

STICHTING
MATHEMATISCH CENTRUM
2e BOERHAAVESTRAAT 49
AMSTERDAM

ZW 1952 - 008

Een diffusieprobleem

A. Nijenhuis



1952

"Een diffusieprobleem"
door A. Nijenhuis.

Antwoord op een vraag van een landbouwchemicus.
Berekening der tabellen geschiedde op de Rekenafdeling.

Het probleem is de oplossing van het randwaardenprobleem:

a) $D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{\partial C}{\partial t}$ voor $-l \leq x \leq l \quad t > 0$

b) $\frac{\partial C}{\partial x} = 0$ voor $x = \pm l \quad t > 0$

(1)

c) $C = C_0$ voor $t = 0 \quad -l \leq x < 0$

d) $C = 0$ voor $t = 0 \quad 0 < x \leq l$

De oplossing luidt voor $l = \infty$:

(2) $C(x, t) = C_0 \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{x/\sqrt{Dt}} e^{-\xi^2/2} d\xi \right\}$

Deze oplossing is bruikbaar voor het geval $l < \infty$ zolang er op $x = -l$ nog niet teveel stof binnengestroomd, en $x = l$ nog niet teveel gepasseerd is. Beide bedragen zijn gelijk aan:

(3) $q \int_{-l}^{\infty} C(x, t) dx = q C_0 \int_{-l}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{x/\sqrt{Dt}} e^{-\xi^2/2} d\xi \right\} dx$

Voor geldigheid van deze approximatiemethode moet dit klein genoeg zijn. De totale hoeveelheid stof is $l q C_0$; laat toe dat de fractie ε (b.v. 1%) mag ontsnappen zonder dat de nauwkeurigheid wordt verstoord. Hieraan is voldaan voor die waarden van t waarvoor

(4) $\psi\left(\frac{l}{\sqrt{Dt}}\right) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{l} \int_{-l}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{x/\sqrt{Dt}} e^{-\xi^2/2} d\xi \right\} dx \leq \varepsilon$

Omvorming van het middelste lid geeft (zie Bijlage 1)

$$(5) \quad \psi(x) = -\frac{1}{2} + \frac{e^{-\frac{1}{2}x^2}}{x\sqrt{2\pi}} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2/2} d\xi$$

In bijlage 2 is een tabel van ψ opgenomen voor aannemelijke waarden van $\psi(x)$. Merk op dat de relatie

$$(6) \quad \int_0^\infty \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{x/\sqrt{2Dt}} e^{-\xi^2/2} d\xi \right\} dx = \sqrt{\frac{Dt}{\pi}}$$

hiermee meteen geverifieerd is, immers het linkerlid is gelijk aan (vgl. (4))

$$(7) \quad \lim_{l \rightarrow 0} l \psi\left(\frac{l}{\sqrt{2Dt}}\right) = \sqrt{2Dt} \lim_{x \rightarrow 0} x \psi(x) = \sqrt{2Dt} \lim_{x \rightarrow 0} x \frac{e^{-\frac{1}{2}x^2}}{x\sqrt{2\pi}} = \sqrt{\frac{Dt}{\pi}}$$

De hoeveelheid die ten tijde t gepasseerd is, wordt uitgedrukt door

$$(8) \quad A_2 = q \int_0^l C(x,t) dx = q C_0 \int_0^\infty \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{x/\sqrt{2Dt}} e^{-\xi^2/2} d\xi \right\} dx = q C_0 \sqrt{\frac{Dt}{\pi}}$$

Zoals gezegd, het bruikbare interval van t wordt bepaald door middel van ξ en de grafiek in Bijlage 1.

