

Investigaciones recientes sobre la dinámica de una dispersión de gotas líquidas: modelos con núcleos “explícitos”

F. Rosso

Departamento de Matemática “Ulisse Dini” Universidad de Firenze

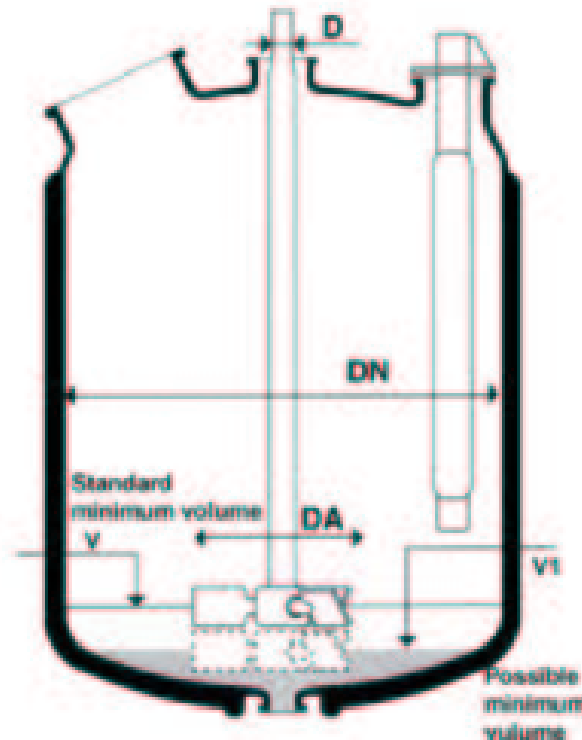
ITLA 2004, Trujillo (PERU), Diciembre 2004

- **Situación física:** dos líquidos inmiscibles (por ejemplo, agua y aceite) están mezclados dentro de un recipiente. Dependiendo del porcentaje de volumen relativo (“hold-up” en inglés) se realizará una dispersión de un líquido en el otro.
- **Problema modelo:**

DADA una función $f_0(v, \mathbf{x})$ — el número inicial de gotas de fase dispersa de tamaño entre $(v, v + dv)$ por unidad de volumen de fase continua en $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ siendo \mathcal{V} el recipiente (acotado) — **ENCONTRAR** la función $f(v, \mathbf{x}, t)$ para todos los $t > 0$.
- **Interés industrial y físico:** las dispersiones, suspensiones y emulsiones son muy comunes en farmacología, química, preparación de alimentos, transporte de petróleo, fabricación de pinturas, fotografía tradicional (no digital),...

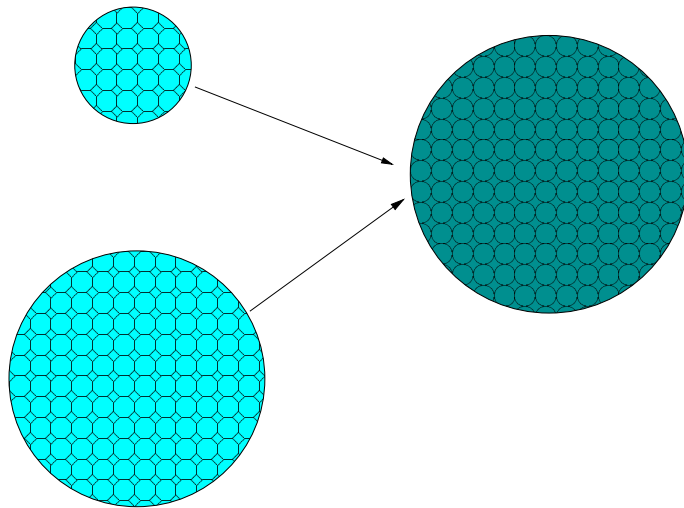
Recipiente típico

Muchas veces la velocidad del rotor es muy elevada (centenas o miles de revoluciones por minuto), de manera que la difusión no es importante y el medio puede ser considerado como **HOMOGÉNEO** (f independiente de x)

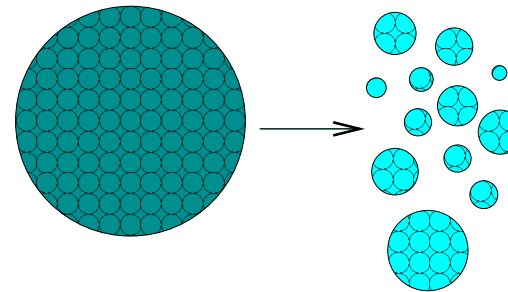


Hay dos procesos básicos que gobiernan la dinámica: **COLISIONES** y **FRAGMENTACIONES** (*ver películas*)

COALESCENCIA



RUPTURA



el modelo standard (antes de F. & R.) (sin difusión)

$$\frac{\partial f}{\partial t} = L_c f + L_b f$$

Efectos en competición: **coalescencia** y **fragmentación**.

Estructura del operador de coalescencia

$$L_c f(v, t) = \underbrace{\int_0^{v/2} \tau_c(w, v-w) f(w, t) f(v-w, t) dw}_{\text{ganancia}} - \underbrace{f(v, t) \int_0^{v_m-v} \tau_c(w, v) f(w, t) dw}_{\text{pérdida}}$$

La coalescencia es **usualmente binaria**: $\boxed{w} + \boxed{v-w}$ produce la gota ganada \boxed{v} , mientras \boxed{v} desaparece porque se une con \boxed{w} y produce $\boxed{v+w}$. Como el límite superior (acotado) v_m no se puede superar, w no puede exceder $v_m - v$.

Estructura del operador de fragmentación

La fragmentación es descrita por

$$L_b f(v, t) = \underbrace{\int_v^{v_m} \mathfrak{D}_b^+(s, v) f(s, t) ds}_{\text{ganancia}} - \underbrace{\mathfrak{D}_b^-(v) f(v, t)}_{\text{pérdida}}$$

donde $\mathfrak{D}_b^+(s, v)$ es el **núcleo de ganancia**: en la literatura corriente **nadie distingue entre los diversos modos de ruptura de una gota**. Este significa que, si \boxed{s} es el tamaño de la gota **progenitora** y \boxed{v} la de la hija **observada**, $\boxed{s - v}$ es el **volumen total de todas las otras hijas sin considerar cuántas son en número**.

De modo similar $\mathfrak{D}_b^-(v)$ es el **núcleo de pérdida**: **de esta forma no es posible distinguir las contribuciones al desaparecer de v como consecuencia de los diversos modos de fragmentación**.

¿Puede el modelo clásico explicar la dinámica que se observa? **Respuesta:**
¡NO!

El modelo clásico no puede explicar de manera “natural” la inestabilidad que se observa cuando la coalescencia produce una gota “bastante grande”!

modelo nuestro (sin difusión)

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \phi(t) (L_c f + L_b f + L_s f)$$

TÉRMINOS NUEVOS: **factor de eficiencia** y “**scattering**” de volumen

$\phi(t) = \Psi[\mathcal{N}(t), \mathcal{S}(t)]$ donde

$$\mathcal{N}(t) = \int_0^{v_m} f(v, t) \, dv, \quad \mathcal{S}(t) = \int_0^{v_m} v^{(2/3)} f(v, t) \, dv,$$

Notar la estructura non local!

Estructura del operador de scattering

$$L_s f(v, t) = \underbrace{\int_{v_m}^{v_m+v} \int_{s-v_m}^{s/2} \mathfrak{D}_s^+(s, v, w) f(w, t) f(s-w, t) dw ds}_{\text{ganancia}} - \underbrace{f(v, t) \int_{v_m-v}^{v_m} \tau_c(w, v) f(w, t) dw}_{\text{pérdida}}$$

donde $\mathfrak{D}_s^+(s, v, w)$ es el **núcleo de ganancia por scattering**: cuando s es mayor que v_m , esta gota vuelve a ser inestable y se fragmenta en muchos pedazos. Unos de esos es v , los otros se suman al volumen total w . La forma $\mathfrak{D}_s^+(s, v, w)$ es "sintética": las contribuciones al tamaño de w por efecto de los diversos modos de ruptura están ocultos y no se comprenden.

Existe una bibliografía muy grande! El siguiente es un
pequeñísimo extracto

TRABAJOS HISTORICOS:

- [1] **M. von Smoluchowski.** Versuch einer mathematischen theorie der kogulationskinetic kolloid lösungen. *Z. Phys. Chem.*, 1917
- [2] **S. Chandrasekhar.** Stochastic processes in physics and astronomy. *Rev. Modern Phys.*, 1943.
- [3] **Z. A. Melzak.** A scalar transport equation. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 1957.

TRABAJOS MUY INTERESANTES POR INGENIEROS QUÍMICOS:

- [4] **K. J. Valentas and R. N. Amundson.** Breakage and coalescence in dispersed phase systems. *I& E C Fundamentals*, 1966.
- [5] **C. Tsouris and L. T. Tavlarides.** Breakage and coalescence models for drops in turbulent dispersions. *AIChE Journal*, 1994.
- [6] **S. Kumar, R. Kumar, and K. S. Gandhi.** A new model for coalescence efficiency of drops in stirred dispersions. *Chemical Engineering Science*, 1993.
- [7] **Sajeev Kumar, R. Kumar, and K. S. Gandhi.** A multi-stage model for drop breakage in stirred vessels. *Chemical Engineering Science*, 1992.

TARABAJOS NUESTROS:

- [8] **A. Fasano and F. Rosso.** A new model for the dynamics of dispersions in a batch reactor. *Lectures in Applied Mathematics*, 2000.
- [9] **A. Fasano and F. Rosso.** Breakage, coalescence and volume scattering in dispersed phase systems. *XXI Southeastern conference on theoretical and applied mechanics*, Developments on Theoretical and Applied Mechanics, 2002.
- [10] **A. Fasano and F. Rosso.** Dynamics of droplets in an agitated dispersion with multiple breakage. Part I: formulation of the model and physical consistency. *Math. Meth. Appl. Sc.* (2004, to appear)
- [11] **A. Fasano and F. Rosso.** Dynamics of droplets in an agitated dispersion with multiple breakage. Part II: uniqueness and global existence. *Math. Meth. Appl. Sc.* (2004, to appear)

TRABAJOS MUY RECIENTES QUE USAN EL MODELO NUESTRO

- [12] **C. Walker.** Coalescence and breakage processes. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 2002.
- [13] **H. Amann and C. Walker.** Local and Global Strong Solutions to Continuous Coagulation–Fragmentation Equations with Diffusion (2004, to appear)
- [14] **P. Laurençot and C. Walker.** Steady State for Coagulation–Fragmentation Equation with Volume Scattering (2004, to appear)

Estado del arte (en lo que respecta a la matemática):

Bajo un razonable conjunto de hipótesis, la ecuación de evolución con la condición inicial $f(v, 0) = f_o(v)$ **tiene una y sólo una solución con y sin difusión** (Fasano and R. 1998–2004 para el modelo “nuevo”, muchos otros autores para el modelo “simplificado” en el cual $L_s f = 0$ y $\Psi \equiv 1$)

Nuestro interés actual: ¿cuál es la verdadera estructura de L_b y L_s ?

