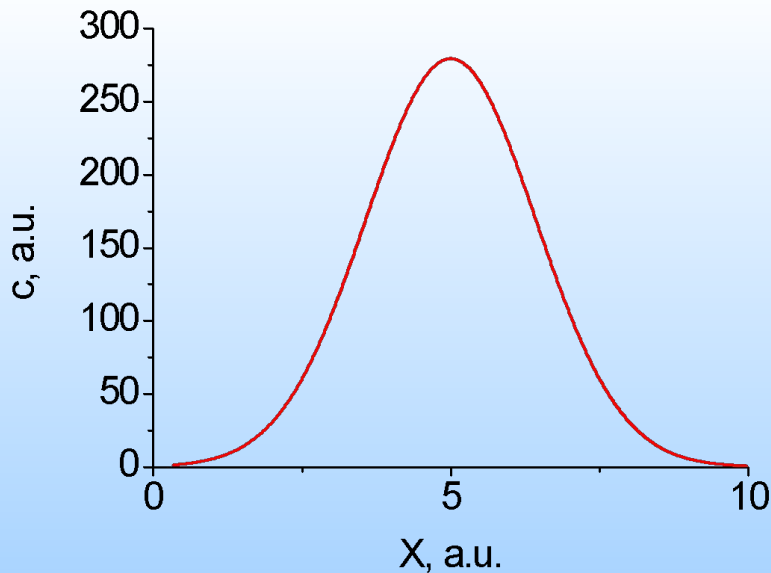


# Диффузия в неограниченном теле

$$c(x, t) = \frac{A}{\sqrt{t}} \exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right)$$

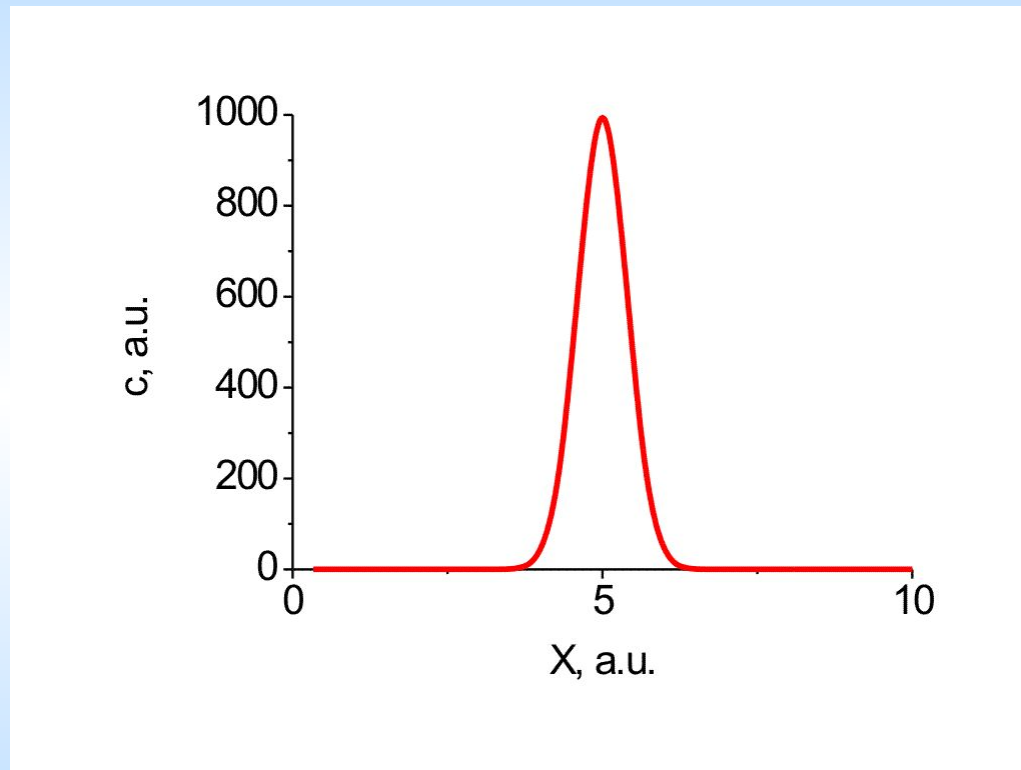
$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$



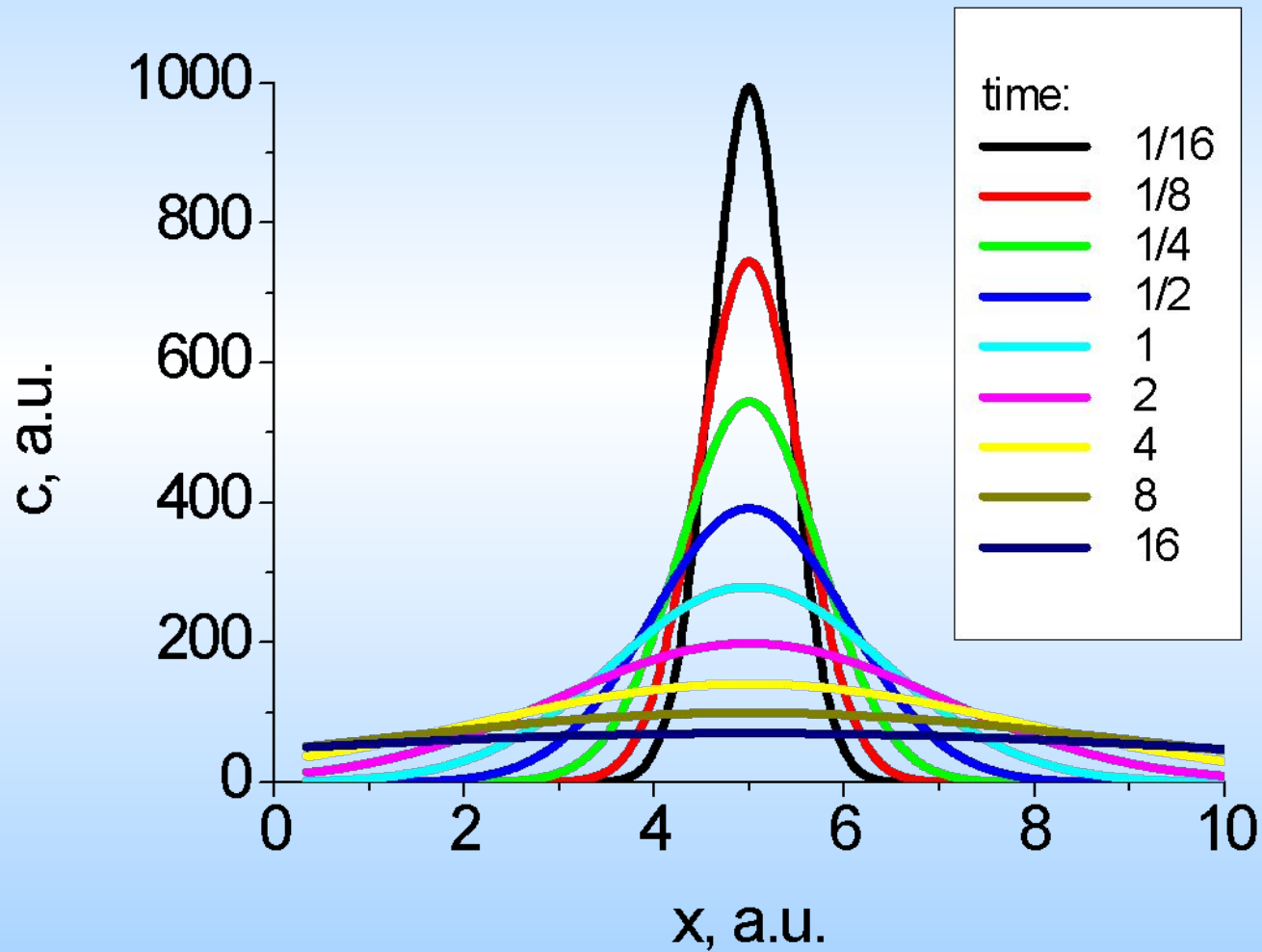
$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} c dx$$

