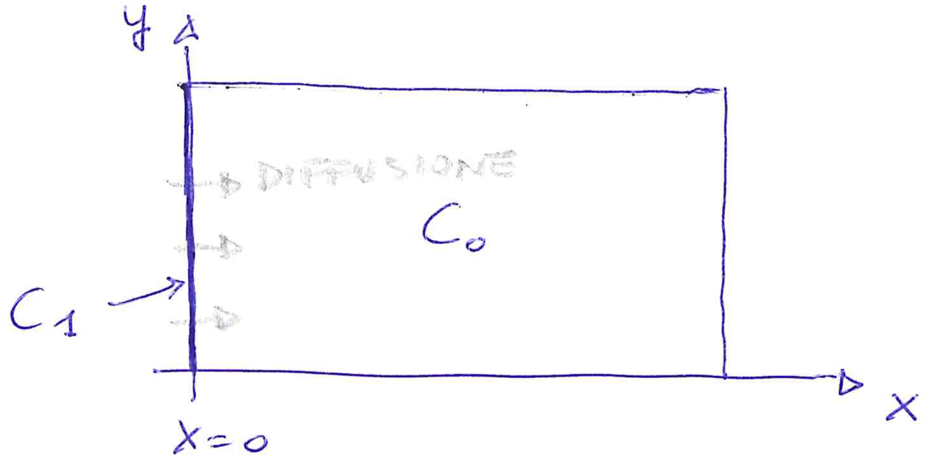
DIFFUSIONE NON-STAZIONARIA IN UN MEZZO SEMI-INFINITO (AKA 1D)

Finora abbiamo considerato processi di trasporto per diffusione di tipo stazionario. Nella realtà, però, la situazione più comune è quella di concentrazione della sostanza che diffonde (ovvero concentrazione delle molecole) che varia nel tempo. Ciò può avvenire ad esempio se cambia ad un dato istante la concentrazione del soluto in corrispondenza di uno dei contorni del volume in cui il processo diffusivo ha luogo (ES: DRUG DELIVERY, rilascio di una sostanza all'interno del flusso sanguigno provoca un improvviso aumento di concentrazione di tale sostanza nei tessuti).

Vediamo come possiamo modellare matematicamente tale situazione.

→



ASSE y : pensabile come una membrana impermeabile che si toglie a $t=0$ per permettere la diffusione

Consideriamo un mezzo (ad es. un fluido) il cui interno è dissolto un soluto di concentrazione C_0.

All'istante $t=0$, la superficie di questo mezzo a $x=0$ viene messa in contatto con un altro mezzo (ad es. un liquido) il cui interno è dissolto lo stesso soluto ma a concentrazione $C_1 > C_0$.

Quale sarà il flusso del soluto attraverso la sezione a $x=0$?

Bilancio di materia:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\left[A \cdot dx \cdot C\right]}_{\text{ACCUMULO IN } dz} = \underbrace{A \cdot J\big|_{x}}_{\text{FLUSSO ENTRANTE}} - \underbrace{A \cdot J\big|_{x+dx}}_{\text{FLUSSO USCENTE}} \quad \left[\frac{kg}{s}\right]$$

Con : $A = dy\,dz$

Il bilancio diventa : $\frac{\partial C}{\partial t} = - \frac{\partial J}{\partial x}$ per $dx \to 0$

Con : $C = C(x,t)$

Sfruttiamo la legge di Fick :

$J = - D \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \Rightarrow \boxed{\frac{\partial C}{\partial t} = + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}}$ EQ. DI DIFFUSIONE NON STAZ. MONO DIM. [9]