Los dos son operadores integrales (lineal el primero, cuadrático el segundo) pero la estructura de sus núcleos siempre es bastante general (hay muchas razones para esto).

De todas maneras, investigar la estructura de esos núcleos es muy importante, porque

- **permitiría considerar más correctamente la dinámica local en el modelo matemático**
- **permitiría obtener indicios útiles “cuando uno hace matemática” en el sentido de “buscar hipótesis más sencillas” en todos los miembros que aparecen en esos núcleos**

Para esto se paga un precio: **la matemática involucrada será más compleja y difícil**

Vamos a ver la razón de esto.

Aunque el término L_s (y sus implicaciones en el modelo) fue la mayor contribución de nuestro trabajo en la investigación sobre este tema, sólo recientemente hemos comprendido la verdadera estructura de los núcleos \mathcal{D} .

Estamos convencidos de que, sin esa comprensión, no tiene mucho sentido hacer hipótesis de cualquier tipo sobre los diversos núcleos guiados únicamente por “necesidades matemáticas contingentes”.

Veamos ahora la estructura “íntima” de esos núcleos

$$\mathfrak{D}_b^+(s, v) = \alpha_2(s) \beta_2(s, v)$$

$$+ \sum_{k=3}^N \alpha_k(s) \int_{D_k(s, v)} \beta_k(s, u_1, \dots, u_{k-2}, s - v - U_{k-2}) d\sigma_{k-2},$$

$$\mathfrak{D}_b^-(v) = \sum_{k=2}^N \alpha_k(v),$$

$$\mathfrak{D}_s^+(s, v, w) = \tau_c(s - w, w) (\lambda_2(s) \beta_2(s, s - v))$$

$$+ \sum_{k=3}^N \lambda_k(s) \int_{D_k(s, v)} \beta_k(s, u_1, \dots, u_{k-2}, s - v - U_{k-2}) d\sigma_{k-2}$$

Las siguientes funciones se pueden entender fácilmente

- $\alpha_k(v)$ es la **frecuencia de ruptura del modo k -ésimo (o sea, en k pedazos)**
- $\beta_k(s, u_1, \dots, u_{k-1})$ es la **densidad de probabilidad** de que gotas con volumen $s \in (0, 2v_m)$ generen por ruptura k fragmentos con volumen prescrito u_j ($j = 1, \dots, k-1$) **en orden creciente**
- $\tau_c(v, w)$ es el **núcleo de coalescencia**
- $\lambda_k(s)$ es un **peso** (que se elige convenientemente) para medir la posibilidad de que la gota progenitora $s \in (v_m, 2v_m]$ se rompa en exactamente k pedazos en el proceso de scattering.

Notar que α_k y λ_k aparecen en contextos similares. Sin embargo, tienen sentidos diferentes: la frecuencia α_k **incluye la probabilidad de ruptura del modo k -ésimo**, mientras que en la función L_s , la ruptura tiene probabilidad uno (o sea, es cierta) y todo lo que queremos saber es la probabilidad de todos los modos en los que el evento se puede realizar.

VENTAJA PRINCIPAL: las hipótesis necesarias para demostrar la existencia y unicidad se hacen **directamente** sobre $\alpha_k, \beta_k (s, u_1, \dots, u_{k-1})$ y λ_k . Por eso resultan no sólo **“fáciles de interpretar”** además **“fáciles de verificar”**. Inclusive **su “forma” está sugerida por la física.**

Al revés, hipótesis hechas **directamente** sobre los núcleos en forma “sintética” (como \mathfrak{D}_b^+ y \mathfrak{D}_s^+) no tienen generalmente una interpretación física inmediata y tampoco parecen fácil de comprobar prácticamente. La razón es que **si no renunciamos a una forma “acumulativa” es imposible pedir que la intuición física sugiera alguna “estructura” particular.**

Hipótesis para probar un teorema de existencia global en el tiempo para el modelo "explícito".

- (H1) $\Psi > 0$, Lipschitziana y acotada en \mathbb{R}^2 . Además $\inf_{\mathbb{R}^2} \Psi = \widehat{\Psi} > 0$.
- (H2) $\tau_c \geq$, simétrica y de clase C^1 en $[v_{\text{crit}}^{(3)}, v_m] \times [v_{\text{crit}}^{(3)}, v_m]$, siendo $v_{\text{crit}}^{(3)} \geq 0$ un oportuno valor umbral.
- (H3) $\alpha_k \geq 0$ para todos los $k = 2, \dots, N$, de clase C^1 , no decreciente en $[v_{\text{crit}}^{(1)}, v_m)$, y con límite $+\infty$ cuando $v \rightarrow v_m$. Además $\sum_{k=2}^N \alpha_k > 0$ sobre $(v_{\text{crit}}^{(1)}, v_m)$, con
- $\alpha_k \simeq (v_m - v)_+^{-\mu_k}$ en un entorno a la izquierda de $v = v_m$, siendo $\mu_k \in (0, 1)$,
 - $\alpha_k \simeq (v - v_{\text{crit}}^{(1)})_+^{\delta_k}$ en un entorno a la derecha de $v = v_{\text{crit}}^{(1)}$, siendo $\delta_k > 0$ y $(\bullet)_+ := \max\{\bullet, 0\}$.
- (H4) λ_k de clase C^0 sobre $[v_m, 2v_m]$ para todos los $k = 2, \dots, N$.

hipótesis que involucran β_k

(H5) (*Regularidad*).

- (i) para todos los $k \geq 2$, β_k se reduce a cero si el volumen de la gota más pequeña tiende a cero; en particular

$$\lim_{v \rightarrow 0} \beta_k \Big|_{D_k(s,v)} = 0,$$

para todos los $k \geq 3$.

(ii) $\beta_2(s, v)$ es de clase C^1 sobre $\mathring{\mathcal{T}}_2 = \bigcup_{s \in (0, 2v_m)} \{s\} \times \mathring{T}_2(s)$ y, inclusive, existe una constante $C > 0$ de manera que, si $v \in (0, v_m)$,

$$(a) \quad \lambda_2(v_m + v)\beta_2(v_m + v, v) \leq C,$$

$$(b) \quad \left| \int_{v_m}^{v_m+v} \lambda_2(s) \frac{\partial \beta_2(s, v)}{\partial v} ds \right| \leq C,$$

$$(c) \quad \int_v^{v_m} \alpha_2(s)\beta_2(s, v) ds \leq C,$$

$$(d) \quad \left| \int_v^{v_m} \alpha_2(s) \frac{\partial \beta_2(s, v)}{\partial v} ds \right| \leq C.$$

(iii) Para todos los $k = 3, \dots, N$, β_k es de clase C^1 sobre

$$\mathring{\mathcal{I}}_k = \bigcup_{s \in (0, 2v_m)} \{s\} \times \mathring{T}_k(s) \text{ e, inclusive, existe una constante } C > 0 \text{ de}$$

manera que, si $v \in (0, v_m)$,

$$(e) \left(\int_{D_k(s,v)} \beta_k(s, u_1, \dots, u_{k-2}, s - v - U_{k-2}) d\sigma_{k-2} \right) \Big|_{s=v_m+v} \leq C,$$

$$(f) \int_v^{v_m} \alpha_k(s) \left(\int_{D_k(s,v)} \beta_k(s, u_1, \dots, u_{k-2}, s - v - U_{k-2}) d\sigma_{k-2} \right) ds \leq C,$$

$$(g) \int_v^{v_m} \alpha_k(s) \left(\int_{\partial D_k(s,v)} \beta_k(s, u_1, \dots, u_{k-2}, s - v - U_{k-2}) d\sigma_{k-3} \right) ds \leq C,$$

$$(h) \left| \int_v^{v_m} \alpha_k(s) \int_{D_k(s,v)} \left[\frac{\partial \beta_k}{\partial u_{k-1}} \right]_{u_{k-1}=s-v-U_{k-2}} d\sigma_{k-2} ds \right| \leq C.$$

Teorema 1. (EXISTENCIA LOCAL)*Bajo hipótesis (H1)-(H5),*

$$\begin{aligned}
 f_o(v) &\in C^1([0, v_m]) && \text{("piecewise")}, \\
 f_o(v) &\geq 0 && \forall v \in [0, v_m],
 \end{aligned}
 \tag{0.1}$$

$$f_o(0) = f_o(v_m) = 0.$$

y

$$|\alpha'_k(v) f_o(v)| < +\infty, \quad \forall k = 2, \dots, N. \tag{0.2}$$

el problema de Cauchy tiene una y una sola solución local (Lipschitz continua) en $[0, v_m] \times [0, T)$ por $T > 0$ limitado.

Otros teoremas de consistencia física:

Teorema 2. (POSITIVIDAD)

Bajo (H1)–(H5), la solución del problema de Cauchy nunca toma valores menor que cero.

