Ecuación de Transporte

Pablo Brianese

31 de julio de 2021

1. La ecuación de transporte escalar

La ecuación de transporte se lee

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla(D\nabla c) - \nabla \cdot (\vec{v} \cdot c) + S \tag{1}$$

- c es la variable de interés (concentración de especie para el transporte de masa, temperatura para el transporte de calor);
- D es el coeficiente de difusión, este puede ser propio de la especie en el caso del movimiento de partículas o referirse a la difusividad térmica en el caso del transporte de calor;
- \vec{v} es el campo de velocidades con que se mueve la cantidad. Es una función del tiempo y del espacio. Por ejemplo, en el caso de la advección, c podría ser la concentración de sal en un río, y luego \vec{v} sería la velocidad del flujo de agua como función del tiempo y la ubicación. En otro ejemplo, c podría ser la concentración de pequeñas burbujas en un lago calmo, y luego \vec{v} sería la velocidad de las burbujas subiendo hacia la superficie por flotación dependiendo del tiempo y de la ubicación de la burbuja.
- S describe fuentes o sumideros para la cantidad c. Por ejemplo, para una especie química, S>0 quiere decir que una reacción química está creando más sustancia de esta especie, y S<0 quiere decir que una reacción química está destruyendo la especie. Para el transporte de calor, S>0 podría ocurrir si se genera energía térmica mediante fricción.

El lado derecho de la ecuación es la suma de tres contribuciones.

■ La primera, $\nabla \cdot (D\nabla c)$, describe la difusión. Imaginemos que c es la concentración de un químico. Cuando la concentración es baja en un lugar comparada con el área que lo rodea (es decir, se trata de un mínimo local de la concentración), la sustancia se difundirá desde los alrededores hacia en interior de dicho lugar, entonces la concentración aumentará. De forma recíproca, si en este lugar la concentración es alta en comparación con los alrededores (es decir, se trata de un maximo local de la concentración),

entonces la substancia se difundirá hacia el exterior de dicho lugar y la concentración decrecerá. La difusión neta es proporcional al Laplaciano de la concentración si la difusividad D es constante.

- La segunda contribución, $-\nabla \cdot (\vec{v} \cdot c)$, describe la convección (o advección). Imaginemos estar parados sobre el banco de un río, midiendo la salinidad del agua (cantidad de sal) cada segundo. Río arriba, alguien arroja un balde de sal dentro del río. Al rato, veríamos aumentar la salinidad súbitamente, luego caer, mientras pasa la zona de agua salada. Por lo tanto, la concentración en una ubicación dada puede cambiar por el flujo.
- La contribución final, S, describe la creación o destrucción de una cantidad. Y no requiere de mayor explicación.

2. La ecuación de difusión

En nuestro caso, tanto \vec{v} como S son nulos. Además D es constante en el tiempo y no varía en el espacio. Luego, debemos resolver la ecuación de difusión

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\Delta c = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}$$
 (2)

Donde c = c(x, y, t) es una función de tres variables x, y, t. Aquí x, y son las variables espaciales, de modo tal que $x \in [0, L_x], y \in [0, L_y]$; y t es la variable temporal, de modo tal que $t \ge 0$. Asumiremos una condición inicial c(x, y, 0) como dada. Finalmente, impondremos condiciones de borde de Newmann homogéneas para nuestra solución.

La ecuación de difusión es idéntica a la ecuación del calor. Para resolverla, seguimos una técnica de resolución que fue descubierta por Joseph Fourier y publicada en *Théorie analytique de la chaleur* el año 1822. El método de separación de variables. Buscaremos soluciones s a la ecuación de difusión (2), nonulas, que satisfagan las condiciones de borde pero que tengan la siguiente propiedad: s es un producto en el cual la dependencia respecto de x, y, t está separada. Esto es:

$$s(x, y, t) = X(x)Y(y)T(t)$$
(3)

En este caso $s \neq 0$ implica $X \neq 0$, $Y \neq 0$, $T \neq 0$, también $XY \neq 0$, $YT \neq 0$, $XT \neq 0$. Luego, substituyendo la fórmula de separación (3) para s en la ecuación de difusión (2) se deriva

$$\frac{\partial}{\partial t}XYT = D\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}XYT + \frac{\partial^2}{\partial y^2}XYT\right) \tag{4}$$

$$XYT' = D\left(X''YT + XY''T\right) \tag{5}$$

$$\frac{T'}{DT} = \frac{X''Y + XY''}{XY} \tag{6}$$

$$\frac{T'}{DT} = \frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} \tag{7}$$

Dado que el lado derecho de (7) depende solo de las variables espaciales y el lado izquierdo solo del tiempo, ambos lados son iguales a un valor constante $\lambda \in \mathbb{R}$. De este modo

$$\frac{T'}{DT} = \frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} = \lambda \tag{8}$$

