
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

**ESTUDIO DE LA DIFUSIÓN
EN CANALES**

Tesis que presenta:
M. en C. Yoshua Chávez Bolaños
Para obtener el grado de:
Doctor en Ciencias (Física)

Asesor:
Dr. Leonardo Dagdug Lima (UAM-I)



Jurado Calificador:

Presidente:	Dra. Rosa María Velasco Belmont	UAM-I
Secretario:	Dr. Leonardo Dagdug Lima	UAM-I
Vocal:	Dr. José de Jesús Álvarez Ramírez	UAM-I
Vocal:	Dr. Iván Santamaría Holek	UNAM
Vocal:	Dr. Pedro Eduardo Miramontes Vidal	UNAM

Lugar: Edificio de Posgrado EP-001, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.

Fecha y hora: 25 de Noviembre de 2019 a las 10:00 hrs.

Agradecimientos

Agradezco a mi Madre por su apoyo incondicional e inspiración, que con su ejemplo me ha motivado a seguir siempre adelante. A mis hermanos, Agny y Heriberto, por acompañarme en la vida.

Agradezco también a mi asesor Leonardo Dagdug Lima por sus invaluable enseñanzas, su paciencia y apoyo a lo largo de todos estos años.

Agradezco además a la Universidad Autónoma Metropolitana por los recursos económicos brindados, a la Unidad Iztapalapa por el lugar de trabajo y por la oportunidad de realizar mis estudios en su plantel.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Difusión y movimiento Browniano	3
1.2. Ecuación de difusión	6
1.3. Conexión entre movimiento Browniano y difusión	7
1.4. La ecuación de Smoluchowski	10
1.5. Estructura de este documento	13
2. Difusión en sistemas confinados	14
2.1. Ecuación de Fick-Jacobs	15
2.2. Coeficiente de difusión para sistemas confinados	16
3. Ecuación de Difusión en su forma Covariante	18
3.1. Invarianza de la concentración	18
3.2. Difusión en una variedad	19
4. Canales 2 dimensionales	21
4.1. Construcción del canal asimétrico en 2 dimensiones	22
4.2. Dependencia en las coordenadas SNC	23
4.3. Cálculo del determinante para el canal asimétrico	26
4.4. Tensor de difusión en SNC	28
4.5. Coeficiente bidimensional	30
4.6. Canal recto asimétrico	38
4.7. Canal asimétrico inclinado	39
5. Canales 3 dimensionales	42
5.1. Vectores tangente, normal y binormal	42
5.2. Cálculo del determinante	46

5.3. Coeficiente de difusión efectivo	54
5.4. Coeficiente de difusión efectivo para un canal recto	60
5.5. Coeficiente de difusión efectivo para un canal inclinado	64
5.6. Coeficiente de difusión efectivo para una hélice circular	67
5.6.1. Aproximación a κ 's y τ 's pequeñas con a constante	74
5.6.2. Aproximación con dependencia en κ 's y τ 's pequeñas con a variable	79
6. Resumen y conclusiones	84
A. Coeficiente de difusión para sistemas confinados	87
A.1. Fick-Jacobs a partir de Smoluchowski	87
A.2. Coeficiente de difusión como función de la posición $D(x)$	90
B. Cálculo Tensorial	99
B.1. Variedades	100
B.2. Transformación de coordenadas de curvas y superficies	100
B.2.1. Tensores contravariantes	102
B.2.2. Tensores covariantes	102
B.2.3. Tensores mixtos	102
B.3. Álgebra tensorial	103
B.4. Derivada covariante	103
C. Reparametrización y longitud de arco	107
C.1. Longitud de arco	107
C.2. Reparametrización	108
D. Las ecuaciones de Frenet-Serret	109
E. Cálculos algebraicos	112
E.1. Simplificación del determinante	112
E.2. Notación compacta para sistemas de ecuaciones	121
E.3. Notación compacta del determinante	122
E.4. Símbolos de Christoffel en el sistema SNC	125
E.5. Símbolos de Christoffel y determinante	126

Capítulo 1

Introducción

Luego de millones de años de evolución, surge en la naturaleza un animal que más allá de sólo interactuar con su entorno, comienza a hacerse preguntas acerca de este, incluso comienza a cuestionarse acerca de sí mismo, qué es y de dónde viene. Ese instinto de curiosidad quizá transmutó en un impulso por preguntar, por cuestionarse. En algún punto la curiosidad se volvió duda y la duda un hueco que necesitaba taparse. El hombre se vio obligado desde el fondo de su ser a buscar respuestas. Sin embargo, responder una cuestión es un asunto nada trivial. ¿Cómo saber cuándo una pregunta ha sido respondida? ¿qué buscamos en esa respuesta: alivio, aceptación, universalidad, verdad? Al final de cuentas, un fenómeno no puede más que ser interpretado por aquel que lo observe y esta interpretación no puede no ser un producto de la experiencia de dicho individuo, lo que impregna profundamente de subjetivismo cualquier respuesta.

Es aquí donde se hace invaluable el pensamiento científico. El pensamiento científico pone un referente, nos da algo con qué comparar nuestras ideas. El pensamiento científico establece que la respuesta a esa pregunta primigenia está en la naturaleza, que la naturaleza dice verdad, que la naturaleza es verdadera. Al final del camino, ese entorno natural que alimentó nuestra curiosidad más primitiva es lo que nos brinda aquellas

respuestas tan necesarias para el crecer del ser humano. La respuesta siempre estuvo frente a nosotros pero nos tomó mucho tiempo darnos cuenta.

Sin embargo, aunque la naturaleza es verdadera, esto no implica que la verdad sea naturaleza. Es decir, no tenemos por qué pensar que la naturaleza es toda la verdad posible. La filosofía va en busca de esta cuestión, establece un sin fin de corrientes del pensamiento, entre ellas están la lógica, la ética, la epistemología, la estética. Como árbol, se ramifica en todas las posibilidades del pensar humano. De la lógica se estudian los principios de la demostración y la inferencia válida que, aplicadas a los números, crea una corriente de pensamiento que establece el comportamiento y las relaciones entre estos. Surge la matemática. La cultura había traído avances y de entre estos avances se encontraban los números, símbolos necesarios para contar. Una vez habiendo establecido las relaciones entre los números, comenzaron a establecerse relaciones entre figuras geométricas, símbolos y entes abstractos. La matemática se hacía más sofisticada, extensa y variada con un sin fin de revoluciones en el seno mismo dentro de esta. La matemática se convertiría en una herramienta poderosa e invaluable.

La matemática es una de las principales herramientas en las que se apoya el método científico. La matemática es capaz de describir mediante sus reglas la manera en que la naturaleza se presenta. Es decir, la matemática nos ayuda a describir la verdad, nos ayuda a responder con verdad preguntas guiadas por nuestra curiosidad, de cierta manera, sacia nuestra necesidad de saber.

Entender que el universo es un todo, indivisible, incognoscible, inconmensurable, nos permite comprender la manera en que trataremos de responder nuestras dudas. Los seres humanos partimos el universo para poder percibirlo, nuestros sentidos escinden la naturaleza, es la única manera en que podemos percibir un poco de ella, creamos trozos del todo. Ahí yace la dificultad de entender la naturaleza en su absoluto. Sólo podemos darle sentido a pequeños pedazos de la naturaleza, formando

piezas de un rompecabezas que no siempre al unir las dan un panorama consistente. A veces las piezas se translapan y se contradicen, es entendible, considerando que no sabemos cómo cortar ni qué forma darle a cada pieza del rompecabezas. Y en efecto, así es como procedemos, tomamos una teoría, buscamos que esta teoría describa de la manera más general posible cierto trozo del universo y con ello, poder interiorizar eso que a simple vista nos era negado, con esto podemos comprender un poco de ese trocito de todo. A eso le llamamos *modelar*.

Construir un modelo es una tarea complicada, sólo poseemos algunas herramientas y nuestra imaginación. Pero incluso esos pequeños trozos de universo se muestran inescrutables por sí solos, hacen que el entendimiento de la naturaleza sea un trabajo titánico. Dificultades conceptuales y tecnológicas permean en todas las ramas de la ciencia y aunado a esto, se le suman las dificultades propias de la matemática en sí. Aunque la matemática sienta una base firme en la cual podemos reposar nuestras ideas acerca de la naturaleza, muchas veces carece de una tecnología que haga posible obtener una respuesta concreta. Y los casos no son pocos ni ha sido abordada por unos cuantos. La ciencia está colmada de esto. En la Física, mucho del trabajo tiene que ver con lo expresado anteriormente, se busca resolver expresiones fundamentales para casos particulares. Se busca crear técnicas matemáticas para trabajar expresiones fundamentales. Este trabajo toma ese rumbo, es acerca de una técnica matemática con la cual podemos describir la dispersión de partículas Brownianas. Este método consiste en reducir las dimensiones espaciales en la ecuación de difusión para partículas confinadas, a través de una función que absorbe parte de la geometría.

