

PROBLEMAS DE FRONTERA LIBRE EN LA DIFUSIÓN DE SOLVENTES EN POLÍMEROS.

Marcos Enrique Gaudiano

Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía y Física como parte de los
requerimientos para la obtención del grado de Doctor en Matemática de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

Marzo de 2008

©FaMAF - UNC 2008

Director: Dra. Cristina Turner.

Resumen.

El estudio de la difusión de solventes en polímeros es de gran utilidad en la industria de los materiales plásticos. Matemáticamente, estos procesos pueden ser modelados como problemas de frontera libre. En este trabajo se trata un modelo unidimensional tomando en cuenta una condición de contorno del tipo convectiva. Se obtienen estimaciones asintóticas de la frontera libre que son independientes del material, válidas incluso para procesos de difusión no lineales. También se presentan métodos numéricos que calculan la solución al problema y que permiten corroborar los resultados teóricos.

Abstract.

Research in diffusion of solvent into polymers is an important challenge which arises in polymer industry. Mathematically, these processes can be modelled as free boundary problems. We studied the one dimensional case. Imposing a convective boundary condition on the fixed face, the solution has an interesting asymptotic behavior. It is found that the free boundary is bounded by a constant which does not depend on the conductivity coefficient, which holds even if the diffusion process is nonlinear. Numerical methods are presented to compute the solutions and compare the results.

PALABRAS CLAVE: Frontera libre. Ecuación de difusión. Condición de contorno convectiva. Ecuaciones diferenciales no lineales.

CÓDIGO DE CLASIFICACIÓN: 35K05, 35K55, 35R35.

A mis padres.

Estoy totalmente agradecido de

*Cristina Turner,
Fernando Menzaque,
y Tomás Godoy.*

*Todo lo mucho que he aprendido,
recibido y compartido en estos años,
en mi opinión resulta imposible
de agradecer en palabras. Aun así,
les digo:*

Muchas gracias.

*Y aclaro, que para mí esas dos
palabras representan a muchas más.*

Índice

1. Introducción.	6
1.1. La ecuación del calor y la conservación de la masa.	8
1.2. Algunos ejemplos de aplicación de la frontera libre.	10
1.2.1. Crecimiento de raíces en vegetales.	10
1.2.2. Unión p - n en un diodo semiconductor.	11
1.2.3. Extracción del petróleo.	12
1.2.4. Crecimiento de tumores cancerígenos.	13
1.3. Difusión de solventes en polímeros.	14
2. Condición convectiva.	18
2.1. Un problema auxiliar.	18
2.2. Existencia local y unicidad.	21
2.3. Existencia global.	23
2.4. Comportamientos asintóticos.	25
2.5. El método numérico.	29
3. El límite $h \rightarrow \infty$.	32
3.1. Convergencia uniforme.	34
3.2. Resultados numéricos.	37
3.3. Un caso particular.	39
4. Un problema con concentración externa creciente.	41
4.1. Un problema auxiliar.	41
4.2. Comportamientos asintóticos.	44
4.3. Solución numérica.	46
5. Coeficiente de conductividad no-constante.	49
5.1. Los Métodos Numéricos.	50
5.1.1. El caso de la barra no-homogénea ($K = K(x)$).	50
5.1.2. Difusión no lineal ($K = K(c)$).	55
5.2. Comportamientos Asintóticos.	56
5.3. Resultados numéricos.	61
6. Conclusión.	64
7. Apéndice.	65
Referencias.	67

1. Introducción.

El primer estudio sobre lo que hoy en matemática se denomina *frontera libre*, se le atribuye a G. Lamé y B.P. Clapeyron en el año 1831, quienes buscaron las soluciones explícitas para el proceso de solidificación de un globo líquido ([1]). En los años 1889-1891, J. Stefan estudió nuevamente este tipo de problemas en sus trabajos sobre el crecimiento del espesor del hielo en el agua a bajas temperaturas ([2]-[7]). Ese problema es justamente conocido en matemática como *el problema de Stefan* y frecuentemente se utiliza para explicar el concepto de *frontera libre*. Supongamos, como se ve en la figura 1.1, que tenemos en un recipiente una cierta cantidad de agua a una temperatura cercana a $0^{\circ}C$. El agua en su fase líquida está en el fondo, por debajo de una capa de hielo que flota en la superficie. El espesor de esa capa de hielo crecerá o disminuirá según cómo varíe en el tiempo la temperatura del medio exterior. En cada instante se puede observar una superficie bien definida que separa la región donde se encuentra la fase líquida de la sólida. Esta superficie es la *frontera libre*. Esta *frontera*, puede determinarse -en principio- conociendo cómo fluye el calor desde el recipiente al medio exterior. Pero en la formulación matemática de este tipo

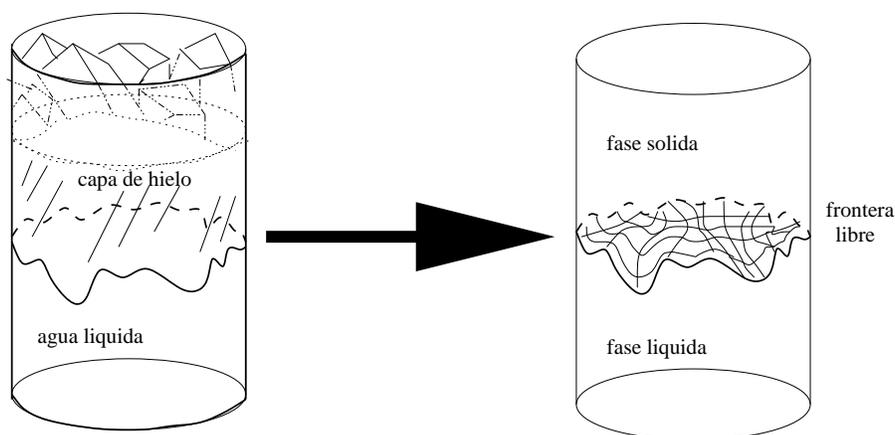


Figura 1.1: La frontera libre en un vaso con hielo.

de problemas se encuentra que la frontera libre no es la única incógnita, sino que además, el problema consiste en determinar la temperatura que se asume en cada punto interior al volumen que ocupa cada fase. Más aún, la distribución de temperatura y la frontera libre están interrelacionadas y deben, por lo general, ser obtenidas simultáneamente.

Para fijar ideas veamos una versión 1-D del problema de Stefan. Supongamos que inicialmente, o sea en $t = 0$, tenemos una columna de agua, representada por el intervalo $0 \leq x \leq +\infty$. El agua está a $0^{\circ}C$ pero en estado líquido, a punto de congelarse. Además el agua se encuentra aislada térmicamente, excepto en el punto $x = 0$, que está en contacto con el medio exterior a una temperatura $\theta < 0^{\circ}C$. Para un instante posterior $t > 0$ la situación es la siguiente: como la temperatura interior es mayor que la exterior existe un flujo de calor a través de $x = 0$ hacia el medio exterior. De esta forma, cerca de $x = 0$, disminuye la temperatura del agua y se forma hielo en cierto intervalo $0 \leq x \leq s(t)$. Para $x > s(t)$ el agua aún se encuentra toda a $0^{\circ}C$ y en estado líquido, como se muestra en la figura:

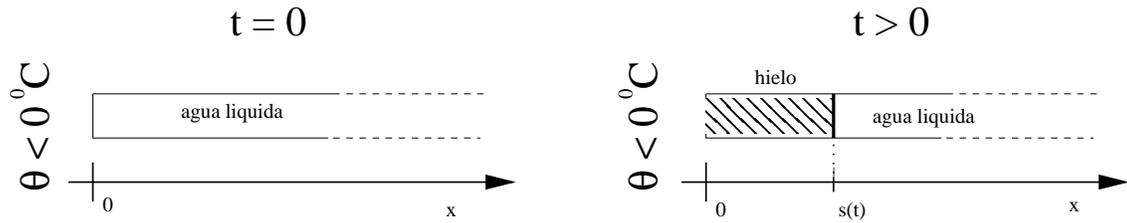


Figura 1.2: Problema de Stefan 1-D.

El punto $s(t)$ es precisamente la frontera libre, depende del tiempo, separa las fases sólida y líquida, y es totalmente desconocida. La temperatura dentro del hielo es una función $u(x, t)$ que debe satisfacer:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad \text{para } 0 < x < s(t) \text{ y } t > 0, \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial u(s(t), t)}{\partial x} = \frac{ds(t)}{dt}, \quad t > 0. \quad (1.2)$$

La ecuación (1.1) es conocida como *ecuación del calor* o *ecuación de difusión* y establece que la energía térmica fluye a través del hielo, sin acumularse en ningún lugar en particular, es decir, la temperatura se difunde en el hielo y se espera que cuando $t \rightarrow \infty$ se uniformice, ocurriendo que $u(x, t) \rightarrow \theta$. La ecuación (1.2) establece que el agua pasa de estado líquido a sólido, pero la cantidad total de agua se conserva, por eso se la conoce como la *ley de conservación de la masa*. Deduciremos ambas ecuaciones en la subsección que sigue. En cuanto a las condiciones de contorno, debe cumplirse que:

$$u(0, t) = \theta, \quad t \geq 0, \quad (1.3)$$

$$u(s(t), t) = 0, \quad t > 0. \quad (1.4)$$

Las ecuaciones (1.3) y (1.4) nos aseguran que la temperatura varíe continuamente desde el exterior a temperatura θ , hasta el agua líquida que podemos asumir, $u(x, t) = 0$ para $x > s(t)$. Como para $t = 0$ no hay hielo, también $s(t)$ cumple que

$$s(0) = 0. \quad (1.5)$$

De este modo, el problema matemático consiste en determinar $u(x, t)$ y $s(t)$ que cumplan simultáneamente (1.1)-(1.5). Así $u(x, t)$ satisface una ecuación con condiciones de contorno, pero dicho contorno no se conoce aún, por tal motivo $s(t)$ es llamada *frontera libre*, puesto que el dominio donde $u(x, t)$ cumple (1.1)-(1.4) cambia con el tiempo, no está fijo y es una incógnita más en el problema. La solución exacta a este problema es:

$$s(t) = c\sqrt{t}, \quad t \geq 0, \quad (1.6)$$

$$u(x, t) = \theta + ce^{c^2/4} \int_0^{x/2\sqrt{t}} e^{-y^2} dy \quad \text{para } 0 \leq x \leq s(t) \text{ y } t \geq 0, \quad (1.7)$$

donde c satisface

$$ce^{c^2/4} \int_0^{c/2} e^{-y^2} dy = -\theta.$$

Vale aclarar que esta solución ya aparece en [1], mucho antes que en [2]-[7]. La denominación a este tipo de problemas por *problema de Stefan* comenzó aproximadamente por el año 1950, en homenaje a este científico, pero esto ocurrió por puro desconocimiento del pionero trabajo de Lamé y Clapeyron.

1.1. La ecuación del calor y la conservación de la masa.

Estas ecuaciones o generalizaciones de las mismas, suelen aparecer en muchos problemas de frontera libre. Ahora entenderemos cómo se formulan partiendo desde la Física.

Ecuación del calor.

La figura 1.3 representa una barra unidimensional de un determinado material (podría

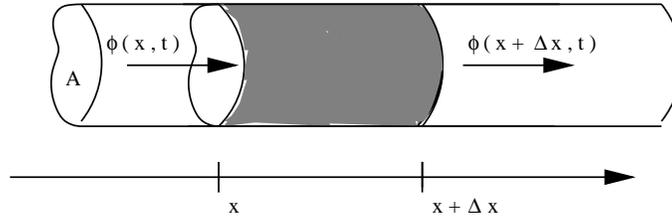


Figura 1.3: Energía térmica fluyendo a través de una barra.

ser el hielo del problema de Stefan). Si la temperatura u dentro de la barra varía de un punto a otro, se producirá un flujo de calor ϕ desde los lugares de mayor temperatura a los lugares de menor temperatura. El flujo $\phi(x, t)$ se define como la cantidad de energía térmica que por unidad de área y por unidad de tiempo atraviesa la sección asociada al punto x . El signo de ϕ se define positivo si la energía fluye hacia la derecha y viceversa. Denotando por $e(x, t)$ a la energía por unidad de volumen, la energía almacenada entre x y $x + \Delta x$ al instante t es:

$$\Delta E(t) = e(\tilde{x}, t)A\Delta x, \quad x < \tilde{x} < x + \Delta x. \quad (1.8)$$

Además, por el *principio de conservación de la energía* tenemos que:

$$\frac{d}{dt}\Delta E(t) = -A(\phi(x + \Delta x, t) - \phi(x, t)). \quad (1.9)$$

Uniendo (1.8) y (1.9):

$$\frac{\partial e(\tilde{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\phi(x + \Delta x, t) - \phi(x, t)}{\Delta x}, \quad (1.10)$$

cuando tomando $\Delta x \rightarrow 0$ obtenemos:

$$\frac{\partial e(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x}. \quad (1.11)$$

Ahora expresaremos esta última ecuación en función de la temperatura $u(x, t)$. El *calor específico* c se define como la cantidad de energía por unidad de masa que hay que suministrar para que el material suba su temperatura en una unidad. De este modo tenemos:

$$e(x, t)A\Delta x = cu(x, t)\rho A\Delta x, \quad (1.12)$$

donde ρ es la densidad del material. Por otro lado, el calor fluye siempre hacia los lugares de menor temperatura, esto se conoce como la *ley de Fourier*:

$$\phi(x, t) = -K\frac{\partial u(x, t)}{\partial x}, \quad (1.13)$$

donde K es el coeficiente de conductividad térmica. Así, introduciendo (1.12) y (1.13) en (1.11), obtenemos:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{K}{c\rho} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}. \quad (1.14)$$

Normalizando, el factor $\frac{K}{c\rho}$ se puede asumir igual a uno y llegamos finalmente a la ecuación (1.1).

Conservación de la masa.

Cuando la frontera libre se mueve desde $s(t)$ a $s(t + \Delta t)$, se forma una cantidad de hielo

$$\Delta m = \rho A (s(t + \Delta t) - s(t)),$$

donde ρ es la densidad del hielo. La energía que pierde el agua al solidificarse está dada por

$$\Delta E = L\Delta m,$$

donde L es el *calor latente*. Esta energía ΔE fluye a través del hielo hacia la izquierda, puesto que $x = 0$ se encuentra a menor temperatura. De modo que por (1.13) tenemos:

$$-Ku_x(s(t), t) = \phi = -\frac{\Delta E}{A\Delta t},$$

de este modo, cuando $\Delta t \rightarrow 0$:

$$u_x(s(t), t) = \frac{L\rho}{K} \frac{ds(t)}{dt},$$

que es precisamente la ecuación (1.2).

Si bien las ecuaciones (1.1) y (1.2) fueron deducidas para el caso particular del problema de Stefan, dependiendo del problema tratado, la variable u puede representar físicamente cualquier entidad que se difunda en el espacio y en el tiempo, por eso es que a (1.1) se la conoce también como ecuación de *difusión*. Igualmente, cuando en un problema se encuentre como condición de contorno una ecuación como (1.2), significará entonces algún tipo de ecuación de conservación de la entidad que se está difundiendo. Por eso a continuación se muestra una serie de problemas en matemática aplicada, todos bien distintos entre sí, pero que se pueden modelizar siempre desde el punto de vista de la frontera libre.

1.2. Algunos ejemplos de aplicación de la frontera libre.

1.2.1. Crecimiento de raíces en vegetales.

Este modelo es de gran interés en Biología y Agronomía. Cada raíz de un vegetal, planta o cultivo que crece en un suelo determinado, está envuelta por un microambiente llamado *rizósfera*. En esta zona del suelo, que es inmediata a la raíz, se encuentran disueltas sales minerales con las que se nutre el vegetal y se caracteriza además por la presencia de una microfauna compuesta por hongos, bacterias, insectos y ácaros, los cuales consumen otros microorganismos que resultan patógenos para la raíz. Este mini-ecosistema

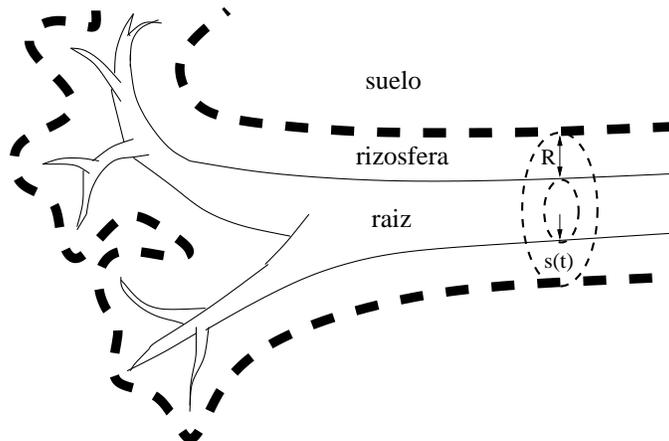


Figura 1.4: Sistema raíz-rizósfera.

tiene un espesor de aproximadamente 1 mm.

En [8] se estudia un modelo muy simplificado, en el que se supone al sistema raíz-rizósfera con simetría radial y se estudia el crecimiento del radio $r = s(t)$ de la raíz a medida que se consumen nutrientes disueltos en la región $s(t) < r < R + s(t)$, donde R es el espesor de la rizósfera, que se asume siempre constante. Un determinado nutriente, con concentración $c(r, t)$ se difunde en la rizósfera y es consumido por la raíz satisfaciendo:

$$\frac{\partial^2 c(r, t)}{\partial r^2} + \frac{\alpha}{r} \frac{\partial c(r, t)}{\partial r} = \frac{\partial c(r, t)}{\partial t} \quad \text{en } s(t) < r < s(t) + R, \quad (1.15)$$

$$c(r, 0) = \Phi(r), \quad s_0 \leq r \leq R, \quad (1.16)$$

$$c(s(t) + R, t) = c_\infty, \quad t > 0, \quad (1.17)$$

$$\beta \frac{\partial c(s(t), t)}{\partial r} + \omega c(s(t), t) = kc(s(t), t) - E = ac(s(t), t) \frac{ds(t)}{dt}, \quad (1.18)$$

$$s(0) = s_0, \quad (1.19)$$

donde α , β , ω , k , E y a son todas constantes experimentales asociadas al suelo, s_0 es el radio inicial de la raíz y $\Phi(r)$ la concentración inicial del nutriente. La ecuación (1.15) no es más que la ecuación de difusión escrita en coordenadas polares. La condición de contorno (1.17) establece que fuera de la rizósfera la concentración del nutriente se supone constante e igual a $c_\infty > 0$. La ecuación (1.18) es una especie de ley de conservación de masa radial asociada al nutriente.

1.2.2. Unión p - n en un diodo semiconductor.

Este ejemplo es de gran interés tecnológico. Es aplicable en el diseño y testeo de diodos y transistores. Un diodo es un mecanismo en electrónica, que impide el paso de corriente eléctrica en un sentido, pero que lo permite en el sentido contrario. Los materiales tipo p y n son metales que tienen disueltas ciertas impurezas en su red cristalina. Dependiendo del par impureza-metal se puede lograr un material dotado de más electrones en la banda de conducción (material n), o dotado de menos electrones en la banda de valencia (material p). Cabe aclarar que ambos materiales son eléctricamente neutros. Un diodo se construye poniendo en contacto físico ambos tipos de materiales (ver figura 1.5). Cualitativamente, el material p posee *huecos*, que tienden a ser llenados -mediante un proceso de difusión- por los electrones *que sobran* en el material n .

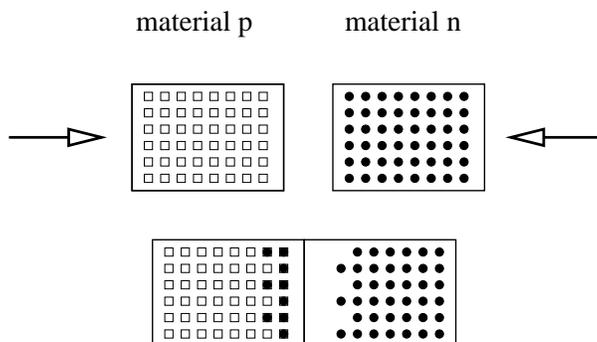


Figura 1.5: Los electrones del material n llenan algunos huecos del material p .

En el modelo considerado en [9], se aplica una diferencia de potencial en el sentido indicado en la figura 1.6, se observa que en la región $-R(t) < x < R(t)$, no hay electrones que puedan conducir la corriente, considerándose prácticamente *nula*. El problema

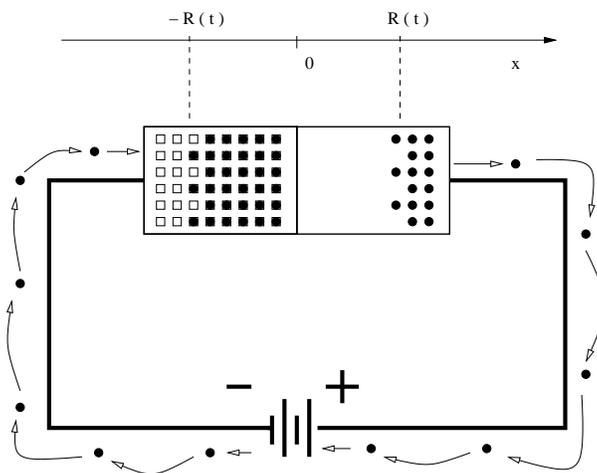


Figura 1.6: En esta disposición, prácticamente no fluye corriente eléctrica a través del diodo, porque hay muy pocos electrones cerca de $x = 0$.

matemático es simétrico con respecto a x y consiste en encontrar $c(x, t)$ y $R(t)$ tales que:

$$c(x, t) = 0 \quad \text{en } 0 \leq x < R(t), \quad (1.20)$$

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial c(x, t)}{\partial x} - \frac{NI}{c(x, t)} \right) \quad \text{para } c(x, t) > N \text{ y } x > R(t), \quad (1.21)$$

$$c(R(t)^+, t) = N, \quad (1.22)$$

$$N \frac{dR(t)}{dt} = I - \frac{\partial c(R(t)^+, t)}{\partial x}, \quad (1.23)$$

$$R(0) = 0. \quad (1.24)$$

donde $c(x, t)$ es la suma de la densidad de electrones de conducción y la densidad de huecos, I es un cierto tipo de corriente asociada al potencial aplicado y N es la cantidad de impurezas por unidad de volumen.

1.2.3. Extracción del petróleo.

El petróleo es un fluido de Bingham. A diferencia de los fluidos ordinarios, no se comporta siguiendo estrictamente las ecuaciones de *Navier-Stokes*, sino que bajo ciertas condiciones mecánicas, de presión y temperatura, parte del mismo adopta una forma de *gel*, que se puede considerar dinámicamente como un sólido.

En la figura 1.7 se observa el petróleo siendo extraído por un conducto aplicando una fuerza $f(t)$. La parte central del fluido adopta la forma de gel, mientras que en la parte

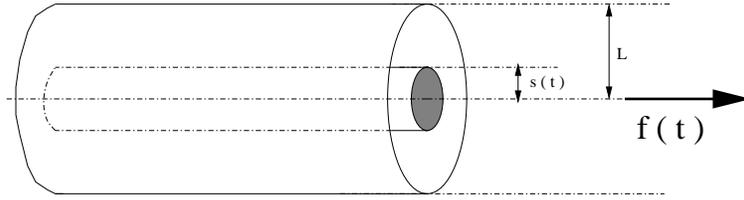


Figura 1.7: Conducto cilíndrico por donde circula un fluido de Bingham.

cercana a las paredes del tubo se comporta como un fluido ordinario. Ambas regiones están separadas por una superficie bien definida dada por $r = s(t)$, que es desconocida. El problema de frontera libre consiste en hallar simultáneamente el campo de velocidad $u(r, t)$ del petróleo y $s(t)$:

$$\rho \frac{\partial u(r, t)}{\partial t} - \eta \frac{\partial^2 u(r, t)}{\partial r^2} - \frac{\eta}{r} \frac{\partial u(r, t)}{\partial r} + \frac{\tau_0}{r} = f(t), \quad s(t) < r < L, t > 0, \quad (1.25)$$

$$u(L, t) = 0, \quad t > 0, \quad (1.26)$$

$$\frac{\partial u(s(t), t)}{\partial r} = 0, \quad t > 0, \quad (1.27)$$

$$\frac{\partial u(s(t), t)}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \left(f(t) - \frac{2\tau_0}{s(t)} \right), \quad t > 0, \quad (1.28)$$

$$s(0) = s_0, \quad (1.29)$$

$$u(r, 0) = u_0(r), \quad 0 < s_0 < r < L, \quad (1.30)$$

donde ρ es la densidad, η la viscosidad y τ_0 se denomina *tensión umbral de corte*. Las ecuaciones (1.25)-(1.27) no son otras que las de Navier-Stokes aplicadas a la parte del petróleo que fluye ordinariamente, mientras que (1.28), habla de una fuerza aplicada sobre la parte en forma de gel, que se mueve como un todo, siendo la velocidad independiente de r en esa región. Este problema de frontera libre fue estudiado en [10].

