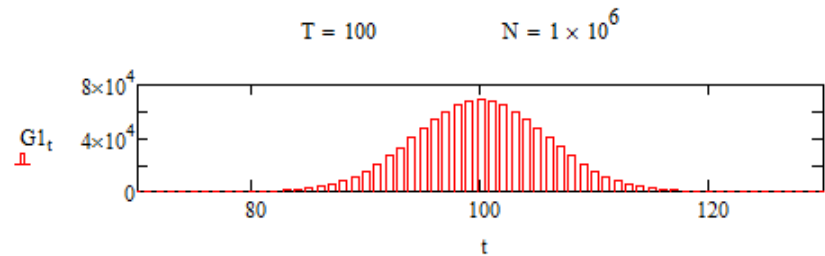
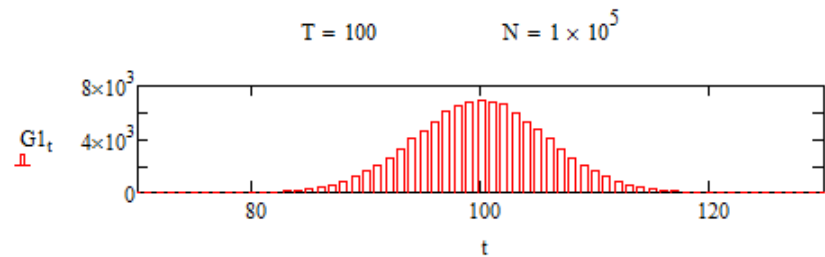
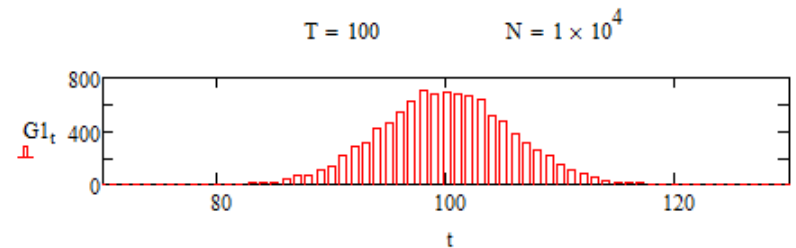
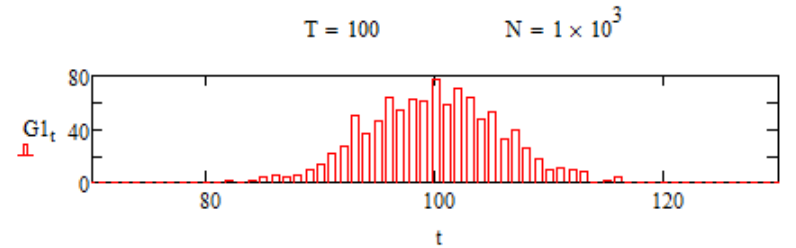
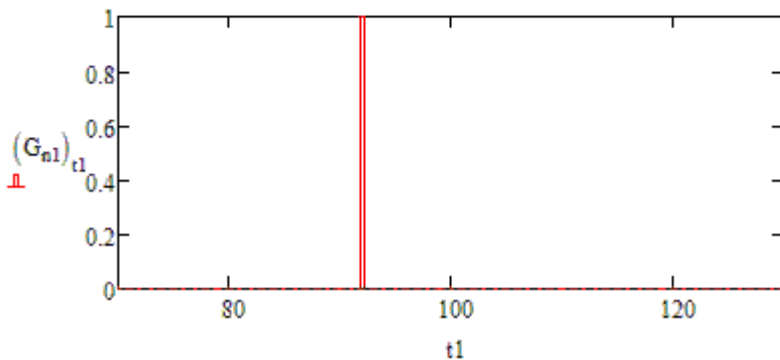
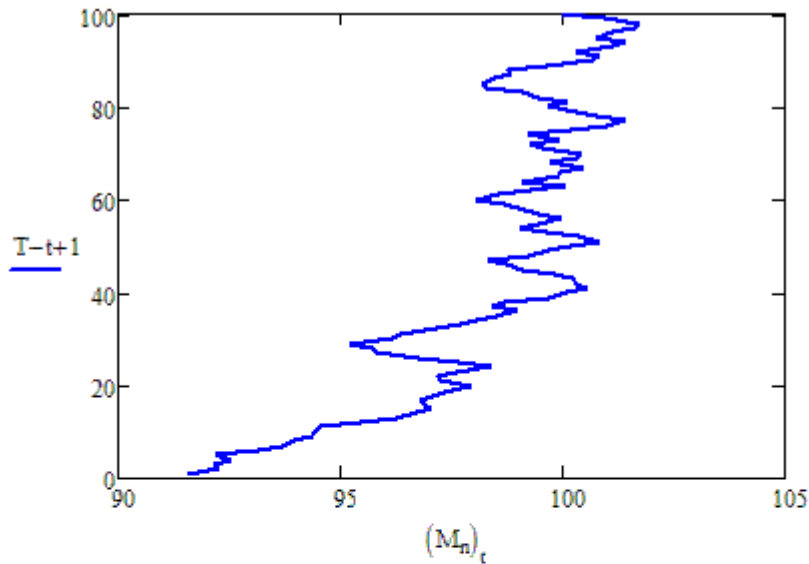


Dyfuzja
w stanie nieustalonym
(czasozależna)

