2. La EDP del calor (I): Motivación, deducción y resultados básicos

Notación habitual: Ω es un abierto conexo acotado de $\mathbf{R}^N$ (N es un entero ≥ 1) y T es un número real positivo; pondremos $Q := \Omega \times (0,T)$, $\Sigma := \partial\Omega \times (0,T)$.

Interpretaremos que Ω es una región espacial donde se encuentran las partículas de un medio y $(0,T)$ es un intervalo temporal. Un punto genérico de Q se designa $(\mathbf{x}, t)$.

Estamos interesados en describir la evolución de un fenómeno con origen en Física, Química, Biología, etc. en Ω durante $(0,T)$. Generalmente, conocemos la situación en el tiempo $t = 0$ y pretendemos predecir qué ocurrirá en todo $t \in (0,T)$.

2.1. Motivación y deducción de la EDP del calor

Suponemos en primer lugar que las partículas del medio poseen energía calorífica. Aceptaremos la existencia de

- Una función escalar $w = w(\mathbf{x}, t)$ que proporciona la densidad de energía.
- Un campo $\mathbf{q} = \mathbf{q}(\mathbf{x}, t)$ que proporciona el flujo de calor.
- Una función escalar $F = F(\mathbf{x}, t)$ que determina la aportación externa de calor.

La función F es conocida (se trata de un dato ligado a la actuación que tenemos sobre el sistema desde el exterior). Por el contrario, w y $\mathbf{q}$ son incógnitas y, justamente, tenemos interés en calcular sus valores o, al menos, aproximaciones de los mismos.

Para determinar el modelo satisfecho por w y $\mathbf{q}$, usaremos:

(I) La *ley de la conservación de la energía:*

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\left(\displaystyle\int_W w\,d\mathbf{x}\right) = -\displaystyle\int_{\partial W} \mathbf{q}\cdot\mathbf{n}\,d\Gamma + \int_W F(\mathbf{x},t)\,d\mathbf{x} \\ \forall W \subset \Omega \ \ \text{(bola arbitraria)}, \ \ \forall t \in [0,T], \end{cases}$$

donde $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{x})$ denota el vector normal unitario dirigido hacia el exterior en los puntos $\mathbf{x} \in \partial W$. Esta ley es de carácter universal, esto es, válida para todo medio. Se puede formular equivalentemente en la forma

$$w_t + \nabla\cdot\mathbf{q} = F(\mathbf{x},t), \quad (\mathbf{x},t) \in Q. \tag{1}$$

(II) La *definición de temperatura:*

$$w = \rho_0\theta, \ \ \text{con} \ \ \rho_0 > 0 \ \ \text{(dada) y} \ \ \theta = \theta(\mathbf{x},t). \tag{2}$$

(III) La *ley de Fourier:*

$$\mathbf{q} = -\kappa\nabla\theta, \ \ \text{con} \ \ \kappa > 0 \ \ \text{(dada)}. \tag{3}$$

Al contrario de (1), esta ley es sólo válida para algunos medios. Se dice que es una ley de comportamiento (o constitutiva). Se trata de una ley "razonable" desde el punto de vista experimental: indica que el flujo de calor va de las regiones de mayor a menor temperatura de la manera más rápida posible.

Usando (1)–(3), llegamos a la EDP del calor:

$$\theta_t - k\Delta\theta = f(\mathbf{x},t), \quad (\mathbf{x},t) \in Q, \tag{4}$$

donde hemos introducido $k := \kappa/\rho_0$ y $f := \frac{1}{\rho_0}F$. En esta EDP, se interpreta que θ_t (resp. $-k\Delta\theta$) es un término de variación en el tiempo (resp. de difusión).

