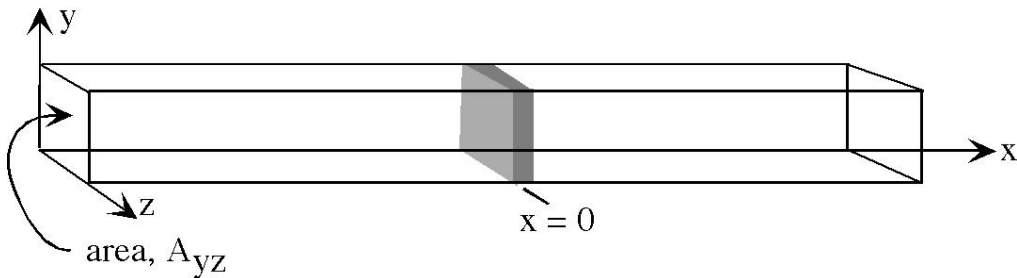


3. Difusión de una inyección puntual e instantánea:

La ecuación de conservación de la masa también se conoce como ecuación de transporte, porque describe el transporte de especies escalares en sistemas de fluidos. En esta sección y en las siguientes se exploran soluciones analíticas a la misma, que describen lo que sucede con la materia bajo distintas condiciones de contorno e iniciales. Para las corrientes incompresibles con coeficientes de difusión isotrópicos y homogéneos, podemos empezar con la siguiente forma de la ecuación de transporte. De momento, pasaremos por alto el término fuente / sumidero.

$$(1) \quad \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right]$$

La primera solución describe la evolución de una cantidad de materia, M , inyectada instantáneamente en el momento $t = 0$ en un fluido estacionario ($u, v, w = 0$). Trabajaremos con un sistema unidimensional en dirección x , o sea, que es uniforme en y y en z , de modo que $\partial/\partial y = 0$, y $\partial/\partial z = 0$. Más abajo se muestra un modelo de sistema con estas características. Una lámina de masa (gris) se introduce en un tubo largo y estrecho. La masa se distribuye uniformemente en el plano y - z , con una dimensión despreciable en x , de modo que la concentración inicial es $C(x) = M \delta(x)$, donde $\delta()$ es la función delta de Dirac. La ecuación de transporte para este sistema aparece en (2).



Inyección puntual e instantánea en una dimensión:

$$(2) \quad \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad M \text{ introducida en } t = 0, x = 0.$$

La solución, $C(x, t)$, se puede hallar de la siguiente manera. Partiendo de (2) prevemos que la concentración será una función de M , D [$L^2 T^{-1}$], x [L], y t [T], donde las dimensiones están expresadas entre corchetes en términos de masa [M], longitud [L] y tiempo [T]. En un sistema unidimensional, la concentración se expresa en unidades de masa por longitud, C [$M L^{-1}$]. Partiendo del análisis dimensional (véase el teorema Pi de Buckingham y el método de las variables repetidas) el anterior conjunto de parámetros forma los siguientes grupos adimensionales:

$$(3) \quad \frac{C}{M/\sqrt{4\pi Dt}} = f\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right)$$

Los factores 4π y 4 se añaden ahora por comodidad, porque aparecen en la solución final. Originalmente, estos factores se hallaron por tanteo. Si definimos $\eta = x/\sqrt{4Dt}$, y a continuación calculamos (2) con (3):

$$(4) \quad \frac{d}{d\eta} \left(\frac{df}{d\eta} + 2f\eta \right) = 0$$

Igualando a cero los elementos entre paréntesis, obtenemos una solución para (4):

$$(5) \quad \frac{df}{d\eta} + 2f\eta = 0,$$

que, a su vez, tiene la solución:

$$(6) \quad f = A_0 \exp(-\eta^2),$$

donde A_0 es una constante arbitraria. (6) nos da una forma concreta de (3) que es una solución para (2)

$$(7) \quad C(x, t) = \frac{A_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

Dado que la masa total debe conservarse a lo largo del tiempo, para todo él:

$$(8) \quad M = \int_{x=-\infty}^{\infty} C dx,$$

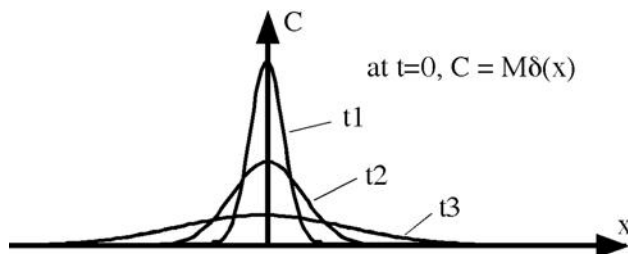
de modo que $A_0 = M$. En resumen, tenemos la siguiente solución.

