# Диффузия

October 17, 2024

## 1 Вывод уравнения диффузии из случайного блуждания

Делим пространство на отрезки:

$$N(z,t) \to N_k(t)$$

Вводим модель случайного блуждания: **каждый атом совершает скачок на расстояние $\Delta z$ за время $\Delta t$.** (В реальности это расстояние и этот промежуток времени являются средними).

Куда совершается этот скачок? Он совершается в случайном направлении (вправо или влево по оси z). Более конкретно, **за каждый промежуток времени совершается скачок вправо с вероятностью 1/2, либо скачок влево с вероятностью 1/2**.

Давайте посмотрим, что происходит с количеством частиц на каждом отрезке при изменении времени на $\Delta t$**.** Рассмотрим, что происходит на отрезке k.

$$N_k(t+\Delta t) = \frac{1}{2}N_{k-1}(t) + \frac{1}{2}N_{k+1}(t)$$

$$N_k(t+\Delta t) - N_k(t) = \frac{1}{2}N_{k-1}(t) - N_k(t) + \frac{1}{2}N_{k+1}(t)$$

$$\frac{N_k(t+\Delta t) - N_k(t)}{\Delta t} = \frac{1}{2\Delta t}\left[N_{k-1}(t) - 2N_k(t) + N_{k+1}(t)\right]$$

$$\frac{N_k(t+\Delta t) - N_k(t)}{\Delta t} = \frac{(\Delta z)^2}{2\Delta t}\left[\frac{N_{k-1}(t) - 2N_k(t) + N_{k+1}(t)}{(\Delta z)^2}\right]$$

$$\frac{N(z,t+\Delta t) - N(z,t)}{\Delta t} = \frac{(\Delta z)^2}{2\Delta t}\left[\frac{N(z-\Delta z,t) - 2N(z,t) + N(z+\Delta z,t)}{(\Delta z)^2}\right]$$

Мы должны перейти к пределу

$$\Delta z \to 0, \quad \Delta t \to 0$$

Мы обязаны предположить, что множитель перед скобкой при этом останется конечным числом. Обозначим его буквой D.

$$\frac{(\Delta z)^2}{2\Delta t} = D$$

$$\frac{\partial N}{\partial t}(z,t) = D\frac{\partial^2 N}{\partial z^2}(z,t) \tag{1}$$

## 2 Добавим испарение частиц

Пусть у нас в каждой точке атом может испариться (то есть исчезнуть) с вероятностью $p_k \in [0, 1]$ за промежуток времени $\Delta t$.

Давайте посмотрим, что происходит с количеством частиц на каждом отрезке при изменении времени на $\Delta t$. Рассмотрим, что происходит на отрезке k.

Для простоты предположим, что сначала происходит испарение, а потом происходит скачок атомов (случайное блуждание).

$$N_k (t + \Delta t) = \frac{1}{2} (1 - p_{k-1}) N_{k-1} (t) + \frac{1}{2} (1 - p_{k+1}) N_{k+1} (t)$$

$$N_k (t + \Delta t) - N_k (t) = \frac{1}{2} N_{k-1} (t) - N_k (t) + \frac{1}{2} N_{k+1} (t) - \frac{1}{2} [p_{k-1} N_{k-1} (t) + p_{k+1} N_{k+1} (t)]$$

$$\frac{N_k (t + \Delta t) - N_k (t)}{\Delta t} = \frac{1}{2\Delta t} [N_{k-1} (t) - 2N_k (t) + N_{k+1} (t)] - \frac{1}{2\Delta t} [p_{k-1} N_{k-1} (t) + p_{k+1} N_{k+1} (t)]$$

$$\frac{N_k (t + \Delta t) - N_k (t)}{\Delta t} = \frac{(\Delta z)^2}{2\Delta t} \left[ \frac{N_{k-1} (t) - 2N_k (t) + N_{k+1} (t)}{(\Delta z)^2} \right] - \frac{1}{2} \left[ \frac{p_{k-1}}{\Delta t} N_{k-1} (t) + \frac{p_{k+1}}{\Delta t} N_{k+1} (t) \right]$$

$$\frac{N (z, t + \Delta t) - N (z, t)}{\Delta t} = \frac{(\Delta z)^2}{2\Delta t} \left[ \frac{N (z - \Delta z, t) - 2N (z, t) + N (z + \Delta z, t)}{(\Delta z)^2} \right] - \frac{1}{2} \left[ \frac{p (z - \Delta z)}{\Delta t} N (z - \Delta z, t) + \frac{p (z + \Delta z)}{\Delta t} N (z + \Delta z, t) \right]$$

Мы должны перейти к пределу

$$\Delta z \to 0, \quad \Delta t \to 0$$

Мы обязаны предположить, что множитель перед скобкой при этом останется конечным числом. Обозначим его буквой D.

$$\frac{(\Delta z)^2}{2\Delta t} = D$$

Мы также обязаны предположить, что вероятность испарения, делённая на $\Delta t$, будет конечной величиной.

$$\frac{p (z)}{\Delta t} = K (z)$$

Тогда получаем уравнение:

$$\frac{\partial N}{\partial t} (z, t) = D \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} (z, t) - K (z) N (z, t) \tag{2}$$

## 3 В 3D пространстве

$$\frac{\partial N}{\partial t} (x, y, z, t) = D \left( \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} \right) - K (x, y, z) N \tag{3}$$

$$\frac{(\Delta z)^2}{6\Delta t} = D \tag{4}$$

$$\frac{p\left(x, y, z\right)}{\Delta t} = K\left(x, y, z\right) \tag{5}$$

В компьютерном моделировании методом случайного блуждания (методом Монте-Карло) нам понадобятся величины $\Delta z, \Delta t, p$. Если мы выбираем величину $\Delta z$ свободно, то остальные чётко вычисляются из предыдущих формул, то есть:

$$\Delta t = \frac{\left(\Delta z\right)^2}{6D} \tag{6}$$

$$p\left(x, y, z\right) = K\left(x, y, z\right)\Delta t \tag{7}$$

## 4 Коэффициент D зависит от координаты