Ciencia y Tecnología, 27(1 y 2): 53-59,2011
ISSN: 0378-0524

SOLUCIÓN DE UNA ECUACIÓN DIFERENCIAL PARCIAL DE DIFUSIÓN

*Julio Céspedes Álvarez**

Escuela de Matemática, Universidad de Costa Rica, 11501-2060 San José, Costa Rica.

Recibido 6 de octubre 2010; aceptado 26 de abril 2012

Resumen

Se presenta un algoritmo que permite obtener la solución de la ecuación diferencial parcial producto de la aplicación de la segunda ley de difusión de Fick, utilizando la transformada de Laplace. La solución de la ecuación no requiere de series de potencias, series de Fourier u otros argumentos más especializados, lo que facilita su uso en diversos procesos de difusión a través de membranas celulares.

Abstract

Utilizing the Laplace transform, an algorithm is shown that solves the partial differential equation, product from the application of the Fick´s second law of diffusion. The solution of the equation is simple and does not require potential or Fourier series, among other arguments, and it can be easily used for diffusion processes through cellular membranes.

Palabras clave: difusión, Fick

Key words: diffusion, Fick

I INTRODUCCIÓN

Una variedad importante de procesos de difusión a través de membranas celulares, reacciones de oxidación-reducción (redox), advección de contaminantes (transporte de partículas contaminantes a través de un medio), etc, están modeladas por la misma ecuación diferencial parcial, salvo por la naturaleza de las variables y constantes, producto de la aplicación de la segunda ley de difusión del fisiólogo y biofísico alemán Adolf Fick (1829-1901):

$$\nabla \cdot \big(D(x,y,z,t) \cdot \nabla c(x,y,z,t)\big) = \frac{\partial c(x,y,z,t)}{\partial t}$$

D es el coeficiente de difusión de la especie de concentración c en un punto espacial (x,y,z) en el tiempo t.

Particularmente, el análisis de la difusión *lineal* con coeficiente de difusión *constante* es fundamental para los profesionales en todas las ciencias e ingenierías (química,

* Autor para correspondencia: julio.cespedes@ucr.ac.cr

meteorología, oceanografía, física, tecnología de alimentos, etc) y a ellos está dirigido este artículo. Como parte del modelo se han considerado condiciones de contorno no homogéneas y condiciones límite, este problema no estándar aparece en investigaciones de alto nivel, por ejemplo, un problema de electroquímica en el cual la tasa de cambio de la concentración a nivel del electrodo en cualquier tiempo es proporcional a la intensidad de la corriente variable con el tiempo. El algoritmo presentado en este artículo permite obtener la concentración (solución de la ecuación diferencial parcial) utilizando la transformada de Laplace, resultando un proceso relativamente simple, y no requiere de series de potencias, series de Fourier u otros argumentos más especializados.

II Modelo matemático con derivadas parciales para difusión lineal

El modelo de la difusión *lineal* de partículas materiales en un medio se obtiene de la segunda ley de Fick de dos variables (x, t) y consiste de:

Variables t tiempo,
x distancia medida sobre un segmento de recta en la dirección de la difusión,
$i(t)$ función externa (por ejemplo, proporcional a la intensidad de la corriente en el electrodo en el instante t, etc),
$c(x, t)$ incógnita, concentración de la especie en la posición x en un tiempo t.

Constantes D coeficiente de difusión de la especie de concentración c, y se supone constante.
c^* concentración inicial que se supone es la misma en cada punto x

Ecuación diferencial parcial (consecuencia inmediata de la segunda ley de Fick) o ecuación de difusión lineal

$$D\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\partial c(x,t)}{\partial t} \qquad \text{(E1)}$$

Condiciones de contorno

$$\forall x \geq 0, \quad c(x,0) = c^* \qquad \text{(C1)}$$

$$\forall t > 0, \quad \lim_{x \to +\infty} c(x,t) = c^* \qquad \text{(C2)}$$

$$\forall t > 0, \quad D\left(\frac{\partial c(x,t)}{\partial x}\right)_{x=0} = i(t) \qquad \text{(C3)}$$

Transformación de la ecuación diferencial parcial en una ecuación diferencial ordinaria

Empecemos transformando el modelo con derivadas parciales dado en un modelo con derivadas ordinarias utilizando la transformada de Laplace, $\mathcal{L}$, que asocia a cada función de t una función de s. Como es usual, la transformada de Laplace de las funciones c, i se denota con las respectivas letras mayúsculas C, I.

