P7

菲克定律：第一定律

如何在宏观尺度上确定扩散通量？

菲克第一定律（Fick's first law）描述了粒子通量取决于浓度梯度：

$$\vec{J}_{\text{Diff}} = -D\nabla c$$

- $\vec{J}_{\text{Diff}}$：扩散通量（Diffusion flux）
- D：扩散系数（Diffusion coefficient）
- ∇c：浓度梯度（Concentration gradient）

详细解释

菲克第一定律

- **菲克第一定律**指出，扩散通量 $\vec{J}_{\text{Diff}}$ 与浓度梯度 ∇c 成正比，并且方向相反。
- **数学表达式**：$\vec{J}_{\text{Diff}} = -D\nabla c$
  - $-D$：负号表示扩散是从高浓度区域向低浓度区域进行的。
  - D：扩散系数，表示物质扩散的速率，单位为面积/时间（例如，m^2/s）。
  - ∇c：浓度梯度，表示浓度随空间位置的变化率。

图示解释

- **状态1（State 1）**：初始状态，有CO_2和O_2两种气体，分别在不同区域。
- **状态2（State 2）**：经过一段时间后，CO_2和O_2在界面处开始扩散。
- **扩散通量（Diffusion Flux）**：
  - $\vec{J}_{\text{Diff, CO2}}$：$CO_2$从高浓度区域（左侧）向低浓度区域（右侧）扩散。
  - $\vec{J}_{\text{Diff, O2}}$：$O_2$从高浓度区域（右侧）向低浓度区域（左侧）扩散。

实际应用

菲克第一定律在许多科学和工程领域中都有广泛应用，包括：

- **化学工程**：描述反应器中物质的扩散。
- **生物学**：解释细胞膜上分子的扩散行为。
- **环境科学**：预测污染物在水体或大气中的扩散。

P8

菲克定律：第二定律

如何在宏观尺度上确定扩散流？

菲克第二定律（Fick's second law）描述了浓度随时间的演变：

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_{\mathrm{Diff}} + S = D\Delta c + S$$

- $\frac{\partial c}{\partial t}$：浓度的时间变化率（Temporal evolution of concentration）
- $\vec{J}_{\mathrm{Diff}}$：扩散通量（Diffusion flux）
- S：源/汇项（Source/sink terms）
- D：扩散系数（Diffusion coefficient）
- Δc：浓度的拉普拉斯算子（Laplacian of concentration）

详细解释

菲克第二定律

- **菲克第二定律**提供了一个关于浓度随时间变化的偏微分方程，描述了扩散过程中浓度的动态变化。
- **数学表达式**：$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_{\mathrm{Diff}} + S = D\Delta c + S$
    - $\frac{\partial c}{\partial t}$：浓度的时间变化率。
    - $-\nabla \cdot \vec{J}_{\mathrm{Diff}}$：扩散通量的散度，表示通量的变化。
    - S：源/汇项，表示系统中生成或消耗的物质。
    - $D\Delta c$：扩散系数乘以浓度的拉普拉斯算子，描述浓度的空间变化对时间变化的影响。

对比其他方程

- **热扩散方程（Heat diffusion equation）**：

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_{\mathrm{Cond}} + S = \lambda \Delta T + S$$

    - $\frac{\partial T}{\partial t}$：温度的时间变化率。
    - $\vec{J}_{\mathrm{Cond}}$：导热通量（Heat conduction flux）。
    - $\lambda \Delta T$：热导率乘以温度的拉普拉斯算子。
- **纳维-斯托克斯方程（Navier-Stokes equations）**：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \vec{v} \cdot \nabla(\rho \vec{v}) = -\nabla p + \eta \Delta \vec{v} + f_{\mathrm{volume}}$$

    - $\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v})$：动量的时间变化率。

- $\vec{v} \cdot \nabla(\rho \vec{v})$：动量的对流项（Convective term）。
- $-\nabla p$：压力梯度项。
- $\eta \Delta \vec{v}$：粘性扩散项（Viscous diffusion term）。
- f_{volume}：体积力项（Body force term）。

Example

P

氢扩散建模

墙壁氢损失量是多少？

假设

- **稳态条件**：系统在稳态下运行，所有变量随时间不变。
- **墙内外浓度恒定**：墙的内部和外部的氢浓度保持不变。
- **y 和 z 方向无扩散传输**：氢扩散仅在 x 方向进行，忽略 y 和 z 方向的扩散。
- **墙中无物种生成**：墙中没有氢的生成或消耗。

参数

- **墙的宽度** w
- **墙的高度和长度** h 和 l
- **墙中氢的扩散系数** D
- **罐内氢浓度** c_{in} 和环境中氢浓度 c_{out}
- **通过墙的体积流量** Q_{out}

详细解释

基本方程

根据菲克定律，稳态条件下氢通过墙的扩散流量可以表示为：

$$J_{\text{Diff}} = -D\frac{dc}{dx}$$

其中：

- J_{Diff} 是扩散通量。
- D 是扩散系数。
- $\frac{dc}{dx}$ 是浓度梯度。

氢的流量

氢的流量可以通过扩散通量乘以墙的面积得到：

$$Q_{\text{out}} = J_{\text{Diff}} \cdot A = -D\frac{c_{\text{in}} - c_{\text{out}}}{w} \cdot (h \cdot l)$$

其中：

- $A = h \cdot l$ 是墙的面积。

求解步骤

1. **确定浓度梯度**：
   - 墙内外氢浓度差：$\Delta c = c_{\text{in}} - c_{\text{out}}$
   - 浓度梯度：$\frac{dc}{dx} = \frac{c_{\text{in}} - c_{\text{out}}}{w}$
2. **计算扩散通量**：
   - $J_{\text{Diff}} = -D\frac{\Delta c}{w}$
3. **计算氢流量**：
   - 墙的面积：$A = h \cdot l$
   - 体积流量：$Q_{\text{out}} = J_{\text{Diff}} \cdot A$

总结

通过以上假设和参数，可以使用菲克定律计算氢通过墙的损失量。这个模型假设稳态条件和简单的扩散过程，是分析氢气泄漏和储存的基础。