$$c(x, \xi, t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right)$$

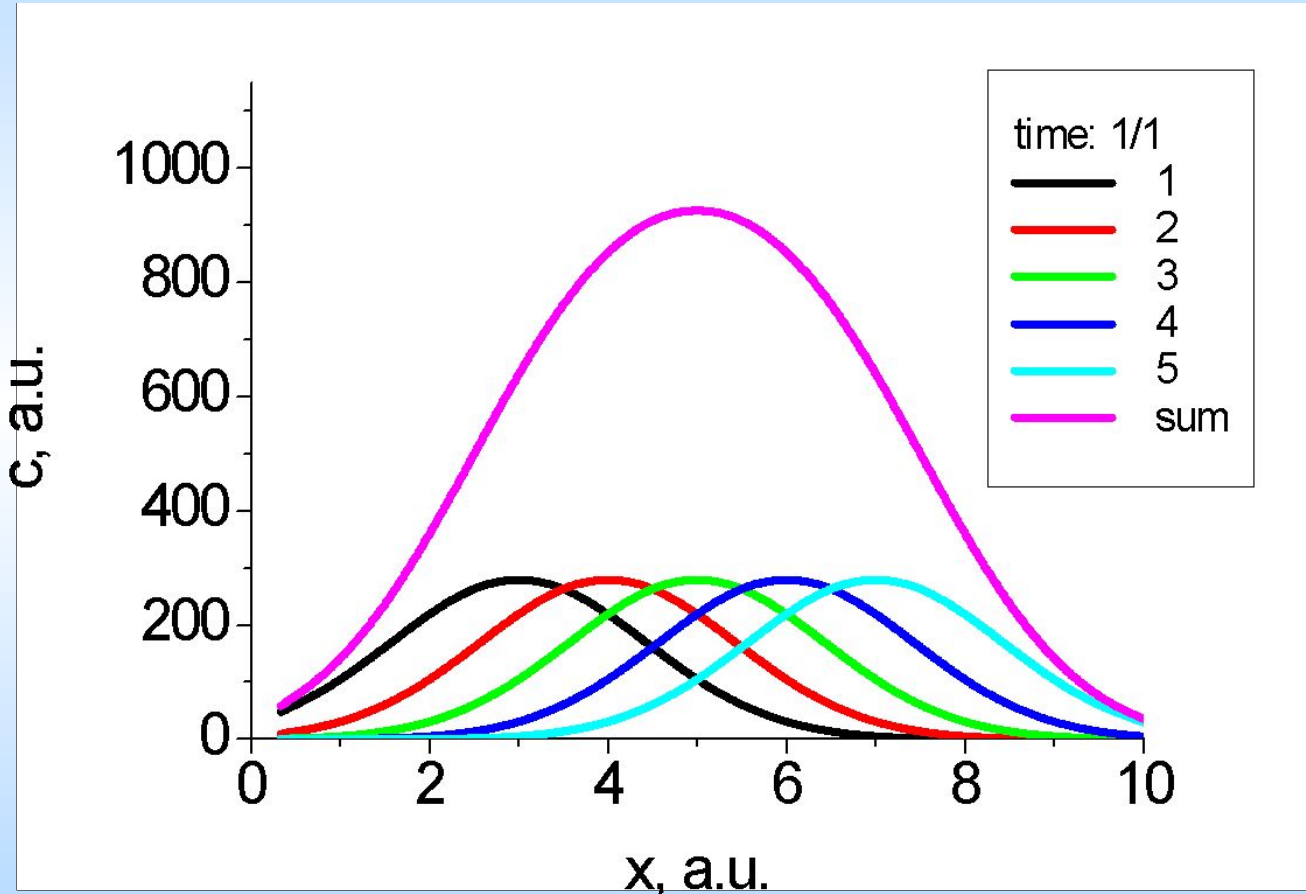
# Мгновенный точечный источник



# Мгновенный точечный источник



# Суперпозиция источников



$$c(x, t) = \sum_{i=1}^n \frac{N_i}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(a_i - x)^2}{4Dt}\right)$$

# Интеграл по источникам

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right) d\xi$$

- фундаментальное решение уравнения диффузии:

$$G(x, \xi, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right)$$

# Интеграл по источникам, строгий вывод

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$
$$-\infty \leq x \leq \infty$$

$$c(x, t)|_{t=0} = c(x, 0) = f(x)$$

$$c(x, t) - ?$$

- Метод разделения переменных:

$$c(x, t) = X(x)T(t)$$

$$\frac{1}{D} \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = -\lambda^2$$

$$T(t) = A \exp(-\lambda^2 Dt)$$

$$X(x) = B \exp(i\lambda x)$$

$$c(x, t) = C \exp(-\lambda^2 Dt) \exp(i\lambda x)$$

$$c(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(\lambda) \exp(-\lambda^2 Dt) \exp(i\lambda x) d\lambda$$

$$c(x, 0) = f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} C(\lambda) \exp(i\lambda x) d\lambda$$

$$C(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp(-i\lambda \xi) d\xi$$

# Интеграл по источникам, строгий вывод

$$c(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\lambda^2 Dt) \left( \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp(-i\lambda\xi) d\xi \right) \exp(i\lambda x) d\lambda$$

$$c(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \left( \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\lambda^2 Dt - i\lambda(\xi - x)) d\lambda \right) d\xi$$

$$c(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \left( \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\left(\lambda\sqrt{Dt} + \frac{i(\xi - x)}{\sqrt{4Dt}}\right)^2\right) \frac{d(\lambda\sqrt{Dt})}{\sqrt{Dt}} \right) d\xi$$

$$c(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \left( \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right) \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{Dt}} \right) d\xi$$

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right) d\xi$$

# Начальные условия

- замена переменной:

$$z = \frac{\xi - x}{\sqrt{4Dt}} \quad \xi = x + z\sqrt{4Dt} \quad d\xi = \sqrt{4Dt} dz$$

- тогда:

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x + z\sqrt{4Dt}) \exp(-z^2) dz$$

$$c(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-z^2) dz = f(x)$$



# Сохранение количества частиц

- если в момент времени  $t = 0$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) d\xi = N_0$$

- то для  $t > 0$

$$N(t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right) d\xi \right\} dx$$

$$N(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \left\{ \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right) dx \right\} d\xi = N_0$$

# Симметричное начальное распределение

- если:

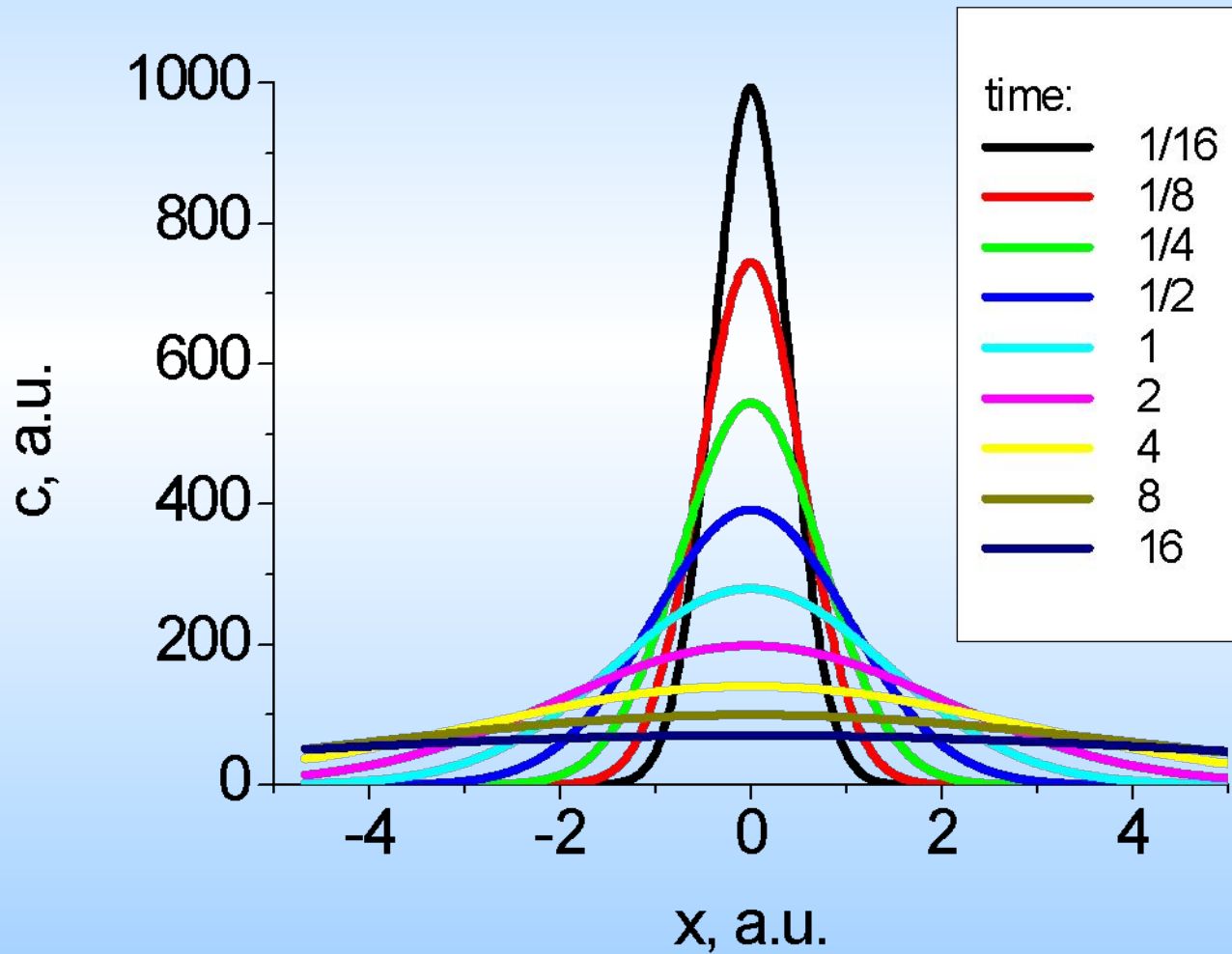
$$c(-\xi, 0) = c(\xi, 0)$$

- то:

$$\begin{aligned} c(-x, t) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} c(\xi, 0) \exp\left(-\frac{(\xi + x)^2}{4Dt}\right) d\xi = \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} c(-\xi, 0) \exp\left(-\frac{(\xi + x)^2}{4Dt}\right) d\xi = \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} c(z, 0) \exp\left(-\frac{(z - x)^2}{4Dt}\right) dz = c(x, t) \end{aligned}$$

$$c(-x, t) = c(x, t)$$

# Симметричное распределение



# Симметричное распределение

- Поток через плоскость  $x = 0$ :

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{1}{2Dt\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} c(\xi, 0)(\xi - x) \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right) d\xi$$

$$\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{1}{2Dt\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} \xi c(\xi, 0) \exp\left(-\frac{\xi^2}{4Dt}\right) d\xi = 0$$

- (интеграл нечетной функции в симметричных пределах)

# Симметричное распределение

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} c(\xi, 0) \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right) d\xi =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \left\{ \int_{-\infty}^0 c(\xi, 0) \exp\left(-\frac{(x - \xi)^2}{4Dt}\right) d\xi + \int_0^{\infty} c(\xi, 0) \exp\left(-\frac{(x - \xi)^2}{4Dt}\right) d\xi \right\}$$

$$\int_{-\infty}^0 c(\xi, 0) \exp\left(-\frac{(x - \xi)^2}{4Dt}\right) d\xi = \int_0^{\infty} c(-z, 0) \exp\left(-\frac{(x + z)^2}{4Dt}\right) dz = \int_0^{\infty} c(z, 0) \exp\left(-\frac{(x + z)^2}{4Dt}\right) dz$$

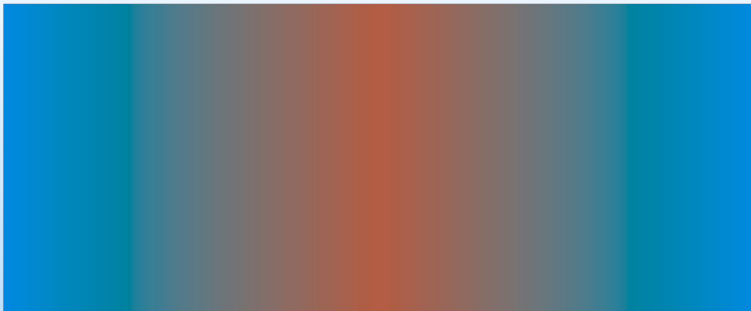
$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^{\infty} c(\xi, 0) \left\{ \exp\left(-\frac{(x - \xi)^2}{4Dt}\right) + \exp\left(-\frac{(x + \xi)^2}{4Dt}\right) \right\} d\xi$$

# Частные случаи

- Бесконечно тонкий слой



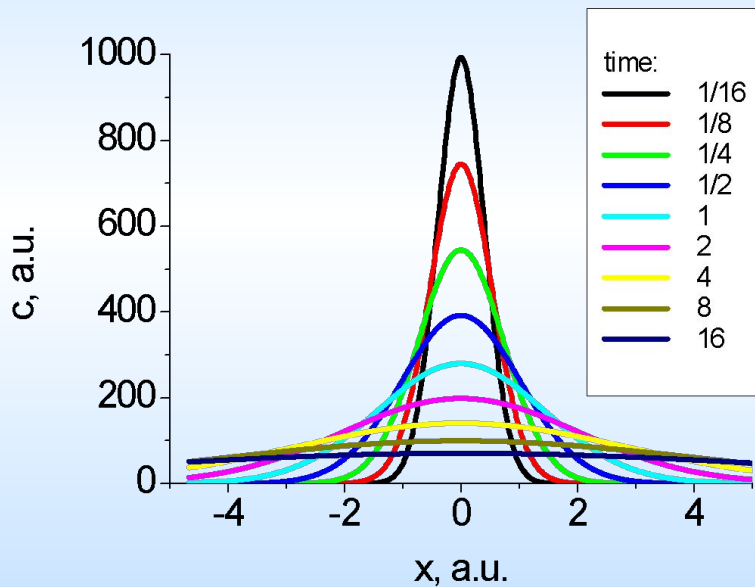
$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{N}{2h} \int_{a-h}^{a+h} \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right) d\xi$$



$$c(x, t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(a - x)^2}{4Dt}\right)$$