Aplique la transformada de Laplace a cada término de (E1) y de las condiciones (C1), (C2) y (C3) y obtenga:

$$\mathcal{L}\left(D\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}\right) = D\mathcal{L}\left(\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}\right) = D\frac{d^2 C(x,s)}{dx^2}$$

$$\mathcal{L}\left(D\frac{\partial c(x,t)}{\partial t}\right) = s\mathcal{L}\big(c(x,t)\big) - c(x,0) = sC(x,s) - c^*$$

$$\mathcal{L}\left(\lim_{x\to+\infty} c(x,t)\right) = \lim_{x\to+\infty}\mathcal{L}\big(c(x,t)\big) = \lim_{x\to+\infty} C(x,s)$$

$$\mathcal{L}(c^*) = \frac{c^*}{s}$$

$$\mathcal{L}\left(D\frac{\partial c(0,t)}{\partial x}\right) = D\mathcal{L}\left(\frac{\partial c(0,t)}{\partial x}\right) = D\frac{dC(0,s)}{dx}$$

$$\mathcal{L}\big(i(t)\big) = I(s)$$

Por lo tanto, la ecuación diferencial parcial (E1) se transforma en la ecuación ordinaria:

$$D\frac{d^2 C(x,s)}{dx^2} = sC(x,s) - c^*$$

Esta se escribe:

$$D\frac{d^2 C(x,s)}{dx^2} - sC(x,s) = -c^* \tag{E2}$$

Las condiciones de contorno se transforman en las siguientes, no escribimos (C1) por cuanto ya se utilizó y no se requiere adelante:

$$\lim_{x\to+\infty} C(x,s) = \frac{c^*}{s} \tag{L1}$$

$$D\frac{dC(0,s)}{dx} = I(s) \tag{L2}$$

La solución general de la ED lineal (E2) es la solución general de su ecuación complementaria (E3) (verla adelante) denotada con $C_h(x,s)$, más una solución particular de (E2) denotada con $C_p(x,s)$, por lo tanto, se deben determinar C_h y C_p tales que la solución general de (E2) sea:

$$C(x,s) = C_h(x,s) + C_p(x,s)$$

Solución general de la ED complementaria de (E2)

La ED complementaria de (E2) es:

$$D\frac{d^2 C(x,s)}{dx^2} - sC(x,s) = 0 \tag{E3}$$

Su ecuación característica $Dr^2 - s = 0$ tiene dos soluciones diferentes:

$$r = \pm\sqrt{\frac{s}{D}}$$

Por lo tanto, la solución general de la ED homogénea (E3) es:

$$C_h(x,s) = \alpha e^{\sqrt{\frac{s}{D}}x} + \beta e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x} \qquad \text{(SG)}$$

donde α, β son constantes indeterminadas (por determinar).

Solución particular de la ED (E2)

El siguiente paso consiste en determinar una solución particular $C_p(x,s)$ de (E2). En efecto, en vista de que la ecuación diferencial tiene coeficientes constantes y la función externa $-c^*$ es constante, se puede utilizar el método de coeficientes indeterminados para obtener $C_p(x,s)$. En tal caso se supone que:

$$C_p(x,s) = k$$

para alguna k constante (respecto a x). Para sustituirla en (E2) y así despejar k, calcule su segunda derivada:

$$\frac{d^2C_p(x,s)}{ds^2} = 0$$

Sustituya en (E2), obtiene:

$$D \cdot 0 - s \cdot k = -c^* \quad \Longrightarrow \quad k = \frac{c^*}{s}$$

Sustituya ese valor en $C_p(x,s) = k$ y concluya que la solución particular es:

$$C_p(x,s) = \frac{c^*}{s} \qquad \text{(SP)}$$

Por lo tanto, la solución general de (E2) es la suma de la solución general (SG) y particular (SP):

$$C(x,s) = \alpha e^{\sqrt{\frac{s}{D}}x} + \beta e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x} + \frac{c^*}{s} \qquad \text{(S)}$$

Determinación de los coeficientes $\alpha,\ \beta$

Vamos a determinar α, β que aparecen en (S) de tal forma que la solución satisfaga las condiciones:

$$\lim_{x\to+\infty} C(x,s) = \frac{c^*}{s} \qquad \text{(L1)}$$

$$D\frac{dC(0,s)}{dx} = I(s) \qquad \text{(L2)}$$

Aplique el límite a la solución (S) y obtenga:

$$\lim_{x\to+\infty} C(x,s) = \lim_{x\to+\infty}\left(\alpha e^{\sqrt{\frac{s}{D}}x} + \beta e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x} + \frac{c^*}{s}\right)$$

Ciencia y Tecnología, 27(1 y 2): 53-59,2011 – ISSN: 0378-0524

El límite a la izquierda según (L1) es $\frac{c^*}{s}$ y para que el de la derecha exista y también sea $\frac{c^*}{s}$ deberá escoger $\alpha = 0$, mientras β por ahora puede ser cualquier constante. Por lo tanto, la solución (S) con $\alpha = 0$ se reduce a:

$$C(x,s) = \beta e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x} + \frac{c^*}{s}$$

Para determinar β utilizaremos (L2), pero antes necesitamos la derivada de esta última solución, cual es:

$$\frac{dC(x,s)}{dx} = -\beta\sqrt{\frac{s}{D}}e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x}$$

