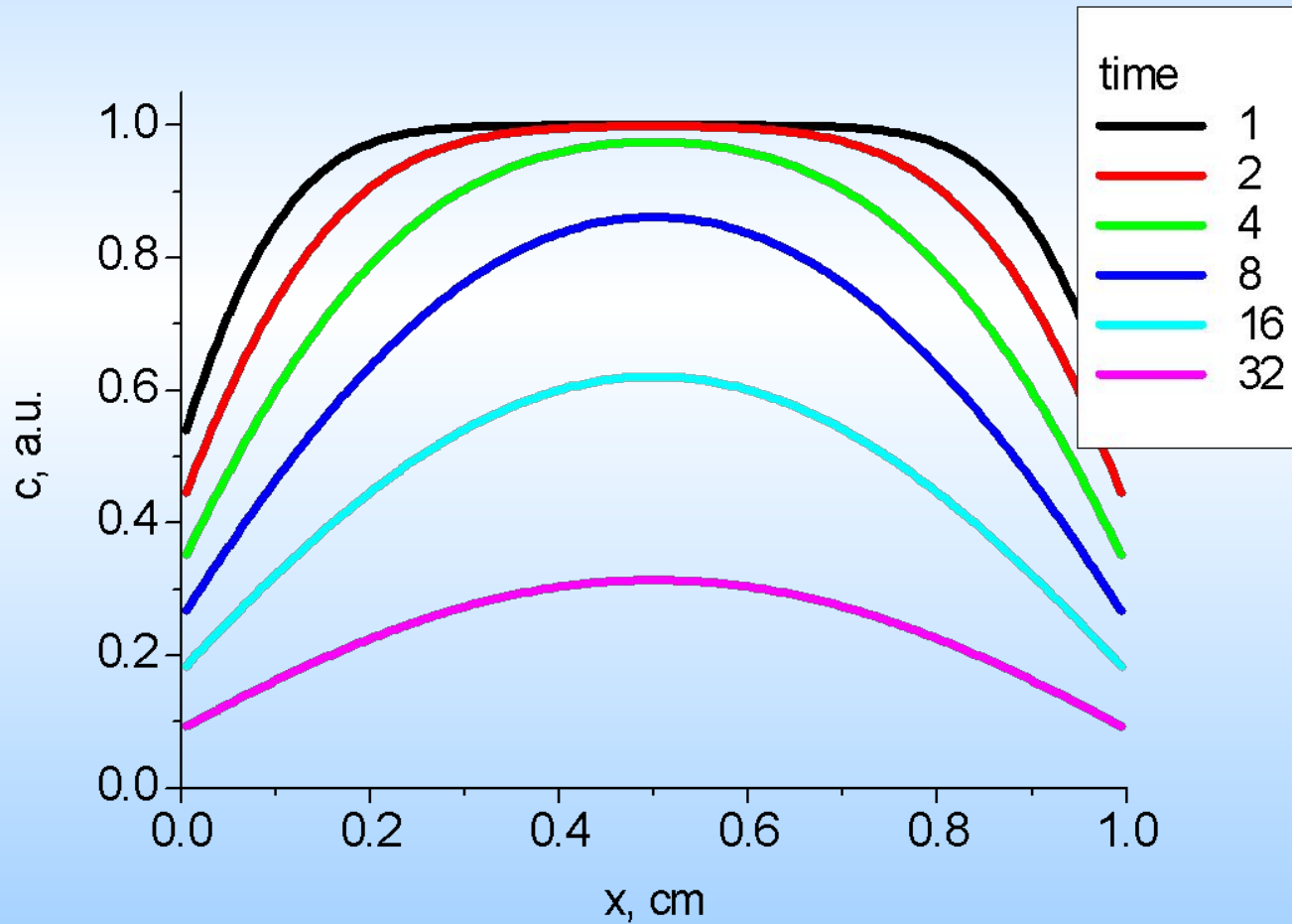
$$D \frac{c_{N+1}^j - c_{N-1}^j}{2h} + kc_N^j = kc_{eq}$$
$$\frac{c_N^{j+1} - c_N^j}{\tau} = D \frac{(c_{N+1}^j - 2c_N^j + c_{N-1}^j)}{h^2}$$