Voor grote waarden van t is (8) niet bruikbaar meer; dan gaan we over tot de volgende beschouwing. We schrijven $C(x,t)$ als een som van producten van functies van x en t , zó dat elke term aan de diff.verg. en randvoorwaarde voldoet. De coëfficiënten worden dan later zo gekozen dat ook is voldaan aan de beginvoorwaarde. Het blijkt (zie Bijlage 3) dat $f(x)g(t)$ voldoet aan (1 a,b) alleen dan als

$$(9a) \quad f(x)g(t) = \text{const.},$$

of

$$(9b) \quad f(x)g(t) = \sin \lambda x e^{-\lambda^2 Dt}, \quad \lambda l = (n + \frac{1}{2})\pi \quad n \text{ geheel},$$

of

$$(9c) \quad f(x)g(t) = \cos \lambda x e^{-\lambda^2 Dt}, \quad \lambda l = n\pi \quad n \text{ geheel} \neq 0.$$

De oplossing van (1) kan dus geschreven in de gedaante

$$(10) \quad C(x,t) = b_0 + \sum_{n=0}^{\infty} a_n \sin \frac{(n+\frac{1}{2})\pi x}{l} e^{-(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2 Dt/l^2} +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} b_n \cos \frac{n\pi x}{l} e^{-n^2 \pi^2 Dt/l^2}$$

De a_n en b_n worden nu bepaald uit het feit dat $C(x,0)$ gegeven is. Deze beschouwing is uitgevoerd in Bijlage 4; het blijkt dat alle cosinus-termen wegvallen terwijl de sinustermen blijven staan. Het eerste komt

doordat $C(x, 0) = \frac{1}{2}C_0$ een oneven functie is van x . Men vindt zo:

$$(11) \quad C(x, t) = \frac{1}{2}C_0 - \frac{C_0}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n+\frac{1}{2}} \sin(n+\frac{1}{2}) \frac{\pi x}{l} e^{-D(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2 t / l^2}$$

De hoeveelheid stof in het deel $0 \leq x \leq l$ is nu gegeven door:

$$\begin{aligned} A'_2 &= q \int_0^l C(x, t) dx = \frac{1}{2} q l C_0 - \frac{q C_0}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n+\frac{1}{2}} e^{-D(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2 t / l^2} \int_0^l \sin(n+\frac{1}{2}) \frac{\pi x}{l} dx \\ (12) \quad &= \frac{1}{2} q l C_0 - \frac{q C_0}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n+\frac{1}{2}} e^{-D(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2 t / l^2} \left[-\frac{l \cos(n+\frac{1}{2}) \frac{\pi x}{l}}{(n+\frac{1}{2}) \pi} \right]_0^l = \\ &= \frac{1}{2} q l C_0 - \frac{q C_0 l}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+\frac{1}{2})^2} e^{-D(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2 t / l^2} = \\ &= q l C_0 \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+\frac{1}{2})^2} e^{-D(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2 t / l^2} \right). \end{aligned}$$

Dit leidt tot

$$(13) \quad \frac{A'_1 - A'_2}{A'_1 + A'_2} = \frac{2}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+\frac{1}{2})^2} e^{-D(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2 t / l^2},$$

hetgeen dus niet overeenstemt met de formule in het boek van Wahl en Bonner (New York 1951, p.78). Dit zou kunnen komen door een verschil in notatie: de lengte van de buis is hier 2 l.

Hier moet nu onderzocht worden wanneer afbreken van de reeks bij $n=2$ geoorloofd is. Het is redelijk, hier als maatstaf te nemen dat de fout in A'_2 niet groter is dan $\varepsilon l q C_0$ (dezelfde als eerst); dan moet

$$(14) \quad \frac{1}{\pi^2} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{(n+\frac{1}{2})^2} e^{-D(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2 t / l^2} < \varepsilon$$

of na wederinvoering van $x = \frac{l}{\sqrt{2Dt}}$:

$$(15) \quad \Omega(x) \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{1}{\pi^2} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{(n+\frac{1}{2})^2} e^{-(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2 / 2 x^2} < \varepsilon$$

Op Bijlage 5 is een tabel gegeven van $\Omega(x)$ voor $2 \leq x \leq 5$ zodat ook hier de nauwkeurigheid af te lezen is. In de grafiek van ψ en Ω (Bijl.7) vindt men het snijpunt van beide krommen.

