

AR 50 00095

CNEA-NT 1/90

**REPUBLICA ARGENTINA  
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA  
GERENCIA DE DESARROLLO**

**RESOLUCION DE UN PROBLEMA DE  
FRONTERA MOVIL CON CONDICION DE  
BORDE IMPLICITA**

**E.A. MOYANO**

**Buenos Aires  
1990**

RESOLUCION DE UN PROBLEMA DE FRONTERA MOVIL  
CON CONDICION DE BORDE IMPLICITA -

-SU APLICACION A UN TEMA DE INTERES MEDICO :

LA OXIGENACION DE TEJIDOS VIVOS -

(Primavera de 1989)

Edgardo A. Moyano

RESUMEN

Se describe una secuencia de cálculo que permite resolver numéricamente, un modelo para el estudio de problemas de frontera móvil en una dimensión espacial, con condición de borde implícita. Se utiliza la transformación de Landau, a fin de trabajar en todo instante con la misma cantidad de nodos. Ello obliga a tratar una ecuación diferencial parcial parabólica, con término difusivo y convectivo, acompañados por coeficientes variables. Se discretiza la ecuación diferencial en forma implícita, utilizando el esquema de Laasonen que es siempre estable, en lugar de emplear el esquema de Crank-Nicolson, como lo hicieron Ferriss-Hill. Se trabaja con paso temporal  $\Delta t$  y espacial  $\Delta x$  fijos, iterando con diversos valores de alcance, es decir  $\delta s$  variable, hasta aproximar una condición de borde. El modelo responde a las características del problema de la difusión con consumo de oxígeno, en tejidos vivos. Permitiría predecir dosajes variables de radiación, de acuerdo a

la distribución de concentración de oxígeno, en un tiempo cualquiera.

## INTRODUCCION

Es cada día mayor el apoyo que la matemática numérica presta a las distintas áreas de la investigación científica y de la actividad industrial.

Dentro del enorme conjunto de problemas que trata la Matemática Aplicada, existe un conjunto de problemas, llamados de Stefan o de frontera móvil, que han atraído la atención de investigadores de diferentes especialidades.

En muy variadas áreas de la investigación, aparece la necesidad de resolver ecuaciones evolucionarias, cuyo dominio espacial varía en el tiempo y es función de la incógnita a estudiar, (que puede ser la temperatura de una placa de metal, el consumo de oxígeno en un tejido vivo, el avance del óxido en una chapa, etc). En los últimos años, ha vuelto a cobrar interés el estudio de la oxidación de metales a altas temperaturas, esencialmente por los problemas de seguridad en reactores nucleares. La oxidación de las vainas de elementos combustibles, en vapor de agua, durante transitorios de temperatura, importa en el estudio del comportamiento de éstos, en un posible accidente por pérdida de refrigerante (LOCA). (27).

Históricamente, es probable que los problemas de Stefan hayan alcanzado su mayor importancia en el estudio de la solidificación de metales. Corresponde a Peel (28,15), el primer trabajo en una de

Las áreas más importantes de la industria del acero, en el que la observación de las frentes móviles, aparece como parte integrante de la resolución del problema.

En general, en el estudio de temas de conducción de calor o difusión con cambio de fase, aparecen problemas de frontera móvil. Y no se reduce su aplicación a los temas mencionados, sino que se detectan problemas de este tipo en variadas áreas de la industria del plástico, metalurgia en general, industria del vidrio, petrolera, nuclear, preservación de alimentos, etc.

En investigación en semiconductores, meteorología, astrofísica, plasma y otras áreas de la ciencia, aparece la necesidad de resolver problemas en los que las ecuaciones tienen el dominio dependiente de la incógnita a determinar, de modo que aunque la e.d.p. sea lineal, esos problemas resultan no lineales.

En la presente nota, se intenta mostrar una aplicación a un tema de interés médico: la irradiación de tejidos vivos atacados por cáncer (5,16,17).

Las obras de Radiobiología, que tratan el efecto oxígeno, explican la conveniencia de oxigenar los tejidos vivos que han contraído la enfermedad, antes del tratamiento por Radioterapia. La radiosensitividad de los tejidos tumorales, aumenta con el aumento de la concentración de oxígeno. Teniendo presente que el éxito en el tratamiento por Radioterapia, radica en la destreza para eliminar las células enfermas, causando el menor daño posible a las sanas, es útil poder oxigenar los tejidos antes de irradiarlos. Y todavía más interesante resultaría, el poder efectuar algunos cálculos, que permitan graduar el dosaje de radiación, es decir, intentar emplear dosis lo más bajas posibles.

Algunos autores afirman que la oxigenación permitiría bajar a un tercio, la dosis necesaria de radiación (3,2,4).

De modo que los tejidos a ser tratados, serían previamente expuestos a oxígeno a alta presión y posteriormente irradiados, teniendo en todo momento, una idea aproximada de la concentración de oxígeno en su interior.

Esta es, sintéticamente, la idea del problema al que podría aplicarse el modelo propuesto por J. Crank y R. S. Gupta, para el estudio de la oxigenación de tejidos vivos (1).

El modelo a que se hace referencia, responde a las características del tipo de problemas mencionados al principio de esta nota, llamados de frontera móvil o de Stefan, a raíz de que el dominio espacial de la ecuación diferencial, varía en el tiempo, siendo función de la incógnita (concentración de oxígeno a determinar. Stefan, por los estudios realizados por Stefan en 1890, sobre la fusión de una barra de hielo (20). Es así que se suele decir que un problema de frontera móvil está resuelto, cuando se está en condiciones de dar en cualquier instante, la posición de la interfase (zona que separa el medio oxigenado del de concentración nula), y la distribución de la concentración de oxígeno en ese dominio.