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

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

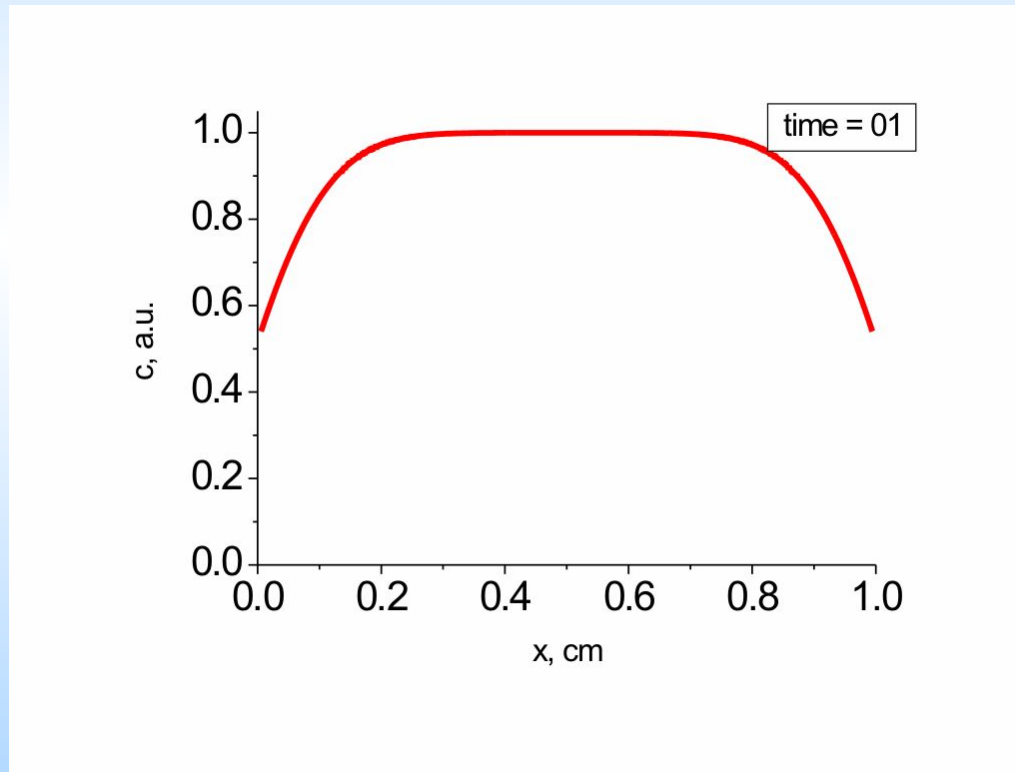
Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, ЧМ, десорбция



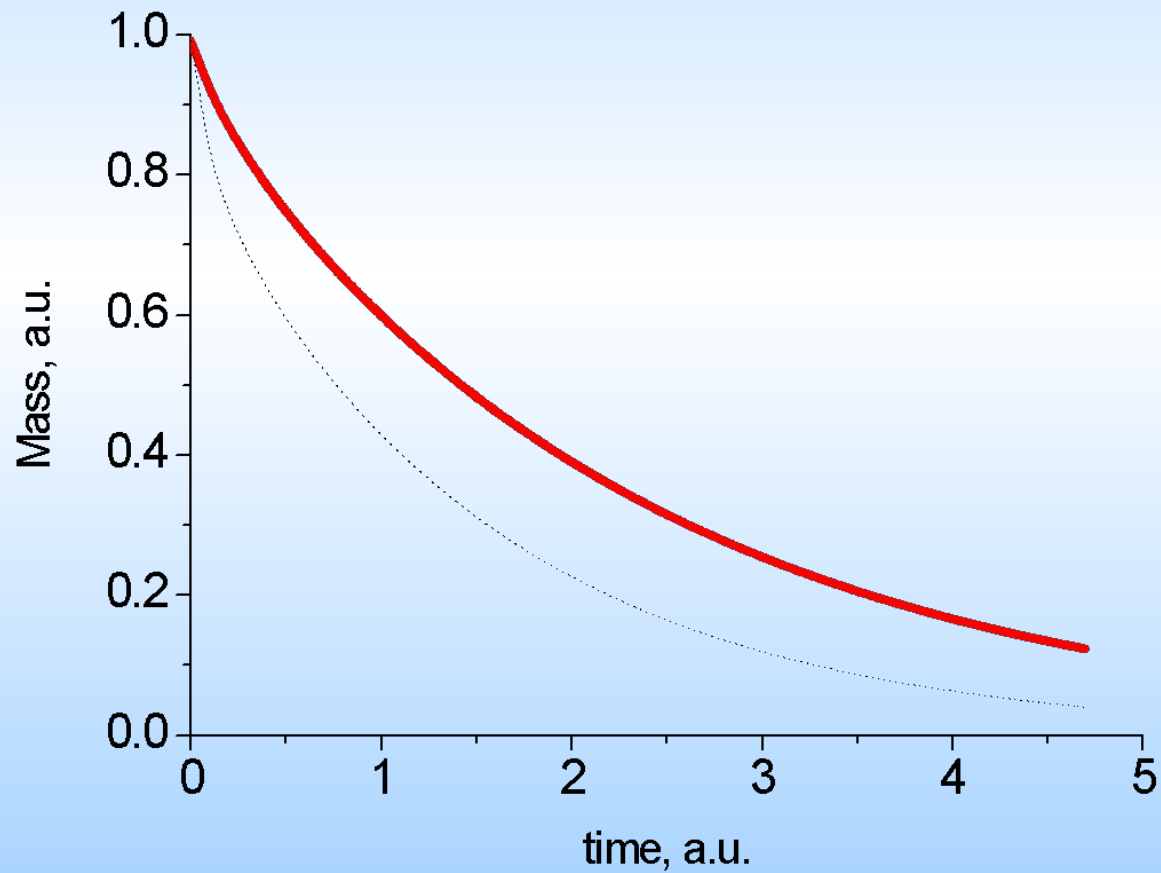
Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, ЧМ, десорбция