Het hoort bij $x = 3.3$, en geeft de functiewaarde $10^{-4,5}$. Dit betekent dus dat voor $x < 3.3$ formule (12) te prefereren is, en voor $x > 3.3$ formule (8). In beide gevallen is de relatieve fout hoogstens gelijk aan $10^{-4,5}$.

Tenslotte is in Bijlage 6 de functie $A_2 \left(\frac{t}{\sqrt{2Dt}} \right)$ numeriek weergegeven in de omgeving van $X = 3,3$ berekend volgens beide methoden.¹⁾ Van de reeks zijn drie termen genomen; omdat Wahl en Bonner er twee geven, is in een aparte kolom de derde term gegeven, zodat de invloed daarvan nagegaan kan worden. Voorts is hieronder een tabel die $A_2'/(q_1C_0 - A_2')$ geeft, met de waarden van $1/x^2$. Deze waarden liggen ten grondslag aan Bijlage 9.

x	$1/x^2$	$A_2'/(q_1C_0 - A_2')$
1.0	1	0.6181
1.1	0.826446	0.5475
1.2	0.644444	0.4879
1.3	0.591716	0.4381
1.4	0.510204	0.3964
1.5	0.444444	0.3614
1.6	0.390625	0.3317
1.7	0.346021	0.3065
1.8	0.308642	0.2847
2.0	0.25	0.2491
2.2	0.206612	0.2215
2.4	0.173611	0.1994

¹⁾ Voor grafiek zie bijlagen 8 en 9.

Berekening van $\ell \psi\left(\frac{\ell}{\sqrt{2Dt}}\right) = \int_{\ell}^{\infty} \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{x/\sqrt{2Dt}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi \right\} dx.$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{x/\sqrt{2Dt}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{x/\sqrt{2Dt}}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi =$$

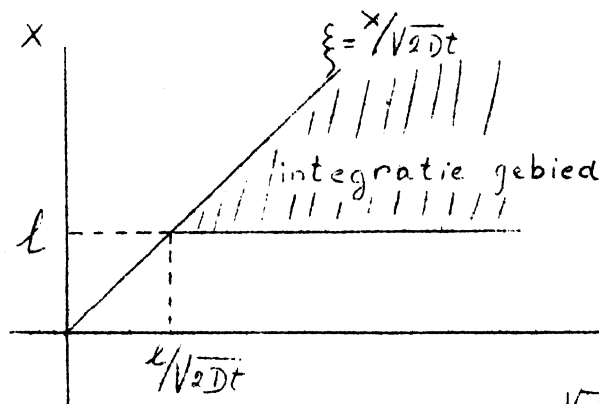
(16)

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{x/\sqrt{2Dt}}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi.$$

dus:

$$(17) \quad \ell \psi\left(\frac{\ell}{\sqrt{2Dt}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\ell}^{\infty} \int_{x/\sqrt{2Dt}}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi dx.$$

We gaan de volgorde van integratie verwisselen; daartoe een schets van het integratiegebied



$$\ell \psi\left(\frac{\ell}{\sqrt{2Dt}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\ell/\sqrt{2Dt}}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi \int_{\ell}^{\sqrt{2Dt}\xi} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\ell/\sqrt{2Dt}}^{\infty} (\xi\sqrt{2Dt} - \ell) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi =$$