La técnica y el proceso de oxigenación que se pretende estudiar es el siguiente: durante la etapa de oxigenación, se mantiene constante la concentración de oxígeno, en la superficie del medio que es necesario oxigenar, luego éste se aísla, de modo tal que no haya más intercambio de oxígeno con el medio exterior. El gas penetra y se difunde hasta cierto punto de penetración máxima, que se ha denominado interfase o separación

entre la fase oxigenada y la no oxigenada. (Figura 1). En ese punto en el que se ha alcanzado estado estacionario (debido al consumo de oxígeno), las condiciones matemáticas se representan por  $\partial C / \partial X = 0$ ,  $C=0$ , simbolizando  $C$  la concentración de oxígeno en el tejido y  $X$  el eje de penetración, sobre el que se mide la posición de la interfase. En el momento en que se alcanza el estado estacionario, la ecuación que modela la distribución de oxígeno es:

$$D \frac{\partial C^2}{\partial X^2} - m = 0 \quad [1]$$

$D$  : coeficiente de difusión que se asume constante ,

$m$  : razón de consumo de oxígeno por unidad de volumen del medio, que también se supone constante ;

$C(X)$  es la concentración de oxígeno libre para difundir, a una distancia  $X$  de la superficie externa del medio, en un tiempo  $T$ .

Las condiciones de borde son

$C=C_0$  en  $X=0$  (concentración constante en la superficie

aislada ) (T $\geq$ 0)

$$C = \frac{\partial C}{\partial X} = 0$$

(concentración y gradiente nulos en la interfase,  $X \geq X_0$ )

Durante el estado estacionario, la concentración, en cada punto del medio, es independiente del tiempo .

Se verifica que la solución del problema estacionario es

$$C = \frac{m}{2D} (X \cdot X_0)$$

$$X_0 = \left( \frac{2 \cdot D \cdot C_0}{m} \right)^{1/2}$$

siendo  $X_0$  el máximo alcance de la interfase.(1).

Estas ecuaciones proveen las condiciones iniciales del problema que a continuación se comenta .

#### DESCRIPCION DEL PROBLEMA

Una vez que se ha aislado la superficie ( $X=0$ ),el oxígeno difundido en el medio sigue siendo consumido : y el punto de concentración cero (interfase), comienza a retroceder hacia la superficie aislada .Aquí se inicia un problema evolucionario, cuyo dominio de validez cambia constantemente en el tiempo :

" es un problema de Stefan o de frontera móvil ". (Figura 2).

Así el modelo a estudiar a partir de este instante es

$$\frac{\partial C}{\partial T} = D \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} - m \quad (0 \leq X \leq X_0) \quad [2]$$

$$C = C(X, T)$$

con las condiciones de borde :

$$\frac{\partial C}{\partial X} = 0 \quad \text{en } X = 0 \quad T \geq 0 \quad [2.1]$$

(superficie aislada)

$$C = \frac{\partial C}{\partial X} = 0 \quad \text{en } X = X_0(T) \quad T \geq 0$$

(interfase) [2.2]

y la condición inicial  $C = \frac{m}{2D} (X - X_0)^2 \quad T=0 \quad [2.3]$

$$0 \leq X \leq X_0$$

$T=0$  es el instante en el cual la superficie es aislada.

Haciendo los siguientes cambios de variables :

$$x = \frac{X}{X_0} \quad , \quad t = \frac{D}{X_0^2} T \quad , \quad c = \frac{D}{m \cdot X_0^2} = \frac{C}{2 \cdot C_0}$$

y llamando  $x_0(t)$  al valor de  $x$  correspondiente a  $X_0(T)$ , el problema se representa por

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - 1 \quad , \quad 0 \leq x \leq x_0(t) \quad [3]$$

$$c = c(x, t)$$

siendo las condiciones de borde

$$\frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad , \quad x = 0 \quad , \quad t \geq 0 \quad [3.1]$$

$$c = \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad , \quad x = x_0(t) \quad , \quad t \geq 0 \quad [3.2]$$

$$c = \frac{1}{2} (1 - x)^2 \quad , \quad 0 \leq x \leq 1 \quad , \quad t = 0 \quad [3.3]$$

Integrando la ecuación parabólica [3], se puede obtener en cada nivel de tiempo un valor de paso temporal. Es el camino seguido por R. Gupta y A. Kumar (9,10), en su método de paso espacial fijo y temporal variable, aproximando la integral por la regla del trapecio.

Haciendo la transformación  $u = c + t$

resulta la ecuación



$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u^2}{\partial x^2} \quad [4]$$

$$u = u(x,t)$$

con las condiciones de borde

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \text{en } x = 0 \quad [4.1]$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \left. \vphantom{\frac{\partial u}{\partial x}} \right| \text{ en } x = x_0(t) \quad [4.2]$$

$$u = 1 \quad [4.3]$$

El hacer esta transformación, impide el uso del método integral para la obtención de un valor de  $\Delta t$ .

Existen distintos tipos de problemas de frontera móvil (7,8), así como variados métodos numéricos para su resolución.

El problema que se trata en el presente trabajo, tiene una particularidad: la ausencia del término  $ds/dt$  (o velocidad de la interfase, siendo  $s = x_0(t)$ ). A esta clase de problemas, G.G. Sackett (12,13,14) los ha denominado problemas de frontera móvil, con condición de borde implícita.

Las características fundamentales de los problemas de frontera móvil, son su dominio espacial no cilíndrico (variable en el tiempo), y su no linealidad: la posición de la interfase depende del perfil de concentraciones y éste, a su vez, de la posición de la interfase.