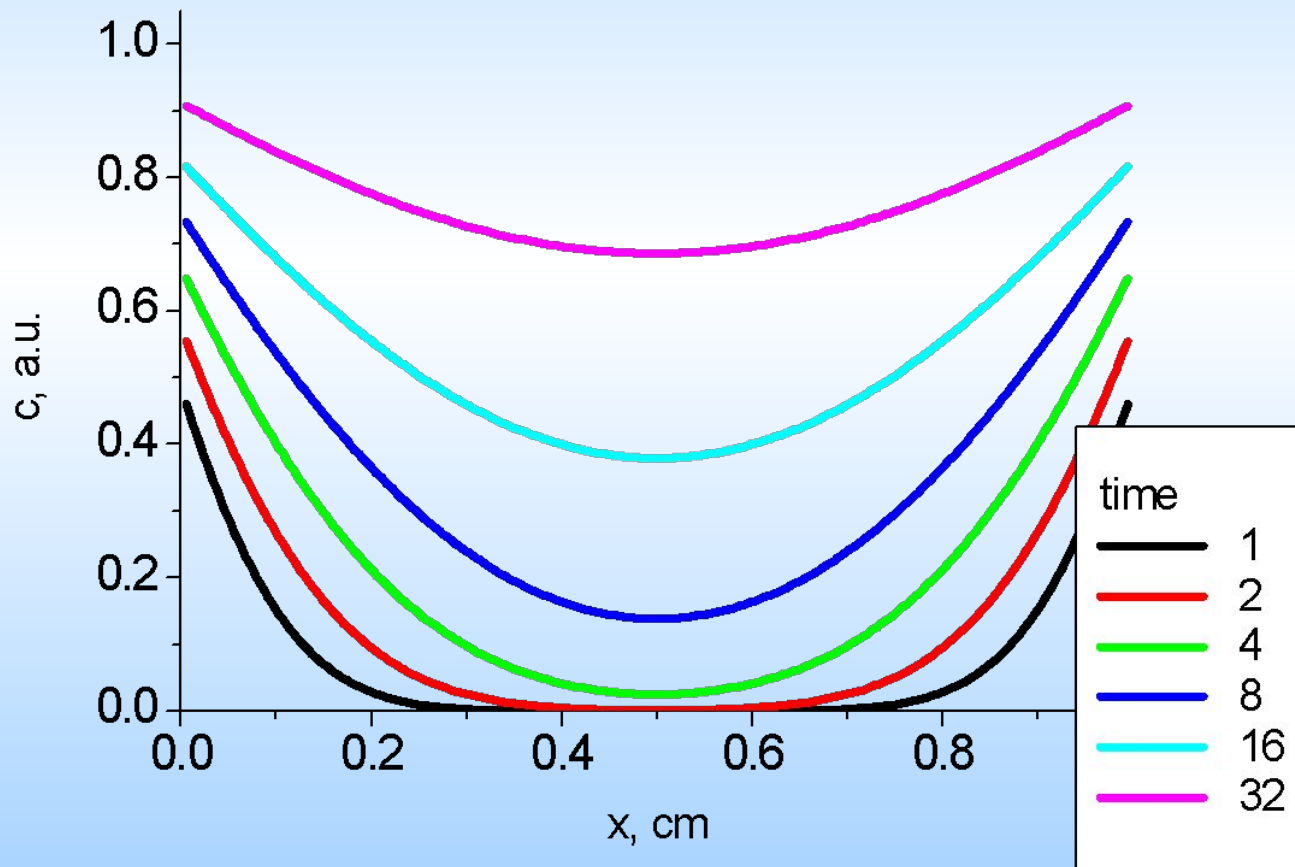
Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, ЧМ, десорбция



