

## EL PROBLEMA DE DIFUSIÓN-CONSUMO DE OXÍGENO EN TEJIDOS VIVIENTES

María E. Ascheri<sup>1</sup>, Cristina V. Turner<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad Nacional de La Pampa. Uruguay 151. (6300)  
Santa Rosa. La Pampa. E-mail: [mavacheri@exactas.unlpam.edu.ar](mailto:mavacheri@exactas.unlpam.edu.ar)

<sup>2</sup>Facultad de Matemática, Astronomía y Física. Universidad Nacional de Córdoba. Valparaíso y Martínez.  
Ciudad Universitaria. (5000) Córdoba. E-mail: [turner@mate.uncor.edu](mailto:turner@mate.uncor.edu)

### RESUMEN

Se analiza un problema de frontera libre implícito que se origina a partir de la difusión de oxígeno en un medio que simultáneamente consume oxígeno, con una razón de consumo de oxígeno que depende del tiempo. Una combinación de métodos numéricos y analíticos son aplicados a este problema y los resultados son expresados, finalmente, en la forma de una expresión polinomial aproximada. Se obtienen, de esta manera, soluciones numéricas y aproximaciones analíticas de una ecuación diferencial parcial, que es la que describe la difusión de oxígeno en un medio absorbente. Las dificultades matemáticas esenciales están asociadas con la presencia de una frontera libre (que indica la máxima penetración de oxígeno en el medio) y también con la necesidad de determinar la distribución de oxígeno en el medio como una función del tiempo. Se deducen ciertas propiedades de la solución del problema original y de la frontera libre. Aplicando los resultados obtenidos, se presentan diversos ejemplos que surgen de considerar distintas expresiones para la razón de consumo de oxígeno, realizándose en cada uno de ellos el análisis correspondiente. Este problema tiene una aplicación particular en la investigación médica: la predicción del modelo puede ser usada en el tratamiento del cáncer por radioterapia [1].

### ABSTRACT

An implicit free boundary problem is analyzed which is originate from the diffusion of oxygen in a medium which simultaneously consumes the oxygen, with a rate of consumption of oxygen which depends on the time. A combination of numerical and analytical methods are applied to this problem and the results are finally expressed in the form of an approximate polynomial expression. By this way, numerical solutions and approximate analytical of a partial differential equation are obtained, which describe the diffusion of oxygen in an absorbing medium. Essential mathematical difficulties are associated with the presence of a free boundary (which marks the furthest penetration of oxygen into the medium) and also with the necessity of determining the distribution of oxygen through the medium as a function of time. Some properties are deduced from the solution of the original problem and from the free boundary. Through the results, several examples are presented which arise of considering differents expressions for the rate of consumption of oxygen, being carried out in each one of them the corresponding analysis. This problem has a particular application in medical research: the prediction of the pattern can be used in the treatment of the cancer by radiotherapy [1].

### INTRODUCCIÓN

La difusión de oxígeno en un medio absorbente, como un ejemplo de problemas de frontera libre implícitos [2], [3], [4], [5], [6], ha sido tratado por un gran número de autores usando diferencias finitas, funciones de Green y elementos finitos [7], [8], [9], [10].

En este trabajo se estudia el problema de frontera libre con una razón de consumo de oxígeno que depende del tiempo. Primero, se obtiene una solución analítica de este problema utilizando la transformada de Laplace y se deduce, a partir de esta solución, una solución analítica aproximada. Se derivan, además, algunas propiedades de la solución y de la frontera libre. Luego, se aplican a este problema métodos numéricos y analíticos, obteniéndose una solución numérica y una solución analítica aproximada utilizando el método de diferencias finitas para una red fija y el método integral, respectivamente. Finalmente, los resultados obtenidos son aplicados a varios ejemplos que surgen a partir de la elección de una determinada función para la razón de consumo de oxígeno que depende del tiempo. Se presenta aquí uno de estos ejemplos y se muestran algunas de las tablas y los gráficos que resultan a partir de los cálculos que se han realizado utilizando una computadora, usando el paquete MATLAB, así como también, las conclusiones a las que se han arribado.

### FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

El problema original fue introducido por J. Crank y R. Gupta [7]: primero se deja difundir oxígeno en un medio; parte del oxígeno es absorbido por el medio siendo, por lo tanto, eliminado del proceso de difusión. La concentración de oxígeno en la superficie del medio es mantenida constante. Esta primera fase del problema continúa hasta alcanzar un estado estacionario en el cual el oxígeno no penetra más allá en el medio. El suministro de oxígeno es entonces cortado y la superficie del medio es sellada de manera que no entre ni salga más oxígeno. El medio continúa absorbiendo el oxígeno disponible en su interior y por consiguiente, la frontera, que establece la separación entre la zona de concentración positiva y nula de oxígeno y que marca el ancho de penetración máxima en el caso estacionario, comienza a retroceder hacia la superficie sellada. Durante esta fase del proceso, las dificultades matemáticas esenciales son, fundamentalmente, las de localizar el movimiento de la frontera libre y determinar la distribución de oxígeno en el medio como una función del tiempo. Estos autores estudiaron el problema asumiendo que la razón de consumo de oxígeno, que se denota con  $m$ , es constante. En el presente trabajo se generaliza el problema considerando  $m=m(t)$ ,  $m>0$ ,  $m \in C^1(0,t)$  y creciente. El proceso de difusión de oxígeno en un medio que simultáneamente consume oxígeno, puede ser representado por la siguiente ecuación diferencial parcial

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - m(t), \quad (1)$$

donde,

$C(x,t)$ : es la concentración de oxígeno libre a difundirse a una distancia  $x$  desde la superficie externa del medio ( $x=0$ ) en el tiempo  $t$ .

$D > 0$ : es el coeficiente constante de difusión.

$m(t)$ : es la razón de consumo de oxígeno por unidad de volumen del medio.

**El problema de difusión-consumo de oxígeno consta de dos partes:**

(a) El problema estacionario.

(b) El problema de frontera libre.

(a) Un estado estacionario es alcanzado en el caso en que la concentración en cada punto del medio se hace independiente del tiempo, es decir,  $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$  en todas partes, cuando el gradiente de la

concentración se hace cero en el punto  $x_0$  y para  $x > x_0$  y donde también, la concentración es cero ( $x_0$  señala la más distante penetración de oxígeno en el medio). Se asume, además, que al llegar a este estado  $m(t)$  toma un cierto valor constante  $m_0$ . La primera parte consiste entonces en hallar la solución estacionaria  $C(x)$  y el punto  $x=x_0$  de manera que satisfagan el sistema

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - m_0 = 0, \quad 0 \leq x \leq x_0 \quad (2)$$

$$C = C_0, \quad x=0 \quad (3)$$

$$C = 0, \quad x \geq x_0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad x \geq x_0 \quad (5)$$

para  $t \geq 0$  ( $C_0$ : concentración de oxígeno entrante por la superficie externa del medio  $x=0$ ).

La solución del sistema anterior está dada por

$$C(x) = \frac{m_0}{2D} (x - x_0)^2, \quad x \leq x_0 \quad (6)$$

$$x_0 = \sqrt{\frac{2DC_0}{m_0}}, \quad (7)$$

y para  $x \geq x_0$ , la concentración es cero.

(b) La segunda etapa empieza cuando la superficie  $x=0$  es sellada. El oxígeno existente en el medio, en la región  $0 \leq x \leq x_0$ , continúa siendo consumido por el mismo. Entonces, el punto de concentración cero retrocede hacia la superficie sellada  $x=0$ . Se representa con  $x_0(t)$  la posición de dicho punto en el instante  $t$  de manera que  $x_0(0) = x_0 = \sqrt{\frac{2DC_0}{m_0}}$  y se asume que  $m(0) = m_0$ .

En la segunda etapa, el problema consiste en hallar  $c(x,t)$  y  $x_0(t)$  soluciones del sistema

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - m(t), \quad 0 \leq x \leq x_0(t), \quad t \geq 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad x = 0, \quad t \geq 0 \quad (9)$$

$$c = \frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad x = x_0(t), \quad t \geq 0 \quad (10)$$

$$c(x,0) = h(x) = \frac{m_0}{2D} (x - x_0)^2, \quad 0 \leq x \leq x_0, \quad (11)$$

donde  $t=0$  es el instante cuando la superficie  $x=0$  es sellada.

La última condición muestra que  $\left. \frac{d}{dx} h(x) \right|_{x=0} = -\frac{m_0 x_0}{D} \neq 0$ , la cual revela una discontinuidad en el

gradiente de la concentración. Esta discontinuidad se debe al gradiente cero en la superficie, que es instantáneamente impuesto cuando la superficie es sellada. Debido a esta discontinuidad, los métodos numéricos basados en diferencias finitas están expuestos a dar soluciones incorrectas en las proximidades de la superficie para tiempos pequeños. Sin embargo, habrá un intervalo de tiempo antes que la perturbación en la superficie tenga un efecto sobre la solución en las proximidades de  $x=x_0(0)$  para un determinado orden de exactitud especificado. Así, se puede obtener una solución analítica que dará una buena aproximación para tiempos pequeños, asumiendo que la frontera  $x_0(t)$  no se mueve inicialmente. Es decir, se quiere resolver un problema de frontera fija.