Teorema 3. (CONSERVACIÓN DE VOLUMEN)

Si $f(v,t)$ es la solución del problema de Cauchy,

$$\int_0^{v_m} v f(v,t) \, dv = \int_0^{v_m} v f_o(v) \, dv. \quad (0.3)$$

MÁS COMPLICADA ES LA DESCRIPCIÓN DE LOS DOMINIOS DE INTEGRACIÓN

Los integrales sobre $D_k(s, v)$ no aparecen **si y sólo si** la fragmentación y el scattering de volumen no involucran en algún modo órdenes mayores que dos (**¡eventos binarios!**). Generalmente, la probabilidad que se observen eventos **únicamente binarios** es muy baja. Entonces **no podemos renunciar a los términos de orden mayor que dos!**

CASO MÁS FÁCIL: $N = 2$ (eventos binarios)

$$\beta_2(s, u) = \beta_2(s, s - u), \quad \beta_2(s, u) = 0, \quad \text{si } s \leq u \quad (0.4)$$

definida sobre

$$T_{2,1}(s) = \{u_1 \mid 0 < u_1 \leq s - u_1 \leq v_m\} = \left(\max\{0, s - v_m\}, \frac{s}{2} \right), \quad (0.5)$$

y después **prolongada por simetría axial** (con respecto a $s/2$) sobre

$$T_{2,2}(s) = \{u_1 \mid 0 < s - u_1 < u_1 \leq v_m\} = \left(\frac{s}{2}, \min\{s, v_m\} \right). \quad (0.6)$$

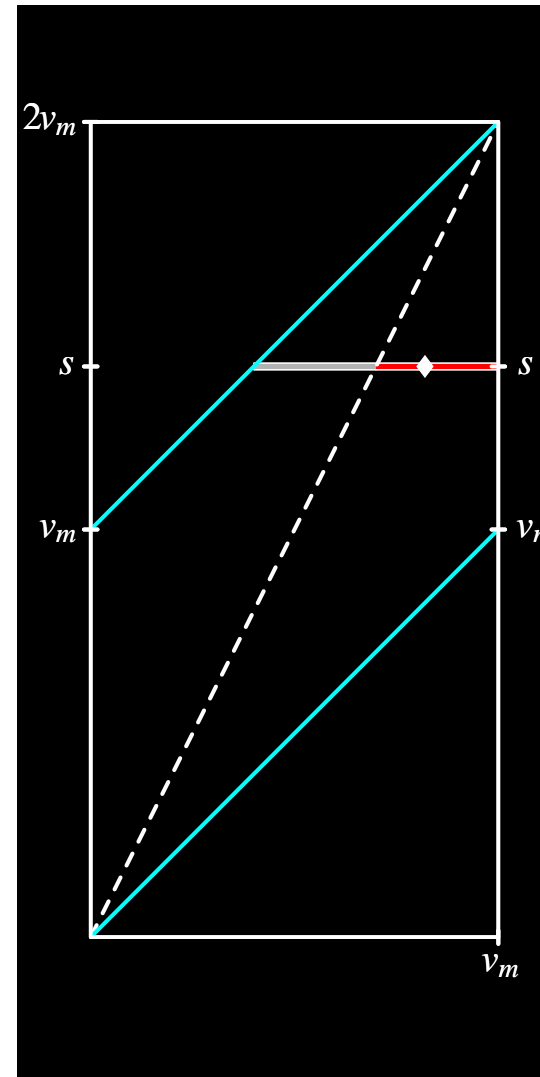
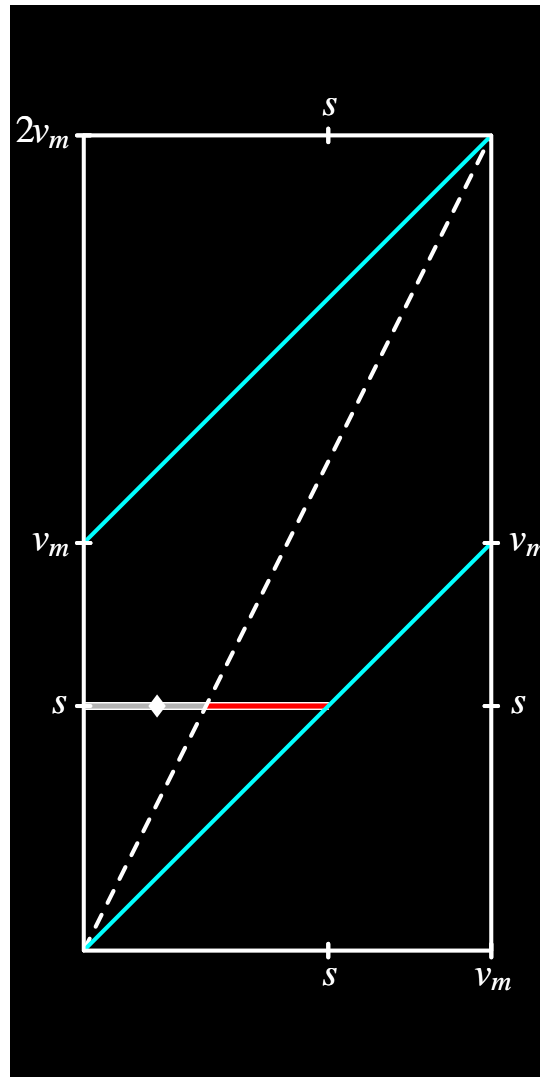
Mapa de extensión : $C_0 : s - u \mapsto u$ (transforma $T_{2,2}(s)$ uno-a-uno sobre $T_{2,1}(s)$)

Normalización: se construye β_2 de manera que

$$\int_{T_{2,1}(s)} \beta_2(s, u) \, du = 1 \quad (0.7)$$

C_0 **preserve la medida:**

$$\int_{T_{2,2}(s)} \beta_2(s, s - u) \, du = \int_{T_{2,1}(s)} \beta_2(s, u) \, du = 1. \quad (0.8)$$



Si $\chi_{\mathcal{T}_{2,\text{inf}}}$, $\chi_{\mathcal{T}_{2,\text{sup}}}$ son funciones características, ponemos

$$\beta_{2,a}(s, u) = A_0(s)(u - v_{\text{crit}}^*)[(s - u) - v_{\text{crit}}^*],$$

$$\beta_{2,b}(s, u) = -\frac{A_1(s)}{2} \left(u - \frac{s}{2}\right)^2 + A_2(s),$$

$$\beta_{2,c}(s, u) = A_2(s).$$

$$\beta_2 = \begin{cases} \beta_{2,a} \chi_{\mathcal{T}_{2,\text{inf}}}, & \text{si } s \in (2v_{\text{crit}}^*, v_m + v_{\text{crit}}^*), \\ \beta_{2,b} \chi_{\mathcal{T}_{2,\text{sup}}}, & \text{si } s \in (v_m + v_{\text{crit}}^*, \bar{s}), \\ \beta_{2,c} \chi_{\mathcal{T}_{2,\text{sup}}}, & \text{si } s \in (\bar{s}, 2v_m), \end{cases}$$

Las funciones $A_i(s)$ son elegidas de manera que satisfagan todas las hipótesis de normalización y regularidad hechas hasta ahora.