Witold Kucza

Błądzenie przypadkowe

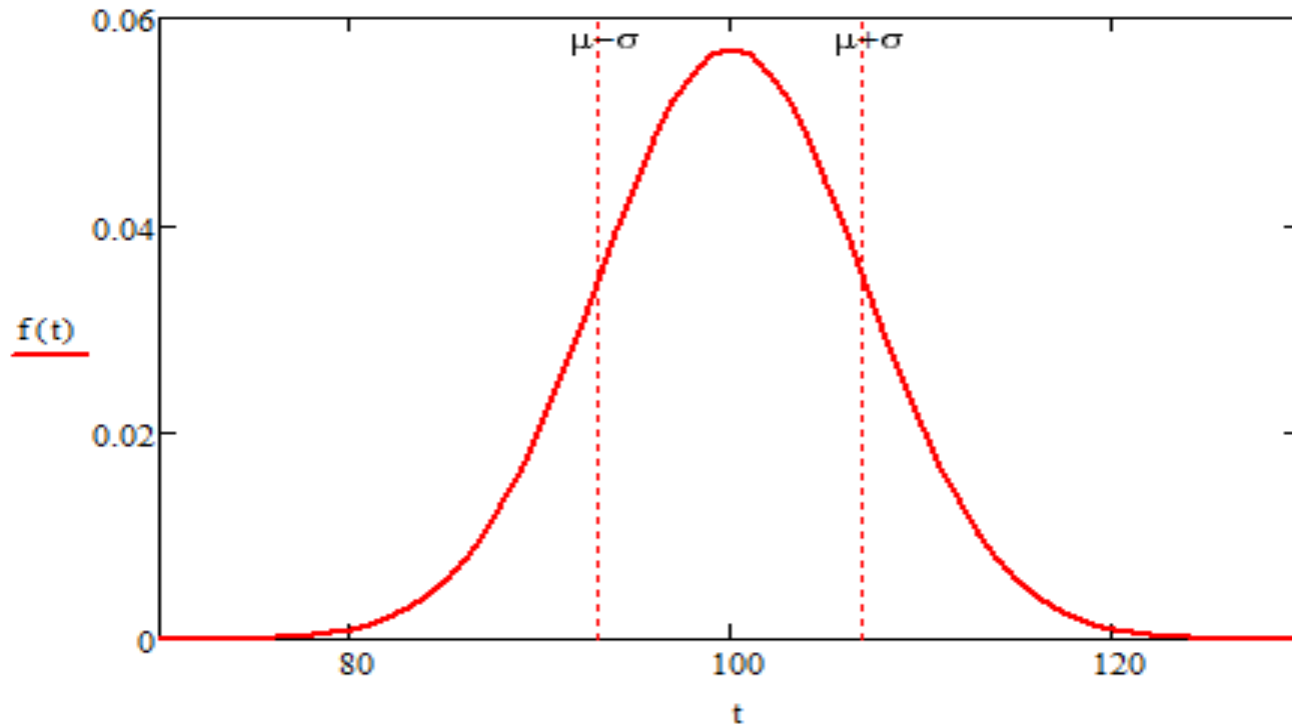


Rozkład Gaussa

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\mu-x)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\sigma = 7$$

$$\mu = 100$$



Równanie dyfuzji: rozw. analityczne

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\mu-x)^2}{2\sigma^2}\right) \quad \sigma = \sqrt{2 \cdot D \cdot t}$$

$$c(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi \cdot D \cdot t}} \exp\left(-\frac{(\mu-x)^2}{4 \cdot D \cdot t}\right)$$

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

$$D \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} = c(x,t) \frac{(\mu-x)}{2 \cdot t}$$

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = c(x,t) \left(-\frac{1}{2 \cdot t}\right) + c(x,t) \frac{(\mu-x)^2}{4 \cdot D \cdot t^2}$$

$$D \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} = c(x,t) \frac{(\mu-x)^2}{4 \cdot D \cdot t^2} + c(x,t) \left(-\frac{1}{2 \cdot t}\right)$$

Równ. dyfuzji: alternatywny dowód

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\mu-x)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Szukamy zależności odchylenia standardowego od czasu, $\sigma(t)$, dla którego $f(x)$ spełnia równanie dyfuzji.

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

$$\frac{\partial f}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial t} = f(x) \left(-\frac{1}{\sigma} + \frac{(\mu-x)^2}{\sigma^3} \right) \frac{\partial \sigma}{\partial t}$$

$$D \frac{\partial f}{\partial x} = D \cdot f(x) \frac{(\mu-x)}{\sigma^2}$$

$$D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = D \cdot f(x) \left(\frac{(\mu-x)^2}{\sigma^4} - \frac{1}{\sigma^2} \right)$$

Zatem:

$$\frac{d\sigma'}{dt'} = \frac{D}{\sigma'} \quad \text{a po scałkowaniu} \quad \boxed{\sigma = \sqrt{2 \cdot D \cdot t}}$$

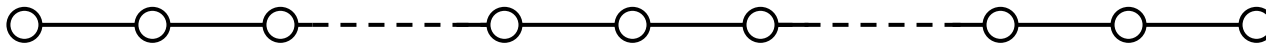
Rozwiązanie numeryczne

Inaczej niż w przypadku rozw. analitycznego szukamy rozwiązania dla określonych punktów, węzłów, w czasach przedzielonych interwałem (poddajemy układ dyskretyzacji)

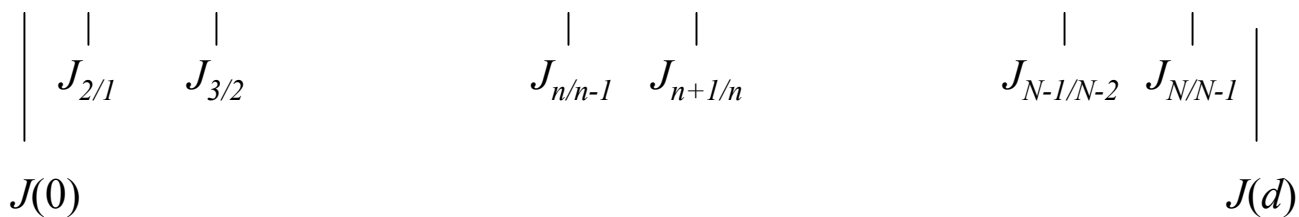
ścieżenia

c_1 c_2 c_3 c_{n-1} c_n c_{n+1} c_{N-2} c_{N-1} c_N

węzły



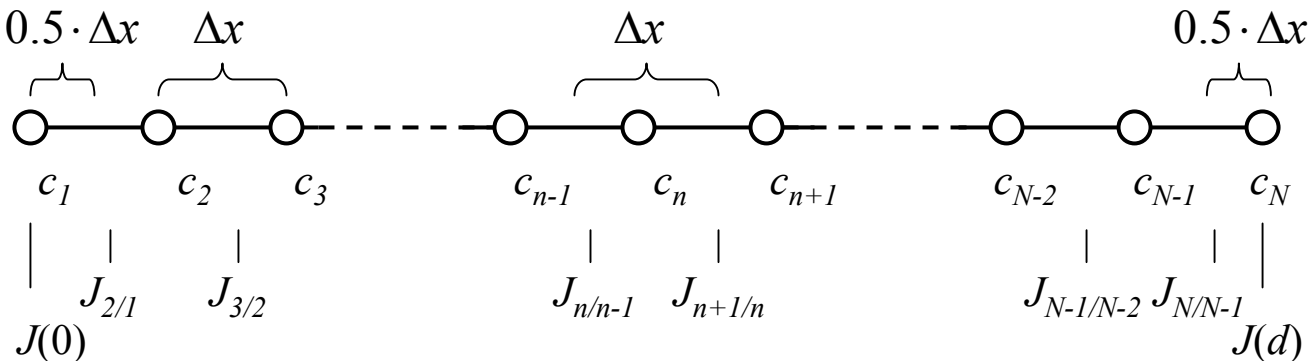
strumienie



Różniczki przybliżamy ilorazami różnicowymi (metoda różnic skończonych)

$$\frac{\partial c}{\partial x} \approx \frac{\Delta c}{\Delta x} \qquad \frac{\partial J}{\partial x} \approx \frac{\Delta J}{\Delta x} \qquad \frac{\partial c}{\partial t} \approx \frac{\Delta c}{\Delta t}$$