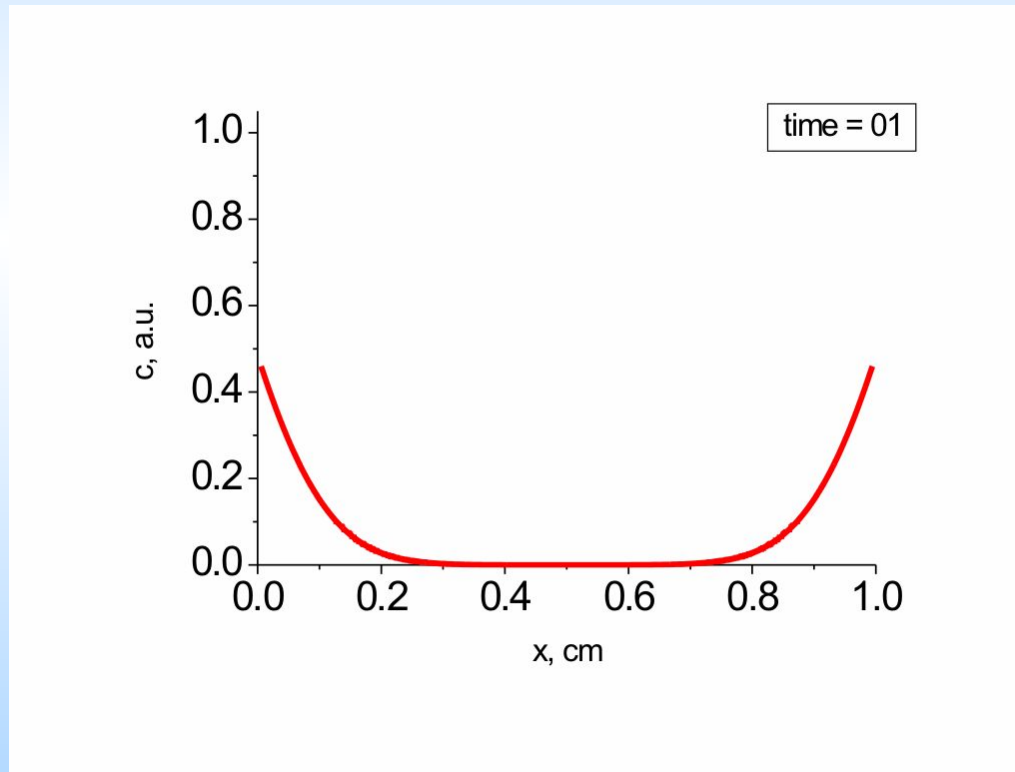
Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, ЧМ, сорбция



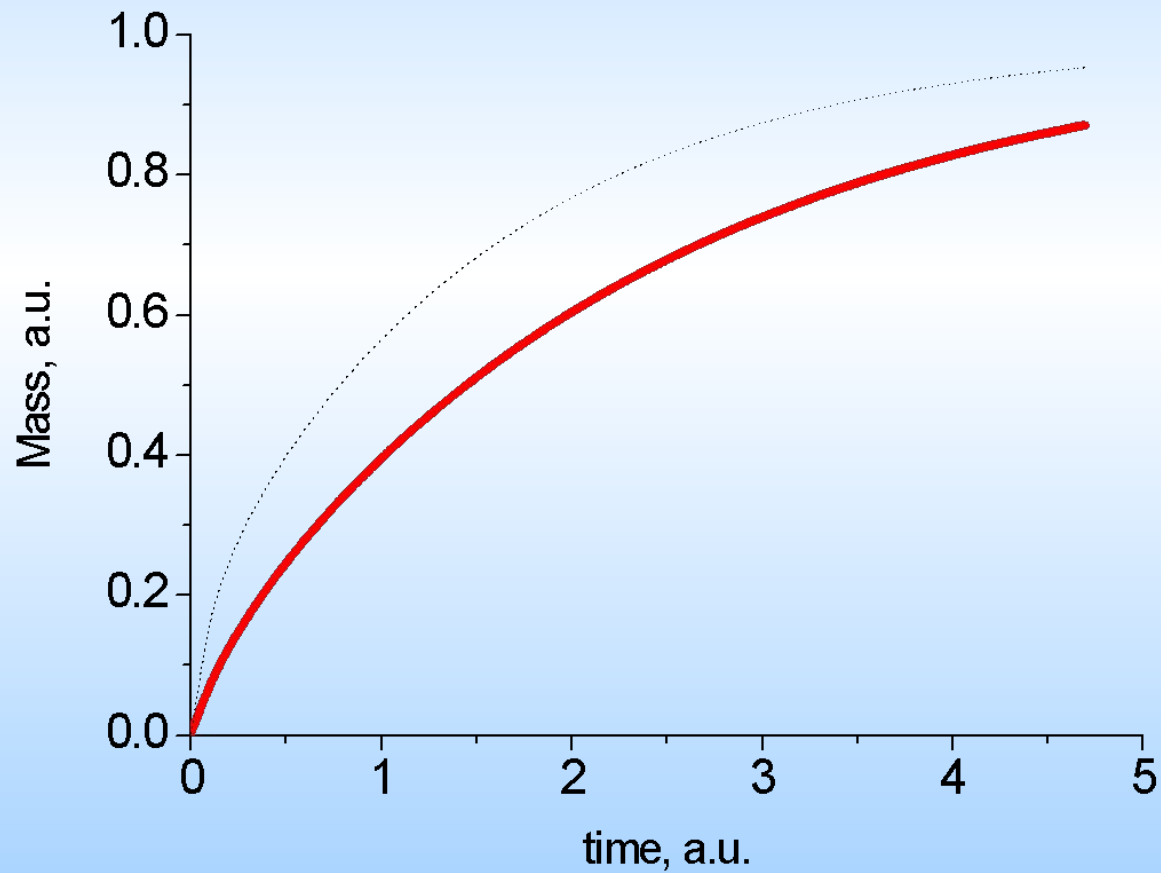
Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, ЧМ, сорбция