1.2.4. Crecimiento de tumores cancerígenos.

Este modelo es potencialmente de importancia en la investigación médica de la lucha contra el cáncer. El cáncer es una enfermedad de origen celular. Debido a diversos factores pertenecientes al medio al que se encuentra expuesto el individuo y a la predisposición genética, pueden aparecer células defectuosas dentro de determinados tejidos. Estas células presentan mutaciones y no cumplen con las funciones biológicas asignadas. El organismo posee un sistema llamado *apoptosis* que elimina naturalmente y sin efectos nocivos a las células defectuosas, pero ocurre en general que las células cancerígenas se multiplican a una velocidad mucho mayor que lo normal, invadiendo el espacio y formando un tumor.

En [11] se expone un modelo matemático muy simplificado de este complejo proceso. Se supone al tumor evolucionando en el tiempo, encerrado dentro de un volumen $\Omega(t)$ y compuesto por tres grupos de células: activas, inactivas y muertas, cuyas densidades las llamaremos P (*proliferating*), Q (*quiescent*) y D (*dead*) respectivamente. Los tres tipos de células están todas mezcladas uniformemente dentro del tumor, es decir:

$$P + Q + D = \text{constante} \equiv N. \quad (1.31)$$

Además, está presente un nutriente de concentración $C = C(x, y, z, t)$, generalmente oxígeno. En el proceso del cáncer, las células activas se caracterizan porque son capaces de multiplicarse a razón $K_B(C)$ y pueden transformarse en inactivas con una tasa $K_Q(C)$. Las células inactivas no se multiplican, pueden transformarse en activas a una tasa $K_P(C)$ y pueden morir a razón $K_D(C)$ en el proceso de *necrosis*, en el que la célula se rompe liberando sus sustancias internas, que son muy nocivas para las células sanas presentes alrededor. Además, tanto las células activas como las inactivas pueden morir por apoptosis a razón $K_A(C)$. Finalmente existe un proceso de eliminación de las células muertas por necrosis con una tasa K_R que no depende de la concentración del nutriente.

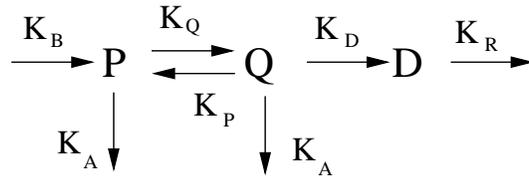


Figura 1.8: El modelo de Cui-Friedman.

La descripción completa de este modelo escapa a esta presentación, pero se encuentra que $P(x, y, z, t)$, $Q(x, y, z, t)$, $C(x, y, z, t)$ deben cumplir:

$$\nabla^2 C - \lambda C = 0 \quad \text{en } \Omega(t), \quad (1.32)$$

$$C = C_0 \quad \text{sobre } \partial\Omega(t), \quad (1.33)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \operatorname{div}(P\nabla\sigma) = [K_B(C) - K_Q(C) - K_A(C)]P + K_P(C)Q \quad \text{en } \Omega(t), \quad (1.34)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \operatorname{div}(Q\nabla\sigma) = K_Q(C)P - [K_P(C) - K_D(C)]Q \quad \text{en } \Omega(t), \quad (1.35)$$

$$N\nabla^2\sigma = -NK_R + [K_B(C) + K_R]P + K_RQ \quad \text{en } \Omega(t), \quad (1.36)$$

donde $\lambda > 0$ y $\sigma(x, y, z, t)$ es una especie de presión asociada al nutriente que sobre la superficie del tumor debe satisfacer:

$$\sigma = \gamma\kappa \quad \text{sobre } \partial\Omega(t), \quad \gamma > 0,$$

donde κ es la curvatura media. El movimiento de la frontera libre está dado por la ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial\sigma}{\partial\vec{n}} \equiv \nabla\sigma \cdot \vec{n} = V_n \quad \text{sobre } \partial\Omega(t),$$

donde \vec{n} es la normal a la superficie y V_n es la velocidad de la frontera libre en esa dirección. El problema consiste en determinar $\Omega(t)$, P , Q , C y σ del sistema planteado dadas las condiciones iniciales:

$$\Omega(0), \quad P(x, y, z, 0), \quad Q(x, y, z, 0).$$

1.3. Difusión de solventes en polímeros.

Los materiales plásticos han producido en el siglo XX una verdadera revolución. El hombre por primera vez comenzó a elaborar y diseñar en forma sintética sus propios materiales. En la sociedad actual, un individuo está en contacto todo el tiempo con este tipo de materiales. Las principales características de los plásticos es que son materiales livianos, resistentes, moldeables y, de acuerdo con su composición química, pueden adoptar múltiples propiedades y aplicaciones. Una de las principales desventajas es que tardan cerca de 500 años en biodegradarse.

Los plásticos están constituidos por polímeros. Estos se caracterizan por tener una estructura molecular en forma de cadena repetitiva e infinita de unidades básicas, llamadas monómeros. De acuerdo al monómero usado, el material resultante adopta el nombre. La figura 1.9 muestra el caso del poliestireno. Los ejemplos más conocidos son el nailon

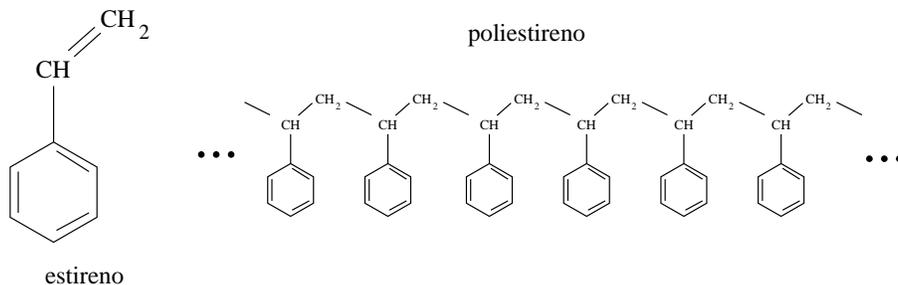


Figura 1.9: Fabricación del poliestireno a partir del estireno.

(poli-amida), el polietileno (poli-etileno), los poliésteres (poli-estireno), los poliuretanos (poli-uretano), el PVC (poli-cloruro de vinilo), el acrílico (poli-metilmacrilato), etc. Los

polímeros vidriosos, como el acrílico, son especialmente requeridos por su extrema dureza, transparencia y resistencia a la intemperie, teniendo aplicaciones en las más diversas industrias, desde la industria del automóvil hasta la ortopedia, en la fabricación de prótesis. Es por eso que es de gran interés para la industria del plástico, estudiar cómo minimizar al máximo su grado de desgaste por efectos de un ambiente externo.

Modelo de Astarita-Sarti.

En el año 1978, los químicos G. Astarita y G. C. Sarti formularon el modelo matemático de la penetración de solvente sobre un polímero vidrioso (ver [12]). El solvente representa al agente corrosivo externo. En la figura 1.10 se observa una barra de polímero homogénea representada por el intervalo $0 \leq x < \infty$. El extremo izquierdo de la barra, o sea $x = 0$, se encuentra en contacto con una fuente de solvente de concentración constante u_0 . Una característica de los polímeros vidriosos, es el hecho de que el solvente no penetra el material si u_0 no supera cierto umbral de concentración $q > 0$. Una vez que se sobrepasa ese umbral (o esa, si $u_0 > q$), el solvente penetra y se difunde a través del polímero. En

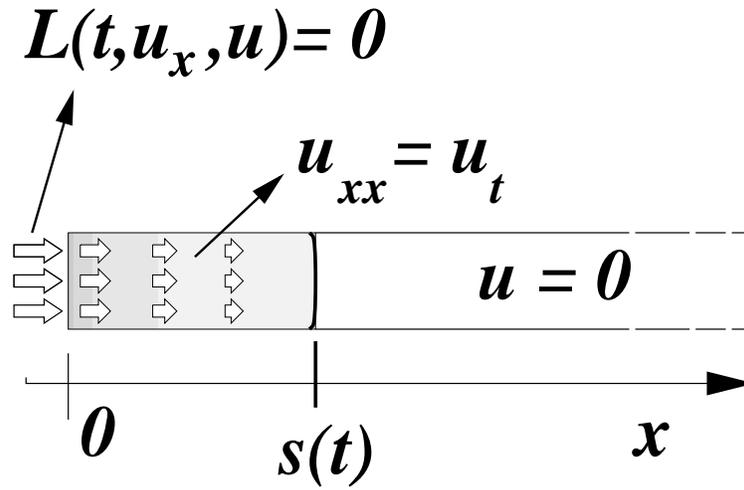


Figura 1.10: El solvente se difunde a través de la barra de polímero.

cada instante $t > 0$ se observa siempre lo mismo: una parte de la barra está mojada con solvente con concentración $u(x, t)$, la cual se difunde satisfaciendo la ecuación del calor. El resto de la barra continúa totalmente seca. El punto $s(t)$ que separa ambas regiones es la frontera libre del problema y es a priori totalmente desconocido. Este modelo establece que la velocidad con la que avanza la frontera libre, es una función monótona de la diferencia entre la concentración de solvente y el valor umbral:

$$\frac{ds(t)}{dt} = f(u(s(t), t) - q), \quad t > 0. \quad (1.37)$$

En Química se encuentra que f es una ley de potencia: $f(c) = c^\alpha$, con $\alpha > 0$ generalmente entre 0.5 y 1. Además uno desearía que el movimiento cese cuando $u(s(t), t)$ esté próximo al valor umbral q . Entonces en (1.37) debemos imponer la condición

$$f(0) = 0. \quad (1.38)$$

Además en $x = s(t)$ se debe cumplir la ley de conservación de la masa, que no tiene para este problema la misma expresión que (1.2) y se deduce como sigue. Se supone que el solvente fluye a través de la barra satisfaciendo la *ley de Fick*:

$$\text{flujo} \equiv \phi(x, t) = -\kappa \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \kappa > 0, \quad (1.39)$$

que es exactamente la ley de Fourier (1.13). Además, para avanzar desde $s(t)$ a $s(t + \Delta t)$, habrá fluído a través de $x = s(t)$ una cierta cantidad de solvente, de modo que por conservación de la masa resulta:

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi(s(t), \tau) d\tau = \begin{array}{l} \text{cant. de solvente que} \\ \text{pasó por } x = s(t) \end{array} = \int_{s(t)}^{s(t+\Delta t)} u(x, t + \Delta t) dx, \quad (1.40)$$

luego, mediante el teorema del valor medio obtenemos:

$$\begin{aligned} \Delta t \phi(s(t), \hat{\tau}) &= (s(t + \Delta t) - s(t)) u(\hat{x}, t + \Delta t), \\ -\kappa \Delta t \frac{\partial u(s(t), \hat{\tau})}{\partial x} &= \end{aligned} \quad (1.41)$$

con $s(t) < \hat{x} < s(t + \Delta t)$ y $t < \hat{\tau} < t + \Delta t$. De este modo, en el límite $\Delta t \rightarrow 0$ tenemos que:

$$-\kappa \frac{\partial u(s(t), t)}{\partial x} = \frac{ds(t)}{dt} u(s(t), t), \quad t > 0. \quad (1.42)$$

Realizando el cambio de variables

$$c(x, t) = u(x, t) - q$$

y tomando $\kappa = 1$, se puede normalizar a la unidad la concentración en $x = 0$, quedando formulado el siguiente problema de frontera libre:

Dado $T > 0$, encontrar $s \in C^1[0, T]$ y $c \in C^{2,1}(D_T)$, con $D_T \equiv \{(x, t) : 0 < x < s(t), 0 < t < T\}$ tales que:

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2}, \quad (x, t) \in D_T, \quad (1.43)$$

$$s(0) = 0, \quad (1.44)$$

$$c(0, t) = 1, \quad 0 < t < T, \quad (1.45)$$

$$\frac{ds(t)}{dt} = f(c(s(t), t)), \quad 0 < t < T, \quad (1.46)$$

$$\frac{\partial c(s(t), t)}{\partial x} = -\frac{ds(t)}{dt} (c(s(t), t) + q), \quad 0 < t < T, \quad (1.47)$$

con $f(c)$ satisfaciendo $f(0) = 0$, $f \in C^1(0, 1]$ y $f'(c) > 0$ para $c \in (0, 1]$.

A. Fasano, G. H. Meyer y M. Primicerio mostraron en [13] que este sistema de ecuaciones está bien planteado, demostrando la existencia y unicidad de la solución para cualquier $T > 0$. Este problema también se formuló y estudió bajo otras condiciones de contorno, en numerosos trabajos. En [18], Phan Huu San y Nguyen Dinh Tri estudiaron una concentración externa decreciente en el tiempo:

$$c(0, t) = g(t) \quad \text{con } dg(t)/dt < 0.$$

Andreucci y Ricci en [17], consideraron la existencia de flujo a través de $x = 0$, en vez de (1.45):

$$\frac{\partial c(0, t)}{\partial x} = \phi(t), \quad \text{con } \phi(t) > 0.$$

En [15], Comparini y Ricci asumieron que

$$\frac{\partial c(0, t)}{\partial x} = \frac{\partial c(0, t)}{\partial t}, \quad \text{en lugar de (1.45).}$$

Comparini, Ricci y Turner en [16] estudiaron el caso de un polímero no-homogéneo considerando:

$$\frac{ds(t)}{dt} = f(c(s(t), t), s(t)), \quad \text{en vez de (1.46).}$$

En el presente trabajo, se estudiará una condición de contorno del tipo *convectiva*:

$$\frac{\partial c(0, t)}{\partial x} = h (c(0, t) - g(t)), \quad t > 0, \quad (1.48)$$

donde $h > 0$ se llama *coeficiente de transferencia de masa*, o *coeficiente de convección*. La función $q + g(t)$ representa la concentración exterior de solvente y si ésta es mayor que la interior (o sea $q + g(t) > u(0, t)$, que equivale a $g(t) > c(0, t)$), entonces el flujo de solvente es hacia adentro, puesto que

$$\phi(0, t) = -\frac{\partial c(0, t)}{\partial x} > 0.$$

Contrariamente, si $g(t) < c(0, t)$ entonces saldrá solvente de la barra de polímero a través de $x = 0$.

El plan a seguir es el siguiente: El problema con la condición de contorno (1.48) se expone en la sección 2. El comportamiento asintótico cuando $h \rightarrow \infty$ se trata en la sección 3. En la sección 4 se generaliza [18] para una concentración de solvente externa que crece en el tiempo. Finalmente, en la sección 5 se estudia el problema para procesos de difusión con condición de contorno tipo (1.48), pero suponiendo además, que el coeficiente de conductividad es no-constante.

2. Condición convectiva.

Esta sección se desarrolla siguiendo la estructura de los trabajos [20] y [19]. El problema matemático queda formulado de la manera siguiente:

Problema PS. *Encontrar una terna (T, s, c) tal que: $T > 0$, $s \in C^1[0, T]$, $c \in C^{2,1}(D_T) \cap C(\bar{D}_T)$, donde $D_T = \{(x, t) : 0 < t < T, 0 < x < s(t)\}$, satisfaciendo*

$$c_{xx} - c_t = 0 \quad \text{en } D_T, \quad (2.1)$$

$$c_x(0, t) = h[c(0, t) - g(t)], \quad g(0) = 1, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (2.2)$$

$$\dot{s}(t) = f(c(s(t), t)), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (2.3)$$

$$c_x(s(t), t) = -\dot{s}(t)[c(s(t), t) + q], \quad 0 \leq t \leq T, \quad (2.4)$$

$$s(0) = 0. \quad (2.5)$$

Se supondrá que el proceso físico representado se estabiliza en el tiempo, esto se puede garantizar si se asume que $g'(t) \leq 0$ y $G \equiv \int_0^\infty g(t) dt < \infty$. Para asegurar la existencia de una solución fue necesario además pedir que $g \in C^{1+\alpha}[0, T]$. De la misma forma se supone que la función f , además de cumplir $f(0) = 0$ y $f'(c) > 0$ para $c \in (0, 1]$ también cumple $f \in C^{1+\alpha}(\tau, 1]$, $\forall \tau > 0$. Será de utilidad definir $\Phi \equiv f^{-1}$ y notemos que esta función posee exactamente las mismas propiedades asumidas para f .

2.1. Un problema auxiliar.

Igualando (2.2) con (2.4) para $t = 0$, obtenemos que $c^* \equiv c(0, 0)$ es la única solución de $f(c^*)(c^* + q) = -h(c^* - 1)$, además cumple $0 < c^* < 1$.

Sea una curva $r \in C^1[0, T] \cap C^2(0, T)$ tal que

$$r(0) = 0, \quad (2.6)$$

$$\dot{r}(0) = f(c^*), \quad (2.7)$$

$$0 \leq \dot{r}(t) \leq f(c^*) \quad \text{en } [0, T], \quad (2.8)$$

$$|\ddot{r}(t)| \leq K \quad \text{en } (0, T) \quad (2.9)$$

y consideremos el problema auxiliar (**PA**) que consiste en:

Problema PA. *Encontrar $c \in C^{2,1}(D) \cap C(\bar{D})$, con c_x continua hasta $x = r(t)$, $t \in (0, T)$, tal que*

$$c_{xx} - c_t = 0 \quad \text{en } D = \{(x, t) : 0 < t < T, 0 < x < r(t)\}, \quad (2.10)$$

$$c_x(0, t) = h[c(0, t) - g(t)], \quad g(0) = 1, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (2.11)$$

$$c_x(r(t), t) = -\dot{r}(t)[\Phi(\dot{r}(t)) + q], \quad 0 \leq t \leq T. \quad (2.12)$$

Teorema 2.1 *El problema PA posee solución única.*

Demostración. Se sigue de aplicar los teoremas sobre existencia y unicidad estudiados en [25] y [26, pág. 561, T. 5.1]. ■

Proposición 2.2 Tomando T lo suficientemente pequeño, la solución de **PA** satisface:

$$c_0 \leq c(x, t) < 1, \quad 0 < x \leq r(t), \quad 0 < t \leq T, \quad (2.13)$$

$$h(c^* - 1) \leq c_x(x, t) < h(1 - g(t)), \quad 0 < t \leq T, \quad 0 < x < r(t), \quad (2.14)$$

donde c_0 es una constante positiva que sólo depende de T .

Demostración. Por aplicación de lema de *Hopf* (ver *Apéndice*), se puede suponer que c asume su valor máximo sobre el eje $x = 0$ debido a que $c_x \leq 0$ sobre $x = r(t)$. Sea

$$\max_{\bar{D}} c = c(0, t_0).$$

Si $t_0 = 0$, entonces $\max_{\bar{D}} c = c^* < 1$. Si $t_0 > 0$ tenemos $0 > c_x(0, t_0) = h(c(0, t_0) - g(t_0))$, lo que implica $\max_{\bar{D}} c < g(t_0) \leq 1$. Se cumple así el lado derecho de (2.13). Ahora supongamos que

$$\min_{\bar{D}} c_x = c_x(0, t_0),$$

para algún $t_0 > 0$. Entonces

$$0 \geq c_{xt}(0, t_0) = h(c_t(0, t_0) - g'(t_0))$$

y $c_{xx}(0, t_0) \leq g'(t_0) \leq 0$, lo que contradice el lema de *Hopf*. Así llegamos a que $\min_{\bar{D}} c_x = c_x(0, 0) = h(c^* - 1)$. Finalmente,

$$\begin{aligned} c(x, t) &= c(0, t) + \int_0^x c_x(\xi, t) d\xi = \frac{1}{h}c_x(0, t) + g(t) + \int_0^x c_x(\xi, t) d\xi \\ &\geq c^* - 1 + g(t) + h(c^* - 1)f(c^*)t \\ &\geq c^* - 1 + g(T) + h(c^* - 1)f(c^*)T > 0, \end{aligned}$$

si T se asume lo suficientemente pequeño. ■

Proposición 2.3 Suponiendo que se verifica (2.6)-(2.9), se cumple que $c \in C^{2,1}(\bar{D})$, $c_{xt} \in C(\bar{D} - (0, 0))$ y existe una constante B que depende de T y K , tal que

$$|c_t(x, t)| \leq B, \quad \forall (x, t) \in D. \quad (2.15)$$

Demostración. Usando [25] y [26, pág. 561, T. 5.1] se puede constatar que $c \in C^{2,1}(\bar{D})$ y $c_{xt} \in C(\bar{D} - (0, 0))$. Notemos que siempre se puede reducir T lo suficientemente para tener que $\dot{r}(t) \geq f(1) - KT > 0 \forall t \in [0, T]$. La función $w \equiv c_t$ es la solución de:

$$w_{xx} - w_t = 0, \quad \text{en } D, \quad (2.16)$$

$$w_x(0, t) = h(w(0, t) - g'(t)), \quad 0 < t < T, \quad (2.17)$$

$$w_x(r, t) + \dot{r}(t)w(r(t), t) = F(t), \quad 0 < t < T, \quad (2.18)$$

con $F(t) = \frac{d}{dt}c_x(r, t)$. Supongamos que w asume su máximo valor en el punto (x_0, t_0) . Si $t_0 > 0$ y $x_0 = r(t_0)$ entonces

$$0 < w_x(x_0, t_0) = F(t_0) - \dot{r}(t_0)w(x_0, t_0),$$

con lo cual

$$\begin{aligned} w(x_0, t_0) &\leq \frac{\sup |F|}{f(c^*) - KT} \\ &\leq \frac{K}{f(c^*) - KT} (c^* + q + f(c^*) + \sup \Phi') \doteq \beta_1. \end{aligned}$$

Si $x_0 = 0$ y $t_0 > 0$ tenemos

$$\begin{aligned} h(w(x_0, t_0) - g'(t_0)) &= w_x(x_0, t_0) < 0 \\ w(x_0, t_0) &< g'(t_0) \leq \sup |g'| \doteq \beta_2. \end{aligned}$$

Finalmente, si $x_0 = 0 = t_0$, podemos obtener t_1, t_2 y t_3 en el intervalo $(0, t)$ tales que:

$$\begin{aligned} \frac{c_x(r(t), t) - c_x(0, t)}{r(t)} &= \frac{-\dot{r}(t)(\Phi(\dot{r}(t)) + q) - h(c(0, t) - g(t))}{r(t)} \\ c_{xx}(r(t_1), t) &= \frac{-\ddot{r}(t_2)[q + \Phi(\dot{r}(t_2)) + \dot{r}(t_2)\Phi'(\dot{r}(t_2))] - h[c_t(0, t_2) - g'(t_2)]}{\dot{r}(t_3)} \\ \left| c_t(r(t_1), t) + \frac{h}{\dot{r}(t_3)}c_t(0, t_2) \right| &\leq \frac{K[q + \sup \Phi + f(c^*) \sup \Phi'] + h \sup |g'|}{\dot{r}(t_3)}, \end{aligned} \tag{2.19}$$

luego, tomando $t \rightarrow 0$:

$$|c_t(0, 0)| \leq \frac{K[q + \sup \Phi + f(c^*) \sup \Phi'] + h \sup |g'|}{h + f(c^*)} \doteq \beta_3.$$

Similarmente se obtiene que $\min_D w \geq -\max(\beta_1, \beta_2, \beta_3)$. ■

El siguiente resultado muestra cómo la solución de **PA** depende continuamente de $r(t)$. Supongamos que $r_1(t), r_2(t)$ verifican (2.6)-(2.9) y sean $c_1(x, t), c_2(x, t)$ las correspondientes soluciones que verifican (2.10)-(2.12).

