

ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ ΚΑΙ ΜΑΖΑΣ

Μάθημα 9

Διάχυση μάζας σε μεταβατικές συνθήκες

Όταν πρέπει να εξετάσουμε τη διάχυση ενός συστατικού σε ένα στάσιμο μέσο όταν το σύστημα δεν έχει φτάσει σε μόνιμη κατάσταση, θα πρέπει να μελετήσουμε το σύστημα χρονικά, δηλαδή σε μεταβατικές συνθήκες.

Διάχυση σε ημιάπειρο πορώδες μέσο

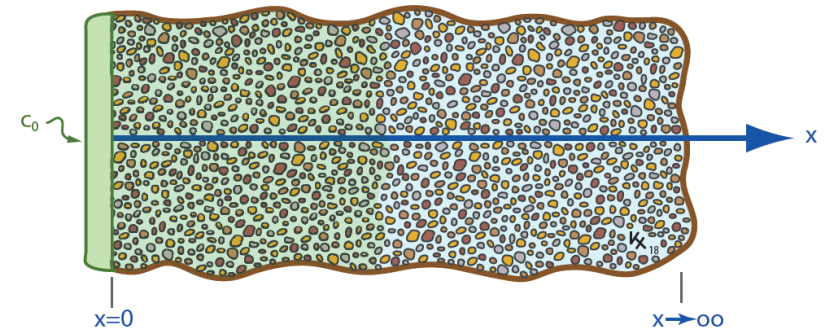
Εξετάζουμε το πρόβλημα της ασταθούς (μη μόνιμης) διάχυσης ρύπου A σε μονοδιάστατο ημιάπειρο χώρο (π.χ. πορώδες μέσο, υδροφορέας) όπου υπάρχει σταθερή συγκέντρωση του ρύπου. Η συγκέντρωση του ρύπου περιγράφεται προσεγγιστικά από το δεύτερο νόμο διάχυσης του Fick, τις οριακές και αρχική συνθήκη:

$$\frac{\partial c(t,x)}{\partial t} = \mathcal{D}_{AB,e} \frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2}$$

$$c(t,0) = c_0$$

$$c(t,\infty) = 0$$

$$c(0,x) = 0$$



Σχήμα 3.13: Μονοδιάστατο πορώδες μέσο (ημιάπειρη λωρίδα στερεού), κορεσμένο με νερό, όπου ο ρύπος είναι ομοιόμορφα κατανεμημένος και έχει συγκέντρωση c_0 σε όλη την επιφάνεια του πορώδους ($x=0$). Ο ρύπος διαχέεται στην κατεύθυνση x .

Για τη λύση του προβλήματος χρησιμοποιείται η μέθοδος των μετασχηματισμών Laplace ως προς τον χρόνο t .

$$\int_0^\infty \frac{\partial c(t,x)}{\partial t} e^{-st} dt = \mathcal{D}_{AB,e} \int_0^\infty \frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2} e^{-st} dt$$

$$\Rightarrow c(t,x) e^{-st} \Big|_0^\infty + s \int_0^\infty c(t,x) e^{-st} dt = \mathcal{D}_{AB,e} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^\infty c(t,x) e^{-st} dt$$

$$\Rightarrow s\tilde{c}(s,x) - c(0,x) = \mathcal{D}_{AB,e} \frac{\partial^2 \tilde{c}(s,x)}{\partial x^2} \quad (*)$$

όπου το αριστερό μέλος της εξίσωσης ολοκληρώθηκε κατά μέρη ($\int u dv = uv - \int v du$) και χρησιμοποιήθηκε ο μετασχηματισμός Laplace :

$$\tilde{c}(s,x) = L[c(t,x)] = \int_0^{\infty} c(t,x) e^{-st} dt$$

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι αντί για την ολοκλήρωση κατά μέρη της πρώτης παραγώγου της συγκέντρωσης ως προς το χρόνο, είναι ευκολότερο να χρησιμοποιηθεί απευθείας ο μετασχηματισμός:

$$L\left[\frac{df(t)}{dt}\right] = \int_0^{\infty} \frac{df(t)}{dt} e^{-st} dt = s\tilde{f}(s) - f(0)$$

Οι οριακές συνθήκες μετασχηματίζονται στις ακόλουθες:

$$\tilde{c}(s,0) = L[c(t,0)] = L[c_o] = \int_0^{\infty} c_o e^{-st} dt = -c_o \frac{e^{-st}}{s} \Big|_0^{\infty} = \frac{c_o}{s}$$

$$\tilde{c}(s,\infty) = L[c(t,\infty)] = L[0] = 0$$

Λόγω της αρχικής συνθήκης η (*) απλουστεύει ως εξής:

$$s\tilde{c}(s,x) = \mathcal{D}_{AB,e} \frac{d^2 \tilde{c}(s,x)}{dx^2} \quad (**)$$

Η γενική λύση της (**) και είναι:

$$\tilde{c}(s,x) = A(s) \exp\left[-\left(\frac{s}{\mathcal{D}_{AB,e}}\right)^{1/2} x\right] + B(s) \exp\left[\left(\frac{s}{\mathcal{D}_{AB,e}}\right)^{1/2} x\right] \quad (***)$$

Χρησιμοποιώντας τις μετασχηματισμένες οριακές συνθήκες στην (***), έχουμε τις δύο σταθερές:

$$B(s) = 0$$

$$A(s) = \frac{c_o}{s}$$

Επομένως, η μετασχηματισμένη λύση του προβλήματος είναι:

$$\tilde{c}(s,x) = \frac{c_o}{s} \exp\left[-\left(\frac{s}{\mathcal{D}_{AB,e}}\right)^{1/2} x\right]$$

Από πίνακες μετασχηματισμών Laplace βρίσκεται ο αντίστροφος μετασχηματισμός της παραπάνω συνάρτησης και δίνει τη ζητούμενη αναλυτική λύση:

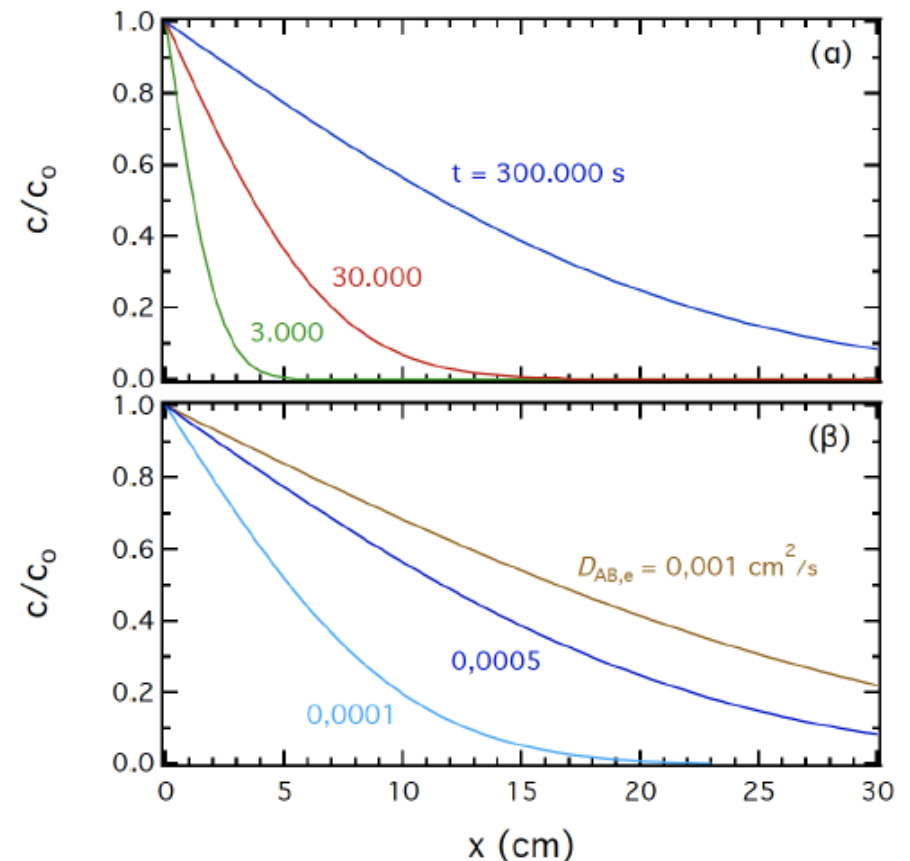
$$c(t,x) = L^{-1}[\tilde{c}(s,x)] = c_o L^{-1} \left\{ \frac{1}{s} \exp \left[- \left(\frac{s}{\mathcal{D}_{AB,e}} \right)^{1/2} x \right] \right\}$$

$$\Rightarrow c(t,x) = c_o \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2(\mathcal{D}_{AB,e} t)^{1/2}} \right] \quad (****)$$

όπου $\operatorname{erfc}(\cdot)$ είναι η συμπληρωματική συνάρτηση σφάλματος (complementary error function):

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-z^2} dz$$

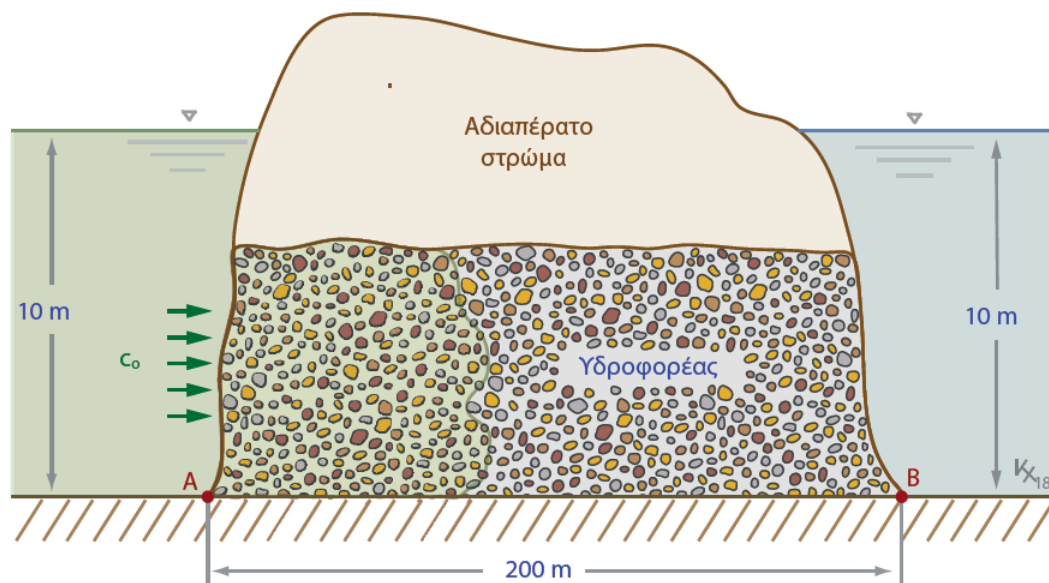
Η συμπεριφορά της αναλυτικής λύσης (****) για διάφορες συνθήκες παρουσιάζεται στο σχήμα δεξιά. Η συγκέντρωση c/c_o καλύπτει μεγαλύτερες αποστάσεις με την πάροδο του χρόνου και την αύξηση του συντελεστή της αποτελεσματικής (πραγματικής) μοριακής διάχυσης.



Γραφική παράσταση της c/c_o σε συνάρτηση της απόστασης από το σημείο, $x=0$ για: (α) διαφορετικούς χρόνους (εδώ η αποτελεσματική μοριακή διάχυση είναι $0.0005 \text{ cm}^2/\text{s}$) και (β) διαφορετικούς συντελεστές αποτελεσματικής μοριακής διάχυσης (εδώ $t=300.000 \text{ s}$).

Παράδειγμα 3.13

Ένας περιορισμένος υδροφορέας ο οποίος απεικονίζεται στο Σχήμα Π3.13, οριοθετείται από δύο λίμνες. Μετά από ισχυρή βροχόπτωση η μία λίμνη ρυπαίνεται με μια ανεπιθύμητη οργανική ουσία, με μέση συγκέντρωση $c_0 = 5 \text{ mg/L}$. Η οργανική ουσία διαχέεται στον υδροφορέα με αποτελεσματικό (πραγματικό) συντελεστή μοριακής διάχυσης $D_{AB,e} = 1,24 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$. Να βρεθεί ο χρόνος που θα απαιτηθεί ώστε η συγκέντρωση του ρύπου στο κατώφλι διέλευσης (σημείο Β) να γίνει ίση με $c = 0,00011 \text{ mg/L}$. Θεωρήστε ότι ο υδροφορέας είναι μονοδιάστατος με μήκος 200 m, το νερό στον υδροφορέα είναι στάσιμο, και η συγκέντρωση της οργανικής ουσίας στη λίμνη που έχει ρυπανθεί παραμένει σταθερή και η οργανική ουσία δεν αντιδρά με το στερεό σκελετό του υδροφορέα.



Σχήμα Π3.13: Περιορισμένος μονοδιάστατος υδροφορέας όπου μια οργανική ουσία διαχέεται από τη λίμνη που έχει ρυπανθεί στην καθαρή.