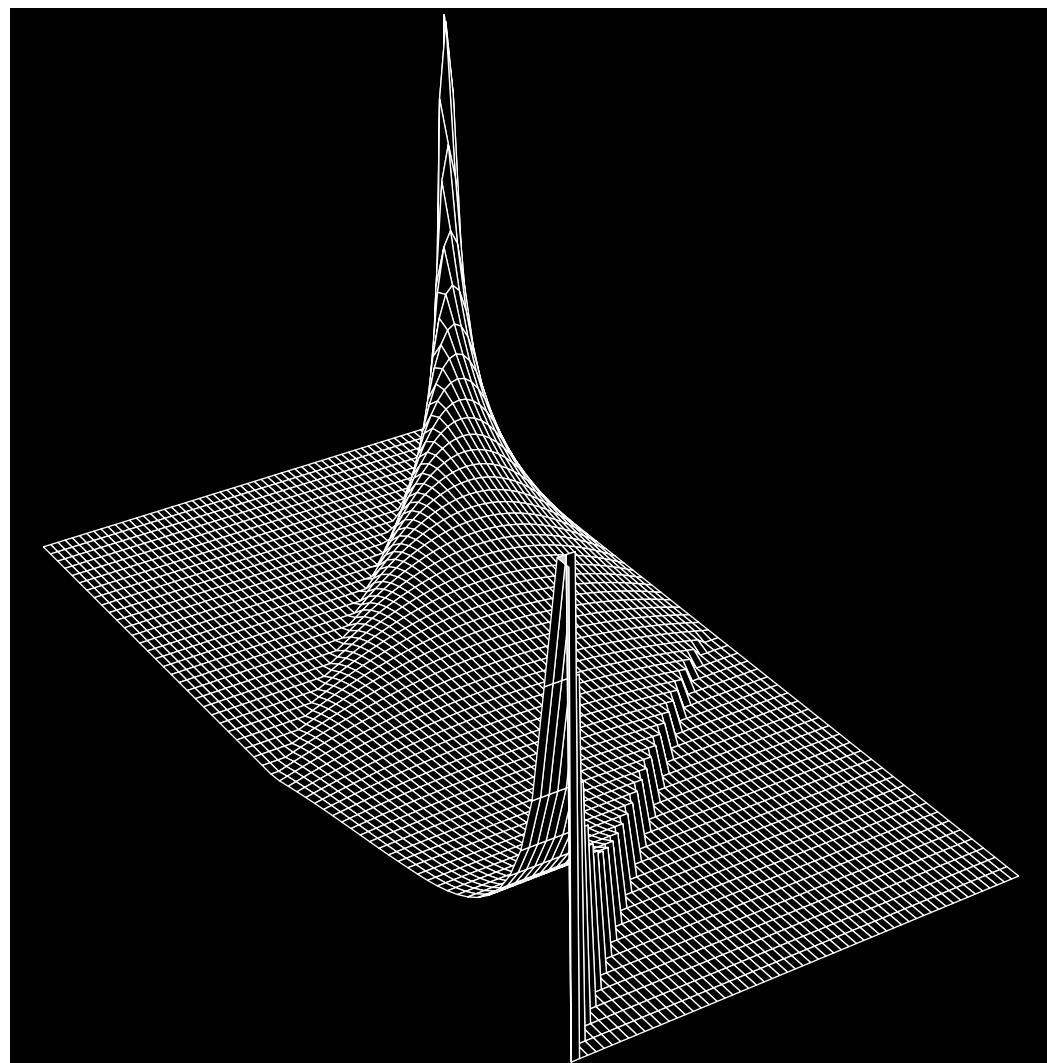


Figure 1: **Ejemplo de**
 $\beta_2(s, u)$

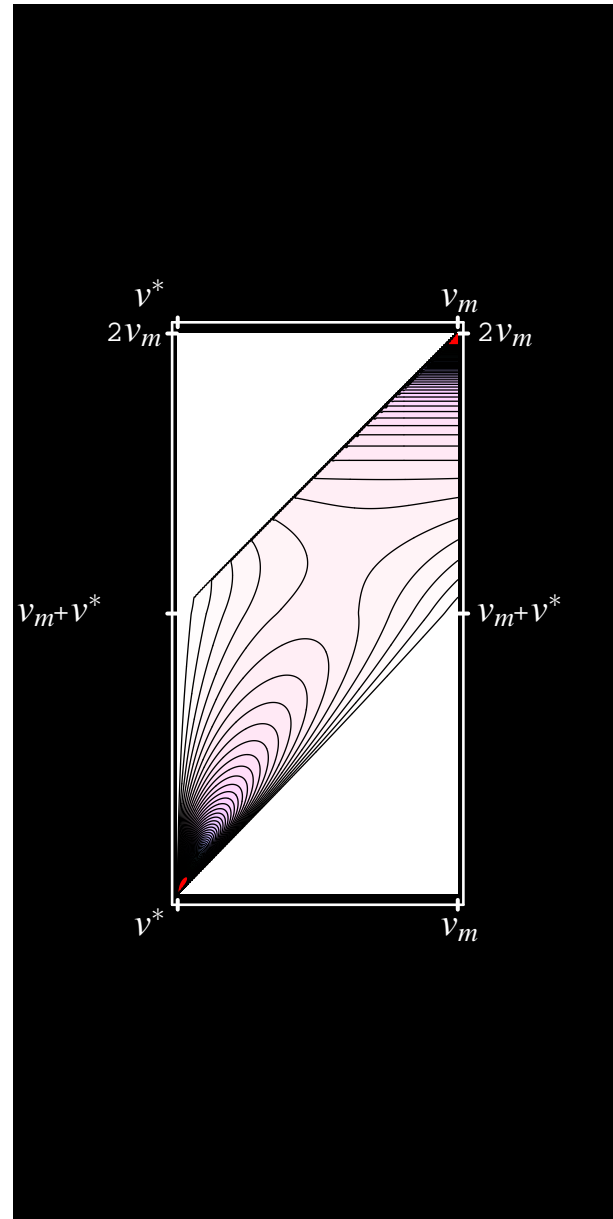


Figure 2: Líneas de nivel de $\beta_2(s, u)$

CASO GENERAL: $k > 2$ (eventos multiples)

Primero consideramos el caso $s \in (0, v_m]$ e introducimos el conjunto de \mathbb{R}^{k-1}

$$T_{k,1}(s) = \left\{ 0 < u_1 \leq \dots \leq u_{k-1} \leq s - \sum_{h=1}^{k-1} u_h \leq v_m \right\}. \quad (0.9)$$

Es claro que $\tilde{u} = s - \sum_{h=1}^{k-1} u_h$ identifica una de las k hijas de s y $T_{k,1}$ está caracterizado por la circunstancia de que \tilde{u} es el volumen de la(s) hija(s) *más grande(s)*. La función β_k **es definida** en $T_{k,1}$ de manera que

$$\int_{T_{k,1}(s)} \beta_k(s, u_1, \dots, u_{k-1}) d\sigma_{k-1} = 1. \quad (0.10)$$

Introducimos ahora, para $s \in (0, v_m]$ fijo, el siguiente dominio en \mathbb{R}^{k-1}

$$T_{k,j}(s) = \left\{ 0 < u_1 \leq \dots \leq u_{k-j} \leq \tilde{u} \leq u_{k-j+1} \leq \dots \leq u_{k-1} \leq v_m \right\},$$

$$j = 2, \dots, k,$$

(0.11)

donde $\tilde{u} = s - \sum_{h=1}^{n-1} u_h$.

Notar que, en el dominio $T_{k,k}(s)$, \tilde{u} resulta ser el volumen de la(s) gota(s) más pequeña(s).

Este dominios son transformados uno en el otro por el siguiente mapa (y, al variar de $j = 1, \dots, k - 1$, todas preservan la medida)

$$C_j : (\xi_1, \dots, \xi_{k-1}) \mapsto (u_1, \dots, u_{k-1}),$$

siendo

$$\left\{ \begin{array}{l} u_1 = \xi_1, \dots, u_{k-j-1} = \xi_{k-j-1}, \\ u_{k-j} = s - \sum_{i=1}^{k-1} \xi_i, \\ u_{k-j+1} = \xi_{k-j+1}, \dots, u_{k-1} = \xi_{k-1}. \end{array} \right.$$

y resulta

$$\left\{ \begin{array}{l} C_j \left(T_{k,j}(s) \right) = T_{k,j+1}(s), \\ C_j \left(T_{k,j+1}(s) \right) = T_{k,j}(s) \end{array} \right.$$

Entonces $C_j = C_j^{-1}$

Estas mapas tienen dos objetivos:

- “re-colocar” la *gota residual* \tilde{u}_k con respecto al conjunto ordenado de las otras hijas
- **extender** la densidad de probabilidad sobre **todos** los dominios $T_{k,j}$

Un resultado crucial (para nada obvio): *para todo* $k \geq 3$ *fijo, resulta*

$\overset{\circ}{T}_{k,j} \cap \overset{\circ}{T}_{k,i} = \emptyset$ *si* $i \neq j$, *y* $\bigcap_{j=1}^k T_{k,j}$ *se reduce a un punto sólo que se puede identificar con el evento*

$$u_1 = u_2 = \dots = u_{k-1} = \frac{s}{k}, \quad (0.12)$$

que es lo mismo que decir **todas las gotas son de lo mismo tamaño** .

En consecuencia de las propiedades de las mapas C_j , resulta

$$\int_{T_{k,1}(s)} \tilde{\beta}_k d\sigma_{k-1} = \int_{T_{k,2}(s)} \tilde{\beta}_k d\sigma_{k-1} = \dots = \int_{T_{k,k}(s)} \tilde{\beta}_k d\sigma_{k-1} = 1; \quad (0.13)$$

Si además ponemos

$$T_k = \bigcup_{j=1}^k T_{k,j}$$

y

$$D_k(s, v) = T_k(s) \cap \left\{ \sum_{h=1}^{k-1} u_h = s - v \right\}.$$

resulta que en todos los $T_{k,j}$ que contribuyen a $D_k(s, v)$, el volumen v es el de la gota “residual”. Notar que $T_k(s)$ es un polítopo $(k-1)$ -dimensional y entonces **$D_k(s, v)$ es exactamente una porción acotada de un hiperplano de \mathbb{R}^{k-2} .**

Como permitimos que s varé en $(0, 2v_m]$, **las funciones β_k están definidas en el polítopo k -dimensional**

$$\mathcal{T}_k = \left\{ s \in (0, 2v_m], 0 < u_1 \leq u_2 \leq \dots \leq u_{k-1} \leq u_k, \sum_{h=1}^k u_h = s \right\}.$$

El dominio $T_k(s)$ es justo $\mathcal{T}_k \cap \{s = \text{constant}\}$.