Cambie x por cero y obtenga:

$$\frac{dC(0,s)}{dx} = -\beta\sqrt{\frac{s}{D}}$$

Sustituya esto en (L2) y reciba:

$$-D\beta\sqrt{\frac{s}{D}} = I(s)$$

Despeje,

$$\beta = -\frac{I(s)}{\sqrt{Ds}}$$

Se concluye que la solución (S) de (E2) que satisface las condiciones de contorno (L1) y (L2) es:

$$C(x,s) = -\frac{I(s)}{\sqrt{Ds}}e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x} + \frac{c^*}{s}$$

Determinar la solución en las variables originales (x,t)

Para determinar la solución $c(x,t)$ del problema original aplique la transformada inversa de Laplace a:

$$C(x,s) = -\frac{I(s)}{\sqrt{Ds}}e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x} + \frac{c^*}{s}$$

Obtenga la ecuación de la concentración solución al problema planteado:

$$c(x,t) = -\frac{1}{\sqrt{D}}\mathcal{L}^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{s}}I(s)e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x}\right) + c^* \qquad \text{(F)}$$

Con frecuencia se requiere la concentración (F) en $x = 0$, en este nivel la solución anterior se reduce a:

$$c(0,t) = -\frac{1}{\sqrt{D}}\mathcal{L}^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{s}}I(s)\right) + c^*$$

Casos particulares según la ecuación de la función externa $i(t)$

A continuación consideramos algunas funciones externas particulares y se calcula la respectiva concentración $c(x,t)$ y en particular en $x = 0$.

(EJ1) Suponga que la función externa es (por ejemplo, proporcional a la intensidad de la corriente) constante i_0 en cualquier tiempo:

$$i(t) = i_0$$

Entonces su transformada es

$$I(s) = \frac{i_0}{s}$$

En tal caso la solución final (F) adopta la forma:

$$c(x,t) = -\frac{1}{\sqrt{D}}\mathcal{L}^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{s}}\frac{i_0}{s}e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x}\right) + c^*$$

Utilice la tabla de transformadas de Laplace y obtenga:

$$c(x,t) = -\frac{i_0}{\sqrt{D}}\left(2\sqrt{\frac{t}{\pi}}e^{-\frac{x^2}{4tD}} - \frac{x}{\sqrt{D}}\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{tD}}\right)\right) + c^*$$

Donde erfc es la *función error complementaria (de Gauss)* definida por:

$$\operatorname{erfc}(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_y^{+\infty} e^{-u^2}du$$

Particularmente, para $x = 0$:

$$c(0,t) = -2i_0\sqrt{\frac{t}{\pi D}} + c^*$$

(EJ2) Suponga que la función externa es:

$$i(t) = i_0 t^b$$

Donde $-1 < b \neq 0$ es constante, entonces su transformada es:

$$I(s) = i_0\frac{\Gamma(b+1)}{s^{b+1}}$$

En tal caso la solución (F) se reduce a:

$$c(x,t) = -\frac{i_0\Gamma(b+1)}{\sqrt{D}}\mathcal{L}^{-1}\left(\frac{1}{s^{b+\frac{3}{2}}}e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x}\right) + c^*$$

Calcular esa transformada resulta engorroso y no queremos desvirtuar el objetivo de este artículo. En particular para $x = 0$ resulta:

$$c(0,t) = -\frac{i_0\Gamma(b+1)}{\sqrt{D}}\mathcal{L}^{-1}\left(\frac{1}{s^{b+\frac{3}{2}}}\right) + c^* = -\frac{i_0}{\sqrt{D}}\frac{1}{b+\frac{1}{2}}t^{b+\frac{1}{2}} + c^* \qquad \text{(EJ3)}$$

Suponga que la función externa es:

$$i(t) = i_0 e^{\omega t}$$

ω constante. Su transformada es:

$$I(s) = \frac{i_0}{s - \omega}$$

Y la solución (F) es:

$$c(x,t) = -\frac{i_0}{\sqrt{D}} \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{s}(s-\omega)} e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}x}\right) + c^*$$

En particular para $x = 0$

$$c(0,t) = -\frac{i_0}{\sqrt{D}} \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{s}(s-\omega)}\right) + c^* = -\frac{i_0}{\sqrt{\omega D}} e^{\omega t} \operatorname{erf}\left(\sqrt{\omega t}\right) + c^*$$

Donde $\operatorname{erf}(y) = 1 - \operatorname{erfc}(y)$ es la función de error.

▣

III REFERENCIAS

Los conceptos básicos sobre ecuaciones diferenciales ordinarias, en particular el método de los coeficientes indeterminados y la transformada de Laplace se pueden consultar en el libro:

[1] Céspedes, Julio. *Ecuaciones Diferenciales para ciencias de la vida*. Ed. UCR: Costa Rica, 2010