

Resumen

Multitud de problemas en ciencia e ingeniería se plantean como ecuaciones en derivadas parciales (EDPs). Si la frontera del recinto donde esas ecuaciones han de satisfacerse se desconoce a priori, se habla de "Problemas de frontera libre", propios de sistemas estacionarios no dependientes del tiempo, o bien de "Problemas de frontera móvil", asociados a problemas de evolución temporal, donde la frontera cambia con el tiempo. La solución a dichos problemas viene dada por la expresión de la(s) variable(s) dependiente(s) de la(s) EDP(s) junto con la función que determina la posición de la frontera. Dado que este tipo de problemas carece en la mayoría de los casos de solución analítica conocida, se hace preciso recurrir a métodos numéricos que permitan obtener una solución lo suficientemente aproximada a la exacta, y que además mantenga propiedades cualitativas de la solución del modelo continuo de EDP(s).

En este trabajo se ha abordado el estudio numérico de algunos problemas de frontera móvil provenientes de diversas disciplinas. La metodología aplicada consta de dos pasos sucesivos: en primer lugar, se aplica la llamada transformación de Landau o "Front-fixing transformation" al modelo en EDP(s) con el fin de mantener inmóvil la frontera del dominio; posteriormente, una vez planteado el nuevo problema en un recinto fijo, se procede a su discretización a través de un esquema en diferencias finitas. De ahí se obtienen esquemas numéricos que se implementan por medio de la herramienta informática Matlab. Mediante un exhaustivo análisis numérico, se estudian propiedades del esquema y de la solución numérica (positividad, estabilidad, consistencia, monotonía, etc.).

En el primer capítulo de este trabajo se revisa el estado del arte del campo objeto de estudio, se justifica la necesidad de disponer de métodos numéricos adaptados a este tipo de problemas y se describe brevemente la metodología empleada en nuestro enfoque. Además, se exponen problemas particulares que se desarrollan en los capítulos siguientes.

El Capítulo 2 se dedica a un problema perteneciente a la Biología Matemática y que consiste en determinar la evolución en el tiempo de la distribución de la población de una especie invasora que se propaga en un hábitat y cuyo frente de propagación es desconocido. Este modelo consiste en una ecuación de difusión-reacción unida a una condición tipo Stefan, que relaciona las funciones solución y frontera móvil a determinar. Los resultados del análisis numérico confirman la existencia de una dicotomía propagación-extinción en la evolución a largo plazo de la densidad de población de la especie invasora, que depende de la relación entre los valores de los parámetros introducidos en el modelo. En particular, se ha podido precisar, por medio de experimentos numéricos, el valor del coeficiente de la condición de Stefan que separa el comportamiento de propagación del de extinción.

Los Capítulos 3 y 4 se centran en un problema de Química del hormigón con interés en Ingeniería Civil: el proceso de carbonatación del hormigón, fenómeno evolutivo que lleva consigo la degradación progresiva de la estructura afectada y finalmente su ruina, si no se toman medidas preventivas. En el Capítulo 3 se considera un sistema de dos EDPs de tipo parabólico con dos incógnitas (concentraciones de dióxido de carbono disueltas en fases gaseosa y acuosa). Para su resolución, hay que considerar además, las condiciones iniciales, las de contorno y las de tipo Stefan (o de transmisión) en la frontera, que relacionan las concentraciones incógnitas y sus derivadas con la función frontera móvil o frente de avance de la zona carbonatada. Los resultados del análisis numérico se ajustan a los obtenidos en un estudio teórico previo. Se han llevado a cabo experimentos numéricos y se ha obtenido en términos cuantitativos la dinámica de las funciones solución y de la frontera, comprobando la tendencia a largo plazo de la ley de evolución de la frontera móvil hacia una función del tipo "raíz cuadrada del tiempo" por medio de un análisis de regresión. En el Capítulo 4 se considera un modelo más general y realista que el anterior, en el que intervienen seis especies químicas

cuyas concentraciones hay que hallar, y que se encuentran tanto en la zona carbonatada como en la no carbonatada.

En el Capítulo 5 se aborda un problema de transmisión de calor que aparece en diversos procesos industriales; en este caso, en el enfriamiento durante la colada de metal fundido, donde la fase sólida avanza y la líquida se va extinguiendo. La frontera móvil (frente de solidificación) separa ambas fases, siendo su posición en cada instante la variable a determinar, junto con las temperaturas en cada una de las dos fases. Después de la adecuada transformación y discretización, se implementa un esquema en diferencias finitas, subdividiendo el proceso en tres estadios temporales, a fin de tratar las singularidades asociadas a posiciones del frente móvil durante las etapas de inicialización y finalización.