

# 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 полугограниченном теле

- Непроницаемая граница,
- Бесконечно тонкий слой

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

# Диффузия в полуограниченном теле

- Непроницаемая граница,
- Слой конечной толщины

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

# 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

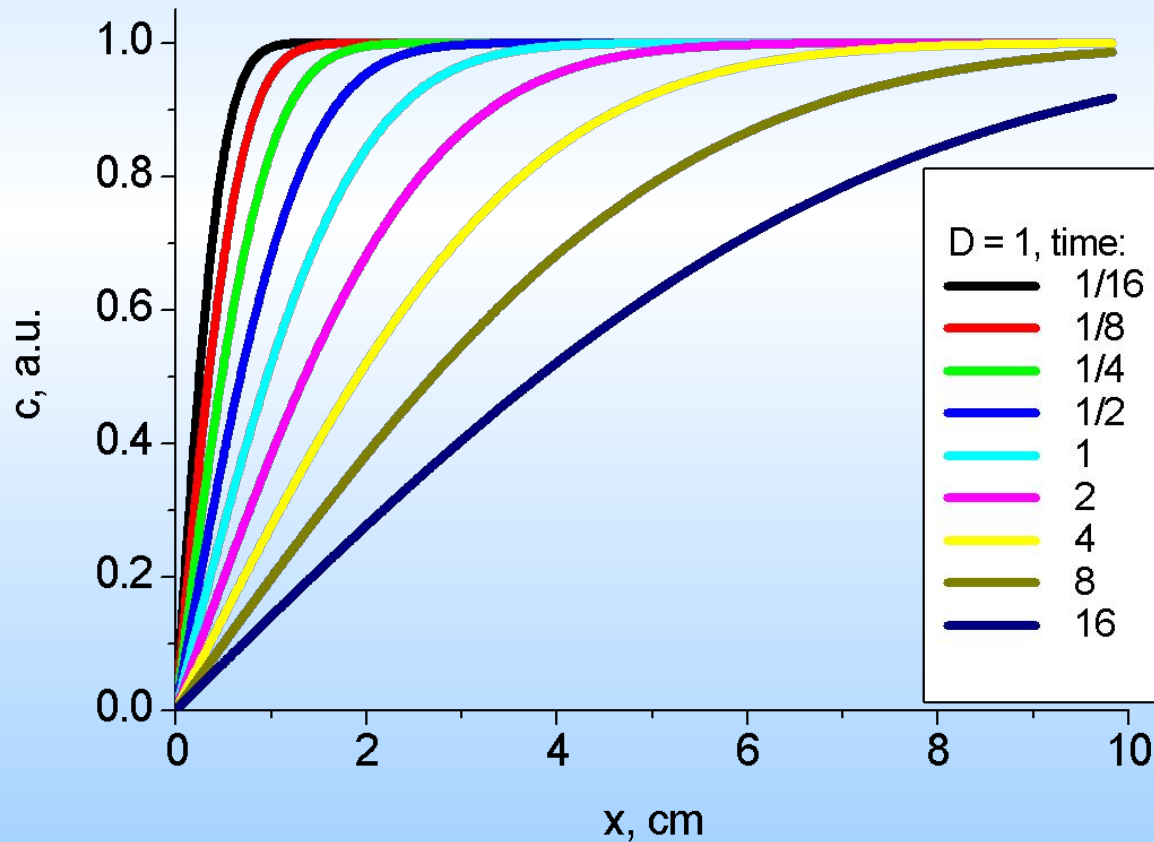
$$c(x,0) = \text{const} = c_0$$

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