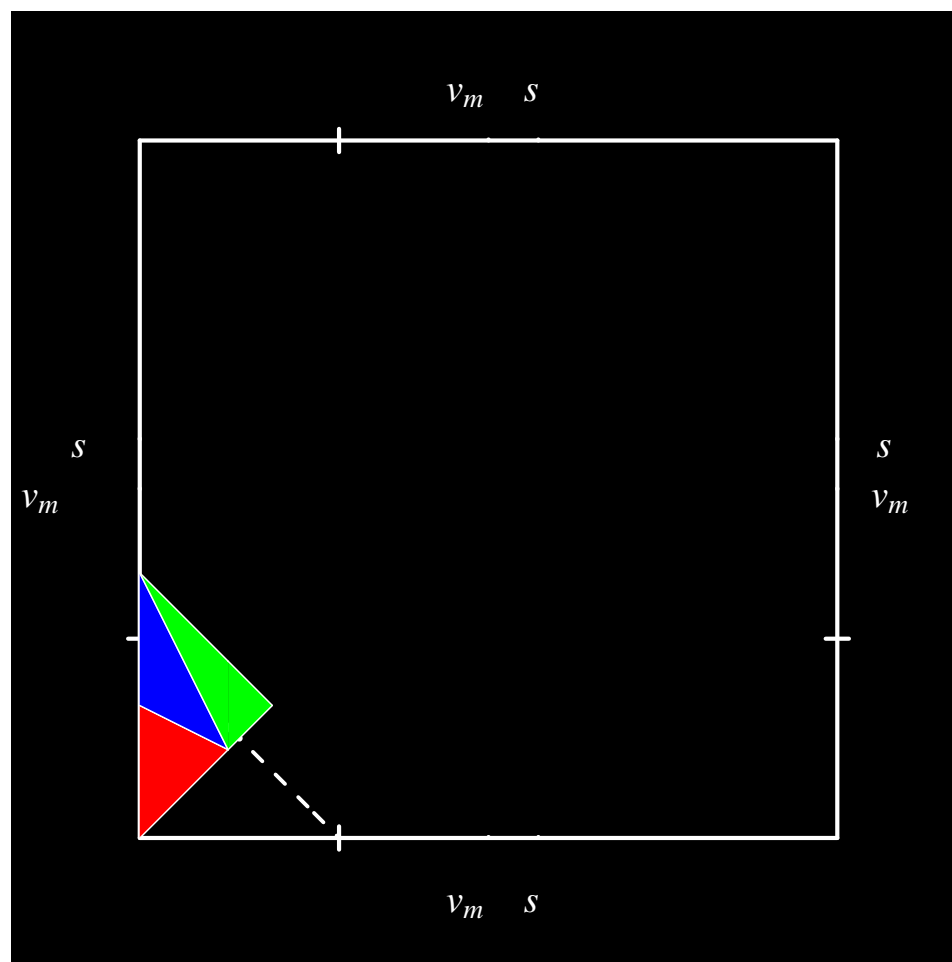


Figure 3: $s < v_m$; la línea recta es $u_1 + u_2 = s - v$

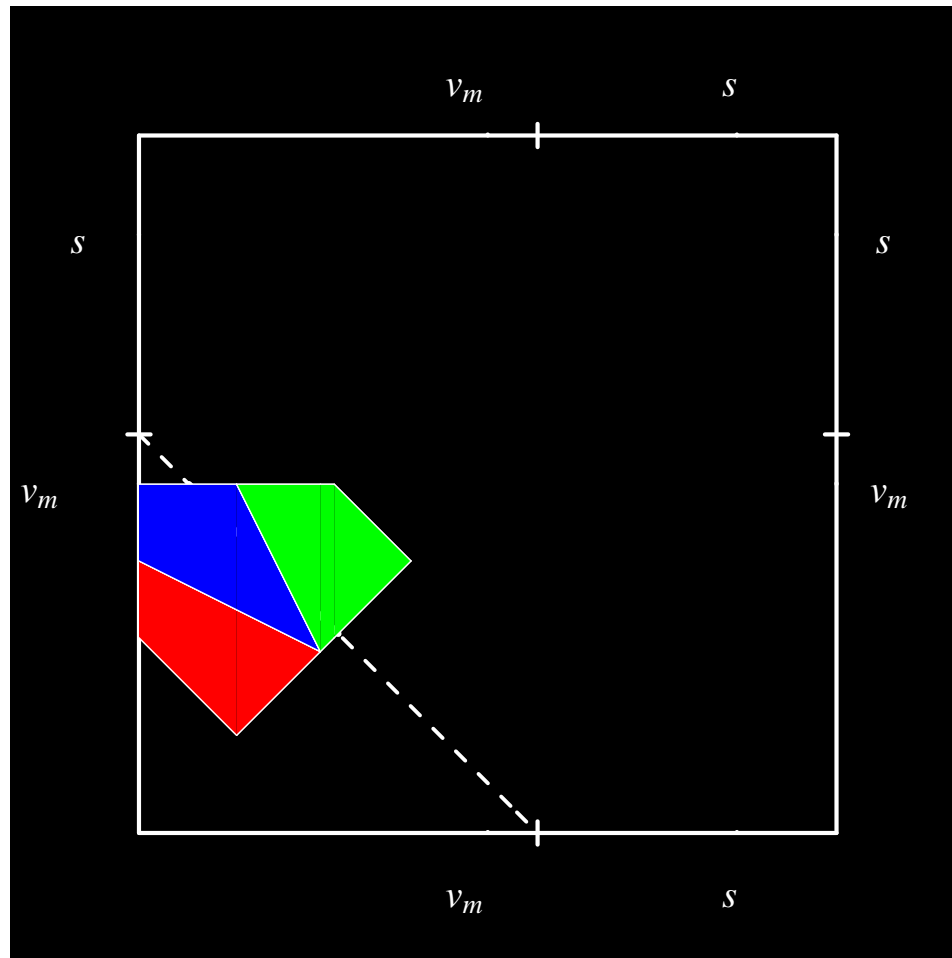


Figure 4: $s > v_m$; la línea recta es $u_1 + u_2 = s - v$

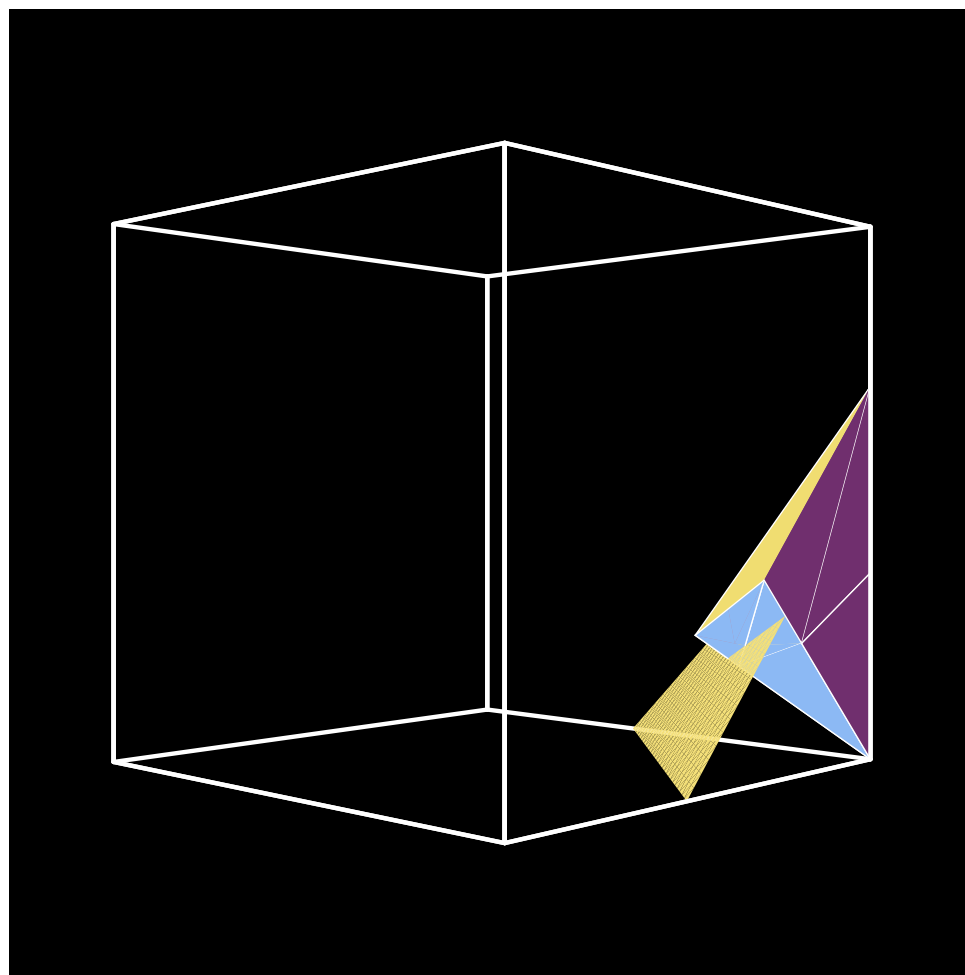


Figure 5: $s < v_m$; el plano que interseca al polítopo es $u_1 + u_2 + u_3 = s - v$

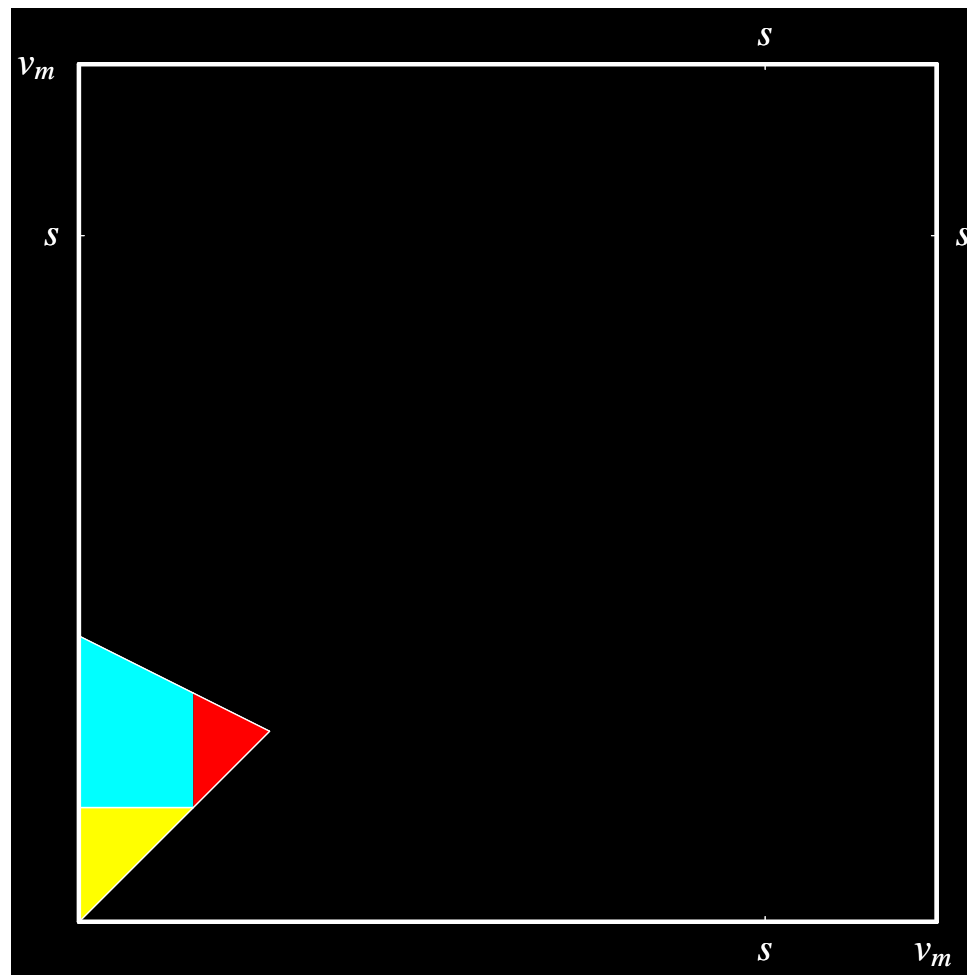


Figure 6: $s < v_m$; proyección en el plano u_1u_2 de la intersección del polítopo con el plano $u_1 + u_2 + u_3 = s - v$

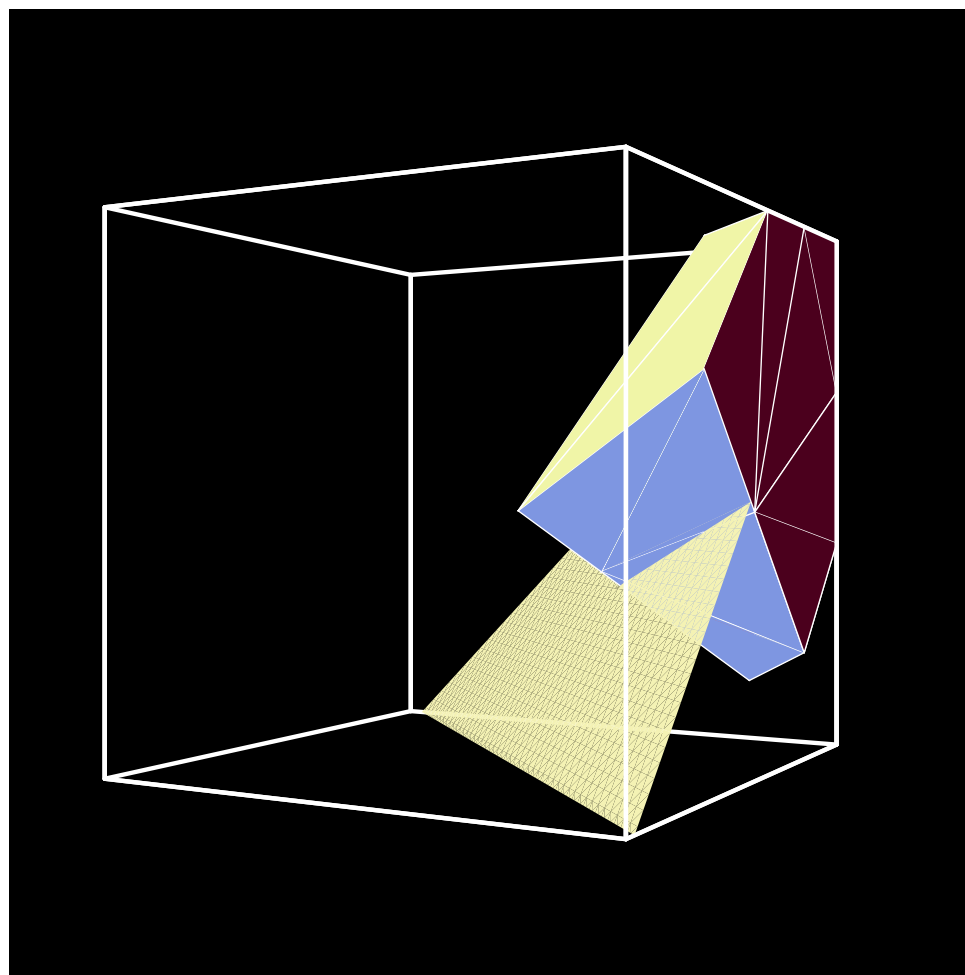


Figure 7: $s > v_m$; el plano que interseca al polítopo es $u_1 + u_2 + u_3 = s - v$