(18)

$$= -\frac{\ell}{\sqrt{2\pi}} \int_{\ell/\sqrt{2Dt}}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi + \frac{\sqrt{2Dt}}{2\pi} \int_{\ell/\sqrt{2Dt}}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi =$$

$$= \frac{-\ell}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} + \frac{\ell}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\ell/\sqrt{2Dt}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi + \frac{\sqrt{2Dt}}{2\pi} e^{-\ell^2/4Dt} =$$

$$= \ell\left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\ell/\sqrt{2Dt}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi\right) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{2Dt}}{\ell} e^{-\ell^2/4Dt}$$

dus

$$(19) \quad \psi(x) = -\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi + \frac{e^{-x^2/2}}{x\sqrt{2\pi}}.$$

Tabel van

$$\psi(x) \stackrel{\text{def.}}{=} -\frac{1}{2} + \frac{e^{-\frac{1}{2}x^2}}{x\sqrt{2\pi}} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2/2} d\xi$$

x	$\psi(x)$	$^{10}\log \psi(x)$
4	0.000001	-6
3	0.000127	0.104 -4
2.6	0.000563	0.751 -4
2.4	0.001133	0.054 -3
2.2	0.002222	0.347 -3
2	0.004245	0.628 -3
1.8	0.007931	0.899 -3
1.6	0.014526	0.1619 -2
1.4	0.026191	0.418 -2
1.2	0.046752	0.670 -2
1	0.083316	0.921 -2
0.8	0.150259	0.1768 -1

(Voor grafiek zie Bijlage 7)

Oplossing van (1, a, b) voor $C = f(x)g(t)$.
 Uit (1 a) volgt na deling door :

$$(20) \quad D \frac{f''}{f} = \frac{g'}{g}$$

Het linkerlid is een functie van x , het rechter een van t ; dus beide zijn constant $= -\lambda^2 D$. Dan volgt voor $\lambda \neq 0$:

$$f(x) = \alpha \cos \lambda x + \beta \sin \lambda x$$

(21)

$$g(t) = e^{-\lambda^2 D t}$$

terwijl voor $\lambda = 0$:

$$(22) \quad f(x) = ax + b \qquad g(t) = \text{constant.}$$

Ook moet voldaan aan de randvoorwaarden (1 b), substitutie $x = \pm l$ geeft dan:

$$\frac{d}{dx} \cos \lambda l = -\lambda \sin \lambda l = 0 \rightarrow \lambda l = n\pi, \quad n \text{ geheel} \quad n > 0$$

$$(23) \quad \frac{d}{dx} \sin \lambda x = \lambda \cos \lambda l = 0 \rightarrow \lambda l = (n + \frac{1}{2})\pi, \quad n \text{ geheel} \quad n \geq 0$$

$$\frac{d}{dl} (al + l) = 0 \quad \rightarrow a = 0$$

Dit geeft juist (9).

Oplossing van a_n , b_n uit:

$$(24) \quad C(x, 0) = b_0 + \sum_{n=0}^{\infty} a_n \sin \frac{(n+\frac{1}{2})\pi x}{l} + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \cos \frac{n\pi x}{l}$$

met $C(x, 0)$ gegeven door (1 c, d). Het is een stelling van Fourierreeksen dat een ontwikkeling (24) steeds mogelijk is, zolang $C(x, 0)$ niet te veel singulariteiten heeft; dat is hier niet het geval.

Men kan door directe berekening verifiëren dat

$$\int_{-l}^{+l} \sin(n+\frac{1}{2}) \frac{\pi x}{l} \cos \frac{m\pi x}{l} dx = 0$$

$$(25) \quad \int_{-l}^{+l} \sin(n+\frac{1}{2}) \frac{\pi x}{l} \sin(m+\frac{1}{2}) \frac{\pi x}{l} dx = \begin{cases} 0 & \text{als } n \neq m \\ l & \text{,, } n = m \end{cases}$$

$$\int_{-l}^{+l} \cos \frac{n\pi x}{l} \cos \frac{m\pi x}{l} dx = \begin{cases} 0 & \text{als } n \neq m \\ l & \text{,, } n = m \end{cases}$$