Rozwiązanie numeryczne (m. Eulera)



n- numeruje węzły, k- numeruje kroki czasowe

I p. Ficka

$$J = -D \frac{\partial c}{\partial x}$$

$$J_{n/n-1}^k = -D \frac{c_n^k - c_{n-1}^k}{\Delta x}$$

$$J_{n+1/n}^k = -D \frac{c_{n+1}^k - c_n^k}{\Delta x}$$

R. ciągłości

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{\partial J}{\partial x}$$

$$\frac{c_n^{k+1} - c_n^k}{\Delta t} = - \frac{J_{n+1/n}^k - J_{n/n-1}^k}{\Delta x}$$

$$c_n^{k+1} = c_n^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} (J_{n+1/n}^k - J_{n/n-1}^k)$$

$$1 < n < N$$

$$c_n^{k+1} = c_n^k - \frac{2\Delta t}{\Delta x} (J_{n+1/n}^k - 0) \cdot WBL$$

$$n = 1$$

$$c_n^{k+1} = c_n^k - \frac{2\Delta t}{\Delta x} (0 - J_{n/n-1}^k) \cdot WBP$$

$$n = N$$

WBL, WBP- równe 0 dla stałych stężeń na brzegach (WB Dirichleta), lub 1 dla zerowych strumieni przez brzeg (WB Neumanna)

M. Eulera: implementacja w Excelu

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	d	D	N	delta_x	delta_t_kr	delta_t	WBL	WBP
2	1.00E-04	1.00E-09	21	0.000005	1.25E-02	1.00E-02	1.00E+00	0.00E+00
3								

$$=A2/(C2-1)$$

$$=D2^2/2/B2$$

warunki początkowe

	A	B	C	D	V	W
7	k\ln		1	2	20	21
8		t\lx	0	0.000005	0.000095	0.0001
9	1	0	0.1875	0.97910089	0.711127	0.190679
10	2	1.00E-04	1.87E-01	9.76E-01	7.10E-01	1.91E-01

$$=C9-2*\$F\$2/\$D\$2*(-\$B\$2*(D9-C9)/\$D\$2+0)*\$G\$2$$

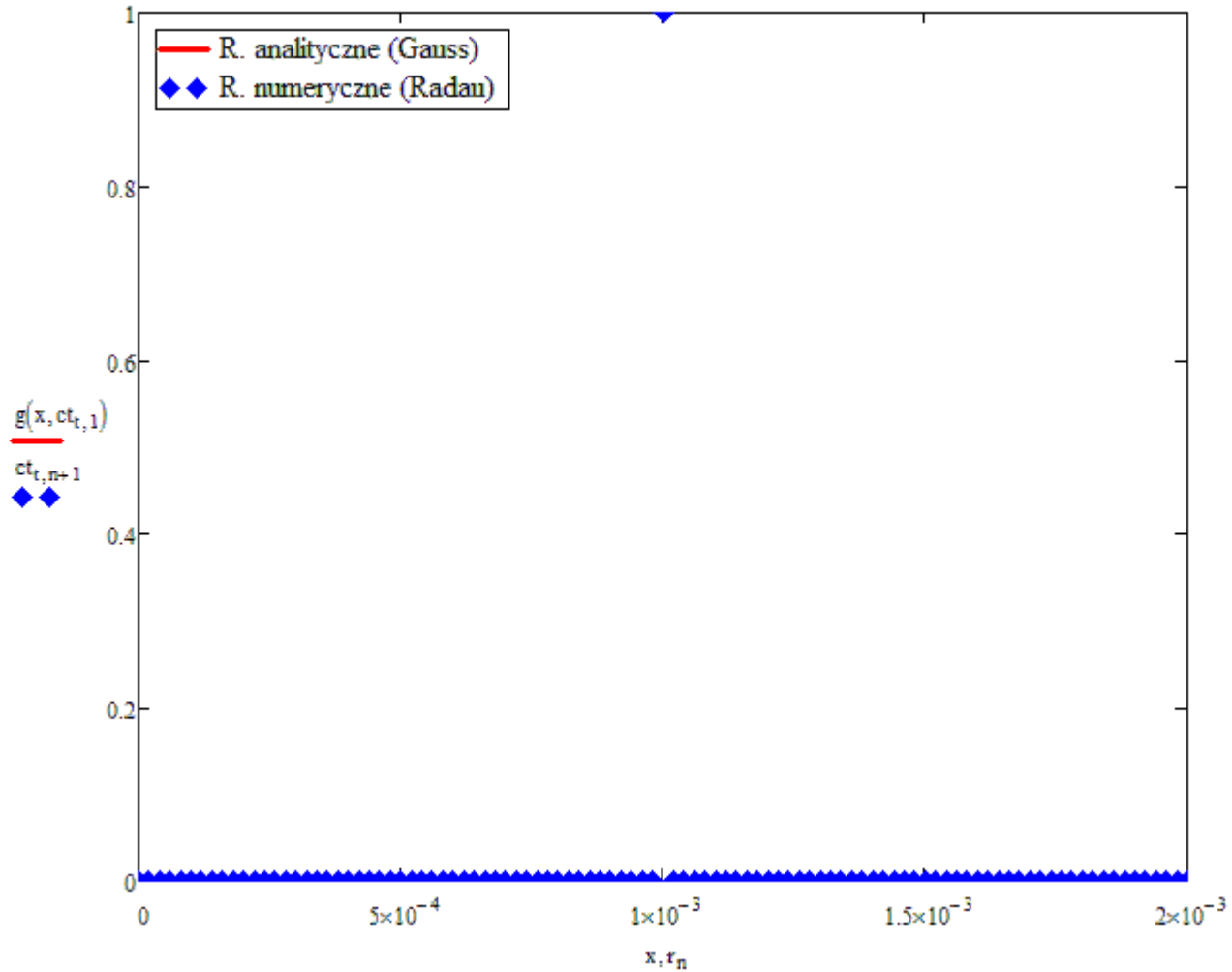
$$=D9-\$F\$2/\$D\$2*(-\$B\$2*(E9-D9)/\$D\$2+\$B\$2*(D9-C9)/\$D\$2)$$

$$=V9-\$F\$2/\$D\$2*(-\$B\$2*(W9-V9)/\$D\$2+\$B\$2*(V9-U9)/\$D\$2)$$

$$=W9-2*\$F\$2/\$D\$2*(0+\$B\$2*(W9-V9)/\$D\$2)*\$H\$2$$

warunki brzegowe

„Kanapka”, ukł. półnieskończony (UP)