# Частные случаи

- Бесконечно тонкий слой



- Максимум:

$$c_{\max}(t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}}$$

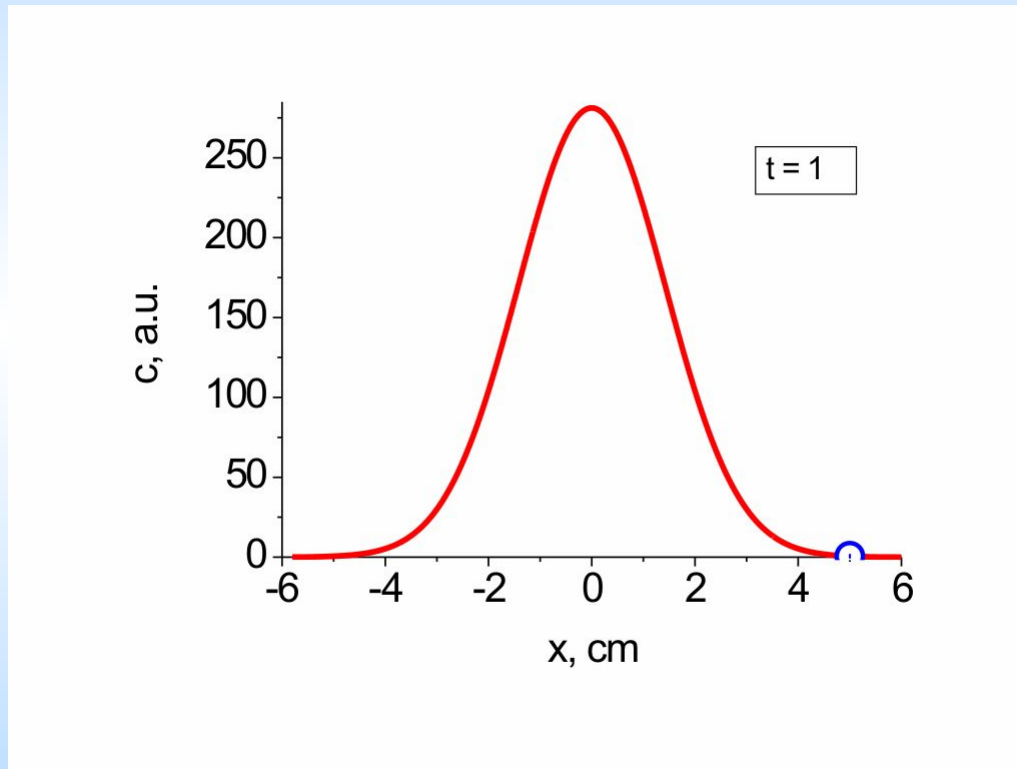
- Ширина:

$$\Delta = 2\sqrt{4Dt}$$

- Концентрация в произвольной точке  $x$  со временем возрастает, достигает экстремума при  $t = x^2/2D$ , а затем убывает

# Частные случаи

- Бесконечно тонкий слой

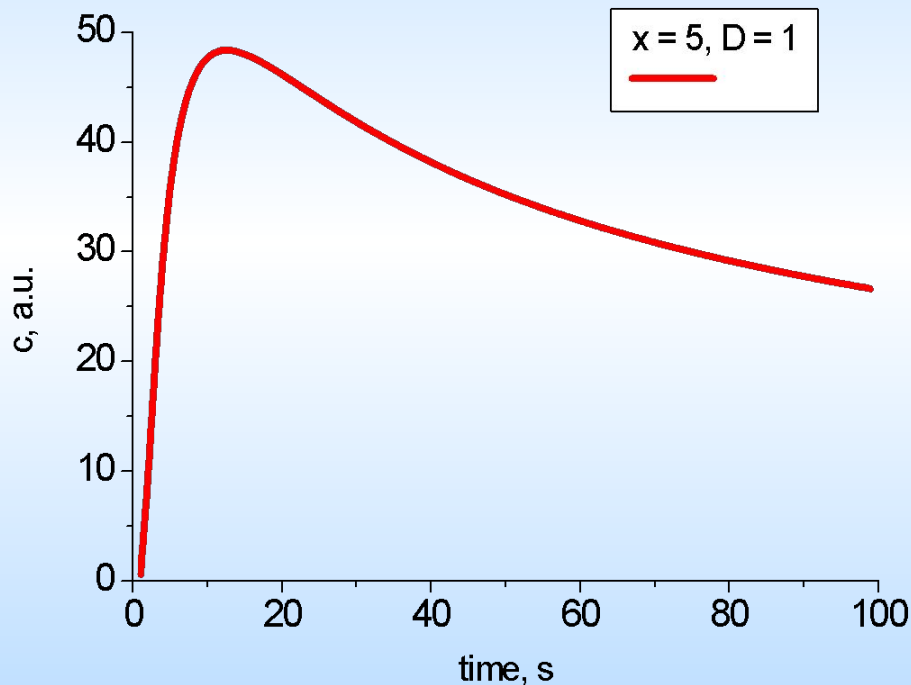


- Концентрация в произвольной точке  $x = 5$



# Частные случаи

- Бесконечно тонкий слой



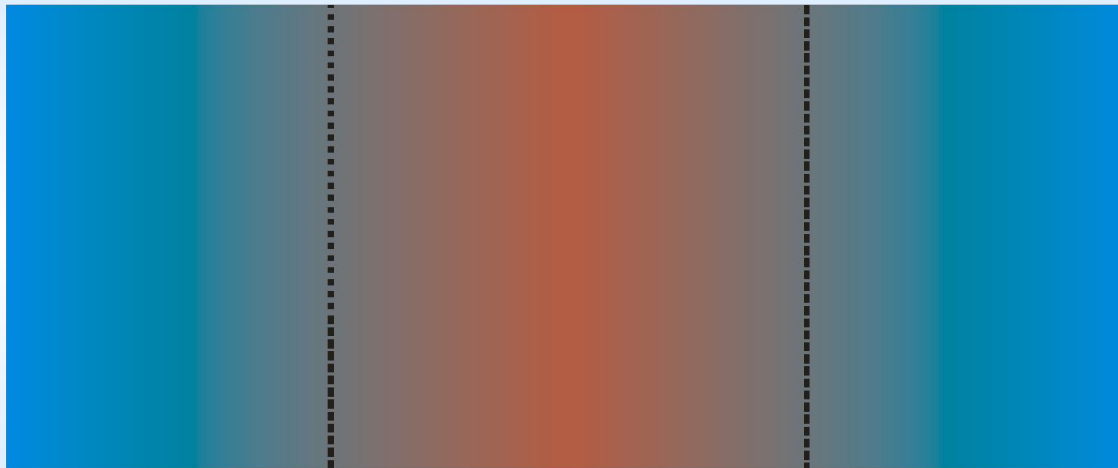
$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \left(-\frac{1}{2t} + \frac{x^2}{4Dt^2}\right)$$