Λύση:

$$c(t,x) = c_0 \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2(D_{AB,e}t)^{1/2}} \right]$$

$$0,00011 \frac{\text{mg}}{\text{L}} = \left(5 \frac{\text{mg}}{\text{L}} \right) \operatorname{erfc} \left[\frac{200 \text{ m}}{2(1,24 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s})^{1/2} t^{1/2}} \right]$$

$$\Rightarrow 2,2 \times 10^{-5} = \operatorname{erfc} \left[\frac{200 \text{ m}}{2(1,24 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s})^{1/2} t^{1/2}} \right]$$

Από τον Πίνακα 3.5 βλέπουμε ότι για η $\operatorname{erfc}(z) = 0,000022$ αντιστοιχεί $z = 3,0$. Επομένως, ο χρόνος που θα απαιτηθεί βρίσκεται λύνοντας την αλγεβρική σχέση:

$$\Rightarrow 3,0 = \frac{200}{2(1,24 \times 10^{-4})^{1/2} t^{1/2}}$$

$$\Rightarrow 9 = \frac{40000}{4(1,24 \times 10^{-4})t}$$

$$\Rightarrow t = \frac{40000 \text{ s}}{4(1,24 \times 10^{-4})9} = 8,96 \times 10^6 \text{ s}$$

$$\Rightarrow t = 103,7 \text{ d}$$

Πίνακας 3.5: Αριθμητικές τιμές των συναρτήσεων $\text{erf}(z)$ και $\text{erfc}(z)$

z	erf(z)	erfc(z)	z	erf(z)	erfc(z)
0,00	0,000000	1,000000	1,25	0,922900	0,077099
0,05	0,056372	0,943628	1,30	0,934008	0,065992
0,10	0,112463	0,887537	1,35	0,943762	0,056238
0,15	0,167996	0,832004	1,40	0,952285	0,047715
0,20	0,222703	0,777297	1,45	0,959695	0,040305
0,25	0,276326	0,723674	1,50	0,966105	0,033895
0,30	0,328627	0,671373	1,55	0,971624	0,028377
0,35	0,379382	0,620618	1,60	0,976348	0,023652
0,40	0,428392	0,571608	1,65	0,980380	0,019620
0,45	0,475482	0,524518	1,70	0,983790	0,016210
0,50	0,520500	0,479500	1,75	0,986692	0,013308
0,55	0,563323	0,436677	1,80	0,989091	0,010909
0,60	0,603856	0,396144	1,90	0,992790	0,007210
0,65	0,642029	0,357971	2,00	0,995322	0,004678
0,70	0,677801	0,322199	2,10	0,997021	0,002979
0,75	0,711156	0,288844	2,20	0,998137	0,001863
0,80	0,742101	0,257899	2,30	0,998857	0,001143
0,85	0,770668	0,229332	2,40	0,999311	0,000689
0,90	0,796908	0,203092	2,50	0,999593	0,000407
0,95	0,820891	0,179109	2,60	0,999764	0,000236
1,00	0,842701	0,157299	2,70	0,999866	0,000134
1,05	0,862436	0,137564	2,80	0,999925	0,000075
1,10	0,880205	0,119795	2,90	0,999959	0,000041
1,15	0,896124	0,103876	3,00	0,999978	0,000022
1,20	0,910314	0,089686	∞	1,000000	0,000000

Διάχυση σε πορώδες μέσο πεπερασμένου μήκους

Εξετάζουμε το πρόβλημα της ασταθούς (μη μόνιμης) διάχυσης ρύπου σε μονοδιάστατο πορώδες μέσο πεπερασμένου μήκους όπου υπάρχει σταθερή συγκέντρωση του ρύπου και στα δυο άκρα. Η συγκέντρωση του ρύπου περιγράφεται προσεγγιστικά από το δεύτερο νόμο διάχυσης του Fick, τις οριακές και αρχική συνθήκη:

$$\frac{\partial c(t,x)}{\partial t} = \mathcal{D}_{AB,e} \frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2}$$

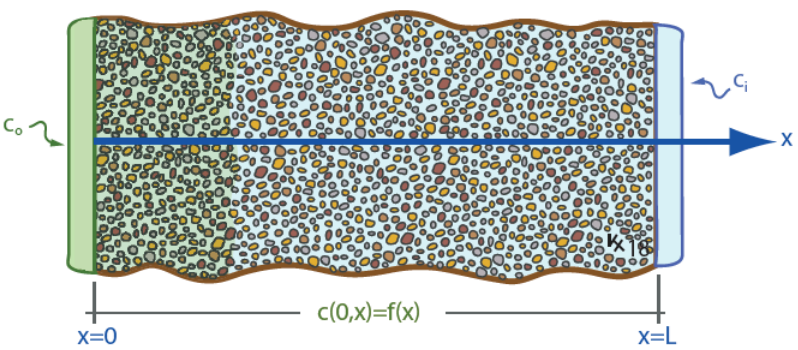
$$c(t,0) = c_o$$

$$c(t,L) = c_i$$

$$c(0,x) = f(x)$$

Η λύση του προβλήματος είναι (Crank, 1975):

$$c = c_o + (c_i - c_o) \frac{x}{L} - \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_i \cos n\pi - c_o}{n} \sin \left[\frac{n\pi x}{L} \right] \exp \left[- \frac{\mathcal{D}_{AB,e} n^2 \pi^2 t}{L^2} \right] + \frac{2}{L} \sin \left[\frac{n\pi x}{L} \right] \exp \left[- \frac{\mathcal{D}_{AB,e} n^2 \pi^2 t}{L^2} \right] \int_0^L f(\xi) \sin \left[\frac{n\pi \xi}{L} \right] d\xi \quad (*)$$



Σχήμα 3.16: Μονοδιάστατο πορώδες μέσο πεπερασμένου μήκους, κορεσμένο με νερό, όπου ο ρύπος στο ένα άκρο (x=0) είναι ομοιόμορφα κατανεμημένος και η συγκέντρωσή του είναι σταθερή (c=c_o), ενώ στο άλλο άκρο (x=L) η συγκέντρωση παραμένει επίσης σταθερή (c=c_i). Ο ρύπος διαχέεται στην κατεύθυνση x.