Esto nos dice, por un lado, que la función T, satisfaciendo la ecuación diferencial $T' = \lambda DT$, es de la forma

$$T(t) = e^{\lambda Dt} \tag{9}$$

Por otro lado, derivando a ambos lados de esta ecuación (8) con respecto a x, y, se deduce

$$\frac{d}{dx}\frac{X''}{X} = \frac{d}{dy}\frac{Y''}{Y} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{X''}{X} = \alpha \qquad \frac{Y''}{Y} = \beta \tag{10}$$

para ciertas constantes $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Resulta entonces que $\alpha + \beta = \lambda$, y nos quedamos con un sistema de ecuaciones

$$T = e^{(\alpha + \beta)Dt} \qquad \qquad X'' = \alpha X \qquad \qquad Y'' = \beta Y \tag{11}$$

Que nos darán forma final de la solución s, después de fijar las condiciones de borde

De este modo obtenemos una familia de soluciones separadas $\{s_i\}_i$ que nos permite escribir la solución general de la ecuación de difusión, c, como una serie

$$c = \sum_{i} D_{i} s_{i} \qquad \text{donde} \qquad D_{i} = \frac{\int_{0}^{L_{y}} \int_{0}^{L_{x}} c(x, y, 0) s_{i}(x, y, 0) dx dy}{\int_{0}^{L_{y}} \int_{0}^{L_{x}} s_{i}(x, y, 0)^{2} dx dy}$$
(12)

3. Condiciones de borde de Neumann

Buscamos soluciones separadas nonulas s=XYT. Imponemos las condiciones de borde de Neumann para todo $x\in[0,L_x],\,y\in[0,L_y],\,t\geq0$

$$\frac{\partial s}{\partial x}(0, y, t) = \frac{\partial s}{\partial x}(L_x, y, t) = \frac{\partial s}{\partial y}(x, 0, t) = \frac{\partial s}{\partial x}(x, L_y, t) = 0$$
 (13)

Substituyendo s = XYT en estas condiciones de borde, se deduce

$$X'(0)YT = X'(L_x)YT = XY'(0)T = XY'(L_y)T = 0$$
(14)

Al ser $s \neq 0$, resultan ser nonulas las funciones XY, YT, XT. Luego

$$X'(0) = X'(L_x) = Y'(0) = Y'(L_y) = 0$$
(15)

Llegamos así a condiciones de borde de Dirichlet para funciones U=X',V=Y'. Además satisfacen las ecuaciones diferenciales $U''=\alpha U,\,V''=\beta V,\,$ como puede verificarse derivando las ecuaciones (11). Nuestra principal herramienta para encontrar las soluciones s es hallar estas funciones s0, s1, s2 usando el siguiente lema

Lema 1. Si U = U(u) es una función nonula definida en un intervalo [0, L] que satisface las condiciones de borde de Dirichlet U(0) = U(L) = 0, y la ecuación diferencial $U'' = \gamma U$ para cierta constante $\gamma \in \mathbb{R}$. Entonces existe un entero positivo k tal que $\gamma = -\pi^2 k^2 / L^2$, y U es de la forma $U = \operatorname{sen}(n\pi u/L)$.

Demostración. La ecuación característica de $U'' - \gamma U = 0$ es $r^2 - \gamma = 0$, y su discriminante es 4γ . Debemos considerar tres casos: $\gamma > 0$ (el discriminante es positivo); $\gamma = 0$ (el discriminante es nulo); $\gamma < 0$ (el discriminante es negativo). Podremos descartar aquellos que resulten en una solución nula U=0, porque llevan a una contradicción con nuestra hipótesis $U \neq 0$. En el primer caso, $\gamma > 0$, la solución de la ecuación diferencial es de la forma $U = C_1 e^{\sqrt{\gamma}u} + C_2 e^{-\sqrt{\gamma}u}$. Las condiciones de borde de Dirichlet U(0) = U(L) = 0 implican que $C_1 + C_2 =$ $C_1 e^{\sqrt{\gamma}L} + C_2 e^{-\sqrt{\gamma}L} = 0$. Luego $C_1 = C_2 = 0$. Podemos descartar este caso porque resulta U=0. En el segundo caso, $\gamma=0$, la solución a la ecuación diferencial es de la forma $U = C_1 u + C_2$. Las condiciones de borde de Dirichlet U(0) = U(L) = 0 implican que $C_2 = C_1L + C_2 = 0$. Luego $C_1 = C_2 = 0$. Podemos descartar este caso porque resulta U=0. En el tercer y último caso, $\gamma < 0$, la solución a la ecuación diferencial es de la forma $U = C_1 \cos(\sqrt{-\gamma}u) +$ $C_2\sin(\sqrt{-\gamma}u)$. Las condiciones de borde de Dirichlet U(0)=U(L)=0 implican que $C_1 = C_1 \cos(\sqrt{-\gamma}L) + C_2 \sin(\sqrt{-\gamma}L) = 0$. Luego $C_2 \sin(\sqrt{-\gamma}L_x) = 0$. La alternativa $C_2 = 0$ nos da nuevamente una solución nula U = 0. Por otro lado, la alternativa $C_2 \neq 0$, nos dice que $\sin(\sqrt{-\gamma}L) = 0$, de aquí resulta $\sqrt{-\gamma}L = n\pi$ para un entero positivo n. Luego $\gamma = -n^2\pi^2/L^2$, y $U(u) = C_2\sin(n\pi u/L)$.