- Концентрация в произвольной точке  $x$  со временем возрастает, достигает экстремума при  $t = x^2/2D$ , а затем убывает

# Частные случаи

- Бесконечно тонкий слой

$$x = -(2Dt)^{1/2} \quad x = 0 \quad x = (2Dt)^{1/2}$$



$$\frac{\partial c}{\partial t} > 0$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} < 0$$

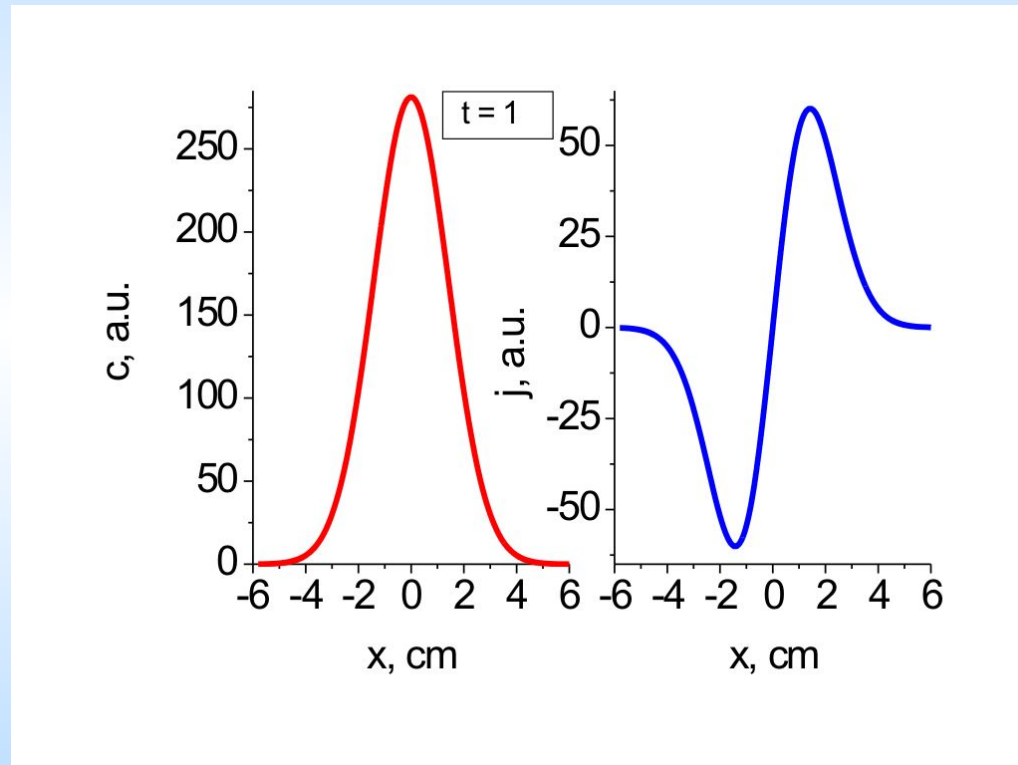
$$\frac{\partial c}{\partial t} > 0$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x} = 0$$

# Частные случаи

- Бесконечно тонкий слой



- Поток: 
$$j(x, t) = -D \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{N}{2t\sqrt{4\pi Dt}} x \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

$$j(0, t) = 0$$

$$j(\sqrt{2Dt}, t) = \max$$

# Частные случаи

- Слой конечной толщины



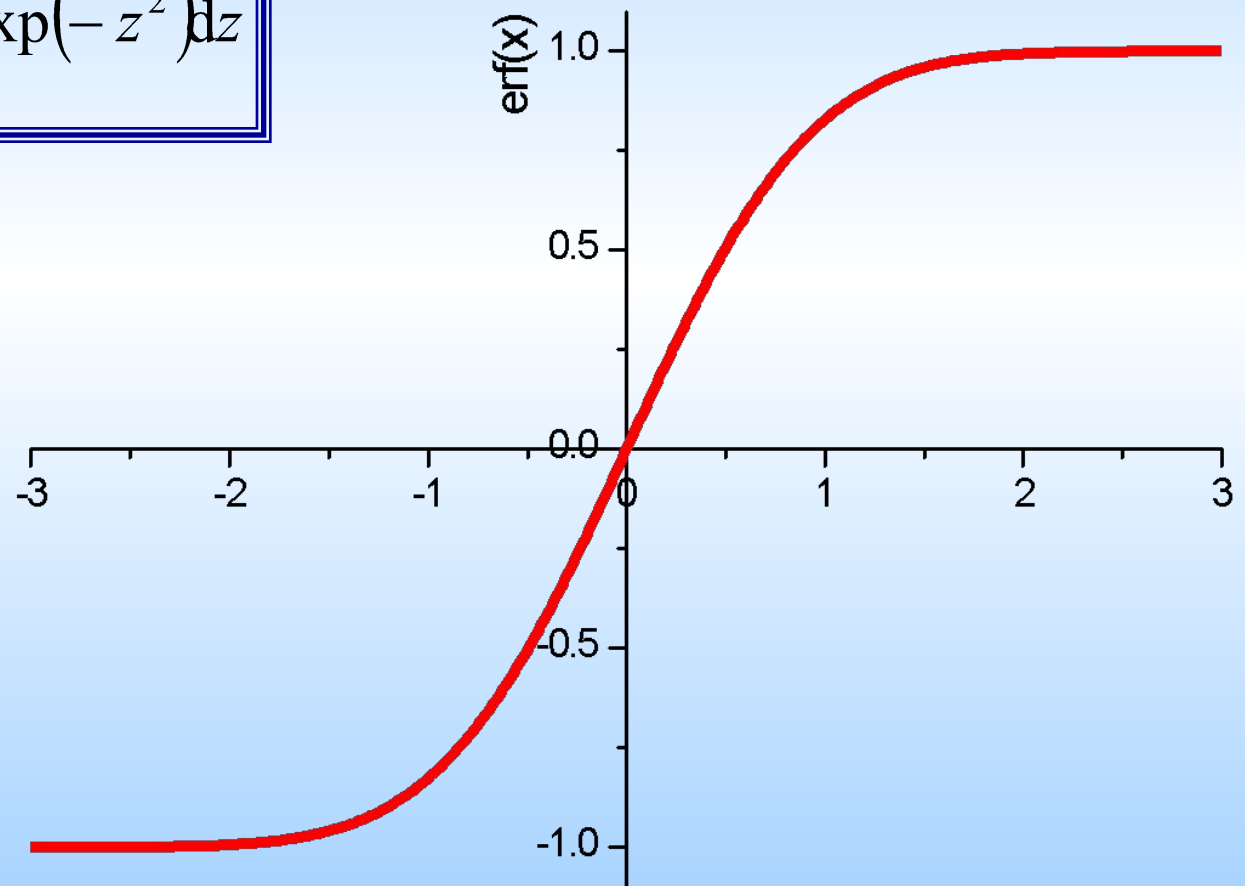
$$c(x, t) = \frac{c_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-h}^h \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right) d\xi =$$
$$\frac{c_0}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{-h-x}{\sqrt{4Dt}}}^{\frac{h-x}{\sqrt{4Dt}}} \exp(-z^2) dz =$$

$$\frac{c_0}{2} \left( \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{h+x}{\sqrt{4Dt}}} \exp(-z^2) dz + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{h-x}{\sqrt{4Dt}}} \exp(-z^2) dz \right)$$