Usando la transformada de Laplace se obtuvo que la solución analítica de (8) sujeta a la condición inicial (11) y a las condiciones de contorno (9) y  $c=0$ ,  $x=x_0$ ,  $t \geq 0$  está dada por

$$\begin{aligned} c(x,t) = & \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^t m(t-u) \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{2nx_0 + x_0 - x}{2\sqrt{D}\sqrt{u}} \right) + \operatorname{erfc} \left( \frac{2nx_0 + x_0 + x}{2\sqrt{D}\sqrt{u}} \right) \right] du - \\ & - m_0 t \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{2nx_0 + x_0 - x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right) + \operatorname{erfc} \left( \frac{2nx_0 + x_0 + x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right) \right] - \\ & - \frac{m_0}{2D} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[ (2nx_0 + x_0 - x)^2 \operatorname{erfc} \left( \frac{2nx_0 + x_0 - x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right) + (2nx_0 + x_0 + x)^2 \operatorname{erfc} \left( \frac{2nx_0 + x_0 + x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right) \right] + \\ & + \frac{m_0 \sqrt{D}\sqrt{t}}{D\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[ (2nx_0 + x_0 - x) \exp \left( -\left( \frac{2nx_0 + x_0 - x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right)^2 \right) + (2nx_0 + x_0 + x) \exp \left( -\left( \frac{2nx_0 + x_0 + x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right)^2 \right) \right] + \\ & + 2 \frac{m_0 \sqrt{D}\sqrt{t} x_0}{D\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[ \exp \left( -\left( \frac{2nx_0 + 2x_0 - x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right)^2 \right) - \exp \left( -\left( \frac{2nx_0 + x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right)^2 \right) \right] - \\ & - \frac{m_0 x_0}{D} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[ (2nx_0 + 2x_0 - x) \operatorname{erfc} \left( \frac{2nx_0 + 2x_0 - x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right) - (2nx_0 + x) \operatorname{erfc} \left( \frac{2nx_0 + x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right) \right] - \\ & - \int_0^t m(u) du + \frac{m_0}{2D} (x - x_0)^2 + m_0 t, \quad 0 \leq x \leq x_0, \quad t \geq 0. \quad (12) \end{aligned}$$

Si  $t \leq 0.020$  y para funciones apropiadas para  $m(t)$ , los seis primeros términos de esta expresión pueden ser aproximados sólo poniendo los correspondientes a  $n=0$  cuando los términos menores que

$10^{-6}$  son despreciados y, los segundos sumandos del primero, segundo, tercero y cuarto términos y los primeros sumandos del quinto y sexto términos pueden ser ignorados con un error menor que  $10^{-3}$ . La concentración para  $0 \leq t \leq 0.020$ , puede entonces ser aproximada por la siguiente expresión

$$c(x, t) \approx \int_0^t m(t-u) \operatorname{erfc} \left( \frac{X_0 - x}{2\sqrt{D}\sqrt{u}} \right) du - m_0 \operatorname{erfc} \left( \frac{X_0 - x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right) \left[ t + \frac{1}{2D} (X_0 - x)^2 \right] + \frac{m_0 \sqrt{D}\sqrt{t}}{D\sqrt{\pi}} \left[ (X_0 - x) \exp \left( - \left( \frac{X_0 - x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right)^2 \right) - 2 X_0 \exp \left( - \left( \frac{x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right)^2 \right) \right] + \frac{m_0 X_0 x}{D} \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right) - \int_0^t m(u) du + \frac{m_0}{2D} (x - X_0)^2 + m_0 t, \quad 0 \leq x \leq X_0 = x_0(0). \quad (13)$$

Ahora, substituyendo  $x$  por  $x=0$ , la concentración en la superficie es

$$c_0(t) = c(0, t) \approx \int_0^t m(t-u) \operatorname{erfc} \left( \frac{X_0}{2\sqrt{D}\sqrt{u}} \right) du - m_0 \operatorname{erfc} \left( \frac{X_0}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right) \left( t + \frac{X_0^2}{2D} \right) + \frac{m_0 \sqrt{D}\sqrt{t} X_0}{D\sqrt{\pi}} \left[ \exp \left( - \left( \frac{X_0}{2\sqrt{D}\sqrt{t}} \right)^2 \right) - 2 \right] - \int_0^t m(u) du + \frac{m_0}{2D} X_0^2 + m_0 t. \quad (14)$$

Haciendo  $c_0(t)=0$ , se puede estimar el tiempo final,  $t_f$ , donde la frontera libre llega a la superficie  $x=0$ .

