Solución de una ecuación de difusión no lineal en una dimensión para un coeficiente de difusión con dependencia lineal de la concentración

Thara Caba[a], Gabriel Barreiro[b] y Vladimir Pérez[c].

Instituto de Física, Universidad Autónoma de Santo Domingo.

Santo Domingo, República Dominicana.

[a]100470273@est.uasd.edu.do
[b]100427354@est.uasd.edu.do
[c]dperez42@uasd.edu.do

Resumen

La difusión es un proceso físico irreversible con mucha importancia en la ciencia e ingeniería, específicamente la difusión es un proceso que interviene en la síntesis química de materiales, en dopaje de metales, en sistemas bioquímicos, diseño de fármacos, entre otras aplicaciones. En esta investigación se estudia el fenómeno de la difusión no lineal en donde el coeficiente de difusión depende linealmente de la concentración. En este estudio se utilizan métodos analíticos, métodos numéricos y simulaciones de dinámica molecular. En este cartel se presenta el progreso alcanzado en la investigación.

Introdución

Considere la ecuación de difusión

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[D(\psi)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right] \tag{1}$$

en dónde $\psi(x,t)$ es la concentración de una sustancia que depende de la posición x y el tiempo t; y $D(\psi)$ es el coeficiente de difusión. Nótese que si D fuese una constante estuviéramos el caso de una ecuación de difusión lineal tradicional.

En esta investigación estamos interesados en el problema la función de difusión depende linealmente de la concentración, es decir:

$$D(\psi) = D_0 + D_1\psi$$

En donde D_0 y D_1 son dos constantes. Expandiendo la ecuación 1 obtenemos:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = D_0\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2}D_1\frac{\partial^2\psi^2}{\partial x^2}$$

Finalmente, esta ecuación se puede reescribir de una forma simplificada

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\delta}{2}\frac{\partial^2\psi^2}{\partial x^2} \tag{2}$$

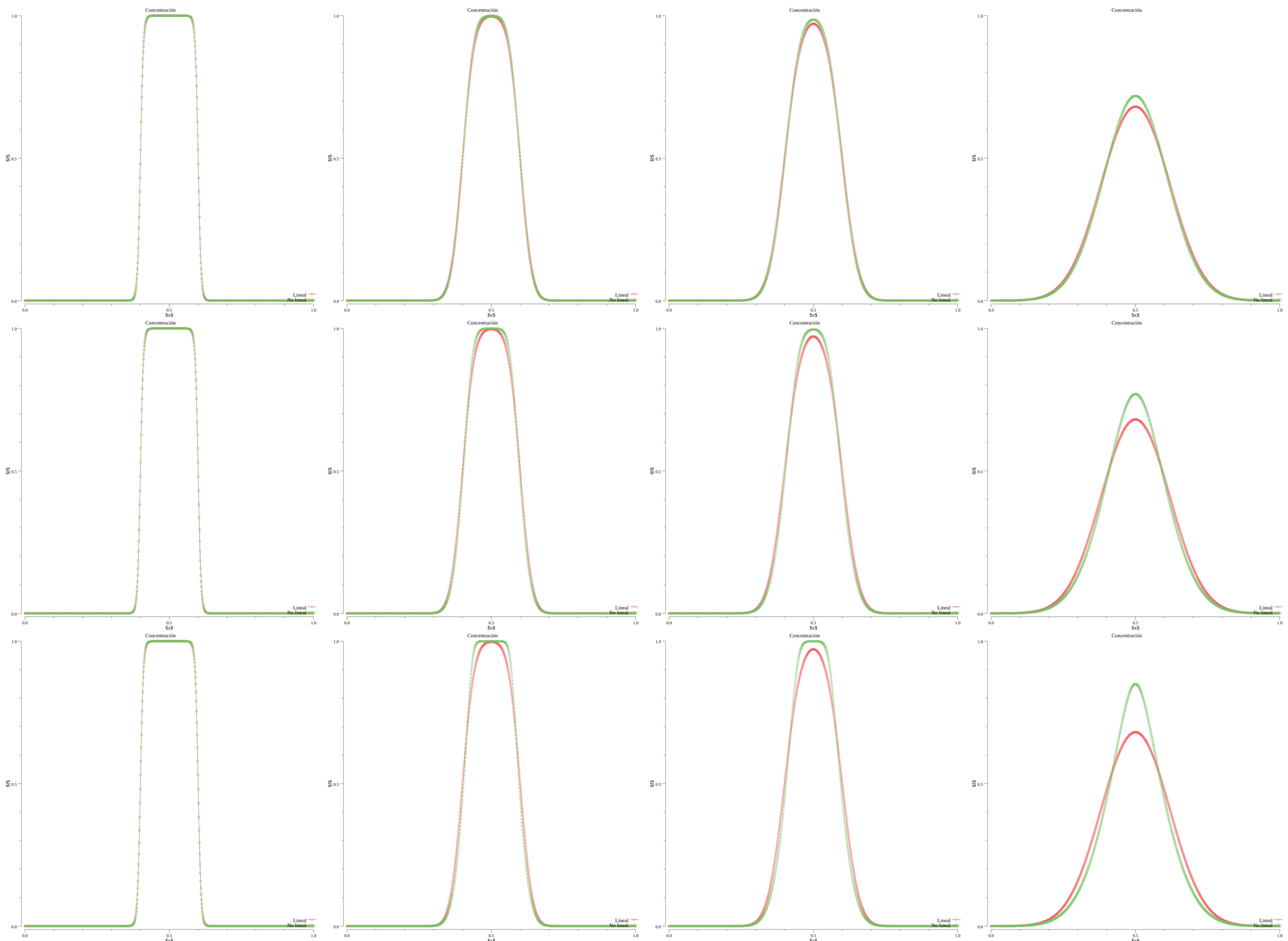
en donde hemos transformado la ecuación a una sin unidades y $\delta \equiv D_1/D_0$. El propósito primordial de esta investigación es determinar el comportamiento de la difusión de acuerdo con el valor de δ.