Una manera de obviar la primera dificultad es utilizar la transformación de Landau (21,6),  $\xi = \frac{x}{s(t)}$ , propuesta por este autor en 1950 y utilizada por Oberkampf (22) y J. Crank (23). Ella permite fijar la interfase en el tiempo, es decir transformar el dominio espacial variable, de la ecuación

diferencial parcial, en una constante en el tiempo, y poder efectuar toda la simulación con la misma cantidad de nodos. (Figura 3b).

La transformación de Landau complica la ecuación diferencial, que pasa a ser una e. d. p. con el término difusivo acompañado por la inversa del cuadrado del alcance de la interfase, y el término convectivo, multiplicado por un coeficiente que es función de la velocidad de la interfase y la inversa del alcance de la interfase.

Nótese que en el presente problema, la interfase siempre retrocede, de modo que el coeficiente del término convectivo es siempre un número negativo. Por el contrario, el coeficiente del término difusivo, se mantiene siempre positivo.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\xi}{s(t)} \frac{ds}{dt} \left( \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{s^2(t)} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} \right) \quad [5]$$

$$u = u(\xi, t)$$

con las condiciones de borde :

$$\frac{\partial u}{\partial \xi} = 0 \quad \text{en } \xi = 0, \quad t > 0 \quad [5.1]$$

$$\frac{\partial u}{\partial \xi} = 0, \quad u = t \quad \text{en } \xi = 1, \quad t > 0 \quad [5.2]$$

y como condición inicial :

$$u = \frac{1}{2} \cdot (1 - \xi)^2, \quad 0 \leq \xi \leq 1, \quad t = 0 \quad [5.3]$$

En la resolución numérica de problemas de frontera móvil, en

una dimensión espacial, la literatura muestra varios trabajos, en los cuales permanece fijo el paso espacial y se calcula el paso temporal, (métodos llamados de paso espacial fijo y paso temporal variable), de modo que la interfase caiga exactamente en un nodo. Otros en los que, manteniendo fijo el paso temporal, se itera recalculando el paso espacial, hasta fijar la posición de la interfase (métodos de paso temporal fijo y paso espacial variable) (16,9,10,15).

Aquí la velocidad de la interfase se desconoce, pero es aproximada en el plano  $(s,t)$  (Figura 3a), en cada nivel temporal, siendo  $t$  el eje del tiempo y  $s$  el alcance de la interfase.

En la discretización de la e.d.p., se indica con

$$\xi_i = i \cdot \Delta \xi \quad \text{coordenada espacial}$$

$$(\xi_1 = 0, \xi_N = 1),$$

siendo  $\Delta \xi$  el paso espacial.

Para el eje temporal

$$t_j = j \cdot \Delta t$$

siendo  $\Delta t$  el paso temporal, que se mantiene fijo.

Aplicar diferencias finitas al problema propuesto, implica apartarse de la expresión diferencial y plantear una relación algebraica de ordenadas (ecuación en diferencias), que es la forma discretizada del modelo diferencial.

De modo que discretizando en forma implícita la e. d. p. resulta:

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} = \left( \frac{\xi_{i,j+1}}{s_{j+1}} \right) \cdot \left( \frac{s_{j+1} - s_j}{\Delta t} \right) \cdot \left( \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i-1,j+1}}{2 \cdot \Delta \xi} \right) +$$

$$\left( \frac{1}{s_{j+1}^2} \right) \cdot \left( \frac{u_{i-1,j+1} - u_{i,j+1} + u_{i+1,j+1}}{\Delta \xi^2} \right) \quad [6]$$

siendo  $u_{i,j}$  la concentración en el nodo  $(i \cdot \Delta \xi, j \cdot \Delta t)$ .

Llamando a los coeficientes

$$C_{j+1} = (s_{j+1} - s_j) / (2 \cdot \Delta \xi \cdot s_{j+1}) \quad [7]$$

$$D_{j+1} = ( \Delta t / \Delta \xi^2 ) \cdot (1 / s_{j+1}^2) \quad [8]$$

y teniendo en cuenta que el dominio de resolución de la e.d.p. es cilíndrico en el tiempo, es  $\xi_{i,j} = \xi_i \quad \forall j$ , resulta:

$$u_{i,j+1} - u_{i,j} = \xi_i \cdot C_{j+1} \cdot (u_{i+1}^{j+1} - u_{i-1}^{j+1}) + D_{j+1} (u_{i-1}^{j+1} - 2 \cdot u_i^{j+1} + u_{i+1}^{j+1}) \quad [9]$$

$$u_i^{j+1} - \xi_i \cdot C_{j+1} \cdot (u_{i+1}^{j+1} - u_{i-1}^{j+1}) - D_{j+1} (u_{i-1}^{j+1} - 2 \cdot u_i^{j+1} + u_{i+1}^{j+1}) = u_i^j \quad [10]$$

$$u_{i-1}^{j+1} \cdot \xi_i \cdot (C_{j+1} - D_{j+1}) + u_i^{j+1} (1 + 2 \cdot D_{j+1}) + u_{i+1}^{j+1} (-\xi_i \cdot C_{j+1} - D_{j+1}) =$$

$$= u_i^j \quad [11]$$

Discretizando las condiciones de borde en forma centrada, se obtiene:

$$\frac{u_2 - u_0}{2 \cdot \Delta x} = 0 \quad \Rightarrow \quad u_0 = u_2 \quad [12]$$

$$\frac{u_{N+1} - u_{N-1}}{2 \cdot \Delta x} = 0 \quad \Rightarrow \quad u_{N+1} = u_{N-1} \quad [13]$$