Proposición 2.4 *Existen constantes $T_0 > 0$ y $N > 0$ tales que para cualquier $T \in (0, T_0)$ se cumple que*

$$|c_1(r_1(t), t) - c_2(r_2(t), t)| \leq N \|r_1 - r_2\|_{C^1[0, T]} \quad 0 < t < T. \tag{2.20}$$

Demostración. Definamos $\lambda = \min(r_1, r_2)$ y $D^* = \{(x, t) : 0 < x < \lambda(t), 0 < t < T\}$. Sea $M > 0$ y

$$W^\pm = c_1 - c_2 \pm xMR \quad \text{en} \quad D^*,$$

con $R = \|r_1 - r_2\|_{C^1[0, T]}$. Estas funciones verifican que

$$W_x^\pm(0, t) = hW^\pm(0, t) \pm MR. \tag{2.21}$$

Supongamos que $\lambda(t) = r_1(t)$ para $t > 0$. Entonces

$$\begin{aligned} |(c_1 - c_2)_x(\lambda, t)| &\leq |c_{1x}(r_1, t) - c_{2x}(r_2, t)| + |c_{2x}(r_2, t) - c_{2x}(r_1, t)| \\ &\leq |-\dot{r}_1(\Phi(\dot{r}_1) + q) + \dot{r}_2(\Phi(\dot{r}_2) + q)| + |c_{2xx}(\xi_{12}, t)| |(r_1 - r_2)(t)| \\ &< MR \end{aligned} \tag{2.22}$$

si se toma $M > (c^* + q) + f(c^*) \max \Phi' + B$ (notar que M resulta el mismo si $\lambda(t) = r_2(t)$). Así obtenemos que $W_x^+(\lambda, t) > 0$ y $W_x^-(\lambda, t) < 0 \forall t$. Además, existen $t^\pm \geq 0$ tales que $\min W^+ = W^+(0, t^+)$ y $\max W^- = W^-(0, t^-)$. Usando el lema de Hopf y (2.21) tenemos que:

$$\begin{aligned} W^+(0, t^+) &> -\frac{M}{h}R, \\ W^-(0, t^-) &< \frac{M}{h}R, \end{aligned}$$

lo cual implica que

$$\begin{aligned} (c_1 - c_2)(x, t) + MRx &\geq W^+(0, t^+) \geq -\frac{M}{h}R, \\ (c_1 - c_2)(x, t) - MRx &\leq W^-(0, t^-) \leq \frac{M}{h}R, \end{aligned}$$

es decir:

$$|(c_1 - c_2)(x, t)| \leq \left(Mf(c^*)T + \frac{M}{h} \right) R. \quad (2.23)$$

■

2.2. Existencia local y unicidad.

Sea $\gamma(t)$ una función positiva y no-creciente, definida para $t > 0$ y posiblemente no acotada cuando $t \rightarrow 0^+$. Denotemos por $X(K, T, \gamma)$ al conjunto de todas las curvas $r(t)$ que satisfacen (2.6)-(2.9) y tales que para algún $\alpha \in (0, 1]$:

$$|\ddot{r}(t_1) - \ddot{r}(t_2)| \leq \gamma(\tau)(t_1 - t_2)^{\alpha/2} \quad 0 < \tau \leq t_2 \leq t_1 \leq T. \quad (2.24)$$

Notemos que el conjunto X es convexo y compacto en $C^1[0, T]$.

Dada $r \in X$, tenemos la solución c de (2.10)-(2.12) y es posible así definir una transformación $\tilde{r} = \mathcal{C}r$ como:

$$\tilde{r}(0) = 0, \quad (2.25)$$

$$\dot{\tilde{r}}(t) = f(c(r(t), t)), \quad 0 < t < T. \quad (2.26)$$

(Notar que (2.26) tiene sentido puesto que $0 < c_0 \leq c < 1$ por (2.13).)

Teorema 2.5 *Existen K, T y γ tales que la transformación $\tilde{r} = \mathcal{C}r$ es continua desde $X(K, T, \gamma) \subset C^1[0, T]$ en sí mismo.*

Demostración. Como (2.6)-(2.8) se satisfacen por construcción, para probar que \mathcal{C} mapea X en sí mismo, sólo hay que elegir K, T y γ para que \tilde{r} satisfaga también (2.9) y (2.24). Ahora,

$$\ddot{\tilde{r}}(t) = [c_x(r(t), t)\dot{r}(t) + c_t(r(t), t)] f'(c(r(t), t)), \quad 0 < t < T. \quad (2.27)$$

Usando (2.13) y (2.14) se puede hacer que se cumpla (2.9) tomando

$$K = (hf(c^*)T + B) \max_{[c_0, 1]} f'.$$

La estimación de la norma Hölder de $\ddot{r}(t)$ se puede lograr estimando la norma de $c_x(x, t)$ en el espacio $C^{1+\alpha}$. Esto se consigue de manera siguiente. Primero se define $z(x, t) \equiv c_x(x, t) + \dot{r}(t) [q + \Phi(\dot{r}(t))]$, la cual es solución de

$$\begin{aligned} z_{xx} - z_t &= -\dot{r}(t) [q + \Phi(\dot{r}(t)) + \Phi'(\dot{r}(t))\dot{r}(t)], & \text{en } D, \\ h z_x(0, t) - z_t(0, t) &= h g'(t) - \dot{r}(t) [q + \Phi(\dot{r}(t)) + \Phi'(\dot{r}(t))\dot{r}(t)], & 0 < t < T, \\ z(r(t), t) &= 0, & 0 < t < T. \end{aligned}$$

Luego observamos que para cada $\tau \in (0, T)$ se puede transformar el dominio $0 < x < r(t)$, $\tau/2 < t < T$ en el rectángulo $(0, 1) \times (\tau/2, T)$ mediante el cambio de coordenadas $y = x/r(t)$. Entonces podemos aplicar la estimación estándar de *Schauder* (ver [26, pág. 561, T. 5.1]) a la función $\hat{z}(y, t)$, en el rectángulo $(1/2, 1) \times (\tau/2, T)$. De esta manera obtenemos que

$$\|z\|_{C^\alpha} \leq \bar{\gamma}(\tau) \quad \text{en } (1/2, 1) \times (\tau, T), \quad (2.28)$$

donde $\bar{\gamma}$ depende de K, f, T, τ y α . De este modo, es posible definir $\gamma(t)$ según (2.28) y \tilde{r} satisfará (2.24).

Sólo faltaría probar que la transformación \mathcal{C} es continua. Pero esto se deduce directamente de (2.20) y (2.26) puesto que

$$\|\tilde{r}_1 - \tilde{r}_2\|_{C^1[0, T]} \leq (T + 1) \max_{[c_0, 1]} f' N \|r_1 - r_2\|_{C^1[0, T]}.$$

■

Teorema 2.6 *Existe $T_0 > 0$ tal que el problema **PS** admite una solución para $T \leq T_0$. Además, $c \in C^{2,1}(\bar{D}_T)$, $s \in C^2[0, T]$.*

Demostración. Esto una consecuencia directa del teorema 2.5 y del teorema del *punto fijo de Schauder* (ver *Apéndice*). Las propiedades de regularidad de c y s se siguen de la proposición 2.2 y de la definición de X . ■

El siguiente lema será útil para probar unicidad en la solución de **PS**. Sean c_i, s_i ($i = 1, 2$) soluciones de:

$$c_{ixx} - c_{it} = 0, \quad 0 < x < s_i(t), \quad t_i < t < T, \quad (2.29)$$

con condiciones iniciales $s_i(t_i) = 0$ y satisfaciendo (2.1)-(2.4) en los intervalos (t_i, T) .

Lema 2.7 *Si $t_1 < t_2$, entonces*

$$s_1(t) > s_2(t), \quad t_2 < t < T. \quad (2.30)$$

Demostración. Notemos que la transformación

$$u(x, t) = - \int_x^{s(t)} [c(y, t) + q] dy \quad (2.31)$$

convierte (2.1)-(2.5) en el siguiente problema:

$$u_{xx} - u_t = 0 \quad \text{en} \quad D_T, \quad (2.32)$$

$$u_t(0, t) = h [u_x(0, t) - q - g(t)], \quad 0 < t < T, \quad (2.33)$$

$$u(s(t), t) = 0, \quad 0 < t < T, \quad (2.34)$$

$$u_x(s(t), t) = \Phi(\dot{s}(t)) + q, \quad 0 < t < T, \quad (2.35)$$

$$s(0) = 0. \quad (2.36)$$

Consideremos la función $u_i(x, t)$, que resulta de aplicar la transformación (2.31) a $c_i(x, t)$ ($i = 1, 2$). Supongamos s_1 se intersecta con s_2 por primera vez en $t = t_0$, llamemos $s_0 \equiv s_1(t_0) = s_2(t_0)$. Ahora bien,

$$\dot{s}_1(t_0) \leq \dot{s}_2(t_0), \quad (2.37)$$

además

$$(u_1 - u_2)(s_0, t_0) = 0, \quad (2.38)$$

$$(u_1 - u_2)_x(s_0, t_0) = \Phi(\dot{s}_1(t_0)) - \Phi(\dot{s}_2(t_0)) \leq 0. \quad (2.39)$$

El lema de *Hopf* y (2.33) aseguran que $u_1 - u_2$ no puede asumir su máximo valor sobre el eje $x = 0$. Pero, para $t_2 \leq t < t_0$ tenemos que

$$(u_1 - u_2)(\lambda(t), t) = (u_1 - u_2)(s_2(t), t) = u_1(s_2(t), t) < 0,$$

luego (2.38) implica que $(u_1 - u_2)_x(s_0, t_0) > 0$ y esto contradice (2.38). ■

Así obtenemos unicidad:

Teorema 2.8 *El problema PS no puede tener dos soluciones distintas, para el mismo T .*

Demostración. Exactamente la misma que aparece en [13].

2.3. Existencia global.

Antes de probar la existencia global, vamos a realizar un análisis *a priori* sobre las soluciones del problema **PS**.

Proposición 2.9 *Supongamos que s y c son soluciones del problema **PS** para algún $T < +\infty$. Entonces*

$$0 < c(x, t) < 1, \quad 0 \leq x \leq s(t), \quad t \geq 0, \quad (2.40)$$

$$h(c^* - 1) < c_x(x, t) < h(1 - g(t)), \quad 0 \leq x \leq s(t), \quad t > 0. \quad (2.41)$$

Demostración. Por aplicación del lema de *Hopf*, podemos suponer que c asume su máximo valor sobre $x = 0$, debido a que $c_x = -f(c)(\Phi(\dot{s}) + q) \leq 0$ sobre $x = s(t)$. Supongamos que:

$$c(0, t_0) = \max_{D_T} c.$$

Si $t_0 = 0$, entonces $\max_{D_T} c = c^* < 1$. Si $t_0 > 0$ tenemos que $0 > c_x(0, t_0) = h(c(0, t_0) - g(t_0))$, lo que implica $\max_{D_T} c < g(t_0) \leq 1$. Supongamos que

$$c(x_1, t_1) = \min_{D_T} c.$$

Si $x_1 = 0$ entonces ocurre que $\min_{D_T} c = c^* > 0$ o

$$\min_{D_T} c = g(t_1) + \frac{1}{h} c_x(0, t_1) \geq g(t_1) > 0.$$

Es más, si $\min_{D_T} c = c(s(t_1), t_1) = 0$ (con $t_1 > 0$) entonces $c_x(s(t_1), t_1) = 0$, contradiciendo el Principio del Máximo (ver *Apéndice*). Así se cumple (2.40) y $c_x(0, t) < h(1 - g(t))$ para todo t . Finalmente, supongamos que

$$\min_{D_T} c_x = c_x(s(t_2), t_2) \quad \text{con } t_2 \geq 0.$$

Si $t_2 > 0$ entonces $0 \geq \frac{d}{dt} c_x(s(t), t)|_{t=t_2}$, es decir

$$0 \leq -[f'(c(s(t_2), t_2))(c(s(t_2), t_2) + q) + f(c(s(t_2), t_2))][c_x(s(t_2), t_2)\dot{s}(t_2) + c_{xx}(s(t_2), t_2)] < 0,$$

lo cual es una contradicción. Entonces $\min_{D_T} c_x = c_x(0, 0) = h(c^* - 1)$. ■

Proposición 2.10 *Bajo todas las suposiciones anteriores, vale la siguiente acotación:*

$$|c_t(x, t)| \leq B_T \quad \forall (x, t) \in D_T, \quad (2.42)$$

con

$$B_T = \max_{D_T} \left\{ \max_{[0, T]} |g'|, f(1)^2(1 + q), |c_t(0, 0)| \right\}. \quad (2.43)$$

Demostración. Notemos de (2.2) que

$$c_t(0, t) = g'(t) + \frac{1}{h} c_{tx}(0, t), \quad 0 < t \leq T. \quad (2.44)$$

Es más, de (2.3) y (2.4) tenemos que $c_x = -f(c)(c + q)$ sobre $x = s(t)$ y derivando respecto de t obtenemos que:

$$c_t f(c) + c_{tx} = -[f'(c)(c + q) + f(c)](c_x f(c) + c_t) \quad \text{sobre } x = r(t), \quad (2.45)$$

$$c_t(s(t), t) = \left(\frac{[f'(c)(c + q) + f(c)] f^2(c)(c + q) - c_{tx}}{2f(c) + f'(c)(c + q)} \right)_{x=r(t)}. \quad (2.46)$$

La proposición sigue de aplicar el lema de *Hopf*. ■

Teorema 2.11 *El problema PS admite una solución para todo $T > 0$.*

Demostración. Asumamos que

$$T^* = \sup\{T > 0 : \text{existe solución de PS para } T.\} \quad (2.47)$$

es finito. Notemos que con el teorema 2.8 y las proposiciones 2.9 y 2.10 se puede concluir que existen los límites:

$$\begin{aligned} s^* &\equiv \lim_{t \rightarrow T^*} s(t), \\ c_0^* &\equiv \lim_{t \rightarrow T^*} c(s(t), t), \\ \dot{s}^* &\equiv \lim_{t \rightarrow T^*} \dot{s}(t), \\ c_0^*(x) &\equiv \lim_{t \rightarrow T^*} c(x, t), \quad 0 \leq x < s^*. \end{aligned}$$

Es más, $c \in C^{2,1}(\bar{D}_{T^*} - D_{T^*/2})$ (ver por ej. [27]) y de (2.40) tenemos que $\dot{s}^* > 0$. De esta manera, si $\hat{T} > T^*$, podemos considerar el conjunto de curvas $r \in C^1[T^*, \hat{T}] \cap C^2(T^*, \hat{T})$ tales que

$$r(T^*) = s^*, \quad (2.48)$$

$$\dot{r}(T^*) = \dot{s}^*, \quad (2.49)$$

$$0 \leq \dot{r}(t) \leq \dot{s}^* \quad \text{en} \quad [T^*, \hat{T}], \quad (2.50)$$

$$|\ddot{r}(t)| \leq K \quad \text{en} \quad (T^*, \hat{T}). \quad (2.51)$$

Se puede demostrar que existe una única solución para el problema de encontrar una función $c \in C^{2,1}(\bar{D}_{\hat{T}} - D_{T^*})$ satisfaciendo (2.10)-(2.12) para $t \in [T^*, \hat{T}]$ y con datos iniciales $c(x, T^*) = c_0^*(x)$ (ver [27]). Similarmente, como en la sección 2.2, se puede encontrar una función $s(t)$ que satisfaga (2.48)-(2.51) y (2.3), para $T^* \leq t \leq \hat{T}$ para algún $\hat{T} > T^*$. Esto contradice (2.47). ■

2.4. Comportamientos asintóticos.

En esta sección se expone el comportamiento asintótico de la función $s(t)$ cuando t tiende a infinito.

Sean $s(t)$ y $c(x, t)$ la solución de PS. El teorema de *Green* establece que:

$$\int \int_{D_t} (Q_x - P_\tau) dx d\tau = \oint_{\partial D_t} P dx + Q d\tau.$$

Entonces, para cada solución $v = v(x, t)$ de $v_{xx} + v_t = 0$ en D_t , si tomamos $P = cv$ y $Q = vc_x - cv_x$ tenemos:

$$0 = \oint_{\partial D_t} c(x, t)v(x, t) dx + (v(x, t)c_x(x, t) - c(x, t)v_x(x, t)) dt, \quad t > 0. \quad (2.52)$$

Así, tomando $v(x, t) = 1$ obtenemos

$$0 = \oint_{\partial D_t} c(x, t) dx + c_x(x, t) dt, \quad t > 0,$$

es decir,

$$0 = \int_0^t c(s(\tau), \tau)\dot{s}(\tau) d\tau - \int_0^t \dot{s}(\tau) (c(s(\tau), \tau) + q) d\tau - \int_0^{s(t)} c(x, t) dx - \int_0^t c_x(0, \tau) d\tau,$$

o sea,

$$qs(t) = - \int_0^{s(t)} c(x, t) dx - \int_0^t c_x(0, \tau) d\tau \quad (2.53)$$

$$= - \int_0^{s(t)} c(x, t) dx - h \int_0^t c(0, \tau) d\tau + h \int_0^t g(\tau) d\tau, \quad (2.54)$$

luego

$$s(t) \leq \frac{h}{q} \int_0^t g(\tau) d\tau \leq \frac{h}{q} G. \quad (2.55)$$

Esta cota superior es independiente de f , y como $\dot{s}(t) = f(c(s(t), t)) > 0$ existe el límite:

$$s_\infty \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} s(t). \quad (2.56)$$

La gráfica que sigue fue obtenida con un método numérico que se explica en la sección 2.5, esta muestra el caso $q = 0.3$, $h = 10$, $g(t) = e^{-2t}$ para muchas funciones f .

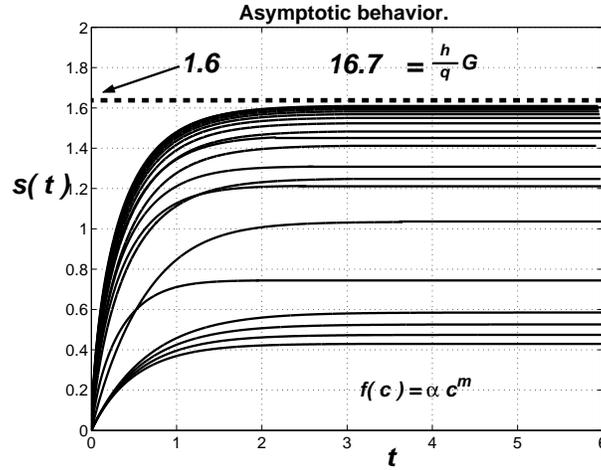


Figura 2.1: Las fronteras libres para varias funciones $f(c) = \alpha c^m$, con $\alpha > 0$ y $m > 0$.

La figura 2.1 muestra que todas las fronteras libres están acotadas por una constante que vale aproximadamente 1.6, por lo que $\frac{h}{q}G = 16.7$ parece ser una cota demasiado grande. Es posible obtener una cota mejor. Para ello, primero obtendremos dos ecuaciones más que conectan s y c ((2.57) y (2.58)). Primero, tomando $v(x, t) = x$ en (2.52) tenemos

$$0 = \oint_{\partial D_t} c(x, \tau) x dx + (x c_x(x, \tau) - c(x, \tau)) dt,$$

entonces

$$0 = \int_0^t c(s(\tau), \tau) s(\tau) \dot{s}(\tau) d\tau + \int_0^t [-(q + c(s(\tau), \tau)) \dot{s}(\tau) s(\tau) - c(s(\tau), \tau)] d\tau - \int_0^{s(t)} c(x, t) x dx + \int_0^t c(0, \tau) d\tau,$$

$$\frac{q}{2}s^2(t) + \int_0^t c(s(\tau), \tau) d\tau = - \int_0^{s(t)} c(x, t)x dx + \int_0^t c(0, \tau) d\tau. \quad (2.57)$$

Similarmente, tomando $v(x, t) = t - \frac{x^2}{2}$ obtenemos:

$$0 = \oint_{\partial D_t} c(x, t) \left(t - \frac{x^2}{2} \right) dx + \left[\left(t - \frac{x^2}{2} \right) c_x(x, t) + xc(x, t) \right] dt,$$

luego

$$\begin{aligned} 0 &= \int_t^0 \tau c_x(0, \tau) d\tau + \\ &+ \int_0^t \left[c(s(\tau), \tau) \left(\tau - \frac{s^2(\tau)}{2} \right) \dot{s}(\tau) + \left(\tau - \frac{s^2(\tau)}{2} \right) c_x(s(\tau), \tau) + c(s(\tau), \tau)s(\tau) \right] d\tau + \\ &+ \int_{s(t)}^0 c(x, t) \left(t - \frac{x^2}{2} \right) dx, \end{aligned}$$

entonces

$$\begin{aligned} 0 &= - \int_0^t \tau c_x(0, \tau) d\tau - \frac{q}{6}s^3(t) - q \int_0^t \tau \dot{s}(\tau) d\tau + \\ &+ \int_0^t c(s(\tau), \tau)s(\tau) d\tau + \frac{1}{2} \int_0^{s(t)} x^2 c(x, t) dx - t \int_0^{s(t)} c(x, t) dx. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Lema 2.12

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^{s(t)} c(x, t) dx = 0. \quad (2.59)$$

Demostración. De (2.58) extraemos que

$$\begin{aligned} \int_0^{s(t)} c(x, t) dx &= -\frac{1}{t} \int_0^t \tau c_x(0, \tau) d\tau - \frac{q}{6t} s^3(t) - \frac{q}{t} \int_0^t \tau \dot{s}(\tau) d\tau + \\ &+ \frac{1}{t} \int_0^t c(s(\tau), \tau)s(\tau) d\tau + \frac{1}{2t} \int_0^{s(t)} x^2 c(x, t) dx \\ &\leq -\frac{1}{t} \int_0^t \tau c_x(0, \tau) d\tau + \frac{1}{t} \int_0^t c(s(\tau), \tau)s(\tau) d\tau + \frac{s_\infty^3}{2t}. \end{aligned}$$

Para probar el lema sólo hay que demostrar que todos estos términos tienden a cero cuando $t \rightarrow \infty$. Notemos que de (2.54),

$$\int_0^t c(0, \tau) d\tau \leq \int_0^t g(\tau) d\tau \leq G,$$

entonces, usando (2.57)

$$\int_0^t c(s(\tau), \tau)s(\tau) d\tau \leq s_\infty \int_0^t c(s(\tau), \tau) d\tau \leq s_\infty G,$$

luego

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t c(s(\tau), \tau)s(\tau) d\tau = 0.$$

Por otro lado, de (2.53)

$$-\int_0^t c_x(0, \tau) d\tau = \int_0^{s(t)} [q + c(x, t)] dx > 0 \quad (2.60)$$

y de (2.2) tenemos

$$-\int_0^\infty c_x(0, \tau) d\tau = h \left(G - \int_0^\infty c(0, \tau) d\tau \right) < \infty. \quad (2.61)$$

Con integración por partes, (2.60), (2.61) y la regla de *L'Hôpital* obtenemos

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \tau c_x(0, \tau) d\tau = \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\int_0^t c_x(0, \tau) d\tau - \frac{1}{t} \int_0^t \left(\int_0^\tau c_x(0, \tau') d\tau' \right) d\tau \right] = 0.$$

■

Lema 2.13 *Para el caso particular de $f(c) = \alpha c$, con $\alpha > 0$, la siguiente fórmula se cumple:*

$$s_\infty = \sqrt{\left(\frac{1}{h} + \frac{1}{\alpha q} \right)^2 + \frac{2}{q} G} - \left(\frac{1}{h} + \frac{1}{\alpha q} \right). \quad (2.62)$$

Demostración. Eliminando el término $\int_0^t c(0, \tau) d\tau$ de las ecuaciones (2.54) y (2.57) obtenemos

$$\frac{q}{2} s^2(t) + \frac{q}{h} s(t) = - \int_0^{s(t)} \left(\frac{1}{h} + x \right) c(x, t) dx + \int_0^t g(\tau) d\tau - \int_0^t c(s(\tau), \tau) d\tau \quad (2.63)$$

y como $c(s(\tau), \tau) = \frac{1}{\alpha} \dot{s}(\tau)$, tenemos

$$\frac{q}{2} s^2(t) + \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{q}{h} \right) s(t) = \int_0^t g(\tau) d\tau - \int_0^{s(t)} \left(\frac{1}{h} + x \right) c(x, t) dx.$$

Observemos que $\int_0^{s(t)} \left(\frac{1}{h} + x \right) c(x, t) dx \leq \left(\frac{1}{h} + s_\infty \right) \int_0^{s(t)} c(x, t) dx$, entonces por (2.59) obtenemos

$$\frac{q}{2} s_\infty^2 + \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{q}{h} \right) s_\infty = G.$$

■

Teorema 2.14

$$\sup_f s_\infty = \sqrt{\frac{1}{h^2} + \frac{2}{q} G} - \frac{1}{h}, \quad (2.64)$$

donde el supremo se toma sobre el conjunto de todas las funciones f para las que se definió el problema **PS**.

