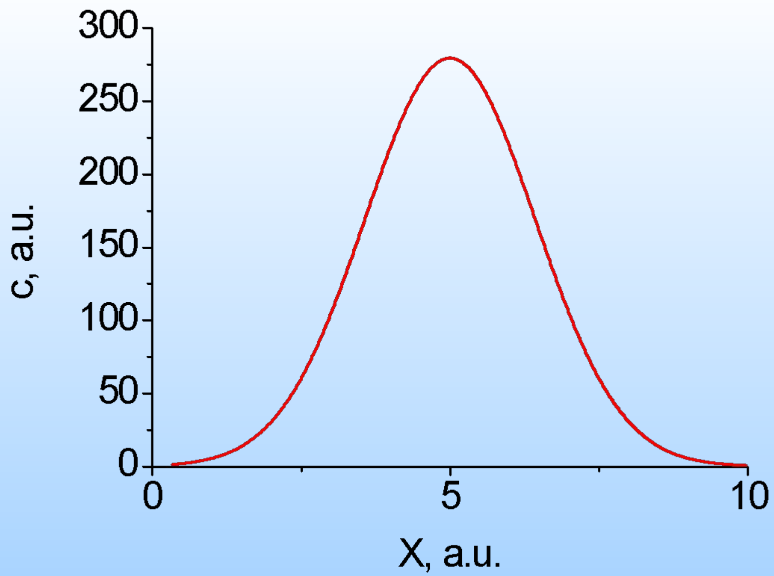
Диффузия в неограниченном теле

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

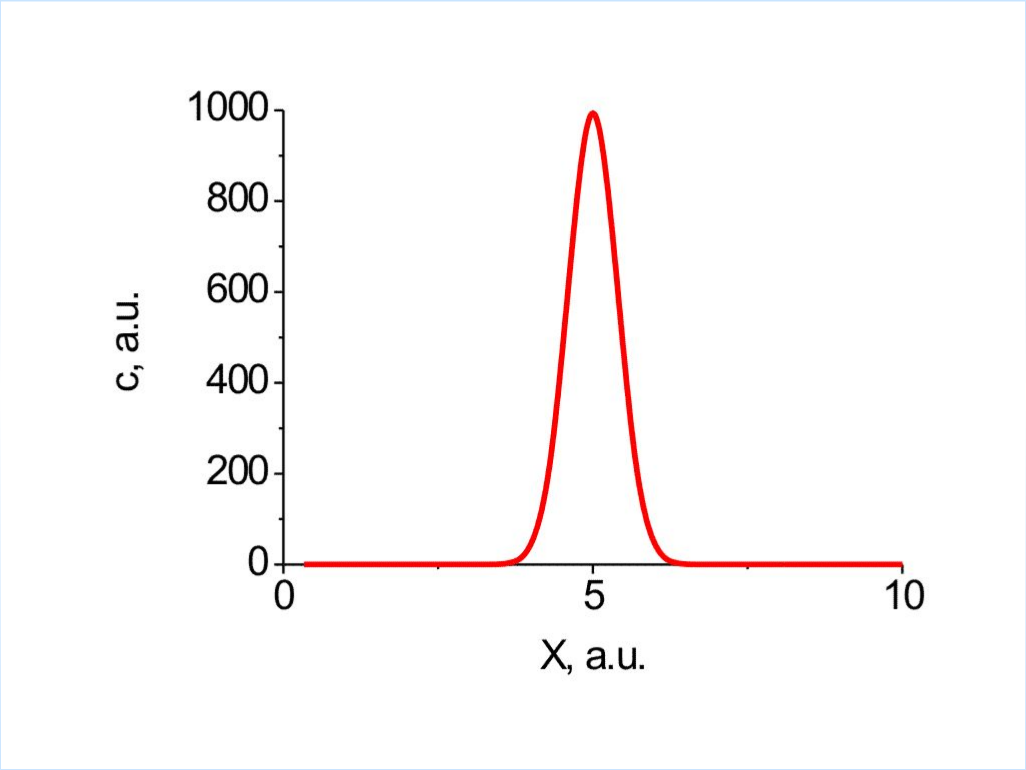
$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$



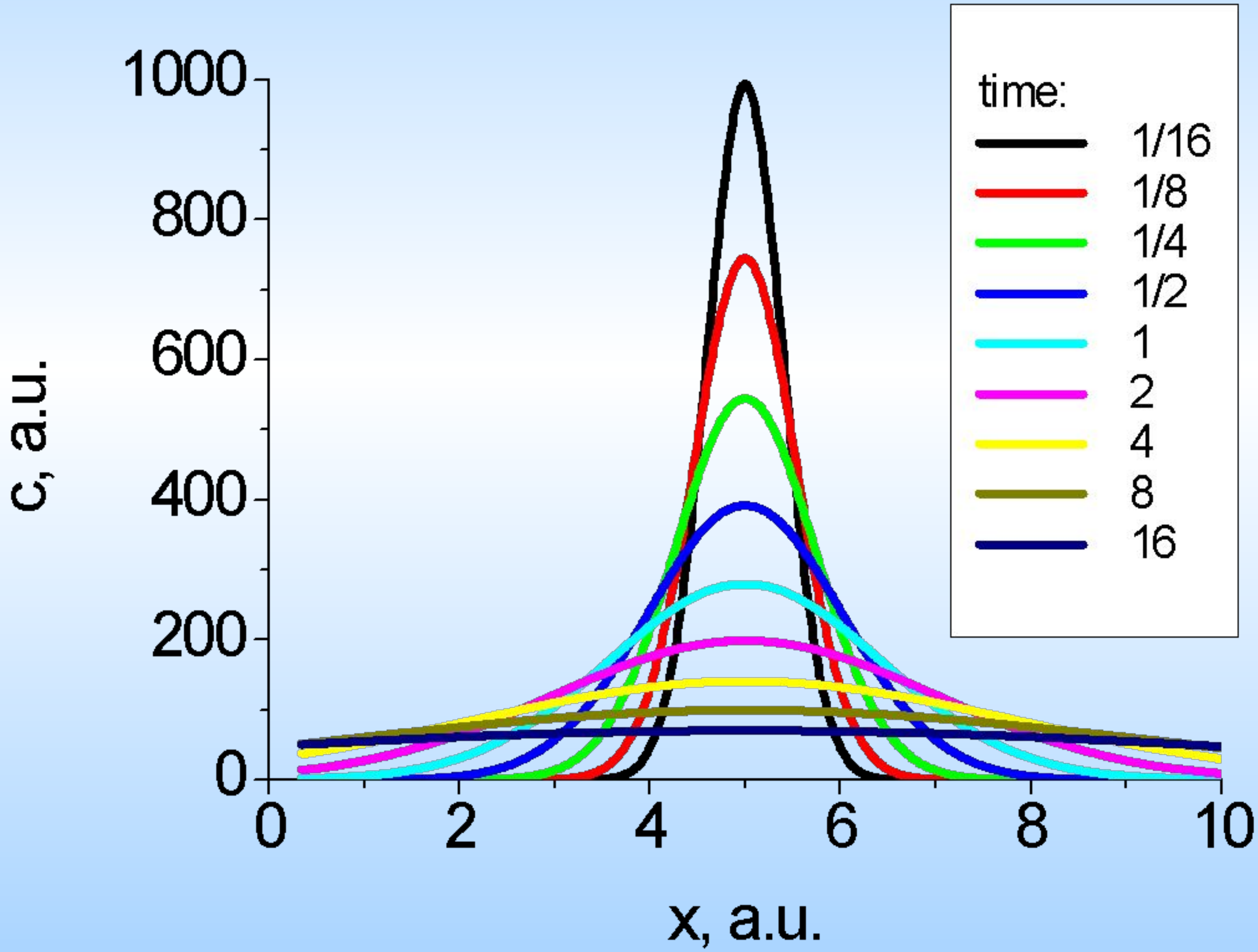
$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} c\,dx$$