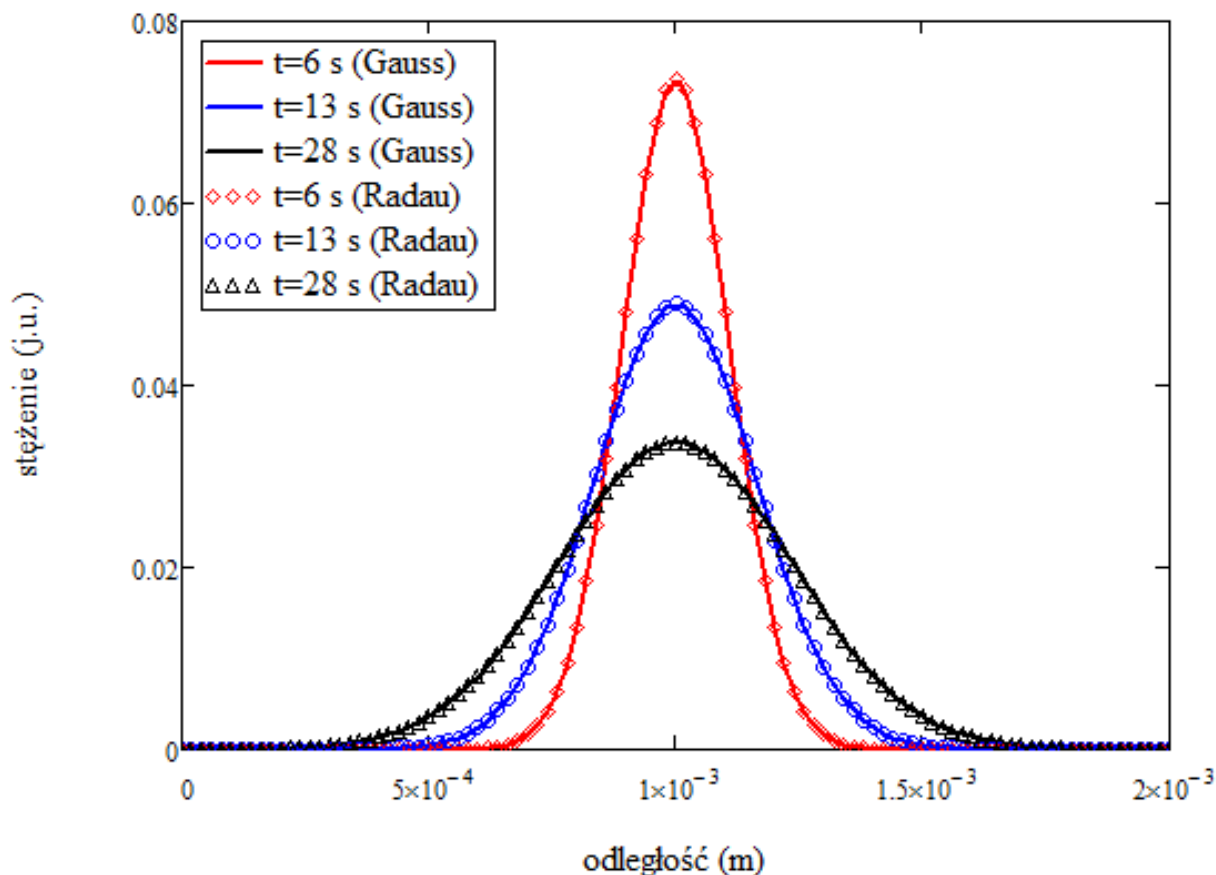


symulacje

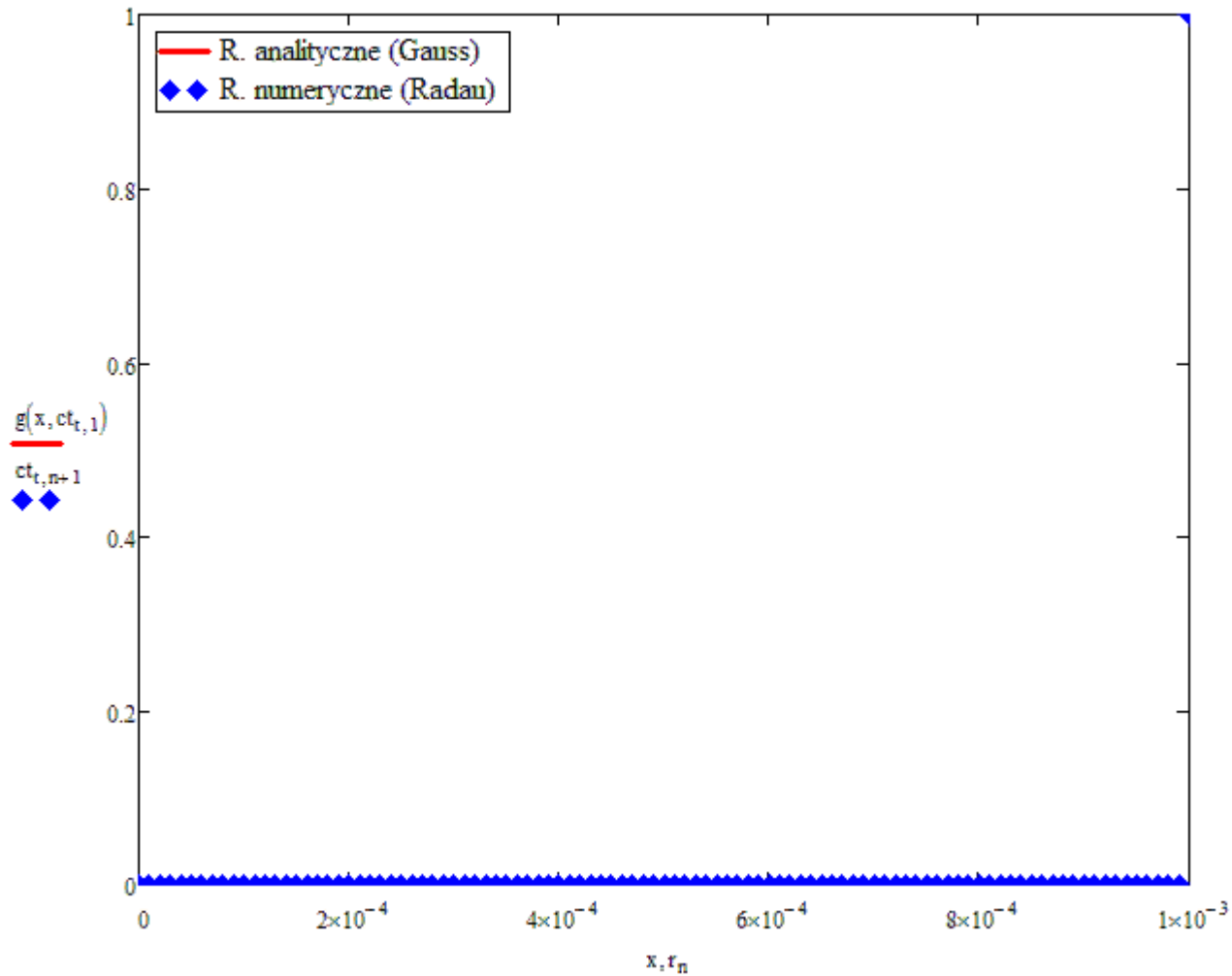
„Kanapka”, ukł. półnieskończony (UP)

$$c(x, t) = \frac{M}{2\sqrt{\pi \cdot D \cdot t}} \exp\left(-\frac{(\mu - x)^2}{4 \cdot D \cdot t}\right)$$

M oznacza ilość atomów (cząsteczek) na jednostkę powierzchni (stężenie dwuwymiarowe)