Se derivan ahora algunas propiedades de la solución y de la frontera libre.

**Proposición.** La concentración  $c(x,t)$  es una función positiva y es una función decreciente de la variable  $x$ . Además, si  $\frac{d}{dt} m(t) > 0$ , entonces la concentración es una función decreciente de la variable  $t$  y la frontera libre  $x_0(t)$  es una función decreciente de la variable  $t$ .

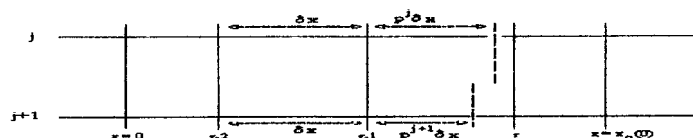
## MÉTODOS DE SOLUCIÓN DEL PROBLEMA

En cuanto la frontera comienza a moverse, se recurre a métodos de solución numérica. En el análisis presente, las concentraciones en los puntos intermedios de la red han sido calculadas usando una simple fórmula explícita de diferencias finitas. Cerca de la frontera libre es usada una fórmula tipo a la de Lagrange, como lo sugirió Crank [11]. La ubicación de la frontera libre es determinada por una serie de Taylor. La región completa  $0 \leq x \leq x_0(0)$ , es subdividida en  $M$  subintervalos de ancho  $\delta x$  y se toma  $x_r = r \delta x$ , donde,  $0 \leq r \leq M$ ,  $r$  entero ( $M \delta x = x_0(0)$ ).

### Método de diferencias finitas para una red fija

#### Concentraciones en los puntos intermedios

Se asume que las concentraciones en cada uno de los puntos de la red en el nivel de tiempo  $j$ -ésimo son conocidas y la posición de la frontera libre en ese tiempo está en algún lugar en el intervalo  $r$ -ésimo entre  $x_{r-1}$  y  $x_r$ , dada por  $x_0^j = (r-1)\delta x + p^j \delta x$  donde,  $0 < p^j < 1$  y es también conocido.



Posición de la frontera libre en un sistema de red fijo

Entonces, las concentraciones en el nivel de tiempo  $(j+1)$ -ésimo, hasta e incluyendo el punto de la red  $(r-2)\delta x$  pueden ser calculadas usando las conocidas fórmulas explícitas

$$c_0^{j+1} = c_0^j + 2D \frac{\delta t}{(\delta x)^2} (c_1^j - c_0^j) - m(t^j) \delta t \quad (15)$$

$$c_k^{j+1} = c_k^j + D \frac{\delta t}{(\delta x)^2} (c_{k+1}^j - 2c_k^j + c_{k-1}^j) - m(t^j) \delta t, \quad (16)$$

para  $k=1, 2, \dots, (r-2)$ , donde  $\delta t$  es el tamaño del paso del tiempo y  $c_k^j$  denota la concentración en el punto  $k \delta x$  en el tiempo  $j \delta t$ .

### Concentración en la proximidad de la frontera libre

Se utiliza una fórmula de interpolación de Lagrange aplicada en los puntos  $(r-2)\delta x$ ,  $(r-1)\delta x$  y la frontera libre  $x_0 = (r-1)\delta x + p\delta x$  para todo tiempo  $t$ , y se usa la condición de contorno (10). Se obtiene la siguiente expresión explícita para  $c_{r-1}^{j+1}$

$$c_{r-1}^{j+1} = c_{r-1}^j + 2D \frac{\delta x}{(\delta x)^2} \left( \frac{c_{r-2}^j}{1+p^j} - \frac{c_{r-1}^j}{p^j} \right) - m(t^j)\delta t. \quad (17)$$

### Posición de la frontera libre

Con el fin de determinar la ubicación de la frontera libre, se utiliza la condición de contorno (10) para deducir las derivadas parciales de mayor orden. La variable  $t$  en  $x_0(t)$  es omitida en las siguientes discusiones. Así, la serie de Taylor para  $c_{r-1}$ , la concentración en el punto de la red  $(r-1)\delta x$  próxima a la frontera libre  $x_0 = (r-1)\delta x + p\delta x$  para todo tiempo  $t$ , puede ser escrita como

$$c_{r-1} = \frac{1}{2}(p\delta x)^2 \frac{m(t)}{D} + \frac{1}{6}(p\delta x)^3 \frac{m(t)}{D^2} \frac{dx_0}{dt} + \dots \quad (18)$$