1.1. Difusión y movimiento Browniano

Clásicamente, *la difusión* es generada por el gradiente de concentración o de temperatura entre dos o más especies distintas de sustancias, las cuales tienden a homogeneizarse en el medio. La difusión es el mecanismo por el

cual se dispersa la materia debido a los impactos aleatorios que los átomos del medio ejercen sobre una partícula inmersa en este[1]. Este movimiento tan característico que tienen las partículas difusivas en el medio se les denomina *movimiento browniano*.

El movimiento browniano fue descrito de manera meticulosa en 1828 por Robert Brown[2, 3]. Este observó que un grano de polen al ser dejado en agua, se movía al azar en todas direcciones sin tener ninguna preferencia en la dirección a la cual hacerlo, con un movimiento incesante. Brown no pudo encontrar cuál era la causa de este fenómeno. No fue sino hasta principios del siglo *XX* que se establecieron las causas del movimiento browniano.

Uno de los artífices fue Marian Von Smoluchowski que mediante teoría cinética explicó que la partícula browniana experimenta aproximadamente 10^{20} colisiones por segundo con las partículas que conforman el medio en el que está sumergida; cada golpe contribuye al desplazamiento de la partícula browniana y dicho desplazamiento va en proporción a la velocidad que tengan las partículas del fluido. Debido a que dicha velocidad no es única según lo establece la distribución de velocidades de Maxwell, no es un sólo choque neto el que siente la partícula en toda su superficie sino una infinidad de ellos los que causan su particular movimiento[4].

Una de las principales contribuciones al entendimiento de la difusión fue establecida por Albert Einstein. Él describió el movimiento browniano a partir de una idea muy simple: a través de la probabilidad de encontrar a la partícula en un cierto lugar a un cierto tiempo. Einstein imaginó una partícula browniana que era golpeada por los átomos del medio y modeló este golpeteo con una función de probabilidad. A partir de esto, Einstein pudo deducir la ecuación de difusión, con lo que se establecía que el movimiento browniano era la causa de que las partículas se dispersaran en el medio, casi 200 años después del descubrimiento de dicho fenómeno[5].

Al principio, el movimiento browniano fue caracterizado con partículas que se movían libremente, es decir, que no experimentaban ninguna restricción en su movimiento. Cuando la partícula browniana está confinada, su dispersión en el medio se verá influenciada por la geometría del mismo, con

lo cual, la difusión puede desviarse significativamente del caso de la partícula libre ya que los recipientes que contienen a las partículas afectan la dinámica del movimiento browniano debido a que la forma del recipiente que crea el confinamiento se relaciona con el número de estados accesibles a las partículas[6], un efecto conocido como barrera entrópica.

En la naturaleza, la difusión suele encontrarse en sistemas confinados[7]:

«...Ejemplos notables se encuentran en la medicina, como la liberación controlada de fármacos suministrados en una microcápsula [8, 9], la penetración en un tejido tumoral de un medicamento con propiedades anticancerígenas [10], la migración a través de la piel de fotones de luz láser de algunos novedosos dispositivos de imagenología [11, 12], entre otros. En la biología molecular están en la absorción de iones a través de proteínas altamente especializadas embebidas en la membrana celular conocidas como canales iónicos [13, 14], o a través de nanoporos sintetizados artificialmente [15, 16], también se encuentran en la migración de ligandos hacia sus receptores o hacia los sitios activos de una proteína [17, 18], en la búsqueda de sitios de unión que ejecuta un cierto ligando sobre una cadena de ADN durante un proceso de reconocimiento molecular de una secuencia de nucleótidos específica [19], y en general en los mecanismos de comunicación química a nivel subcelular, [20, 21, 22]. Otros ejemplos en la química son la catálisis de reacciones en minirreactores y en medios porosos [23, 24] o bien las técnicas de separación de partículas que tienen como fundamento el uso de cribas moleculares o el intercambio iónico, como son la ósmosis, la cromatografía y la electroforesis, [25, 26]. Finalmente, en la nanotecnología los ejemplos incluyen el transporte de partículas a través de nanotubos de carbono [27], o a través de membranas sintéticas semipermeables [28, 29], además de todos los fenómenos que pueden ocurrir en el interior de muchas microestructuras sintetizadas en el laboratorio destinadas para los más diversos fines, [30, 31].»

1.2. Ecuación de difusión

El estudio de la difusión se remonta al siglo *XVI* con pensadores que aportaron al avance en su entendimiento como Johann Dobereiner[6, 32], Thomas Graham[33, 34] y Adolf Eugen Fick[35]. Thomas Graham descubre que entre más denso era el gas, la velocidad de la difusión de las partículas era menor. Por otra parte, Fick piensa que hay una analogía entre la difusión de las partículas y las leyes de la conducción del calor desarrollada por Joseph Fourier junto con la ley de la conducción eléctrica de Simon Ohm[36]. Debido a esta idea, postula que el flujo de partículas es directamente proporcional a las diferencias de las concentraciones C .

Matemáticamente se escribe

$$\mathbf{J} = -D_0 \nabla C \quad (1.1)$$

que se conoce como *primera ley de Fick*. Al sustituir esta expresión en la ecuación de balance de materia

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (1.2)$$

la cual nos dice que el cambio de la concentración en una región es igual al flujo de materia que entra o sale, obtenemos

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_0 \nabla^2 C \quad (1.3)$$

llamada *segunda ley de Fick* o *ecuación de difusión*¹. La ecuación de difusión rige la dinámica con la que las partículas se dispersan en el fluido debido al simple hecho de estar inmersas en él, esto es, cuando no hay ningún campo externo aplicado en la partícula. Si uno resolviera esta ecuación dadas las condiciones de frontera e iniciales, podría conocer la concentración en cada punto a cualquier tiempo o en su defecto, la

¹ La ecuación 1.3 se puede reescribir para un movimiento unidimensional como

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (1.4)$$

probabilidad de encontrar a la partícula en una cierta posición a un cierto tiempo. Es decir, si conocemos el comportamiento de la función $C(x, y, z, t)$ podemos conocer el comportamiento de las partículas a cualquier tiempo en cualquier punto.

1.3. Conexión entre movimiento Browniano y Difusión

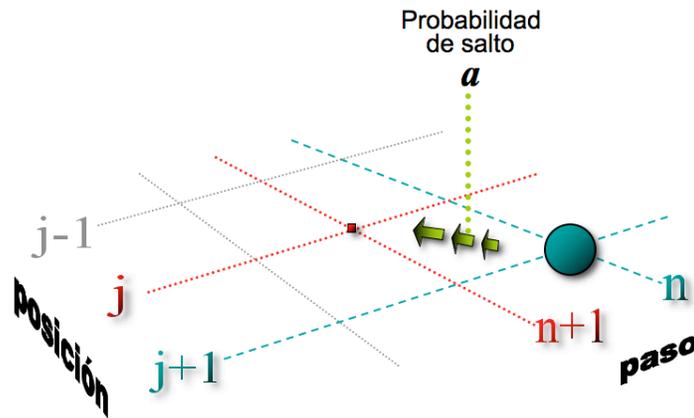


Figura 1.1: Esquema de la partícula browniana en el plano j vs. n . La partícula se encuentra en la posición $j + 1$ luego de n pasos y brincaré en la dirección decreciente en j , una unidad, en el paso $n + 1$ con una probabilidad de salto a .

En la Sección 1.2 se propuso la ecuación de difusión mediante un procedimiento heurístico. En esta sección se pretende deducir la expresión (1.4) mediante el uso de nociones microscópicas. Esto contribuirá a la robustez de la teoría.

Pensaremos que tenemos una partícula en una malla que restringe el movimiento de la partícula en una sola dirección. La partícula es golpeada por los átomos que la rodean de cada lado de una malla, lo que haría que dé un brinco. Como el golpeteo de los átomos del medio en la partícula es

errático, en principio no sabemos que lado recibirá un mayor número de impactos y por ende no sabemos hacia que lado se mueve la partícula. Por ello, le asignaremos una probabilidad de brinco, es decir, supondremos que dará un brinco a la derecha o a la izquierda con igual probabilidad de ocurrir, de manera que la partícula va y viene en la malla[37].