Para calcular θ, necesitamos añadir a (4) condiciones complementarias. Una posibilidad (no la única) consiste en añadir información sobre los valores de θ para $t = 0$ y para $(\mathbf{x},t) \in \Sigma$. Por ejemplo, tiene sentido considerar el *problema de Cauchy-Dirichlet*

$$\begin{cases} \theta_t - k\Delta\theta = f(\mathbf{x},t), & (\mathbf{x},t) \in Q \\ \theta = \theta_\Gamma(\mathbf{x},t), & (\mathbf{x},t) \in \Sigma \\ \theta(\mathbf{x},0) = \theta_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega, \end{cases}$$

donde θ_Γ y θ_0 son nuevos datos (respectivamente, la temperatura del medio sobre Σ y la temperatura para $t = 0$).

Otra posibilidad igualmente interesante consiste en dar información sobre el comportamiento del flujo de calor sobre Σ. Esto conduce al llamado *problema de Cauchy-Neumann*

$$\begin{cases} \theta_t - k\Delta\theta = f(\mathbf{x},t), & (\mathbf{x},t) \in Q \\ k\dfrac{\partial\theta}{\partial\mathbf{n}} = g(\mathbf{x},t), & (\mathbf{x},t) \in \Sigma \\ \theta(\mathbf{x},0) = \theta_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega, \end{cases}$$

donde g es dada.

2.2. Resultados básicos

Por simplicidad, nos referiremos al problema de Cauchy-Dirichlet con $\theta_\Gamma \equiv 0$:

$$\begin{cases} \theta_t - k\Delta\theta = f(\mathbf{x},t), & (\mathbf{x},t) \in Q \\ \theta = 0, & (\mathbf{x},t) \in \Sigma \\ \theta(\mathbf{x},0) = \theta_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega. \end{cases} \tag{5}$$

Teorema 2.1 *Supongamos que $f \in L^2(Q)$ y $\theta_0 \in C^1(\overline{\Omega})$ con $\theta_0\big|_{\partial\Omega} = 0$. Entonces existe una única función $\theta = \theta(\mathbf{x},t)$ que verifica lo siguiente:*

1. *En casi todo Q, θ es diferenciable respecto de todas sus variables, las $\partial_i\theta$ son diferenciables respecto de las x_j y*
$$\theta, \theta_t, \partial_i\theta, \partial_i\partial_j\theta \in L^2(Q) \quad \forall i,j.$$
2. *$\theta_t - k\Delta\theta = f$ c.p.d. en Q.*
3. *$\theta(\cdot\,,t) \in C^0(\overline{\Omega})$ y $\theta(\cdot\,,t)\big|_{\partial\Omega} = 0$ c.p.d. en $(0,T)$.*
4. *$t \mapsto \theta(\cdot\,,t)$ está bien definida y es continua de $[0,T]$ en $L^2(\Omega)$ y $\theta(\cdot\,,0) = \theta_0$.*

Para la demostración, véase por ejemplo [3]. Se dice que θ es la (única) *solución fuerte* de (5).

Observación 2.1 El mismo resultado continúa siendo cierto para otros sistemas análogos:

- Así, en (5) se puede cambiar la condición sobre Σ por la *condición de Neumann homogénea:*

$$k\frac{\partial\theta}{\partial\mathbf{n}} = 0, \quad (\mathbf{x},t)\in\Sigma. \tag{6}$$

  El resultado precedente continúa siendo cierto.

- Supongamos por otra parte que los a_{ij}, b_i, c son dados, con

$$a_{ij} = a_{ji} \in C^1(\overline{Q}), \quad b_i, c \in L^\infty(Q),$$
$$\sum_{i,j=1}^N a_{ij}(\mathbf{x},t)\xi_i\xi_j \geq \alpha|\xi|^2 \quad \forall\xi\in\mathbf{R}^N, \quad (\mathbf{x},t) \text{ c.p.d. en } Q,$$

  donde $\alpha > 0$. Pongamos

$$L(t)z := -\sum_{i,j=1}^N \partial_i(a_{ij}(\mathbf{x},t)\partial_j z) + \sum_{i=1}^N b_i(\mathbf{x},t)\partial_i z + c(\mathbf{x},t)z.$$