Siempre que la frontera no se mueva demasiado rápido, el primer término de la serie suministra una aproximación razonable. Por lo tanto, la posición de la frontera libre en el nivel de tiempo  $(j+1)$ -ésimo está dada por

$$x_0^{j+1} = \left[ (r-1) + \sqrt{\frac{2Dc_{r-1}^{j+1}}{m(t^{j+1})} \frac{1}{\delta x}} \right] \delta x. \quad (19)$$

### Frontera libre que cruza una línea de la red

A medida que  $c_{r-1}$  va decreciendo hay que controlar que las siguientes situaciones no ocurran:

- (i)  $c_{r-1}^{j+1} \leq 0$ : ella es físicamente imposible;
- (ii)  $c_{r-1}^{j+1} > c_{r-1}^j$ : el proceso numérico se ha hecho inestable.

Se realiza un análisis de estabilidad del esquema aquí utilizado. Cuando una de las condiciones anteriores aparece, se considera hasta el  $(r-1)$ -ésimo punto de la red calculado en el nivel de tiempo  $(j-1)$ -ésimo. La fórmula de Lagrange es entonces aplicada para recalcular  $c_{r-2}^j$  usando un nuevo valor de  $p$  en el tiempo  $(j-1)$ -ésimo, el cual es tomado del que es el anterior valor de  $p^{j-1}$  más 1. Este proceso es continuado hasta que haya al menos dos puntos de la red incluyendo la superficie sellada.

### Método Integral. Descripción

Ahora se utiliza el "Método Integral" introducido por Theodore R. Goodman en 1958 [12], con el fin de obtener una solución analítica aproximada del problema de frontera libre.

Se integra la ecuación (8) con respecto a la variable  $x$ , sobre el rango para el cual ella es válida y se insertan las condiciones de contorno (9) y (10), produciendo una ecuación integral. Se obtiene así que

$$\frac{d}{dt} \int_0^{x_0(t)} c(x,t) dx = -m(t)x_0(t). \quad (20)$$

Se asume ahora que  $c(x,t)$  puede ser representada por un polinomio de cuarto grado en  $x$  de la forma

$$c(x,t) = a_1(t) + a_2(t)x + a_3(t)x^2 + a_4(t)x^3 + a_5(t)x^4. \quad (21)$$

Para determinar los cinco parámetros desconocidos se usan las condiciones de contorno (9) y (10), la

expresión (14) y la ecuación  $D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = m(t)$ ,  $x = x_0(t)$ .

### Determinación de los coeficientes y de la frontera libre

Se obtiene así, el siguiente sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{cases} c_0 + a_3 x_0(t)^2 + a_4 x_0(t)^3 + a_5 x_0(t)^4 = 0 \\ 2a_3 x_0(t) + 3a_4 x_0(t)^2 + 4a_5 x_0(t)^3 = 0 \\ 2a_3 + 6a_4 x_0(t) + 12a_5 x_0(t)^2 = \frac{m(t)}{D} \end{cases} \quad (22)$$

Resolviendo este sistema de ecuaciones lineales, la ecuación para el polinomio resulta

$$c(x, t) = \left(1 - \frac{x}{x_0(t)}\right)^2 \left[ \frac{m(t)}{2D} x^2 + 4c_0 \left(1 - \frac{x}{x_0(t)}\right) - 3c_0 \left(1 - \frac{x}{x_0(t)}\right)^2 \right] \quad (23)$$

la cual contiene la posición de la frontera libre  $x_0(t)$  que aún tiene que ser determinada.

Introduciendo la expresión (23) en la ecuación (20), se obtiene una ecuación diferencial ordinaria para la posición de la frontera libre  $x_0(t)$ , con  $t$  como variable independiente y que tiene que ser resuelta

$$\dot{x}_0(t) = - \frac{\int_0^t \frac{\partial m}{\partial t}(t-u) \operatorname{erfc}\left(\frac{X_0}{2\sqrt{D}\sqrt{u}}\right) du - \frac{m_0\sqrt{D}X_0}{D\sqrt{\pi}\sqrt{t}} + \frac{3}{2}m(t) + m_0 + \frac{1}{24D}\dot{m}(t)x_0(t)^2}{c_0(t) + \frac{1}{8}m(t)x_0(t)^2} x_0(t). \quad (24)$$

Para obtener una solución numérica de esta ecuación diferencial ordinaria para  $x_0(t)$  se usa un método de Runge-Kutta. Una vez que la solución es obtenida, se la reemplaza en la expresión polinomial para la concentración, ecuación (23), hallándose así, la distribución de la concentración en ese tiempo.