Consideremos la partícula inmersa en un medio unidimensional como en la Figura 1.1. A cada paso, la partícula se mueve una unidad de distancia. La probabilidad $P_n(j)$ de que la partícula esté en la posición j al paso n viene dada por la suma de las probabilidades de que esté en la posición $j - 1$ al $n - 1$ -ésimo paso y brinque, en este caso, una unidad en la dirección creciente de x , y la probabilidad de que esté en la posición $j + 1$ al $n - 1$ -ésimo paso y brinque una unidad en la dirección decreciente de j . Supongamos que A_1 es el conjunto de eventos que la partícula esté en la posición $j - 1$ al $n - 1$ -ésimo paso, que A_2 el conjunto de eventos que la partícula esté en la posición $j + 1$ al $n - 1$ -ésimo paso, B es el evento "brincar en la dirección de j positiva" y C es el evento "brincar en la dirección de j negativa". Esto nos permite escribir

$$P_n(j) = P(A_1 \cap B) + P(A_2 \cap C) \quad (1.5)$$

pero como los eventos A_1 y B son eventos independientes así como A_2 y C , entonces tenemos $P(A_1 \cap B) = P(A_1)P(B)$ y $P(A_2 \cap C) = P(A_2)P(C)$. Con esto

$$P_n(j) = P(A_1)P(B) + P(A_2)P(C) \quad (1.6)$$

Ahora definamos que $P(B) = p$ y $P(C) = q$. Con ello tenemos

$$P_n(j) = pP_{n-1}(j - 1) + qP_{n-1}(j + 1) \quad (1.7)$$

Ahora, en lugar de que la partícula esté en una recta donde sólo puede dar saltos discretos, supongamos que se encuentra en una recta continua. Es decir, en lugar de que la partícula esté en la posición j de la recta discreta, luego de dar n pasos, estará en la posición de la recta continua x al haber

transcurrido un tiempo t . Consideraremos entonces que $n - 1 \rightarrow t$, $n \rightarrow t + \Delta t$, $j \rightarrow x$ y $j \pm 1 \rightarrow x \pm \Delta x$. Habiendo establecido esto, la ecuación (1.7) se reescribe como

$$P(x, t + \Delta t) = pP(x - \Delta x, t) + qP(x + \Delta x, t) \quad (1.8)$$

Haciendo un desarrollo en serie de Taylor en t y x a primer y segundo orden, respectivamente, para la función de probabilidad de la ecuación (1.8). Con esto, la ecuación (1.8) queda

$$\begin{aligned} P(x, t) + \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \Delta t &\approx pP(x, t) - p\Delta x \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + p \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \\ &+ qP(x, t) + q\Delta x \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + q \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (1.9)$$

que podemos reescribir como

$$\begin{aligned} P(x, t) + \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \Delta t &\approx [p + q] P(x, t) - [p - q] \Delta x \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + \\ &+ [p + q] \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (1.10)$$

La suma $[p + q] = 1$. Así tenemos

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \approx \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} - [p - q] \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \quad (1.11)$$

Al hacer la hipótesis que estamos en el continuo, los términos Δx y Δt tienden a cero por lo que debemos pedir que el término

$$\frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} \rightarrow D_0 \quad (1.12)$$

siendo D_0 una constante. . Por otro lado, en el límite, el término

$$[p - q] \frac{\Delta x}{\Delta t} \rightarrow \gamma \quad (1.13)$$

con lo que obtenemos

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} - \gamma \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \quad (1.14)$$

donde los términos que van como $(\Delta x)^n/\Delta t$, con $n > 2$, tienden a cero.

Considerando

$$c(x, t) = \frac{NP(x, t)}{V},$$

podemos reescribir la ecuación (1.14)

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} - \gamma \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \quad (1.15)$$

Notese que si las probabilidades de salto p y q son iguales, $\gamma = 0$, con lo que obtenemos la ecuación de difusión. Este enfoque, cuando existe una asimetría en la probabilidad de desplazamiento de la partícula, fue abordado por Marian Von Smoluchowski. En la expresión (1.15) no se especifica la causa de dicha asimetría, lo que lo hace una ecuación muy general. Smoluchowski supone que esa asimetría viene dada por un campo externo.

1.4. La ecuación de Smoluchowski

Hasta ahora, se ha establecido la ecuación de difusión como la expresión matemática que describe la manera en que la materia se dispersa en el medio. Por su parte, Marian Von Smoluchowski establece el comportamiento de una partícula browniana en presencia de algún campo externo que le aporta energía extra a la partícula[39]. En este sentido, podemos considerar que el flujo J es consecuencia de dos flujos, el movimiento browniano de la partícula al difundir, J_{dif} , ec. (1.1), que para el caso en 1 dimensión es

$$J(x, t) = -D_0 \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1.16)$$

aunado al flujo provocado por el agente externo, $J_{a.e.}$

$$J(x, t) = J_{dif}(x, t) + J_{a.e.}(x, t) \quad (1.17)$$

Ahora haremos algunas consideraciones. El flujo se define como

$$J \equiv \frac{1}{A} \frac{dN}{dt} \quad (1.18)$$

donde A es el área transversal que atraviesa el flujo y N es el número de partículas en una cierta región. En una dimensión

$$J = \frac{dN}{dt} \quad (1.19)$$

Suponiendo que la posición depende del tiempo, usamos la regla de la cadena

$$J = \frac{dN}{dx} \frac{dx}{dt} \quad (1.20)$$

Haciendo las consideraciones usuales $v = dx/dt$ además de que la concentración se define como

$$C(x, t) \equiv \frac{N(x, t)}{\Delta x} \quad (1.21)$$

obtenemos que un flujo en general puede escribirse en términos de

$$J_{a.e.} = v(x, t)C(x, t) \quad (1.22)$$

Agreguemos una hipótesis extra, es decir, supongamos que la velocidad de la partícula en el medio es proporcional a la fuerza que se le aplique, esto es

$$v(x, t) = \mu F(x, t) \quad (1.23)$$

donde μ es la constante de proporcionalidad.

Combinando las ecuaciones (1.16), (1.17), (1.22) y (1.23) llegamos a que

$$J(x, t) = -D \left[\frac{\partial C(x, t)}{\partial x} - \frac{\mu}{D} F(x, t)C(x, t) \right] \quad (1.24)$$

Ahora, supongamos que la fuerza $F(x, t)$ se deriva de un potencial independiente del tiempo $U(x)$ tal que

$$F(x) = -\frac{dU(x)}{dx} \quad (1.25)$$

y con el cual, las partículas obedecen la distribución de Boltzmann en el equilibrio, esto es $p_{eq}(x, t = t_0) \propto \exp[-\beta U(x)]$ con t_0 tiempo en el que se llega al equilibrio y $\beta = (k_B T)^{-1}$ siendo k_B la constante de Boltzman y T

la temperatura. Usando (1.25) para reescribir (1.24), obtenemos que el flujo toma la forma

$$J(x, t) = -D \left[\frac{\partial C(x, t)}{\partial x} + \frac{\mu}{D} \frac{dU(x)}{dx} C(x, t) \right] \quad (1.26)$$

Considerando que en el equilibrio $C(x, t) \rightarrow C_{eq}(x)$, $J(x, t) = 0$, esto es

$$0 = -D \left[\frac{\partial C(x, t)}{\partial x} + \frac{\mu}{D} \frac{dU(x)}{dx} C(x, t) \right] \quad (1.27)$$

$$\Rightarrow \mu = \beta D \quad (1.28)$$

con esto (1.26) queda

$$J(x, t) = -D \left[\frac{\partial C(x, t)}{\partial x} + \beta \frac{dU(x)}{dx} p(x, t) \right] \quad (1.29)$$

Reescribamos esta ecuación considerando $e^{\beta U(x)} e^{-\beta U(x)} = 1$

$$J(x, t) = -D e^{\beta U(x)} e^{-\beta U(x)} \left[\frac{\partial C(x, t)}{\partial x} + \beta \frac{dU(x)}{dx} C(x, t) \right] \quad (1.30)$$

$$\Rightarrow J(x, t) = -D e^{-\beta U(x)} \left[e^{\beta U(x)} \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} + \beta e^{\beta U(x)} \frac{dU(x)}{dx} p(x, t) \right] \quad (1.31)$$

que puede ser escrita finalmente como

$$J(x, t) = -D e^{-\beta U(x)} \frac{\partial}{\partial x} \left[e^{\beta U(x)} C(x, t) \right] \quad (1.32)$$

Consideremos la ecuación de balance de materia, ec. (1.2) en el caso de una dimensión

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0, \quad (1.33)$$

Sustituyendo (1.32) en (1.33) obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x)} C(x, t) \quad (1.34)$$

donde (1.34) es la ecuación de Smoluchowski. Como la ecuación de Smoluchowski fue deducida para el caso de difusión en presencia de potenciales externos, con ella podemos modelar difusión en presencia de alguna barrera, pared u obstáculo cuyo efecto pueda describirse en términos de un potencial.