  Entonces, para cada f y cada θ_0 en las condiciones precedentes, el problema

$$\begin{cases} \theta_t + L(t)\theta = f(\mathbf{x},t), & (\mathbf{x},t)\in Q \\ \theta = 0, & (\mathbf{x},t)\in\Sigma \\ \theta(\mathbf{x},0) = \theta_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x}\in\Omega. \end{cases}$$

  posee una única solución fuerte. □

En virtud de esta observación, dados $\mathbf{b}\in\mathbf{R}^N$ y $c\in\mathbf{R}$, vemos que el Teorema 2.1 es válido para la EDP

$$\theta_t - k\Delta\theta + \mathbf{b}\cdot\nabla\theta + c\theta = f(\mathbf{x},t), \tag{7}$$

complementada con las condiciones iniciales y de contorno de (5). En esta EDP, los términos que aparecen tiene un significado claro:

- θ_t y $-k\Delta\theta$ se interpretan como antes.
- $\mathbf{b}\cdot\nabla\theta$ es un término de *transporte.* Estamos aceptando que las partículas del medio "viajan" con velocidad $\mathbf{b}$ y, en consecuencia, el flujo de calor se ve afectado por ello.
- Finalmente, $c\theta$ es un término de *reacción* o *disipación.* Si $c < 0$, tiene como efecto aumentar los valores de θ y se interpreta como un término reactivo; c puede ser, por ejemplo, la concentración de un producto químico cuya presencia genera un aumento de temperatura. Por el contrario, si $c > 0$, el efecto producido es una pérdida de energía calorífica que se puede deber a la evaporación, a la influencia de fenómenos atmosféricos, etc.

Una importante propiedad de la solución de (5) es el*principio del máximo débil:*

Teorema 2.2 *En las condiciones del teorema precedente, si $f \geq 0$ c.p.d. en Q y $\theta \geq 0$ en Ω, entonces $\theta \geq 0$ c.p.d. en Q.*

La demostración también está dada en [3]. La idea principal de la misma consiste en multiplicar la EDP por θ_- e integrar en espacio y tiempo (recuérdese que, para todo $a\in\mathbf{R}$, tenemos $a_+ := max(a,0)$ y $a_- := max(-a,0)$). Teniendo en cuenta que $\theta\equiv\theta_+ - \theta_-$, obtenemos fácilmente que

$$-\|\theta_-(\cdot\,,t)\|^2 \geq \iint_{\Omega\times(0,t)} f\theta_-\,d\mathbf{x}\,dt \geq 0 \quad \forall t\in(0,T),$$

de donde, efectivamente, $\theta \geq 0$.

Si pudiéramos asegurar que la solución θ es más regular, también podríamos decir más cosas sobre el signo de θ; para detalles, véase por ejemplo [4, 5].

El Teorema 2.2 corresponde a lo que se espera de un modelo realista de la evolución del calor: si inicialmente la temperatura es no negativa y estamos aplicando una fuente de calor, la temperatura tiene que seguir siendo no negativa en todo instante posterior. Lo contrario indicaría que (5) no es un buen modelo para este fenómeno.

El teorema continúa siendo cierto si la condición de contorno sobre Σ es de la forma

$$\theta = \theta_\Gamma(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Sigma,$$

con $\theta_\Gamma \geq 0$ (y la idea de la demostración es la misma). También es cierto cuando la condición de contorno sobre Σ es (6). Finalmente, el resultado sigue siendo válido para la EDP considerada en la Observación 2.1, con independencia de los signos de los coeficientes b_i y c.

2.3. Otras aplicaciones de la EDP del calor

Existen muchos fenómenos de origen diverso que pueden ser descritos por la solución de una EDP similar:

• Evolución de la concentración de un producto sometido a una reacción química:

Sea $u = u(\mathbf{x}, t)$ la concentración. Es usual suponer que u debe verificar una EDP como la siguiente:

$$u_t - k\Delta u + c(\mathbf{x}, t)u = f(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in Q, \tag{8}$$

donde $k > 0$ y $c = c(\mathbf{x}, t)$ es una función dada.

