Selección de cristales cristalinos: soluciones con valores medidas de una ley de conservaión no local

Director: Jesús Ildefonso Díaz Díaz (ildefonso.diaz@mat.ucm.es)

9 de diciembre de 2011

En este trabajo se estudiarán los llamados *procesos de maduración de Ostwald* (persistencia de un sólo tamaño de cristal después de un determinado tiempo) que aparecen en ciertos precipitados químicos de los que las películas fotográficas son un excelente ejemplo.

Tras una serie de preámbulos sobre la noción de velocidad de una reacción química, y ciertos resultados matemáticos de caracter más o menos elemental, se pasará a analizar dos modelos matemáticos de los *procesos de maduración de Ostwald* propuestos por N.S.Tavare [1], en 1985.

En el primero de los modelos se supone que los tamaños de los cristales están fijos *a priori* y lo que se analiza es la evolución en el tiempo del número de cada uno de esos tamaños. Se obtiene así un sistema no lineal y no local de ecuaciones diferenciales ordinarias para el que se mostrará el proceo de selección: sólo perduran los cristales de mayor tamaño.

Un segundo modelo obedece a una situación más compleja, pero más realista pues no se prejuzga de entrada el tamaño de los posibles cristales. En ese caso el modelo viene dado por una ecuación en derivadas parciales no lineal del tipo de las *leyes de conservación* no lineal pero con la dificultad adicional de que la "ley del flujo asociado.$^{\text{es}}$ no local. En concreto se abordará el problema

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(Gn) = 0 & x > 0, t > 0, \\ n(x,0) = n_0(x) & x > 0. \end{cases}$$

dónde $G(x,t)$ está definida por

$$G(x,t) = \begin{cases} k_\gamma(c(t) - c^* e^\Gamma/x)^\gamma & \text{si } x > x^*(t), \\ -k_\delta(c^* e^{\Gamma/x} - c(t))^\delta & \text{si } x < x^*(t), \end{cases}$$

siendo

$$x^*(t) = \frac{\Gamma}{\log(c(t)/c^*)},$$

$$c(t) = c_0 + \beta \int_0^\infty x^3 n_0(x) dx - \beta \int_0^\infty x^3 n(x,t) dx, \quad c_0 > c^*,$$

y donde todas las constantes involucradas se suponene positivas.

Además de las aplicaciones de este fenómeno, muy interesantes en la física y la química, desde el punto de vista matemático, se puede probar que cuando el dato inicial $n_0(x) = \sum_{i=1}^{N} \mu_i \delta(x - x_{i,0})$ es una medida (de hecho, la suma de un número finito de deltas de Dirac), la solución correspondiente no es un función de L^1 sino una función $n(\cdot, t)$ cuyos valores son medidas.

El objetivo principal de este trabajo será analizar y sistematizar la literatura existente sobre el tema, intentando mejorar, si es posible, los trabajos realizados al respecto por A. Friedman, B. Ou y D. S. Ross [2] [3], 1989 y generalizarlo a más tipos de funciones $G(x, t)$. En vez de trabajar con $\gamma \geq 1$ y $\delta \geq 1$, trabajaremos ahora con $\gamma > 0$ y $\delta > 0$ ya que en las ecuaciones cinéticas de muchas reacciones químicas los exponentes cumplen $\gamma \in (0, 1)$ y $\delta \in (0, 1)$ (véase, por ejemplo, R. Aris [4]). Además se demostrará que el fenómeno de maduración de Ostwald se dá no solo asintoticamente ($t \to \infty$) sino en tiempo finito.

Algunos artículos se detallan a continuación.

Referencias

[1] N.S. Tavare, Simulation of Ostwald Ripening in a Reactive Batch Crystallizer, AIchE J. 33, (1985), 152-156

[2] A. Friedman and B. Ou , A model of crystal precipitation, J. Math. Anal. Appl. 137, (1989), 550-575.

[3] A. Friedman, B. Ou and D.S. Ross, Crystal Precipitation with Discrete Initial Data, J. Math. Anal. Appl. 137, (1989), 576-590.

[4] R. Aris: The Mathematical Theory of Di®usion and Reaction in Permeable Catalysts, Vols. 1 and II, Oxford University Press, Oxford, 1975.

[5] S. Antontsev, J. I. Díaz, S. Shmarev, Energy methods for free boundary problems. Applications to nonlinear PDEs and Fluid Mechanics, Series Progress in Nonlinear Di®erential Equations and Their Applications, No. 48, BirkÄauser, Boston, 2002

[6] J.I. Díaz, Nonlinear partial differential equations and free boundaries, Research Notes in Math., 106, Pitman, London, 1985.

[7] R. J. DiPerna, Measure-Valued Solutions to Conservation Laws, Arch. Rational. Mech. Anal. 88 (1985), 223-270.

[8] J. Málek, J. Nečas, M. Rokta and M. Růžička, Weak and Measure-valued Solutions to Evolutionary PDEs, Chapman and Hall, London, 1996.

[9] J. I. Díaz and F. de Thelin, On a nonlinear parabolic problems arising in some models related to turbulence flows. SIAM Journal of Mathematical Analysis, Vol 25, No 4, (1994), 1085-1111.