Demostración. Procediendo como para obtener (2.63), tenemos que

$$s^2(t) + \frac{2}{h} s(t) - \frac{2}{q} \int_0^t g(\tau) d\tau = - \frac{2}{q} \int_0^{s(t)} \left(\frac{1}{h} + x \right) c(x, t) dx - \int_0^t c(s(\tau), \tau) d\tau \leq 0,$$

cuando $t \rightarrow \infty$:

$$s_\infty^2 + \frac{2}{h}s_\infty - \frac{2}{q}G \leq 0,$$

así

$$s_\infty \leq \sqrt{\frac{1}{h^2} + \frac{2}{q}G} - \frac{1}{h}$$

y (2.64) sigue de tomar el límite $\alpha \rightarrow \infty$ en (2.62). ■

La ecuación (2.64) nos habla de una acotación óptima para s_∞ , en el sentido de que ésta, resulta independiente de la función f . Se puede ver que esta fórmula concuerda con lo que se observa en la figura 2.1, para ése caso se tiene efectivamente que:

$$1.6 \approx \sqrt{\frac{1}{h^2} + \frac{2}{q}G} - \frac{1}{h}. \quad (2.65)$$

2.5. El método numérico.

A continuación se expone cómo se resuelve el problema **PS** con un método numérico, basado en el esquema que aparece en [28].

La idea del método numérico consiste en discretizar el tiempo y resolver una sucesión de ecuaciones diferenciales ordinarias. Concretamente, para el tiempo $t = t_n$ (con $t_n - t_{n-1} = \Delta t$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$), la solución del problema **PS** se aproxima por $c(x, t_n) \approx C_n(x)$ y $s(t_n) \approx S_n$, tomando como $\{C_n(x), S_n\}$ la solución exacta del siguiente sistema de ecuaciones:

$$C_n'' - \frac{C_n - C_{n-1}}{\Delta t} = 0, \quad 0 < x < S_n, \quad (2.66)$$

$$C_n'(0) = h(C_n(0) - g(t_n)), \quad (2.67)$$

$$\frac{S_n - S_{n-1}}{\Delta t} = f(C_n(S_n)), \quad S_0 = 0, \quad (2.68)$$

$$C_n'(S_n) = -\frac{S_n - S_{n-1}}{\Delta t}(q + C_n(S_n)). \quad (2.69)$$

En (2.66) la función $C_{n-1}(x)$ se supone conocida y definida sobre todo el intervalo $0 \leq x < \infty$ y junto con S_{n-1} , se tiene que determinar simultáneamente S_n y $C_n(x)$ en $0 \leq x < \infty$. Para ello, primero escribimos (2.66) como un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden sobre $(0, S_n)$:

$$C_n' = V_n, \quad (2.70)$$

$$V_n' = \frac{1}{\Delta t}(C_n - C_{n-1}). \quad (2.71)$$

Luego se utiliza la transformación de Riccati:

$$C_n(x) = R(x)V_n(x) + W_n(x), \quad (2.72)$$

donde

$$R' = 1 - \frac{1}{\Delta t}R^2, \quad R(0) = 1/h, \quad (2.73)$$

$$W_n' = -\frac{R(x)}{\Delta t}(W_n - C_{n-1}(x)), \quad W_n(0) = g(t_n). \quad (2.74)$$

Se puede resolver (2.73) exactamente:

$$R(x) = \begin{cases} \sqrt{\Delta t} \coth \frac{x+\kappa}{\sqrt{\Delta t}} & \text{si } h\sqrt{\Delta t} < 1 \\ 1/h & \text{si } h\sqrt{\Delta t} = 1 \\ \sqrt{\Delta t} \tanh \frac{x+\kappa}{\sqrt{\Delta t}} & \text{si } h\sqrt{\Delta t} > 1, \end{cases} \quad (2.75)$$

donde

$$\kappa = \begin{cases} \sqrt{\Delta t} \tanh^{-1} (h\sqrt{\Delta t}) & \text{si } h\sqrt{\Delta t} < 1 \\ \sqrt{\Delta t} \tanh^{-1} \left(\frac{1}{h\sqrt{\Delta t}} \right) & \text{si } h\sqrt{\Delta t} > 1. \end{cases} \quad (2.76)$$

La frontera libre S_n se determina de manera que C_n , V_n y S_n simultáneamente satisfagan (2.68), (2.69) y (2.72). Eliminando C_n y V_n de (2.69) y (2.72) se obtiene que S_n debe ser una raíz de la ecuación:

$$\sigma_n(x) \equiv (x - S_{n-1})/\Delta t - f \left(\frac{W_n(x) - qR(x)(x - S_{n-1})/\Delta t}{1 + R(x)(x - S_{n-1})/\Delta t} \right) = 0. \quad (2.77)$$

Si S_n es conocido, podemos escribir:

$$C_n(S_n) = \frac{W_n(S_n) - R(S_n)\dot{S}_n q}{1 + R(S_n)\dot{S}_n}, \quad (2.78)$$

de manera que

$$\dot{S}_n \equiv \frac{S_n - S_{n-1}}{\Delta t} = f(C_n(S_n)) \quad (2.79)$$

y

$$C'_n(S_n) = V_n(S_n) = -\dot{S}_n \frac{W_n(S_n) + q}{1 + R(S_n)\dot{S}_n}. \quad (2.80)$$

De esta manera la terna $\{C_n(S_n), V_n(S_n), S_n\}$ es la solución exacta de (2.68), (2.69) y (2.72). Se define S_n como la raíz más pequeña de la ecuación $\sigma_n(x) = 0$ en el intervalo (S_{n-1}, ∞) . El lema 2.15 probará que S_n está bien definida.

Una vez que S_n es calculada, se puede obtener V_n por integración sobre el intervalo $[0, S_n)$ de la ecuación:

$$V'_n = \frac{1}{\Delta t} (R(x)V_n + W_n(x) - C_{n-1}(x)), \quad (2.81)$$

con $V_n(S_n)$ dado por (2.80). La concentración $C_n(x)$ al tiempo t_n se obtiene de (2.72). Finalmente, $C_n(x)$ se define más allá de S_n de forma lineal:

$$C_n(x) = C'_n(S_n)(x - S_n) + S_n, \quad S_n \leq x < \infty. \quad (2.82)$$

Como concentración inicial se toma

$$C_0(x) = -h(1 - c^*)x + c^*$$

(c^* se definió en la sección 2.1).

Lema 2.15 *Existe una solución S_n de (2.77) en (S_{n-1}, ∞) y $S_n - S_{n-1} \leq f(1)\Delta t$. La función C_n satisface $0 < C_n \leq 1$ sobre el intervalo $[0, \infty)$.*

Demostración. Dado que $0 < c^* < 1$, para $n = 0$ vale que $C_0(x) = -h(1 - c^*)x + c^* < 1$. Procedamos por inducción suponiendo que el resultado es válido para $n - 1$. Integrando (2.74) obtenemos que

$$W_n(x) = \exp\left(-\int_0^x R/\Delta t\right) \left(g(t_n) + \int_0^x \frac{R(r)}{\Delta t} \exp\left(\int_0^r R/\Delta t\right) C_{n-1}(r) dr\right).$$

Puesto que $R(x)$ es una función positiva (por (2.75)) y se asume que $C_{n-1} \leq 1$, tenemos que

$$\begin{aligned} W_n(x) &\leq \exp\left(-\int_0^x R/\Delta t\right) \left(g(t_n) + \int_0^x \frac{R(r)}{\Delta t} \exp\left(\int_0^r R/\Delta t\right) dr\right) \\ &= \exp\left(-\int_0^x R/\Delta t\right) \left(g(t_n) + \exp\left(\int_0^x R/\Delta t\right) - 1\right) \\ &\leq 1, \end{aligned}$$

además $W_n(S_{n-1}) > 0$. En consecuencia, la función

$$\frac{W_n(x) - qR(x)(x - S_{n-1})/\Delta t}{1 + R(x)(x - S_{n-1})/\Delta t}$$

permanece acotada por uno, es positiva sobre cierto intervalo (S_{n-1}, x_0) , anulándose para x_0 (ver en (2.75) que $R(x) \rightarrow \sqrt{\Delta t}$ cuando $x \rightarrow \infty$). Entonces,

$$\sigma_n(x_0) = \frac{x_0 - S_{n-1}}{\Delta t} - f(0) > 0,$$

es más

$$\sigma_n(S_{n-1}) = -f(W_n(S_{n-1})) < 0,$$

entonces necesariamente tiene que haber un punto en (S_{n-1}, x_0) tal que $\sigma_n(x)$ se anule. Además, puesto que $\sigma_n(x)$ es continua, es correcto definir S_n como el mínimo número mayor que S_{n-1} que anula a $\sigma_n(x)$. De esta forma, resulta $W_n(x) > 0$ para $0 \leq x \leq S_n$. Así resulta también que $0 < C_n(S_n) \leq 1$ y $C'_n(S_n) < 0$. Integrando (2.72) obtenemos que para $0 \leq x \leq S_n$:

$$\begin{aligned} 0 < C_n(x) &= \exp\left(\int_{S_n}^x 1/R\right) \left(C_n(S_n) - \int_{S_n}^x \frac{W_n(r)}{R(r)} \exp\left(-\int_{S_n}^r 1/R\right) dr\right) \\ &\leq \exp\left(\int_{S_n}^x 1/R\right) \left(C_n(S_n) - \int_{S_n}^x \frac{1}{R(r)} \exp\left(-\int_{S_n}^r 1/R\right) dr\right) \\ &= \exp\left(\int_{S_n}^x 1/R\right) \left(C_n(S_n) + \exp\left(-\int_{S_n}^x 1/R\right) - 1\right) \leq 1. \end{aligned}$$

Finalmente, de (2.78) y (2.79) concluimos que $S_n - S_{n-1} = f(C_n(S_n))\Delta t \leq f(1)\Delta t$. ■

Esta sección la podemos concluir diciendo que el principal resultado es el comportamiento asintótico de la frontera libre. Es remarkable que la ecuación (2.64) resulta independiente de la función f . Esto podría ser de mucha utilidad en un caso concreto donde

el material en estudio sea desconocido y sea requerida una estimación para s_∞ . También es de destacar la desigualdad (2.55), tampoco depende de la función f . Un problema que aparece es determinar hasta que punto se puede generalizar el problema **PS** de modo que se siga cumpliendo (2.55). Por ejemplo, sería bueno preguntarse qué pasaría si en vez de cumplirse $c_t = c_{xx}$, se cumple dentro del material que:

$$c_t = (Kc_x)_x,$$

donde $K > 0$ es un coeficiente de conducción. El caso visto hasta ahora es obviamente $K \equiv 1$. Pero en la mayoría de las situaciones físicas esto no es cierto, sino que más bien resulta K un *operador* actuando sobre c , digamos $K = K(x, c, c_x, t)$, etc.. ¿Seguirán cumpliéndose la desigualdades (2.55) y (2.64) en casos más generales? La respuesta la daremos en la sección 5.

3. El límite $h \rightarrow \infty$.

El coeficiente de transferencia de masa h de la condición de la contorno convectiva

$$c_x(0, t) = h(c(0, t) - g(t)), \quad (3.1)$$

puede interpretarse físicamente como sigue. Como se muestra en la figura 3.1, se tiene en la parte exterior el baño con concentración $g(t)$ y la concentración de solvente interior cerca del borde es $c(0, t)$. Ambas regiones se encuentran separadas en la práctica por una zona muy estrecha de espesor Δx , en la que se produce la absorción del solvente. De esta manera, el flujo de solvente a través del borde se puede aproximar por:

$$\phi(0, t) = -\kappa c_x(0, t) \approx -\kappa \frac{c(0, t) - g(t)}{\Delta x}, \quad (3.2)$$

y de esta forma, comparando con (3.1) asociamos:

$$h = \frac{1}{\Delta x}. \quad (3.3)$$

Así, queda claro que el mecanismo físico de absorción del solvente a través de $x = 0$, es por lo general desconocido y todo se simplifica y modeliza dentro de la ecuación (3.1). Se encuentra en la práctica que el coeficiente h es frecuentemente un número grande y esto se debe, según (3.3) a que Δx es muy pequeño. Esta es la razón por la que surge preguntarse qué ocurre realmente en el límite $\Delta x \rightarrow 0$, o lo que es lo mismo, analizar el

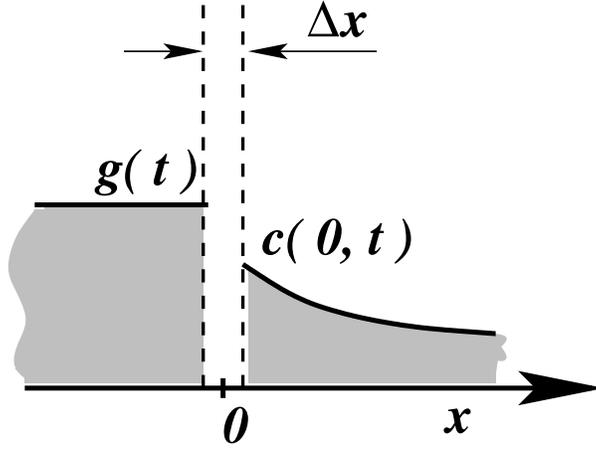


Figura 3.1: En la región cercana a $x = 0$ se produce un salto brusco en la concentración de solvente.

límite $h \rightarrow \infty$. Si se asume que el flujo de solvente a través de $x = 0$ es algo acotado, observando la ecuación (3.1), vemos que cuando $h \rightarrow \infty$ debe ocurrir necesariamente que

$$c(0, t) \rightarrow g(t)$$

para que $c_x(0, t)$ no diverja y se mantenga finito. De esta forma, la condición de contorno convectiva (3.1) se transforma cuando $h \rightarrow \infty$ en:

$$c(0, t) = g(t), \quad (3.4)$$

la cual es ahora realmente una condición de contorno del tipo *Dirichlet*. Así se plantea que en el límite $h \rightarrow \infty$ la solución $\{c(x, t), s(t)\}$ del problema **PS**, que cumple:

$$c_{xx} - c_t = 0 \quad \text{en } D_T, \quad (3.5)$$

$$c_x(0, t) = h[c(0, t) - g(t)], \quad g(0) = 1, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (3.6)$$

$$\dot{s}(t) = f(c(s(t), t)), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (3.7)$$

$$c_x(s(t), t) = -\dot{s}(t)[c(s(t), t) + q], \quad 0 \leq t \leq T, \quad (3.8)$$

$$s(0) = 0, \quad (3.9)$$

debería converger a un par $\{w(x, t), z(t)\}$, que sea solución de:

Problema PS $_{\infty}$ Encontrar $z \in C^1[0, T]$ y $w \in C^{2,1}(D_T) \cap C(\bar{D}_T)$, donde $D_{zT} = \{(x, t) : 0 < t < T, 0 < x < z(t)\}$, satisfaciendo

$$w_{xx} - w_t = 0 \quad \text{en } D_{zT}, \quad (3.10)$$

$$w(0, t) = g(t), \quad g(0) = 1, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (3.11)$$

$$\dot{z}(t) = f(w(z(t), t)), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (3.12)$$

$$w_x(z(t), t) = -\dot{z}(t)[w(z(t), t) + q], \quad 0 \leq t \leq T, \quad (3.13)$$

$$z(0) = 0. \quad (3.14)$$

Este problema es exactamente el estudiado en [18] por Phan Huu San y Nguyen Dinh Tri. En ese trabajo se prueba que \mathbf{PS}_∞ está bien planteado mostrando la existencia y unicidad de la solución para todo $T > 0$.

3.1. Convergencia uniforme.

Es posible demostrar una convergencia uniforme de la solución del problema \mathbf{PS} a la del problema \mathbf{PS}_∞ . Para ello, seguiremos el trabajo [23].

La idea básica es aplicar el teorema de *Ascoli-Arzelá* (ver *Apéndice*) al conjunto de todas las funciones $c(x, t)$ y $s(t)$ que se genera variando h entre 0 y $+\infty$. Para aplicar este teorema, primero se tiene que demostrar que dicho conjunto de funciones sea *equicontinuo* (ver *Apéndice*). Por ejemplo, el conjunto de curvas $s(t)$ es equicontinuo puesto que, dados $0 < t < t' < T$, tenemos

$$\begin{aligned} |s(t) - s(t')| &= \dot{s}(\hat{t})|t - t'| \quad \text{con} \quad t < \hat{t} < t' \\ &= f(c(s(\hat{t})))|t - t'| \\ &\leq f(1)|t - t'|. \end{aligned} \tag{3.15}$$

Para demostrar que el conjunto de las funciones $c(x, t)$ es equicontinuo, es necesario obtener estimaciones independientes de h , para c , c_x y c_t . En las proposiciones 2.9 y 2.10 ya se habían obtenido las estimaciones:

$$0 < c(x, t) \leq 1, \tag{3.16}$$

$$h(c^* - 1) \leq c_x(x, t) \leq h(1 - g(t)), \tag{3.17}$$

$$|c_t(x, t)| \leq \max \left\{ \max_{[0, T]} |g'|, f(1)^2(1 + q), |c_t(0, 0)| \right\} \equiv B_T. \tag{3.18}$$

Lamentablemente, tanto (3.17) como (3.18) son cotas que dependen de h .

Lema 3.1

$$\lim_{h \rightarrow \infty} c_t(0, 0) = g'(0). \tag{3.19}$$

Demostración. Consideremos el cociente:

$$\frac{c_x(s(t), t) - c_x(0, t)}{s(t)}$$

y hagamos $t \rightarrow 0$. De la proposición 2.3, se sabe que $c_t(x, t)$ es continua en \bar{D}_T , tenemos de (3.6)-(3.9) que

$$c_t(0, 0) = \frac{hg'(0) + f(c^*)^2(c^* + q)(f'(c^*)(c^* + q) + f(c^*))}{h + 2f(c^*) + f'(c^*)(c^* + q)}, \tag{3.20}$$

donde $0 < c^* < 1$ y cumple $f(c^*)(c^* + q) = -h(c^* - 1)$, de modo que ocurre que

$$0 < 1 - c^* \leq \frac{f(1)(1 + q)}{h},$$

lo que implica que

$$\lim_{h \rightarrow \infty} c^* = 1 \tag{3.21}$$

y ecuación (3.19) se obtiene tomando $h \rightarrow \infty$ en (3.20). ■

El lema 3.1 nos dice que en la estimación (3.18), puede asumirse que B_T no depende de h . Una estimación para c_x se obtiene como sigue:

$$\begin{aligned}
|c_x(x, t)| &\leq |c_x(s(t), t)| + \int_x^{s(t)} |c_{xx}(y, t)| dy \\
&\leq f(1)(1+q) + \int_x^{s(t)} |c_t(y, t)| dy \\
&\leq f(1)(1+q) + B_T |s(t) - x| \\
&\leq f(1)(1+q) + 2B_T f(1)T \equiv A_T,
\end{aligned} \tag{3.22}$$

y logramos entonces una cota para c_x que no depende de h .

Denotaremos por el momento $\{c_h(x, t), s_h(t)\}$ a la solución del problema **PS** para un $h > 0$ dado. Aplicando el teorema de *Ascoli-Arzelá* se puede obtener una función continua $r(t)$ definida sobre $[0, T]$ y una sucesión $\{h_k : k \in \mathbf{N}\}$ con $h_k < h_{k+1}$ y $h_k \rightarrow \infty$ tal que:

$$|r(t) - s_{h_k}(t)| \leq 2^{-k}, \quad \forall t \in [0, T]. \tag{3.23}$$

Ahora definimos inductivamente la sucesión de conjuntos $\{H_n\}$, $n \geq 0$. Si $H_0 \equiv \{h_k : k \in \mathbf{N}\}$, supongamos $n \geq 1$ y que es conocido $H_{n-1} \subset H_0$. Definimos

$$\{(x, t) : 0 \leq t \leq T, 0 \leq x \leq r(t) - 2^{-n}\} \equiv D_n.$$

El punto $(0, 0)$ no pertenece a D_n . Notemos que para h suficientemente grande, las funciones $c_h(x, t)$, con $h \in H_{n-1}$, están todas definidas sobre D_n . En efecto, estas funciones constituyen un conjunto *equi-acotado* y *equi-continuo* sobre D_n , entonces se puede aplicar nuevamente el teorema de *Ascoli-Arzelá* para obtener un conjunto infinito $H_n \subset H_{n-1}$ tal que, $c_h(x, t)$ converja uniformemente sobre D_n si $h \rightarrow \infty$ *por dentro* de H_n . Luego definimos

$$H \equiv \{h'_1, h'_2, h'_3, \dots\}, \tag{3.24}$$

donde $h'_n \equiv n$ -ésimo elemento de H_n . Como $H \subset H_n \forall n$, tenemos que existe el límite

$$v(x, t) \equiv \lim_H c_h(x, t), \tag{3.25}$$

donde \lim_H denota el límite $h \rightarrow \infty$ *por dentro* de H . Es más, la convergencia es uniforme sobre cada conjunto compacto contenido en

$$\{(x, t) : 0 < x < r(t), 0 < t < T\} \equiv D_{rT}.$$

Se puede ver en [25, pág. 253, T. 15.1.2] que v satisface

$$v_{xx} - v_t = 0 \quad \text{en} \quad D_{rT}. \tag{3.26}$$

Como el gradiente de $c_h(x, t)$ está acotado por una constante independiente de h , la función $v(x, t)$ posee una extensión continua (que la seguiremos denotando por $v(x, t)$) sobre \bar{D}_{rT} . Además, para cada $t \in (0, T]$:

$$\lim_H c_{hx}(x, t) = v_x(x, t), \quad x \in (0, r(t)) \tag{3.27}$$

y teniendo en cuenta que $|c_{hxx}| \leq B_T$, el mismo argumento anterior nos dice que para $t \in (0, T]$, la función $v_x(x, t)$ es continua en x sobre el intervalo $[0, r(t)]$.

Finalmente, de (3.6) y (3.22):

$$v(0, t) = \lim_H c_h(0, t) = \lim_H \left(\frac{c_{hx}(0, t)}{h} + g(t) \right) = g(t) \quad \forall t \in [0, T] \quad (3.28)$$

Lema 3.2

$$\lim_H c_h(s_h(t), t) = v(r(t), t), \quad (3.29)$$

$$\lim_H c_{hx}(s_h(t), t) = v_x(r(t), t) \quad (3.30)$$

y la convergencia es uniforme sobre $(0, T]$.