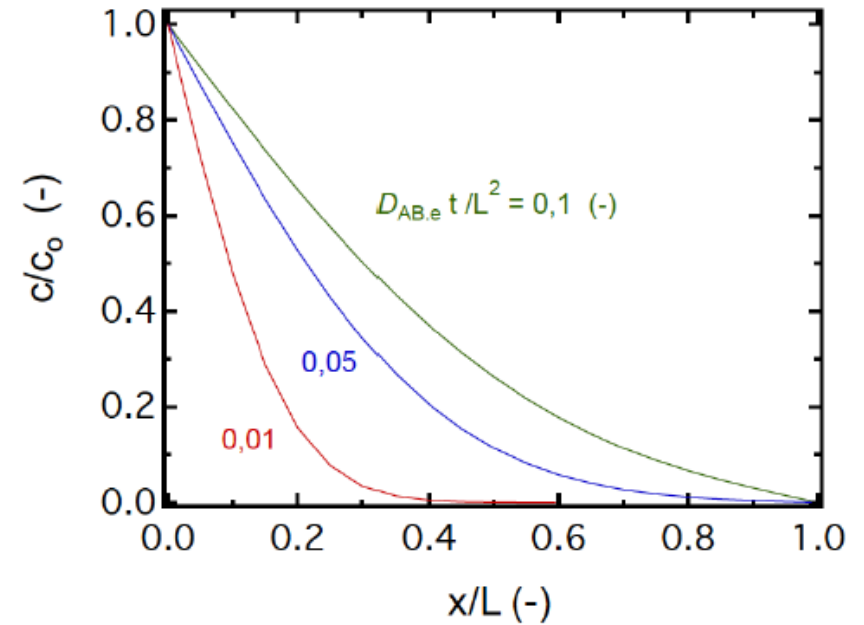
όπου ο αδιάστατος χρόνος, γνωστός ως αδιάστατος αριθμός *Fourier* δίνεται από τη σχέση:

$$\frac{\mathcal{D}_{AB,e} t}{L^2} = N_{Fo}$$

Για την ειδική περίπτωση όπου $c(0, x)=f(x)=0$ και $c_i=0$ η παραπάνω αναλυτική λύση (*) απλουστεύει ως εξής(Grathwohl, 1998):

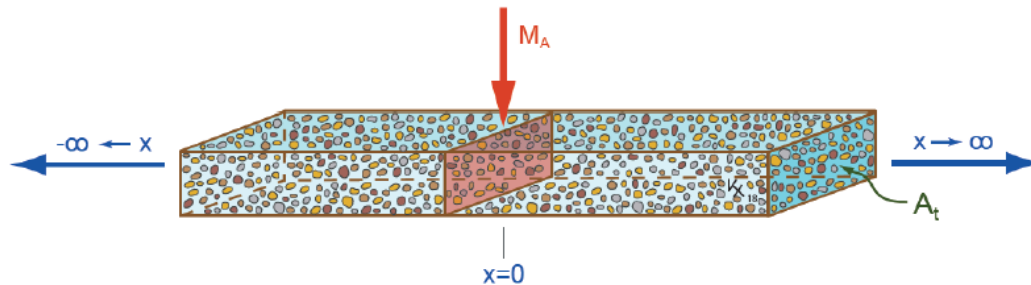
$$\frac{c}{c_0} = 1 - \frac{x}{L} - \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sin\left[\frac{n\pi x}{L}\right] \exp\left[-\frac{\mathcal{D}_{AB,e} n^2 \pi^2 t}{L^2}\right] \quad (**)$$

Η συμπεριφορά της αναλυτικής λύσης (**), αθροίζοντας μόνο τους δέκα πρώτους όρους της απειροσειράς, για διάφορες συνθήκες παρουσιάζεται στο σχήμα δεξιά. Η κανονικοποιημένη συγκέντρωση του διαχεόμενου υγρού ρύπου ισούται με τη μονάδα στο αριστερό άκρο του πεπερασμένου πορώδους μέσου. Η συγκέντρωση ελαττώνεται κατά μήκος του μονοδιάστατου πορώδους μέσου αλλά αυξάνει με την πάροδο του χρόνου.



Παλμική διαταραχή σε μονοδιάστατο πορώδες μέσο

Εξετάζουμε το πρόβλημα της διάχυσης υγρού ρύπου σε ένα μακρύ ομογενές, κορεσμένο με νερό πορώδες μέσο απείρου μήκους. Μια ποσότητα M_A ρύπου εισάγεται στο μέσο του πορώδους μέσου με τη μορφή παλμικής διαταραχής και κατόπιν διαχέεται μέσα στο πορώδες. Θεωρούμε ότι για ένα σχετικά λεπτό πορώδες μέσο, η συγκέντρωση του ρύπου σε όλη τη διατομή (A_t) είναι ομοιόμορφη και ο ρύπος διαχέεται μόνο κατά την αξονική κατεύθυνση x .



Μονοδιάστατο πορώδες μέσο (απείρου μήκους), κορεσμένο με νερό, όπου μια ποσότητα υγρού ρύπου (M_A) εισάγεται στο $x=0$, ομοιόμορφα κατανομημένη στη διατομή A_t . Ο ρύπος διαχέεται στην κατεύθυνση x .

Η συγκέντρωση του ρύπου περιγράφεται προσεγγιστικά από το δεύτερο νόμο διάχυσης του Fick και τις εξής οριακές συνθήκες:

$$\frac{\partial c(t,x)}{\partial t} = \mathcal{D}_{AB,e} \frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2}$$

και την αρχική συνθήκη παλμικής διαταραχής που περιγράφεται μαθηματικά με τη σχέση:

$$c(0,x) = \frac{M_A}{A_t} \delta(x)$$

$$\delta(x-\alpha) = \begin{cases} \infty & x=\alpha \\ 0 & x \neq \alpha \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-\alpha) dx = 1$$

η αρχική συνθήκη ικανοποιεί το ισοζύγιο μάζας για τη συνολική ποσότητα του ρύπου A στο πορώδες μέσο:

$$A_t \int_{-\infty}^{\infty} c(t,x) dx = M_A \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{A}(x) dx = M_A$$

Η συμμετρία του συστήματος επιβάλλει ομοιόμορφη διάχυση του ρύπου δεξιά και αριστερά. Επομένως η παραπάνω εξίσωση μπορεί να γραφεί για το μισό πορώδες μέσο ($x > 0$) ως εξής:

$$\int_0^{\infty} c(t,x) dx = \frac{M_A}{2A_t} \quad (*)$$

Εφαρμογή του μετασχηματισμού Laplace ως προς το χρόνο t στο δεύτερο νόμο διάχυσης του Fick δίνει τη συνήθη διαφορική εξίσωση:

$$s\tilde{c}(s,x) - c(0,x) = \mathcal{D}_{AB,e} \frac{d^2\tilde{c}(s,x)}{dx^2}$$

Βάσει της αρχικής συνθήκης, $c(0,x)=0$ για κάθε $x \neq 0$. Επομένως, η παραπάνω εξίσωση απλουστεύεται ως εξής:

$$\frac{d^2\tilde{c}(s,x)}{dx^2} - \frac{s}{\mathcal{D}_{AB,e}} \tilde{c}(s,x) = 0$$

και η γενική της λύση είναι:

$$\tilde{c}(s,x) = A(s) \exp\left[-\left(\frac{s}{\mathcal{D}_{AB,e}}\right)^{1/2} x\right] + B(s) \exp\left[\left(\frac{s}{\mathcal{D}_{AB,e}}\right)^{1/2} x\right]$$

όπου $A(s)$ και $B(s)$ είναι παράμετροι που πρέπει να βρεθούν από τις μετασχηματισμένες οριακές συνθήκες. Και οι δύο παράμετροι πρέπει να κρατηθούν γιατί το πορώδες μέσο είναι απείρου μήκους ($x \rightarrow \pm\infty$).

