

Projekt nr C.8.2

Rozwiązanie równania dyfuzji w przypadku jednowymiarowym ze źródłami i absorbentami cząstek

Wprowadzenie teoretyczne

Fizyka

Równanie dyfuzji jest równaniem drugiego rzędu różniczkowym cząstkowym, można go wyprowadzić korzystając z zasady zachowania liczby cząstek, równania Ficka oraz twierdzenia Gaussa. Jeżeli przez n oznaczymy koncentrację (ilość cząstek na jednostkę objętości), a przez wektor \vec{j} oznaczymy wektor gęstości strumienia cząstek (liczba cząstek przechodzących prostopadłe przez powierzchnię jednostkową w jednostce czasu) to, stąd wynika prawo Ficka postaci:

$$\vec{j} = -D\nabla n,$$

gdzie D jest współczynnikiem dyfuzji.

Dodając prawo zachowania cząstek zapisane w postaci :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \iiint_{\Omega} n d\tau &= - \oiint_{\Sigma} \vec{j} \circ d\vec{\sigma} \\ \oiint_{\Sigma} \vec{j} \circ d\vec{\sigma} &= \iiint_{\Omega} (\nabla \circ \vec{j}) d\tau \Rightarrow \iiint_{\Omega} \left(\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \circ \vec{j} \right) d\tau = 0, \end{aligned}$$

stąd wynika prawo dyfuzji:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla \circ (D\nabla n).$$

Dla uzyskania pełnej jego postaci należy dodać jeszcze funkcję źródła $S(x,t)$, końcowa postać:

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = \nabla \circ (D \cdot \nabla n(x,t)) + S(x,t).$$

W ogólnej postaci występująca w prawie Ficka stała D może być zależna od ośrodka, jak i również może zmieniać się w czasie, lecz tu zakładamy, że jest to wartość stała w całej przestrzeni i w czasie.

Numeryka

W obliczeniach numerycznych należy przeprowadzić dyskretyzację równania.

Wariant A

Pochodną koncentracji po czasie przeprowadza się np. za pomocą różnicy do przodu:

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} \approx \frac{n(x,t+HT) - n(x,t)}{HT}.$$

Wartość nabli do kwadratu w jednym wymiarze przechodzi w zwykłą drugą pochodną, którą dyskretyzujemy przy pomocy aproksymacji trójpunktowej:

$$\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} \approx \Delta^2 n(x,t) / HP^2 = \frac{n(x+HP,t) - 2n(x,t) + n(x-HP,t)}{HP^2},$$

gdzie HT i HP dyskretyzują odpowiednio czas i przestrzeń.

Taka dyskretyzacja równania prowadzi do rozwiązania postaci

$$n(x,t+HT) = n(x,t) + D \cdot (HT / HP^2) \cdot [n(x-HP,t) - 2n(x,t) + n(x+HP,t)] + HT \cdot S(x,t),$$

skąd

$$n(x,t+HT) = \left(1 - 2D \frac{HT}{HP^2}\right) n(x,t) + D \frac{HT}{HP^2} [n(x-HP,t) + n(x+HP,t)] + HT \cdot S(x,t). \quad (\mathbf{A})$$

Taką postać można zaimplementować na komputerze przyjmując za x oraz t odpowiednie punkty siatki przestrzennej i czasowej. Krok dyskretyzacji przestrzennej zostaje podany z góry.

Wariant B

Odmienne rozwiązanie można uzyskać stosując aproksymację drugiej pochodnej, polegającą na obliczaniu jej dla następnego kroku czasowego, tzn.:

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \approx \frac{1}{HP^2} \Delta^2 [n(x,t+HT)].$$

Stosując aproksymację pierwszej pochodnej po czasie jak poprzednio można uzyskać wzór na $n(x,t+HT)$ postaci:

$$n(x,t+HT) = \left\{ 1 + \frac{D \cdot HT}{HP^2} [n(x-HP,t+HT) - 2n(x,t+HT) + n(x+HP,t+HT)] \right\}^{-1} \cdot [n(x,t) + HT \cdot S(x,t)].$$

Jeżeli przyjmujemy, że $HT \ll 1$ to możemy przybliżyć wyrażenie dla dowolnego operatora postaci $(1 + A_{op} \cdot HT)^{-1} \approx 1 - A_{op} \cdot HT$ z dokładnością do $O(HT^2)$. Po przekształceniach otrzymuje się następujący wzór na $n(x, t + HT)$:

$$\begin{aligned} n(x, t + HT) = & \left(1 - \frac{2D \cdot HT}{HP^2}\right) n(x, t) + \left(HT - \frac{2D \cdot HT^2}{HP^2}\right) S(x, t) + \\ & + \frac{D \cdot HT}{HP^2} [n(x - HP, t) + n(x + HP, t)] + \frac{D \cdot HT^2}{HP^2} [S(x + HP, t) + S(x - HP, t)]. \end{aligned} \quad (\text{B})$$

Taki wzór na $n(x, t + HT)$ można już zaimplementować na komputerze.

Wariant C

Odmienne rozwiązanie można uzyskać stosując inną metodę aproksymacji drugiej pochodnej, którą można przedstawić przy pomocy następującego wzoru:

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \approx \frac{1}{2HP^2} \Delta^2 [n(x, t) + n(x, t + HT)].$$

Stosując aproksymację pierwszej pochodnej po czasie jak poprzednio można uzyskać wzór na $n(x, t + HT)$ postaci:

$$n(x, t + HT) = \left(1 - \frac{HT}{2HP^2} \Delta^2\right)^{-1} \left[\left(1 + \frac{HT}{2HP^2} \Delta^2\right) n(x, t) + HT \cdot S(x, t) \right].$$

Stosując przybliżenie jak powyżej otrzymujemy następujący wzór na $n(x, t + HT)$:

$$\begin{aligned} n(x, t + HT) = & \left[1 - \frac{2D \cdot HT}{HP^2} - \frac{3D^2 HT^2}{2HP^4}\right] n(x, t) + \\ & + \left[\frac{D \cdot HT}{HP^2} - \frac{D^2 HT^2}{HP^4}\right] [n(x - HP, t) + n(x + HP, t)] + \\ & + \frac{D^2 HT^2}{4HP^4} [n(x - 2HP, t) + n(x + 2HP, t)] + \\ & + \frac{D \cdot HT^2}{2HP^2} [S(x - HP, t) + S(x + HP, t)] + \left[HT - \frac{D \cdot HT^2}{HP^2}\right] S(x, t). \end{aligned} \quad (\text{C})$$

Taki wzór na $n(x, t + HT)$ można już zaimplementować na komputerze.

Zadania do wykonania

1. obliczyć rozkład koncentracji cząstek w czasie dla wszystkich wariantów obliczeń,
2. przedstawić wyniki graficznie,
3. porównać i omówić otrzymane wyniki.

Literatura

[1] M.S. Kielkiewicz, *Reaktory energetyczne*, WNT, Warszawa 1978.