Inyección de materia (puntual) en una dimensión:

M inyectada en $t = 0$ y $x = 0$.

Condición inicial, $C(x) = M \delta(x)$.

$$(9) \quad C(x, t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) = [M/L]$$



Nótese que la solución anterior es correcta para un sistema matemático unidimensional, en el que $C[M/L]$. En los sistemas reales (tridimensionales) la concentración debe expresarse en unidades de M/L^3 . Para convertir la solución matemática que aparece en (9) a un dominio real, hay que dividir por las dimensiones despreciadas, aquí la sección transversal del sistema en el plano y-z, A_{yz} .

$$(10) \quad C(x, t) = \frac{M}{A_{yz} \sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) = [M/L^3]$$

Recuérdese que se obtuvo la misma solución del modelo estadístico de difusión, tal y como se describió en el apartado “Modelo conceptual de difusión”.

Momentos de la distribución de concentración.

Es útil caracterizar la geometría de la distribución de masa en evolución basándose en sus momentos. El momento cero nos da la masa total, M , de la nube:

$$\text{Momento cero} = M_0 = M = \int_{-\infty}^{\infty} C(x, t) dx.$$

Los momentos posteriores indican el centroide y la varianza de la distribución de masa.

$$\text{Primer momento} = M_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x C(x, t) dx$$

$$\text{Segundo momento} = M_2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 C(x, t) dx$$

La media indica el centroide de masa de la nube,

$$\text{Media} = \mu = \frac{M_1}{M_0}.$$

La varianza indica la anchura de la distribución.

$$\sigma^2 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu)^2 C(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} C(x, t) dx} = \frac{M_2}{M_0} - \mu^2.$$

Al calcular la media y la varianza de la distribución dada en (10), vemos que la media, $\mu = 0$, o sea, que el centroide de la nube se mantiene en $x = 0$ en todo momento. La varianza es:

$$(11) \quad \sigma^2 = 2Dt.$$

Si el coeficiente de difusión, D , es constante, la varianza de la distribución de la masa aumenta linealmente a lo largo del tiempo. Tomando la derivada de (11):

$$(12) \quad D = \frac{1}{2} \frac{d\sigma^2}{dt} = \frac{1}{2} \frac{\sigma_2^2 - \sigma_1^2}{t_2 - t_1}.$$

Esto constituye una herramienta útil para estimar el coeficiente de difusión realizando un seguimiento de la varianza de un trazador en difusión a lo largo del tiempo. Es útil hacer notar que, para una distribución de Gauss, la concentración para una desviación típica de uno a partir del centro de la masa es:

$$(13) \quad C(x = \sigma = \sqrt{2Dt}) = \left[\frac{M}{A_{yz} \sqrt{4\pi Dt}} \right] \exp\left(-\frac{2Dt}{4Dt}\right) = C_{\max}(t) \exp(-1/2) = 0.61 C_{\max},$$

donde C_{\max} es la concentración máxima en el cúmulo en el momento t , y viene dada por el coeficiente entre paréntesis que corresponde al elemento exponencial de (13), $C_{\max} = M / (A_{yz} (4\pi Dt)^{1/2})$.

Problemas de ejemplo (ábralos desde la página principal para verlos en una ventana nueva.)

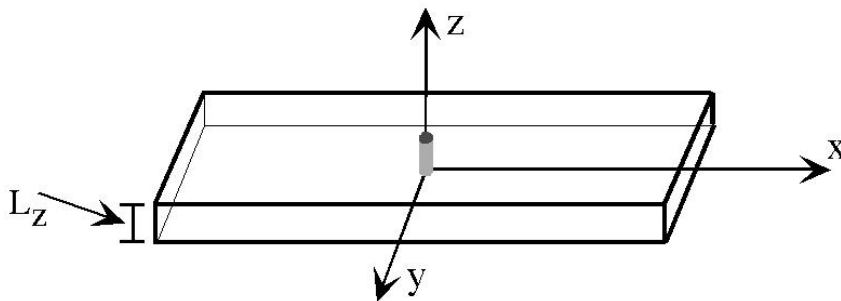
Por último, tal y como se explica en “Modelo conceptual de difusión”, la desviación típica, σ , proporciona una escala de longitudes útil para la nube en difusión. Teniendo en cuenta que el 95% de la masa total se halla contenido en un radio de $\pm 2\sigma$ del centroide, una escala convencional de longitud del cúmulo es:

$$(14) \quad L = 4\sigma.$$

Con esta definición del tamaño de la nube, sus límites vienen dados por la concentración $C(x = \pm 2\sigma) = 0,14 C_{\max}$.

Inyección puntual e instantánea en dos dimensiones:

Se inyecta una cierta cantidad de masa, M , en $x = y = z = 0$ en un fluido estacionario ($u = v = w = 0$). Las condiciones de flujo son uniformes en z ($\partial/\partial z = 0$). Inicialmente, el cúmulo se distribuye uniformemente en z , con dimensiones despreciables en x e y , de modo que la concentración inicial es $C(x,y,t=0) = M \delta(x)\delta(y)$, donde $\delta()$ es la función delta de Dirac.



Para generalizar, asumiremos que la difusión es anisotrópica, $D_x \neq D_y$. La ecuación de transporte para este sistema es, por lo tanto:

$$(15) \quad \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}.$$

Aplicando la ley de Fick y analizando (15), vemos que la difusión en x (1^{er} término del lado derecho) depende sólo de la distribución en x , y que la difusión en y (2^o término del lado derecho) depende sólo de la distribución en y . Esto nos lleva a proponer que la solución de (15) podría ser el producto de dos soluciones no acopladas (**uncoupled**) que describan la distribución en x e y .

$$(16) \quad C(x, y, t) = MC_1(x, t)C_2(y, t),$$

donde, claramente, C_1 no es una función de y , y C_2 no es una función de x . Si insertamos la forma de la solución propuesta en (15), obtenemos:

$$(17) \quad \frac{\partial}{\partial t}(C_1C_2) = C_1 \frac{\partial C_2}{\partial t} + C_2 \frac{\partial C_1}{\partial t} = D_x C_2 \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + D_y C_1 \frac{\partial^2 C_2}{\partial y^2}.$$

Esta ecuación se puede reformular para aislar las funciones C_1 y C_2 .

$$(18) \quad C_2 \left[\frac{\partial C_1}{\partial t} - D_x \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} \right] + C_1 \left[\frac{\partial C_2}{\partial t} - D_y \frac{\partial^2 C_2}{\partial y^2} \right] = 0.$$

La solución trivial, aunque inútil, es $C_1 = C_2 = 0$. Alternativamente, cada uno de los grupos de elementos entre paréntesis podría ser cero. Por ejemplo, si igualamos el primer paréntesis a cero, obtenemos:

$$(19) \quad \frac{\partial C_1}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2},$$

que es la ecuación de difusión (2) en 1-D. Partiendo de (7), podemos hallar la solución a (19).

$$(20) \quad C_1(x, t) = \frac{A_1}{\sqrt{4\pi D_x t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D_x t}\right)$$

Se puede hallar una forma similar para C_2 igualando a cero el segundo paréntesis de (18). Así pues, la solución completa sería de la forma:

$$(21) \quad C(x, y, t) = C_1(x, t)C_2(y, t) = \frac{A_1 A_2}{4\pi t \sqrt{D_x D_y}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t}\right),$$

donde A_1 y A_2 son constantes. El producto $A_1 A_2 = M$ se halla aplicando la condición:

$$(22) \quad M = \int_{y=-\infty}^{\infty} \int_{x=-\infty}^{\infty} C dx dy.$$

Por último, la solución bidimensional a (21) va en las unidades $[M L^{-2}]$, porque se ha despreciado la tercera dimensión. Para hallar la concentración correcta en un dominio real de tres dimensiones, hay que dividir la solución bidimensional entre la longitud de la dimensión que falta, es decir, entre L_z de la figura que aparece arriba. Resumiendo, tenemos la solución siguiente.

Inyección puntual e instantánea en dos dimensiones:

M inyectada en $t = 0$ y en $x = y = 0$.