1.5. Estructura de este documento

Hasta ahora, en el Capítulo 1, hemos dado un vistazo a los conceptos y expresiones básicas en los cuales se sustenta la difusión de partículas y que son las bases de este trabajo.

Cabe resaltar que se ha puesto cierto énfasis en la manera en que se construyeron las expresiones matemáticas, lo cual, muchas veces es mal visto por extender la explicación de nociones que quizá para muchos sean obvias. Sin embargo, dicho énfasis es puesto en este trabajo, ya que, al hacer la construcción de las expresiones, se hacen suposiciones que, a mi parecer, deben estar siempre presentes en la mente de quien aborda la matemática de los fenómenos físicos y debe tenerse clara la manera en que dichas suposiciones afectan las expresiones matemáticas obtenidas y más aún cuando se planea hacer una extensión, como es el caso de este trabajo. El Capítulo 2 trata sobre el modelo matemático para la difusión de partículas en confinamiento. En este capítulo se presenta un esbozo de la deducción de la ecuación de Zwanzig, sin embargo, con el objetivo de plasmar clara y formalmente en qué consiste la reducción a una dimensión de la ecuación de difusión, en el Apéndice A se hace un análisis detallado. El punto principal es sacar a la luz la expresión (2.9), la cual es pieza fundamental de este trabajo.

El Capítulo 3 expone detalladamente la manera en que se construye la ecuación de difusión en su forma covariante.

En el Capítulo 4 se deduce el coeficiente de difusión dependiente de la posición para un canal bidimensional de paredes simétricas y asimétricas.

En el Capítulo 5 se construye el coeficiente de difusión dependiente de la posición para un canal tridimensional aplicando la técnica principalmente a un canal helicoidal de área transversal circular.

Finalmente, en el Capítulo 6 se presentan las conclusiones de este trabajo.

Capítulo 2

Difusión en sistemas confinados

Luego del establecimiento de la relación entre difusión y movimiento browniano, las leyes de Fick fueron puestas a prueba en diversos contextos y aunque la ecuación de difusión describe correctamente el fenómeno, es válida para el caso en el que no hay potenciales externos ni ninguna clase de restricción en su movimiento y cuando sucede así, requiere de ciertos términos de corrección como nos lo muestran las expresiones (1.15) y (1.34).

En la ecuación de difusión, al estar escrita en términos de derivadas parciales, las condiciones iniciales y de frontera juegan un papel fundamental en su solución. Por ello, cuando la difusión se considera confinada, se acarrea grandes dificultades debido a que a veces las fronteras que delimitan al sistema donde se lleva a cabo la difusión son complicadas, lo que implica que las expresiones matemáticas se vuelven complejas de resolver, y en muchos casos llega a ser imposible encontrar dicha solución[7]. Como alternativa, se han atacado los problemas no tradicionales mediante métodos numéricos dejando un poco de lado la búsqueda de soluciones analíticas. Sin embargo, dada la importancia de encontrar soluciones analíticas, se han hecho esfuerzos para poder elucidar cosas en este sentido. Una de las líneas de investigación más fuertes es tratar de encontrar una ecuación que describa el problema original y que

dependa de menos variables. Se buscan expresiones más simples pero que contengan la misma física de las expresiones originales.

2.1. Ecuación de difusión y reducción a una dimensión: Ecuación de Fick-Jacobs

Como ya se ha mencionado, debido a la dificultad para obtener soluciones analíticas a la ecuación de difusión, se han buscado métodos alternativos, en particular, métodos que arrojen resultados analíticos para dar un mejor entendimiento de la difusión. Una de estas líneas de investigación consiste en reducir, mediante una proyección unidimensional de la densidad de partículas, la dimensión de la ecuación de difusión.

El primero en hacer esto fue Merkel H. Jacobs, quien atacó el problema suponiendo que había simetría cilíndrica alrededor de uno de los ejes, digamos x [40]. El radio $r(x)$ del área de la sección transversal $\Lambda(x) = \pi r(x)^2$ es dependiente de la posición. Además se establece una nueva función

$$c(x, t) = \int_{\Lambda(x)} C(x, y, z, t) dS \quad (2.1)$$

donde $c(x, t)dx$ es el número de partículas en la región entre x y $x + dx$.

La integral se efectúa sobre toda el área Λ transversal al eje x . Al suponer que la concentración es homogénea en el plano transversal, se puede escribir $C(x, y, z, t) = c(x, t)/\Lambda(x)$. Sustituyendo esto en la primera ley de Fick la cual establece que el flujo es proporcional al cambio en la concentración de $C(x, y, z, t)$

$$J(x, t) = -D_0 \frac{\partial}{\partial x} \frac{c(x, t)}{\Lambda(x)} \quad (2.2)$$

Por definición de flujo de corriente

$$I_{ent} = -D_0 \Lambda(x) \frac{\partial}{\partial x} \frac{c(x, t)}{\Lambda(x)} \quad (2.3)$$

I_{ent} es la corriente que entra a la región infinitesimal en el punto (x, t) . La corriente que sale de dicha región infinitesimal en el punto $x + dx$ viene

dada por la expansión en serie de Taylor de la corriente alrededor del punto de entrada

$$I_{sal} = -D_0 \left[\Lambda(x) \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \frac{1}{\Lambda(x)} + \frac{\partial \Lambda(x)}{\partial x} \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \frac{1}{\Lambda(x)} dx + \dots \right] \quad (2.4)$$

Nos quedaremos sólo hasta primer orden en las derivadas. Igualando el término $I_{ent} - I_{sal}$ al cambio en el tiempo del número de partículas en la región diferencial obtenemos ¹

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial}{\partial x} \left[\Lambda(x) \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \frac{1}{\Lambda(x)} \right] \quad (2.5)$$

que se conoce como *Ecuación de Fick-Jacobs*.

Si comparamos la expresión (2.5) con (1.34) obtenemos la relación

$$\Lambda(x) = e^{-\beta U(x)} \quad (2.6)$$

La expresión (2.6) es de gran importancia ya que relaciona la geometría del canal con el potencial que confina las partículas difusivas.

A pesar de que la ecuación de Fick-Jacobs era relativamente menos complicada de resolver que la ecuación de difusión, ec. (1.3), sus predicciones no eran precisas por lo que se buscó la forma de modificarla con el objetivo de que sus resultados reprodujeran de manera más fiel lo que en los experimentos se encontraba.

2.2. Coeficiente de difusión para sistemas confinados

Jacobs al reducir a una dimensión la ecuación de difusión, pierde información en el plano transversal al momento de proyectar, ec. (2.1), por lo que, mediante una perturbación, Zwanzig[41] busca recuperar parte de la información perdida. Lo que hace primero es deducir la expresión de

$$^1 \frac{\partial}{\partial t} c(x,t) dx = I_{ent} - I_{sal}$$

donde $c(x,t)dx$ es el número de partículas en el área transversal

Fick-Jacobs, partiendo de la ecuación de Smoluchowski, ec. (1.34), para el caso bidimensional

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} C(x, y, t) &= D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} C(x, y, t) \\ &+ D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U(x, y)} C(x, y, t) \end{aligned}$$

haciendo la suposición

$$C(x, y, t) \cong G(x, t) \rho(y; x) \quad (2.7)$$

donde $G(x, t)$ y $\rho(y; x)$ viene dado por las ecs. (A.7) y (A.10), respectivamente. Con esto podemos llegar a la expresión

$$\frac{\partial}{\partial t} G(x, t) = D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A(x)} \frac{\partial}{\partial x} \frac{G(x, t)}{e^{-\beta A(x)}}$$

que es la ecuación de Fick-Jacobs. Considerando la definición (2.7), se hace una perturbación fuera del equilibrio de esta expresión

$$C(x, y, t) = G(x, t) \rho(y; x) + \delta C(x, y, t) \quad (2.8)$$

obteniendo

$$\frac{\partial}{\partial t} G = \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} D(x) \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G(x, t) \quad (2.9)$$

La expresión (2.9) es una ecuación que en principio describe la misma dinámica que la ecuación de difusión, ec. (1.3) pero sólo depende de una variable espacial [42, 43, 44, 45, 46]. La ecuación (2.9) absorbe la dependencia de las coordenadas axiales en un coeficiente de difusión que depende de la posición, $D(x)$. Con esto, en lugar de trabajar con una ecuación tridimensional en el espacio o una ecuación bidimensional en el plano, trabajamos con una ecuación unidimensional. Un análisis detallado de esta expresión viene expuesta en el Apéndice A.