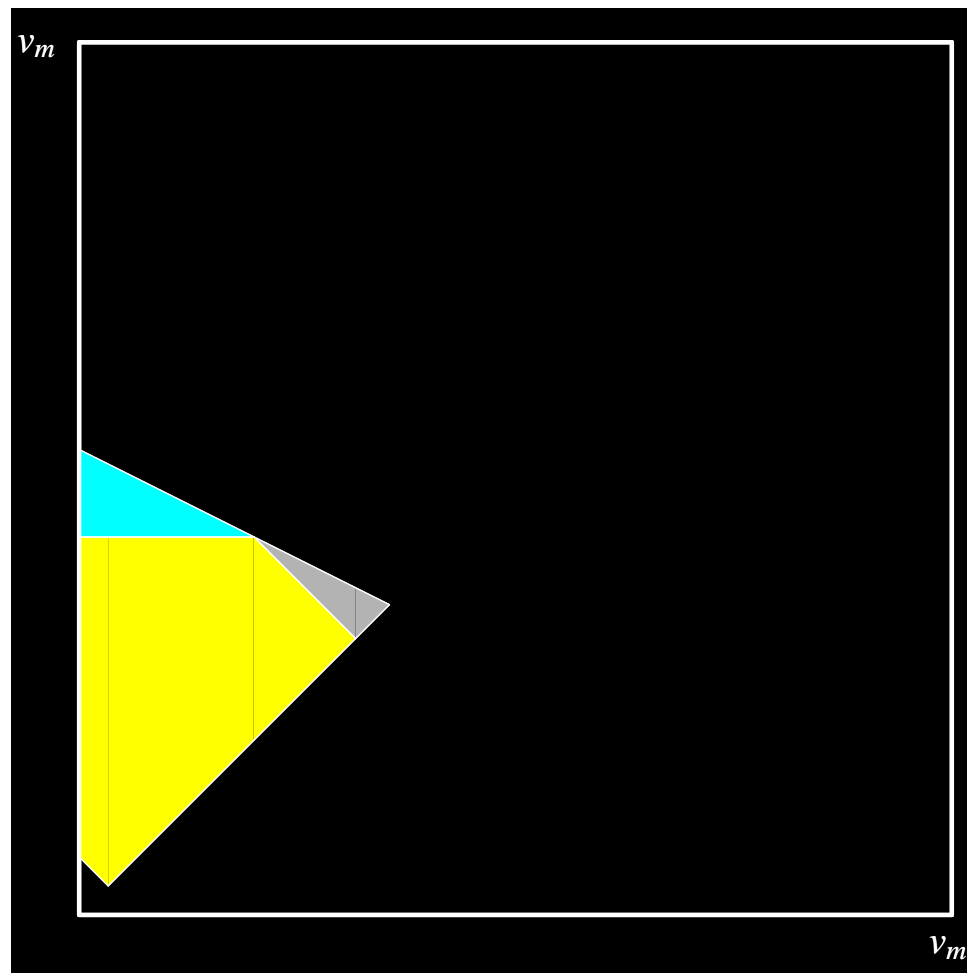


Figure 8: $s > v_m$; proyección en el plano u_1u_2 de la intersección del polítopo con el plano $u_1 + u_2 + u_3 = s - v$

EJEMPLO DE FUNCIÓN DE DENSIDAD DE PROBABILIDAD

Asimismo construimos β_3 poniendo ahora

$$f(s, u_1, u_2) = 720s^{-5}u_1u_2(s - u_1 - u_2)$$

y

$$\left\{ \begin{array}{ll} \beta_{3,1}(s, u_1, u_2) = f(s, u_1, u_2) \circ \chi_{T_{3,1}(s)}(u_1, u_2), & (u_1, u_2) \in T_{3,1}(s), \\ \beta_{3,2}(s, u_1, u_2) = f(s, u_1, s - u_1 - u_2) \circ \chi_{T_{3,2}(s)}(u_1, u_2), & (u_1, u_2) \in T_{3,2}(s), \\ \beta_{3,3}(s, u_1, u_2) = f(s, s - u_1 - u_2, u_1) \circ \chi_{T_{3,1}(s)}(u_1, u_2), & (u_1, u_2) \in T_{3,3}(s), \end{array} \right.$$

de manera que

$$\beta_3 = \beta_{3,1} + \beta_{3,2} + \beta_{3,3}.$$

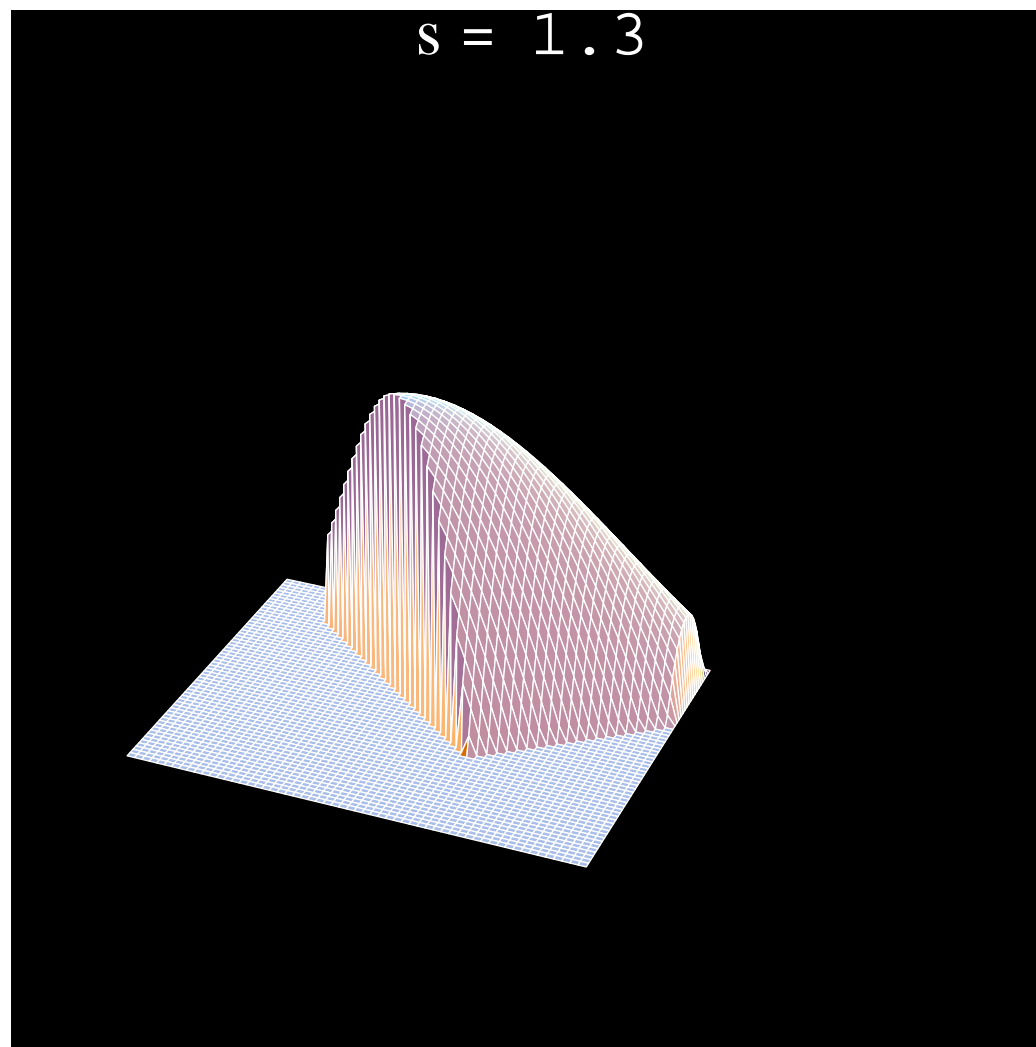
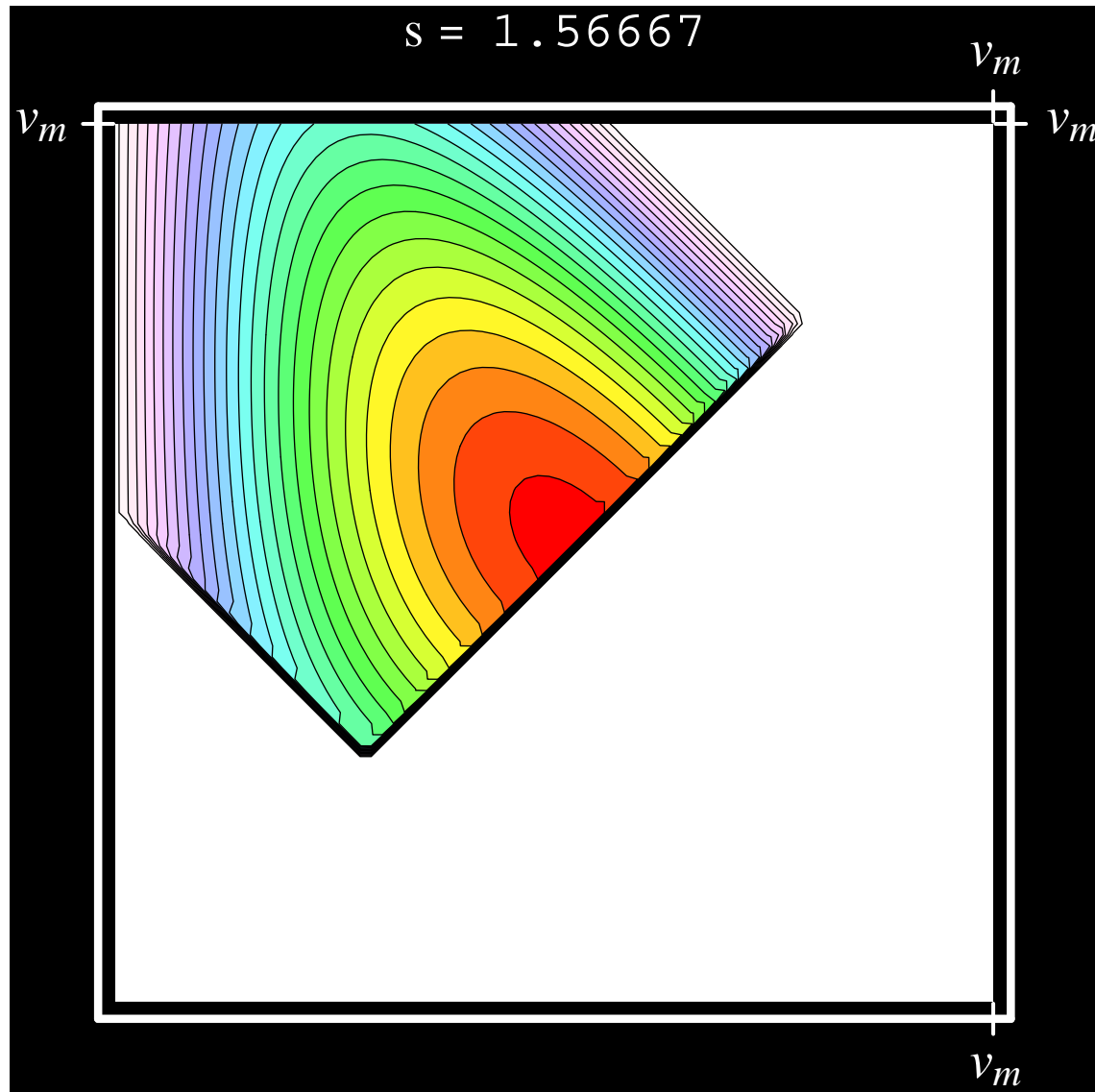