Escribiendo la ecuación en diferencias finitas para  $i = 1, 2, 3, \dots, N$  y teniendo en cuenta [12] y [13], se obtiene un sistema de ecuaciones lineales algebraicas, de matriz tridiagonal, cuya solución es la distribución de concentraciones en cada nivel temporal. Llamando

$$R_i = D^{j+1} - \xi_i \cdot C^{j+1}$$

$$SD = 1 + 2 \cdot D^{j+1}$$

$$T_i = D^{j+1} + \xi_i \cdot C^{j+1}$$

resulta la matriz

$$\begin{pmatrix} SD & -(R_1 + T_1) & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ -R_2 & SD & -T_2 & & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -R_3 & SD & -T_3 & & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & & -R_{N-2} & SD & -T_{N-2} & & 0 & & & & & \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & -R_{N-1} & SD & -T_{N-1} & & & & & & \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & -(R_N + T_N) & SD & & & & & & \end{pmatrix}$$

En forma matricial se escribe  $A \cdot u^{j+1} = u^j$ , siendo  $u^{j+1}$

el perfil de concentraciones en el tiempo  $(j+1)\Delta t$  y  $u^j$  la distribución en el tiempo  $j.\Delta t$ .

Estos problemas de frontera móvil son no lineales. El error que se comete en el cálculo del alcance de la interfase, incide en la distribución de las concentraciones y viceversa, ya que la distribución de concentraciones depende del alcance  $s = x_0(t)$  de la interfase y éste a su vez del perfil de concentraciones.

El algoritmo empleado en el presente problema, itera hasta satisfacer la condición de borde [4.3].

Esencialmente, la sucesión de cálculos, en cada tiempo, se realiza de la siguiente forma: con un paso temporal  $\Delta t$  constante, el algoritmo fabrica una sucesión de alcances  $s_1, s_2, s_3, \dots$ . La iteración se detiene cuando se cumple, con cierta aproximación, la condición de borde  $u_N = t$ .

El algoritmo sigue el siguiente esquema: en un nivel temporal cualquiera, se considera el alcance del nivel temporal anterior como primera aproximación  $s_1$  del alcance actual. Determinada, de alguna forma, otra aproximación  $s_2$  para ese tiempo, (cosa no difícil, por cuanto en este problema la interfase siempre retrocede), se hace uso del método de Newton - Raphson (6) para generar otro alcance  $s_3$ . Con el nuevo valor  $s_3$  calculado, y una previa elección entre los dos anteriores  $s_1$  y  $s_2$  de acuerdo a su efecto en el borde libre, se continúa calculando hasta satisfacer con cierta aproximación la condición de borde [4.3].

Es útil recalcar que si bien los coeficientes de la ecuación [5] combinan valores pertenecientes tanto al plano original  $(s, t)$  como al transformado (según Landau)  $(\xi, t)$ , los cálculos se hacen

en el plano ( $\xi, t$ ), en un dominio cilíndrico en el tiempo, según el esquema en diferencias finitas implícito, propuesto por Laasonen (25) (Figura 4).

Del plano ( $s, t$ ), sólo se extrae una aproximación de la velocidad  $ds/dt$ .

### RESULTADOS NUMERICOS

En la tabla 1 se puede apreciar la variación de la concentración de oxígeno, en la superficie aislada,  $\xi=0$ , según los resultados de distintos autores. Los cálculos han sido efectuados con un paso temporal fijo  $\Delta t=0.001$  y un paso espacial  $\Delta \xi=0.05$ , salvo indicación expresa.

$t$	Crank Gupta	Gupta	Ferriss Hill	.Elliot f.e., des. var.		Hansen Nougaard ecua. integral	Método descrip
		esp. var.	Fijación de inter. $\Delta t=01$	Inm.			
.005	4203	_____	4271	_____	_____	_____	4202 4251
.01	3875	_____	3919	_____	_____	_____	3872 3904
.04	2745	2745	_____	_____	2744	2743	2743 2760
.10	1433	1434	1446	1432	1433	1432	1432 1444
.14	779	780	790	799	780	779	779 788
.18	218	218	228	218	219	218	218 223
.185	156	154	_____	_____	155	153	153 157
.19	90	_____	100	_____	_____	_____	90 92
.198	28	_____	_____	_____	_____	_____	_____ 28

Valores de concentración  $\times 10^4$  en la superficie aislada ( $\xi=0$ ).

(Tabla 1)

La Tabla 2 muestra la posición de la interfase, para

distintos tiempos, de acuerdo a diferentes esquemas de cálculo usados por distintos autores. Como en la anterior, el paso espacial ha sido  $\Delta x = 0.05$  y el temporal  $\Delta t = 0.001$ , salvo indicación expresa.

t	Crank y Gupta	Gupta	Ferriss y Hill		Elliot e. f. . d. var.		Hansen y Hougaard	Método descrip.
		esp. var.	front. fija	inm. $\Delta t = .01$	$\Delta x = .05$	$.01$ $\Delta t = .005$ $.001$	ec. int.	
.040	9992	9988	_____	_____	9990	9991	9992	9997
.100	9352	9309	9352	9353	9326	9325	9350	9381
.140	7976	7930	8005	8000	7961	7986	7989	7976
.180	4961	4974	5083	5097	4991	5011	5011	4885
.185	4178	4308	_____	_____	4355	4333	4334	4189
.190	3387	_____	3595	_____	_____	_____	3454	3277
.195	1613	_____	2352	_____	_____	_____	2065	1638

Posición de la frontera móvil  $\times 10^4$   $\Delta x = 0.05$  ,  $\Delta t = 0.001$ .