Για τη διάχυση στην **αριστερή πλευρά** του πορώδους μέσου ισχύει:

$$\tilde{c}(s,x) = B(s) e^{\left(\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}}\right)x} \quad x < 0 \quad [A(s) = 0]$$

και για τη διάχυση στη **δεξιά πλευρά** του πορώδους μέσου ισχύει:

$$\tilde{c}(s,x) = A(s) e^{-\left(\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}}\right)x} \quad x > 0 \quad [B(s) = 0] \quad (**)$$

Εφαρμογή του μετασχηματισμού Laplace ως προς το t στην εξίσωση (*) δίνει:

$$L\left\{\int_0^{\infty} c(t,x) dx\right\} = L\left\{\frac{M_A}{2A_t}\right\}$$

$$\Rightarrow \int_0^{\infty} e^{-st} \int_0^{\infty} c(t,x) dx dt = \int_0^{\infty} \frac{M_A}{2A_t} e^{-st} dt$$

$$\Rightarrow \int_0^{\infty} \tilde{c}(s,x) dx = \frac{M_A}{2A_t s} \quad (***)$$

Αντικαθιστώντας την εξίσωση (**) στην (***) βρίσκεται η παράμετρος A(s):

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} A(s) e^{-\left(\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}}\right)x} dx &= \frac{M_A}{2A_t s} \\ \Rightarrow \frac{-A(s)}{\sqrt{s/\mathcal{D}_e}} e^{-\left(\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}}\right)x} \Big|_0^{\infty} &= \frac{M_A}{2A_t s} \\ \Rightarrow A(s) &= \frac{M_A}{2A_t \sqrt{s \mathcal{D}_{AB,e}}} \quad (4^*) \end{aligned}$$

Αντικατάσταση της (4*) στην (**) δίνει τη **συγκέντρωση σε χρόνο Laplace**:

$$\tilde{c}(s,x) = \frac{M_A}{2A_t \sqrt{\mathcal{D}_{AB,e}}} \frac{e^{-\left(x/\sqrt{\mathcal{D}_{AB,e}}\right)\sqrt{s}}}{\sqrt{s}}$$

στην οποία εφαρμόζεται ο αντίστροφος μετασχηματισμός Laplace ως εξής:

$$c(t,x) = L^{-1}[\tilde{c}(s,x)] = \frac{M_A}{2A_t \sqrt{\mathcal{D}_{AB,e}}} L^{-1}\left[\frac{e^{-\left(x/\sqrt{\mathcal{D}_{AB,e}}\right)\sqrt{s}}}{\sqrt{s}}\right]$$

Από πίνακες μετασχηματισμών Laplace βρίσκεται ο αντίστροφος μετασχηματισμός:

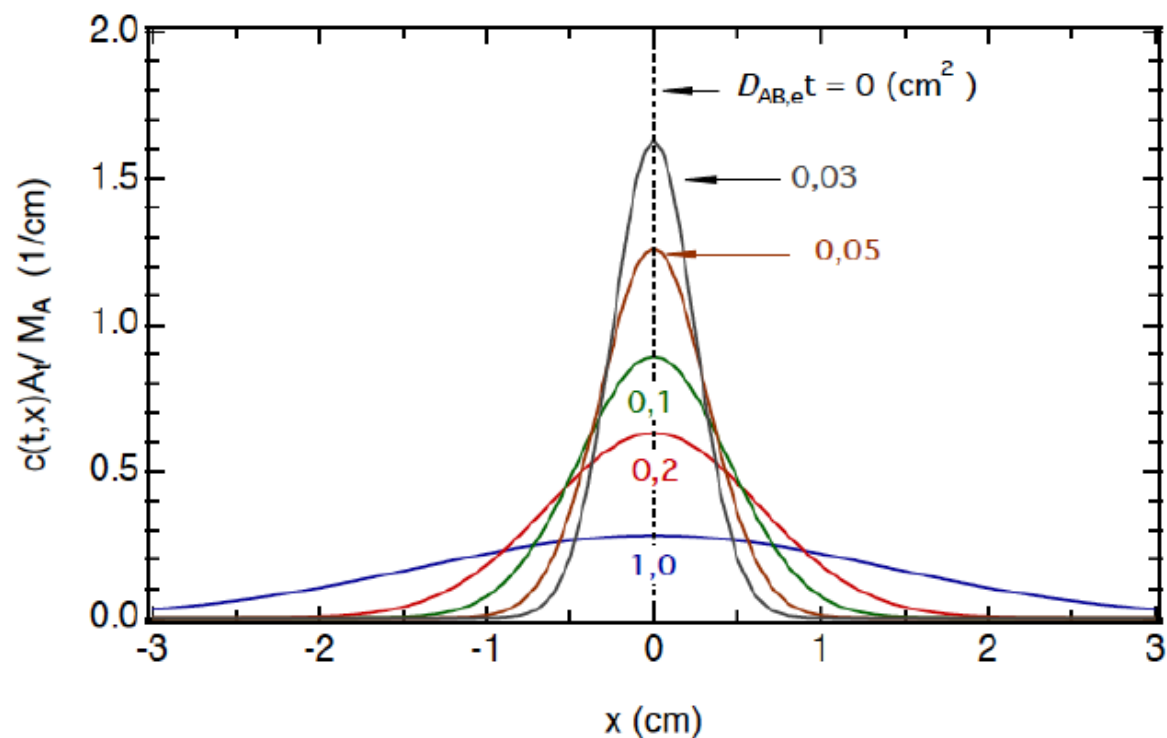
$$L^{-1}\left[\frac{e^{-\alpha\sqrt{s}}}{\sqrt{s}}\right] = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} e^{-\alpha^2/4t}$$

Εφαρμογή του αντίστροφου μετασχηματισμού με $\alpha=x/\sqrt{\mathcal{D}_e}$ δίνει τη ζητούμενη αναλυτική λύση:

$$c(t,x) = \frac{M_A}{2A_t \sqrt{\pi \mathcal{D}_{AB,e} t}} \exp\left[\frac{-x^2}{4 \mathcal{D}_{AB,e} t}\right] \quad \forall x, t > 0 \quad (5^*)$$

Η ίδια ακριβώς έκφραση προκύπτει και από τη λύση της εξίσωσης που περιγράφει τη διάχυση του ρύπου στην αριστερή πλευρά του πορώδους μέσου. Επομένως η παραπάνω λύση προσομοιώνει τη συγκέντρωση του διαχεόμενου ρύπου σε κάθε σημείο x ($-\infty < x < \infty$) του πορώδους μέσου.

