

4. Condiciones de contorno

Cuando una nube en difusión se encuentra con un límite, su evolución subsiguiente se ve afectada por las características del mismo. A continuación se describen las expresiones matemáticas de cuatro condiciones de contorno usuales.

Flujo especificado: En este caso el flujo por área, $(q/A)_n$, que atraviesa el límite (es normal a él) viene especificado. El subíndice 'n' indica la dirección de la normal que apunta hacia afuera, de tal forma que se toma a $(q/A)_n$ como el flujo que abandona el dominio del fluido. La condición de contorno de flujo especificada se expresa, por lo tanto:

$$(1) \quad (q/A)_n = \text{flujo que abandona el dominio del fluido a través del límite.}$$

Concentración constante especificada: En este caso, se da el valor de concentración en el límite. De esta condición de contorno se habla en el capítulo 7, "Fuentes espacialmente distribuidas".

$$(2) \quad C_{\text{en el límite}} = \text{constante.}$$

Límite que no permite el flujo: Se trata de un caso especial de la condición de flujo especificada que aparece arriba, siendo $(q/A)_n = 0$. La condición más general es:

$$(3a) \quad [CV_n - D_n \partial C / \partial n] = 0.$$

Una vez más, el subíndice 'n' indica la normal que apunta hacia afuera. Cuando no se permite el fl

Condición de contorno en ausencia de flujo:

Las soluciones analíticas que cumplen la condición de contorno en ausencia de flujo (*no-flux boundary condition*) se hallan mediante el principio de superposición. El método exige que la siguiente ecuación de transporte sea lineal:

(5)

Esto es lo que suele suceder, a menos que la forma concreta de la fuente o del sumidero ($\pm S$) no sea lineal. Si la ecuación y la condición de contorno son lineales, se puede superponer (sumar) un número cualquiera de soluciones concretas para generar una nueva que se adapte a la condición inicial o de contorno deseada. El método se demuestra aquí para un sistema unidimensional en x , en el que la masa, M , se inyecta en $x = 0$ y $t = 0$. Para simplificar, se considera que la velocidad es cero en todos los puntos del sistema. El área transversal perpendicular a la dirección x es A_{yz} . Existe un límite sólido en $x = -L$. Concretamente, queremos resolver:

(6a)

(6b) Condición inicial ($t = 0$): $C(x) = M\delta(x)$.
Condición de contorno: $\partial C/\partial x = 0$ en $x = -L$.

La ecuación de transporte y la condición inicial del sistema se ven satisfechas por la solución unidimensional para una inyección puntual e instantánea en la posición de la fuente real:

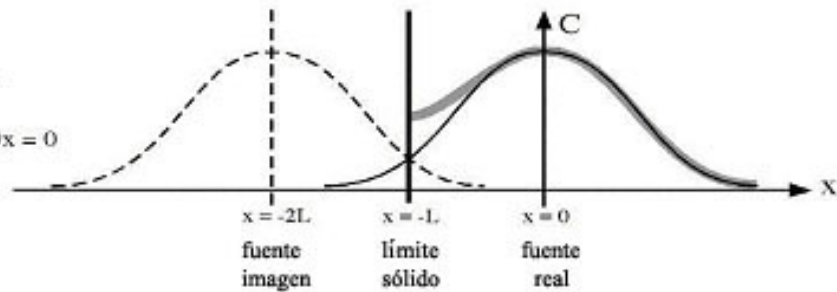
(7)

No obstante, esta solución, que se muestra con una línea continua negra en la figura siguiente, no cumple la condición de ausencia de flujo en $x = -L$. Concretamente, $\partial C/\partial x > 0$ en $x = -L$.

Además, (7) permite que la masa $\int_{-\infty}^{-L} C(x)dx$ atravesase el borde $x = -L$. Es posible sustituir con exactitud esta masa dentro del dominio real ($x > -L$) añadiendo una fuente nueva e idéntica en $x = -2L$. La fuente adicional se sitúa en la imagen especular de la fuente original, con el espejo colocado en el límite que impide el flujo $x = -L$. Por eso llamamos a la nueva fuente una fuente imagen. La distribución de la masa para la fuente imagen, $C_i(x,t)$, se muestra mediante una línea discontinua. Su forma es idéntica a la de la fuente original, $C(x,t)$, pero su punto máximo está desplazado de $x = 0$ a $x = -2L$. Este desplazamiento se consigue obligando al elemento exponencial a ser uno para $x = -2L$, es decir, igualando la variable independiente a cero en $x = -2L$.