(Tabla 2)

El esquema de cálculo utilizado es siempre estable [25]. En cuanto a la dispersión numérica o error de truncamiento que se produce, es bueno comentar que siendo dicha dispersión

$$D_{\text{num}} = (1/2) \cdot cc \cdot \Delta x (\lambda)$$

donde  $cc$  es el coeficiente del término convectivo y

$$\lambda = cc \cdot \Delta t / \Delta x \quad , \quad \text{resulta}$$

$$D_{\text{num}} = (1/2) \cdot (c \xi_i / s_{j+1}) \cdot (|\delta s| / \Delta t) \cdot \Delta t =$$

$$= (1/2) \cdot (c \xi_i^2 / s_{j+1}^2) \cdot |\delta s|^2 \cdot (1 / \Delta t)$$



Para los cálculos que figuran en la tabla anterior, se ha usado un paso temporal  $\Delta t=0.001$ , de modo que resulta:

$$D_{num} \leq 500. |\delta s|^2. (1/s_{j+1}^2)$$

La resolución de ecuaciones del tipo (5) obliga al control de la dispersión o difusión numérica, dado que se demuestra que en la resolución de ecuaciones parabólicas con término convectivo, el error de truncamiento o dispersión numérica se suma al valor del coeficiente del término difusivo (la difusión física): de modo que si resultare muy significativa frente a la difusión física, se estaría resolviendo otra ecuación.

Así, el coeficiente del término difusivo de la ecuación (5) pasa a ser

$$(1/s_{j+1}^2) + D_{num}$$

Las experiencias, con la malla antes elegida, muestran que en los primeros tramos de la simulación,  $|\delta s|$  posee valores muy bajos, es decir que la interfase se mueve al principio muy lentamente. Se observan valores  $D_{num} \leq 2.5 \times 10^{-6}$ , valor que no perturba el coeficiente difusivo.

En  $t=0.1$  se calculó  $D_{num} \leq 0.0264$  siendo  $1/s_{j+1}^2 = 1.13615$

si  $t=0.18$  resulta  $D_{num} \leq 0.36486$  siendo  $1/s_{j+1}^2 = 4.41928$

si  $t=0.19$  resulta  $D_{num} \leq 1.68697$  siendo  $1/s_{j+1}^2 = 10.425$

Los valores muestran el crecimiento del error de truncamiento en la zona de mayor velocidad de la interfase, pero afortunadamente

ello no afecta significativamente el valor del coeficiente difusivo de la ecuación (5).

A continuación se exhiben tres gráficos, que permiten visualizar las características del proceso de difusión con consumo de oxígeno.

El primero (g1) muestra la evolución de la distribución de oxígeno en el tejido, desde la curva superior o condición inicial, hasta un perfil de concentración muy baja en  $t=0.18$ , pasando por distintas distribuciones para diferentes tiempos.

El gráfico (g2) presenta la posición de la frontera móvil con respecto al tiempo. En él se puede apreciar que al comienzo de la simulación, para el  $\Delta t$  usado, resulta muy pequeño el  $\delta s$  (variación del alcance de la interfase). Lo opuesto se observa en los últimos tramos del proceso, donde la velocidad es muy elevada.

El gráfico (g3) permite apreciar cómo desciende la concentración de oxígeno, en la superficie aislada, durante el tiempo (aprox. 0.196) que dura la simulación del proceso estudiado.

## CONCLUSIONES

Se ha presentado un modelo matemático, cuyo objetivo es la descripción del proceso de difusión con consumo de oxígeno, en tejidos vivos. Se ha estudiado, en la segunda parte del proceso o parte no estacionaria, el movimiento de la interfase o punto de penetración máxima del oxígeno en el tejido.

Se ha observado que en los primeros tramos la interfase se mueve a velocidad muy baja, pero el consumo de oxígeno hace que se acelere y tienda a infinito en las instancias finales de la simulación.

Se ha trabajado en diferencias finitas, discretizando la e.d.p. de modo de poder usar el esquema de Laasonen, que es siempre estable. Además, por las características de los coeficientes de los términos difusivo y convectivo, no presenta dificultades de dispersión numérica.

## - REFERENCIAS -

- (1) John Crank and Radhey S. Gupta, A moving boundary problem arising from the diffusion of oxygen in absorbing tissue, Internal Report, Brunel University, Department of Mathematics, 1971.
- (2) Domingo A. Tarzia, A Bibliography on moving-free boundary problems for the heat diffusion equation. The Stefan problem, Instituto de Matemática "Beppo Levi", Facultad de Ciencias

Exactas e Ingenieria, Universidad Nacional de Rosario, 1988.

(3) A. I. Liapis, G. G. Lipscomb and O. K. Crosser, A model of oxygen diffusion in absorbing tissue, *Mathematical Modelling*, 3, 83-92, 1982.

(4) Domingo A. Tarzia, *Cuadernos del Instituto de Matemática " Beppo Levi "*, 11, 1-32.

(5) Donald J. Pizzarello and Richard L. Witcofski, *Basic Radiation Biology*, Lea and Febiger, Philadelphia, 1967.

(6) J. R. Ockendon and W. R. Hodgkins, *Moving boundary problems in heat flow and diffusion*, Clarendon Press, Oxford, England, 1975.

(7) R. M. Furzeland, A survey of the formulation and solution of free and moving boundary (Stefan) problems, Internal Report, Oxford University, Computing Laboratory, 1977 .

(8) R. M. Furzeland, A comparative study of numerical methods for moving boundary problems, *J. Inst. Maths. Applics.*, 26, 411-429, 1980.

(9) Radhey S. Gupta and Ambreesh Kumar, Variable time-step method with coordinate transformation, *Computer Methods applied mechanics and engineering*, 44, 91-103, 1984.

(10) Radhey S. Gupta and Dharendra Kumar, Complete numerical solution of the oxygen diffusion problem involving a moving boundary, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 29, 233-239, 1981.

(11) John Crank, *Free and moving boundary problems*, Clarendon Press, Oxford, England, 1984.

(12) G. G. Sackett, *Siam J. Num. Anal.*, 8, 80-96, (1971).