Aquí, u_t, $-k\Delta u$ y cu deben ser interpretados de nuevo como términos de variación en el tiempo, difusión y disipación o reacción. El dato $f = f(\mathbf{x}, t)$ corresponde a un segundo miembro que "alimenta" la reacción química (un reactante).

Más generalmente, la concentración u debe ser solución de una EDP (posiblemente no lineal) del tipo

$$u_t - \nabla \cdot (a(u)\nabla u) + B(\mathbf{x}, t, u) = f(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in Q, \tag{9}$$

para funciones $a = a(u)$ y $B = B(\mathbf{x}, t, u)$ adecuadas; véase [2, 4, 5] para más detalles.

• Evolución de una población aislada:

Denominemos $y = y(\mathbf{x}, t)$ la densidad de población en un *habitat* en condiciones de aislamiento. En primera instancia, es adecuado suponer que y es solución de la EDP *de tipo Malthus*

$$y_t - \varepsilon\Delta y = m(\mathbf{x}, t)y, \quad (\mathbf{x}, t) \in Q, \tag{10}$$

donde $\varepsilon > 0$ y $m = m(\mathbf{x}, t)$ es una función no negativa. En (10), y_t, $-\varepsilon\Delta y$ y my se interpretan como términos de variación en el tiempo, difusión y reproducción.

En un modelo más completo, debemos tener en cuenta que la población debe competir por los recursos a su alcance. Esto da lugar a la EDP *logística*

$$y_t - \varepsilon\Delta y = m(\mathbf{x}, t)y - \mu(\mathbf{x}, t)y^2, \quad (\mathbf{x}, t) \in Q, \tag{11}$$

donde $\mu = \mu(\mathbf{x}, t)$ es otra función no negativa y a la EDP *de tipo Gompertz*

$$y_t - \varepsilon\Delta y = m(\mathbf{x}, t)y \log\left(\frac{Y}{y}\right), \quad (\mathbf{x}, t) \in Q, \tag{12}$$

donde $Y > 0$.

• Evolución de una población de células tumorales:

Sea ahora $c = c(\mathbf{x}, t)$ la concentración de células tumorales en un órgano (el abierto Ω) durante el intervalo de tiempo $(0, T)$. Sea $\omega \subset \Omega$ un "pequeño" abierto. Es adecuado suponer que, bajo la acción de la *radioterapia* aplicada en ω, c verifica la EDP

$$c_t - \nabla \cdot (D(\mathbf{x})\nabla c) = (m(\mathbf{x}, t) - v(\mathbf{x}, t)1_\omega)\, c, \quad (\mathbf{x}, t) \in Q, \tag{13}$$

donde $D = D(\mathbf{x})$ es una función dada (el coeficiente de difusión tumoral, que depende de $\mathbf{x}$), $m = m(\mathbf{x}, t)$ y $v = v(\mathbf{x}, t)$ son funciones no negativas y 1_ω es la fucnión característica de ω.

Aquí, m vuelve a indicar el nivel de reproducción; la función v determina la intensidad del tratamiento y, por supuesto, debe estar sometida a restricciones severas. Una vez más, c_t, $-\nabla \cdot (D(c)\nabla c)$ se interpretan como términos de variación en el tiempo y difusión, respectivamente.

En modelos realistas, el coeficiente D experimenta grandes cambios con $\mathbf{x}$. Así, en el caso del tumor cerebral o *glioblastoma,* es frecuente suponer que D es constante a trozos (en efecto, es bien conocido que la movilidad de las células es completamente distinta cuando pasamos de la materia blanca a la materia gris; véase [6, 7]).

Encontraremos más adelante situaciones donde se produce *interacción* entre distintas variables. Esto ocurre, por ejemplo, cuando se modela la evolución conjunta de varias especies que comparten el mismo habitat. Tendremos entonces necesidad de usar modelos no escalares, basados en sistemas de EDPs.