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} \left( \operatorname{erf} \frac{h+x}{\sqrt{4Dt}} + \operatorname{erf} \frac{h-x}{\sqrt{4Dt}} \right)$$

# Функция ошибок

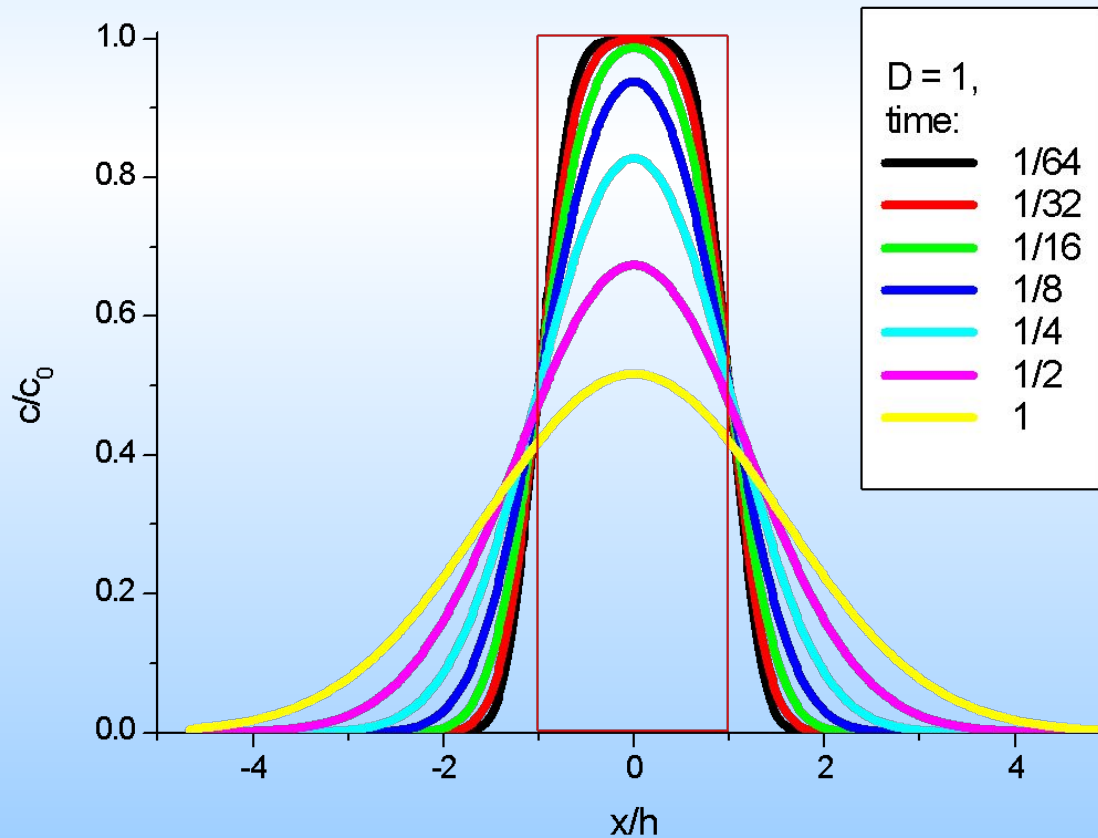
$$\operatorname{erf}(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y \exp(-z^2) dz$$



# Частные случаи

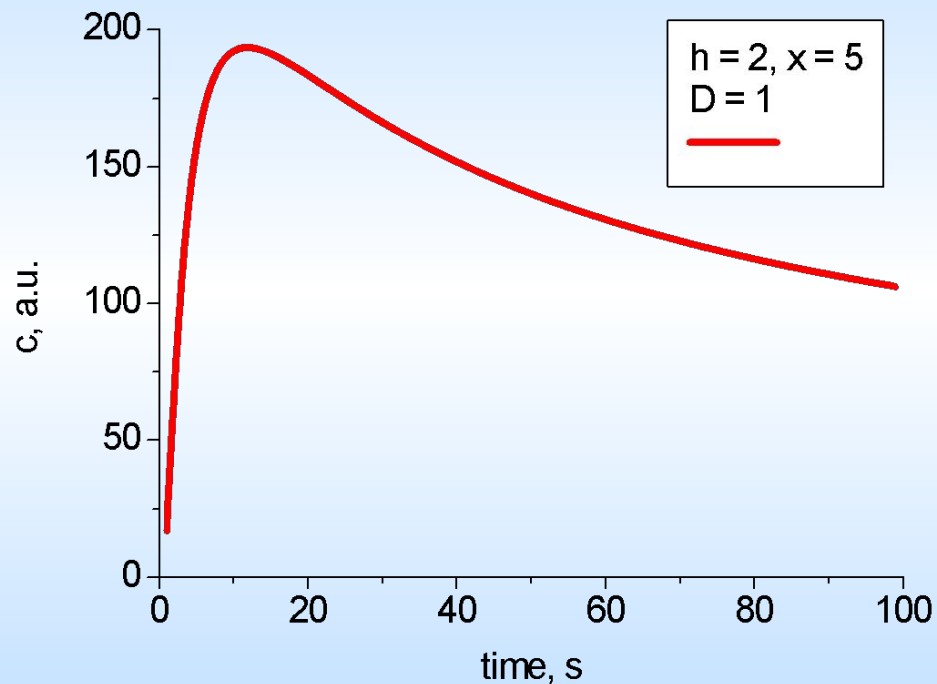
- Слой конечной толщины

$$c(x,t) = \frac{c_0}{2} \left( \operatorname{erf} \frac{h+x}{\sqrt{4Dt}} + \operatorname{erf} \frac{h-x}{\sqrt{4Dt}} \right)$$



# Частные случаи

- Слой конечной толщины



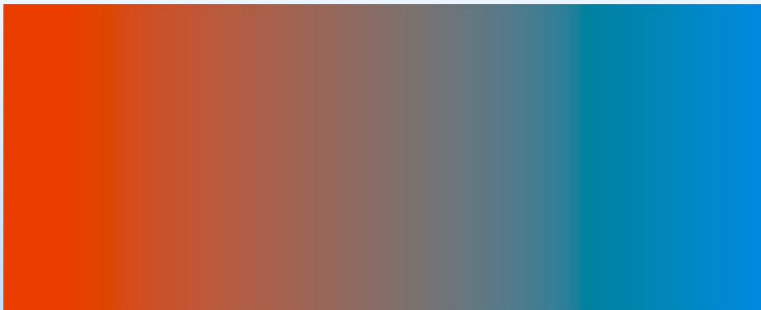
- Концентрация в произвольной точке  $x$  со временем возрастает, достигает экстремума, а затем убывает

# Частные случаи

- Ступенчатое распределение



$$c(x, t) = \frac{c_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^0 \exp\left(-\frac{(x-\xi)^2}{4Dt}\right) d\xi = \frac{c_0}{2} \left(1 - \operatorname{erf} \frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right)$$