(13) G. G. Sackett, *Maths. Comp.*, 25, 425-434, 1971.

(14) A. Shatz, *J. Math. Analysis Applics.*, 28, 669-680, 1969

- (15) Edgardo A. Moyano, Daniel Balzaretto y Eduardo Vicente, Resolución numérica de un problema de Stefan : solidificación unidireccional de metales puros, CNEA NT 5/85.
- (16) J. Douglas and T. M. Gallie, Duke Mathematical Journal 22,557-570, 1955.
- (17) E. J. Hall, Radiobiology for the Radiobiologist, Harper and Row, New York, NY 1978 .
- (18) D. F. Bruley and D. H. Hunt, Oxygen transport to tissue, Microvasc. Res. 8, 314-319.
- (19) S. Bogado Leite, M. N. Ozisik and K. V. Verghese, On the solution of linear diffusion problems in media with moving boundary. Nucl. Sci. Int. J. Heat Mass Transfer 76,345-370, 1980.
- (20) R. S. Gupta and N. C. Banik, Approximate method for the oxygen diffusion problem. Int. J. Heat Mass Transfer 32,4, 781-783 ,1989.
- (21) H. S. Carslaw and J. C. Jaeger, Conduction of heat in solids, Oxford University Press, 1959.
- (22) H. G. Landau, Q. J. of Applied Maths. 8,81-94, 1950.
- (23) W. L. Oberkampf, Int. J. Numer. Meth. Engng.,10,211-223, 1976.
- (24) J. Crank, Q. J. Mech. Appl. Math. 10, 220-231, 1957.
- (25) R. D. Richtmyer and K. W. Morton, Difference Methods for initial-value problems, Wiley and Sons, 1967.
- (26) D. A. Peel and A. E. Pengelly, Heat Transfer, Solidification and Metallurgical Structure in the Continuous Castings of Aluminium, I.S.I. Publication 123, pp 196-198 (1970).
- (27) Eduardo A. García, Diffusion in a semi-infinite system with

a moving interface at constant temperature for application to  $\alpha$ -zirconium oxidation at high temperature, J. of Nuclear Materials 92 (1980) 249-256.

---

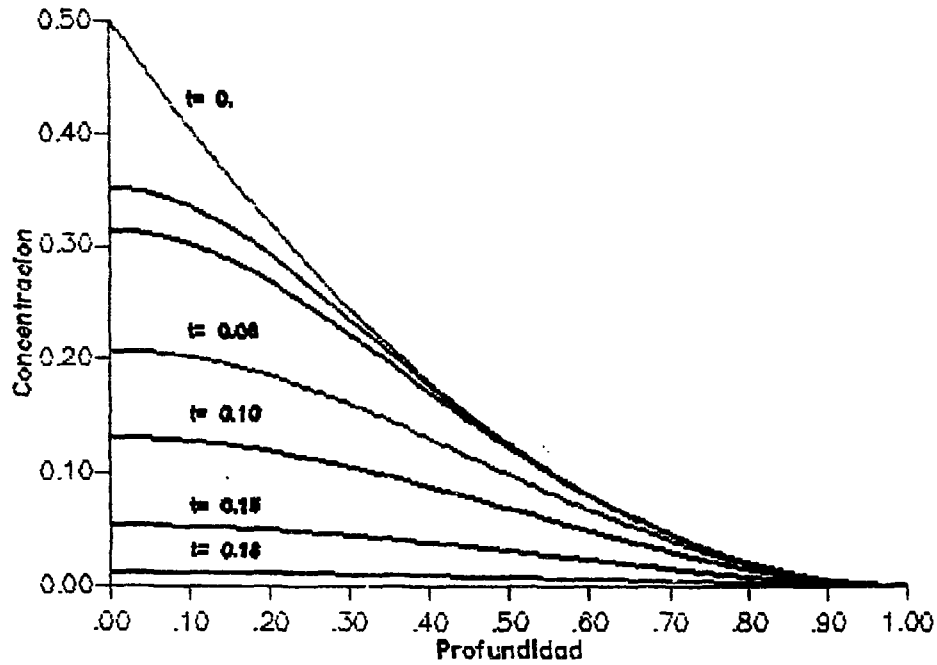
Agradecimientos:

Agradezco a la Lic Patricia Binaghi la graficación de las curvas que se exhiben en la presente nota.

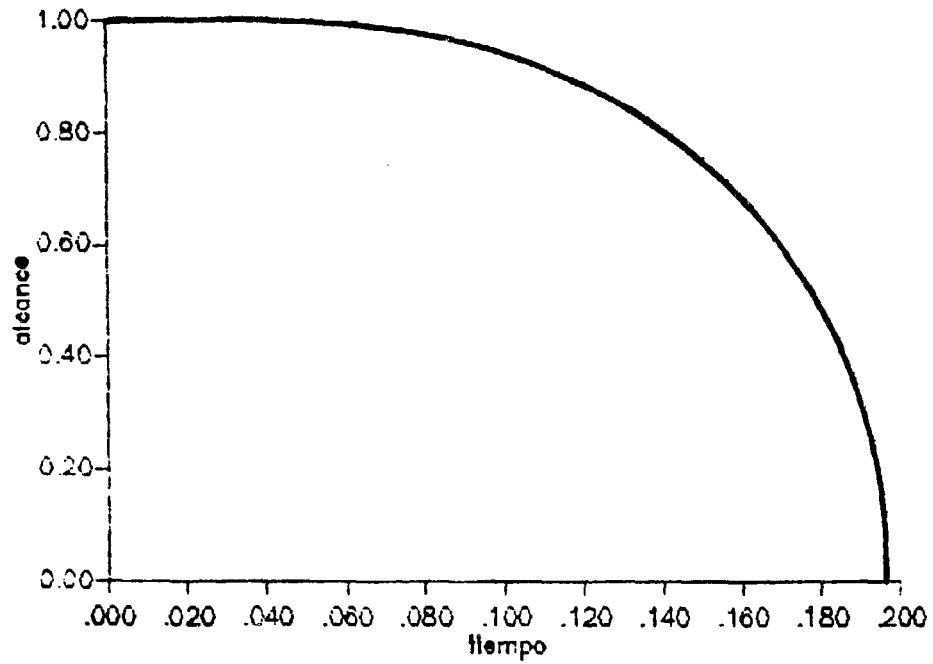
Al Lic Horacio Taboada y Lic Alberto Mascitti, agradezco el generoso asesoramiento en el uso del procesador de textos.