(8)

Figura 1. Añadir una fuente imagen (puntos) a la fuente real (negra) para obtener una solución (gris) en el dominio real ($x > -L$) que cumpla la condición de contorno $\partial C / \partial x = 0$ en $x = -L$.



La superposición (suma) de las fuentes original e imagen se muestra dentro del dominio del fluido ($x > -L$) con una línea gris gruesa. Nótese concretamente que esta curva satisface la condición $\partial C / \partial x = 0$ en $x = 0$, tal y como se expresa en (6). La solución es, pues, la suma de (7) y (8):

(9)

Condición de contorno perfectamente absorbente:

El método de superposición también se puede emplear para cumplir una condición de contorno perfectamente absorbente. Pensemos de nuevo en el sistema unidimensional anteriormente descrito, con un límite en $x = -L$ que actúe como absorbedor perfecto. A continuación, busquemos la solución a:

(10a)

(10b) Condición inicial ($t = 0$): $C(x) = M\delta(x)$.
 Condición de contorno: $C(x = -L, t) = 0$.

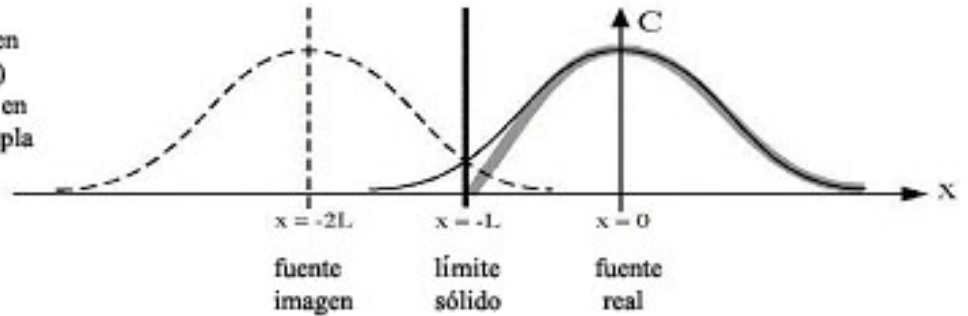
Igual que antes, la solución básica dentro del dominio del fluido será la válida para una inyección instantánea de masa en un punto discreto, en particular (7). Para satisfacer la condición de contorno, ahora restamos, en lugar de sumar, la fuente imagen.

(11)

Restando la fuente imagen (línea de puntos) de la fuente real (línea negra continua), la concentración en el límite queda fijada en cero. Nótese que la solución superpuesta (línea gris gruesa) indica un flujo hacia dentro del límite en $x = -L$, es decir, $\partial C / \partial x > 0$, lo cual tiene sentido hablando de un límite absorbente. Nótese asimismo que la solución (11) da concentraciones negativas en la región $x < -L$, lo cual no es realista desde el punto de vista físico. No obstante, dicha región se encuentra fuera del dominio real del fluido ($x > -L$), de modo que los valores irreales carecen de importancia. Únicamente es necesario

que las soluciones dentro del dominio real ($x > -L$) sean físicamente razonables, y lo son.

Figura 2. Restar la fuente imagen (puntos) de la fuente real (negra) para generar una solución (gris) en el dominio real ($x > -L$) que cumpla la condición de contorno $C(x = -L, t) = 0$.



Límites múltiples:

Si existe más de un límite, se necesitarán fuentes imagen adicionales. Siguiendo con el mismo sistema unidimensional antes descrito, ahora supongamos que tiene bordes tanto en $x = -L$ como en $x = +L$.

(12a)

(12b) Condición inicial ($t = 0$): $C(x) = M\delta(x)$.

Condición de contorno: $\partial C / \partial x = 0$ en $x = -L$ y en $x = +L$.

Para cumplir la condición de ausencia de flujo en $x = -L$, agregamos una fuente imagen en $x = -2L$, igual que antes. Para cumplirla en $x = +L$, necesitamos otra fuente imagen en $x = +2L$. Ambas aparecen en la figura 3.