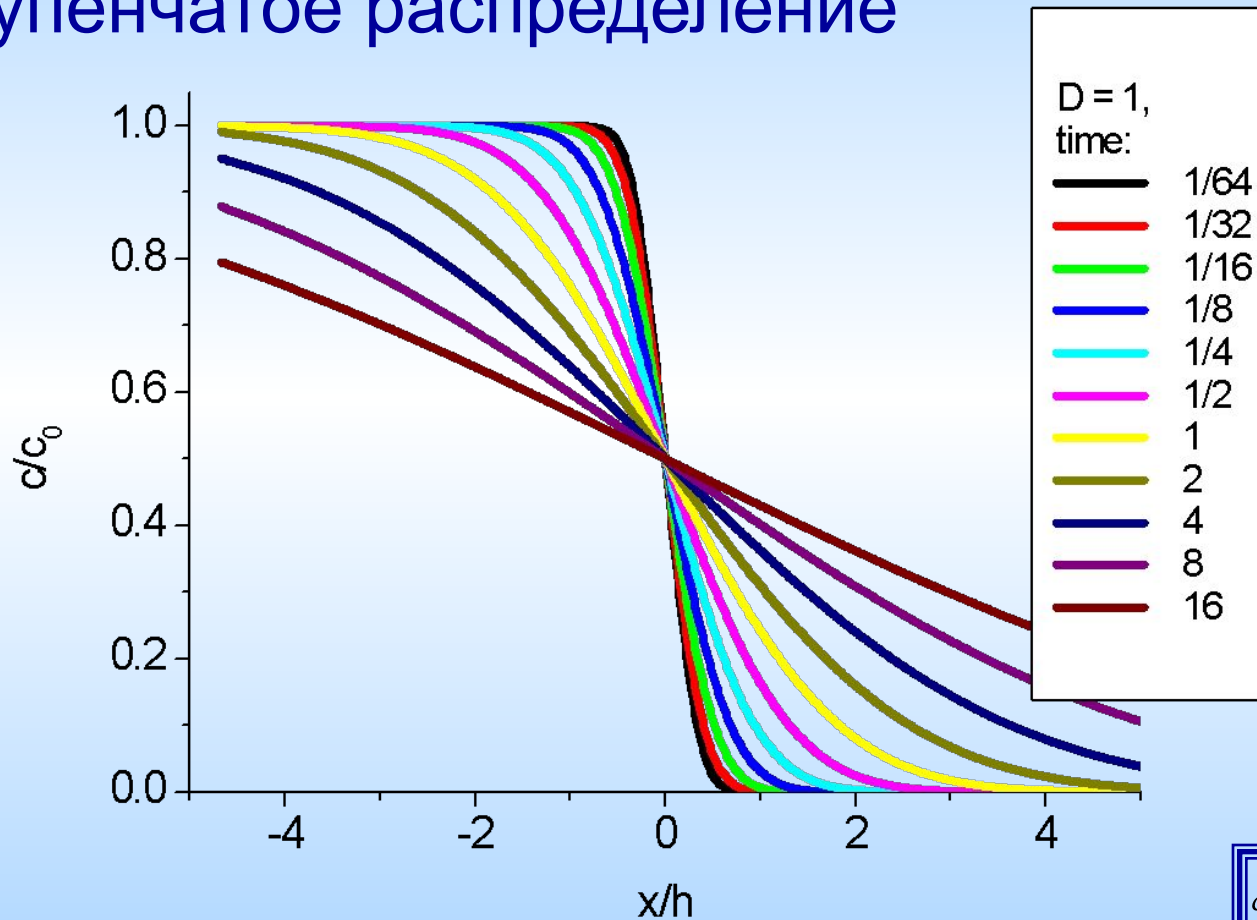


$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} \operatorname{erfc} \frac{x}{\sqrt{4Dt}}$$



# Частные случаи

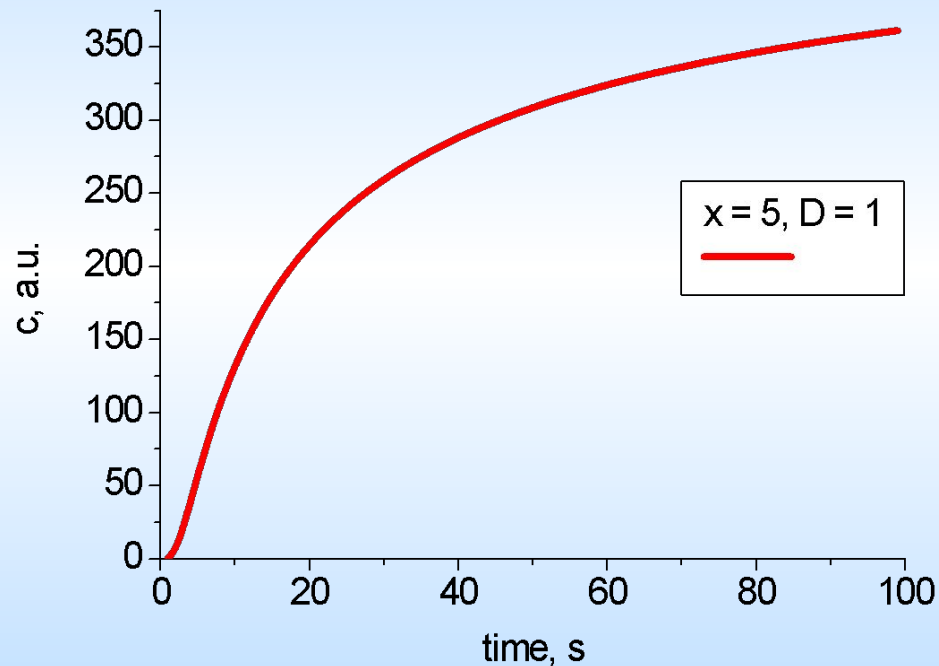
- Ступенчатое распределение



$$c(x,t) = \frac{c_0}{2} \operatorname{erfc} \frac{x}{\sqrt{4Dt}}$$

# Частные случаи

- Ступенчатое распределение



- Концентрация в произвольной точке  $x$  со временем возрастает и в пределе стремится к значению  $c_0/2$

# Диффузия в полуограниченном теле

Граница



$$c(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \left\{ \int_{-\infty}^0 c_1(\xi,0) \exp\left[-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}\right] d\xi + \int_0^{\infty} c(\xi,0) \exp\left[-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}\right] d\xi \right\}$$

$$c(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^{\infty} \left\{ c(\xi,0) \exp\left[-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}\right] + c_1(-\xi,0) \exp\left[-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}\right] \right\} d\xi$$

$$c_1(-\xi,0) - ?$$

**Неизвестная функция должна быть определена из граничных условий**

# Диффузия в полугограниченном теле

- Непроницаемая граница:

$$j(0, t) = -D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{1}{2Dt\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^{\infty} \left\{ (\xi - x)c(\xi, 0) \exp\left[-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right] - (\xi + x)c_1(-\xi, 0) \exp\left[-\frac{(\xi + x)^2}{4Dt}\right] \right\} d\xi$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{1}{2Dt\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^{\infty} \xi (c(\xi, 0) - c_1(-\xi, 0)) \exp\left[-\frac{\xi^2}{4Dt}\right] d\xi = 0$$

$$c_1(-\xi, 0) = c(\xi, 0)$$

$\Rightarrow$

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^{\infty} c(\xi, 0) \left\{ \exp\left[-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right] + \exp\left[-\frac{(\xi + x)^2}{4Dt}\right] \right\} d\xi$$

# Диффузия в полуограниченном теле

- десорбция:
- (поглощающая граница)

$$c(0, t) = c|_{x=0} = 0$$

$$c(0, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^{\infty} [c(\xi, 0) + c_1(-\xi, 0)] \exp\left(-\frac{\xi^2}{4Dt}\right) d\xi = 0$$

$$c_1(-\xi, 0) = -c(\xi, 0)$$

$$c(0, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^{\infty} c(\xi, 0) \left\{ \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt}\right) - \exp\left(-\frac{(\xi + x)^2}{4Dt}\right) \right\} d\xi$$