Voorts vindt men gemakkelijk:

$$\int_{-l}^{+l} C_0(x, 0) \frac{\sin(n+\frac{1}{2})x}{l} dx = - \frac{C_0 l}{(n+\frac{1}{2})\pi}$$

$$\int_{-l}^{+l} C(x, 0) \cos \frac{n\pi x}{l} dx = 0$$

$$\int_{-l}^{+l} C(x, 0) dx = l C_0$$

Vermenigvuldiging van (24) met 1, $\sin \frac{(n+\frac{1}{2})\pi x}{l}$, $\cos \frac{n\pi x}{l}$ resp. en integratie geeft in verband met (25) en (26):

$$(27) \quad b_0 = \frac{1}{2} C_0, \quad b_n = 0, \quad a_n = - \frac{C_0}{(n+\frac{1}{2})\pi}$$

Bijlage 5.Tabel van

$$\Omega(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\pi^2} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{(n+\frac{1}{2})^2} e^{-\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 \frac{\pi^2}{2} x^2}$$

x	$\Omega(x)$	$10^{\log \Omega(x)}$
2	0.000000	
2.5	0.000001	-6 0.000000
3	0.000010	-5 0.000000
3.2	0.000022	-5 0.36173
3.4	0.000045	-5 0.65321
3.6	0.000080	-5 0.90309
3.8	0.000131	-4 0.11727
4	0.000199	-4 0.29885
5	0.000837	-4 0.92273

(Voor grafiek zie Bijlage 7.)

Bijlage 6.

Tabel van $\frac{A'_2}{q\ell c_0} = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+\frac{1}{2})^2} e^{-\frac{(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2}{2} x^2}$

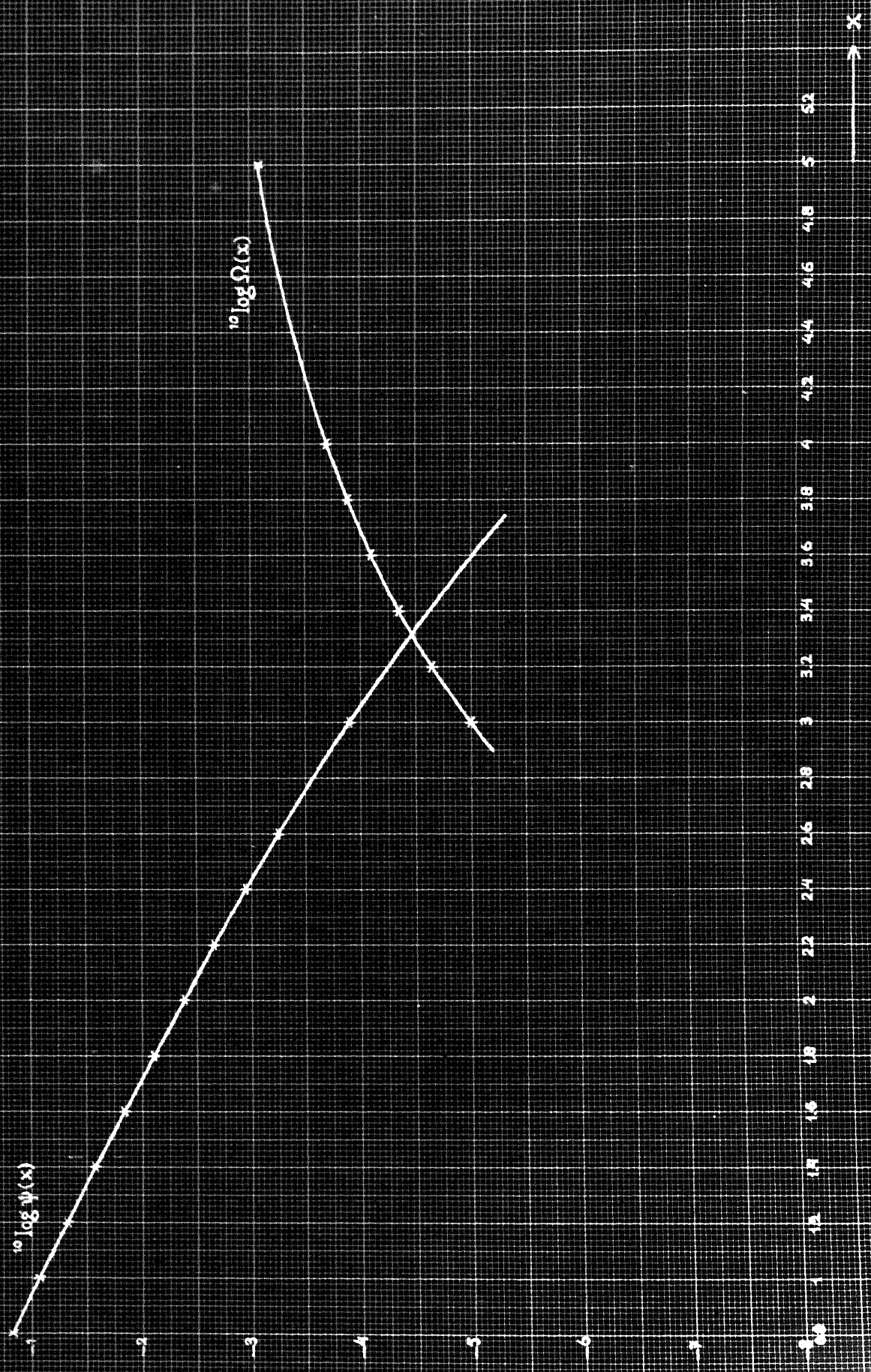
$$\frac{A_2}{q\ell c_0} = \frac{1}{x\sqrt{2\pi}}$$