Ejercicio 2.1 Se considera el problema

$$\begin{cases} c_t - \nabla \cdot (D(\mathbf{x})\nabla c) = (m(\mathbf{x}, t) - v(\mathbf{x}, t)1_\omega)\, c, & (\mathbf{x}, t) \in Q \\ c = 0, & (\mathbf{x}, t) \in \Sigma \\ c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega, \end{cases}$$

donde $D \in C^1(\overline{\Omega})$, $m, v \in L^\infty(Q)$ y $c_0 \in C^1(\overline{\Omega})$ con $c_0\big|_{\partial\Omega} = 0$.

1. Probar que existe una única solución fuerte.
2. Probar que, si $c_0 \geq 0$, entonces $c \geq 0$ c.p.d.
3. Suponiendo que $c_0 \leq K$, $0 \leq m \leq M$ c.p.d. y $v \geq 0$ c.pd., ¿cómo está acotada superiormente c? □

Ejercicio 2.2

1. Escribir un programa `MatLab` capaz de resolver el problema

$$\begin{cases} u_t - Du_{xx} = \rho u(1-u), & (\mathbf{x}, t) \in Q \\ u = 0, & (\mathbf{x}, t) \in \Sigma \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega, \end{cases}$$

donde $\Omega = (-L, L)$, $D, \rho > 0$ y $u_0(x) := u_{0,\max} \exp\left(\frac{|x|^2}{2\sigma_0}\right)$ con $0 < u_{0,\max} < 1$ y $\sigma_0 > 0$. Repreentar gráficamente la solución.

2. Mismo enunciado para el problema análogo con la EDP
$$u_t - Du_{xx} = \lambda u \log\left(\frac{1}{u}\right),$$
donde $\lambda > 0$.

3. Mismo enunciado para el problema análogo con la EDP del apartado precedente y las condiciones de contorno
$$u(-L,t) = 0, \quad (Du_x + \kappa u)(L,t) = \kappa u_e(t), \quad t \in (0,T),$$
donde $\kappa > 0$ y
$$u_e(t) := \begin{cases} 0, & \text{si } t \le t_1 \\ 2u_{e,\max}\dfrac{t-t_1}{t_2-t_1}, & \text{si } t \in [t_1, \frac{1}{2}(t_1+t_2)] \\ 2u_{e,\max}\dfrac{t_2-t}{t_2-t_1}, & \text{si } t \in [\frac{1}{2}(t_1+t_2), t_2] \\ 0, & \text{si } t \ge t_2 \end{cases}$$
(aquí, $u_{e,\max} > 0$ y $0 < t_1 < t_2 < T$). □

Bibliografía

[1] Evans, L.C., *Partial differential equations.* Second edition. Graduate Studies in Mathematics, 19. American Mathematical Society, Providence, RI, 2010.

[2] Friedman, A., Kao, C,Y., *Mathematical modeling of biological processes.* Lecture Notes in Mathematical Modelling in the Life Sciences, Springer International Publishing, Switzerland, 2014.

[3] Jackson, T.; Komarova, N.; Swanson, K.R., *Mathematical oncology: using mathematics to enable cancer discoveries.* Amer. Math. Monthly 121 (2014), no. 9, 840–856.

[4] Pao, C.V., *Nonlinear parabolic and elliptic equations.* Plenum Press, New York, 1992.

[5] Protter, M.H.; Weinberger, H.F., *Maximum principles in differential equations.* Corrected reprint of the 1967 original. Springer-Verlag, New York, 1984.

[6] Smoller, J., *Shock waves and reaction-diffusion equations.* Second edition. Fundamental Principles of Mathematical Sciences, 258. Springer-Verlag, New York, 1994.

[7] Swanson, K.R., *Quantifying glioma cell growth and invasion in vitro.* Math. Comput. Modelling 47 (2008), no. 5-6, 638–648.