Диффузия в полуограниченном теле

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

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

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

Неизвестная функция должна быть определена из граничных условий

Диффузия в полуограниченном теле

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

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

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

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

$$\Rightarrow$$

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

Диффузия в полуограниченном теле

- Непроницаемая граница,
- Бесконечно тонкий слой

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

$$\frac{N}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt} \right)$$

Диффузия в полуграниченном 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)

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

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

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

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

Диффузия в полуограниченном теле

- Десорбция
- равномерное начальное распределение

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

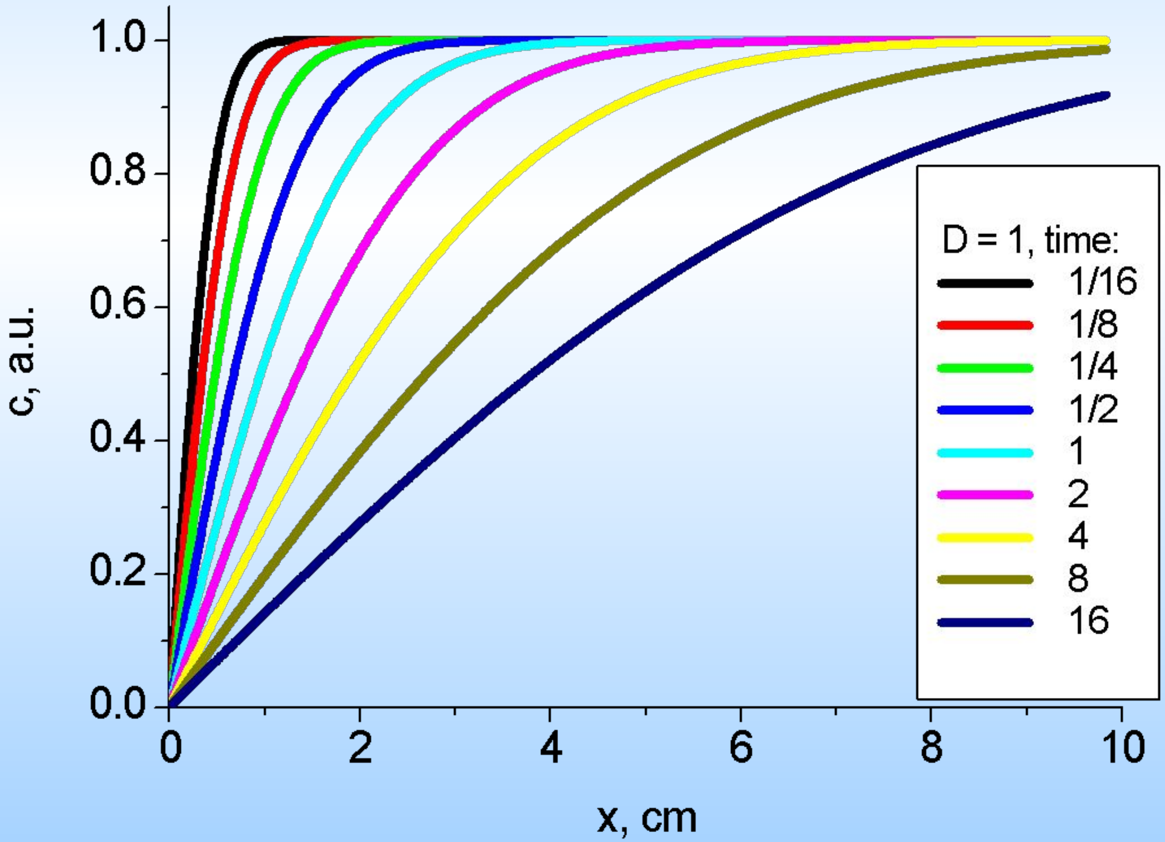
$$c(x,t) = \frac{c_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_0^{\infty} \left\{ \exp\left(-\frac{(\xi - x)^2}{4Dt} \right) - \exp\left(-\frac{(\xi + x)^2}{4Dt} \right) \right\} d\xi =$$