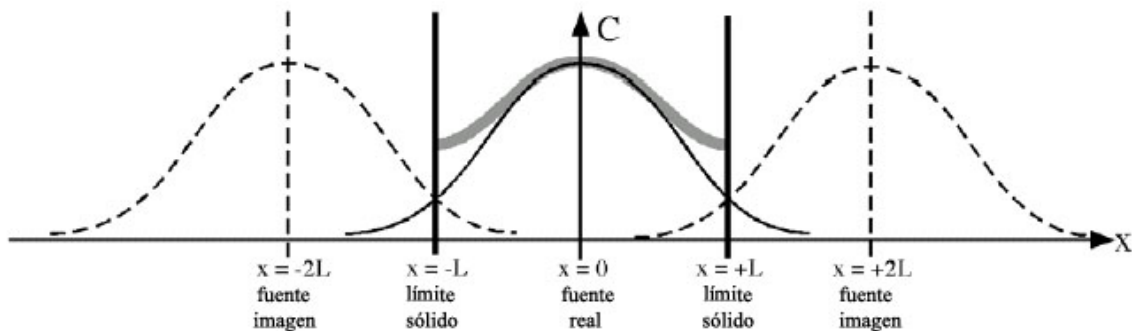


Figura 3. Para cumplir la condición de ausencia de flujo en ambos límites, se añaden dos fuentes imagen (puntos) a la fuente real (negra). Durante un periodo corto, la suma de estas tres fuentes (gris) es suficiente para satisfacer $\partial C / \partial x = 0$ en $x = \pm L$. No obstante, más adelante ambas fuentes imagen empezarán a perder masa a través de su límite opuesto, y la condición de ausencia de flujo dejará de cumplirse. Finalmente, se necesitarán imágenes en $x = \pm 2nL$, para todo número entero n .

La figura 3 muestra el campo de concentración (*concentration field*) por un corto espacio de tiempo. En un periodo más largo, se puede predecir, por ejemplo, que la fuente imagen que se origina en $x = -2L$ alcanzará y empezará a atravesar el borde de enfrente en $x = +L$, con lo cual el dominio real volverá a perder masa. Para equilibrar la pérdida, se necesita una nueva imagen adicional en $x = +4L$, es decir, en la imagen de $x = -2L$ a través de un ‘espejo’ situado en $x = +L$. Del mismo modo, la fuente imagen en $x = +2L$ necesitará su propia imagen al otro lado del borde $x = -L$, es decir, en $x = -4L$. Si continuamos con este razonamiento, en último término necesitamos un número infinito de imágenes, igual que un objeto situado entre dos espejos paralelos genera un número infinito de imágenes. La solución a (12) es, por lo tanto:

(13)

Del mismo modo, si los límites en $x = \pm L$ son absorbedores perfectos, debemos resolver:

(14a)

(14b) Condición inicial ($t = 0$): $C(x) = M\delta(x)$.

Condición de contorno: $C = 0$ en $x = -L$ y en $x = +L$.

Un razonamiento geométrico simple mostrará que se necesitan imágenes negativas en $x = \pm 2L$ e imágenes positivas en $x = \pm 4L$, y así sucesivamente de forma alternativa. Esto es:

(b)

imagen negativa

imagen positiva

Límites en sistemas de dos y tres dimensiones:

El método de superposición antes descrito para sistemas unidimensionales se puede extender fácilmente a sistemas de dos y tres dimensiones. A modo de ejemplo, pensemos en un dominio tridimensional lleno de un fluido estancado (de corriente cero). El sistema está vinculado por la parte inferior mediante un plano continuo en $y = 0$, de modo que el dominio que nos interesa ocupa $y \geq 0$. El sistema carece de restricciones en el plano x - z . Una cantidad de masa, M , se inyecta en el punto $(x, y, z) = (0, 0, 0)$ en el instante $t = 0$. La difusión es isotrópica y homogénea. Nótese que, dado que la fuente está situada en el límite, la condición del gradiente (3b) es insuficiente para inhibir la pérdida de masa del dominio real ($y \geq 0$). Se utiliza una condición de borde más general:

(16a)

(16b) Condición inicial ($t = 0$): $C(x) = M\delta(x) \delta(y) \delta(z)$.

Condición de contorno: ausencia de flujo saliente del dominio del fluido en $y = 0$.

La ecuación (25) del capítulo 3 proporciona una solución general que satisface la mencionada ecuación de transporte y la condición inicial.