Figure 9: **Ejemplo de**
 $\beta_3(s, u)$



SIMULACIONES NUMÉRICAS

- HEMOS PROBADO LA EXISTENCIA Y UNICIDAD GLOBAL EN EL TIEMPO POR NUESTRO MODELO INDEPENDIENTEMENTE DE CUÁNTOS NUMEROSOS SEAN LOS MODOS DE RUPTURA.
- TODAS LAS SIMULACIONES NUMÉRICAS UTILIZAN LAS FUNCIONES β_k MOSTRADAS ANTES.
- SON CONSIDERADOS EVENTOS HASTA EL CUARTO ORDEN INCLUSIVE. EL NÚCLEO DE COALESCENCIA UTILIZADO APARECE EN LA LITERATURA TECNICA. TODAS LAS FRECUENCIAS DE RUPTURA α_k TIENEN LÍMITE 0 CUANDO $\nu \rightarrow 0$ Y TIENEN LIMITE $+\infty$ CUANDO $\nu \rightarrow \nu_m$.
- TODOS LAS INTEGRALES MÚLTIPLES SE EVALÚAN UTILIZANDO CONVENIENTES MÉTODOS MONTE CARLO.

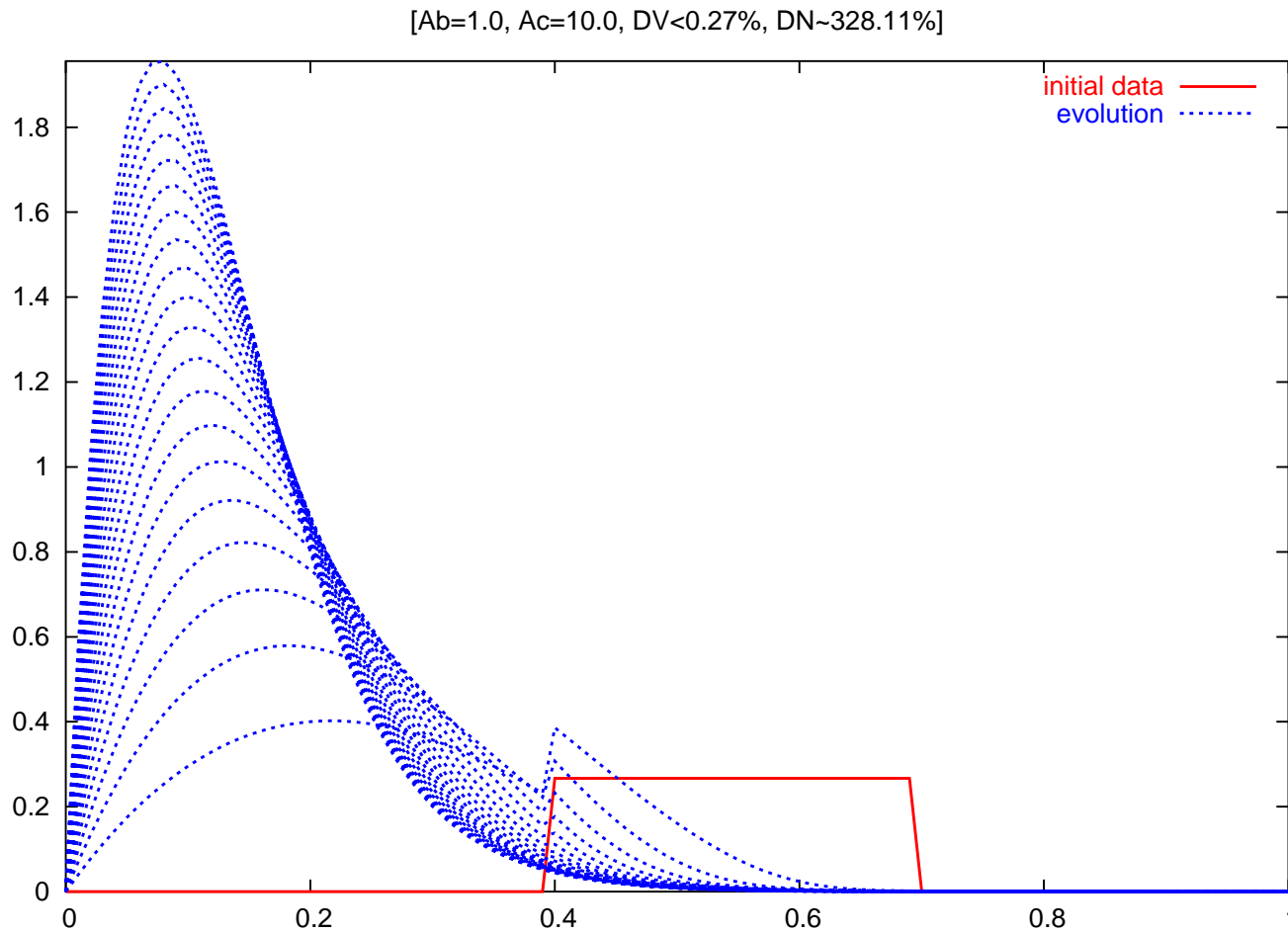


Figure 11: **Evolución de $f(v,t)$ a partir desde un dato inicial fijo: en este caso sólo se consideran eventos binarios**

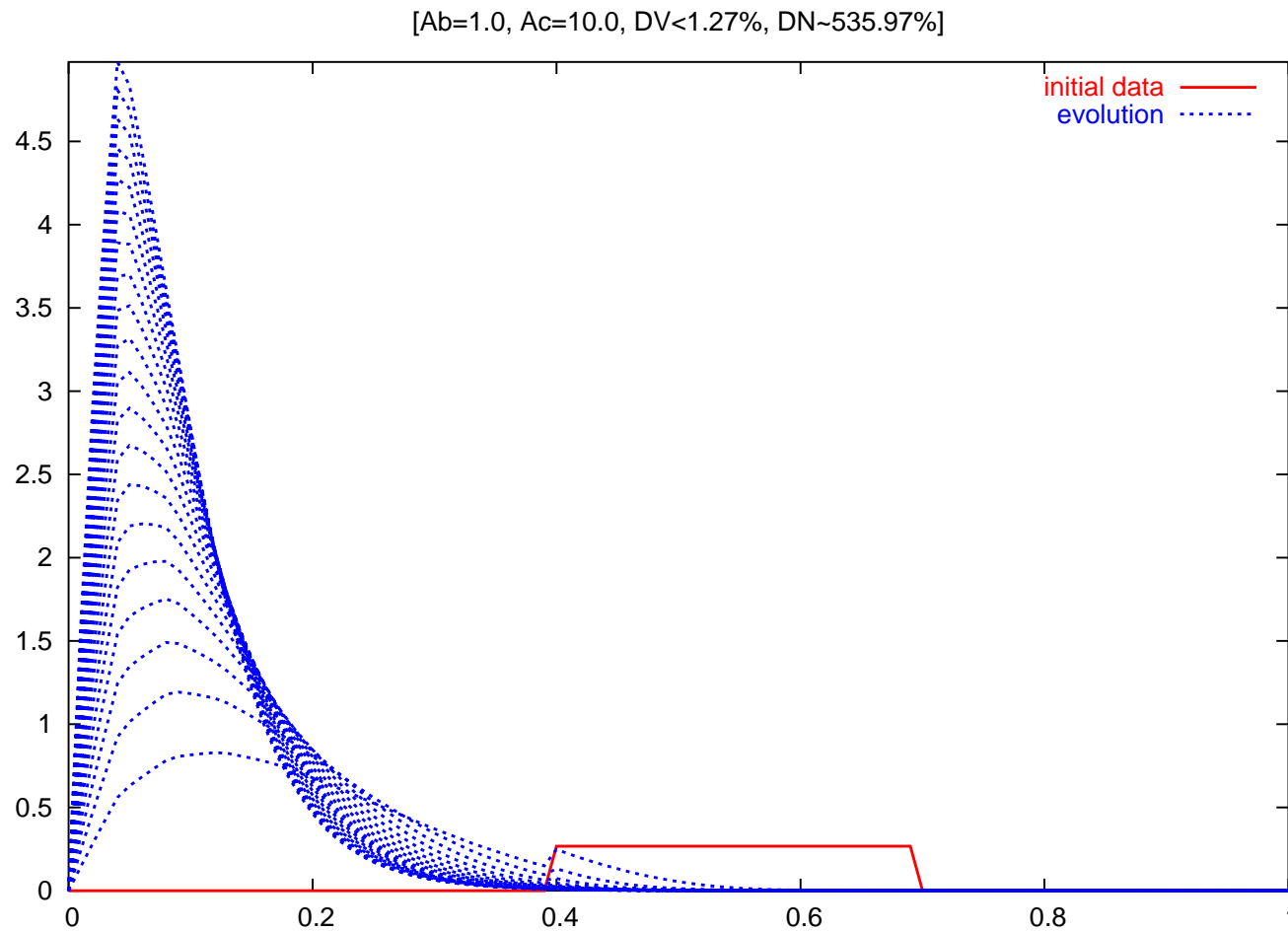


Figure 12: **Evolución de $f(v,t)$ a partir desde un dato inicial fijo: en este caso se consideran eventos de orden hasta el tercero inclusive**