Η συμπεριφορά της παραπάνω αναλυτικής λύσης (5*) για διάφορες συνθήκες παρουσιάζεται στο σχήμα που ακολουθεί. Η κανονικοποιημένη συγκέντρωση του διαχεόμενου ρύπου είναι απλά μια κατανομή Gauss. Η παλμική διαταραχή αποσβένεται με την πάροδο του χρόνου.



Η αναλυτική λύση (5*) θα πρέπει να ικανοποιεί το ισοζύγιο μάζας

$$A_t \int_{-\infty}^{\infty} c(t,x) dx = M_A \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{A}(x) dx = M_A$$

για κάθε $t > 0$. Η συνθήκη αυτή επιβεβαιώνεται με ολοκλήρωση της αναλυτικής λύσης (5*):

$$\int_{-\infty}^{\infty} c(t,x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M_A}{2A_t \sqrt{\pi \mathcal{D}_{AB,e} t}} \exp\left[\frac{-x^2}{4 \mathcal{D}_{AB,e} t}\right] dx$$

Η **συμμετρία της διάχυσης** επιτρέπει τη μετατροπή της παραπάνω εξίσωσης ως εξής:

$$\int_{-\infty}^{\infty} c(t,x) dx = 2 \int_0^{\infty} \frac{M_A}{2A_t \sqrt{\pi \mathcal{D}_{AB,e} t}} \exp\left[\frac{-x^2}{4 \mathcal{D}_{AB,e} t}\right] dx$$

Χρησιμοποιώντας τον παρακάτω μετασχηματισμό

$$u = \frac{x}{\sqrt{4 \mathcal{D}_{AB,e} t}}$$

στην παραπάνω εξίσωση προκύπτει:

$$\int_{-\infty}^{\infty} c(t,x) dx = \frac{M_A}{A_t \sqrt{\pi \mathcal{D}_{AB,e} t}} \int_0^{\infty} \exp[-u^2] \sqrt{4 \mathcal{D}_{AB,e} t} du$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} c(t,x) dx = \frac{M_A}{A_t} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp[-u^2] du$$

Βάσει του ορισμού της συνάρτησης σφάλματος:

$$\text{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-x^2} dx$$

η παραπάνω σχέση μπορεί να γραφεί ως εξής:

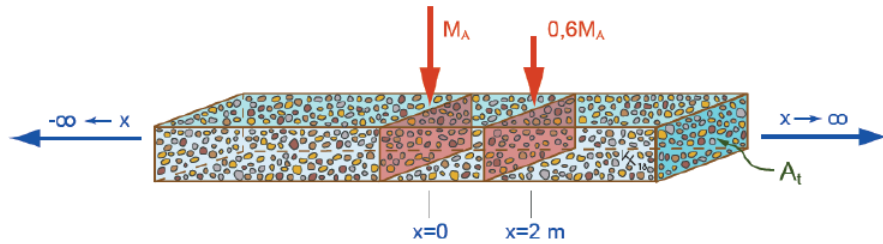
$$\int_{-\infty}^{\infty} c(t,x) dx = \frac{M_A}{A_t} \text{erf}(\infty) = \frac{M_A}{A_t} (1)$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} c(t,x) dx = \frac{M_A}{A_t} \quad (6^*)$$

Η εξίσωση (6*) είναι ακριβώς ίδια με την εξίσωση (*). Επομένως η αναλυτική λύση (5*) ικανοποιεί το ισοζύγιο μάζας (*).

Παράδειγμα 3.15

Να βρεθεί η αναλυτική εξίσωση που περιγράφει τη διάχυση ενός υγρού ρύπου Α σε ένα μακρύ (απείρων διαστάσεων), ομογενές, κορεσμένο με νερό πορώδες μέσο όταν μια ποσότητα M_A του ρύπου εισάγεται στη μέση του πορώδους μέσου με τη μορφή παλμικής διαταραχής και συγχρόνως μια δεύτερη ποσότητα $0,6M_A$ εισάγεται με τη μορφή παλμικής διαταραχής 2 m δεξιά από το κέντρο του πορώδους μέσου ($x=2$), όπως φαίνεται στο Σχήμα Π3.15. Θεωρείστε ότι ο υγρός ρύπος κατανέμεται ομοιόμορφα στη διατομή A_t και ότι ο ρύπος διαχέεται στην κατεύθυνση x .



Σχήμα Π3.15: Μονοδιάστατο πορώδες μέσο (απείρου μήκους), κορεσμένο με νερό, όπου μια ποσότητα υγρού ρύπου Α (M_A) εισάγεται στο $x=0$ και μια δεύτερη ποσότητα $0,6M_A$ εισάγεται στο $x=2$ m. Ο ρύπος διαχέεται στην κατεύθυνση x .

Λύση:

Η συγκέντρωση του ρύπου στο μονοδιάστατο πορώδες μέσο, το οποίο μπορεί να θεωρηθεί άπειρων διαστάσεων, περιγράφεται προσεγγιστικά από το δεύτερο νόμο διάχυσης του Fick, και τις εξής οριακές και αρχική συνθήκες:

$$\frac{\partial c(t,x)}{\partial t} = \mathcal{D}_{AB,e} \frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2}$$

$$c(t, \pm \infty) = 0$$

$$c(0,x) = \frac{M_A}{A_t} \delta(x) + \frac{0,6M_A}{A_t} \delta(x-2)$$

όπου A_t είναι η διατομή του μονοδιάστατου πορώδους μέσου και $\delta(x)$ είναι η συνάρτηση δέλτα. Ο δεύτερος νόμος διάχυσης του Fick περιγράφεται από μια μερική διαφορική εξίσωση δευτέρου βαθμού, η οποία είναι γραμμική ως προς τη συγκέντρωση $c(t,x)$. Επομένως, βάσει της αρχής της επαλληλίας ή υπέρθεσης (superposition principle) η λύση του προβλήματος ισούται με το άθροισμα των λύσεων για κάθε μία από τις δύο παλμικές διαταραχές ξεχωριστά. Δηλαδή η συνεισφορά κάθε παλμικής διαταραχής είναι ανεξάρτητη από την ύπαρξη της άλλης, εφαρμόζεται δηλαδή σαν να μην υπήρχε η άλλη. Για την παλμική διαταραχή στο $x=0$ η λύση δίνεται από την εξίσωση (5*):

$$c_1(t,x) = \frac{M_A}{2A_t \sqrt{\pi \mathcal{D}_{AB,e} t}} \exp \left[\frac{-x^2}{4 \mathcal{D}_{AB,e} t} \right] \quad \forall x, t > 0$$