Demostración. Sea $\epsilon > 0$ y $h \in H$ tales que $|s_h(t) - r(t)| < \epsilon$ en $[0, T]$. Entonces,

$$\begin{aligned} |c_h(s_h(t), t) - v(r(t), t)| &\leq |c_h(s_h(t), t) - c_h(r(t) - \epsilon, t)| + \\ &\quad + |c_h(r(t) - \epsilon, t) - v(r(t) - \epsilon, t)| + \\ &\quad + |v(r(t) - \epsilon, t) - v(r(t), t)| \\ &\leq A_T |r(t) - s_h(t) - \epsilon| + \\ &\quad + |c_h(r(t) - \epsilon, t) - v(r(t) - \epsilon, t)| + \\ &\quad + A_T \epsilon, \end{aligned} \quad (3.31)$$

luego

$$\lim_H |c_h(s_h(t), t) - v(r(t), t)| \leq 2A_T \epsilon, \quad \forall \epsilon, \quad (3.32)$$

que prueba (3.29). Finalmente, (3.30) obtiene de (3.7), (3.8) y (3.29). ■

Lema 3.3 *La función $r(t)$ pertenece a $C^1[0, T]$ y satisface*

$$\dot{r}(t) = f(v(r(t), t)), \quad t \geq 0, \quad (3.33)$$

$$v_x(r(t), t) = -\dot{r}(t) [q + v(r(t), t)], \quad t > 0. \quad (3.34)$$

Demostración. Del lema 3.1 tenemos que

$$\int_0^t f(v(r(\tau), \tau)) d\tau = \lim_H \int_0^t f(c_h(s_h(\tau), \tau)) d\tau = \lim_H s_h(t) = r(t), \quad \forall t \geq 0,$$

luego

$$\begin{aligned} -\dot{r}(t) [q + v(r(t), t)] &= -f(v(r(t), t)) [q + v(r(t), t)] \\ &= -\lim_H \{f(c_h(s_h(t), t)) [q + c_h(s_h(t), t)]\} \\ &= \lim_H c_{hx}(s_h(t), t) \\ &= v_x(r(t), t). \end{aligned}$$

■

Hasta aquí todo lo que se ha hecho fue solamente obtener una sucesión de $\{c_h(x, t), s_h(t)\}$ (con $h \in H$) convergente al par $\{v(x, t), r(t)\}$, que es verdaderamente una solución de \mathbf{PS}_∞

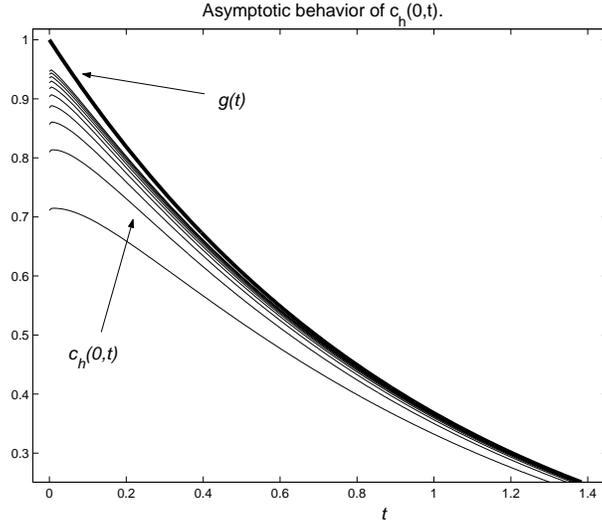


Figura 3.2: Convergencia uniforme de la concentración en $x = 0$ hacia la función $g(t)$ (se tomó el parámetro $h = 10, \dots, 100$).

(puesto que verifica (3.26), (3.28), (3.33) y (3.34)). Pero, según se demostró en [18], la solución al problema \mathbf{PS}_∞ es única, por lo tanto $v(x, t) = w(x, t)$ y $r(t) = z(t)$.

El paso final para probar la convergencia uniforme, es mostrar la convergencia *global*, es decir, con $h \rightarrow \infty$ pero ahora h recorriendo todo el intervalo $(0, \infty)$. Por el absurdo, supongamos que tenemos una sucesión $\{h_j\}$, con $h_j \rightarrow \infty$, para la cual en algún subconjunto de puntos en D_{zT} y/o en el intervalo $[0, T]$, el par $\{c_{h_j}(x, t), s_{h_j}(t)\}$ no converge uniformemente a $\{w(x, t), z(t)\}$ cuando $h \rightarrow \infty$. De esa sucesión $\{h_j\}$, se podría extraer una subsucesión $\{h'_j\}$ (con $h'_j \rightarrow \infty$), de la misma forma que se hizo anteriormente para obtener la sucesión H de (3.24). Pero al igual que antes, cuando $h'_j \rightarrow \infty$, la sucesión $\{c_{h'_j}(x, t), s_{h'_j}(t)\}$ convergerá uniformemente a la *única* solución $\{w(x, t), z(t)\}$ de \mathbf{PS}_∞ . Así hemos probado el siguiente teorema:

Teorema 3.4 *Siendo $\{c(x, t), s(t)\}$ la solución de \mathbf{PS} (para $h > 0$) y $\{w(x, t), z(t)\}$ la solución de \mathbf{PS}_∞ , se cumple que*

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow \infty} c(x, t) &= w(x, t), \\ \lim_{h \rightarrow \infty} s(t) &= z(t), \end{aligned}$$

y la convergencia es uniforme sobre \bar{D}_T y $[0, T]$.

3.2. Resultados numéricos.

Numéricamente la convergencia uniforme estudiada se puede comprobar, siguiendo el método numérico expuesto en la sección 2.5. Los gráficos 3.2, 3.3, 3.4 y 3.5 se realizaron tomando $q = 5$, $f(c) = c^2$, $g(t) = e^{-t}$ y variando el parámetro h . La curva $z(t) = \lim_{h \rightarrow \infty} s(t)$ se calculó con el método numérico que se verá de la sección 4.3.

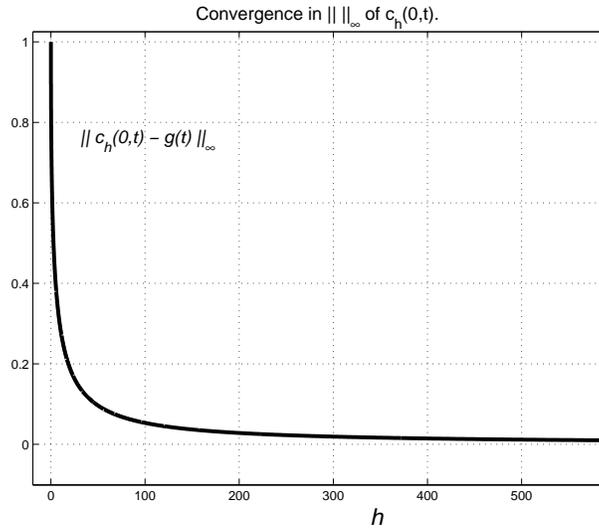


Figura 3.3: La norma infinito $\|c(0, t) - g(t)\|_\infty$ tiende a cero continuamente cuando $h \rightarrow \infty$.

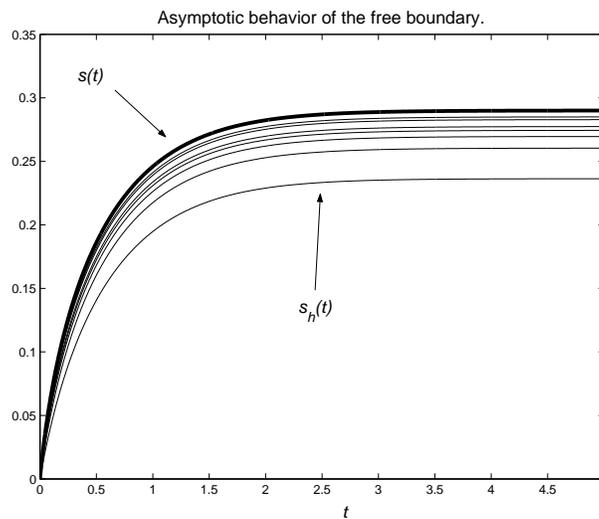


Figura 3.4: Convergencia uniforme de la frontera libre $s(t)$ hacia $z(t)$ (se tomó $h = 10, \dots, 40, 130, 200, 400$).

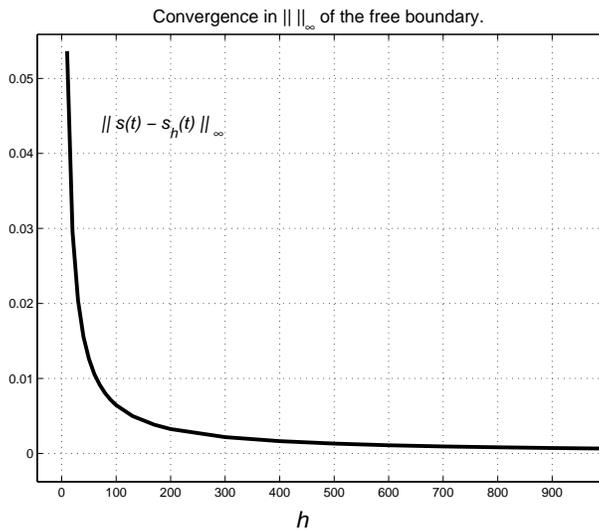


Figura 3.5: La norma $\|s(t) - z(t)\|_\infty$ tiende a cero continuamente cuando $h \rightarrow \infty$.

3.3. Un caso particular.

Para el caso particular en el que $f(c) = \alpha c$ (con $\alpha > 0$) se puede dar una demostración alternativa de la convergencia $s(t) \rightarrow z(t)$. Aplicamos a $w(x, t)$ la transformación

$$u(x, t) = - \int_x^{z(t)} [w(y, t) + q] dy \quad (3.35)$$

y observamos que

$$u_{xx} - u_t = 0 \quad \text{en} \quad D_T, \quad (3.36)$$

$$u_x(0, t) = g(t) + q, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (3.37)$$

$$u_x(z(t), t) = \alpha^{-1} \dot{z}(t) + q, \quad 0 < t \leq T, \quad (3.38)$$

$$u(z(t), t) = 0, \quad 0 < t \leq T. \quad (3.39)$$

Por aplicación del teorema de Green obtenemos:

$$0 = \oint_{D_t} u(x, \tau) dx + u_x(x, \tau) d\tau, \quad (3.40)$$

entonces

$$0 = \int_{z(t)}^0 u(x, t) dx + \int_t^0 g(\tau) d\tau + \alpha^{-1} z(t). \quad (3.41)$$

Similarmente:

$$0 = \int_{s(t)}^0 u_h(x, t) dx + \int_t^0 c(0, \tau) d\tau + \alpha^{-1} s(t), \quad h > 0, \quad (3.42)$$

donde

$$u_h(x, t) = - \int_x^{s(t)} [c(y, t) + q] dy \quad (3.43)$$

y restando (3.41) con (3.42) obtenemos:

$$\alpha^{-1} (z(t) - s(t)) = \int_0^t (g(\tau) - c(0, \tau)) d\tau + \int_0^{z(t)} u(x, t) dx - \int_0^{s(t)} u_h(x, t) dx. \quad (3.44)$$

De (3.6) y (3.22) tenemos que:

$$|c(0, t) - g(t)| \leq \frac{A_T}{h} \quad (3.45)$$

y aquí podemos aplicar el teorema [25, T. 18.5.1, pág. 322] para concluir que existe una constante k dependiente de q y T tal que

$$\left| \int_0^{z(t)} u(x, t) dx - \int_0^{s(t)} u_h(x, t) dx \right| \leq \frac{k}{h}.$$

En definitiva, hemos demostrado:

Teorema 3.5 *Supongamos que $f(c) = \alpha c$ ($\alpha > 0$) para el problema **PS**. Entonces la frontera libre $s(t)$ converge a $z(t)$ cuando $h \rightarrow \infty$, satisfaciendo:*

$$|s(t) - z(t)| \leq \frac{\bar{k}}{h}, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (3.46)$$

donde \bar{k} depende de q , α , g y T .

Con este teorema, si observamos la figura 3.5, se podría especular que el orden de convergencia sigue siendo de la forma h^{-1} . Sería interesante como trabajo futuro, demostrar una generalización del teorema 3.5 para una función $f(c)$ cualquiera.

4. Un problema con concentración externa creciente.

En esta sección se estudia el problema tratado en [18], pero ahora con una condición de contorno de concentración creciente en $x = 0$:

$$c(0, t) = g(t), \quad \text{con } g'(t) \geq 0. \quad (4.1)$$

Una concentración de solvente exterior que crezca en el tiempo podría significar en muchos casos que la concentración $c(x, t)$ dentro de la barra no se mantenga acotada. Por definición, en la Química se entiende siempre por concentración a una cantidad acotada, por lo tanto, un problema de frontera libre con una condición de contorno como (4.1) podría no tener un correlato físico directo. Sin embargo, cuando $g(t) \rightarrow \infty$ se encuentran interesantes comportamientos asintóticos.

Problema PS. *Encontrar una terna (T, s, c) tal que: $T > 0$, $s \in C^1[0, T]$, $c \in C^{2,1}(D_T) \cap C(\bar{D}_T)$, donde $D_T = \{(x, t) : 0 < t < T, 0 < x < s(t)\}$, satisfaciendo*

$$c_{xx} - c_t = 0 \quad \text{en } D_T, \quad (4.2)$$

$$c(0, t) = g(t), \quad g(0) = 1 \text{ y } g'(t) \geq 0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (4.3)$$

$$\dot{s}(t) = f(c(s(t), t)), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (4.4)$$

$$c_x(s(t), t) = -\dot{s}(t) [c(s(t), t) + q], \quad 0 \leq t \leq T, \quad (4.5)$$

$$s(0) = 0. \quad (4.6)$$

Sobre la función $f(c)$ ahora asumiremos que $f \in C^1[0, \infty)$ con f' continua y positiva sobre todo el intervalo $(0, \infty)$. Se seguirá el esquema de [24] y al igual que como se hizo en la sección 2, primero se demostrará el buen planteamiento de **PS**.

4.1. Un problema auxiliar.

Dada $r \in C^1[0, T] \cap C^2(0, T)$ tal que:

$$r(0) = 0, \quad (4.7)$$

$$\dot{r}(0) = f(1), \quad (4.8)$$

$$0 \leq \dot{r} \leq f(g(T)), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (4.9)$$

$$|\ddot{r}| \leq K, \quad 0 < t < T, \quad (4.10)$$

consideremos el problema auxiliar:

Problema PA. *Encontrar un $c \in C^{2,1}(D) \cap C(\bar{D})$ con c_x continua hasta $x = r(t)$, $t \in (0, T)$, tal que en $D = \{(x, t) : 0 < x < r(t), 0 < t < T\}$ cumpla:*

$$c_{xx} - c_t = 0 \quad (4.11)$$

y $\forall t \in (0, T)$:

$$c(0, t) = g(t), \quad (4.12)$$

$$c_x(r(t), t) = -\dot{r}(t)(\Phi(\dot{r}(t)) + q). \quad (4.13)$$

Este problema tiene única solución, la prueba se la puede encontrar en [14].

Proposición 4.1 Tomando T suficientemente pequeño la solución de **PA** satisface:

$$c_0 \leq c(x, t) < g(t), \quad 0 < x \leq r(t), \quad 0 < t \leq T, \quad (4.14)$$

$$-c_{0x} \leq c_x(x, t) < 0, \quad 0 < x < r(t), \quad 0 < t \leq T, \quad (4.15)$$

donde c_0 y c_{0x} son constantes positivas y dependen sólo de T .

Demostración. Sea $c^1(x, t)$ la solución de **PA** para $g = 1$. En [13] se prueba que $c^1(x, t)$ verifica la ecuación (4.14). Dado que $(c - c^1)_x(r, t) = 0 \forall t$, el Principio del Máximo establece que el máximo y el mínimo de $c - c^1$ se asumen sobre $x = 0$. Puesto $(c - c^1)(0, t) = g(t) - 1$ se tiene que:

$$\begin{aligned} 0 &\leq (c - c^1)(x, t) < g(t) - 1, \\ c_0 \leq c^1(x, t) &\leq c(x, t) < c^1(x, t) - 1 + g(t) < g(t), \end{aligned}$$

obteniendo (4.14). Como $c_{xx}(0, t) = c_t(0, t) = g'(t) \geq 0$, $\max_x c_x = \max_r c_x < 0$. Para probar el lado izquierdo de (4.15) observemos que $v(x, t) = e^{-2t}(x+1)c_x(x, t)$ satisface el problema:

$$\begin{aligned} Lv &= v_{xx} - \frac{2}{x+1}v_x + \left[\frac{2}{(x+1)^2} - 2 \right] v - v_t = 0 \quad \text{en } D, \\ v(0, t) - v_x(0, t) &= -e^{-2t}g'(t), \\ v(r, t) &= -e^{-2t}(r+1)\dot{r}(q + \Phi(\dot{r})), \quad 0 < t < T. \end{aligned}$$

Supongamos que $\min_{\bar{D}} v = v(x_0, t_0) < 0$. Si $x_0 = r(t_0)$ entonces

$$v(x_0, t_0) = -e^{-2t_0}(r(t_0) + 1)\dot{r}(t_0)(\Phi(\dot{r}(t_0)) + q) \geq -(f(1)t_0 + 1)f(1)(1 + q).$$

Si $x_0 > 0$ y (x_0, t_0) no está sobre la curva r , entonces $v_{xx}(x_0, t_0) \geq 0$, $v_x(x_0, t_0) = 0$ y $v_t(x_0, t_0) \leq 0$, luego $Lv(x_0, t_0) > 0$, que es falso. Si por último $x_0 = 0$, entonces $v_x(0, t_0) \geq 0$ y:

$$v(x, t) \geq v(0, t_0) = v_x(0, t_0) - e^{-2t_0}g'(t_0) \geq -e^{2t_0}g'(t_0),$$

luego

$$v(x, t) \geq -\max\left(e^{2t_0}g'(t_0), (f(1)t_0 + 1)f(1)(1 + q)\right),$$

con lo que:

$$c_x(x, t) \geq -\max_{(x,t) \in \bar{D}} \left\{ \frac{e^{2t}}{x+1} \max_{0 \leq \tau \leq t} \left[\max\left(e^{2\tau}g'(\tau), (f(1)\tau + 1)f(1)(1 + q)\right) \right] \right\}.$$

■

Proposición 4.2 La solución de **PA** cumple que $c \in C^{2,1}(\bar{D})$, $c_{xt} \in C(\bar{D} - \{(0, 0)\})$ y :

$$|c_t(x, t)| \leq m + Mt, \quad \forall (x, t) \in D, \quad (4.16)$$

donde $m = \max_{[0, T]} |g'|$ y M depende de T y K .

Demostración. La regularidad sobre c_t se puede obtener usando [25] y [26, pág.561, T. 5.1]. Siempre se puede disminuir T para que

$$\dot{r}(t) = f(1) + \int_0^t \ddot{r} \geq f(1) - KT > 0, \quad \forall t \in [0, T]. \quad (4.17)$$

La función $w = (c - c^1)_t$ satisface el problema:

$$w_{xx} - w_t = 0 \quad \text{en } D, \quad (4.18)$$

$$w(0, t) = g'(t), \quad 0 < t < T, \quad (4.19)$$

$$w_x(r, t) + \dot{r}(t)w(r(t), t) = 0, \quad 0 < t < T. \quad (4.20)$$

Sea $t^* \geq 0$. Si se cumple $\text{máx } w = w(r(t^*), t^*)$ entonces

$$\text{máx } w = -\frac{w_x(r(t^*), t^*)}{\dot{r}(t^*)} \leq 0.$$

De igual forma, si $\text{mín } w = w(r(t^*), t^*)$ se obtiene que $\text{mín } w \geq 0$, luego por el Principio del Máximo

$$|w| \leq \text{máx}_{x=0} |w| = m,$$

y (4.16) se obtiene como en [13, prop. 2.3, pág 947]. ■

Proposición 4.3 *Bajo todas las suposiciones anteriores, existen constantes $N > 0$ y $T_0 > 0$, tales que si $T \in (0, T_0)$ y c_i es la solución de **PA** para r_i , $i = 1, 2$ resulta:*

$$|c_1(r_1, t) - c_2(r_2, t)| \leq N \|r_1 - r_2\|_{C^1(0, T)} T, \quad 0 < t < T. \quad (4.21)$$

Demostración. Llamemos $\lambda = \text{mín}(r_1, r_2)$ y $\mu = \text{máx}(r_1, r_2)$. Sea V la solución del problema

$$V_{xx} - V_t = 0 \quad \text{en } D^*, \quad (4.22)$$

$$V(0, t) = 0, \quad 0 < t < T, \quad (4.23)$$

$$V_x(\lambda, t) = (A + Mt) \|r_1 - r_2\|_{C^1(0, T)}, \quad 0 < t < T, \quad (4.24)$$

donde $D^* = \{0 < x < \lambda, 0 < t < T\}$ y $A = m + q + g(T) \left(1 + \text{máx}_{[f(1)-KT, f(g(T))]} \Phi'\right)$.

Supongamos que $\lambda = r_1$ y $\mu = r_2$, y observemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} & |c_{1x}(\lambda, t) - c_{2x}(\lambda, t)| = |c_{1x}(r_1, t) - c_{2x}(r_2, t) + c_{2x}(r_2, t) - c_{2x}(r_1, t)| \\ & \leq |-\dot{r}_1(\Phi(\dot{r}_1) + q) + \dot{r}_2(\Phi(\dot{r}_2) + q)| + (m + Mt) \|r_1 - r_2\|_{C^1(0, T)} \\ & \leq (q + m + Mt) \|r_1 - r_2\|_{C^1(0, T)} + |\dot{r}_2 \Phi(\dot{r}_1) - \dot{r}_1 \Phi(\dot{r}_1)| + |\dot{r}_2 \Phi(\dot{r}_2) - \dot{r}_2 \Phi(\dot{r}_1)| \\ & \leq (q + m + Mt) \|r_1 - r_2\|_{C^1(0, T)} + \|r_1 - r_2\|_{C^1(0, T)} \left(g(T) + g(T) \text{máx}_{[f(1)-KT, f(g(T))]} \Phi' \right) \\ & = V_x(\lambda, t). \end{aligned}$$

Como $(V - (c_1 - c_2))_x \geq 0$ sobre λ , por el Principio del Máximo obtenemos

$$0 = \text{mín}_{x=0} (V - (c_1 - c_2)) \leq V - (c_1 - c_2) \quad \text{en } D^*.$$

De manera análoga se obtiene $-V \leq c_1 - c_2$ en D^* . De modo que

$$|c_1 - c_2| \leq V \quad \text{en } D^*,$$

y esto implica que

$$|(c_1 - c_2)(\lambda, t)| \leq V(\lambda, t) \leq \int_0^\lambda |V_x(\xi, t)| d\xi \leq tf(g(T))(A + Mt) \|r_1 - r_2\|_{C^1(0,T)},$$

puesto que el máximo y el mínimo de V_x se asumen sobre λ ($V_{xx} = V_t = 0$ sobre $x = 0$). Finalmente,

$$\begin{aligned} |c_1(r_1, t) - c_2(r_2, t)| &\leq |c_1(\lambda, t) - c_2(\lambda, t)| + |c_2(r_1, t) - c_2(r_2, t)| \\ &\leq tf(g(T))(A + Mt) \|r_1 - r_2\|_{C^1(0,T)} + c_{0x} t \max_{[0,T]} |\dot{r}_1 - \dot{r}_2| \\ &\leq T [f(g(T))(A + MT) + c_{0x}] \|r_1 - r_2\|_{C^1(0,T)}. \end{aligned}$$

■

La demostración de la existencia y unicidad de la solución del problema **PS** continúa de manera análoga a como se hizo para el caso convectivo en las secciones 2.2 y 2.3. Se construye un conjunto cerrado $X \subset C^1[0, T]$ constituido por curvas que satisfacen la ecuaciones (4.7)-(4.10). Luego se define el operador $r \rightarrow \tilde{r}$ por

$$\tilde{r}(t) = \int_0^t f(c(r(\tau), \tau)) d\tau,$$

donde c es la solución de **PA** para r . Usando las ecuaciones (4.14)-(4.16) y (4.21) se puede ajustar K para lograr que el operador $r \rightarrow \tilde{r}$ sea una contracción sobre X para T pequeño. Luego el teorema del punto fijo de Banach (ver *Apéndice*) asegura la existencia de $s \in C^1[0, T]$ tal que $\tilde{s} = s$. La existencia global y la unicidad de **PS** se obtienen como en [13].