Cienka warstwa, UP+WBN

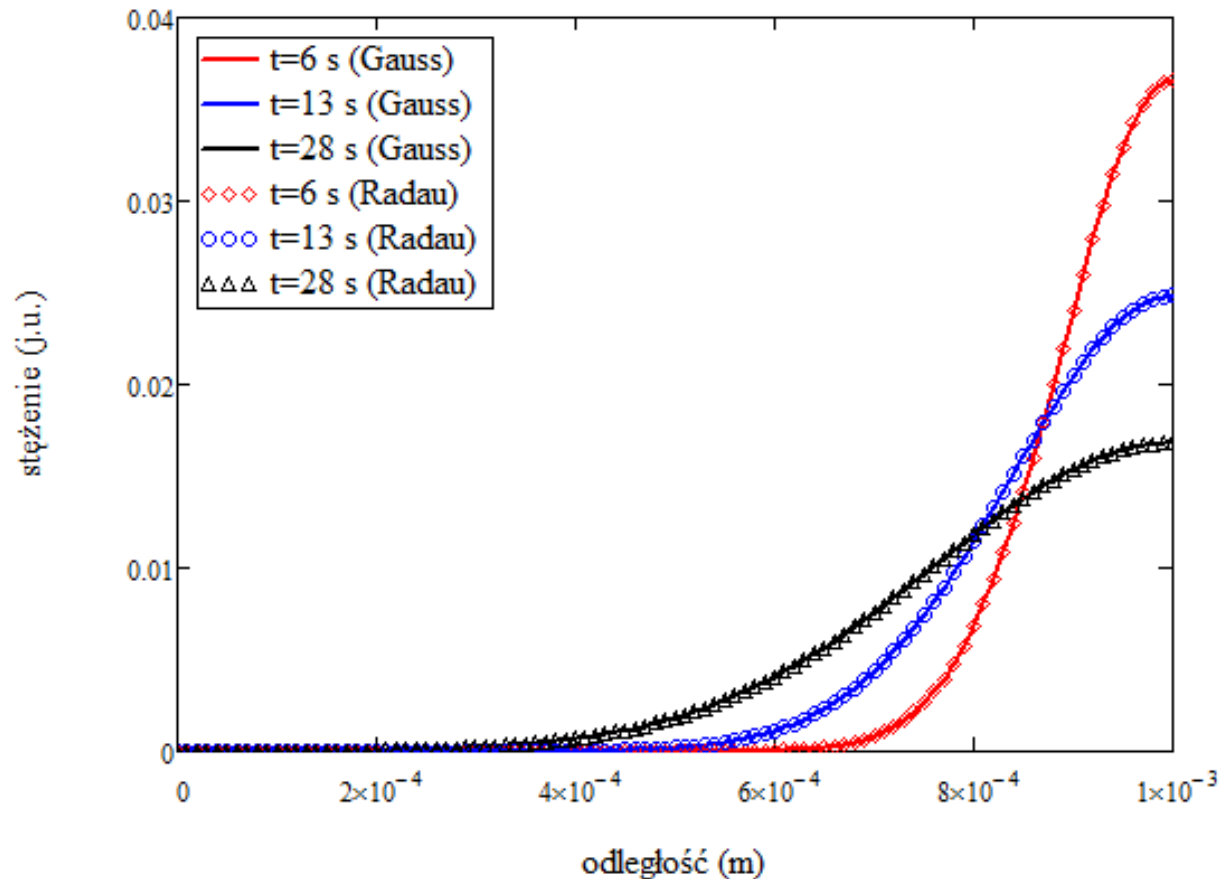


symulacje

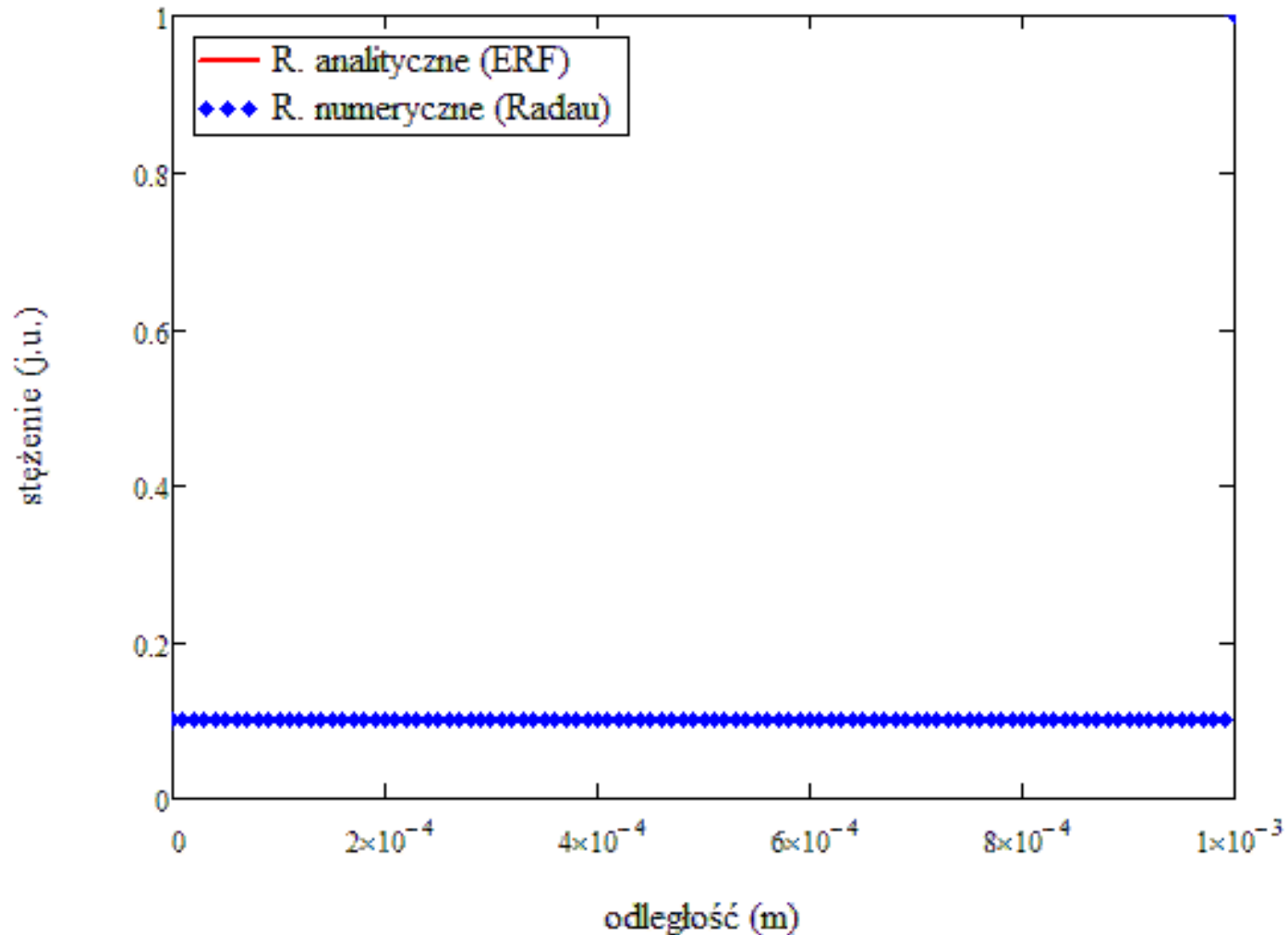
Cienka warstwa, UP+WBN

$$c(x,t) = \frac{M}{\sqrt{\pi \cdot D \cdot t}} \exp\left(-\frac{(\mu - x)^2}{4 \cdot D \cdot t}\right)$$