De hecho, esta solución también satisface la expresión del gradiente para una condición de contorno con ausencia de flujo, tal y como aparece en (3b). No obstante, esta solución no conserva la masa dentro del dominio real, sino que permite que la mitad de la misma se difunda en la región $y < 0$, lo cual va en contra de la condición de contorno con ausencia de flujo. Para que se cumpla dicha condición en $y = 0$, debemos añadir una fuente imagen. La imagen de la fuente real, situada en $y = 0$, al otro lado del plano $y = 0$ también se situará en $y = 0$. Dado que las fuentes real e imagen están situadas de forma complementaria, sólo hay que añadir el factor 2 a la solución que se da arriba. Además, la difusión es isotrópica ($D_x = D_y = D_z = D$). La solución a (16) es la siguiente:

(17)

Como último caso, trataremos los bordes paralelos en un sistema tridimensional. El dominio del fluido carece de restricciones en el plano x - z , pero está restringido en dirección y y debido a unos límites planos y sólidos situados en $y = \pm L$. No existe corriente y la difusión es isotrópica y homogénea. Se produce una inyección instantánea de masa, M , en $x = y = z = t = 0$. La ecuación de transporte y las condiciones iniciales adecuadas son:

(18) siendo $C(x, y, z, t=0) = M \delta(x) \delta(y) \delta(z)$.

Figura 4. Masa inyectada a medio camino entre límites sólidos paralelos. El sistema carece de restricciones en x y en z .

Para satisfacer una condición de contorno, ya sea con ausencia de flujo o perfectamente absorbente, añadiremos fuentes imagen en las posiciones correspondientes a las imágenes especulares de la fuente real al otro lado de los planos $y = \pm L$. La fuente real está situada en $(x=0, y=0, z=0)$. Las fuentes imagen tendrán que situarse, pues, en $(x=0, y=2nL, z=0)$, donde $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3$ y sigue creciendo hasta \pm infinito. Si los bordes en $y = \pm L$ no

permiten el flujo, las fuentes imagen serán todas positivas, y el campo de concentración (**concentration field**) viene descrito por:

(19)

Si los límites en $y = \pm L$ son absorbedores perfectos, se necesitarán fuentes imagen tanto positivas como negativas. El campo de concentración (**concentration field**) se puede describir de la siguiente manera:

(20) $C(x, y, z, t) =$

Comparación de las condiciones de contorno perfectamente absorbente y con ausencia de flujo:

La animación siguiente explora la evolución de la concentración una vez que una cantidad de masa se ha inyectado en medio de dos límites continuos paralelos, tal y como se muestra en la figura 4. Se tratan dos situaciones, la de límites perfectamente absorbentes y la de límites con ausencia de flujo, por medio de las soluciones (19) y (20) que aparecen arriba. Para cada uno de los sistemas, el campo de concentración (**concentration field**) se muestra en el plano $z = 0$. Además, el perfil de concentración $C(x=0, y, z=0)$ para cada sistema se ha trazado en una única gráfica, para poder compararlos.

Antes de visualizar la animación, conteste a las preguntas siguientes:

Los límites paralelos están situados en $y = \pm 70$ cm, y la difusividad es $D = 1 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$.

Realice una estimación del momento en que los bordes empezarán a afectar a la evolución de la nube en difusión.

¿Para qué condición de contorno disminuirá más rápidamente el valor máximo? ¿Por qué?

¿Cuál será la concentración final en cada uno de los sistemas?

Mientras visualiza la animación, tenga en cuenta lo siguiente.

Según los perfiles en $(x=0, y, z=0)$, ¿en qué momento las condiciones de borde empezarán a afectar al campo de concentración (**concentration field**)? ¿Cómo es este valor comparado con su predicción en (1)?

Si los dos perfiles $C(x=0, y, z=0)$ no estuvieran marcados, ¿cómo identificaría el que evoluciona con un límite que no permite el flujo? ¿Y el que lo hace con un límite absorbente?

Por último, piense en el sistema con límites con ausencia de flujo. Advierta que con el tiempo el perfil perpendicular a los límites, $C(y)$, se vuelve cada vez más uniforme. Al final, este perfil será lo suficientemente uniforme como para considerar que el sistema está perfectamente mezclado en esta dimensión. La evolución de la nube a partir de este momento continuará como si el sistema fuera bidimensional en x y z . Esto se trata con más detalle más adelante.

Para ver la animación en esta ventana, haga clic aquí.

Para ver simultáneamente la animación y este texto, abra la animación desde la página de inicio del capítulo.

Respuestas.