Диффузия в пленке

- Обобщенные граничные условия, ЧМ, сорбция



Диффузия в пленке

- Ограничение потока

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

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

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

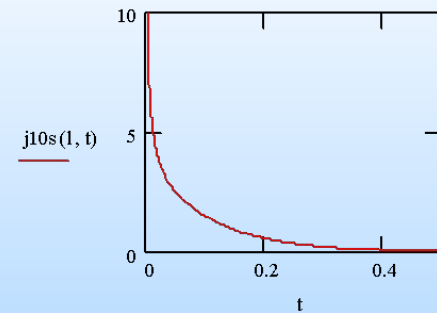
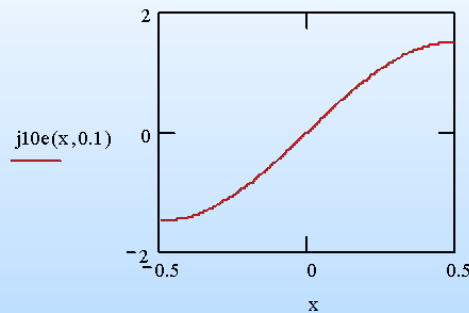
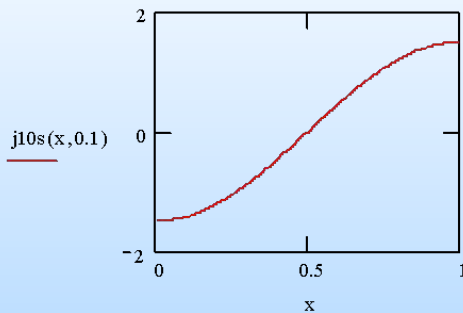
Диффузия в пленке

- Ограничение потока

$$D := 1 \quad l := 1$$

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

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



Диффузия в пленке

- Граничные условия: ограничение потока

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

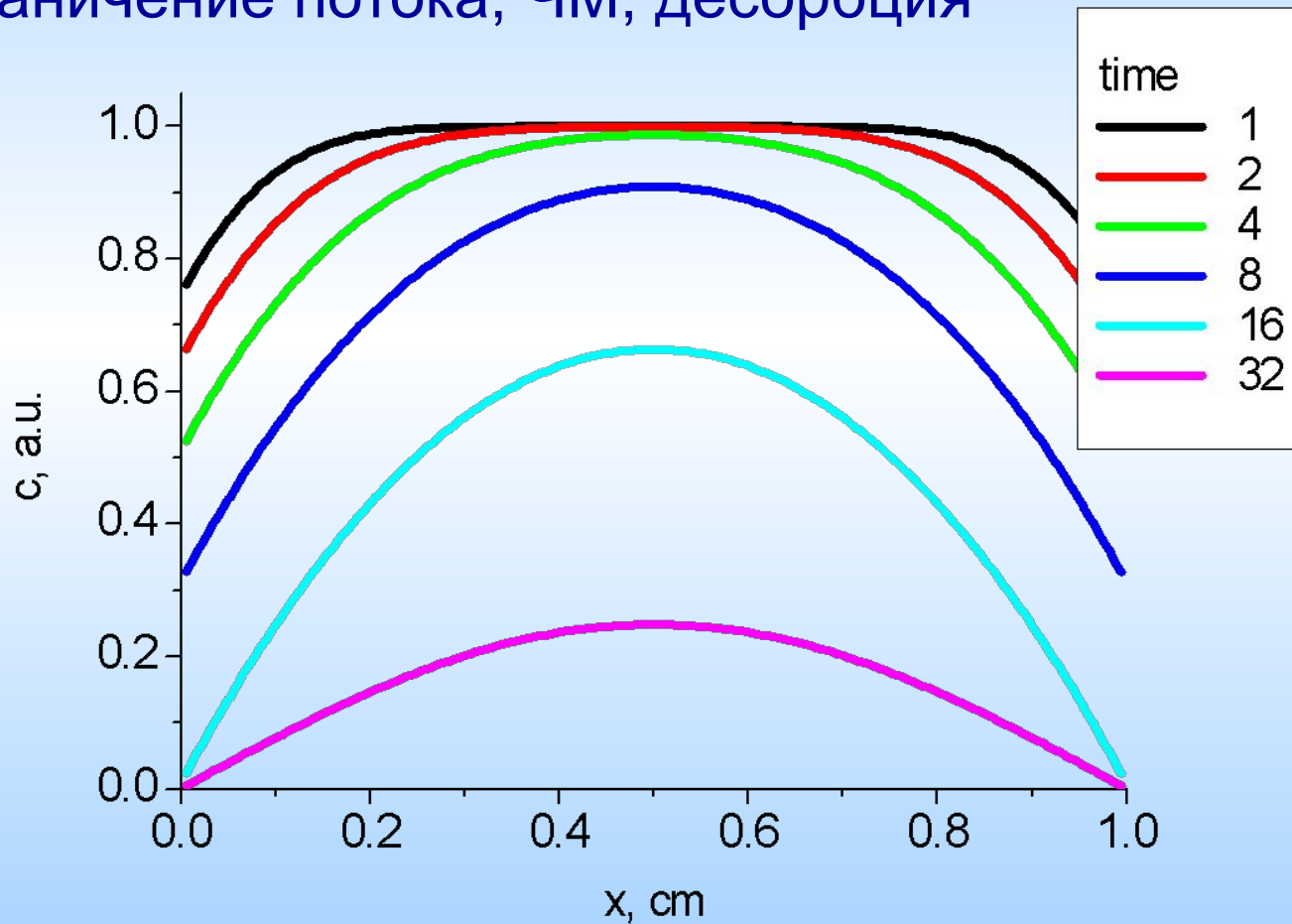
- Численные методы, десорбция:

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

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

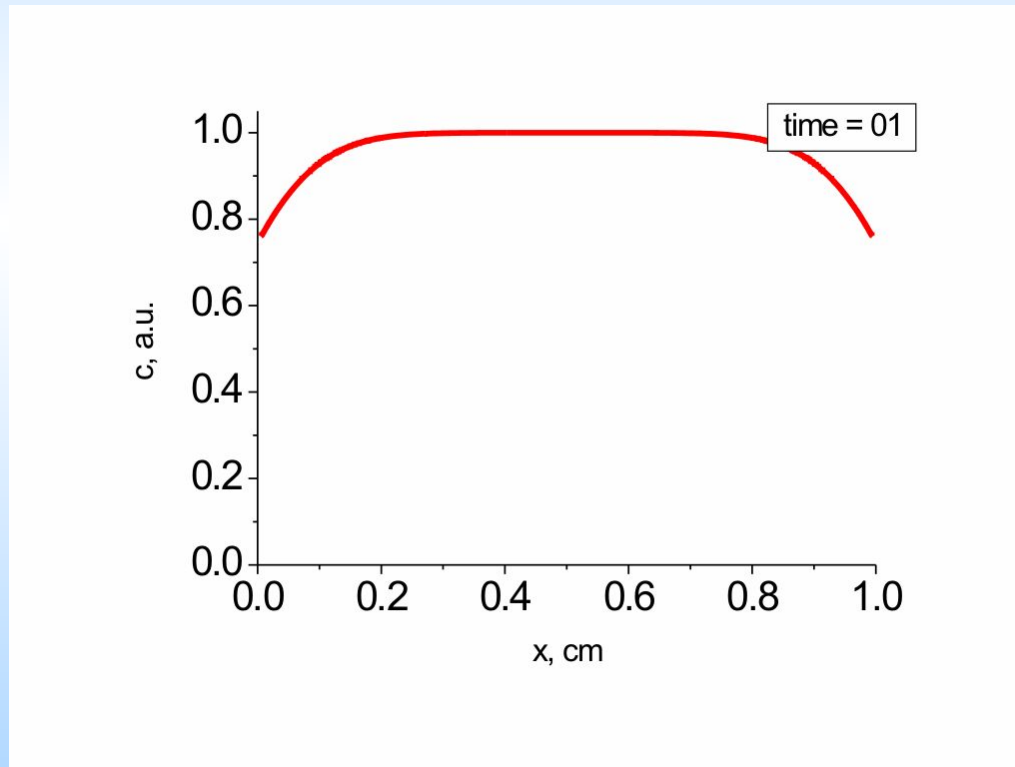
Диффузия в пленке

- Ограничение потока, ЧМ, десорбция