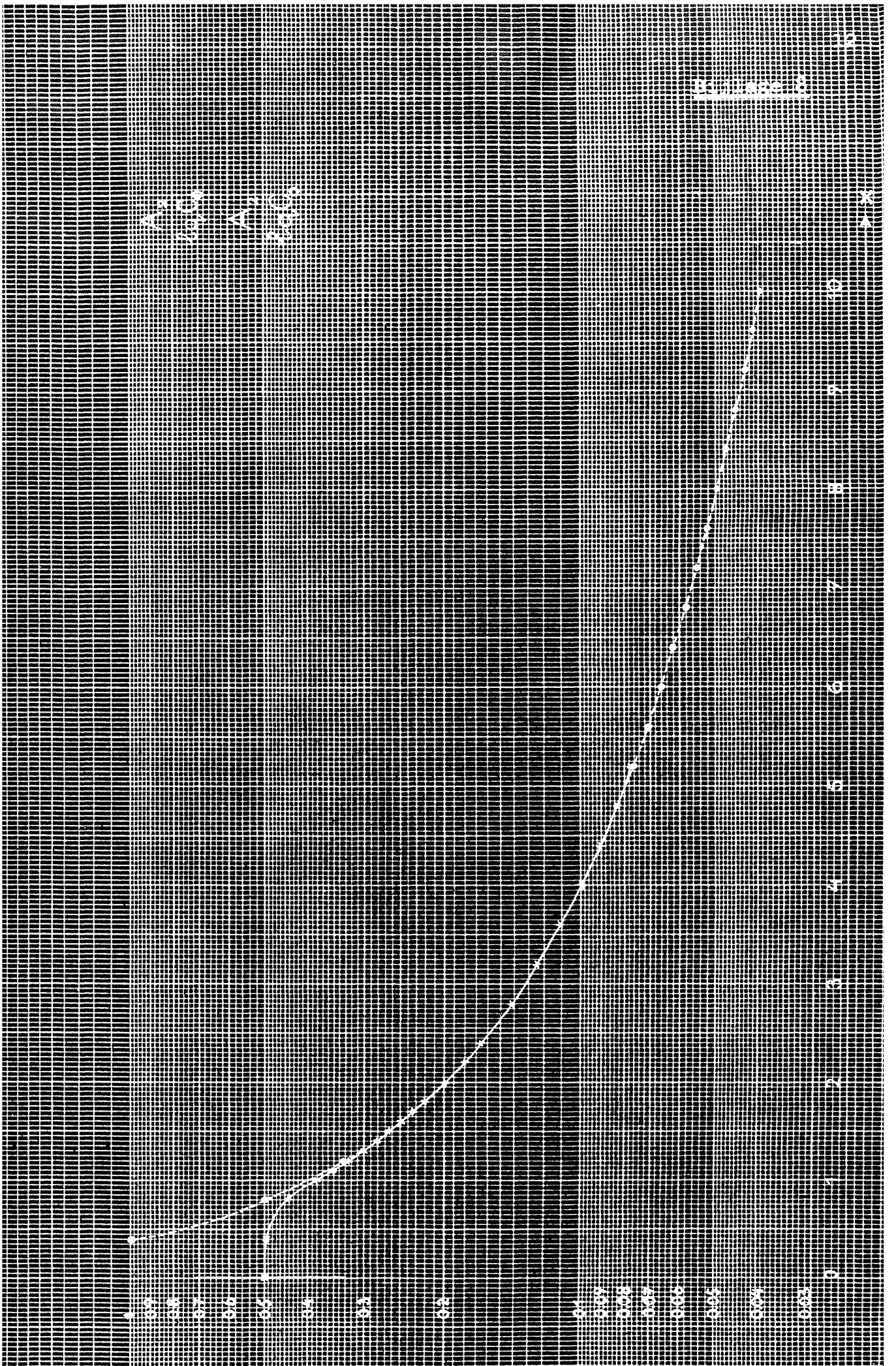
waar

$$x = \frac{\ell}{\sqrt{2Dt}}$$

x	$\frac{4}{25\pi^2} e^{-25\pi^2/8}$	$A'_2/q\ell c_0$	$A_2/q\ell c_0$	$1/x^2$
0.	0	0.5	∞	∞
0.4	0.000000	0.499818	0.997356	6.25
0.8		0.441018	0.498678	1.5625
1.0		0.381975		1.
1.1		0.353791		0.826446
1.2		0.327918	0.332452	0.644444
1.3		0.304627		0.591716
1.4		0.283871		0.510204
1.5	0.0000002	0.265452		0.444444
1.6	0.0000059	0.249107	0.249339	0.390625
1.7	0.0000037	0.234570		0.346021
1.8	0.0000117	0.221591		0.308642
2.0	0.0000717	0.199464	0.199471	0.25
2.2	0.0002733	0.181337		0.206612
2.4	0.000077	0.166225	0.166226	0.173611
2.8	0.000317	0.142483	0.142479	0.127551
3.2	0.000798	0.124692	0.124661	0.097656
3.6	0.001501	0.110897	0.110817	0.077160
4.0	0.002359	0.099934	0.099736	0.0625
4.4	0.003296	0.091063	0.090669	0.051653
4.8	0.004251	0.083783	0.083113	0.043403
5.2	0.005181	0.077743	0.076720	0.036982
5.6			0.071240	0.031888
6.0			0.066490	0.027778
6.4			0.062335	0.024414
6.8			0.058668	0.021626
7.2			0.055409	0.019290
7.6			0.052492	0.017313
8.0			0.049868	0.015625
8.4			0.047493	0.014172
8.8			0.045334	0.012913
9.2			0.043363	0.011815
9.6			0.041556	0.010851
10.0			0.039894	0.01

Bijlage 7





Bijlage 9

$$\phi(x) = \frac{A'_2}{q(C_0 - A'_2)}$$

$$\frac{1}{x^2} = \frac{2Dt}{l^2}$$