Por otra parte, este no siempre aplica. Puede pasar que X'=0 o Y'=0, y tenemos que recorrer cada posibilidad.

Supongamos X'=Y'=0. En este caso, prestando atención al sistema de ecuaciones (11), se tiene $\alpha=\beta=0$, y la solución s es de la forma

$$s(x, y, t) = 1 \tag{16}$$

Supongamos $X' \neq 0$, Y' = 0. En este caso, la función Y es de la forma Y = 1. Por su parte, U = X' entra en las condiciones del lema 1. Esto implica que $\alpha = -n^2\pi^2/L_x^2$, donde n es un entero positivo que parametriza la solución, y U es de la forma $U = \text{sen}(n\pi x/L_x)$. Se deduce que X es de la forma $X = \cos(n\pi x/L_x)$. Finalmente, T es de la forma $T = \exp(-(\pi^2 n^2/L_x^2)Dt)$. Por lo tanto, la solución s está parametrizada por un entero positivo n y es de la forma

$$s_n(x, y, t) = \cos\left(n\pi \frac{x}{L_x}\right) \exp\left(-\pi^2 \frac{n^2}{L_x^2} Dt\right)$$
 (17)

Supongamos $X'=0,\,Y'\neq 0.$ Como en el caso anterior, la solución s está parametrizada por un entero positivo m y es de la forma

$$s_m(x, y, t) = \cos\left(m\pi \frac{y}{L_y}\right) \exp\left(-\pi^2 \frac{m^2}{L_y^2} Dt\right)$$
 (18)

Supongamos $X'\neq 0, Y'\neq 0$. En este caso U=X', V=Y' entran en las condiciones del lema 1. Esto implica que $\alpha=-n^2\pi^2/L_x^2, \ \beta=-m^2\pi^2/L_y^2,$

donde n y m son enteros positivos que parametrizan la solución; y U, V son de la forma $U = \text{sen}(n\pi x/L_x)$, $V = \text{sen}(m\pi y/L_y)$. Se deduce que X, Y son de la forma $X = \cos(n\pi x/L_x)$, $Y = \cos(m\pi y/L_y)$. Finalmente, T es de la forma $T = \exp(-\pi^2(n^2/L_x^2 + m^2/L_y^2)Dt)$. Por lo tanto, la solución s está parametrizada por dos enteros positivos n, m, y es de la forma

$$s_{n,m}(x,y,t) = \cos\left(n\pi\frac{x}{L_x}\right)\cos\left(m\pi\frac{y}{L_y}\right)\exp\left(-\pi^2\left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{m^2}{L_y^2}\right)Dt\right)$$
(19)

Podemos resumir los resultados (16), (17), (18), (19) diciendo que las soluciones separadas s están parametrizadas por dos número naturales n, m (enteros nopositivos) y son de la forma

$$s_{n,m}(x,y,t) = \cos\left(n\pi\frac{x}{L_x}\right)\cos\left(m\pi\frac{y}{L_y}\right)\exp\left(-\pi^2\left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{m^2}{L_y^2}\right)Dt\right) \quad (20)$$

En general, la combinación lineal de soluciones a la ecuación de transporte (2) que satisfacen las condiciones de borde de Newmann (13) también satisfacen ambas (2) y (13). Puede probarse que la solución a estas ecuaciones simultáneas, con condiciones iniciales c(x, y, 0), está dada por la serie

$$c(x,y,t) = \sum_{n\geq 0, m\geq 0} D_{n,m} \cos\left(n\pi \frac{x}{L_x}\right) \cos\left(m\pi \frac{y}{L_y}\right) \exp\left(-\pi^2 \left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{m^2}{L_y^2}\right) Dt\right)$$
(21)

donde

$$D_{n,m} = \frac{\int_0^{L_x} \int_0^{L_y} c(x, y, 0) \cos\left(n\pi \frac{x}{L_x}\right) \cos\left(m\pi \frac{y}{L_y}\right) dy dx}{\int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \cos\left(n\pi \frac{x}{L_x}\right)^2 \cos\left(m\pi \frac{y}{L_y}\right)^2 dy dx}$$
(22)