Capítulo 3

Ecuación de Difusión en su forma Covariante

3.1. Invarianza de la concentración

Una de las premisas básicas para poder escribir la ecuación de difusión en su forma covariante es el hecho de que la concentración de partículas, C , es un *invariante*, esto es, que permanece sin cambios bajo una transformación de coordenadas. Que la concentración de partículas sea un invariante puede verse a partir de su definición como el cociente de dos cantidades independientes de las coordenadas, que son el número de partículas y el área (o volumen, sea el caso).

Supóngase que deseamos conocer el valor de la concentración en un punto P , cuyas coordenadas en cierto sistema de coordenadas son (x_P, y_P) . Si conocemos la forma funcional de la concentración en este sistema de coordenadas, entonces podemos calcular $C(P) = C(x_P, y_P)$. Ahora supóngase que hacemos la descripción desde otro sistema de coordenadas, en el cual el punto P está descrito mediante la díada (x'_P, y'_P) . En general, la concentración en este nuevo sistema de coordenadas tendrá una dependencia funcional diferente que en el primer sistema. Denotamos a la concentración en el segundo sistemas de coordenadas por $\tilde{C} = \tilde{C}(x', y')$. Lo que debemos destacar aquí es que al ser la concentración una cantidad

invariante, el valor numérico $C(P) = C(x_P, y_P)$ coincide con $\tilde{C}(x'_P, y'_P)$, aun cuando la dependencia funcional de $C(x, y)$ y $\tilde{C}(x', y')$ sean distintas. Para saber cómo se relacionan estas funciones hace falta conocer la relación entre las coordenadas del punto P en ambos sistemas de coordenadas, esto es,

$$x_P = x_P(x'_P, y'_P), \quad (3.1)$$

$$y_P = y_P(x'_P, y'_P). \quad (3.2)$$

De donde se obtiene que

$$C(x_P(x'_P, y'_P), y_P(x'_P, y'_P)) = \tilde{C}(x'_P, y'_P). \quad (3.3)$$

con lo que se pedirá que las transformaciones sean homeomorfismos[47].

3.2. Difusión en una variedad

Teniendo en mente lo establecido en la Sección 3.1, tomemos la ecuación de balance de materia, ec. (1.2), y promovámosla a estar en alguna variedad¹, esto es²

$$\dot{C} + \nabla \cdot \vec{J} = 0, \quad (3.5)$$

donde, \dot{C} es la derivada temporal de la concentración, J es el flujo de partículas dado por (1.1)

$$\mathbf{J} = -D_0 \nabla C$$

¹Una variedad es un espacio topológico que tiene una conexión con los espacios euclidianos a través de un mapeo llamado homeomorfismo. La existencia de este mapeo asegura que las propiedades en ambos espacios son invariantes[47]. Al decir que la ecuación esté en una variedad, estamos pidiendo que se encuentre en un espacio topológico que tenga las mismas propiedades que tiene un espacio euclidiano, con el objetivo de garantizar que podamos seguir aplicando las nociones establecidas para estos espacios (ver Apéndice B.1).

² Dado que ∇_c y J^c son tensores de rango uno

$$\nabla \cdot \vec{J} = \nabla_c J^c \quad (3.4)$$

y ∇ es la *derivada covariante*. O, en lenguaje tensorial³

$$\dot{C} + \nabla_\mu J^\mu = 0, \quad (3.7)$$

y

$$J^\mu = -D^{\mu\nu} \partial_\nu C \quad (3.8)$$

con $\mu = 1, 2, 3$ y $\nu = 1, 2, 3$. Ahora, combinamos (3.7) y (3.8) para obtener

$$\dot{C} = \nabla_\mu D^{\mu\nu} \partial_\nu C \quad (3.9)$$

Tomando la expresión (B.25) con $a = c = \mu$

$$\nabla_\mu X^\mu = \partial_\mu X^\mu + \Gamma_{b\mu}^\mu X^b \quad (3.10)$$

y sustituyendola en (3.9), obtenemos

$$\dot{C} = \partial_\mu [D^{\mu\nu} \partial_\nu C] + \Gamma_{\lambda\mu}^\mu [D^{\lambda\nu} \partial_\nu C].$$

esto es

$$\dot{C} = \partial_\mu [D^{\mu\nu} \partial_\nu C] + \Gamma_{\lambda\mu}^\mu [D^{\lambda\nu} \partial_\nu C] \quad (3.11)$$

que es la ecuación de difusión escrita de forma covariante. Si trabajamos en un marco de referencia cartesiano, los símbolos de Christoffel serán cero y el tensor $D^{\mu\nu}$ es una matriz diagonal con D_0 como entradas. Por ello, la ec. (3.11) se transforma en la ecuación de difusión usual para un marco cartesiano, expresión (1.3). Las ecs. (1.12) y (1.13) nos indican que los coeficientes de difusión son una medida de la velocidad con la que se desplaza la partícula browniana en el medio. Sin embargo, en medios anisotrópicos la velocidad de desplazamiento depende de la dirección en el que se mueva la partícula. Ello se ve reflejado en la ecuación (3.11), donde se representa un coeficiente de difusión para cada componente del tensor de difusión $D^{\mu\nu}$.

³ La derivada covariante de un tensor de rango cero, g , es igual a su derivada ordinaria

$$\nabla_c g = \partial_c g \quad (3.6)$$

por lo que

$$J^\mu = -D^{\mu\nu} \nabla_\nu C = -D^{\mu\nu} \partial_\nu C$$

Capítulo 4

Canales 2 dimensionales

Construyamos un canal bidimensional alrededor de un eje, el cual estará dado por una curva parametrizada. Tomaremos dos vectores ortonormales que funjan como los ejes de un nuevo sistema de referencia que se irá moviendo junto con esta curva. Pondremos nuestro nuevo sistema de referencia sobre este marco y trabajaremos con la ecuación de difusión, ec. (3.11), en este marco[48].

Sea $\mathbf{r}_c \in \mathbb{R}^2$, el vector que dibuja la línea media del canal con parámetro t está dada por

$$\mathbf{r}_c(t) = (t, f(t)) \quad (4.1)$$

Por construcción y comodidad, el canal estará insertado en el eje $x - y$. El vector unitario $\hat{\mathbf{t}}$, tangente a dicha curva, tiene la expresión

$$\hat{\mathbf{t}} = \hat{\mathbf{t}}(t) = \frac{\mathbf{t}(t)}{|\mathbf{t}(t)|} = \frac{\dot{\mathbf{r}}_c(t)}{|\dot{\mathbf{r}}_c(t)|} = \frac{1}{l}(1, f'(t)) \quad (4.2)$$

donde $l = \sqrt{1 + f'^2(t)}$.

Para el vector $\hat{\mathbf{n}}$, normal la curva dada por \mathbf{r}_c , calcularemos el producto cruz de $\hat{\mathbf{t}}$ con el vector unitario $\hat{\mathbf{k}}$

$$\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{t}} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{l} & \frac{f'(t)}{l} & 0 \end{vmatrix} = \frac{1}{l}(-f'(t), 1, 0) \quad (4.3)$$

Con el vector $\hat{\mathbf{n}}$ vamos a construir la parte transversal al eje del canal donde le daremos una magnitud en esa dirección con la variable ρ . Sin embargo, no queremos que ρ se extienda infinitamente, queremos que llegue hasta un cierto valor ρ_0 , que es donde se encuentra la pared del canal (ver Figura 4.1). Por ello, el grosor del canal estará modulado por el término ρ/ρ_0 . Además, para generalizar aún más el canal, pediremos que el ancho dependa de la coordenada t y haremos esto mediante la función $a(t)$. Con esto podremos describir un canal con ancho variable. Por todo lo anterior, podemos escribir

$$\mathbf{r}(t, \rho) = \mathbf{r}_c(t) + \frac{\rho}{\rho_0} a(t) \hat{\mathbf{n}} \quad (4.4)$$

que podemos reescribir como

$$\mathbf{r}(t, \rho) = (t, f(t)) + \frac{a(t)\rho}{l\rho_0} (-f'(t), 1) \quad (4.5)$$

es decir

$$\mathbf{r}(t, \rho) = \left(t - \frac{a(t)\rho}{l\rho_0} f'(t), f(t) + \frac{a(t)\rho}{l\rho_0} \right) \quad (4.6)$$

Y con esto, se obtiene la transformación de coordenadas

$$x(t, \rho) = t - \frac{a(t)\rho}{l\rho_0} f'(t) \quad (4.7)$$

y

$$y(t, \rho) = f(t) + \frac{a(t)\rho}{l\rho_0} \quad (4.8)$$

El ancho del canal w , viene dado por $w = |\mathbf{r}(t, \rho_0) - \mathbf{r}(t, -\rho_0)| = 2a(t)$.