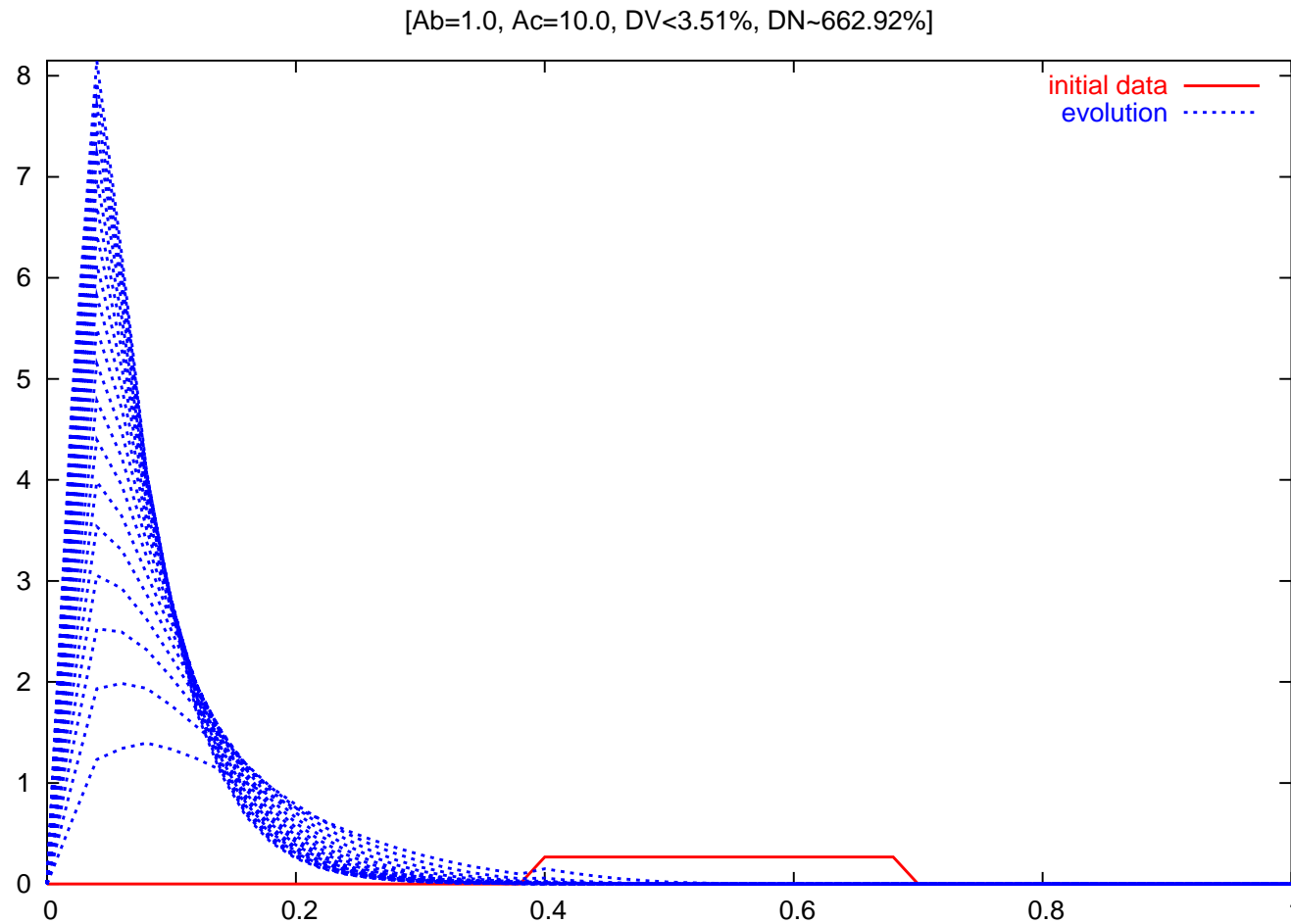


Figure 13: **Evolución de $f(v,t)$ a partir desde un dato inicial fijo: en este caso se consideran eventos de orden hasta el cuarto inclusive**

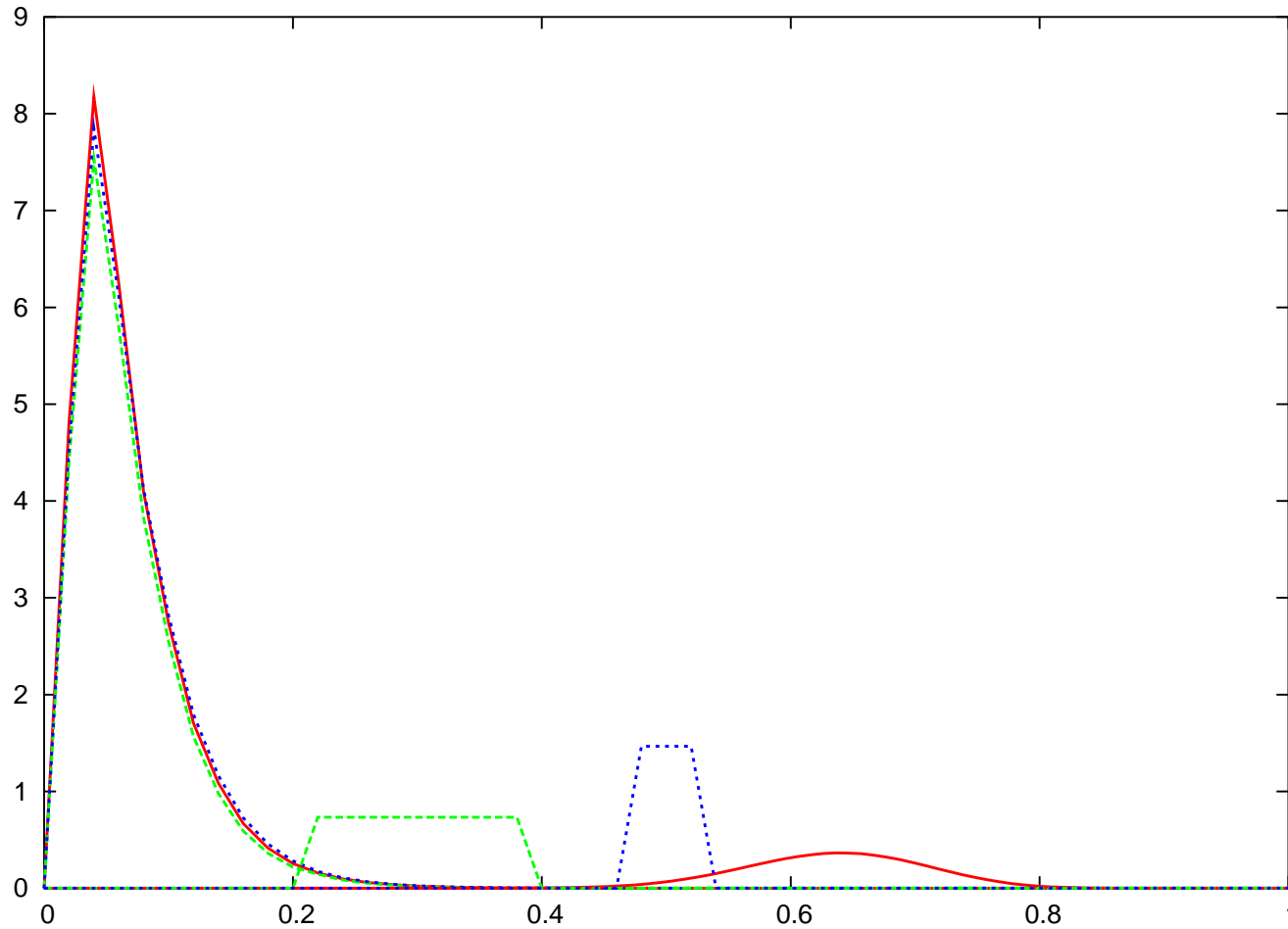


Figure 14: **Evolución de $f(v, t)$ a partir desde tres diferentes datos iniciales fijos: la forma asintótica aparece independiente de $f(v, 0)$**

POSIBLES PERSPECTIVAS FUTURAS:

- el último gráfico muestra que la solución asintótica (en el tiempo) parece independiente de $f_o(v)$. ¿**Es esto un teorema?**
- La existencia de una solución estacionaria no trivial fue demostrada muy recientemente por el modelo con scattering de volumen (P. Laurençot and C. Walker 2004). ¿**Puede esto ser demostrado también por el modelo “explícito” bajo hipótesis “buenas” y “fáciles-de-leer” sobre $\alpha_k, \beta_k, \lambda_k$?**
- La extensión al caso discreto (más adaptado a medios poliméricos) es “rutina” en el modelo clásico. ¿**Existe algo similar para el modelo explícito?**
- Incluir complicaciones adicionales como un flujo de “inlet-outlet”, agentes químicos, un campo térmico