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

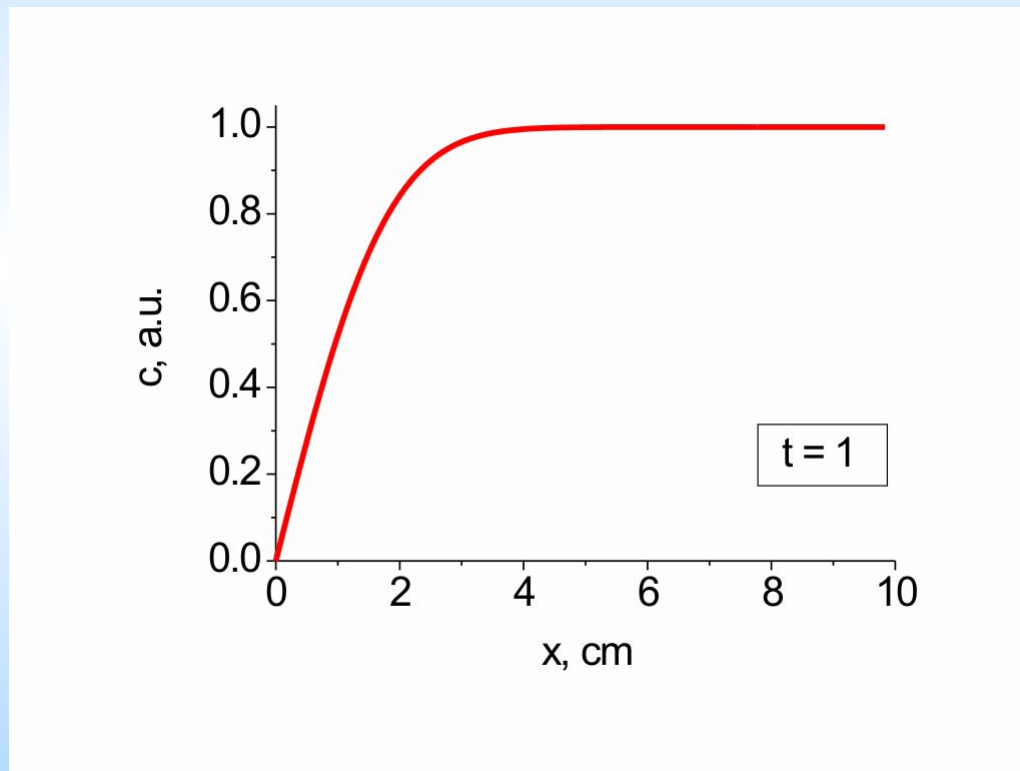
# Диффузия в полугограниченном теле

- Десорбция, равномерное начальное распределение



# Диффузия в полугограниченном 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:

$$N(t) = \int_0^t j(x, t) \Big|_{x=0} dt = 2c_0 \sqrt{\frac{Dt}{\pi}}$$

# Диффузия в полугограниченном теле

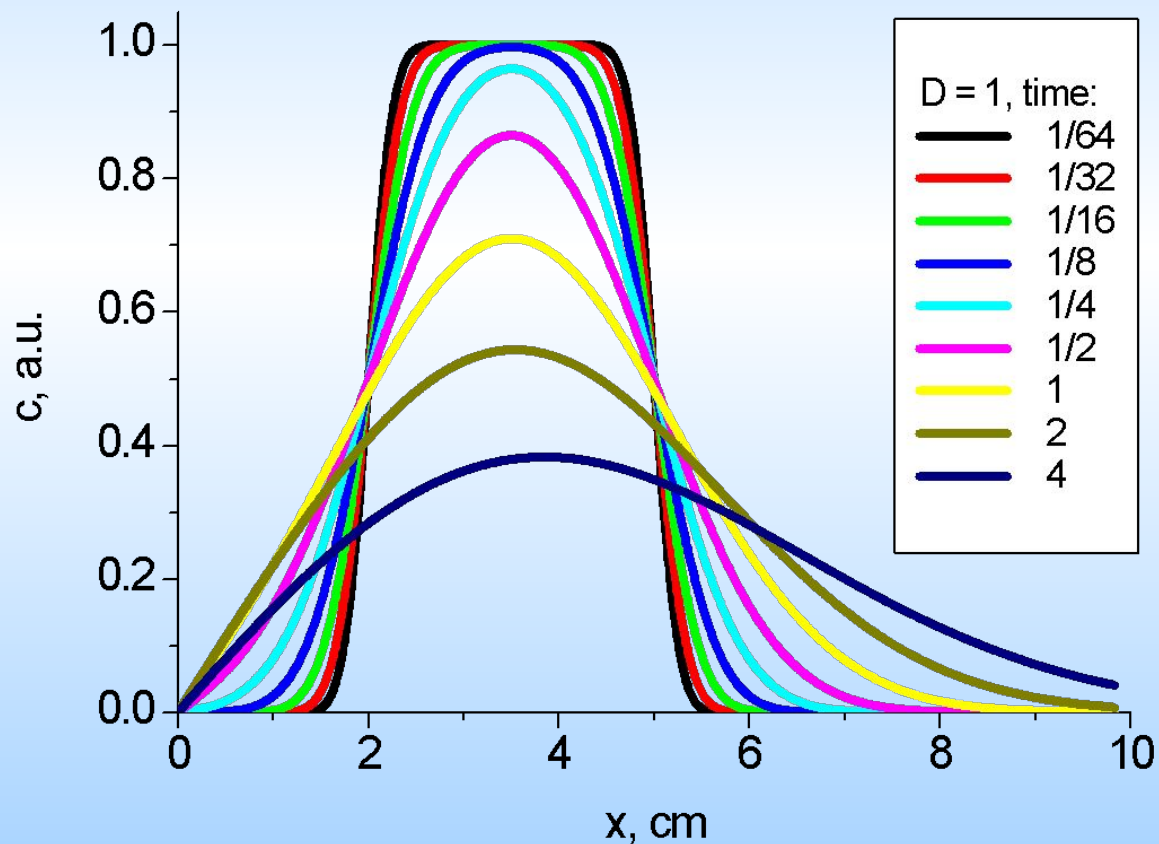
- Десорбция, слой конечной толщины

$$c(x,0) = \begin{cases} c_0, & b \leq x \leq h \\ 0, & 0 \leq x < b, \quad h < x \leq \infty \end{cases}$$