4.2. Comportamientos asintóticos.

Un aspecto interesante de este problema es el comportamiento de $s(t)$ para tiempos grandes. Hay indicios de que cuando $t \rightarrow \infty$ la frontera libre parece depender más de g que de la función f . Veamos lo siguiente. Por aplicación del Teorema de Green obtenemos la identidad:

$$0 = \oint_{\partial D_t} (xc_x - c) d\tau + xc dx, \quad t > 0,$$

luego,

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^t c(s, \tau) s \dot{s} d\tau - \int_0^t [s \dot{s} (c(s, \tau) + q)] d\tau - \int_0^s c(x, t) x dx + \int_0^t g(\tau) d\tau, \\ \frac{q}{2} s^2 &= - \int_0^t c(s, \tau) d\tau - \int_0^s cx dx + \int_0^t g(\tau) d\tau, \end{aligned}$$

y se llega a la acotación:

$$s(t) \leq \sqrt{\frac{2}{q} \int_0^t g(\tau) d\tau}. \quad (4.25)$$

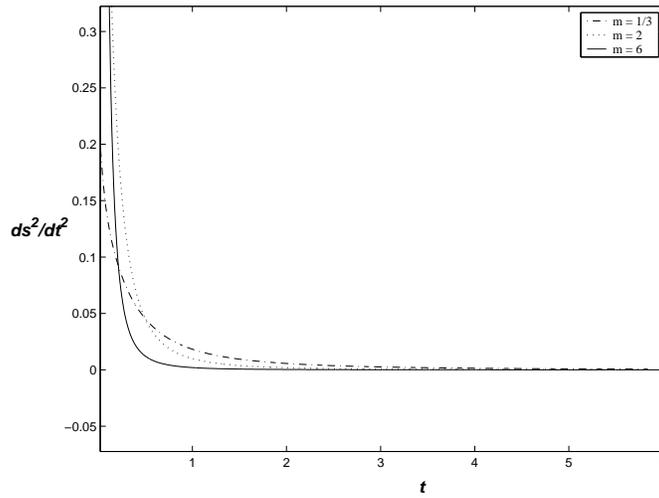


Figura 4.1: $q = 0,3$, $g(t) = 2t + 1$, $f(c) = c^m$

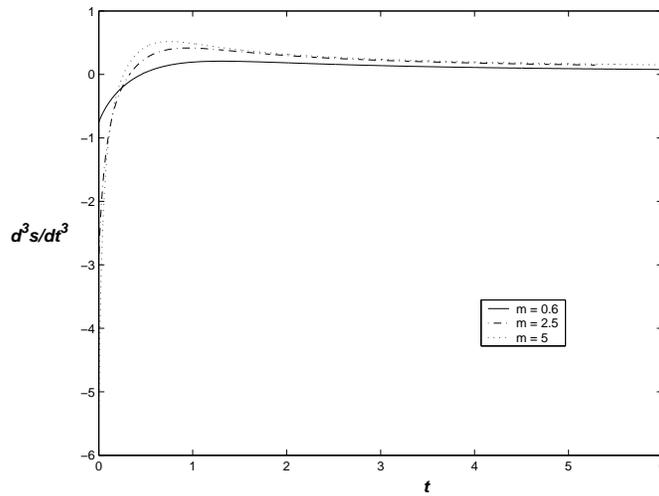


Figura 4.2: $q=0,3$, $g(t) = t^2 + 1$, $f(c) = c^m$

Esta desigualdad, no depende en absoluto de la función f . Lo que es más, los experimentos numéricos muestran que solamente $g(t)$ determina de alguna forma el comportamiento de $s(t)$ para tiempos largos. Por ejemplo, se encuentra la conjetura de que si g es un polinomio de grado n , entonces cuando $t \rightarrow \infty$:

$$\frac{d^{n+1}s}{dt^{n+1}} \rightarrow 0. \tag{4.26}$$

Esto no contradeciría (4.25), puesto que si $g(t) = \sum_{j=0}^n g_j t^j$ entonces

$$\sqrt{\frac{2}{q} \int_0^t g(\tau) d\tau} \leq \sqrt{\frac{2ng_n}{q(n+1)}} t^{\frac{n+1}{2}} \quad t \rightarrow \infty$$

y $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d^{n+1} t^{\frac{n+1}{2}}}{dt^{n+1}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t^{\frac{n+1}{2}}} = 0$ como en (4.26). Esto se puede apreciar en las gráficas 4.1, 4.2 y 4.3, obtenidas para varios polinomios g y diversas funciones f .

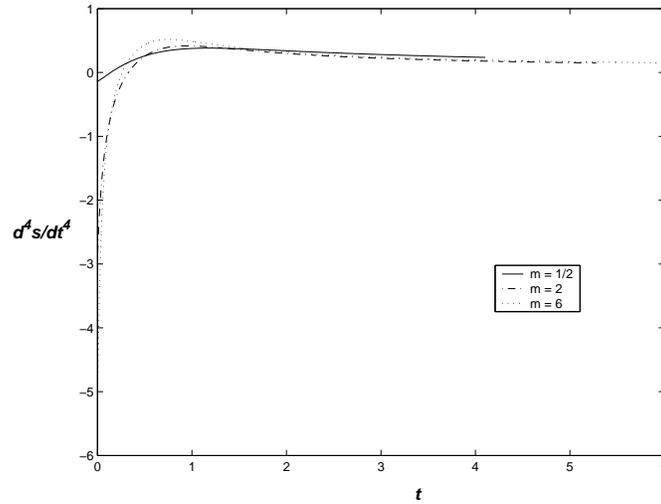


Figura 4.3: $q = 0.3$, $g(t) = t^3 + t^2 + t + 1$, $f(c) = c^m$.

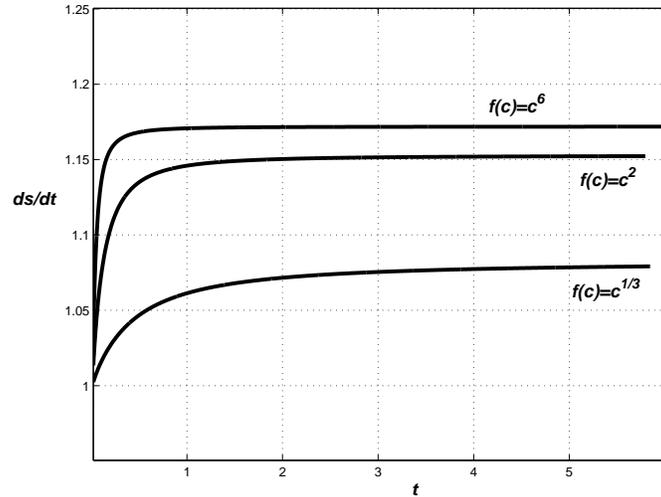


Figura 4.4: $q = 0.3$, $g(t) = 2t + 1$, $f(c) = c^m$.

En estos comportamientos, un caso especial es $g(t) = At + 1$. Aquí no sólo se verifica (4.26) para $n = 1$, sino que también se observa que $s(t)$ se pega asintóticamente a una recta, o sea, siempre existen constantes a y b tales que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} [at + b - s(t)] = 0.$$

Esto se ve en la gráfica 4.4, que es la ds/dt para los mismos casos de la figura 4.1.

4.3. Solución numérica.

El método numérico que se usó en la sección 2.5 es muy similar, al que presentaremos ahora. De hecho, cronológicamente lo que primero se hizo fue resolver numéricamente el

problema con condición de contorno $c(0, t) = g(t)$ y luego se trató de adaptar este al caso convectivo $c_x(0, t) = h(c(0, t) - g(t))$. El método numérico que se mencionó en la sección 3.2 para computar el caso límite $h = +\infty$, es el que ahora mostraremos (será válido indistintamente si $g'(t) \leq 0$ o $g'(t) \geq 0$).

Todo igual que como en la sección 2.5, el sistema al tiempo $t = t_n$ que hay que resolver es:

$$C_n'' - \frac{C_n - C_{n-1}}{\Delta t} = 0 \quad \text{en} \quad 0 < x < S_n, \quad (4.27)$$

$$C_n(0) = g(t_n), \quad (4.28)$$

$$\frac{S_n - S_{n-1}}{\Delta t} = f(C_n(S_n)), \quad S_0 = 0, \quad (4.29)$$

$$C_n'(S_n) = -\frac{S_n - S_{n-1}}{\Delta t}(q + C_n(S_n)). \quad (4.30)$$

Escribimos (4.27) como el sistema de ecuaciones:

$$C_n' = V_n, \quad (4.31)$$

$$V_n' = \frac{1}{\Delta t}(C_n - C_{n-1}) \quad (4.32)$$

y aplicamos la transformación de Riccati a C_n :

$$C_n(x) = R(x)V_n(x) + W_n(x), \quad (4.33)$$

donde:

$$R' = 1 - \frac{1}{\Delta t}R^2, \quad \text{con} \quad R(0) = 0 \quad (4.34)$$

y

$$W_n' = \frac{-1}{\Delta t}R(W_n - C_{n-1}), \quad W_n(0) = g(t_n). \quad (4.35)$$

La solución de (4.34) es $R(x) = \sqrt{\Delta t} \tanh(x/\sqrt{\Delta t})$. De (4.33):

$$C_n'(S_n) = (C_n(S_n) - W_n(S_n))/R(S_n).$$

Igualando con (4.30) y despejando $C_n(S_n)$, obtenemos de (4.29):

$$(S_n - S_{n-1})/\Delta t = f\left(\frac{W_n(S_n) - qR(S_n)(S_n - S_{n-1})/\Delta t}{1 + R(S_n)(S_n - S_{n-1})/\Delta t}\right),$$

o sea que S_n es un cero de la función:

$$\sigma_n(x) = (x - S_{n-1})/\Delta t - f\left(\frac{W_n(x) - qR(x)(x - S_{n-1})/\Delta t}{1 + R(x)(x - S_{n-1})/\Delta t}\right), \quad (4.36)$$

que está definida para $[0, \infty)$ (para el caso $g'(t) \geq 0$) o en $[0, 1]$ (para el caso $g'(t) \leq 0$). Entonces, una vez obtenido S_n (que se asume como el primer $x > S_{n-1}$ que anula a $\sigma_n(x)$), ponemos:

$$\dot{S}_n = \frac{S_n - S_{n-1}}{\Delta t}, \quad (4.37)$$

$$C_n(S_n) = \frac{W_n(S_n) - R(S_n)\dot{S}_n q}{1 + R(S_n)\dot{S}_n}, \quad (4.38)$$

$$C_n'(S_n) = V_n(S_n) = -\dot{S}_n \frac{W_n(S_n) + q}{1 + R(S_n)\dot{S}_n}. \quad (4.39)$$

Ahora que tenemos W_n y $V(S_n)$, se puede integrar sobre $[0, S_n]$ la ecuación

$$V'_n = \frac{1}{\Delta t}(RV_n + W_n - C_{n-1}). \quad (4.40)$$

Luego de (4.33) se obtiene $C_n(x)$ al tiempo $t = t_n$ en $[0, S_n]$. Para $x > S_n$, se la extiende a $C_n(x)$ linealmente según (4.38) y (4.39). Y como dato inicial usaremos:

$$C_0(x) = -f(1)(q+1)x + 1, \quad \forall x. \quad (4.41)$$

Lema 4.4 *Si $g'(t) \geq 0$, existe una raíz $S_n > S_{n-1}$ de σ_n . Además $0 < C_n \leq g(T)$ sobre $[0, S_n]$ y $C'_n < 0$ sobre el intervalo $[0, \infty)$. Y se cumple que:*

$$S_n - S_{n-1} \leq f(g(T))\Delta t. \quad (4.42)$$

Demostración. Para $n = 0$ tenemos $C_0(0) = 1 \leq g(T)$ y $C'_0 = -f(1)(1+q) < 0$. Supongamos la afirmación válida para $n - 1$. Restando C'_{n-1} miembro a miembro en (4.35), podemos resolver la ODE que resulta para $W_n - C_{n-1}$, obteniendo:

$$(W_n - C_{n-1})(x) = \frac{g(t_n) - g(t_{n-1}) - \int_0^x C'_{n-1}(r)e^{\int_0^r R/\Delta t} dr}{e^{\int_0^x R/\Delta t}},$$

de donde sale que $W_n(x) > C_{n-1}(x) \forall x > 0$, en consecuencia, por (4.35) resulta W_n es decreciente. Ahora observemos que la expresión:

$$\frac{W_n(x) - qR(x)(x - S_{n-1})/\Delta t}{1 + R(x)(x - S_{n-1})/\Delta t}$$

es un función continua, decreciente y positiva en $S_{n-1} \leq x < x_0$, para cierto x_0 donde se anula (W_n tiene ahora derivada negativa y no acotada). Pero entonces:

$$\sigma_n(x_0) = \frac{x_0 - S_{n-1}}{\Delta t} - f(0) > 0$$

por definición de f . Por otro lado:

$$0 < C_{n-1}(S_{n-1}) \leq W_n(S_{n-1}),$$

o sea $\sigma_n(S_{n-1}) = -f(W_n(S_{n-1})) < 0$, con lo que existe un primer $S_n \in (S_{n-1}, x_0)$ que hace cero a σ_n . Con esto resulta $\dot{S}_n > 0$, $C_n(S_n) > 0$ y $V_n(S_n) < 0$. Resolviendo (4.40) tenemos:

$$V_n(x) = \frac{\int_{S_n}^x \frac{W_n(r) - C_{n-1}(r)}{\Delta t} e^{-\int_0^r R/\Delta t} dr + V_n(S_n)e^{-\int_0^{S_n} R/\Delta t}}{e^{\int_0^x R/\Delta t}}, \quad x \in [0, S_n],$$

con lo que $C'_n < 0$ en $[0, \infty)$, lo que implica $g(T) \geq g(t_n) = C_n(0) \geq C_n \geq C_n(S_n) > 0$ en $[0, S_n]$. Finalmente observemos que por (4.29),

$$0 < S_n - S_{n-1} = f(C_n(S_n))\Delta t \leq f(g(T))\Delta t. \quad (4.43)$$

■

Lema 4.5 *Si $g'(t) \leq 0$, existe una raíz $S_n > S_{n-1}$ de σ_n . Además $0 < C_n \leq 1$ sobre $[0, S_n]$. Y se cumple que:*

$$S_n - S_{n-1} \leq f(1)\Delta t. \quad (4.44)$$

Demostración. Para $n = 0$ se tiene $C_0(0) = 1$. El resto de la prueba es exactamente la del lema 2.15. ■

5. Coeficiente de conductividad no-constante.

En esta sección estudiaremos el problema de la sección 2, pero suponiendo que el proceso de difusión no es uniforme, fluyendo el solvente de diversas maneras que dependerán de la naturaleza del *coeficiente de conducción*. Se seguirá la estructura de los trabajos [21] y [22].

Tal como se mencionó en la sección 1.1, la ley de *Fourier* establece que:

$$\phi(x, t) = -Kc_x(x, t). \quad (5.1)$$

Es decir, el flujo ϕ de solvente a través del material es proporcional al gradiente de concentración c_x . El factor de proporcionalidad es precisamente el *coeficiente de conducción* K .

Todo lo presentado hasta ahora, se hizo asumiendo que K es una constante y con esto, siempre fue posible *normalizar* y asumir directamente $K \equiv 1$. En consecuencia, nunca aparece ningún parámetro K en los problemas **PS** de las secciones 2 y 4.

Sin embargo, es claro que suponer K constante es el modelo más simple posible. Una aproximación mejor es permitir que K sea variable. Por ejemplo, asumir que el coeficiente K sea función de la coordenada x , es decir $K = K(x)$ (*material no-homogéneo*), o de la concentración misma, o sea $K = K(c)$ (*difusión no lineal*). También podría asumirse que $K = K(t)$, que es el caso en el que por ejemplo, el material está inmerso en un baño térmico con una temperatura que dependa del tiempo. Finalmente incluso, se podría llegar al caso en el que el material en cuestión esté siendo testeado y presente un coeficiente K totalmente desconocido. De este modo, es que directamente vamos a asumir una situación bien general:

$$K = K[c], \quad (5.2)$$

donde $K[c]$ es un *operador* que actúa sobre la función c . De esta manera, si se tiene en cuenta (5.1), el problema matemático queda planteado de la siguiente forma:

Problema PS Dado $T > 0$, determinar las funciones $s(t)$ y $c(x, t)$ tales que $s \in C^1[0, T]$, $c \in C^{2,1}(D_T) \cap C(\bar{D}_T)$, con $D_T = \{(x, t) : 0 < x < s(t), 0 < t < T\}$, satisfaciendo:

$$(Kc_x)_x - c_t = 0 \quad \text{en} \quad D_T, \quad (5.3)$$

$$Kc_x(0, t) = h[c(0, t) - g(t)], \quad g(0) = 1, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (5.4)$$

$$\dot{s}(t) = f(c(s(t), t)), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (5.5)$$

$$Kc_x(s(t), t) = -\dot{s}(t)[c(s(t), t) + q], \quad 0 \leq t \leq T, \quad (5.6)$$

$$s(0) = 0. \quad (5.7)$$

El operador $K[c]$, deberá satisfacer mínimamente que:

$$K[c] \in C^{1,0}(\bar{D}_T), \quad (5.8)$$

$$K[c](x, t) > 0, \quad \forall (x, t) \in \bar{D}_T. \quad (5.9)$$

Al igual que antes, también supondremos que $f \in C^1(0, 1] \cap C[0, 1]$, $f(0) = 0$ y $f' > 0$. Además, $g \in C^1[0, +\infty)$, $g'(t) \leq 0$, $\forall t$ y $G = \int_0^\infty g(\tau) d\tau < \infty$.

Notemos que independientemente de K , si igualamos para $t = 0$ (5.4) y (5.6), obtenemos de (5.5):

$$h(c(0, 0) - 1) = K[c](0, 0)c_x(0, 0) = -f(c(0, 0))(c(0, 0) + q), \quad (5.10)$$

de modo que se sigue cumpliendo que

$$c(0, 0) = c^*, \quad (5.11)$$

donde c^* es la única solución de la ecuación $h(1 - c^*) = f(c^*)(c^* + q)$ la cual satisface:

$$0 < c^* < 1. \quad (5.12)$$

Como el problema **PS** es bastante general, demostrar la existencia y unicidad de una solución sería un tarea inmensa. Está claro que para los casos $K = K(c)$ o $K = K(x)$, si la *función* K es lo suficientemente regular, la demostración de existencia y unicidad se podría realizar siguiendo por ejemplo las ideas de [13] y [29].

5.1. Los Métodos Numéricos.

Ahora mostraremos los esquemas numéricos que se idearon para dos casos particulares de coeficiente K . Al igual que antes, el problema es discretizado en el tiempo y se resuelve una sucesión de ecuaciones diferenciales ordinarias, aproximando la solución en la forma $c(x, t_n) \approx C_n(x)$ y $s(t_n) \approx S_n$ (con $t_n = n\Delta t$, $n = 0, 1, 2, \dots$). A cada función $C_n(x)$ se la extiende linealmente más allá de S_n :

$$C_n(x) = C_n(S_n) + C'_n(S_n)(x - S_n), \quad x \geq S_n.$$

De la ecuación (5.10), tenemos que

$$c_x(0, 0) = \frac{h}{K[c](0, 0)}(c^* - 1) \quad (5.13)$$

y con esto, para $n = 0$ se define

$$C_0(x) = c_x(0, 0)x + c^*, \quad 0 \leq x < +\infty. \quad (5.14)$$

5.1.1. El caso de la barra no-homogénea ($K = K(x)$).

Discretizando con respecto al tiempo el sistema (5.3)-(5.7) obtenemos:

$$\frac{C_n - C_{n-1}(x)}{\Delta t} = K(x)C''_n + K'(x)C'_n, \quad 0 < x < S_n, \quad n \geq 1, \quad (5.15)$$

$$K(0)C'_n(0) = h(C_n(0) - g(t_n)), \quad n \geq 1, \quad (5.16)$$

$$\frac{S_n - S_{n-1}}{\Delta t} = f(C_n(S_n)), \quad n \geq 1, \quad (5.17)$$

$$K(S_n)C'_n(S_n) = -\left(\frac{S_n - S_{n-1}}{\Delta t}\right)[q + C_n(S_n)], \quad n \geq 1, \quad (5.18)$$

$$S_0 = 0. \quad (5.19)$$

En este sistema, se supone conocido S_{n-1} y $C_{n-1}(x)$ para $0 \leq x < +\infty$. Los lemas que siguen a continuación, servirán para demostrar que este método numérico está bien definido para todo n .

Dado $n \geq 1$, llamaremos $W_n(x)$ y $R(x)$ a las soluciones de:

$$R' = 1 + \left(K'(x) - \frac{R}{\Delta t} \right) \frac{R}{K(x)}, \quad R(0) = K(0)/h, \quad (5.20)$$

$$W_n' = \frac{R(x)}{K(x)\Delta t} (C_{n-1}(x) - W_n), \quad W_n(0) = g(t_n). \quad (5.21)$$

Lema 5.1 *Si R and W_n satisfacen (5.20) y (5.21), entonces*

$$\frac{R(x)}{K(x)} \geq \frac{1}{h + x/\Delta t}, \quad \forall x \geq 0. \quad (5.22)$$

En consecuencia $R(x) > 0$ para $x \geq 0$.

Demostración. Llamemos $r(x) \equiv R(x)/K(x)$. Usando (5.20), se obtiene que $r(x)$ satisface la ecuación:

$$r' = \frac{1}{K(x)} - \frac{1}{\Delta t} r^2, \quad r(0) = \frac{1}{h}. \quad (5.23)$$

Recordando que por definición K es una función positiva, deducimos que:

$$r'/r^2 \geq -1/\Delta t,$$

y se obtiene (5.22) integrando esta desigualdad entre 0 y x . ■

Lema 5.2 *Sea $n \geq 1$. Supongamos que conocemos S_{n-1} y $C_{n-1}(x)$, y asumamos que $0 < C_{n-1} \leq 1$ en $[0, S_{n-1}]$ y $C'_{n-1} < 0$ en $[S_{n-1}, \infty)$. Entonces*

1. $W_n > 0$ en $[0, S_{n-1}]$.

2. $W_n \leq 1$ para $x \geq 0$.

3. Si

$$\varphi(x) = \frac{K(x)W_n(x) - qR(x)(x - S_{n-1})/\Delta t}{K(x) + R(x)(x - S_{n-1})/\Delta t}, \quad (5.24)$$

entonces $\varphi(x) \leq W_n(x) \leq 1$ para todo $x \geq S_{n-1}$ y $\varphi(S_{n-1}) > 0$.

4. $\lim_{x \rightarrow \infty} W_n(x) = -\infty$.

5. $\lim_{x \rightarrow \infty} \varphi(x) = -\infty$.

6. Existe $x_0 > S_{n-1}$ tal que x_0 es la mínima raíz de φ en (S_{n-1}, ∞) .

Demostración.

(1) Resolviendo la ecuación diferencial (5.21) obtenemos:

$$W_n(x) = \exp\left(-\int_0^x \frac{R}{K\Delta t}\right) \left[g(t_n) + \int_0^x \frac{R(y)C_{n-1}(y)}{K(y)\Delta t} \exp\left(\int_0^y \frac{R}{K\Delta t}\right) dy \right], \quad (5.25)$$

Como tanto g , R como C_{n-1} son funciones positivas en el intervalo $[0, s_{n-1}]$, tenemos que $W_n(x)$ es positiva en $[0, S_{n-1}]$.