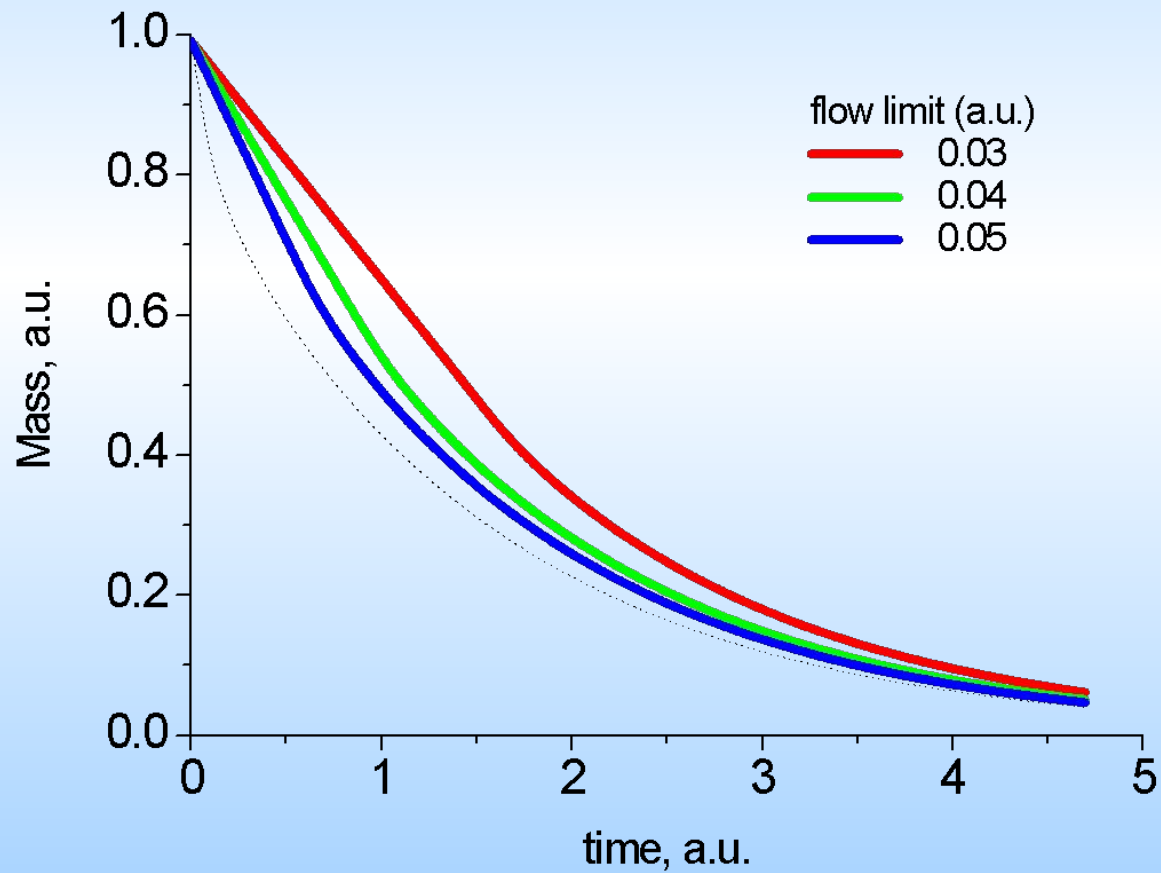
Диффузия в пленке

- Ограничение потока, ЧМ, десорбция



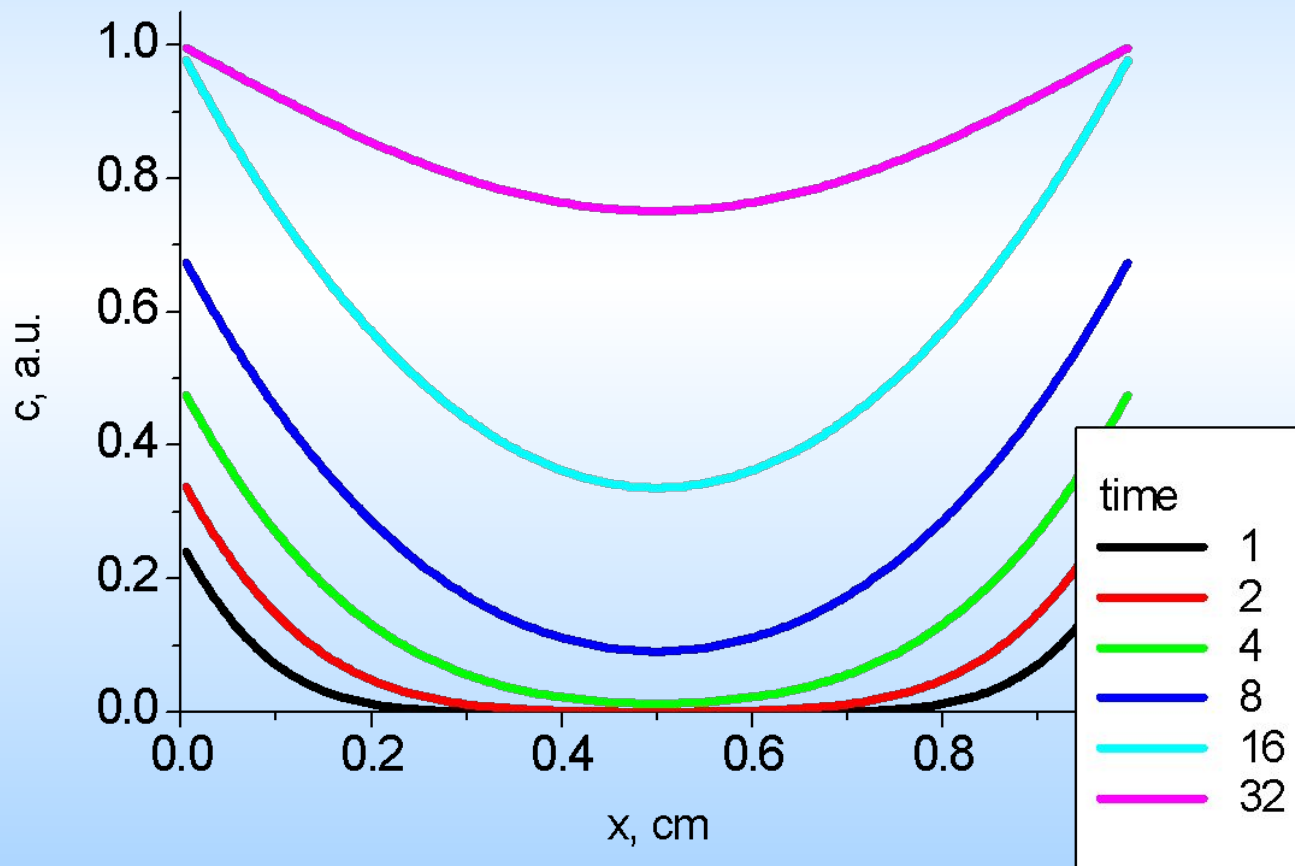
Диффузия в пленке

- Ограничение потока, ЧМ, десорбция