Metodología

Para solucionar la ecuación (2) hemos discretizado la función ψ para utilizar métodos numéricos de diferenciación e integración. Para diferenciación se ha usado la diferenciación numérica con tres puntos y para la integración se utilizó la integración numérica trapezoidal. Con estos métodos se implementó un programa de computadora que solucionó de manera simultánea la ecuación diferencial lineal (es decir, con $\delta = 0$) y la ecuación diferencial no lineal (ecuación 2) y produjo varios gráficos a diferente tiempo.

Resultados Preliminares

Solución de la ecuación de difusión en distintos tiempos ($t = 0$, $t = 0.0001$, $t = 0.0002$ y $t = 0.001$) para $\delta = -0.25$, $\delta = -0.50$ y $\delta = -0.75$. La línea roja repreenta la solución lineal y la línea verde la solución lineal.



A partir de estas soluciones vemos que a medida que aumenta el valor de δ, disminuye la rapidez con la que la difusión ocurre, lo cual no es sorprendente debido a que δ es negativo. Por otro lado, observamos que la forma de $\psi(x,t)$ parece permanecer igual o muy parecida, lo cual sugiere que el efecto no lineal parece solo afectar el coeficiente de difusión.

Conclusiones Preliminares

- La difusión no lineal disminuye a medida que δ disminuye.
- La función ψ no lineal tiene una forma muy parecida a ψ lineal. Esta propiedad será estudiada con mayor detenimiento.

Referencias

[1] D Duran. *Numerical Methods for fluid mechanics - With Applications to Geophysics.* 2nd edition, 2010.

[2] Eddy Estevez. Dinámica molecular de la difusión de un líquido lennard-jones. 2018.

[3] Hans Petter Langtangen Svein Linge. *Finite Difference Computing with PDEs - A Modern Software Approach.* 1st edition, 2016.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer al **Decanato de la Facultad de Ciencias** de la Universidad Autónoma de Santo Domingo por el apoyo económico para poder participar en este evento. También al Ministerio de Educación Superior, Ciencia y Tecnolgía por la ayuda ofrecida a través de su programa de **Becas Nacionales**.