(2) Debido a que $C_{n-1} \leq 1$ en $[0, S_{n-1}]$ y que $C'_{n-1} < 0$ en $[S_{n-1}, \infty)$, tenemos que $C_{n-1} \leq 1$ para todo $x \in [0, \infty)$. Reemplazando esto en la ecuación (5.25) obtenemos:

$$\begin{aligned} W_n(x) &\leq \exp\left(-\int_0^x \frac{R}{K\Delta t}\right) \left[g(t_n) + \int_0^x \frac{R(y)}{K(y)\Delta t} \exp\left(\int_0^y \frac{R}{K\Delta t}\right) dy \right] \leq \\ &\leq \exp\left(-\int_0^x \frac{R}{K\Delta t}\right) \left[g(t_n) + \exp\left(\int_0^x \frac{R}{K\Delta t}\right) - 1 \right] \leq 1, \quad \forall x. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Se cumple la última desigualdad porque $g' \leq 0$ y $g(0) = 1$.

(3) Claramente, si $x \geq S_{n-1}$ podemos ver que $\varphi(x) \leq W_n(x) \leq 1$ (debido a (2)). Ahora, evaluando $\varphi(S_{n-1}) = W_n(S_{n-1}) > 0$ debido a (1).

(4) De (5.22) y usando que C_{n-1} es una función lineal decreciente en $[S_{n-1}, \infty)$ obtenemos que $RC_{n-1}/(K\Delta t)$ es menor que alguna constante negativa cuando x tiende a infinito. Como $\exp(\int_0^x R/(K\Delta t))$ es más grande que 1 para todo x , entonces la función $W_n(x) \rightarrow -\infty$ cuando $x \rightarrow \infty$.

(5) Es una consecuencia de (3).

(6) Puesto que $\varphi(S_{n-1}) > 0$, por (5) se deduce que debe existir un número x_0 donde φ se anula. Además, x_0 se puede elegir como la mínima raíz de φ en (S_{n-1}, ∞) , entonces $S_{n-1} < x_0$. ■

Lema 5.3 *Si se cumplen las hipótesis del lema (5.2), la función*

$$\sigma_n(x) = \frac{(x - S_{n-1})}{\Delta t} - f(\varphi(x)). \quad (5.27)$$

posee una raíz dentro del intervalo (S_{n-1}, ∞) .

Demostración. Evaluando la función σ_n en x_0 y en S_{n-1} tenemos que:

$$\sigma_n(S_{n-1}) = -f(W_n(S_{n-1})) < 0, \quad (5.28)$$

$$\sigma_n(x_0) = \frac{x_0 - S_{n-1}}{\Delta t} - f(0) = \frac{x_0 - S_{n-1}}{\Delta t} > 0. \quad (5.29)$$

Luego, como la función σ_n es continua, el lema queda demostrado. ■

Definamos S_n como la raíz más pequeña de la función σ_n sobre el intervalo (S_{n-1}, ∞) . Observemos que S_n no es igual a S_{n-1} por (5.28) y por lo tanto $S_{n-1} < S_n < x_0$.

Del lema 5.2, sabemos que W_n es positiva sobre $[0, S_{n-1}]$. Si existe $y \in (S_{n-1}, S_n]$ tal que $W_n(y) = 0$, entonces $\varphi(y) < 0$ por el punto (3) del lema 5.2. Entonces, existe $z \in (S_{n-1}, y)$ tal que $\varphi(z) = 0$. Esto es una contradicción, puesto que x_0 era la mínima raíz de φ en (S_{n-1}, ∞) . De este modo,

$$W_n(x) > 0 \text{ en el intervalo } [0, S_n].$$

Ahora estamos en condiciones de establecer qué función $C_n(x)$ resulta solución del sistema (5.15)-(5.19). Asumiendo conocida $C_{n-1}(x)$, definimos la función $V_n(x)$ como la solución de la siguiente ecuación diferencial:

$$\begin{cases} V_n' = \frac{1}{K} \left(\frac{R}{\Delta t} - K' \right) V_n + \frac{W_n - C_{n-1}}{K \Delta t}, \\ V_n(S_n) = -S_n' \left(\frac{q + W_n(S_n)}{K(S_n) + R(S_n)S_n'} \right), \quad S_n' = \frac{S_n - S_{n-1}}{\Delta t} \end{cases} \quad (5.30)$$

y definimos la función $C_n(x)$ como:

$$C_n(x) = R(x)V_n(x) + W_n(x) \quad 0 \leq x \leq S_n. \quad (5.31)$$

Lema 5.4 *Asumiendo que se satisfacen la hipótesis del lema (5.2), la función $C_n(x)$ cumple que:*

1. $C_n' = V_n$,
2. $C_n(S_n) = \varphi(S_n) \leq 1$,
3. $V_n' = \frac{(1 - R')V_n - W_n'}{R}$,
4. C_n y S_n satisfacen las ecuaciones (5.15)-(5.19),
5. $0 < C_n \leq 1$ en $[0, S_n]$,
6. $C_n' < 0$ en $[S_n, \infty)$,
7. $S_n - S_{n-1} \leq f(1)\Delta t$.

Demostración

(1) Se sigue de derivar C_n :

$$C_n' = R'V_n + RV_n' + W_n' \quad (5.32)$$

y reemplazar R' por (5.20), V_n' por (5.30) y W_n' por (5.21).

(2) Evaluemos $C_n(S_n) = R(S_n)V_n(S_n) + W_n(S_n)$ y reemplacemos o $V_n(S_n)$ por (5.30). La desigualdad se deduce del punto (3) del lema (5.2).

(3) Usando (1) y la ecuación (5.32) tenemos una expresión para V_n de la cual, operando algebraicamente obtenemos V_n' .

(4) Hay que seguir los siguientes pasos:

- Empezando del lado derecho de (5.15), de (1) tenemos que:

$$KC_n'' + K'C_n' = KV_n' + K'V_n. \quad (5.33)$$

Si reemplazamos V_n' usando (3) y cambiamos W_n' por (5.21) obtenemos (5.15).

- Para obtener (5.16), sustituimos $C_n'(0)$ por $V_n(0)$, y reemplazamos $V_n(0)$ usando (5.31). Entonces, reemplazamos el valor de W_n en $x = 0$ por $g(t_n)$ (ecuación (5.21)) y este ítem queda demostrado por simple cálculo.
- La fórmula (5.17) se deduce de la definición de S_n y (2).
- Partiendo de la ecuación (5.30), se puede obtener $K(S_n)V_n(S_n)$. Entonces se verifica (5.18).

(5) De (5.31) y (1), podemos calcular una expresión para C_n , a saber:

$$C_n(x) = \exp\left(-\int_x^{S_n} \frac{1}{R}\right) C_n(S_n) + \exp\left(-\int_x^{S_n} \frac{1}{R}\right) \int_x^{S_n} \frac{W_n(y)}{R(y)} \exp\left(\int_y^{S_n} \frac{1}{R}\right) dy. \quad (5.34)$$

Como $C_n(S_n) = \varphi(S_n) > 0$ y tanto R como W_n son funciones positivas sobre $[0, S_n]$, obtenemos que C_n es estrictamente positiva en todo el intervalo $[0, S_n]$.

Por otro lado, usando el punto (2) del lema (5.2), tenemos:

$$\begin{aligned} C_n(x) &\leq \exp\left(-\int_x^{S_n} \frac{1}{R}\right) C_n(S_n) + \exp\left(-\int_x^{S_n} \frac{1}{R}\right) \int_x^{S_n} \frac{1}{R(y)} \exp\left(\int_y^{S_n} \frac{1}{R}\right) dy, \\ &\leq 1 + \exp\left(-\int_x^{S_n} \frac{1}{R}\right) [C_n(S_n) - 1] \leq 1, \quad x \in [0, S_n]. \end{aligned} \quad (5.35)$$

(La última desigualdad se cumple debido a (2)).

(6) Si $x \geq S_n$, usando (5.18) obtenemos:

$$C_n'(x) = C_n'(S_n) = -\frac{1}{K(S_n)} \left(\frac{S_n - S_{n-1}}{\Delta t}\right) [q + C_n(S_n)] < 0. \quad (5.36)$$

(7) Como la función f es creciente y $C_n(S_n) \leq 1$, se tiene que

$$S_n - S_{n-1} \leq \Delta t f(C_n(S_n)) \leq \Delta t f(1).$$

Ahora estamos en condiciones de formular el siguiente teorema que garantiza la buena definición del método numérico. ■

Teorema 5.5 *Para cada $n \geq 1$ existe una solución del sistema (5.15)-(5.19). Además la sucesión $\{S_n\}_{n=1}^{\infty}$ es estrictamente creciente.*

Demostración. Dado que

$$C_0(x) = \frac{h}{K(0)}(c^* - 1)x + c^*, \quad (5.37)$$

el caso $n = 0$ es trivial. El lema (5.3) garantiza que la sucesión $\{S_n\}$ es creciente. La función C_n está definida por la fórmula (5.31) y satisface las hipótesis del lema (5.2) debido a (5) y (6) del lema (5.4). ■

5.1.2. Difusión no lineal ($K = K(c)$).

Discretizando con respecto al tiempo el sistema (5.3)-(5.7) obtenemos:

$$\frac{C_n - C_{n-1}(x)}{\Delta t} = K(C_n)C_n'' + K'(C_n)C_n'^2, \quad 0 \leq x \leq S_n, \quad (5.38)$$

$$K(C_n(0))C_n'(0) = h(C_n(0) - g(t_n)), \quad n \geq 1, \quad (5.39)$$

$$\frac{S_n - S_{n-1}}{\Delta t} = f(C_n(S_n)), \quad n \geq 1, \quad (5.40)$$

$$K(S_n(S_n))C_n'(S_n) = -\left(\frac{S_n - S_{n-1}}{\Delta t}\right)[q + C_n(S_n)], \quad n \geq 1, \quad (5.41)$$

$$S_0 = 0. \quad (5.42)$$

En cuanto a la función $K(c)$, supondremos que es positiva y con derivada continua para $0 \leq c \leq 1$. Debido a la naturaleza no-lineal de las ecuaciones (5.38) y (5.39), no se puede seguir exactamente el esquema que se usó para $K = K(x)$, es decir no se puede plantear la transformación de Riccati $C_n = RV_n + W_n$. Nos vemos así obligados a cambiar el método numérico:

De acuerdo con (5.13) y (5.14) se tomará como dato inicial:

$$C_0(x) = \frac{h}{K(c^*)}(c^* - 1)x + c^*, \quad (5.43)$$

Sea $n \geq 1$. Dados S_{n-1} y $C_{n-1}(x)$, se define la función $F(z)$ sobre el intervalo $S_{n-1} \leq z \leq S_{n-1} + f(1)\Delta t$ de la manera siguiente:

Se resuelve sobre el intervalo $0 \leq x \leq z$ la ecuación diferencial

$$\frac{u - C_{n-1}(x)}{\Delta t} = K(u)u'' + K'(u)u'^2 \quad (5.44)$$

con condiciones iniciales

$$u(z) = f^{-1}\left(\frac{z - S_{n-1}}{\Delta t}\right), \quad (5.45)$$

$$u'(z) = -\frac{1}{K(u(z))}\left(\frac{z - S_{n-1}}{\Delta t}\right)[q + u(z)], \quad (5.46)$$

luego definimos

$$F(z) = K(u(0))u'(0) - h[u(0) - g(t_n)], \quad (5.47)$$

Notemos que es necesario pedir que $z \in [S_{n-1}, S_{n-1} + f(1)\Delta t]$ porque $(z - S_{n-1})/\Delta t$ debe estar en el dominio de f^{-1} .

Si se supone que la función F tiene una raíz en el intervalo $[S_{n-1}, S_{n-1} + f(1)\Delta t]$, se puede definir S_n como el mínimo z que anule a F en ese intervalo. Y la función $C_n(x)$ se define como la solución de (5.44)-(5.46) tomando $z = S_n$ para $0 \leq x \leq S_n$, y $C_n(x)$ lineal para $x > S_n$.

Si este procedimiento se puede realizar para todo n , entonces el sistema (5.38)-(5.41) tendrá solución para todo n .

5.2. Comportamientos Asintóticos.

Independientemente del problema de demostrar la existencia y unicidad a estos problemas, si se asume conocida la solución $\{c(x, t), s(t)\}$ se pueden demostrar interesantes acotaciones y comportamientos asintóticos que han de verificarse *siempre*, independientemente de cuál sea la naturaleza del operador $K[c]$ y de la función f . Ya en la sección 2 se habían obtenido (para el caso $K \equiv 1$) las relaciones:

$$s(t) \leq \frac{h}{q} \int_0^t g(\tau) d\tau \leq \frac{h}{q} G, \quad (5.48)$$

$$\sup_f s_\infty = \sqrt{\frac{1}{h^2} + \frac{2}{q} G} - \frac{1}{h} \quad (5.49)$$

y había quedado pendiente determinar si siguen siendo válidas para el caso general $K = K[c]$.

Teorema 5.6 *Supongamos que $\{c(x, t), s(t)\}$ sea solución del problema PS para algún $T > 0$. Entonces se verifica que:*

$$0 \leq c(x, t) \leq 1, \quad \forall (x, t) \in \bar{D}_T. \quad (5.50)$$

Demostración. Primero notemos que la función $c(x, t)$ no puede ser una constante, porque si lo fuera se tendría $c_x(x, t) = 0 \forall (x, t) \in \bar{D}_T$. En particular, resulta que $c(0, 0) = \frac{1}{h} c_x(0, 0) + g(0) = 1$, lo que contradice (5.11) y (5.12). Ahora consideremos el operador:

$$L[u] = a(x, t)u_{xx} + b(x, t)u_x - u_t, \quad (5.51)$$

donde

$$\begin{aligned} a(x, t) &= K[c](x, t), \\ b(x, t) &= (K[c](x, t))_x. \end{aligned}$$

Las restricciones (5.8) y (5.9) proporcionan a las funciones $a(x, t)$ y $b(x, t)$ toda la regularidad suficiente para aplicar un Principio del Máximo en una versión bien general (ver por ejemplo [30, pág. 168, T. 2]), con el cual es posible garantizar que, como la función $c(x, t)$ no es constante y evidentemente satisface $L[c] = 0$, se deberá cumplir que su máximo y mínimo sobre \bar{D}_T se asuman sobre la frontera parabólica de D_T . Sobre $x = s(t)$ se cumple (5.5) y como el dominio de la función f es el intervalo $[0, 1]$ se tiene que:

$$0 \leq c(s(t), t) \leq 1, \quad 0 \leq t \leq T. \quad (5.52)$$

Por otro lado, si un extremo ocurre sobre el eje $x = 0$, digamos para algún $t_0 \in [0, T]$, se tiene que:

$$c(0, t_0) = \frac{1}{h} K[c](0, t_0) c_x(0, t_0) + g(t_0) \begin{cases} \leq g(t_0) \leq 1 & \text{si } c(0, t_0) \text{ es máximo} \\ \geq g(t_0) \geq 0 & \text{si } c(0, t_0) \text{ es mínimo.} \end{cases}$$

■

Observación: Se cumple que $c(x, t) \leq 1 \forall (x, t) \in \bar{D}_T$ aún si se supone que el dominio de la función f es el intervalo $[0, +\infty)$. En efecto, si se asume el valor máximo de $c(x, t)$ sobre la frontera libre, digamos sobre $t = t_0$ se tiene que:

$$c(s(t_0), t_0) = \max_{\bar{D}_T} c \geq c(0, 0) = c^* > 0,$$

luego por (5.6) se llega a que $c_x(s(t_0), t_0) < 0$, lo que no es cierto.

Al igual que en la sección 2 haremos uso de la identidad de Green:

$$\int \int_{D_t} (Q_x - P_\tau) dx d\tau = \oint_{\partial D_t} P dx + Q d\tau. \quad (5.53)$$

Tomando $P = c$ y $Q = Kc_x$ obtenemos:

$$0 = \oint_{\partial D_t} c(x, \tau) dx + Kc_x(x, \tau) d\tau, \quad t > 0, \quad (5.54)$$

con lo cual,

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^t c(s(\tau), \tau) \dot{s}(\tau) d\tau - \int_0^t \dot{s}(\tau) (c(s(\tau), \tau) + q) d\tau - \int_0^{s(t)} c(x, t) dx \\ &\quad - \int_0^t Kc_x(0, \tau) d\tau, \end{aligned} \quad (5.55)$$

entonces

$$\begin{aligned} qs(t) &= - \int_0^{s(t)} c(x, t) dx - \int_0^t Kc_x(0, \tau) d\tau \\ &= - \int_0^{s(t)} c(x, t) dx - h \int_0^t c(0, \tau) d\tau + h \int_0^t g(\tau) d\tau, \end{aligned} \quad (5.56)$$

luego debido al teorema 5.6:

$$s(t) \leq \frac{h}{q} \int_0^t g(\tau) d\tau \leq \frac{h}{q} G, \quad (5.57)$$

con lo cual, se recupera totalmente la desigualdad (5.48). Sorprendentemente se sigue cumpliendo (5.48) independientemente de la función f y de cuál sea la naturaleza del operador $K[c]$. También hay que remarcar que (5.57) es una acotación que se cumple para cada t . En efecto, si $G(t) \equiv \int_0^t g(\tau) d\tau$ tenemos que

$$s(t) \leq \frac{h}{q} G(t), \quad 0 \leq t \leq T. \quad (5.58)$$

Hay una explicación física muy sencilla para (5.57) y es que como mínimo, la concentración *real* de solvente dentro del material es el valor umbral q (que se corresponde con $c(x, t) = 0$), de modo que la cantidad total de solvente adentro debe ser qs_∞ . Ahora, la cantidad total de solvente que pasó a través de $x = 0$ es como mínimo hG y (5.57) es una consecuencia de la *conservación de la masa*.

Hay otro hecho muy importante para destacar respecto de la desigualdad (5.57): esta acotación es *óptima* respecto de f y K , lo que quiere decir que siempre es posible elegir K y f para que s_∞ pueda estar tan próximo a $\frac{h}{q}G$ como se quiera. En efecto:

Teorema 5.7

$$\sup_{f,K} s_\infty = \frac{h}{q}G, \quad (5.59)$$

donde el supremo se toma sobre el conjunto de todas las funciones f y operadores K tales que el problema **PS** tenga una solución definida para todo $T > 0$.

Demostración. Consideremos el problema **PS** con $K \equiv 1$. Sea $k > 0$ un número real positivo. Si reemplazamos h por h/\sqrt{k} y asumimos que $f(c) = \frac{\alpha}{\sqrt{k}}c$ (con $\alpha > 0$) existirá un par $\{w(x, t), z(t)\}$ que es solución del problema **PS** según se demostró en la sección 2. La curva $z(t)$ satisface la ecuación (2.62), que en este caso adopta la forma:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} z(t) = \sqrt{k \left(\frac{1}{h} + \frac{1}{\alpha q} \right)^2 + \frac{2G}{q}} - \sqrt{k} \left(\frac{1}{h} + \frac{1}{\alpha q} \right). \quad (5.60)$$

Se puede ver fácilmente que si $s(t) = \sqrt{k}z(t)$ y $c(x, t) = w(x/\sqrt{k}, t)$, entonces el par $\{c(x, t), s(t)\}$ es la solución de **PS** para el caso $K = k$ y $f(c) = \alpha c$. Con esto, la ecuación anterior se puede reescribir como:

$$s_\infty = \sqrt{k^2 \left(\frac{1}{h} + \frac{1}{\alpha q} \right)^2 + \frac{2Gk}{q}} - k \left(\frac{1}{h} + \frac{1}{\alpha q} \right) \quad (5.61)$$

y si tomamos $\alpha = k^2$ obtenemos también que

$$s_\infty = \frac{k}{h} \left(\sqrt{1 + \frac{2Gh^2}{qk} + \frac{2h}{k^2q} + \frac{h^2}{k^4q^2}} - 1 \right) + \frac{1}{k^2q}. \quad (5.62)$$

Usando el hecho de que $\sqrt{1+x} = 1 + x/2 + o(x^2)$ y tomando

$$x = \frac{2Gh^2}{qk} + \frac{2h}{k^2q} + \frac{h^2}{k^4q^2}, \quad (5.63)$$

tenemos que:

$$s_\infty = \frac{k}{h} \left[\frac{Gh^2}{qk} + \frac{h}{k^2q} + \frac{h^2}{2k^4q^2} + o \left(\frac{2Gh^2}{qk} + \frac{2h}{k^2q} + \frac{h^2}{k^4q^2} \right)^2 \right] + \frac{1}{qk^2} \quad (5.64)$$

y si se toma $k \rightarrow \infty$ obtenemos que

$$s_\infty \rightarrow \frac{h}{q}G.$$

■

Si se fija el coeficiente de conducción a uno de la forma $K = K(x)$, se puede mejorar la estimación (5.59) y obtener otra cota óptima para s_∞ que, sea válida ahora sobre el

conjunto de todas las funciones f . Para demostrar esto, apliquemos la identidad de *Green* (5.53) a las funciones $P = cv$ y $Q = K(x)(c_x v - cv_x)$:

$$\oint_{\partial D_t} cv \, dx + K(x)(c_x v - cv_x) \, d\tau = 0, \quad (5.65)$$

donde $v(x, t)$ satisface:

$$(K(x)v_x)_x + v_t = 0, \quad \text{en } D_T. \quad (5.66)$$

Así, tomando $v(x, t) = \int_0^x \frac{dy}{K(y)}$, la ecuación (5.65) adopta la forma:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^t \left\{ c(s(\tau), \tau) \int_0^{s(\tau)} \frac{dx}{K(x)} s'(\tau) + \right. \\ &+ K(s(\tau)) \left[-\frac{s'(\tau)}{K(s(\tau))} (c(s(\tau), \tau) + q) \int_0^{s(\tau)} \frac{dy}{K(y)} - c(s(\tau), \tau) \frac{1}{K(s(\tau))} \right] \left. \right\} d\tau + \\ &+ \int_{s(t)}^0 c(x, t) \int_0^x \frac{dy}{K(y)} dx - \int_t^0 c(0, \tau) d\tau, \end{aligned}$$

es decir:

$$\begin{aligned} 0 &= -q \int_0^t s'(\tau) \int_0^{s(\tau)} \frac{dy}{K(y)} d\tau - \int_0^t c(s(\tau), \tau) d\tau - \\ &- \int_0^{s(t)} c(x, t) \int_0^x \frac{dy}{K(y)} dx + \int_0^t c(0, \tau) d\tau. \end{aligned} \quad (5.67)$$

Finalmente, si tomamos $v(x, t) = t - \int_0^x \frac{y \, dy}{K(y)}$ la ecuación (5.65) se convierte en:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^t \left[c(s(\tau), \tau) \left(\tau - \int_0^{s(\tau)} \frac{y \, dy}{K(y)} \right) s'(\tau) - \right. \\ &- s'(\tau) (c(s(\tau), \tau) + q) \left(\tau - \int_0^{s(\tau)} \frac{y \, dy}{K(y)} \right) + c(s(\tau), \tau) s(\tau) \left. \right] d\tau + \\ &+ \int_{s(t)}^0 c(x, t) \left(t - \int_0^x \frac{y \, dy}{K(y)} \right) dx + K(0) \int_t^0 \tau c_x(0, \tau) d\tau, \end{aligned} \quad (5.68)$$

operando algebraicamente llegamos a que:

$$\begin{aligned} 0 &= -K(0) \int_0^t \tau c_x(0, \tau) d\tau - q \int_0^t \tau s'(\tau) d\tau + q \int_0^t s'(\tau) \int_0^{s(\tau)} \frac{y \, dy}{K(y)} d\tau + \\ &+ \int_0^t c(s(\tau), \tau) s(\tau) d\tau + \int_0^{s(t)} c(x, t) \int_0^x \frac{y \, dy}{K(y)} dx - \\ &- t \int_0^{s(t)} c(x, t) dx. \end{aligned} \quad (5.69)$$

Supongamos que $\{c(x, t), s(t)\}$ es una solución de **PS** para todo $T > 0$. El siguiente lema muestra que asintóticamente la concentración de solvente tiende a cero (en forma integral) cuando t tiende a infinito.