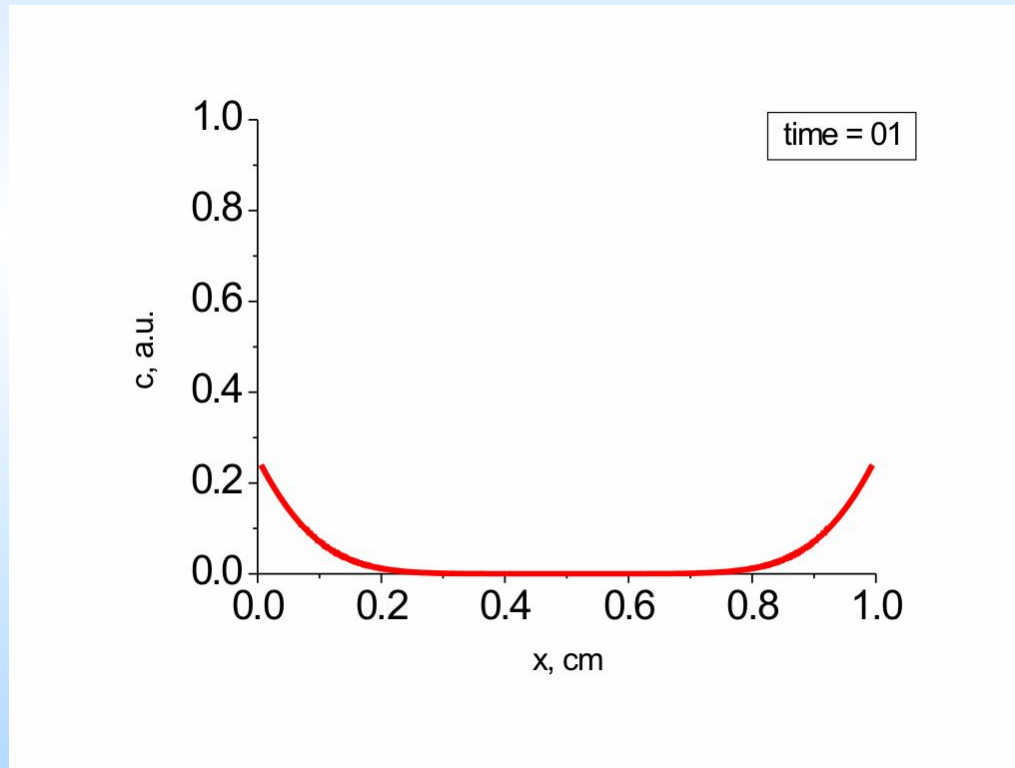
Диффузия в пленке

- Ограничение потока, ЧМ, сорбция



Диффузия в пленке

- Ограничение потока, ЧМ, сорбция



Диффузия в пленке

- Ограничение потока, ЧМ, сорбция