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

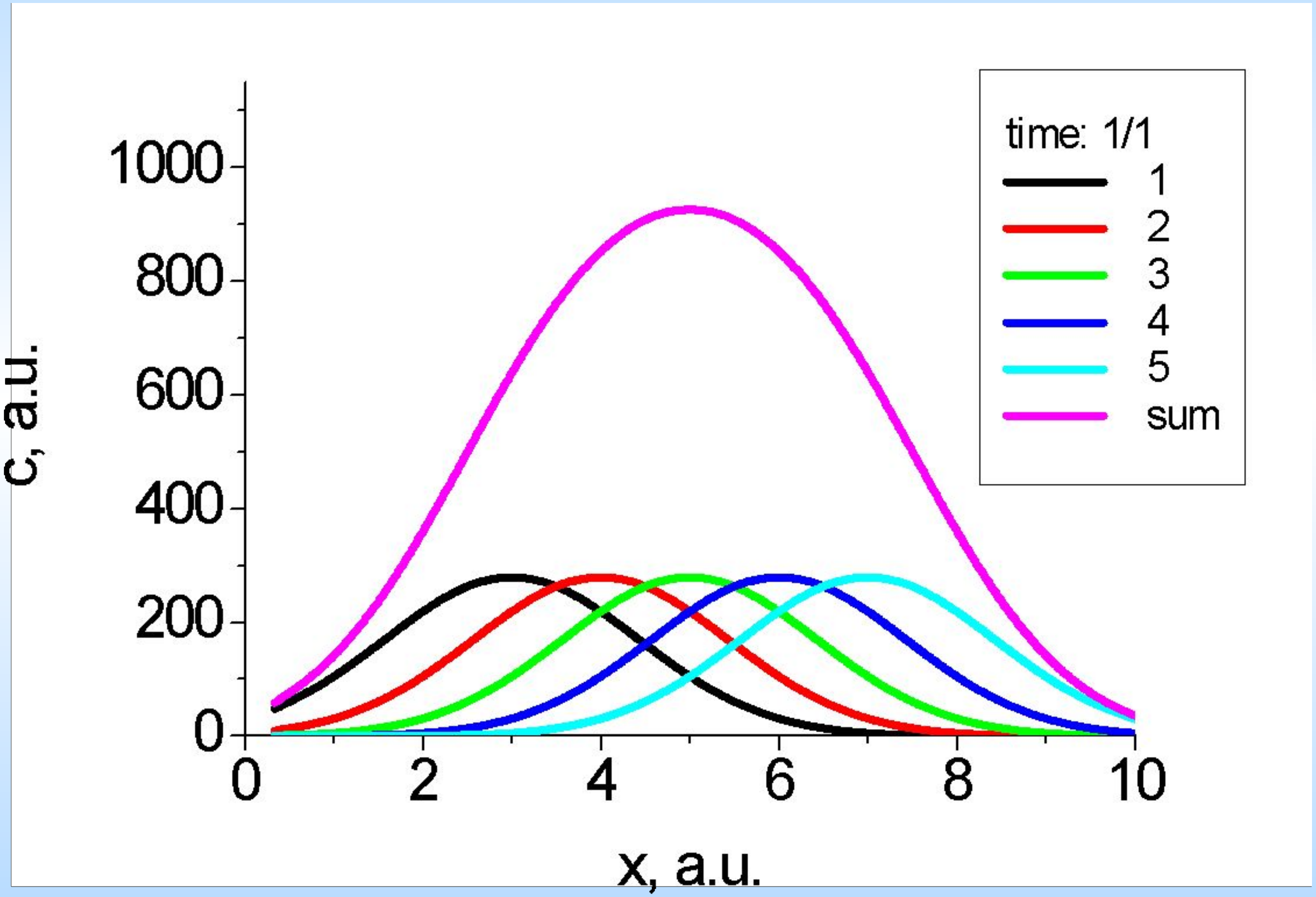
Мгновенный точечный источник



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

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

$$-\infty \le x \le \infty$$

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

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

- Метод разделения переменных:

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

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

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

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

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

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

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

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

Интеграл по источникам, строгий вывод

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

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

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

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

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

Начальные условия

- замена переменной:

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

- тогда:

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

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

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:

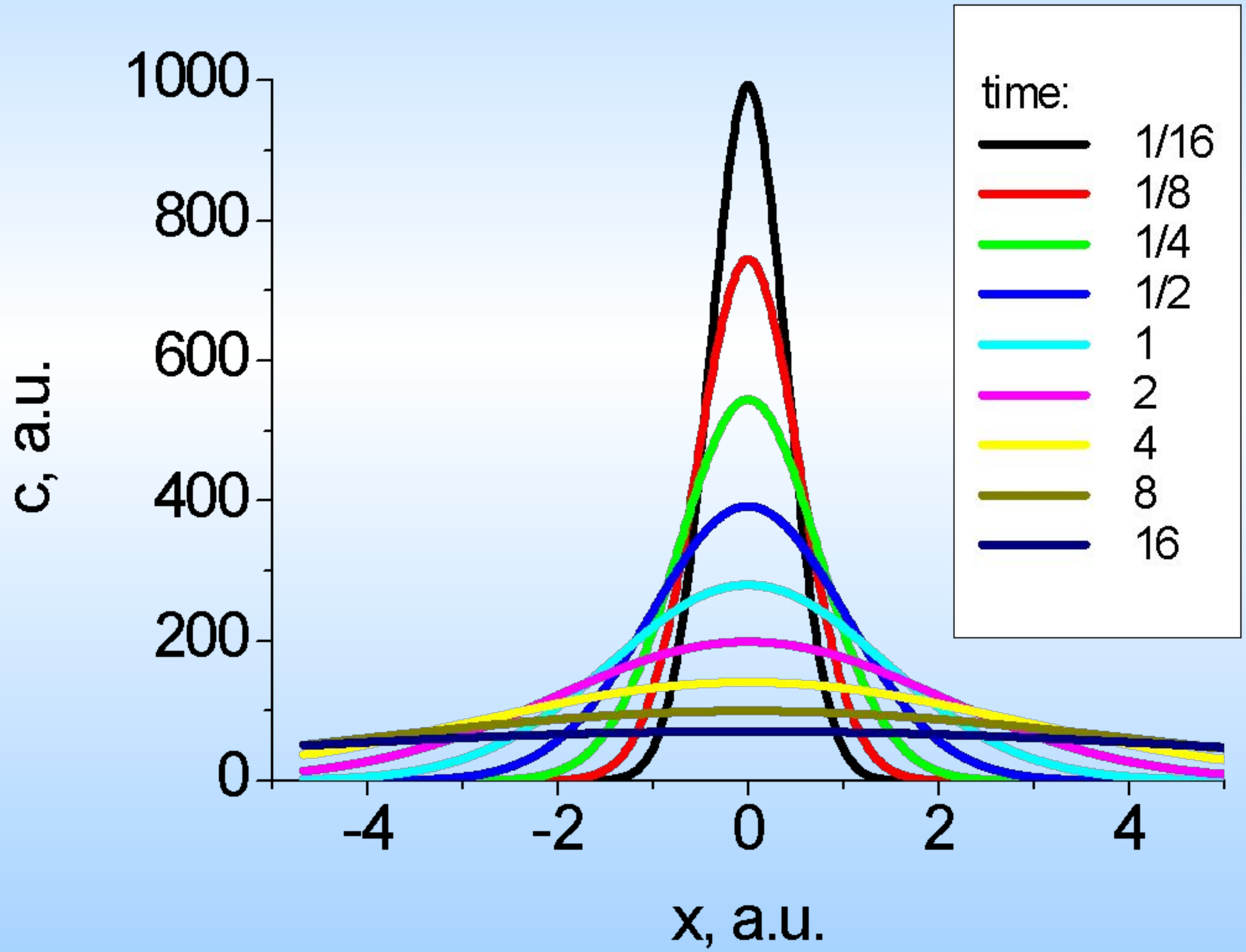
$$c(-x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\int_{-\infty}^{\infty}c(\xi,0)\exp\left(-\frac{(\xi+x)^2}{4Dt}\right)d\xi=$$

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

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

$$\boxed{c(-x,t)=c(x,t)}$$

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

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

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

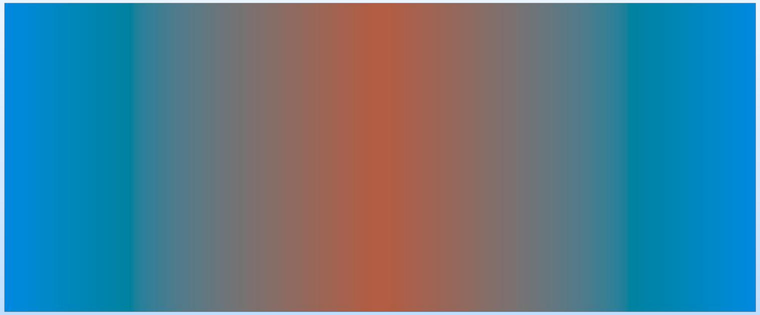
$$\int_{-\infty}^{0}c(\xi,0)\exp\left(-\frac{(x-\xi)^2}{4Dt}\right)d\xi=\int_{0}^{\infty}c(-z,0)\exp\left(-\frac{(x+z)^2}{4Dt}\right)dz=\int_{0}^{\infty}c(z,0)\exp\left(-\frac{(x+z)^2}{4Dt}\right)dz$$

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

Частные случаи

- Бесконечно тонкий слой

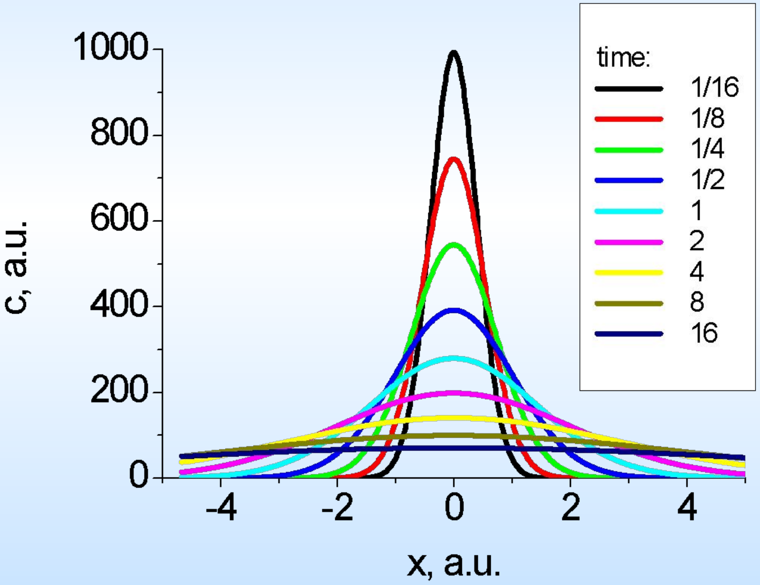
$$c(x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\frac{N}{2h}\int_{a-h}^{a+h}\exp\left(-\frac{(\xi-x)^2}{4Dt}\right)d\xi$$



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

Частные случаи

- Бесконечно тонкий слой



- Максимум:

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

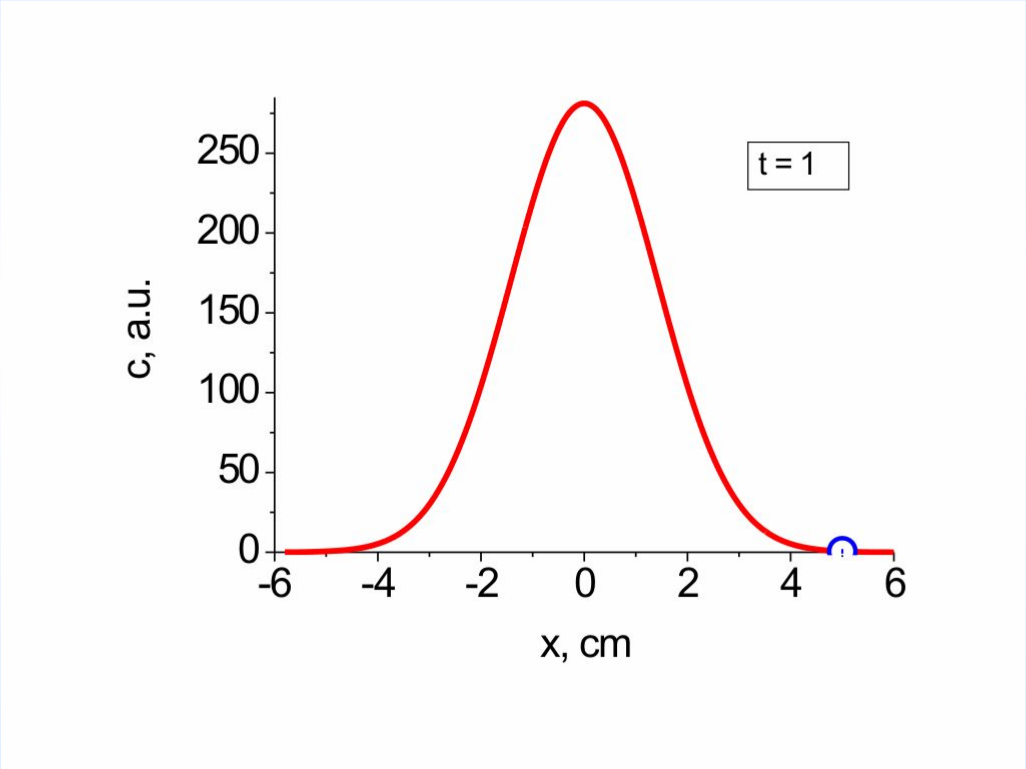
- Ширина:

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

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

Частные случаи

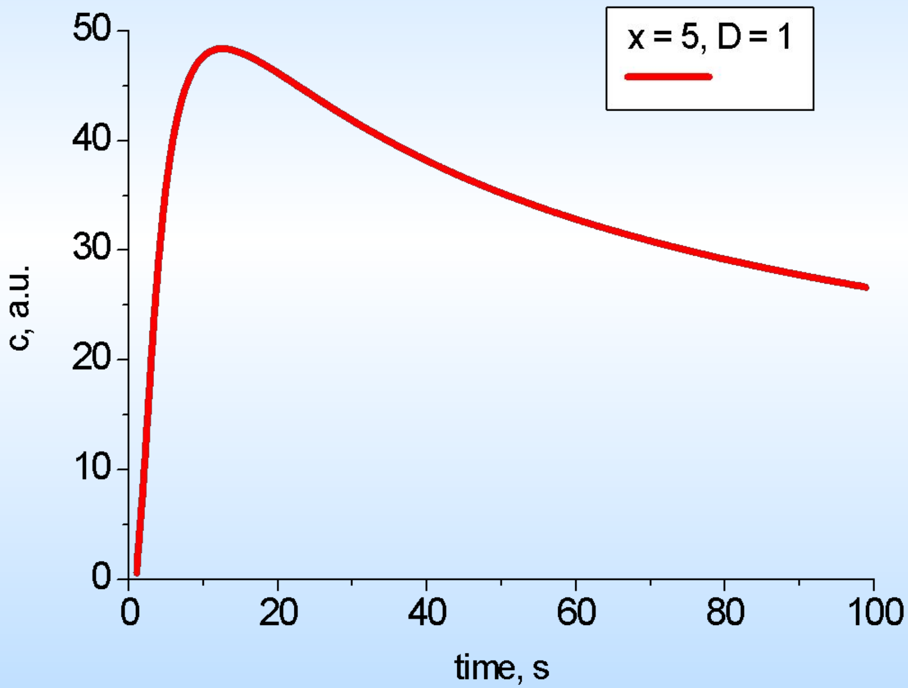
- Бесконечно тонкий слой



- Концентрация в произвольной точке *x* = 5

Частные случаи

- Бесконечно тонкий слой

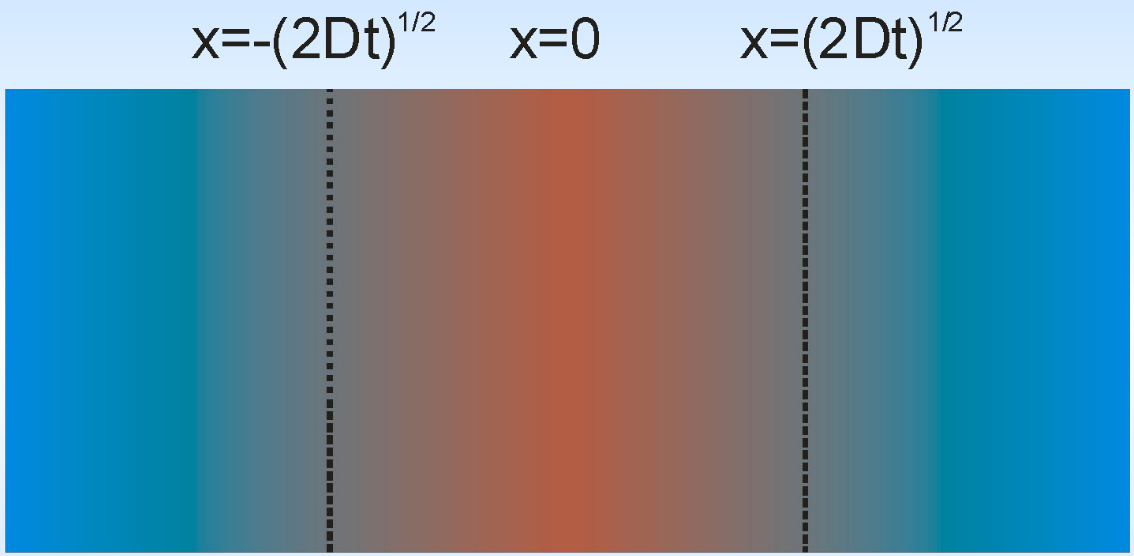


$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)\left(-\frac{1}{2t} + \frac{x^2}{4Dt^2}\right)$$