και για την παλμική διαταραχή στο $x=2$ m, η λύση δίνεται από (Π4) αντικαθιστώντας $0,6M_A$ για M_A και $x-2$ για x :

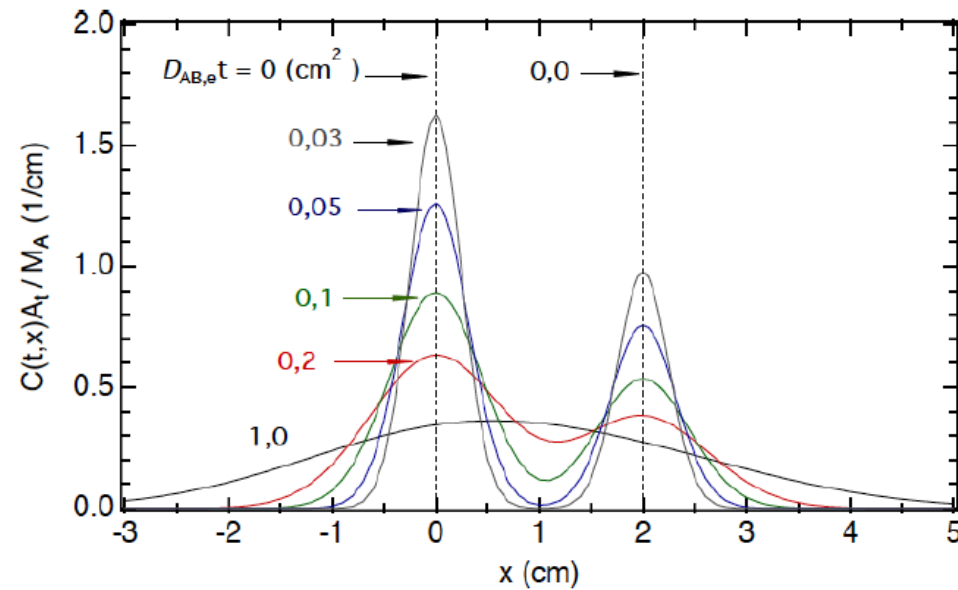
$$c_2(t,x) = \frac{0,6M_A}{2A_t \sqrt{\pi \mathcal{D}_{AB,e} t}} \exp \left[\frac{-(x-2)^2}{4 \mathcal{D}_{AB,e} t} \right] \quad \forall x, t > 0$$

Άρα η συγκέντρωση του ρύπου Α στο σωλήνα δίνεται από τη σχέση:

$$c(t,x) = c_1(t,x) + c_2(t,x)$$

$$\Rightarrow c(t,x) = \frac{M_A}{2A_t \sqrt{\pi \mathcal{D}_{AB,e} t}} \left\{ \exp \left[\frac{-x^2}{4 \mathcal{D}_{AB,e} t} \right] + 0,6 \exp \left[\frac{-(x-2)^2}{4 \mathcal{D}_{AB,e} t} \right] \right\} \quad \forall x, t > 0 \quad (\text{Π6})$$

Η συμπεριφορά της αναλυτικής λύσης (Π6) για διάφορες συνθήκες απεικονίζεται στο Σχήμα Π3.15α. Η κανονικοποιημένη συγκέντρωση του διαχεόμενου ρύπου είναι απλά το άθροισμα δυο κατανομών Gauss, οι οποίες λειτουργούν ανεξάρτητα και αποσβένονται με την πάροδο του χρόνου.



Σχήμα Π3.15α: Κατανομή της κανονικοποιημένης συγκέντρωσης των δύο διαχεόμενων παλμικών διαταραχών του υγρού ρύπου μέσα στο μονοδιάστατο πορώδες μέσο, βάσει της αναλυτικής λύσης (Π6), για διαφορετικές τιμές του γινομένου $\mathcal{D}_{AB,e} t$.

Διάχυση από στιγμιαία σημειακή πηγή σε τρισδιάστατο πορώδες μέσο

Εξετάζουμε το πρόβλημα σφαιρικής διάχυσης σημειακής πηγής υγρού ρύπου σε ένα κορεσμένο με νερό πορώδες μέσο, απείρων διαστάσεων όπου το νερό είναι στάσιμο. Θεωρούμε ότι μια προκαθορισμένη μάζα, M_A , ουσίας A εισέρχεται στιγμιαία στο πορώδες μέσο στο σημείο $r=0$ τη χρονική στιγμή $t=0$. Βάσει της αρχής διατήρησης της μάζας, η συνολική μάζα της ουσίας A στο πορώδες μέσο διατηρείται σταθερή για κάθε χρονική στιγμή $t>0$. Η απαίτηση αυτή εκφράζεται μαθηματικά με την ολοκληρωτική σχέση:

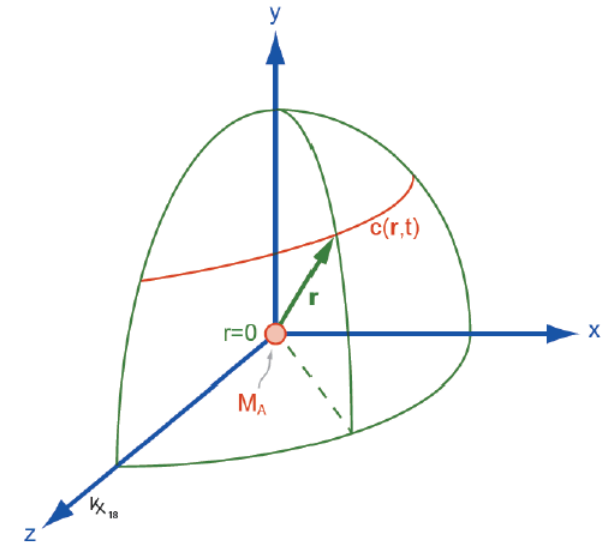
$$\int_0^{\infty} c(t,r) 4\pi r^2 dr = M_A \quad t>0$$

όπου $4\pi r^2$ είναι μια σφαιρική επιφάνεια με ακτίνα r . Η συγκέντρωση του ρύπου στο πορώδες μέσο περιγράφεται από το δεύτερο νόμο διάχυσης του Fick σε σφαιρικές συντεταγμένες και τις εξής συνθήκες:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \mathcal{D}_{AB,e} \left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c}{\partial r} \right)$$

$$c(0,r) = M_A \delta(r), \quad \delta(r) = \begin{cases} 1 & r=0 \\ 0 & r \neq 0 \end{cases}$$

$$c(t,\infty) = 0$$



Σχήμα 3.19: Στιγμιαία σημειακή πηγή σε τρισδιάστατο πορώδες μέσο κορεσμένο με νερό. Η υγρή ουσία A διαχέεται συμμετρικά σε σφαιρικό χώρο.