# Диффузия в полуограниченном теле

- Десорбция
- равномерное начальное распределение

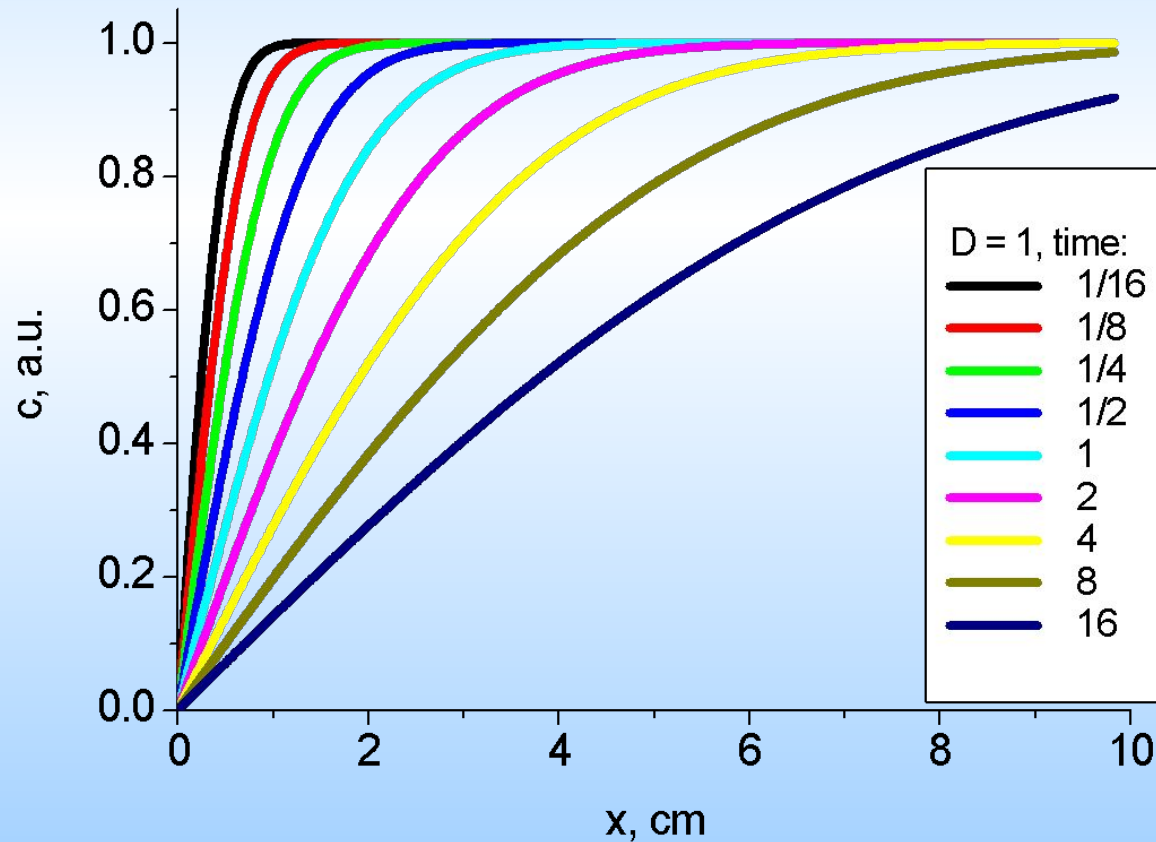
$$c(x,0) = \text{const} = c_0$$

$$\begin{aligned} c(x,t) &= \frac{c_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^\infty \left\{ \exp\left(-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}\right) - \exp\left(-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}\right) \right\} d\xi = \\ &= \frac{c_0}{\sqrt{\pi}} \left( \int_{\frac{x}{\sqrt{4Dt}}}^\infty \exp(-z^2) dz - \int_{\frac{x}{\sqrt{4Dt}}}^\infty \exp(-z^2) dz \right) \end{aligned}$$

$$c(x,t) = c_0 \operatorname{erf} \frac{x}{\sqrt{4Dt}}$$

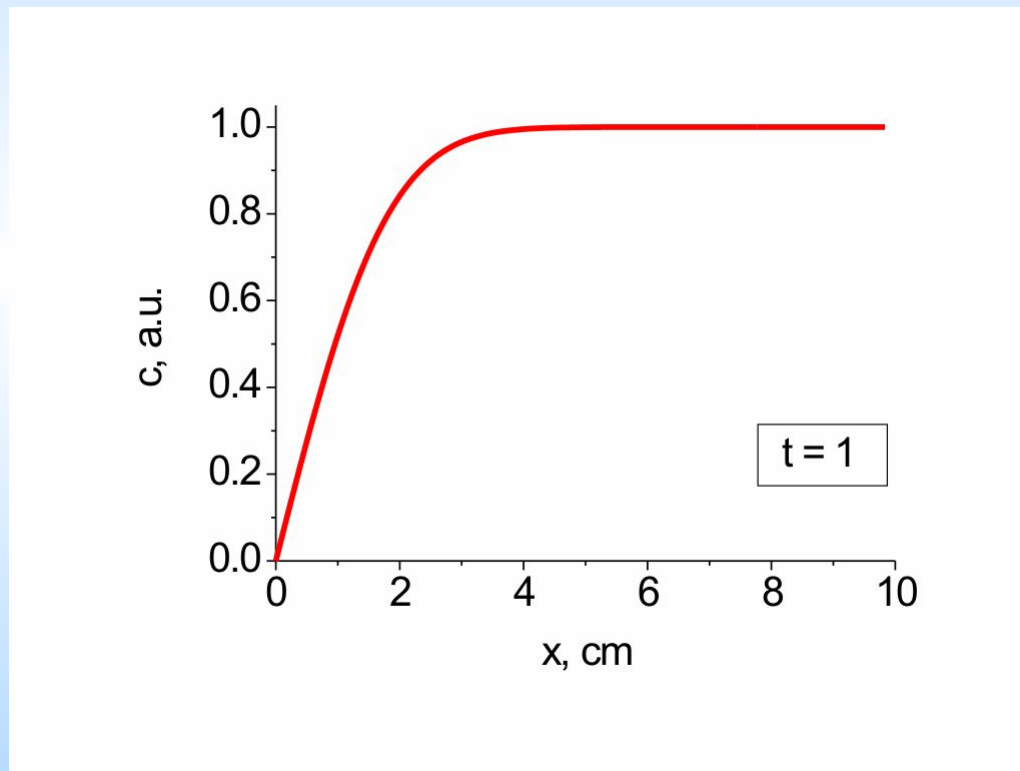
# Диффузия в полугограниченном теле

- Десорбция, равномерное начальное распределение



# Диффузия в полуограниченном теле

- Десорбция, равномерное начальное распределение





# Диффузия в полуограниченном теле

- Десорбция, равномерное начальное распределение
- Поток:

$$j(x, t)|_{x=0} = -D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} = -\frac{Dc_0}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \Big|_{x=0} = -c_0 \sqrt{\frac{D}{\pi t}}$$

- Число частиц, покинувших тело:

$$N(t) = \int_0^t j(x, t) \Big|_{x=0} dt = c_0 \sqrt{\frac{4Dt}{\pi}}$$