4.1. Construcción del canal asimétrico en 2 dimensiones

Para el caso de un canal simétrico, el vector posición estaba dado por la ec. (4.4), la cual indicaba que las paredes superior e inferior tenían la misma longitud ρ_0 desde el eje central del canal. El término $\frac{\rho}{\rho_0} a(t)$ establecía los límites del canal al decir que $\rho \in [-\rho_0, \rho_0]$. Pero ahora como queremos que

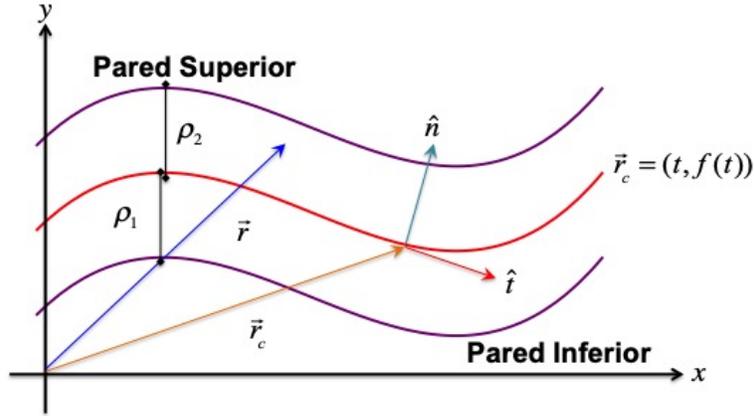


Figura 4.1: Canal bidimensional asimétrico. La pared superior se encuentra a mayor distancia del eje que la pared inferior. Si $\rho_1 = \rho_2 \equiv \rho_0$ se obtiene un canal simétrico.

la longitud de la pared superior e inferior sean diferentes, pediremos que $\rho \in [-\rho_1, \rho_2]$ y la expresión del vector está dada por (ver Figura 4.1)

$$\mathbf{r}(t, \rho) = \mathbf{r}_c(t) + \frac{\rho}{\rho_2} a(t) \hat{\mathbf{n}} \quad (4.9)$$

con $\rho_2 > \rho_1$. Reescribiendo (4.9)

$$\mathbf{r}(t, \rho) = \left(s - \frac{a(t)\rho}{l\rho_2} f'(t), f(t) + \frac{a(t)\rho}{l\rho_2} \right) \quad (4.10)$$

4.2. Dependencia en las coordenadas SNC

Dado que al construir el canal, las coordenadas del sistema cartesiano dependen ahora del *sistema no-Cartesiano*, al que denotaremos por **SNC**, esto es, $x = x(t, \rho)$ y $y = y(t, \rho)$, quisieramos encontrar la relación inversa. Para ello, escribiremos

$$dx = \frac{\partial x}{\partial t} dt + \frac{\partial x}{\partial \rho} d\rho \quad (4.11)$$

y

$$dy = \frac{\partial y}{\partial t} dt + \frac{\partial y}{\partial \rho} d\rho \quad (4.12)$$

y por otro lado

$$dt = \frac{\partial t}{\partial x} dx + \frac{\partial t}{\partial y} dy \quad (4.13)$$

y

$$d\rho = \frac{\partial \rho}{\partial x} dx + \frac{\partial \rho}{\partial y} dy \quad (4.14)$$

Sustituyendo (4.13) y (4.14) en (4.11)

$$dx = \frac{\partial x}{\partial t} \left(\frac{\partial t}{\partial x} dx + \frac{\partial t}{\partial y} dy \right) + \frac{\partial x}{\partial \rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} dx + \frac{\partial \rho}{\partial y} dy \right) \quad (4.15)$$

Reacomodando los términos

$$dx = \left(\frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial x} + \frac{\partial x}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) dx + \left(\frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial y} + \frac{\partial x}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial y} \right) dy \quad (4.16)$$

Igualando término a término, se obtiene un sistema de ecuaciones

$$t_x x_t + x_\rho \rho_x = 1 \quad (4.17)$$

$$x_t t_y + \rho_y x_\rho = 0 \quad (4.18)$$

De manera análoga, sustituyendo (4.13) y (4.14) en (4.12), se obtiene el sistema de ecuaciones

$$t_x y_t + y_\rho \rho_x = 0 \quad (4.19)$$

$$y_t t_y + \rho_y y_\rho = 1 \quad (4.20)$$

Por otro lado, reagrupemos (4.17) con (4.19)

$$t_x x_t + x_\rho \rho_x = 1$$

$$t_x y_t + y_\rho \rho_x = 0 \quad (4.21)$$

y (4.18) con (4.20)

$$x_t t_y + \rho_y x_\rho = 0$$

$$y_t t_y + \rho_y y_\rho = 1 \quad (4.22)$$

Finalmente, usaremos la regla de Cramer para resolver los sistemas de ecuaciones. Sea una matriz \mathbb{A} , la solución al sistema

$$\mathbb{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (4.23)$$

viene dada por

$$x_j = \frac{\det(\mathbb{A}_j)}{\det(\mathbb{A})} \quad (4.24)$$

donde \mathbb{A}_j es la matriz que resulta de remplazar la j -ésima columna de \mathbb{A} por el vector \mathbf{b} .

Resolvamos el primer sistema de ecuaciones. Tomemos el sistema de ecuaciones (4.21) y escribamoslo en notación matricial

$$\begin{pmatrix} x_t & x_\rho \\ y_t & y_\rho \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_x \\ \rho_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

Entonces, en nuestro caso, \mathbb{A} tiene la forma

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} x_t & x_\rho \\ y_t & y_\rho \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

la solución para t_x viene dada por

$$t_x = \frac{\det(\mathbb{A}_{tx})}{\det(\mathbb{A})} \quad (4.27)$$

donde

$$\det(\mathbb{A}_{tx}) = \begin{vmatrix} 1 & x_\rho \\ 0 & y_\rho \end{vmatrix} = y_\rho \quad (4.28)$$

Así, tenemos que

$$t_x = \frac{y_\rho}{\det(\mathbb{A})} \quad (4.29)$$

La solución para ρ_x sería

$$\rho_x = \frac{\det(\mathbb{A}_{\rho x})}{\det(\mathbb{A})} \quad (4.30)$$

donde

$$\det(\mathbb{A}_{\rho x}) = \begin{vmatrix} x_t & 1 \\ y_t & 0 \end{vmatrix} = -y_t \quad (4.31)$$

Así tenemos que

$$\rho_x = \frac{-y_t}{\det(\mathbb{A})} \quad (4.32)$$

De manera análoga obtenemos

$$t_y = \frac{-x_\rho}{\det(\mathbb{A})} \quad (4.33)$$

y

$$\rho_y = \frac{x_t}{\det(\mathbb{A})} \quad (4.34)$$

4.3. Cálculo del determinante de la matriz \mathbb{A} para el canal asimétrico

Para el determinante de la matriz \mathbb{A} , consideraremos la expresión (4.10)

$$\mathbf{r}(t, \rho) = \left(t - \frac{a(t)\rho}{l\rho_2} f'(t), f(t) + \frac{a(t)\rho}{l\rho_2} \right)$$

y derivemosla con respecto a s

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{r}(t, \rho) = \left(1 - \frac{\rho}{\rho_2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{a(t)f'(t)}{l} \right), f'(t) + \frac{\rho}{\rho_2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{a(t)}{l} \right) \right) \quad (4.35)$$

donde

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{a(t)f'(t)}{l} \right) = -\frac{a(t)f'^2(t)f''(t)}{l^3} + \frac{a(t)f''(t)}{l} + \frac{a'(t)f'(t)}{l} \quad (4.36)$$

y

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{a(t)}{l} \right) = -\frac{a(t)f'(t)f''(t)}{l^3} + \frac{a'(t)}{l} \quad (4.37)$$

Sustituyendo (4.36) y (4.37) en (4.35), obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{r}(t, \rho) = & \left(1 - \frac{\rho}{\rho_2} \left(-\frac{a(t)f'^2(t)f''(t)}{l^3} + \frac{a(t)f''(t)}{l} + \frac{a'(t)f'(t)}{l} \right), \right. \\ & \left. f'(t) + \frac{\rho}{\rho_2} \left(-\frac{a(t)f'(s)f''(t)}{l^3} + \frac{a'(t)}{l} \right) \right) \quad (4.38) \end{aligned}$$

Reescribiendo la expresión

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{r}(t, \rho) = & \left(1 + \frac{\rho}{\rho_2} \frac{a(t)f'^2(t)f''(t)}{l^3} - \frac{\rho}{\rho_0} \frac{a(t)f''(t)}{l} - \frac{\rho}{\rho_2} \frac{a'(t)f'(t)}{l}, \right. \\ & \left. f'(t) - \frac{\rho}{\rho_0} \frac{a(t)f'(t)f''(t)}{l^3} - \frac{\rho}{\rho_2} \frac{a'(t)}{l} \right) \quad (4.39) \end{aligned}$$