---

**Perfiles de concentración de oxígeno  
para diferentes tiempos**

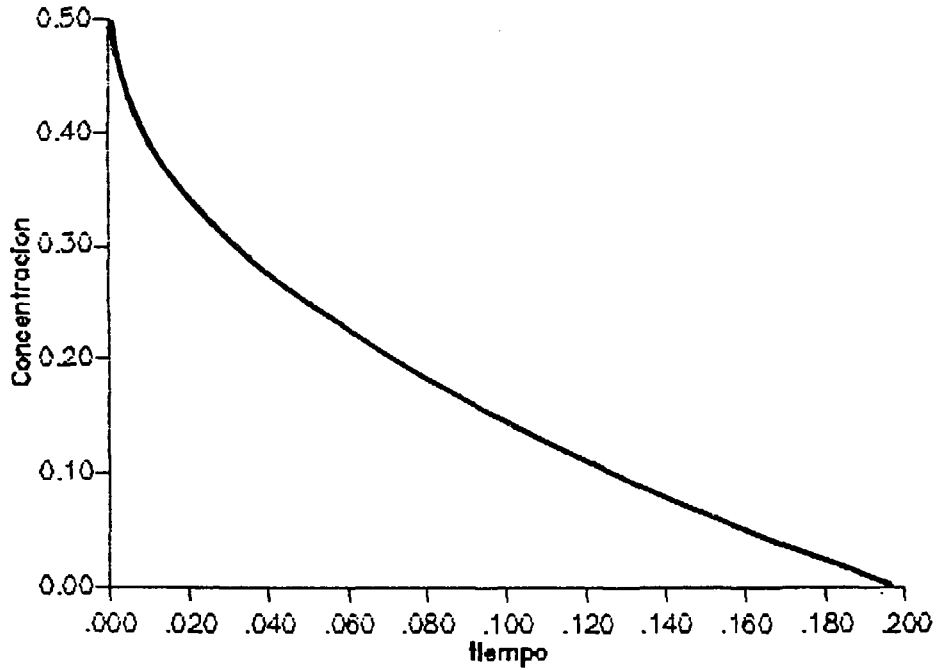


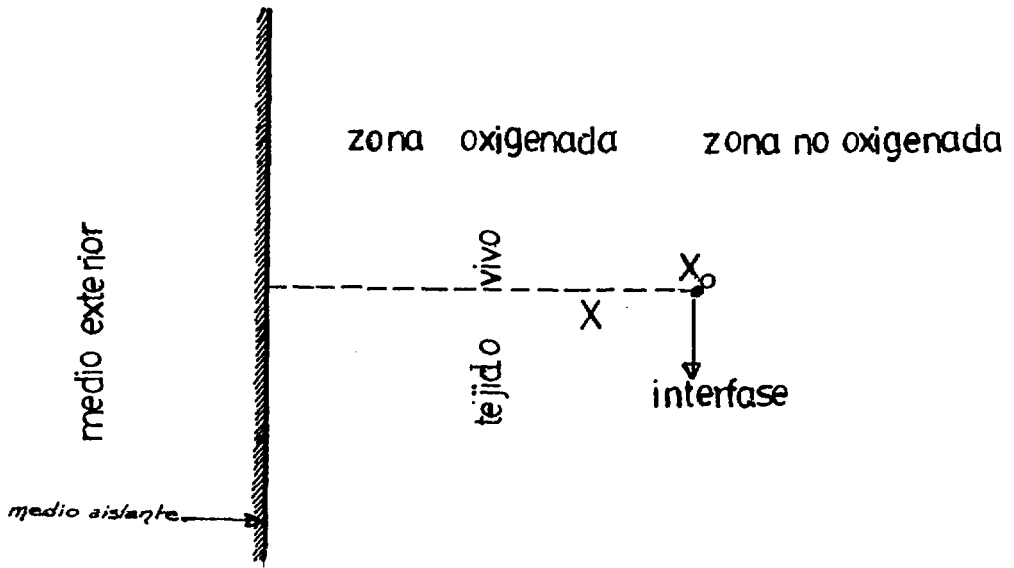
**Posición de la frontera marítima  
con respecto al tiempo**