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

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

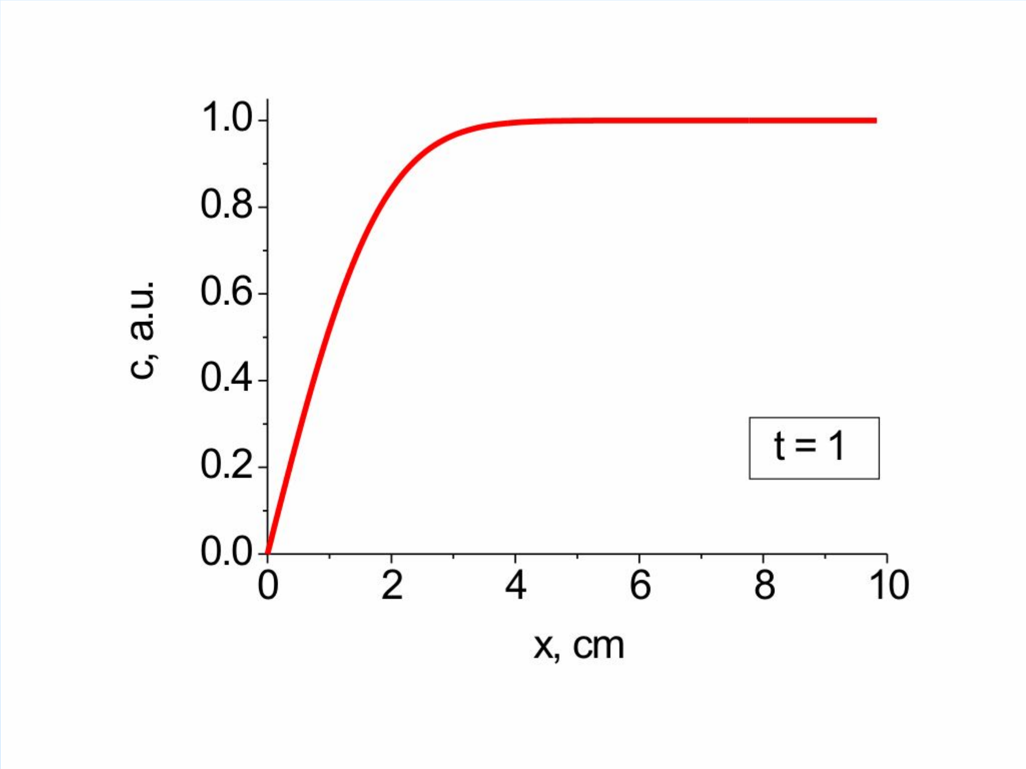
Диффузия в полуограниченном теле

- 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:

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

Диффузия в полуограниченном теле

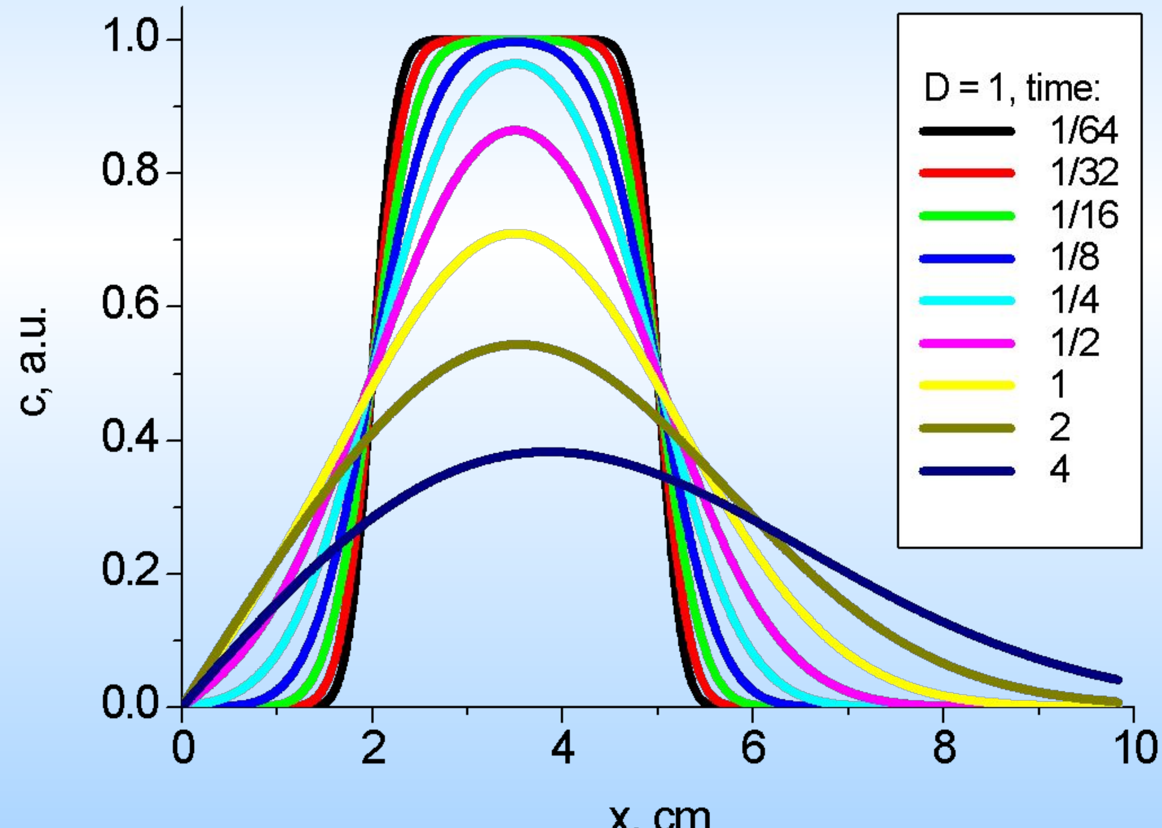
- Десорбция, слой конечной толщины

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

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

Диффузия в полуограниченном теле

- Десорбция, слой конечной толщины



Диффузия в полуограниченном теле

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

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

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

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

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

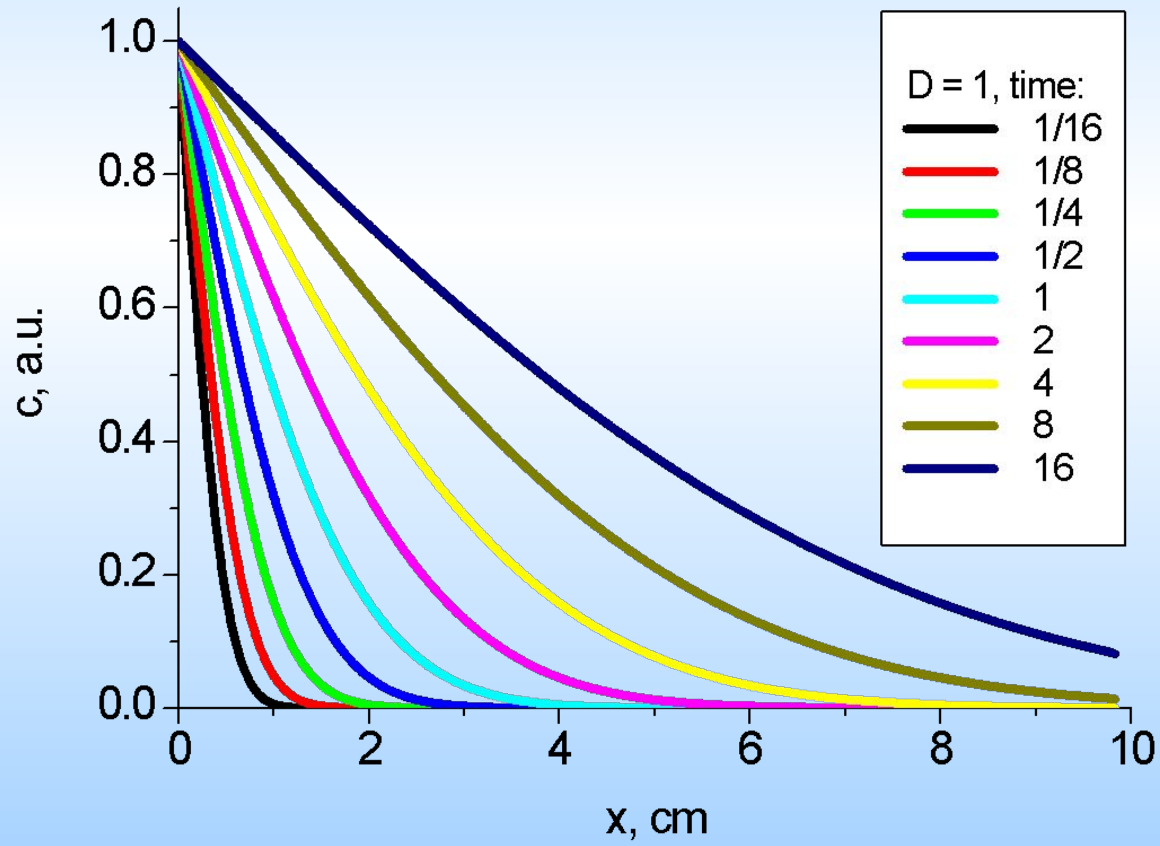