### APLICACIÓN DE LOS RESULTADOS

Se asume que  $m_0=1$ ,  $D=1$  y  $X_0=1$ , lo cual es posible adimensionalizando el problema original. Se obtiene una solución para la concentración de oxígeno  $c(x, t)$  y la posición de la frontera libre para todo tiempo ( $t_m$ : tiempo mínimo a partir del cual la derivada de  $x_0(t)$  es negativa):

<i>Solución por Laplace Truncado</i>	<i>para</i>	$0 \leq t \leq 0.020$
<i>Solución por Laplace</i>	<i>para</i>	$0.020 \leq t \leq t_m$
<i>Solución por el método integral</i>	<i>para</i>	$t_m \leq t \leq t_f$
<i>Solución por el método de diferencias finitas</i>	<i>para</i>	$0 \leq t \leq t_f$

Tal como se indica en los cuadros anteriores, los tres primeros métodos se utilizan consecutivamente para llegar hasta el final del tiempo y el último, con el que se comparan los resultados obtenidos por este método y por los tres primeros, desde el principio hasta el final.

**Ejemplo. Razón de consumo de oxígeno:**  $m(t) = 1.5 t^2 + 1.5 t + 1$ .

Se encuentra en este caso que  $t_f=0.17658$  y  $t_m=0.0446$ . La Tabla I muestra que los valores obtenidos usando el método de diferencias finitas están en muy buena concordancia con aquellos calculados desde la solución por Laplace truncado, para tiempos pequeños. Se debe notar que las soluciones numéricas involucran errores grandes en el comienzo en la superficie, debido a la discontinuidad en el gradiente en el tiempo cero, pero luego se vuelven consistentes con las soluciones por Laplace truncado. En  $t=0.020$ , la diferencia entre ambas soluciones no es más que de 0.0006 en todas partes, cuando la frontera  $x_0$  se ha movido apenas una distancia de 0.003 desde su posición original  $x_0=1$ .

TABLA I. Comparación entre las soluciones por Laplace truncado (entrada superior) y numérica (entrada inferior,  $\delta x = 0.05$ ,  $\delta t = 0.001$ ). Los valores tabulados son  $10^6 c$ .

$t \backslash x$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
0.001	464317	404605	319999	244999	179999	124999	79999	44999	19999	4999
	460000	405000	320000	245000	180000	125000	80000	45000	20000	5000
0.002	449534	401924	319970	244997	179997	124997	79997	44997	19997	4997
	451998	404998	319998	244998	179998	124998	79998	44998	19998	4998
0.003	438189	397804	319753	244991	179993	124993	79993	44993	19993	4994
	437595	398595	319995	244995	179995	124995	79995	44995	19995	4995
0.004	428623	393144	319199	244989	179988	124988	79988	44988	19988	4989
	429591	394751	319991	244991	179991	124991	79991	44991	19991	4991
0.005	420193	388318	318283	244905	179980	124981	79981	44981	19981	4983
	420305	389113	318961	244985	179985	124985	79985	44985	19985	4986
0.008	399026	374033	313805	244203	179898	124950	79952	44952	19953	4959
	399430	374778	314649	244565	179958	124958	79958	44958	19958	4963
0.010	387087	364996	309874	243200	179729	124910	79924	44925	19927	4939
	387429	365600	310651	243658	179859	124932	79932	44932	19933	4944
0.012	378263	356390	305513	241778	179411	124839	79887	44892	19895	4916
	378594	356907	306225	242289	179611	124867	79900	44901	19903	4921
0.015	361932	344218	298519	238973	178596	124633	79674	44748	19772	4975
	361912	344651	299145	239513	178881	124732	79835	44842	19849	4981
0.019	344189	329181	288819	234277	176949	124088	79614	44715	19747	4911
	344447	329529	289358	234813	177208	124259	79677	44739	19760	4919
0.020	340119	325577	286370	232973	176300	123895	79544	44679	19720	4793
	340372	325933	286691	233504	176672	124061	79618	44707	19734	4802

TABLA II. Comparación entre las soluciones por Laplace (entrada superior) y numérica (entrada inferior,  $\delta x = 0.05$ ,  $\delta t = 0.001$ ). Los valores tabulados son  $10^6 \cdot c$ .