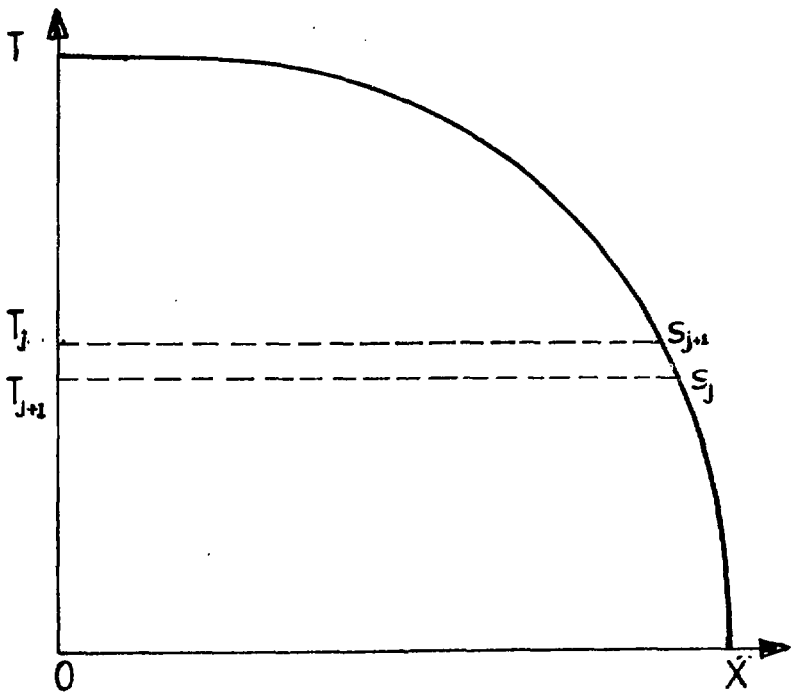


**Variacion de la concentracion de oxigeno  
en la superficie , con respecto al tiempo**

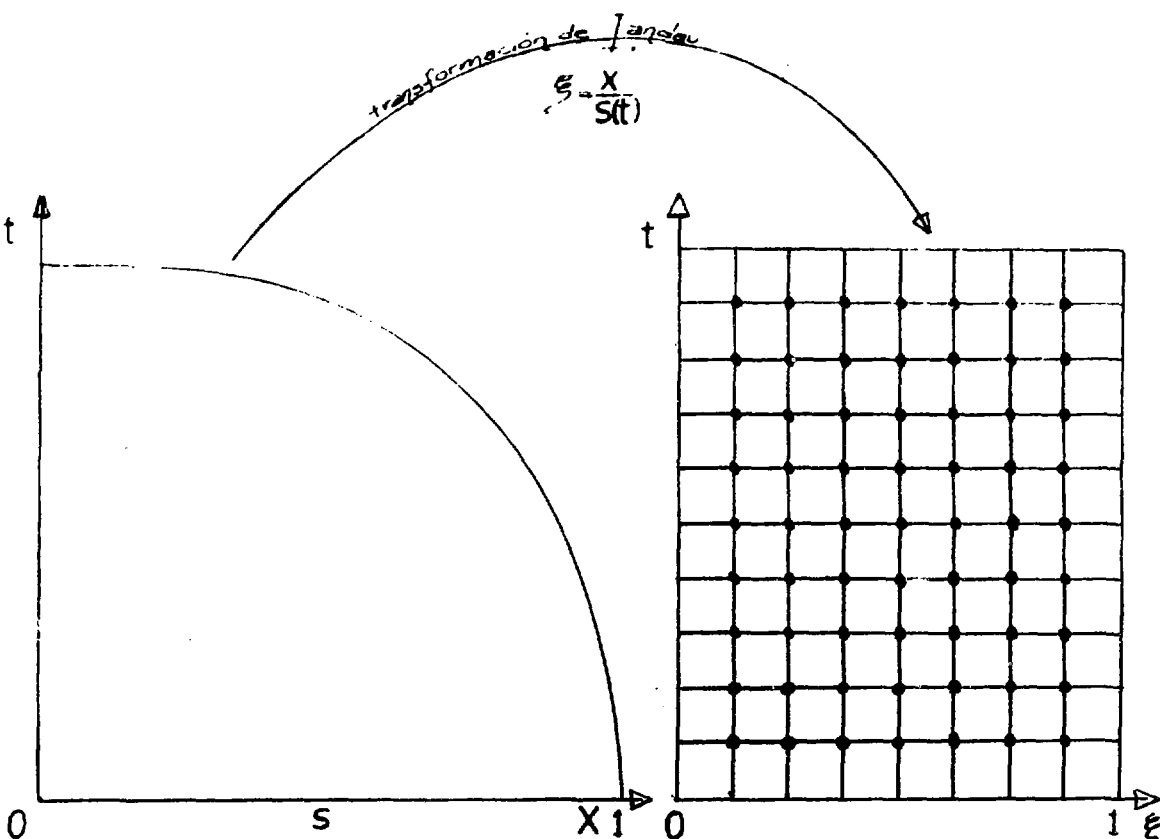




(fig. 1)



(fig. 2)



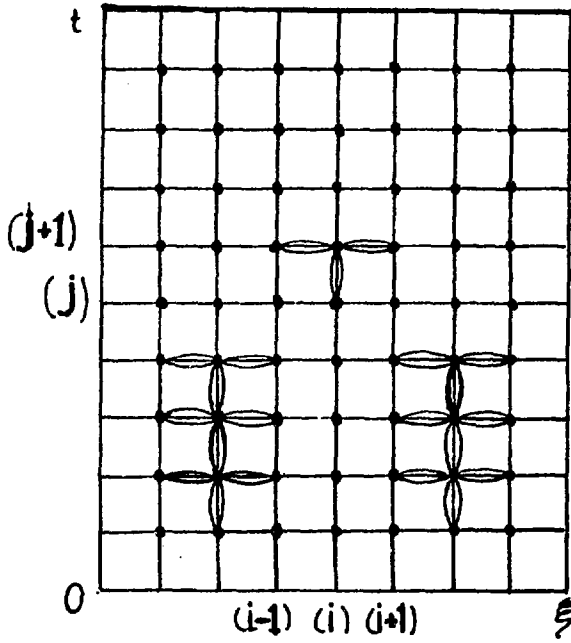
dominio del problema de oxigenación

dominio de cálculo de la ecuación (5)

(fig. 3a)

(fig. 3b)

Esquema de Laasonen



(fig. 4)