En nuestro caso, la condición inicial está dada por

$$c(x, y, 0) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \le L_x/2 \\ 0 & \text{si } x > L_x/2 \end{cases}$$
 (23)

de modo que

$$D_{n,m} = \frac{\int_0^{L_x/2} \int_0^{L_y} \cos\left(n\pi \frac{x}{L_x}\right) \cos\left(m\pi \frac{y}{L_y}\right) dy dx}{\int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \cos\left(n\pi \frac{x}{L_x}\right)^2 \cos\left(m\pi \frac{y}{L_y}\right)^2 dy dx}$$
(24)

$$= \frac{\int_0^{L_x/2} \cos\left(n\pi \frac{x}{L_x}\right) dx \int_0^{L_y} \cos\left(m\pi \frac{y}{L_y}\right) dy}{\int_0^{L_x} \cos\left(n\pi \frac{x}{L_x}\right)^2 dx \int_0^{L_y} \cos\left(m\pi \frac{y}{L_y}\right)^2 dy}$$
(25)

$$= \begin{cases} \frac{\int_{0}^{L_{x}/2} \cos\left(n\pi \frac{x}{L_{x}}\right) dx \frac{\sin(m\pi y/L_{y})}{m\pi/L_{y}} \Big|_{0}^{L_{y}}}{\int_{0}^{L_{x}} \cos\left(n\pi \frac{x}{L_{x}}\right)^{2} dx (L_{y}/2)} & \text{si } m \neq 0 \\ \frac{\int_{0}^{L_{x}/2} \cos\left(n\pi \frac{x}{L_{x}}\right) dx L_{y}}{\int_{0}^{L_{x}} \cos\left(n\pi \frac{x}{L_{x}}\right)^{2} dx L_{y}} & \text{si } m = 0 \end{cases}$$
 (26)

$$= \begin{cases} 0 & \text{si } m \neq 0 \\ \frac{\int_0^{L_x/2} \cos\left(n\pi \frac{x}{L_x}\right) dx}{\int_0^{L_x} \cos\left(n\pi \frac{x}{L_x}\right)^2 dx} & \text{si } m = 0 \end{cases}$$

$$(27)$$

$$= \begin{cases}
0 & \text{si } m \neq 0 \\
\frac{\int_{0}^{L_{x}/2} dx}{\int_{0}^{L_{x}} dx} & \text{si } m = 0 \text{ y } n = 0 \\
\frac{\int_{0}^{L_{x}/2} \cos\left(n\pi\frac{x}{L_{x}}\right) dx}{\int_{0}^{L_{x}} \cos\left(n\pi\frac{x}{L_{x}}\right)^{2} dx} & \text{si } m = 0 \text{ y } n \neq 0 \\
= \begin{cases}
0 & \text{si } m \neq 0 \\
\frac{1}{2} & \text{si } m = 0 \text{ y } n = 0 \\
\frac{2}{L_{x}} \frac{\sin(n\pi x/L_{x})}{n\pi/L_{x}} \Big|_{0}^{L_{x}/2} & \text{si } m = 0 \text{ y } n \neq 0
\end{cases} \tag{29}$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{si } m \neq 0 \\ \frac{1}{2} & \text{si } m = 0 \text{ y } n = 0 \\ \frac{2}{L_x} \frac{\sin(n\pi x/L_x)}{n\pi/L_x} \Big|_{0}^{L_x/2} & \text{si } m = 0 \text{ y } n \neq 0 \end{cases}$$
 (29)

$$= \begin{cases} 0 & \text{si } m \neq 0 \\ \frac{1}{2} & \text{si } m = 0 \text{ y } n = 0 \\ \frac{2 \operatorname{sen}(n\pi/2)}{n\pi} & \text{si } m = 0 \text{ y } n \neq 0 \end{cases}$$
(30)

$$= \begin{cases} 0 & \text{si } m \neq 0 \\ \frac{1}{2} & \text{si } m = 0 \text{ y } n = 0 \\ 0 & \text{si } m = 0, \text{ y } n \neq 0 \text{ es par} \\ (-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{2}{n\pi} & \text{si } m = 0, \text{ y } n \neq 0 \text{ es impar} \end{cases}$$
(31)

Por lo tanto

$$c(x,y,t) = 2 + \sum_{k=1,n=2k+1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{4}{n\pi} \cos(n\pi x/L_x) \exp((-\pi^2 n^2/L_x^2)Dt)$$
 (32)