$x \backslash t$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
0.020	340119 340372	325577 326933	286370 286891	232973 233504	176300 176672	123895 124081	79544 79618	44679 44707	19720 19734	4793 4802
0.022	332266 332510	318599 318934	281470 281958	230243 230761	175077 175467	123433 123660	79374 79468	44595 44632	19662 19680	4758 4766
0.025	321111 321346	308661 308870	274149 274596	225900 226397	172988 173365	122553 122807	79027 79153	44433 44487	19561 19585	4894 4707
0.027	314032 314260	302124 302419	269305 269730	222876 223357	171376 171789	121641 122115	78729 78875	44295 44363	19481 19512	4649 4665
0.030	303870 304091	292808 293084	262115 262510	218193 218662	168783 169199	120562 120890	78174 78349	44038 44125	19341 19382	4573 4594
0.035	287959 288170	278058 278315	250361 250717	210118 210543	163968 164380	118080 118385	76951 77165	43449 43570	19034 19096	4419 4453
0.040	273092 273295	264133 264374	238912 239239	201836 202232	158670 159071	115025 115364	75353 75597	42636 42789	18915 18701	4222 4273
0.042	267391 267592	258761 258998	234417 234735	198489 198875	156442 156838	113687 114030	74612 74865	42244 42408	18411 18508	4128 4187
0.044	261815 262014	253492 253725	229970 230279	195131 195507	164163 164554	112284 112629	73815 74077	41814 41969	18185 18292	4024 4093

La Tabla II muestra que los valores obtenidos usando el método de diferencias finitas están en muy buena concordancia con aquellos calculados desde la solución por Laplace. En  $t=0.044$ , la diferencia entre ambas soluciones no es más que de 0.0004 en todas partes, cuando la frontera  $x_0$  se ha movido una distancia de 0.01 desde su posición original  $x_0=1$ .

Las curvas típicas de la Figura 1 demuestran la forma general y confirman que la concentración no varía, dentro de la exactitud de la representación gráfica, cerca de la frontera en  $x=1$ .

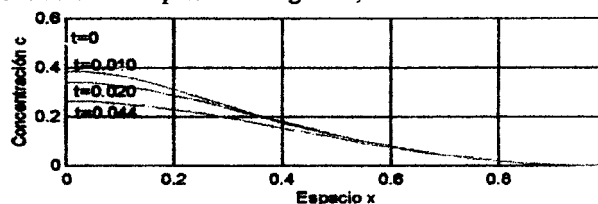


Figura 1. Distribución de las concentraciones para  $t \leq 0.044$  antes que la frontera se mueva dentro de la exactitud de la representación gráfica. (Método de diferencias finitas).

La Tabla III muestra una comparación de las concentraciones en distintos tiempos ( $t \geq 0.045$ ) junto con la posición de la frontera libre. Se ve muy buena concordancia entre los valores obtenidos con el método integral y con el método de diferencias finitas.

TABLA III. Comparación de las concentraciones y las distancias de la frontera libre desde la superficie sellada. La entrada superior muestra los valores obtenidos desde el método integral con la ecuación diferencial ordinaria resuelta por un método de Runge-Kutta y la entrada inferior, los valores obtenidos desde la solución numérica ( $\delta x = 0.05$ ,  $\delta t = 0.001$ ).

$x \backslash t$	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	Frontera Libre
0.045	259070 259268	249957 251124	225933 228069	192442 193820	153942 153394	114414 111906	77257 73662	45290 41764	20750 18175	5294 4092	1.00000 0.98745
0.050	245749 245943	237236 238480	215029 217192	183784 185370	147589 147439	110211 108077	74796 71388	44072 40493	20274 17504	5158 3751	0.99682 0.99404
0.060	220797 220987	213479 214571	194210 196235	166784 168501	134687 134950	101092 99533	68864 65947	40556 37243	18413 16710	4369 2989	0.99090 0.97456
0.080	175794 175984	170313 171079	155975 156965	134115 135340	108430 108718	80964 80046	54206 52329	30492 28351	12202 10542	1662 1026	0.95528 0.94283
0.100	135190 135397	131104 131633	119790 120380	102931 103191	82040 81873	59459 58766	37354 36416	18229 17415	4793 4365	0 0	0.88497 0.88970
0.120	97496 97751	94568 94670	86020 85773	72840 72655	55771 55075	37324 36836	19770 19689	8143 8332	42 54	0 0	0.80844 0.80051
0.140	61822 62204	59957 59760	53802 52722	43384 41960	29884 28897	18644 15519	4180 4541	0 0	0 0	0 0	0.68849 0.69283
0.160	27587 28302	26928 26448	23031 21159	16231 13427	8629 5153	84 0	0 0	0 0	0 0	0 0	0.51165 0.50369
0.170	10878 11960	10312 10423	5817 6277	1011 1275	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0	0.37252 0.34432
0.175	2804 3973	1744 2734	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0	0 0	0.25898 0.19344

Nota. Para  $t \leq 0.044$  ver Tablas I y II.