Lema 5.8

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^{s(t)} c(x, t) dx = 0. \quad (5.70)$$

Demostación. De la expresión (5.69) tenemos que:

$$\begin{aligned} \int_0^{s(t)} c(x, t) dx &= -\frac{K(0)}{t} \int_0^t \tau c_x(0, \tau) d\tau - \frac{q}{t} \int_0^t \tau s'(\tau) d\tau + \\ &+ \frac{q}{t} \int_0^t s'(\tau) \int_0^{s(\tau)} \frac{y dy}{K(y)} d\tau + \frac{1}{t} \int_0^t c(s(\tau), \tau) s(\tau) d\tau \\ &+ \frac{1}{t} \int_0^{s(t)} c(x, t) \int_0^x \frac{y dy}{K(y)} dx \\ &\leq -\frac{K(0)}{t} \int_0^t \tau c_x(0, \tau) d\tau + \frac{qs_\infty^3}{6tK_0} + \\ &+ \frac{1}{t} \int_0^t c(s(\tau), \tau) s(\tau) d\tau + \frac{s_\infty^3}{6tK_0}, \end{aligned} \quad (5.71)$$

donde $K_0 = \min_{x \in [0, hG/q]} K(x) > 0$. De este modo, para probar el lema es suficiente demostrar que todos los términos de la derecha en (5.71) tienden a cero cuando t tiende a infinito.

De la ecuación (5.56) tenemos que:

$$\int_0^t c(0, \tau) d\tau \leq \int_0^t g(\tau) d\tau \leq G. \quad (5.72)$$

Luego, usando la ecuación (5.67) y el hecho de que la frontera libre tiende a s_∞ , podemos ver que:

$$\begin{aligned} \int_0^t c(s(\tau), \tau) s(\tau) d\tau &\leq s_\infty \int_0^t c(s(\tau), \tau) d\tau \\ &\leq s_\infty \int_0^t c(0, \tau) d\tau \leq s_\infty G, \end{aligned} \quad (5.73)$$

entonces el tercer término de la desigualdad (5.71) tiende a cero cuando $t \rightarrow \infty$.

Por otro lado, de la ecuación (5.56):

$$-K(0) \int_0^t c_x(0, \tau) d\tau = \int_0^{s(t)} (q + c(x, t)) dx > 0 \quad (5.74)$$

y

$$-K(0) \int_0^\infty c_x(0, \tau) d\tau = h \left(G - \int_0^\infty c(0, \tau) d\tau \right) < \infty. \quad (5.75)$$

Entonces usando (5.74), (5.75) y la regla de L'Hôpital llegamos a:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \tau c_x(0, \tau) d\tau = \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\int_0^t c_x(0, \tau) d\tau - \frac{1}{t} \int_0^t \left(\int_0^\tau c_x(0, \eta) d\eta \right) d\tau \right] = 0. \quad (5.76)$$

Entonces el primer término de (5.71) tiende a cero cuando t tiende a infinito. ■

Lema 5.9 *Supongamos que $f(c) = \alpha c$, con $\alpha > 0$. Entonces vale que:*

$$h \int_0^{s_\infty} \int_0^x \frac{dy}{K(y)} dx + \left(\frac{h}{q\alpha} + 1 \right) s_\infty = \frac{h}{q} G. \quad (5.77)$$

Demostración. Cancelando $\int_0^t c(0, \tau) d\tau$ de las ecuaciones (5.56) y (5.67) obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{q}{h}s(t) + q \int_0^t \int_0^z \frac{dy}{K(y)} dz &= -\frac{1}{h} \int_0^t c(x, t) dx + \int_0^t g(\tau) d\tau - \\ &- \frac{1}{\alpha}s(t) - \int_0^{s(t)} c(x, t) \int_0^x \frac{dy}{K(y)} dx \end{aligned} \quad (5.78)$$

Tomando el límite cuando t tiende a infinito obtenemos:

$$\frac{q}{h}s_\infty + q \int_0^{s_\infty} \int_0^x \frac{dy}{K(y)} dx = -\frac{1}{\alpha}s_\infty + G. \quad (5.79)$$

■

El lema siguiente da una cota óptima para s_∞ para cuando $K = K(x)$.

Lema 5.10 *El número*

$$z = \sup_f s_\infty \quad (5.80)$$

satisface

$$h \int_0^z \int_0^x \frac{dy}{K(y)} dx + z = \frac{h}{q}G. \quad (5.81)$$

Demostración. Como en (5.78):

$$\begin{aligned} \frac{q}{h}s(t) + q \int_0^t \int_0^z \frac{dy}{K(y)} dz &= -\frac{1}{h} \int_0^t c(x, t) dx + \int_0^t g(\tau) d\tau - \\ &- \int_0^t c(s(\tau), \tau) d\tau - \int_0^{s(t)} c(x, t) \int_0^x \frac{dy}{K(y)} dx \leq \\ &\leq \int_0^t g(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (5.82)$$

Luego

$$s_\infty + h \int_0^{s_\infty} \int_0^x \frac{dy}{K(y)} dx \leq \frac{h}{q}G. \quad (5.83)$$

Entonces, la ecuación (5.81) se deduce de la ecuación (5.77) tomando el límite $\alpha \rightarrow \infty$. ■

5.3. Resultados numéricos.

Ahora mostraremos numéricamente los resultados teóricos de la sección anterior. Supondremos que $g(t) = e^{-2t}$, que el umbral de concentración es $q = 0.3$ y que la constante de transferencia de masa es $h = 10$. Así por ejemplo la cota sobre f y K del teorema (5.7) asume el valor:

$$s_\infty = \frac{h}{q}G \approx 16.667. \quad (5.84)$$

Consideremos primero el caso $K = K(x)$. Como se puede ver en la figura 5.3, no es posible alcanzar el supremo variando f o K individualmente. Para el caso $K(x) = 30x + 1$ (gráfica derecha) ocurre que todas las $s(t)$ están acotadas por el valor 6.807, que es el que se obtiene de despejar z en (5.81). Como se muestra en la figura 5.2, si se toma

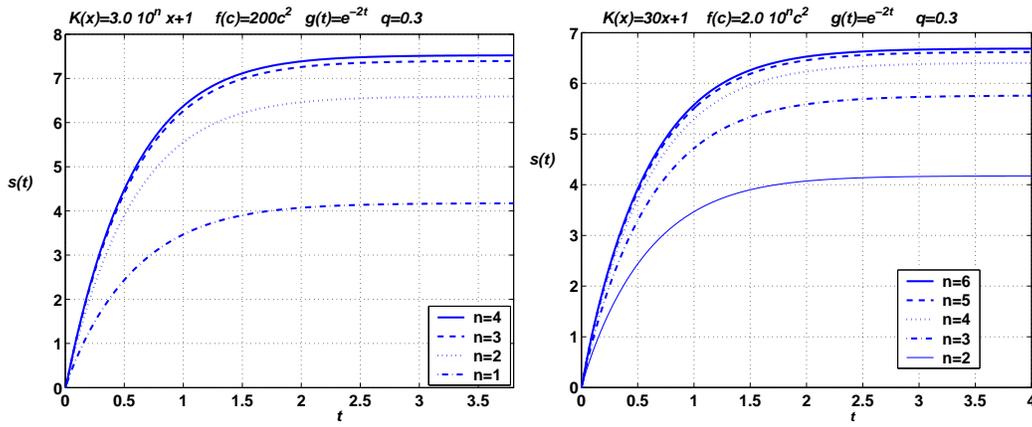


Figura 5.1: Caso $K = K(x)$, para varias funciones K y f . Izquierda: f se fija, K se varía. Derecha: K está fijo, f se varía.

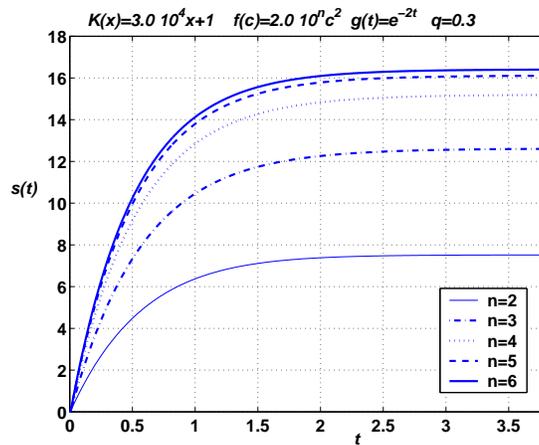


Figura 5.2: Caso $K = K(x)$. $K(x)$ es grande y se varía f

$K = K(x)$ lo suficientemente grande y dejamos que f tienda a infinito, se puede alcanzar la cota $s_\infty = hG/q \approx 16.667$.

Claramente, los resultados numéricos concuerdan con el teorema 5.7.

Ahora consideremos un coeficiente de difusión no-lineal $K(c) = A/c$ con $A > 0$.

Como se puede ver en la figura (5.3) el supremo cambiará si tomamos supremo variando f y K .

En la siguiente figura podemos demostrar otra vez numéricamente que la cota (5.59) se cumple sobre todas las funciones K y f (es suficiente tomar la función f con pendiente grande).

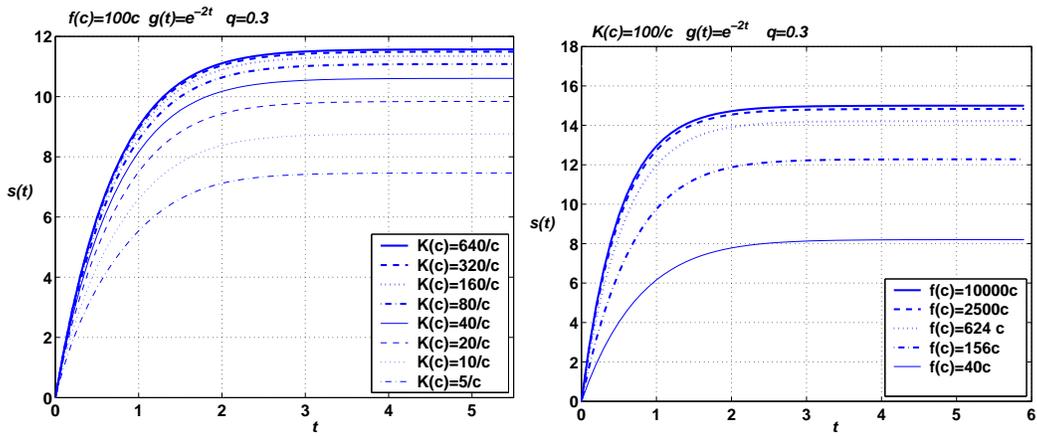


Figura 5.3: Caso $K = K(c)$, para varias funciones K y varias f .

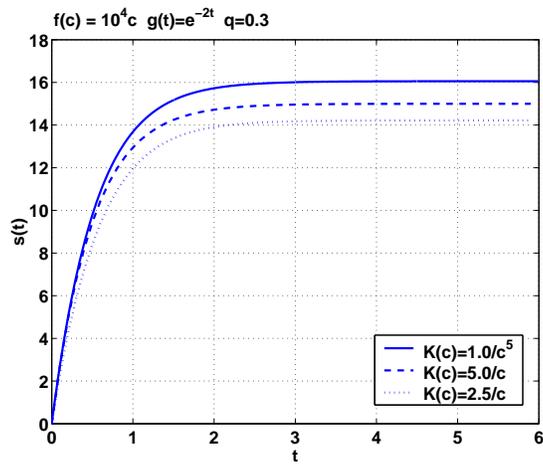


Figura 5.4: f es grande y $K(c)$ se varía

6. Conclusión.

Se ha estudiado el problema de frontera libre 1-D de la difusión de un solvente en polímero vídrioso, bajo una condición de contorno del tipo convectiva. En la sección 2 se pudo acotar

$$s_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} s(t)$$

por una constante que es independiente de la función f . Es más, en la sección 5 se pudo encontrar una acotación que no depende incluso de la conductividad $K[c]$ del material. Estas acotaciones de s_∞ son importantes, porque al no depender del polímero (no dependen de f ni de $K[c]$), pueden ser usadas en aplicaciones reales, donde el material en estudio sea desconocido o esté siendo testeado.

El resultado de la sección 3 es interesante porque prueba la equivalencia entre las condiciones de contorno $c(0, t) = g(t)$ y $c_x(0, t) = h(c(0, t) - g(t))$ cuando $h \rightarrow \infty$. En muchas aplicaciones el parámetro h puede asumir valores muy grandes y los métodos numéricos que calculan $c(x, t)$ y $s(t)$ se pueden tornar inestables si se considera a h finito. Además, si para h grande, se usa el método numérico con la condición $c(0, t) = g(t)$, se tiene la seguridad que el error que se cometa en esta aproximación está uniformemente distribuido en x y t , puesto que la convergencia es uniforme cuando $h \rightarrow \infty$.

Los métodos numéricos que aparecen en [13] se pudieron adaptar al problema con condición de contorno convectiva, excepto el caso de difusión no-lineal, en el que se ideó un algoritmo totalmente nuevo. Estos permitieron verificar todos los resultados teóricos mencionados.

Como trabajo futuro, se podría estudiar si es posible generalizar las acotaciones nombradas al caso 3-D y ver si se cumple también la convergencia uniforme cuando $h \rightarrow \infty$. La frontera libre sería ahora una superficie y es aconsejable la utilización de elementos finitos para una aproximación numérica de la solución.

7. Apéndice.

■ Principio del Máximo.

Sea $D_T = \{(x, t) : s_1(t) < x < s_2(t), 0 < t \leq T\}$, donde s_1 y s_2 son funciones continuas. El conjunto

$$B_T = \{(s_1(t), t) : t \in [0, T]\} \cup \{(s_2(t), t) : t \in [0, T]\} \cup \{(x, 0) : s_1(0) \leq x \leq s_2(0)\},$$

se denomina *frontera parabólica* de D_T y cualquier solución de $u_{xx} = u_t$ continua en $D_T \cup B_T$ cumple que:

$$\max_{D_T \cup B_T} u = \max_{D_T} u = \max_{B_T} u. \quad (\text{Principio del Máximo Débil})$$

Además ocurre que

$$\inf_{B_T} u < u < \sup_{B_T} u \quad \text{en } D_T$$

o u es constante en $D_T \cup B_T$ (Principio del Máximo Fuerte).

■ Lema de Hopf.

Si s_1 es Lipschitz superiormente y s_2 es Lipschitz inferiormente. Sea u solución de la ecuación del calor de D_T , continua en $D_T \cup B_T$ y no idénticamente constante en cada D_t ($0 < t \leq T$). Si u asume su valor máximo en $(s_2(t_0), t_0)$, $t_0 > 0$, entonces:

$$\liminf_{x \nearrow s_2(t_0)} \frac{u(x, t_0) - u(s_2(t_0), t_0)}{x - s_2(t_0)} > 0.$$

Si en este caso, u_x existe en $(s_2(t_0), t_0)$, entonces

$$u_x(s_2(t_0), t_0) > 0.$$

Si u asume su valor mínimo en $(s_2(t_0), t_0)$, $t_0 > 0$, entonces:

$$\limsup_{x \nearrow s_2(t_0)} \frac{u(x, t_0) - u(s_2(t_0), t_0)}{x - s_2(t_0)} < 0.$$

Si en este caso, u_x existe en $(s_2(t_0), t_0)$, entonces

$$u_x(s_2(t_0), t_0) < 0.$$

Si u asume su valor máximo en $(s_1(t_0), t_0)$, $t_0 > 0$, entonces:

$$\limsup_{x \searrow s_1(t_0)} \frac{u(x, t_0) - u(s_1(t_0), t_0)}{x - s_1(t_0)} < 0.$$

Si en este caso, u_x existe en $(s_1(t_0), t_0)$, entonces

$$u_x(s_1(t_0), t_0) < 0.$$

Si u asume su valor mínimo en $(s_1(t_0), t_0)$, $t_0 > 0$, entonces:

$$\liminf_{x \searrow s_1(t_0)} \frac{u(x, t_0) - u(s_1(t_0), t_0)}{x - s_1(t_0)} > 0.$$

Si en este caso, u_x existe en $(s_1(t_0), t_0)$, entonces

$$u_x(s_1(t_0), t_0) > 0.$$

■ **Teorema del Punto Fijo de Banach.**

Sea V un espacio vectorial normado y completo, $X \subset V$ un conjunto cerrado y $F : X \rightarrow X$ una contracción, o sea, existe un $\alpha \in [0, 1)$ tal que:

$$\|F(x) - F(y)\| \leq \alpha \|x - y\|, \quad \forall x, y \in X.$$

Entonces existe un $z \in X$ tal que $F(z) = z$.

■ **Teorema del Punto Fijo de Schauder.**

Sea V un espacio vectorial normado y completo, y $X \subset V$ un conjunto convexo y compacto. Si el operador $F : X \rightarrow X$ satisface:

$$\|F(x) - F(y)\| \leq M \|x - y\|, \quad \forall x, y \in X$$

para algún $M \in (0, +\infty)$, entonces existe $z \in X$ tal que $F(z) = z$.

■ **Teorema de Ascoli-Arzelá.**

Una sucesión de funciones $\{f_n\}$ se dice equicontinua en D si para cada $x_0 \in D$ y para todo $\epsilon > 0$ existe un $\delta(x_0, \epsilon) > 0$ tal que para todo n se cumpla:

$$|f_n(x) - f_n(x_0)| < \epsilon, \quad \forall x \in D \text{ con } |x - x_0| < \delta.$$

Si $\{f_n\}$ es una sucesión de funciones definidas en un dominio compacto, equicontinuas y uniformemente acotadas, entonces existe una subsucesión que converge uniformemente en D .

Referencias

- [1] **G. Lamé** y **B.P. Clapeyron**, *Memoire sur la Solidification par Refroidissement d'un Globe Liquide.*, Ann. Chimie Physique, 47, pág. 250-256 (1831).
- [2] **J. Stefan**, *Ueber die Theorie der Eisbildung, Insbesondere ueber die Eisbildung im Polarmeer.*, Zit. Akad. Wiss. Wien, Math. Cl., 98, pág. 388-395 (1889).
- [3] **J. Stefan**, *Über Einige Probleme der Theorie der Wärmeleitung.*, Zit. Akad. Wiss. Wien, Math. Cl., 98, pág. 473-484 (1889).
- [4] **J. Stefan**, *Über die Diffusion von Säuren und Basen Gegen Einander.*, Zit. Akad. Wiss. Wien, Math. Cl., 98, pág. 616-634 (1889).
- [5] **J. Stefan**, *Über die Verdampfung und die Auflösung als Vorgänge der Diffusion*, Zit. Akad. Wiss. Wien, Math. Cl., 98, pág. 1418-1442 (1889).
- [6] **J. Stefan**, *Ueber die Theorie der Einsbildung*, Monatshefte Mat. Phys., 1, pág. 1-6 (1890).
- [7] **J. Stefan**, *Ueber die Theorie der Einsbildung, Insbesondere ueber die Einsbildung im Polarmeere*, Ann. Physik. Chemie., 42, pág. 269-286 (1891).
- [8] **J.C. Reginato**, **D.A. Tarzia**, **A. Cantero** *Un Modelo Mejorado para el Crecimiento de Raíces de Cultivos*, Anales AFA, vol. 1, pág. 351-354 (1989).
- [9] **M. Primicerio**, **I. Rubinstein**, **B. Zaltzman** *Electrodiffusional Free Boundary Problem, in a Bipolar Membrane (Semiconductor Diode), at a Reverse Bias for Constant Current*, Quaterly of Applied Mathematics, vol. 52, No. 4, pág. 637-659 (1999).
- [10] **E. Comparini**, *A One-Dimensional Bingham Flow*, Journal of Mathematical Analysis and Application, vol. 169, No. 1, pág. 127-139 (1992).
- [11] **S. Cui** y **A. Friedman** *A Hyperbolic Free Boundary Problem Modelling Tumor Growth*, Interfaces and Free Boundaries, vol. 5, pág. 159-181 (2003).
- [12] **G. Astarita** y **G. C. Sarti**, *A Class of Mathematical Models for Sorption of Swelling Solvents in Glassy Polymers*, Polymer Engineering Science, vol. 18, No. 5, pág. 388-395 (1978).
- [13] **A. Fasano** , **G. H. Meyer** y **M. Primicerio**, *On a Problem in the Polymer Industry: Theoretical and Numerical Investigation of Swelling*, SIAM Journal of Mathematical Analysis, vol. 17, No. 4, pág. 945-960 (1986).
- [14] **A. Fasano** y **M. Primicerio**, *Free Boundary Problems for Nonlinear Parabolic Equations with Nonlinear Free Boundary Conditions*, Journal of Mathematical Analysis and Applications, vol. 72, pág. 247-273 (1979).
- [15] **A. Comparini** y **R. Ricci**, *On the Swelling of a Glassy Polymer in Contact with a Well-stirred Solvent*, Mathematical Methods in the Applied Sciences, vol. 7, pág. 238-250 (1985).

- [16] **A. Comparini, R. Ricci y C. Turner**, *Penetration of a Solvent into a Non-Homogeneous Polymer*, *Meccanica*, vol 23, pág. 75-80 (1988).
- [17] **D. Andreucci y R. Ricci**, *A Free Boundary Problem Arising from Sorption of Solvent in Glassy Polymers*, *Quarterly of Applied Mathematics*, vol. 44, pág. 649-657 (1987).
- [18] **Phan Huu San y Nguyen Dinh Tri**, *On a free boundary problem arising in the polymer industry*, *Acta Mathematica Vietnamica*, vol. 17, No. 2, pág. 41-52 (1992).
- [19] **M. Gaudiano, C. Turner y T. Godoy**, *Free boundary problems in Industry: Diffusion of a solvent into a polymer*,
<http://www.famaf.unc.edu.ar/series/pdf/pdfAMat/AMat74.pdf>
- [20] **M. Gaudiano, C. Turner y T. Godoy**, *On a Convective Condition in the Diffusion of a Solvent into a Polymer*, *Computational and Applied Mathematics*, vol.26, nro. 3, pág. 309-321 (2007).
- [21] **M. Gaudiano, G. Torres y C. Turner**, *A Free Boundary Problem for the Diffusion of a Solvent into a Polymer with Non-Constant Conductivity Coefficient*,
<http://www.famaf.unc.edu.ar/series/pdf/pdfAMat/AMat81.pdf>
- [22] **M. Gaudiano, G. Torres y C. Turner**, *A Free Boundary Problem for the Diffusion of a Solvent into a Polymer with Non-Constant Conductivity Coefficient*, *Mathematics and Computers in Simulation* (review positivo para publicación, 2008).
- [23] **M. Gaudiano, C. Turner y T. Godoy**, *On the Limit Behavior in a Free Boundary Model for the Diffusion in a Polymer*, *Rendiconti dell'Istituto di Matematica dell'Università di Trieste* (aceptado para publicación, 2008).
- [24] **M. Gaudiano y C. Turner**, *Difusión de un Solvente en un Polímero Vidrioso con una Condición de Contorno del Tipo Creciente en el Tiempo*, *MAT-Serie A*, nro. 10, pág. 1-9 (2005).
- [25] **J. R. Cannon**, *The One-Dimensional Heat Equation*, *Encyclopedia of Mathematics and its Applications*, vol.23 (1984).
- [26] **O. A. Ladyženskaya, V. A. Solonnikov y N. N. Ural'ceva**, *Linear and Quasilinear Equations of Parabolic Type*, *American Mathematical Society Translations* 23, Providence, RI (1968).
- [27] **G. M. Lieberman**, *Time-Periodic Solutions of Linear Parabolic Differential Equations*, *Communications in Partial Differential Equations*, vol. 24, N° 3 & 4, 631-663 (1999).
- [28] **G. H. Meyer**, *One-Dimensional Parabolic Free Boundary Problems*, *SIAM Review*, vol. 19, No. 1, 17-33 (1977).
- [29] **A. Friedman**, *Partial Differential Equations of Parabolic Type*, *Krieger Pub Co*, (1983).

- [30] **M. H. Protter, H. F. Weinberger** *Maximum Principles in Differential Equations*, Springer-Verlag, (1984).