M oznacza ilość atomów (cząsteczek) na jednostkę powierzchni (stężenie dwuwymiarowe)



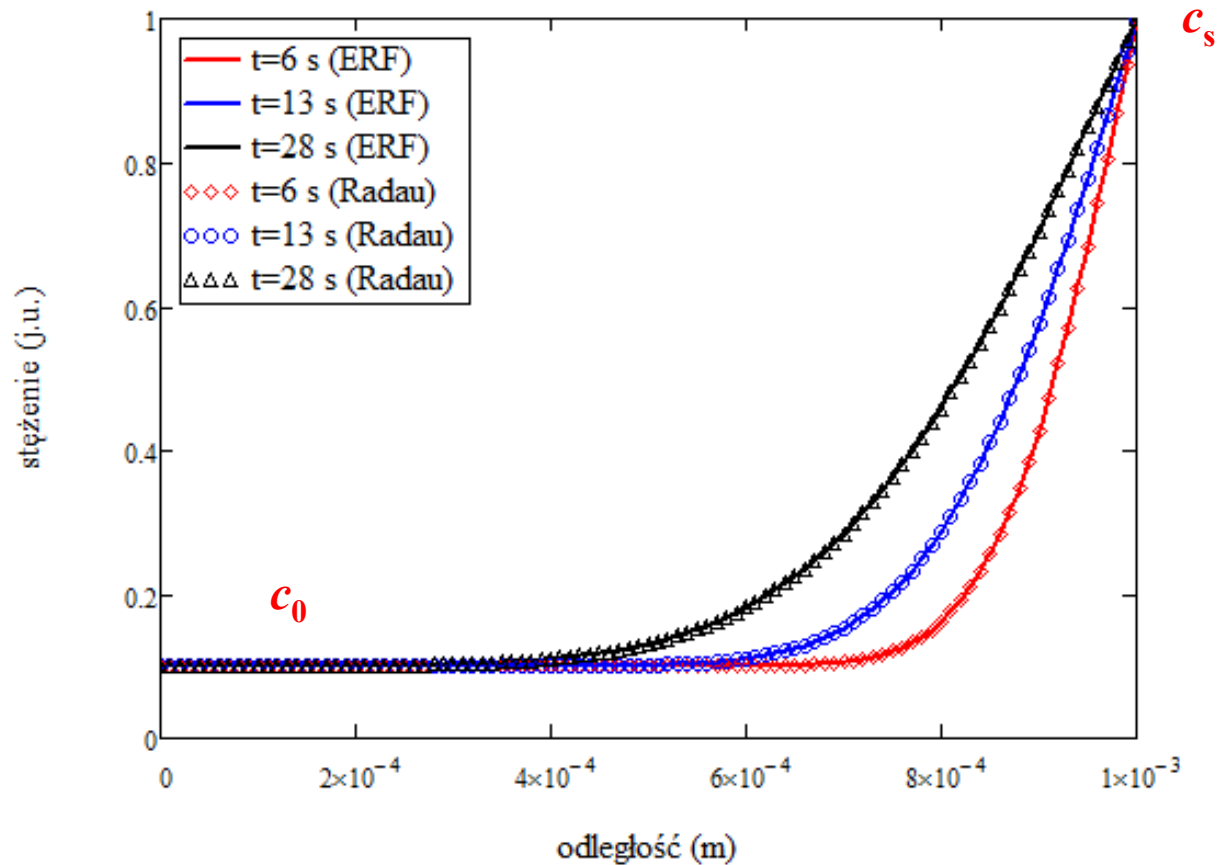
Cienka warstwa, UP+WBD



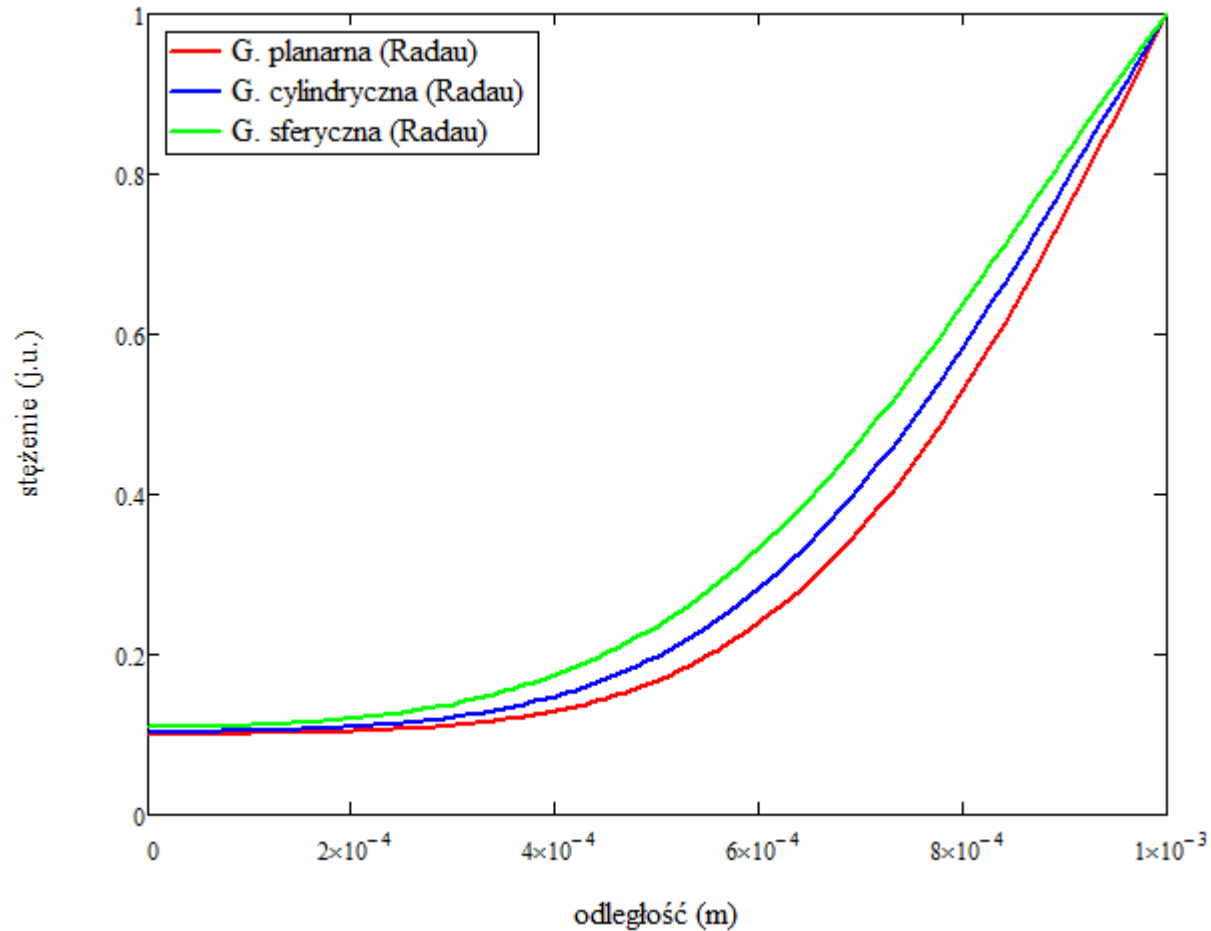
symulacje

Cienka warstwa, UP+WBD

$$c(x,t) = c_s + (c_0 - c_s) \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{\mu - x}{2\sqrt{D \cdot t}}\right) \quad \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy$$