Με την παρακάτω αλλαγή μεταβλητής:

$$u = cr$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial t}$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{2u}{r^3}$$

$$\frac{2}{r} \frac{\partial c}{\partial r} = \frac{2}{r^2} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{2u}{r^3}$$

Το μαθηματικό πρόβλημα απλουστεύεται σημαντικά ως εξής:

$$\begin{aligned}\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial t} &= \mathcal{D}_{AB,e} \left[\left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{2u}{r^3} \right) + \left(\frac{2}{r^2} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{2u}{r^3} \right) \right] \\ \Rightarrow \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial t} &= \mathcal{D}_{AB,e} \frac{1}{r} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \\ \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial t} &= \mathcal{D}_{AB,e} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \quad (*) \\ u(0,r) &= 0 \quad r > 0 \quad (**) \\ u(t,\infty) &= 0 \quad (***)\end{aligned}$$

Δηλαδή με την αλλαγή μεταβλητής ο δεύτερος νόμος διάχυσης του Fick σε **σφαιρικές συντεταγμένες** παίρνει τη μορφή του νόμου του Fick σε **καρτεσιανές συντεταγμένες**, η οποία είναι μια απλούστερη εξίσωση και βοηθά στην ευκολότερη αναλυτική επίλυση προβλημάτων διάχυσης σε σφαιρικά συστήματα.

Εφαρμογή του μετασχηματισμού Laplace ως προς το t στην (*) δίνει την συνήθη διαφορική εξίσωση:

$$s\tilde{u}(s,r) - u(0,r) = \mathcal{D}_{AB,e} \frac{d^2 \tilde{u}(s,r)}{dr^2}$$

Βάσει της συνθήκης (**) η παραπάνω εξίσωση απλουστεύεται ως εξής:

$$\frac{d^2 \tilde{u}(s,r)}{dr^2} - \frac{s}{\mathcal{D}_{AB,e}} \tilde{u}(s,r) = 0$$

και η γενική της λύση είναι:

$$\tilde{u}(s,r) = A(s) \exp \left[- \left(\frac{s}{\mathcal{D}_{AB,e}} \right)^{1/2} r \right] + B(s) \exp \left[\left(\frac{s}{\mathcal{D}_{AB,e}} \right)^{1/2} r \right]$$

Βάσει της συνθήκης (***) η αποδεκτή λύση της μετασχηματισμένης συγκέντρωσης του ρύπου μετά την αντικατάσταση της μεταβλητής $c=u/r$ είναι:

$$\begin{aligned}\tilde{u}(s,r) &= \tilde{c}(s,r)r = A(s) e^{-\left(\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}}\right)r} \\ \Rightarrow \tilde{c}(s,r) &= \frac{A(s)}{r} e^{-\left(\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}}\right)r} \quad r > 0 \quad (4*)\end{aligned}$$

Εφαρμογή του μετασχηματισμού Laplace ως προς το t στην ολοκληρωτική σχέση για τη συνολική μάζα της ουσίας A δίνει:

$$\begin{aligned} L\left\{\int_0^{\infty} c(t,r) 4\pi r^2 dr\right\} &= L\{M_A\} \\ \Rightarrow \int_0^{\infty} e^{-st} \int_0^{\infty} c(t,r) 4\pi r^2 dr dt &= \int_0^{\infty} M_A e^{-st} dt \\ \Rightarrow 4\pi \int_0^{\infty} \tilde{c}(s,r) r^2 dr &= \frac{M_A}{s} \end{aligned} \quad (5^*)$$

Αντικαθιστώντας την εξίσωση (4*) στην (5*) προκύπτει:

$$4\pi A(s) \int_0^{\infty} e^{-(\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}})r} r dr = \frac{M_A}{s}$$

Το παραπάνω ολοκλήρωμα βρίσκεται με ολοκλήρωση κατά παράγοντες:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-(\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}})r} r dr &= \frac{-1}{\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}}} \left[r e^{-(\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}})r} \right]_0^{\infty} - \int_0^{\infty} e^{-(\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}})r} dr \\ &= \frac{-1}{\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}}} \left[0 - \frac{-e^{-(\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}})r}}{\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}}} \right]_0^{\infty} = \frac{\mathcal{D}_{AB,e}}{s} \end{aligned}$$

Συνδυάζοντας τις δύο τελευταίες εξισώσεις προκύπτει:

$$\begin{aligned} 4\pi A(s) \frac{\mathcal{D}_{AB,e}}{s} &= \frac{M_A}{s} \\ \Rightarrow A(s) &= \frac{M_A}{4\pi \mathcal{D}_{AB,e}} \end{aligned} \quad (6^*)$$

Αντικαθιστώντας την εξίσωση (6*) στην (4*) προκύπτει:

$$\begin{aligned} \tilde{c}(s,r) &= \frac{M_A}{4\pi \mathcal{D}_{AB,e} r} e^{-(\sqrt{s/\mathcal{D}_{AB,e}})r} \quad r>0 \\ c(t,r) &= L^{-1}[\tilde{c}(s,r)] = \frac{M_A}{4\pi \mathcal{D}_{AB,e} r} L^{-1}\left[e^{-(r/\sqrt{\mathcal{D}_{AB,e}})\sqrt{s}}\right] \\ L^{-1}\left[e^{-\alpha\sqrt{s}}\right] &= \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi t^3}} e^{-\alpha^2/4t} \end{aligned}$$

Εφαρμογή του αντίστροφου μετασχηματισμού με $\alpha=r/\sqrt{\mathcal{D}_{AB,e}}$ δίνει τη ζητούμενη **αναλυτική λύση**:

$$c(t,r) = \frac{M_A}{(4\pi \mathcal{D}_{AB,e} t)^{3/2}} \exp\left[\frac{-r^2}{4\mathcal{D}_{AB,e} t}\right] \quad \forall r, t>0 \quad (7^*)$$

Η συμπεριφορά της αναλυτικής λύσης (7*) για διάφορες συνθήκες παρουσιάζεται στο παρακάτω σχήμα. Η κανονικοποιημένη συγκέντρωση του διαχεόμενου υγρού ρύπου είναι πάντα μέγιστη στο κέντρο του σφαιρικού χώρου όπου και υπήρξε η στιγμιαία σημειακή πηγή και ελαττώνεται ακτινικά στο σφαιρικό χώρο. Η στιγμιαία σημειακή πηγή αποσβένεται με την πάροδο του χρόνου.

