DIFUSIÓN TRANSITORIA EN MEDIO SEMI-INFINITO

Considérese un medio permeable que se extiende infinitamente en la dirección x positiva, a partir de la posición $x = 0$. Inicialmente, este medio no contiene nada del componente A. En $t = 0$, en la posición $x = 0$, el medio se pone en contacto con una solución del componente A, de concentración C_0, que se mantiene constante. La temperatura es constante y el sistema se puede asumir diluido. Se desea conocer el perfil de concentración de A en el medio permeable, en función de la posición y del tiempo, $C_A(x,t)$.

Suposiciones

1. Condiciones transitorias (no es estado estable).
2. Sólo hay difusión en la dirección x.
3. La concentración depende de x y t, pero no de y o z.
4. No hay reacción química.
5. Difusión unimolecular (sólo A se transfiere).
6. Sistema diluido (baja concentración de A).
7. Difusividad constante.

Ecuación diferencial

La ecuación de conservación de un componente es:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla C_A - \mathscr{D}_{AB} \nabla^2 C_A - r_A = 0$$

que en coordenadas rectangulares se vuelve:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left[v_x \frac{\partial C_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial C_A}{\partial y} + v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} \right] - \mathscr{D}_{AB} \left[\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] - r_A = 0$$

El medio no está en movimiento, por lo que todos los componentes de la velocidad son cero. Las derivadas respecto a y y z también son cero, y no hay reacción química, con lo que la ecuación se simplifica a:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} - \mathscr{D}_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} = 0$$

$$\boxed{\frac{\partial C_A}{\partial t} = \mathscr{D}_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}}$$

Ésta es una ecuación diferencial parcial de segundo orden, parabólica, lineal, homogénea, de coeficientes constantes. Las condiciones de frontera, de acuerdo con el planteamiento del caso analizado, son:

(1) $C_A = C_0$ en $x = 0$

(2) $C_A = 0$ cuando $x \to \infty$

y se necesita también una condición inicial:

(i) $C_A = 0$ en $t = 0$

Solución de la ecuación diferencial

Dado que se busca la solución en un medio semi-infinito, el método de solución adecuado para la ecuación diferencial es por **combinación de variables**. Se define una variable combinada:

$$\eta = \frac{x}{\sqrt{4\mathscr{D}_{AB} t}}$$

Para simplificar el desarrollo, también se define una concentración adimensional:

$$\psi = \frac{C_A}{C_0}$$

Con estas definiciones, la ecuación diferencial se transforma a una ecuación diferencial ordinaria, de segundo orden, lineal, homogénea, de coeficientes variables:

$$\frac{d^2\psi}{d\eta^2} + 2\eta \frac{d\psi}{d\eta} = 0$$

Las condiciones de frontera también se transforman, obteniendo:

(1*) $\psi = 1$ en $\eta = 0$

(2*) $\psi = 0$ cuando $\eta \to \infty$

Nótese que, del problema original, la condición (2) y la condición inicial se transforman a la misma segunda condición (2*). Éste es un requisito matemático de compatibilidad para poder obtener la solución buscada.

Para resolver la ecuación diferencial, se aprovecha el hecho de que ψ no aparece explícitamente, sólo su primera y segunda derivadas, por lo que se hace el cambio de variable:

$$u = \frac{d\psi}{d\eta}$$

Derivando una vez respecto a η:

$$\frac{du}{d\eta} = \frac{d^2\psi}{d\eta^2}$$

y estas dos definiciones se sustituyen en la ecuación diferencial, para tener:

$$\frac{d^2\psi}{d\eta^2} + 2\eta \frac{d\psi}{d\eta} = 0 \qquad \to \qquad \frac{du}{d\eta} + 2\eta u = 0$$

Ésta es ahora una ecuación diferencial ordinaria de primer orden, que se puede resolver por separación de variables:

$$\frac{du}{d\eta} = -2\eta u \qquad \to \qquad \frac{du}{u} = -2\eta d\eta$$

Integrando a ambos lados:

$$\int \frac{du}{u} = -2\int \eta d\eta \qquad \to \qquad \ln u = -\eta^2 + \ln C_1$$

donde la constante de integración se escribió como $\ln C_1$ para facilitar la simplificación que sigue. Aplicando la función exponencial a ambos lados de la ecuación:

$$u = C_1 e^{-\eta^2}$$

Sustituyendo de regreso u, se tiene una ecuación de primer orden que —en principio— es separable e integrable:

$$\frac{d\psi}{d\eta} = C_1 e^{-\eta^2}$$
$$d\psi = C_1 e^{-\eta^2} d\eta$$
$$\int d\psi = C_1 \int e^{-\eta^2} d\eta$$

El problema es que $e^{-\eta^2}$ sólo se puede integrar si el diferencial es $\eta d\eta$, pero no se puede completar con variables (sólo con constantes), por lo que la integración del lado derecho no se puede realizar.

$$\psi = C_1 \int e^{-\eta^2} d\eta$$

Para superar esta dificultad, considérese la definición de la función error:

$$\operatorname{erf}(x) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \mathrm{e}^{-x^2}\, dx$$

Como se puede ver, el integrando es el mismo, pero la integral en la solución de la ecuación diferencial no tiene límites. Aquí se va a aplicar un truco un poco inusual: se le pone límites a la integral, arbitrariamente los que se necesitan en la definición de la función error, con la condición de agregar una constante de integración. Si los límites elegidos resultan ser los correctos para el caso analizado, la constante terminará siendo cero; pero si no, esa constante se hará cargo de cualquier discrepancia. Entonces, la solución de la ecuación diferencial se convierte a:

$$\psi = C_1 \int_0^{\eta} e^{-\eta^2} d\eta + C_2$$

Ahora, la integral se multiplica y divide por $2\sqrt{\pi}$ (con lo que no se altera) y se reacomoda para identificar la función error:

$$\psi = C_1 \frac{2\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\pi}} \int_0^{\eta} e^{-\eta^2} d\eta + C_2$$
$$\psi = C_1 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \underbrace{\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\eta} e^{-\eta^2} d\eta}_{\operatorname{erf}(\eta)} + C_2$$
$$\psi = C_1 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(\eta) + C_2$$

Ahora se puede utilizar las condiciones de frontera para evaluar las constantes C_1 y C_2. Sustituyendo la condición (1*):

$$1 = C_1 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(0) + C_2$$

pero la función error evaluada en cero es cero, $\operatorname{erf}(0) = 0$, lo que lleva a que $C_2 = 1$, y la solución general se vuelve:

$$\psi = C_1 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(\eta) + 1$$

Ahora se sustituye la condición (2*):

$$0 = C_1 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(\infty) + 1$$

y como $\operatorname{erf}(\infty) = 1$:

$$0 = C_1 \frac{\sqrt{\pi}}{2} + 1$$

Se despeja C_1:

$$C_1 = \frac{-2}{\sqrt{\pi}}$$

y se sustituye en la solución general:

$$\psi = \left(\frac{-2}{\sqrt{\pi}}\right) \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(\eta) + 1$$

donde se cancelan los factores 2 y $\sqrt{\pi}$, y se llega a la solución general:

$$\psi = 1 - \operatorname{erf}(\eta)$$

Finalmente se regresa a las variables originales:

$$\frac{C_A}{C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4\mathscr{D}_{AB} t}}\right)$$

y se despeja C_A para tener el perfil de concentración buscado:

$$C_A = C_0 \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4\mathscr{D}_{AB} t}}\right)\right]$$