$$\tilde{c}(0,t) = 0$$

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

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

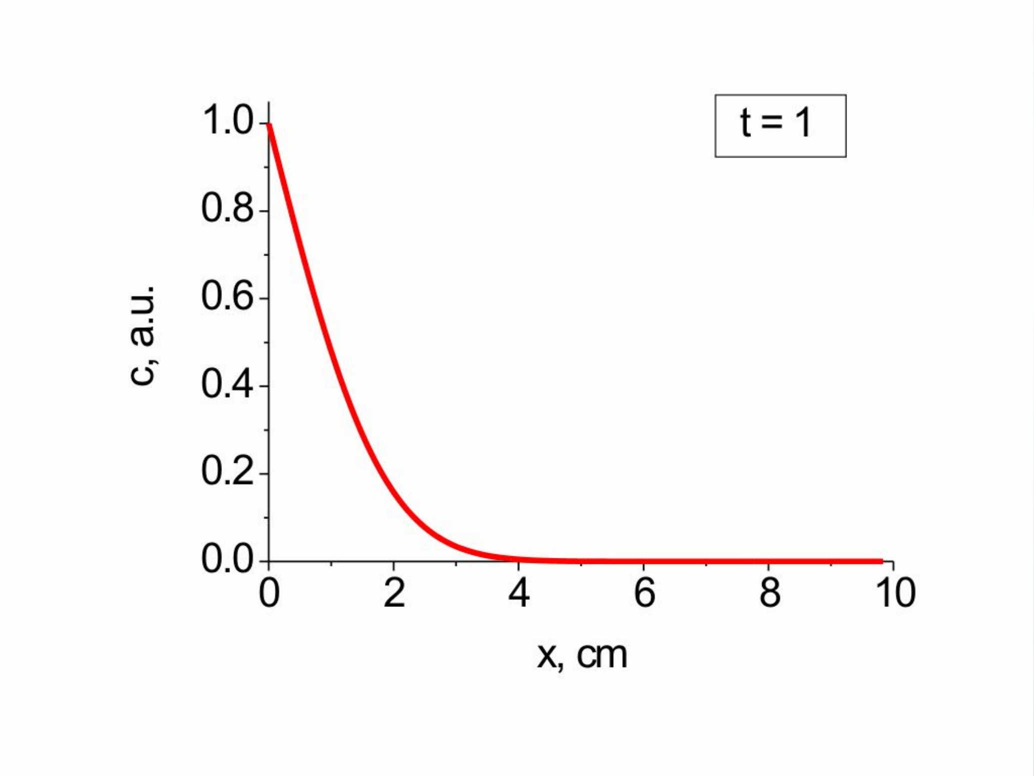
Диффузия в полуограниченном теле

- Сорбция, "постоянный источник"



Диффузия в полуограниченном теле

- Сорбция, "постоянный источник"



Диффузия в полуограниченном теле

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

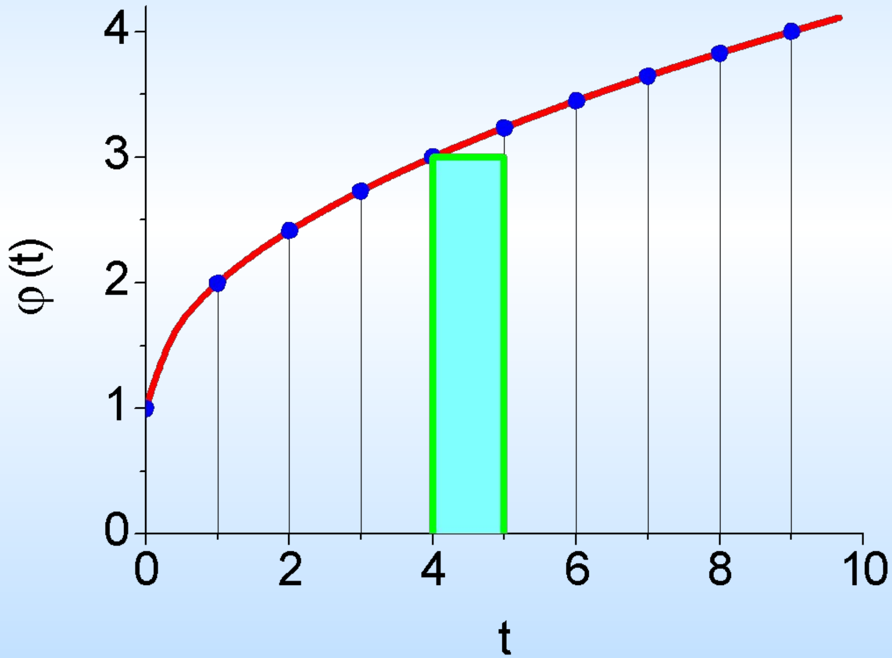
$$N(t) = \int_0^t j(x,t)\Big|_{x=0} dt = c_0\sqrt{\frac{4Dt}{\pi}}$$

- 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 полуограниченном 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 $\phi(t)$ - зависящая от времени граничная концентрация