1. Una escala de longitudes usual para una nube en difusión define el límite de la misma a una distancia de 2σ del centroide (capítulo 1). Según esta definición, el contorno de la nube toca el borde cuando $L = 2\sigma = 2\sqrt{2Dt}$. Cuando $L = 70$ cm. y $D = 1\text{cm}^2\text{s}^{-1}$, $t = 613$ s. No obstante, la demarcación del límite de la nube a 2σ sólo abarca el 95% de su masa total, de modo que para $t = 613$ s. el 5% de la masa ya ha alcanzado y sobrepasado el borde. Una aproximación más conservadora definiría el límite de la nube a 3σ , con lo cual éste tocaría el borde cuando $t = L^2/(18D) = 270$ segundos. En este momento, sólo el 0,3% de la masa ha alcanzado el borde (capítulo 1).
2. La concentración máxima debería descender más rápidamente en el sistema con límites absorbentes, ya que estos permiten el flujo, y así una dilución adicional en comparación con los límites con ausencia de flujo.
3. Dado que ninguno de los sistemas tiene restricciones en x y z , la concentración final será cero.
4. Según la animación, las dos curvas empiezan a separarse aproximadamente a los 250 segundos. Esto se aproxima razonablemente al tiempo estimado para $L = 3\sigma$.
5. Las condiciones de contorno se reflejan en la forma que adopta el perfil en el borde. Para la condición de borde absorbente, $\partial C/\partial y > 0$ en $y = -L$, y < 0 en $y = +L$, que en ambos casos indica flujo hacia el interior del límite. Para el límite que no permite flujo, $\partial C/\partial y = 0$ en ambos límites.

Escala de tiempo para lograr una condición uniforme entre los límites.

Vimos en el capítulo 3 que la ecuación de transporte es más simple en los sistemas que se pueden aproximar por dimensiones reducidas, es decir en dos en lugar de en tres dimensiones. Por lo tanto, cuando uno se enfrenta por primera vez a un sistema, es útil determinar si es posible reducir el número de dimensiones. Para eliminar una dimensión dada, por ejemplo y , hay que demostrar que la concentración en y es uniforme, esto es $\partial C/\partial y = 0$. Si $\partial C/\partial y = 0$, entonces tanto el flujo difusivo ($D \partial^2 C/\partial y^2$) como el flujo advectivo ($v \partial C/\partial y$) de y quedan eliminados,

(21)

lo cual reduce la ecuación de transporte a dos dimensiones en x y z . Por ejemplo, pensemos en el sistema representado en la animación anterior y que posee límites paralelos que no permiten el flujo en $y = \pm L$. En un principio, el campo de concentración (**concentration field**) es tridimensional con gradientes en x , y , y z . Con el tiempo, el perfil perpendicular a los límites, $C(y)$, se vuelve uniforme. En la figura 5, que aparece abajo, se muestra una progresión temporal de $C(y)$. La unidad básica de tiempo, L^2/D , se ha seleccionado partiendo de un razonamiento dimensional. De la figura 5 se deduce que el sistema es uniforme en y , es decir, perpendicular a los bordes, para $t = t_y = (2L)^2/4D$, que se denomina tiempo de mezcla.

Figura 5. Una cierta cantidad de masa se inyecta en $(x, y, z, t)=0$ en un dominio fluido que carece de restricciones en el plano x-z, pero que está restringido por límites paralelos que no permiten el flujo en $y = +L$ y $-L$. Los perfiles de concentración, $C(x=0, y, z=0)$, se han trazado para varios momentos posteriores a la inyección. El sistema se halla completamente mezclado (uniforme) a lo largo del dominio y en el instante $t = (2L)^2/4D$.

En instantes posteriores al de mezclado, $\partial C/\partial y = 0$, y el sistema se puede tratar teniendo en cuenta sólo dos dimensiones (x y z). Esto es, para $t > t_y$, la ecuación de transporte se reduce a:

(22)

y la evolución de la concentración se describe mediante la solución de una inyección puntual e instantánea en **dos dimensiones** (véase capítulo 3), esto es, para $t > t_y$:

(23)

donde $(2L)$ es la escala de longitudes para la dimensión que ahora despreciamos.

Definición de tiempo de mezcla:

Para un sistema genérico, definimos la escala de longitudes que nos interesa como la anchura total del dominio en una dirección dada, por ejemplo, L_x, L_y, L_z . Si se inyecta masa en el centro del dominio, las escalas de tiempo necesarias para alcanzar unas condiciones uniformes en cada una de las dimensiones son:

(24) Tiempo de mezcla: $t_i = L_i^2/4D_i$, donde $i = x, y, z$.