Esto es

$$\frac{\partial x}{\partial t} = 1 + \frac{\rho}{\rho_2} \frac{a(t)f'^2(t)f''(t)}{l^3} - \frac{\rho}{\rho_2} \frac{a(t)f''(t)}{l} - \frac{\rho}{\rho_2} \frac{a'(t)f'(t)}{l} \quad (4.40)$$

y

$$\frac{\partial y}{\partial t} = f'(t) - \frac{\rho}{\rho_2} \frac{a(t)f'(t)f''(t)}{l^3} - \frac{\rho}{\rho_2} \frac{a'(t)}{l} \quad (4.41)$$

Por otro lado, ahora derivemos (4.10) con respecto a ρ

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \mathbf{r}(t, \rho) = \left(-\frac{a(t)f'(t)}{l\rho_2}, \frac{a(t)}{l\rho_2} \right) \quad (4.42)$$

es decir

$$\frac{\partial x}{\partial \rho} = -\frac{a(t)f'(t)}{l\rho_2} \quad (4.43)$$

y

$$\frac{\partial y}{\partial \rho} = \frac{a(t)}{l\rho_2} \quad (4.44)$$

Así, el $\det \mathbb{A} \equiv \Delta$ viene dado por

$$\Delta = \begin{vmatrix} x_t & x_\rho \\ y_t & y_\rho \end{vmatrix} = x_t y_\rho - y_t x_\rho \quad (4.45)$$

esto es

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial y}{\partial \rho} - \frac{\partial y}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial \rho} \\ &= \left(1 + \frac{\rho}{\rho_2} \frac{a(t)f'^2(t)f''(t)}{l^3} - \frac{\rho}{\rho_2} \frac{a(t)f''(t)}{l} - \frac{\rho}{\rho_2} \frac{a'(t)f'(t)}{l} \right) \left(\frac{a(t)}{l\rho_2} \right) + \\ &\quad - \left(f'(t) - \frac{\rho}{\rho_0} \frac{a(t)f'(t)f''(t)}{l^3} - \frac{\rho}{\rho_2} \frac{a'(t)}{l} \right) \left(-\frac{a(t)f'(t)}{l\rho_2} \right) \\ &= \frac{a(t)}{l\rho_2} + \frac{\rho a^2(t)f'^2(t)f''(t)}{l^4 \rho_2^2} - \frac{\rho a^2(t)f''(t)}{l^2 \rho_2^2} - \frac{\rho a(t)a'(t)f'(t)}{l^2 \rho_2^2} + \\ &\quad + \frac{a(t)f'^2(t)}{l\rho_2} - \frac{\rho a^2(t)f'^2(t)f''(t)}{l^4 \rho_2^2} + \frac{\rho a(t)a'(t)f'(t)}{l\rho_2} \\ &= \frac{a(t)}{l\rho_2} - \frac{\rho a^2(t)f''(t)}{l^2 \rho_2^2} + \frac{a(t)f'^2(t)}{l\rho_2} \\ &= \frac{a(t)}{l\rho_2} \left(1 + f'^2(t) - \frac{\rho a(t)f''(t)}{l\rho_2} \right) \\ &= \frac{a(t)}{l\rho_2} \left(l^2 - \frac{\rho a(t)f''(t)}{l\rho_2} \right) \end{aligned}$$

Así, finalmente

$$\Delta = \frac{la(t)}{\rho_2} \left(1 - \frac{\rho a(t)f''(t)}{l^3 \rho_2} \right) \quad (4.46)$$

El determinante de la transformación es llamada también como el *Jacobiano*. De cierta manera, nos dice de qué manera se deforma una región al aplicarle un mapeo.

4.4. Tensor de difusión en SNC

Propondremos que el tensor de difusión en el marco euclidiano tiene la forma

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} D^x & 0 \\ 0 & D^y \end{pmatrix} \quad (4.47)$$

donde D^x y D^y son los coeficientes de difusión de bulto en las componentes x e y , respectivamente. Usando la expresión para la transformación de un tensor de un marco de referencia a otro, expresión (B.14), obtenemos

$$D^{\mu\nu} = D^{ab} \frac{\partial x^\mu}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial x^\nu}{\partial \tilde{x}^b}$$

donde, recordemos que las variables con tilde, \tilde{x}^b , representan a las variables del sistema euclidiano y las no tildadas, x^ν , representan a las variables de SNC.

Calculemos el tensor en SNC:

$$\begin{aligned} D^{tt} &= D^{ab} \frac{\partial x^t}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial x^t}{\partial \tilde{x}^b} \\ &= D^{ab} \frac{\partial t}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial t}{\partial \tilde{x}^b} = D^{xb} \frac{\partial t}{\partial x} \frac{\partial t}{\partial \tilde{x}^b} + D^{yb} \frac{\partial t}{\partial y} \frac{\partial t}{\partial \tilde{x}^b} \\ &= D^{xx} \frac{\partial t}{\partial x} \frac{\partial t}{\partial x} + D^{xy} \frac{\partial t}{\partial x} \frac{\partial t}{\partial y} + D^{yx} \frac{\partial t}{\partial y} \frac{\partial t}{\partial x} + D^{yy} \frac{\partial t}{\partial y} \frac{\partial t}{\partial y} \\ &= D^{xx} \left(\frac{\partial t}{\partial x} \right)^2 + D^{yy} \left(\frac{\partial t}{\partial y} \right)^2 \\ &= D^x (t_x)^2 + D^y (t_y)^2 \end{aligned} \quad (4.48)$$

Considerando las expresiones (4.29) y (4.33) tenemos

$$D^{tt} = D^x \left(\frac{y_\rho}{\Delta} \right)^2 + D^y \left(-\frac{x_\rho}{\Delta} \right)^2 \quad (4.49)$$

Finalmente

$$D^{tt} = \frac{1}{\Delta^2} (D^x y_\rho^2 + D^y x_\rho^2) \quad (4.50)$$

De manera análoga

$$\begin{aligned}
D^{t\rho} &= D^{ab} \frac{\partial x^t}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial x^\rho}{\partial \tilde{x}^b} \\
&= D^{xb} \frac{\partial t}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial \rho}{\partial \tilde{x}^b} = D^{xb} \frac{\partial t}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial \tilde{x}^b} + D^{yb} \frac{\partial t}{\partial y} \frac{\partial \rho}{\partial \tilde{x}^b} \\
&= D^{xy} \frac{\partial t}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial x} + D^{xy} \frac{\partial t}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial y} + \frac{\partial t}{\partial y} \frac{\partial \rho}{\partial x} + D^{yy} \frac{\partial t}{\partial y} \frac{\partial \rho}{\partial y} \\
&= D^{xx} \frac{\partial t}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial x} + D^{yy} \frac{\partial t}{\partial y} \frac{\partial \rho}{\partial y} \\
&= D^x t_x \rho_x + D^y t_y \rho_y
\end{aligned} \tag{4.51}$$

usando (4.29), (4.33), (4.32) y (4.34), se obtiene

$$D^{t\rho} = -\frac{1}{\Delta^2} (D^x y_\rho y_t + D^y x_\rho x_t) \tag{4.52}$$

Del mismo modo

$$\begin{aligned}
D^{\rho\rho} &= D^{ab} \frac{\partial x^\rho}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial x^\rho}{\partial \tilde{x}^b} \\
&= D^{xb} \frac{\partial \rho}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial \rho}{\partial \tilde{x}^b} = D^{xb} \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial \tilde{x}^b} + D^{yb} \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial \rho}{\partial \tilde{x}^b} \\
&= D^{xy} \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial x} + D^{xy} \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial y} + D^{yx} \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial \rho}{\partial x} + D^{yy} \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial \rho}{\partial y} \\
&= D^{xx} \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial \rho}{\partial x} + D^{yy} \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial \rho}{\partial y} \\
&= D^x \rho_x^2 + D^y \rho_y^2
\end{aligned}$$

que usando (4.32) y (4.34)

$$D^{\rho\rho} = \frac{1}{\Delta^2} (D^x y_t^2 + D^y x_t^2) \tag{4.53}$$

En las expresiones (4.50), (4.52) y (4.53) vemos que los coeficientes de D^x y D^y tienen dependencia entre ambos marcos de coordenadas. Además, están multiplicadas por un término Δ^{-2} , el cual nos dice cómo se deforma el canal al cambiar de marco de referencia. $D^{\rho\rho}$ y D^{tt} son las componentes de la traza del tensor y $D^{t\rho}$ el elemento fuera de la diagonal.