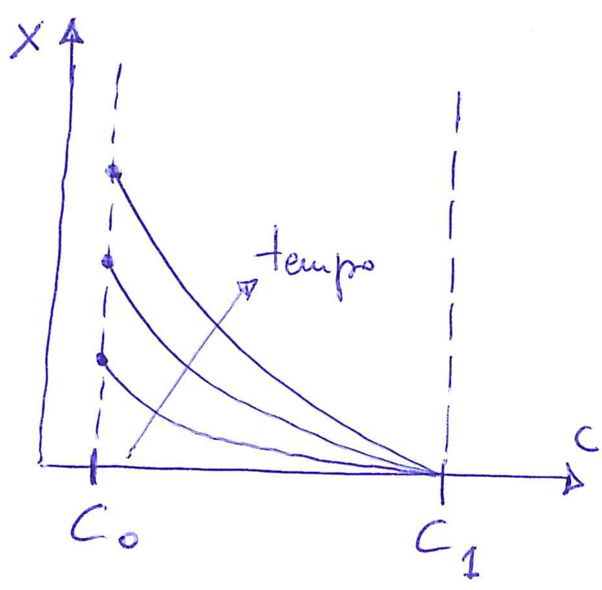
Per risolvere tale equazione servono:

C.I. $C(x, t=0) = C_0 \quad \forall x$

C.C.#1 $C(x=0, t) = C_1 \quad \forall t \geq 0$

C.C.#2 $C(x \to \infty, t) = C_0 \quad \forall t \geq 0$

L'equazione corrisponde all'evoluzione di concentrazione riportata nel grafico qui a destra.



NOTA: Le c.c. che devono essere soddisfatte in questo problema implicano che entrambi i termini dell'equazione [9] abbiano ordine di grandezza confrontabile.

In fatti:

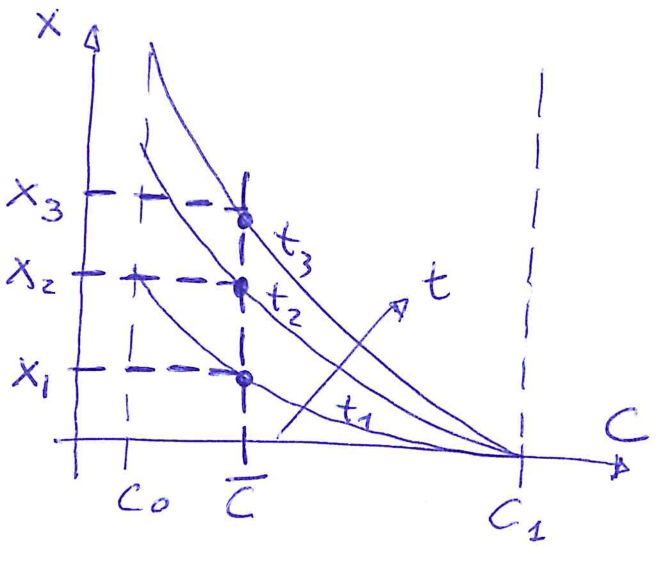
- se fosse $\frac{\partial C}{\partial t} \ll \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ allora avremmo che la soluzione dell'eq. [9] sarebbe $C = Ax + B$ e risulterebbe $C \to \infty$ per $x \to \infty$, in contrasto con la c.c.# (che impone $C(x \to \infty) = C_0$).

- se fosse $\frac{\partial C}{\partial t} \gg \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ allora avremmo una concentrazione che dipende solo dal tempo e non da x, in contrasto col fatto che C deve variare tra C_0 e C_1.

Riconsideriamo il grafico precedente. Notiamo che:

$$C(x_1, t_1) = C(x_2, t_2) =$$

$$= C(x_3, t_3) \equiv \overline{C}$$



Ovvero, ottengo la stessa concentrazione di soluto in diverse posizioni all'interno del mezzo dove avviene la diffusione a diversi istanti.

Per ridurre il numero di variabili indipendenti da cui dipende l'incognita (variabile dipendente) del problema, possiamo introdurre una opportuna variabile adimensionale combinando le variabili indipendenti :

$$\left.\begin{matrix} x \\ t \end{matrix}\right\} \quad \boxed{\eta \triangleq x \cdot t^{-n}}$$ VARIABILE DI SIMILITUDINE

Con n da ricavare. Sfruttiamo questa definizione per riscrivere le derivate che compaiono nell'eq. [S]:

- $$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial c}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\partial c}{\partial \eta} \cdot \left(-n \cdot t^{-n-1} \cdot x\right)$$

- $$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial \eta} \cdot \left(t^{-n}\right)$$