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

Частные случаи

- Бесконечно тонкий слой

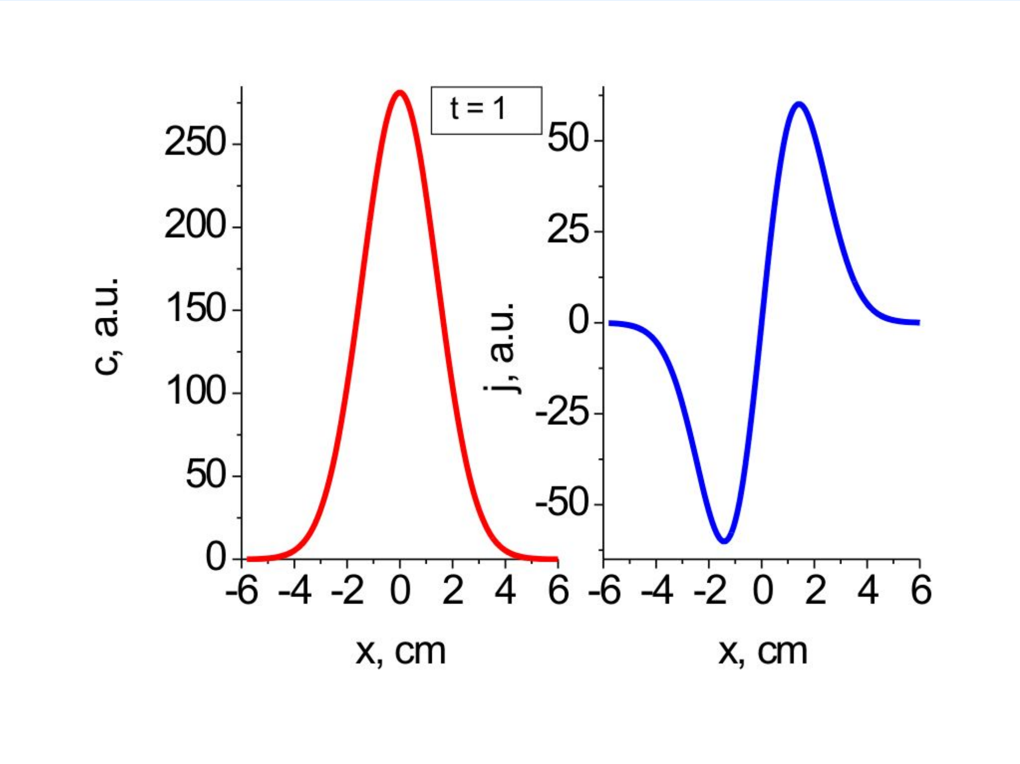


$$\frac{\partial c}{\partial t} > 0 \qquad \frac{\partial c}{\partial t} < 0 \qquad \frac{\partial c}{\partial t} > 0$$

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

Частные случаи

- Бесконечно тонкий слой



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

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

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

Частные случаи

- Слой конечной толщины

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

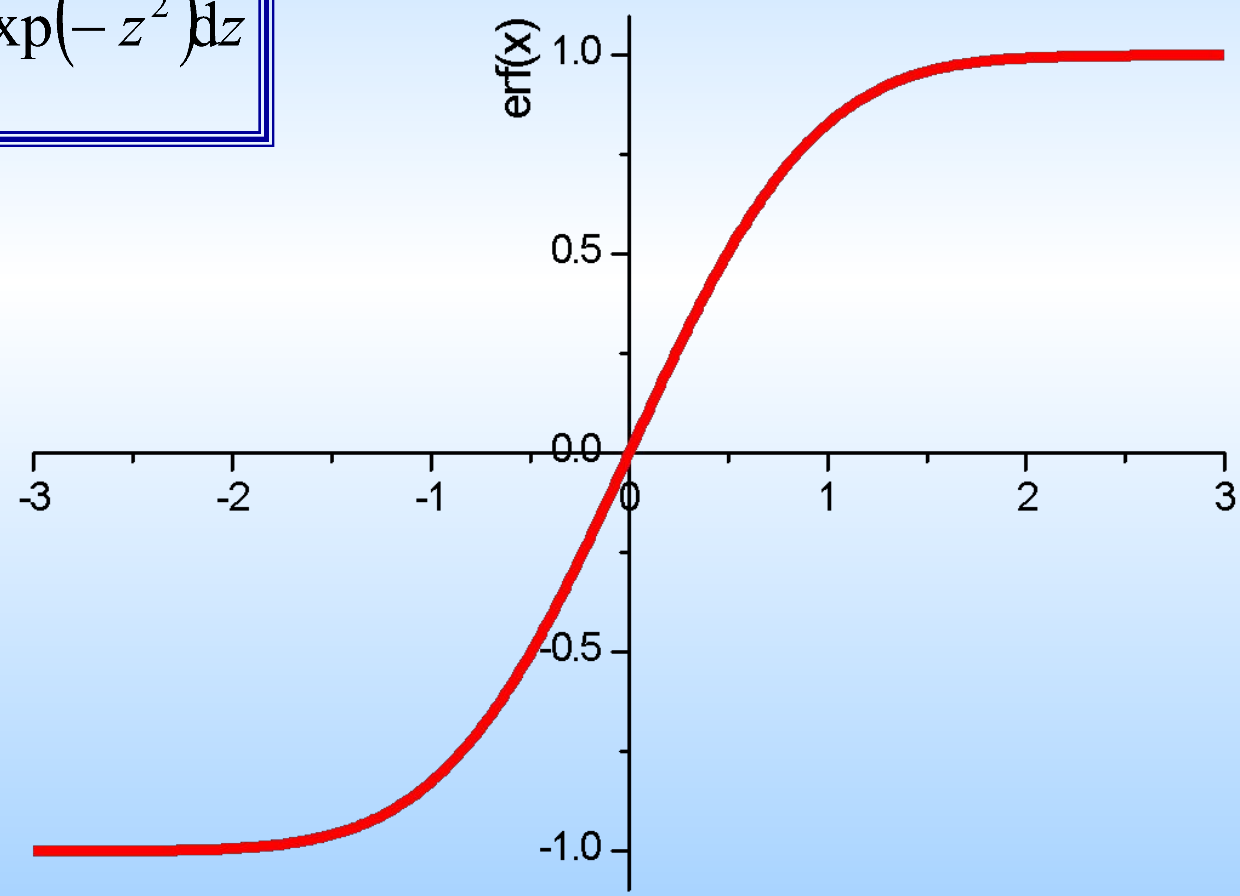
$$\frac{c_0}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{-h-x}{\sqrt{4Dt}}}^{\frac{h-x}{\sqrt{4Dt}}} \exp\left(-z^2\right) dz =$$

$$\frac{c_0}{2} \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{\frac{h+x}{\sqrt{4Dt}}} \exp\left(-z^2\right) dz + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{\frac{h-x}{\sqrt{4Dt}}} \exp\left(-z^2\right) dz \right)$$