Si bien esta escala de tiempo es una definición estándar, de la figura 5 podemos deducir que se produce una aproximación a unas condiciones casi uniformes en un periodo más corto $L_i^2/8D_i$.

Problema de ejemplo con animación

Pensemos en los dos sistemas que se muestran más abajo. El sistema 1 es un paralelepípedo de dimensiones 1m x 1m x 0,1m. El sistema 2 viene definido por límites horizontales paralelos en $z = \pm 0,1$ m., pero por lo demás carece de restricciones. Ningún límite permite el flujo. En ambos sistemas la difusión es isotrópica, $D = 2 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$. Cuando $t = 0$ una masa, $M = 100\text{g.}$, se inyecta en ambos sistemas en $x=0, y=0, z=0$. En cada uno se introduce una sonda de concentración, designadas por A y A', en la posición ($x = -0,5$ m, $y = 0, z = 0$). El límite de detección de cada sonda es de 10 ppm. (gm^{-3}).

- Realice una estimación del instante en que las mediciones de concentración en A y A' comienzan a divergir.
- ¿Cuál es la concentración final registrada en cada sistema y cuándo se alcanza?
- Confirme las estimaciones realizadas en a) y b) dibujando las concentraciones en A y A'.

(a) Realice una estimación del instante en que las mediciones de concentración en A y A' comienzan a divergir.

Las concentraciones en A y A' divergen cuando el límite afecta a la solución del sistema 1. Esto sucede cuando la nube en difusión alcanza el límite. Realice la estimación del tiempo equiparando el límite de la nube a la escala de longitudes 3σ . Esto es, la nube tocará el borde cuando $3\sigma = 3\sqrt{2Dt} = 50 \text{ cm.}$, de modo que $t = (50\text{cm.})^2 / 18 \bullet 2\text{cm.}^2\text{s}^{-1} = 70$ segundos.

(b) ¿Cuál es la concentración final registrada en A (A') y cuándo se alcanza?

La concentración final en el **sistema 1** será $C = (100\text{g.}) / (1\text{m.} \times 1\text{m.} \times 0,1\text{m.}) = 1000$ ppm. Se alcanza cuando la masa está completamente mezclada por todo el dominio. Utilizando la dimensión mayor para aproximar la escala de tiempo, $t = (L)^2 / (4 D) = 1250$ s. Como se apuntaba antes, se trata de una estimación conservadora, y $t = (L)^2 / (8 D) = 625$ s., también es razonable. Dado que el **sistema 2** no tiene restricciones, es posible la dilución infinita y la concentración final será $C = 0$ ppm. En teoría, esto llevaría un tiempo infinito. Sin embargo, como la sonda tiene un límite de detección de 10 ppm., ésta registrará concentración cero para cualquier valor inferior a 10 ppm., lo cual sucede en un tiempo finito.

(c) Confirme las estimaciones realizadas en a) y b) dibujando las concentraciones en A y A'.

En ambos sistemas la concentración es uniforme en z cuando $t = (10\text{cm})^2 / (4 \times 2 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}) = 12,5$ seg. tras la inyección. Como esto es poco en relación con las otras escalas de tiempo que nos interesan (1250 seg.), podemos despreciar la fase tridimensional de la nube y emplear una solución bidimensional. Para el sistema 1, se necesita un número infinito de fuentes imagen para adaptarnos a los bordes que no permiten el flujo. Según la **ecuación 4.19**:

fuente real imágenes en el eje y imágenes en el eje x

En la práctica no se necesita un número infinito de imágenes. Para los valores de tiempo inferiores al requerido para alcanzar una buena mezcla entre los bordes ($t < L^2/4D$), es suficiente con tres imágenes por borde para aproximar la solución completa con infinitas imágenes. A partir de este momento, la concentración se mantiene constante y uniforme, y ya no se necesita la solución detallada de arriba. El sistema 2 viene descrito por una simple inyección de masa bidimensional (**ec. 3.23**):

En **esta animación** se traza la concentración en A(A') por medio de C1 y C2. Compare las escalas de tiempo antes estimadas con la solución completa que aparece en la animación. Concretamente, la concentración en A y A' divergen a los **70 segundos**. La concentración final en estado estacionario se alcanza en el **sistema 1** entre los **600 y los 1200 segundos**.