Condición inicial, $C = M \delta(x) \delta(y)$.

$$(23) \quad C(x, y, t) = \frac{M}{L_z 4\pi t \sqrt{D_x D_y}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t}\right) = [ML^{-3}].$$

De (23) se deduce que el perfil de concentración, $C(x, y)$ a lo largo de cualquier corte en línea recta que atravesase el cúmulo de masa tendrá una distribución gaussiana. Dos ejemplos clarísimos son los perfiles $C(x, y = 0)$ y $C(x = 0, y)$. Se trata del resultado directo de la ley de Fick, que exige que el flujo en cualquier dirección sea proporcional sólo a los gradientes en dicha dirección. Si los coeficientes de difusión son anisotrópicos, la nube crecerá de forma anisotrópica, aumentando su longitud más rápidamente a lo largo del eje con mayor velocidad de difusión. La escala de longitudes de la nube a lo largo de cualquiera de los ejes será proporcional al coeficiente de difusión a lo largo del mismo.

$$(24) \quad \begin{aligned} L_x &= 4\sigma_x = 4\sqrt{2D_x t} \\ L_y &= 4\sigma_y = 4\sqrt{2D_y t} \end{aligned}$$

Con esta definición de la escala de longitudes, el borde de la nube se sitúa a 2σ a partir del centroide a lo largo de un contorno de concentración $C = 0,14 C_{\max}$, similar al del caso unidimensional antes descrito. Las características básicas de la inyección bidimensional de materia se muestran en la animación siguiente.

Difusión anisotrópica en dos dimensiones:

Esta animación presenta la difusión de una masa discreta vertida en $(x = 0, y = 0, t = 0)$.

La difusión es anisotrópica $D_x = 4 D_y$. Tal y como se indica en (24), las escalas de longitudes aumentan proporcionalmente a la raíz cuadrada de la difusión, de modo que

las dimensiones de la nube son anisotrópicas, con $L_x/L_y = \sqrt{D_x/D_y}$. En este

sistema, $L_x = 2L_y$. Nótese que los perfiles de concentración a lo largo de los ejes x e y tienen una forma gaussiana. Por último, si advertimos que el contorno 2σ alcanza $x = \pm L$ para $t = 600$ s., obtendremos una estimación del coeficiente de difusión, D_x .

Concretamente, habrá que aplicar la restricción $L_x = 2L$ cuando $t = 600$ s. en (24) para realizar la estimación de D_x .

Los análisis anteriores se pueden extender con facilidad a las tres dimensiones.

Inyección puntual e instantánea en tres dimensiones:

M inyectada con $t = 0$, y con $x = y = z = 0$.

Condición inicial, $C = M \delta(x)\delta(y)\delta(z)$.

$$(25) \quad C(x,y,z,t) = \frac{M}{(4\pi t)^{3/2} \sqrt{D_x D_y D_z}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t} - \frac{z^2}{4D_z t}\right) = [ML^{-3}]$$

Velocidad de dilución:

La velocidad de dilución de una nube se puede describir como la velocidad de cambio de la concentración máxima dentro de la misma. En una inyección de materia la concentración máxima, $C_{\max}(t)$, se produce en el centroide y corresponde al coeficiente que acompaña al exponencial en (10), (23), y (25).

$$(26) \quad \begin{aligned} 1-D: \quad C_{\max} &= \frac{M}{A_{yz}(4\pi D t)^{1/2}} \\ 2-D: \quad C_{\max} &= \frac{M}{L_z 4\pi t \sqrt{D_x D_y}} \\ 3-D: \quad C_{\max} &= \frac{M}{(4\pi t)^{3/2} \sqrt{D_x D_y D_z}} \end{aligned}$$

El sistema tridimensional produce la velocidad de dilución más alta, $C_{\max} \sim t^{-3/2}$, porque la difusión se produce en todas direcciones. En los sistemas de 1-D y 2-D, el flujo difusivo sólo puede producirse en 1 o 2 direcciones, respectivamente, de modo que la velocidad de dilución se reducía a $t^{-1/2}$ y t^{-1} , respectivamente. Las diferencias de velocidad de dilución se muestran más abajo. Un cantidad de masa se inyecta en un sistema de 1-D, 2-D y 3-D, de modo que en un periodo corto de tiempo la concentración máxima de cada nube es la misma. A continuación, la concentración máxima desciende más rápidamente en el sistema menos restringido, es decir, el de 3-D.