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

Функция ошибок

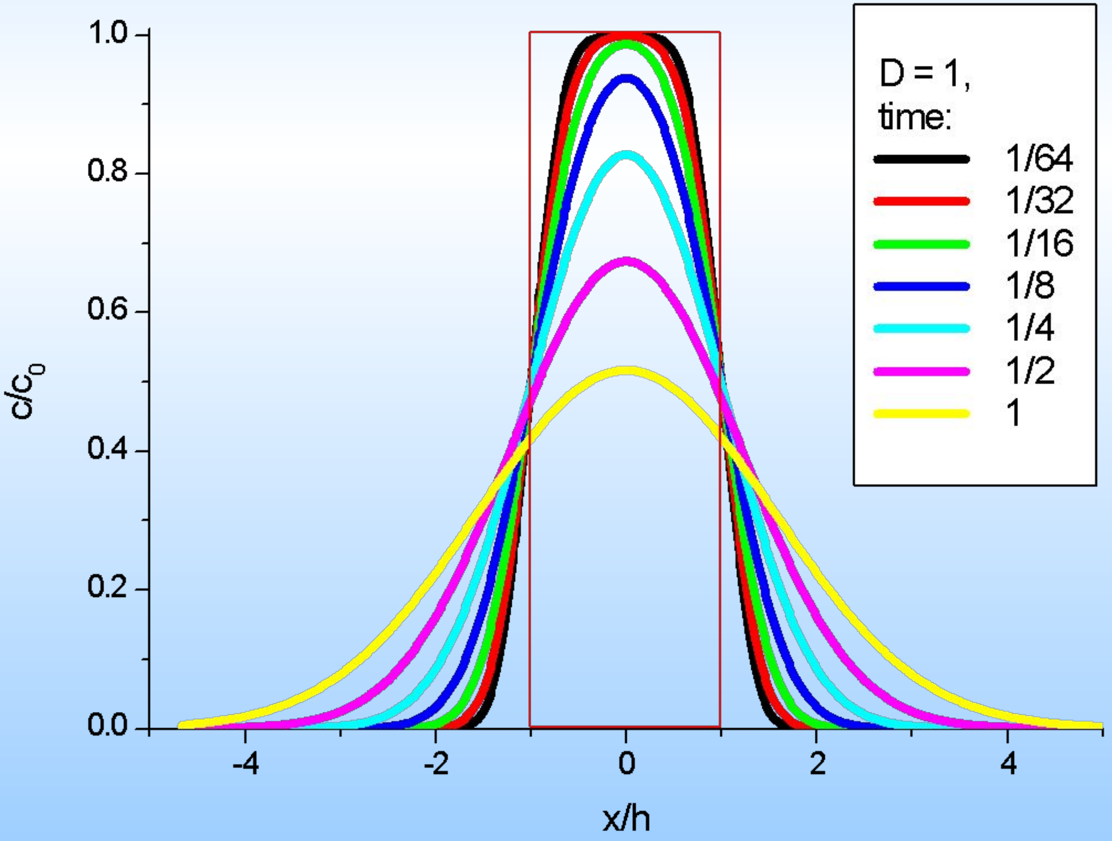
$$\operatorname{erf}(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y \exp\left(-z^2\right) \mathrm{d}z$$