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

# Диффузия в полугограниченном теле

- Десорбция, слой конечной толщины



# Диффузия в полуограниченном теле

- **Сорбция:**
- ("постоянный источник")

$$\begin{aligned}c(x,0) &= 0 \\c(0,t) &= c_0\end{aligned}$$

$$\tilde{c}(x,t) = c_0 - c(x,t)$$

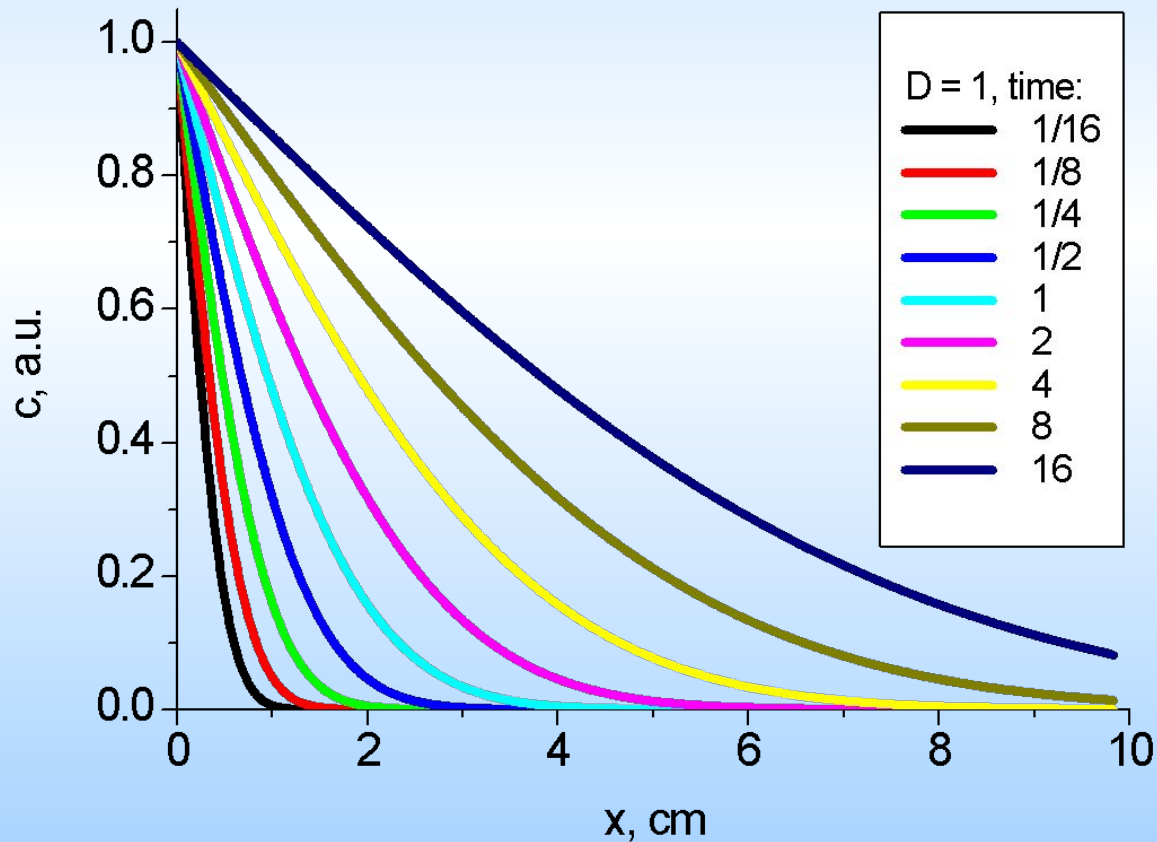
$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial x^2} \\ \tilde{c}(x,0) &= c_0 \\ \tilde{c}(0,t) &= 0\end{aligned}$$