La Figura 2 muestra la distribución de las concentraciones en distintos tiempos y la Figura 3 permite observar el comportamiento de la frontera libre con respecto al tiempo.

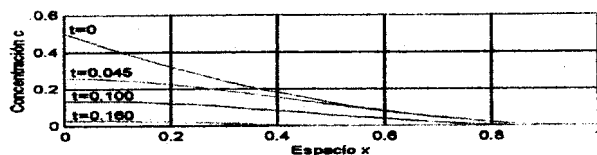


Figura 2. Distribución de las concentraciones para el estado estacionario ( $t=0$ ) y para  $t>0.044$ . (Método integral).

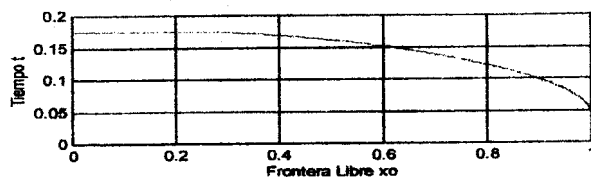


Figura 3. Posición de la frontera libre con respecto al tiempo. (Método de Runge-Kutta).

### RESUMEN Y CONCLUSIÓN

- Cuando se ha asumido que la frontera no se mueve de su posición original (tiempos pequeños), los valores obtenidos por el método de diferencias finitas están en muy buena concordancia con aquellos calculados desde la solución por Laplace truncado y por Laplace, respectivamente. Para tiempos grandes, los valores obtenidos por el método integral muestran muy buena concordancia con aquellos calculados por el método de diferencias finitas.
- El método integral es especialmente útil para calcular la concentración y la posición de la frontera libre en un tiempo arbitrario y en el final, en el caso en que el método numérico no trabajase debido a los pocos puntos de la red que quedan. Este método también se puede utilizar desde el inicio del proceso.

### REFERENCIAS

- [1] LIAPIS A.I.- LIPSCOMB G.G.- CROSSER O.K.- TSIROYIANNI - LIAPIS E., *A model of oxygen diffusion in absorbing tissue*, Math. Modelling, 3, 1982, págs. 83-92.
- [2] BERGER A. - CIMENT M. - ROGERS J. C. W., *Numerical solution of a diffusion consumption problem with a free boundary*, SIAM J. Num. Anal., 12, 1975, págs. 646-672.
- [3] CRANK J., *Free and moving boundary problems*, Clarendon Press, Oxford, 1984.
- [4] PRIMICERIO M., *Problemi di diffusione a frontiera libera*, Boll.U.M.I., 18ª, 1981, págs.11-68.
- [5] TARZIA D. A., *A bibliography on moving - free boundary problems for the heat - diffusion equation. The Stefan problem*. Progetto Nazionale M. P. I. *Equazioni di Evoluzione e Applicazioni Fisico-Matematiche*, Firenze, 1988.
- [6] ZERROUKAT M. - CHATWIN C. R., *Computational moving boundary problems*, J. Wiley & Sons Inc., New York, 1994.
- [7] CRANK J. - GUPTA R. S. , *A moving boundary problem arising from the diffusion of oxygen in absorbing tissue*, J. Inst. Math. Appl.,10, 1972, págs. 19-33.
- [8] GUPTA R. S. - KUMAR D., *Complete numerical solution of the oxygen diffusion problem involving a moving boundary*, Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 29, 1981, págs. 233-239.
- [9] HANSEN E. - HOUGAARD P., *On a moving boundary problem from biomechanics*, J. Inst. Math. Appl., 13, 1974, págs. 385-398.
- [10] MILLER J. V. - MORTON K. W. - BAINES M. J., *A finite element moving boundary computation with an adaptive mesh*, J. Inst. Math. Appl., 22, 1978, págs. 467-477.
- [11] CRANK J., *Two methods for the numerical solution of moving - boundary problems in diffusion and heat flow*, Quart. J. Mech. Appl. Math., 10, 1957, págs. 220-231.
- [12] GOODMAN T. R., *The heat - balance integral and its applications to problems involving a change of phase*, Trans. of the ASME, 80, 1958, págs. 335-342.