Частные случаи

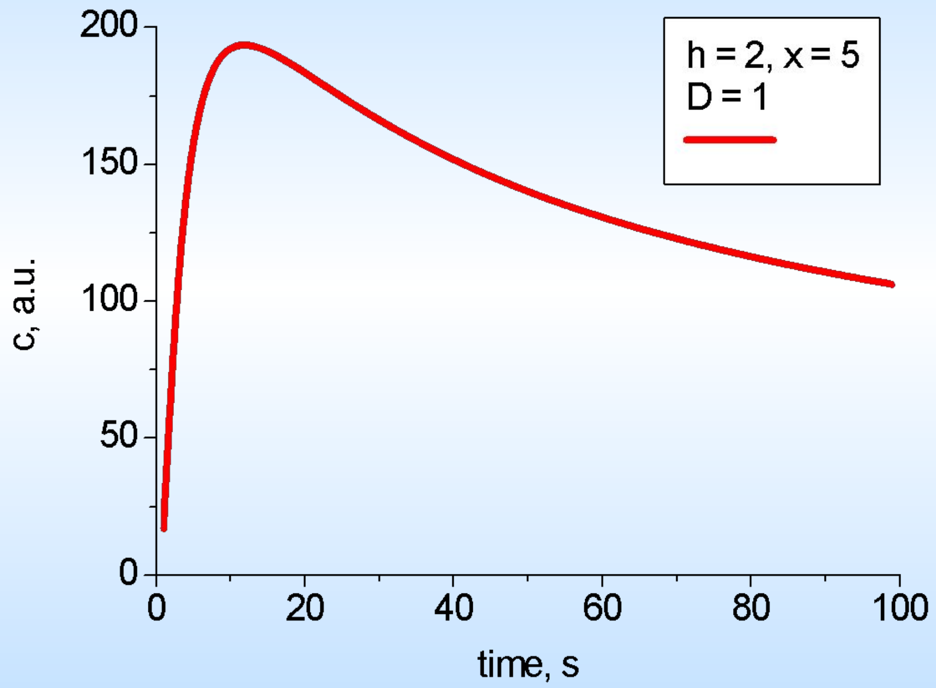
- Слой конечной толщины

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



Частные случаи

- Слой конечной толщины



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

Частные случаи

- Ступенчатое распределение

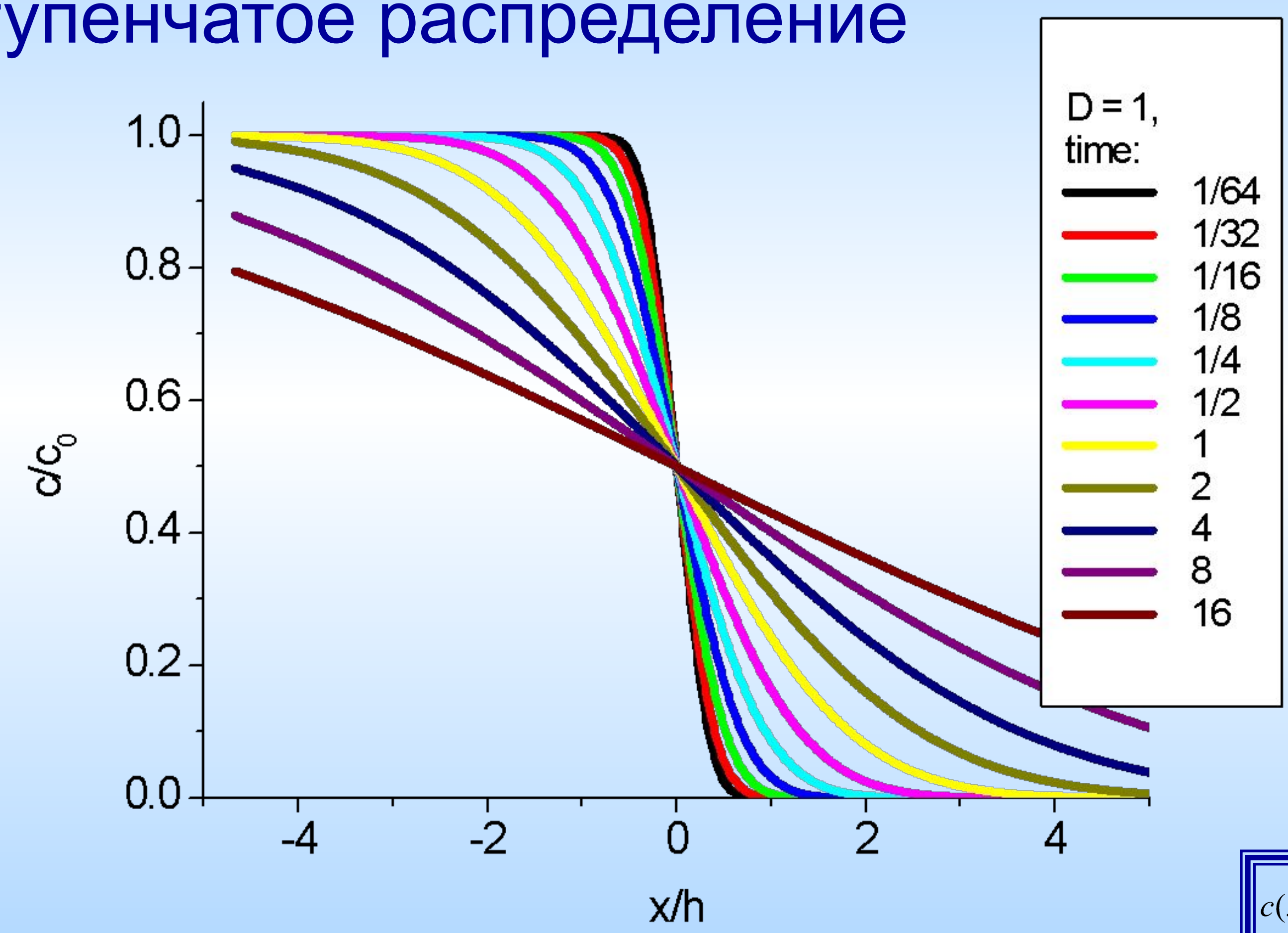
$$c(x,t)=\frac{c_0}{\sqrt{4\pi Dt}}\int_{-\infty}^{0}\exp\left(-\frac{(x-\xi)^2}{4Dt}\right)d\xi=$$

$$\frac{c_0}{2}\left(1-\operatorname{erf}\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right)$$

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

Частные случаи

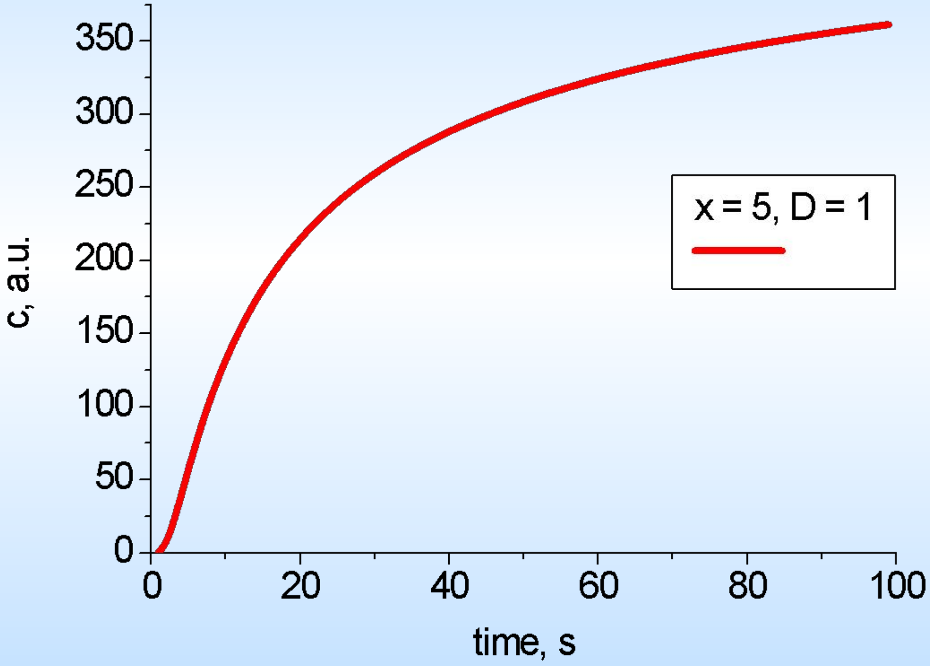
- Ступенчатое распределение



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

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

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

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

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

Неизвестная функция должна быть определена из граничных условий

Диффузия в полуограниченном теле

- Непроницаемая граница: $$\boxed{j(0,t) = -D\left.\frac{\partial c}{\partial x}\right|_{x=0} = 0}$$

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

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

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

$$\Rightarrow$$

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

Диффузия в полуограниченном теле

- **десорбция:**
- (поглощающая граница)