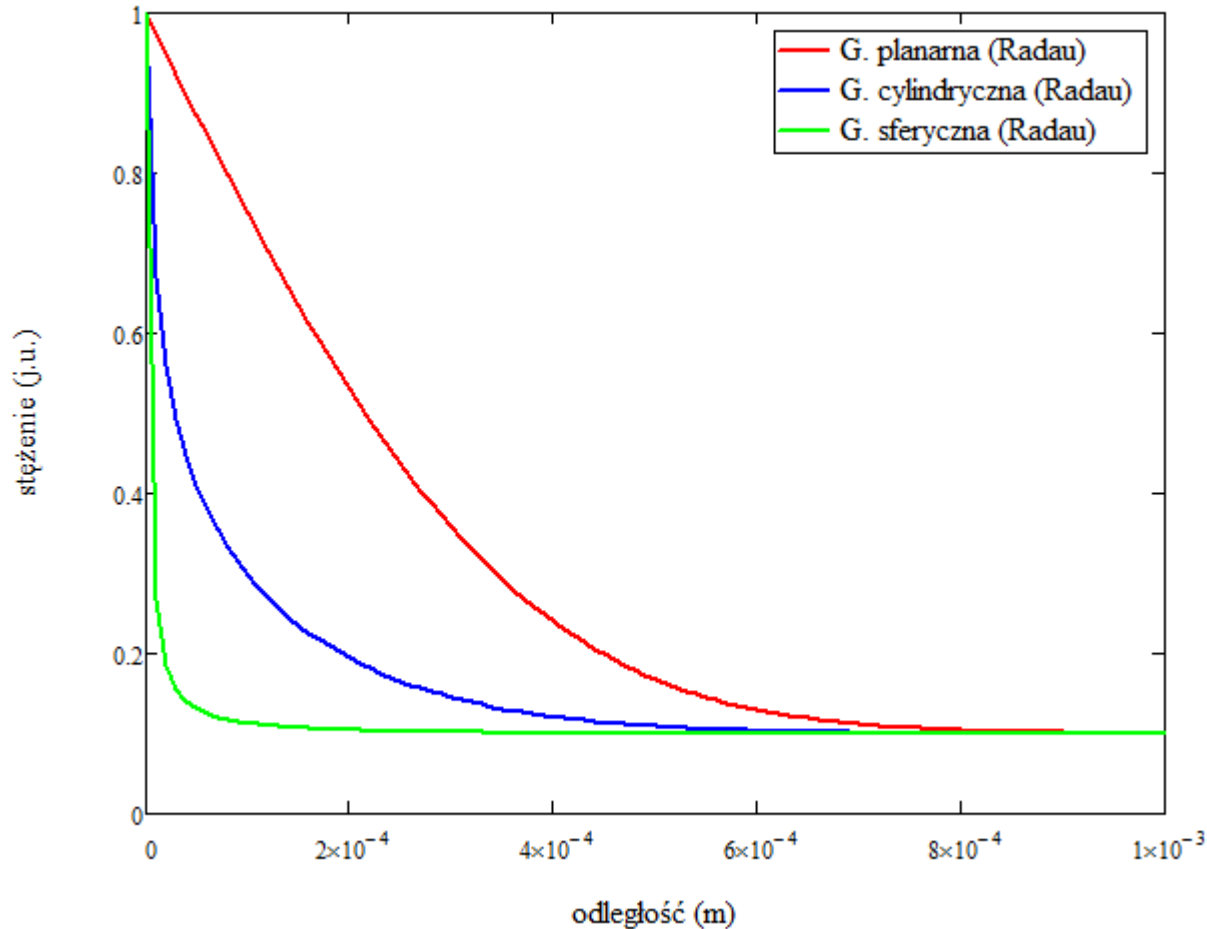
Rozw. numeryczne dla geometrii



WBN

WBD

Rozw. numeryczne dla geometrii

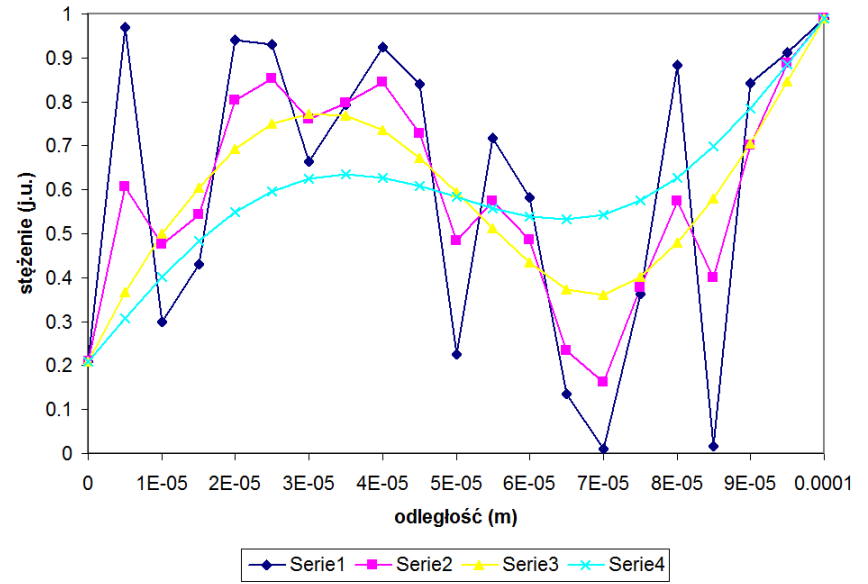
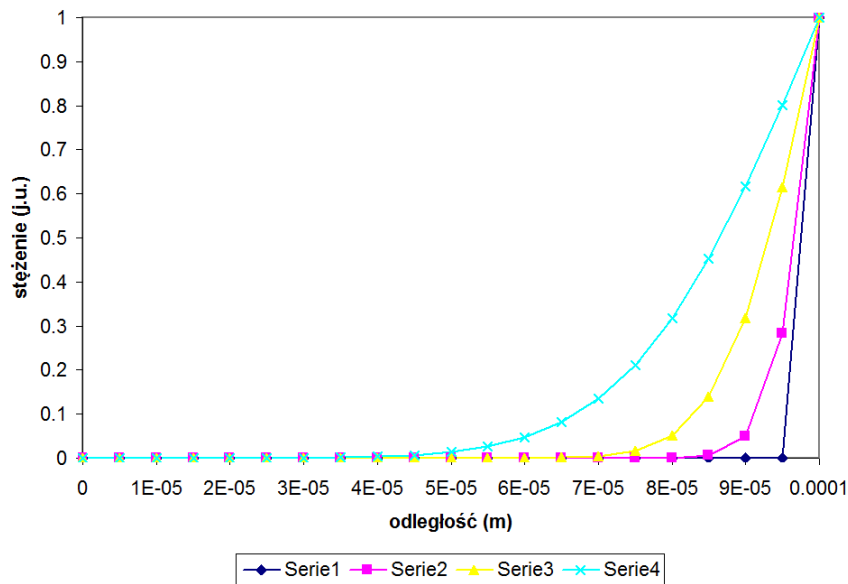
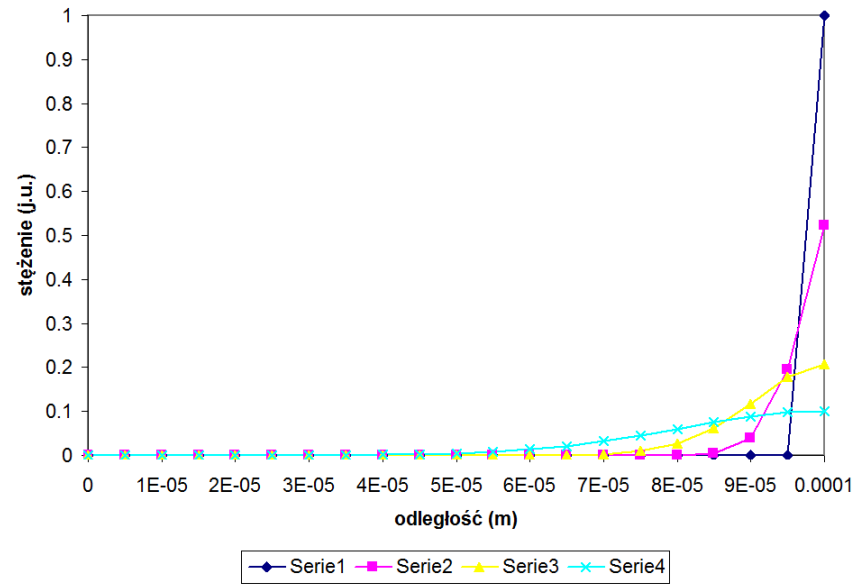
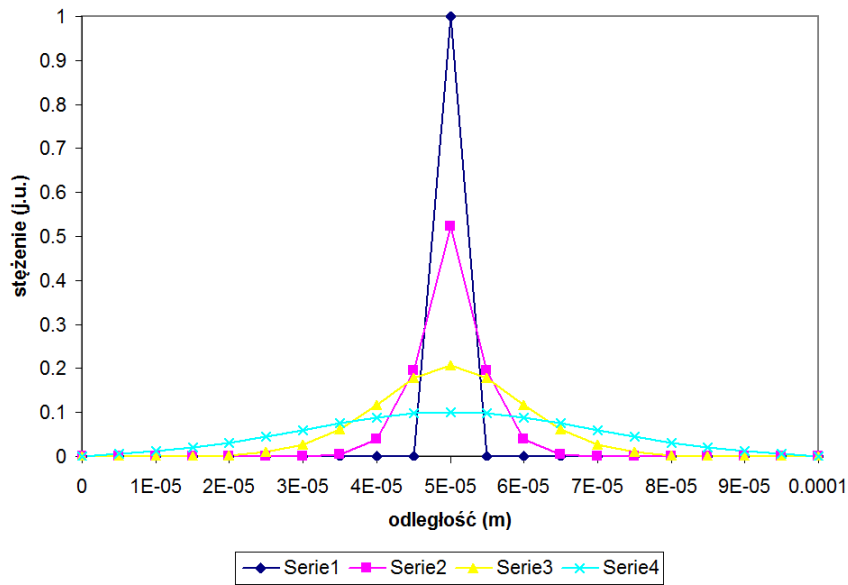


WBD

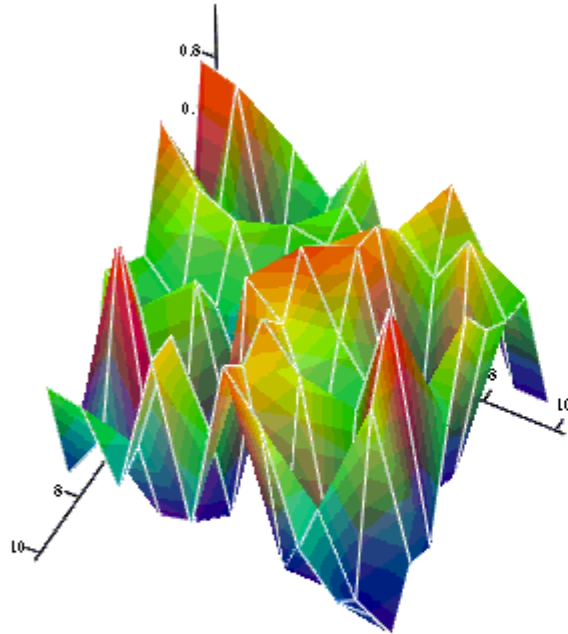
WBN

Uwaga: dla GC i GS niefizyczne (kłopot z realizacją WBD dla $r=0$)

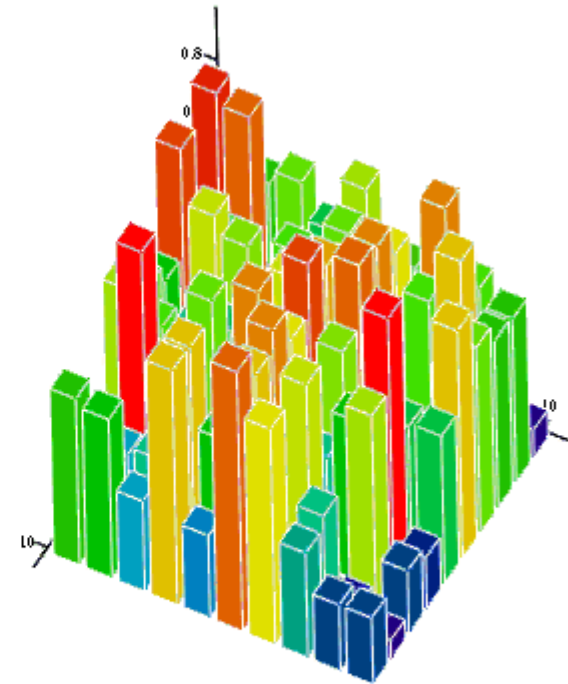
Met. Eulera: aneks do wykładu



Rozw. numeryczne dla 2D (WBD)



Mt_t



Mt

Mt_t

symulacje

Rozw. analityczne vs numeryczne

Rozw. analityczne

zalety:

- natychmiastowa dostępność
- łatwa analiza
- szybkie met. odwrotne

wady:

- założenia upraszczające
- nie zawsze istnieją rozwiązania

Rozw. numeryczne

zalety:

- istnieją rozwiązania
- brak założeń upraszczających
- możliwość (szybkiej) modyfikacji

wady:

- (bywa) długi czas obliczeń
- utrudniona analiza
- wolne met. odwrotne