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

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

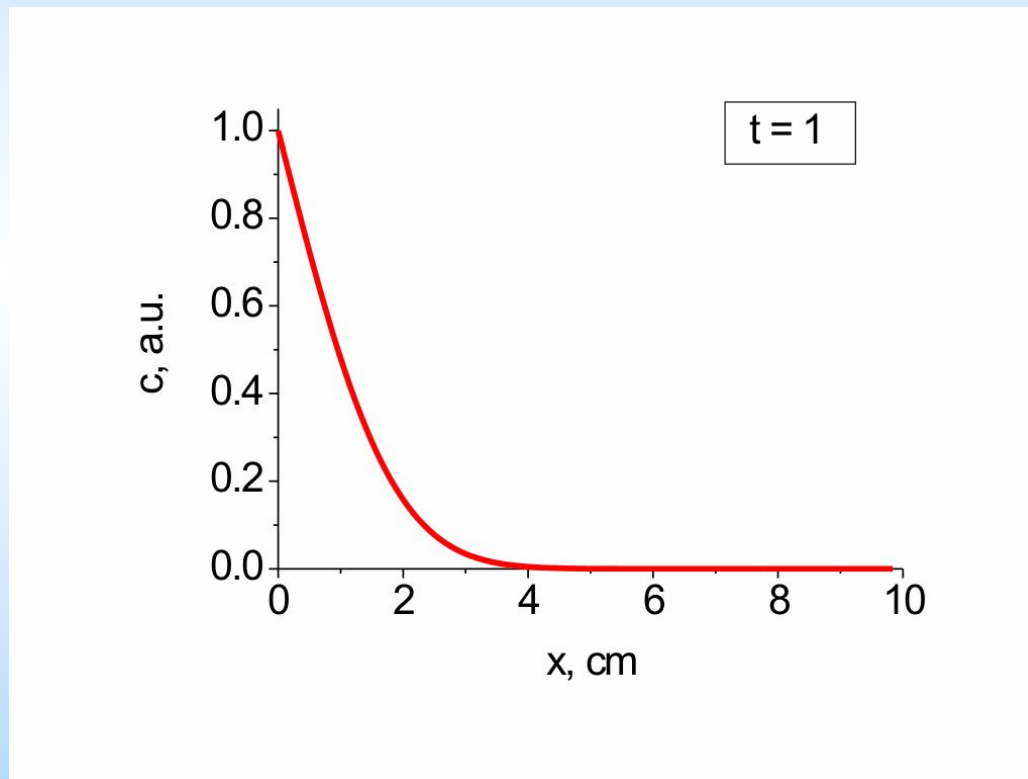
# Диффузия в полугограниченном теле

- Сорбция, "постоянный источник"



# Диффузия в полугограниченном теле

- Сорбция, "постоянный источник"



# Диффузия в полуограниченном теле

- Сорбция, "постоянный источник"
- 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, вошедших в тело:

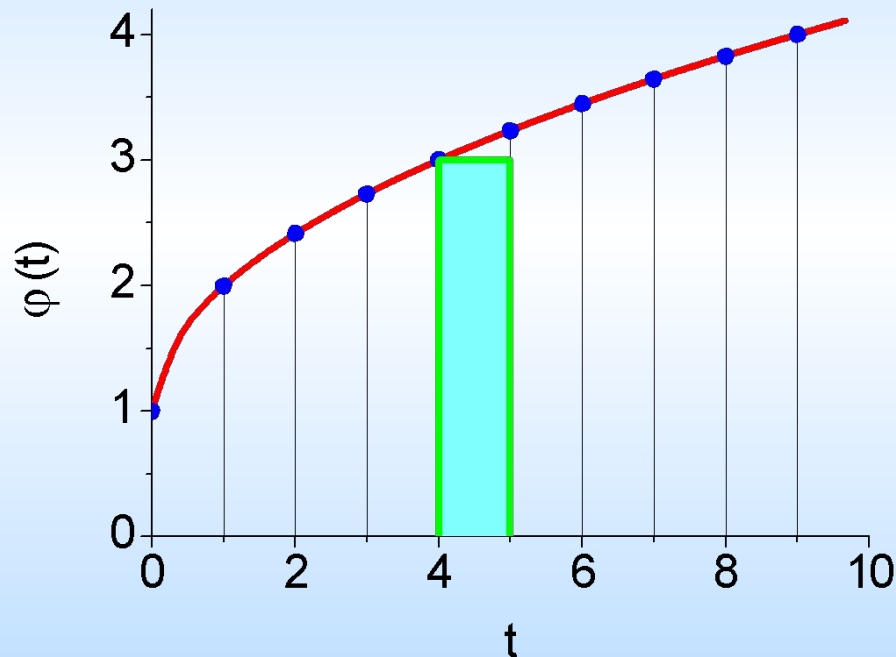
$$N(t) = \int_0^t j(x, t) \Big|_{x=0} dt = c_0 \sqrt{\frac{4Dt}{\pi}}$$

- или иначе:

$$N(t) = \int_0^\infty c(x, t) dx = c_0 \int_0^\infty \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right) dx = c_0 \sqrt{\frac{4Dt}{\pi}}$$

# Диффузия в полуограниченном теле

- Сорбция, концентрация на границе как функция времени



$$\Delta c_i(x, t) = \varphi(t_i) \left[ \operatorname{erfc} \frac{x}{\sqrt{4D(t-t_i)}} - \operatorname{erfc} \frac{x}{\sqrt{4D(t-t_i-\Delta t)}} \right]$$



# Диффузия в полуограниченном теле

- Сорбция, концентрация на границе как функция времени

$$\Delta c_i(x, t) = \varphi(t_i) \left[ \operatorname{erfc} \frac{x}{\sqrt{4D(t-t_i)}} - \operatorname{erfc} \frac{x}{\sqrt{4D(t-t_i-\Delta t)}} \right]$$

$$\operatorname{erfc} \frac{x}{\sqrt{4D(t-t_i-\Delta t)}} \approx \operatorname{erfc} \frac{x}{\sqrt{4D(t-t_i)}} - \frac{x\Delta t}{\sqrt{4\pi D(t-t_i)^3}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D(t-t_i)}\right)$$

$$\Delta c_i(x, t) = \frac{\varphi(t_i)x\Delta t}{\sqrt{4\pi D(t-t_i)^3}} \exp\left[-\frac{x^2}{4D(t-t_i)}\right]$$

# Диффузия в полуограниченном теле

- Сорбция, концентрация на границе как функция времени

$$c(x, t) = \frac{x}{\sqrt{4\pi D}} \int_0^t \frac{\varphi(\tau)}{(t - \tau)^{3/2}} \exp\left[-\frac{x^2}{4D(t - \tau)}\right] d\tau$$

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

# Диффузия в полугограниченном теле

- Теорема Дюамеля

$$c(x, t) = \int_0^t \varphi(\tau) \frac{\partial}{\partial t} F(x, t - \tau) d\tau$$

- Где  $F(x, t)$  решение задачи сорбции с "постоянным источником" (начальная концентрация равна нулю, граничная концентрация постоянна), а  $\varphi(t)$  - зависящая от времени граничная концентрация