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

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

$$\boxed{c_1(-\xi,0) = -c(\xi,0)}$$

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

Диффузия в полуограниченном теле

- Десорбция
- равномерное начальное распределение

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

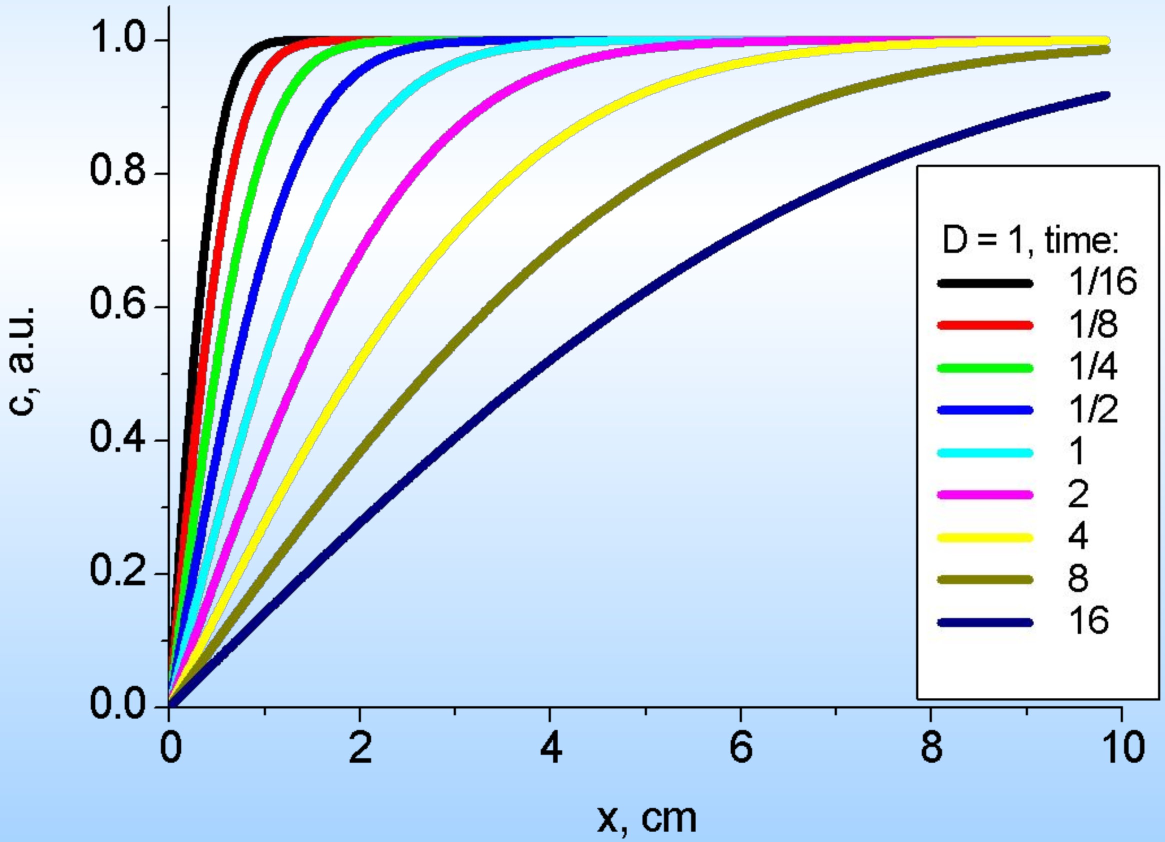
$$c(x,t) = \frac{c_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^{\infty} \left\{ \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt} \right) - \exp\left(-\frac{(\xi + x)^2}{4Dt} \right) \right\} d\xi =$$

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

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

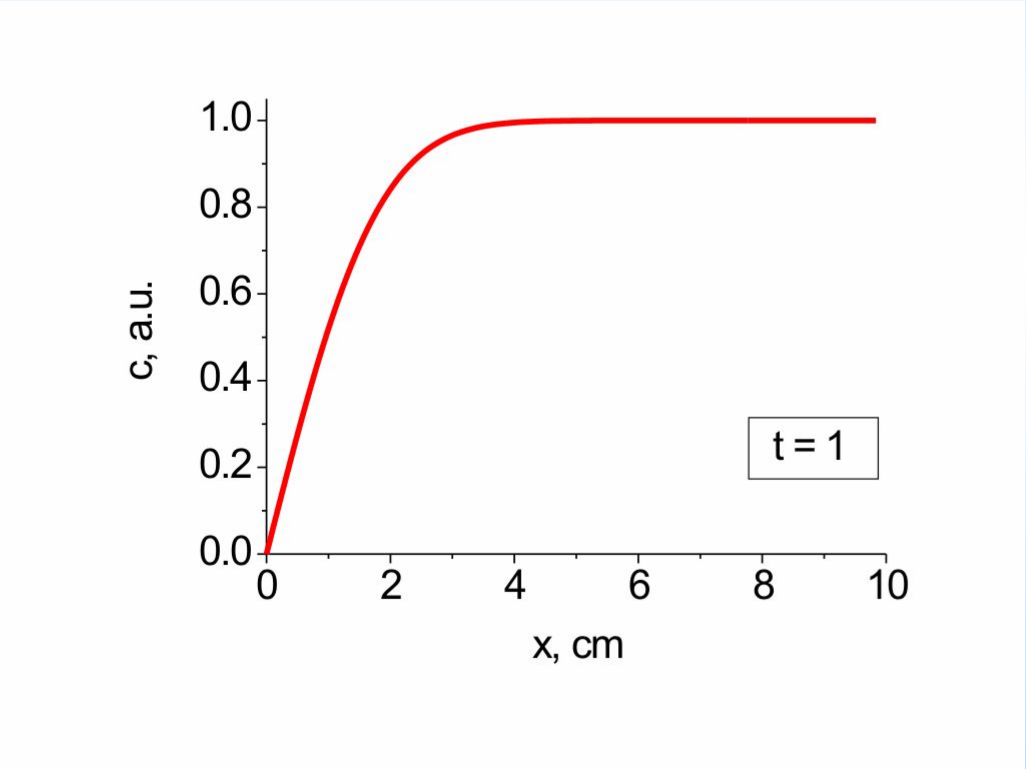
Диффузия в полуограниченном теле

- Десорбция, равномерное начальное распределение



Диффузия в полуограниченном теле

- Десорбция, равномерное начальное распределение



Диффузия в полуограниченном теле

- Десорбция, равномерное начальное распределение
- Поток:

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

- Число частиц, покинувших тело:

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