- $$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial c}{\partial \eta} \cdot \left(t^{-n}\right)\right] = \longrightarrow$$

$$= t^{-n} \cdot \underbrace{\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\frac{\partial C}{\partial \eta}\right)}_{\frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2}} \cdot \underbrace{\frac{\partial \eta}{\partial x}}_{t^{-n}} = \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} \cdot t^{-2n}$$

Ovvero:

$$-n x t^{-n-1} \cdot \frac{\partial C}{\partial \eta} = D \cdot t^{-2n} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2}$$

Poiché:

$$C = C(\eta) \longrightarrow \frac{\partial C}{\partial \eta} = \frac{dC}{d\eta} \ ; \ \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} = \frac{d^2 C}{d\eta^2}$$

$$x \cdot t^{-n-1} = x \cdot t^{-n} \cdot t^{-1} = \eta \cdot t^{-1}$$

troviamo:

$$-n \cdot \eta \frac{dC}{d\eta} \cdot \frac{1}{t} = D \cdot \frac{d^2 C}{d\eta^2} \cdot t^{-2n}$$

Affinché l'equazione sia risolvibile per $C(\eta)$ deve sparire il tempo. Ciò avviene se

$$n = \frac{1}{2} \Rightarrow \eta \triangleq \frac{x}{\sqrt{t}}$$

che restituisce:

$$\frac{d^2C}{d\eta^2} + \frac{1}{2D}\eta\frac{dC}{d\eta} = 0$$

Problema! La definizione $\eta \triangleq x/\sqrt{t}$ non corrisponde ad una variabile adimensionale. In effetti:

$$\frac{x}{\sqrt{t}} = \left[\frac{m}{s^{1/2}}\right] \quad \text{ma} \quad D = \left[\frac{m^2}{s}\right]$$

Tramite considerazioni puramente dimensionali, ci accorgiamo che, definendo:

$$\boxed{\eta \triangleq \frac{x}{2\sqrt{D \cdot t}}}$$

VARIABILE DI SIMILITUDINE ADIMENSIONALE

troviamo:

$$\boxed{\frac{d^2C}{d\eta^2} + 2\eta\frac{dC}{d\eta} = 0}$$

ovvero l'eq. [9] scritta rispetto a η.

Per trovare C dobbiamo integrare rispetto ad η.

Per integrare, però, dobbiamo anche riscri-
vere le C.C. rispetto ad η:

$$x = 0 \rightarrow \eta = 0 \rightarrow \boxed{C(\eta = 0) = C_1}$$

$$x \rightarrow \infty \rightarrow \eta \rightarrow \infty \rightarrow \boxed{C(\eta \rightarrow \infty) = C_0}$$

Integrazione:

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

$$\frac{d^2C}{d\eta^2} = -2\eta \frac{dC}{d\eta}$$

Poniamo $\frac{dC}{d\eta} = X$: $\frac{dX}{d\eta} = -2\eta \cdot X$

Soluz.

$$X = A \cdot e^{-\eta^2}$$

Otteniamo:

$$\frac{dC}{d\eta} = A \cdot e^{-\eta^2}$$

$$\int_{C_1}^{C(\eta)} dC = \int_0^{\eta} A \cdot e^{-\eta^2} d\eta$$

$$C(\eta) - C_1 = A \cdot \underbrace{\int_0^{\eta} e^{-\eta^2} d\eta}$$

QUESTO INTEGRALE E' PARENTE DELLA FUNZIONE DEGLI ERRORI

$$\mathrm{erf}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\eta} e^{-\eta^2} d\eta$$

Ora, è possibile dimostrare che:

$$\int_0^{\infty} e^{-\eta^2} d\eta = \int_0^{\eta} e^{-\eta^2} d\eta + \underbrace{\int_{\eta}^{\infty} e^{-\eta^2} d\eta}_{=0\,!}$$

ovvero che:

$$C(\eta) - C_1 = A \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \mathrm{erf}(\eta)$$

Poiché $C(\eta \to \infty) = C_0$ si trova:

$$A = \frac{C_0 - C_1}{\sqrt{\pi}/2}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\frac{C(\eta) - C_1}{C_0 - C_1} = \mathrm{erf}(\eta)}$$