4.5. Coeficiente de difusión efectivo para canales asimétricos bidimensionales en SNC

Tomemos la ecuación de difusión en una variedad, ec.(3.11)

$$\dot{C} = \partial_\mu [D^{\mu\nu} \partial_\nu C] + \Gamma_{\mu\nu}^\mu D^{\nu\sigma} \partial_\sigma C \quad (4.54)$$

donde las condiciones de frontera piden que las paredes del canal sean reflejantes, esto es, que la componente del flujo que es perpendicular al canal, sea cero. En SNC, la componente del flujo que es perpendicular al canal es J^ρ , por lo que en el punto donde se encuentra el canal, $\rho = \rho_1, \rho_2$, se anulará el flujo

$$J^\rho|_{\rho=\rho_1, \rho_2} = 0 \quad (4.55)$$

que, usando (3.8), se convierte en

$$(D^{\rho\nu} \partial_\nu C)|_{\rho=\rho_1, \rho_2} = 0 \quad (4.56)$$

Por otro lado, del Apéndice E.5, ec. (E.13), tenemos la relación

$$\Gamma_{\sigma\mu}^\sigma = \frac{1}{\Delta} \partial_\mu \Delta$$

Con esto, (4.54) queda

$$\dot{C} = \partial_\mu [D^{\mu\nu} \partial_\nu C] + \frac{1}{\Delta} (\partial_\mu \Delta) D^{\mu\sigma} \partial_\sigma C \quad (4.57)$$

multiplicando por Δ

$$\Delta \dot{C} = \Delta \partial_\mu [D^{\mu\nu} \partial_\nu C] + (\partial_\mu \Delta) D^{\mu\sigma} \partial_\sigma C \quad (4.58)$$

Esto es

$$\Delta \dot{C} = \partial_\mu [\Delta D^{\mu\nu} \partial_\nu C] \quad (4.59)$$

Desarrollando

$$\Delta \dot{C} = \partial_t \Delta D^{t\nu} \partial_\nu C + \partial_\rho \Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C \quad (4.60)$$

Integrando en $\rho \in [-\rho_1, \rho_2]$

$$\int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho \Delta \dot{C} = \partial_t \int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho \Delta D^{t\nu} \partial_\nu C + \int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho \partial_\rho \Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C \quad (4.61)$$

Concentremos en el segundo término del lado derecho de la ecuación (4.61)

$$\begin{aligned} \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \partial_\rho \Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C d\rho &= \partial_\rho \Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C \Big|_{\rho=-\rho_1}^{\rho=\rho_2} \\ &= \partial_\rho \Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C \Big|_{\rho=\rho_2} - \partial_\rho \Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C \Big|_{\rho=-\rho_1} \end{aligned} \quad (4.62)$$

Pediremos que en las paredes del canal, el flujo sea nulo

$$J^\rho \Big|_{\rho=-\rho_1, \rho_2} = 0 \quad (4.63)$$

que, recurriendo a (3.8)

$$J^\mu = -D^{\mu\nu} \partial_\nu C$$

se llega a

$$D^{\mu\nu} \partial_\nu C \Big|_{\rho=-\rho_1, \rho_2} = 0 \quad (4.64)$$

por lo que, la expresión (4.62)

$$\int_{-\rho_1}^{\rho_2} \partial_\rho \Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C d\rho = 0 \quad (4.65)$$

y así (4.61) queda

$$\int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho \Delta \dot{C} = \partial_t \int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho \Delta D^{s\nu} \partial_\nu C \quad (4.66)$$

reescribiendo esta expresión

$$\frac{\partial}{\partial \mathcal{T}} \int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho \Delta C = \partial_t \int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho \Delta D^{t\nu} \partial_\nu C \quad (4.67)$$

donde \mathcal{T} es el tiempo. Ahora definamos

$$\mathcal{P} \equiv \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \Delta C d\rho \quad (4.68)$$

Así, (4.67) queda

$$\frac{\partial}{\partial \mathcal{T}} \mathcal{P} = \partial_t \int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho \Delta D^{t\nu} \partial_\nu C \quad (4.69)$$

Desarrollemos la expresión (4.69)

$$\frac{\partial}{\partial \mathcal{T}} \mathcal{P} = \partial_t \int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho (\Delta D^{tt} \partial_t C + \Delta D^{t\rho} \partial_\rho C) \quad (4.70)$$

Ahora supongamos que se tiene la misma estructura en cualquier marco de referencia de la ecuación de Fick-Jacobs

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \mathcal{T}} = \frac{\partial}{\partial t} D(t) w(t) \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\mathcal{P}}{w(t)} \right) \quad (4.71)$$

con

$$w(t) = \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \Delta d\rho \quad (4.72)$$

Igualando (4.70) y (4.71) y despejemos para $D(t)$

$$D(t) = \frac{\int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho (\Delta D^{tt} \partial_t C + \Delta D^{t\rho} \partial_\rho C)}{w(t) \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\mathcal{P}}{w(t)} \right)} \quad (4.73)$$

Para dejar todo en términos de la variable que va a lo largo del canal, es decir, t , usamos (3.8) para el caso de ρ

$$\begin{aligned} J^\rho &= D^{\rho\nu} \partial_\nu C \\ &= D^{\rho t} \partial_t C + D^{\rho\rho} \partial_\rho C \end{aligned}$$

Así

$$\partial_\rho C = \frac{1}{D^{\rho\rho}} J^\rho - \frac{D^{\rho s}}{D^{\rho\rho}} \partial_t C \quad (4.74)$$

Sustituyendo (4.74) en (4.73)

$$D(t) = \frac{\int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho \left(\Delta D^{tt} \partial_t C + \Delta D^{t\rho} \left(\frac{1}{D^{\rho\rho}} J^\rho - \frac{D^{\rho t}}{D^{\rho\rho}} \partial_t C \right) \right)}{w(t) \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\mathcal{P}}{w(t)} \right)} \quad (4.75)$$

Si pedimos que los flujos en la línea transversal al canal, sean nulos, esto es, $J^\rho = 0$, llegamos a

$$D(t) = \frac{\int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho \left(\Delta D^{tt} \partial_t C - \Delta D^{t\rho} \frac{D^{\rho t}}{D^{\rho\rho}} \partial_t C \right)}{w(t) \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\mathcal{P}}{w(t)} \right)} \quad (4.76)$$

esto es

$$D(t) = \frac{\int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho \Delta \left(\frac{D^{tt} D^{\rho\rho} - D^{t\rho} D^{\rho t}}{D^{\rho\rho}} \right) \partial_t C}{w(t) \partial_t \left(\frac{\mathcal{P}}{w(t)} \right)} \quad (4.77)$$

Calculando $w(t)$

$$\begin{aligned} w(t) &= \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \Delta d\rho \\ &= \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \frac{la(t)}{\rho_0} \left(1 - \frac{\rho a(t) f''(t)}{l^3 \rho_0} \right) d\rho \\ &= \frac{la(t)}{\rho_2} \left(\int_{-\rho_1}^{\rho_2} d\rho - \frac{a f''}{\rho_0 l^3} \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \rho d\rho \right) \\ &= \frac{la(t)}{\rho_2} \left(\rho_1 + \rho_2 - \frac{a f''}{2\rho_2 l^3} (\rho_2^2 - \rho_1^2) \right) \end{aligned}$$

esto es

$$w(t) = \frac{la}{\rho_2} (\rho_1 + \rho_2) - \frac{a^2 f''}{2\rho_2 l^2} (\rho_2^2 - \rho_1^2) \quad (4.78)$$

Suponiendo que la concentración es casi uniforme en la dirección de ρ , es decir, $C(t, \rho) \approx C^{(0)}(t)$

$$\mathcal{P} = \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \Delta C(t, \rho) d\rho \approx C^{(0)}(t) \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \Delta d\rho = C^{(0)}(t) w(t) \quad (4.79)$$

esto es

$$\mathcal{P} = C^{(0)}(t) \left(\frac{la}{\rho_2} (\rho_1 + \rho_2) - \frac{a^2 f''}{2\rho_2 l^2} (\rho_2^2 - \rho_1^2) \right) \quad (4.80)$$

Ahora concentremonos en el término

$$\Delta \frac{D^{tt} D^{\rho\rho} - D^{t\rho} D^{\rho t}}{D^{\rho\rho}}$$

de la expresión (4.77). Sustituiremos las ecuaciones (4.50), (4.52) y (4.53)

en esta expresión

$$\begin{aligned}
D^{tt}D^{\rho\rho} - D^{t\rho}D^{\rho t} &= \frac{1}{\Delta^4} (D^x y_\rho^2 + D^y x_\rho^2) (D^x y_t^2 + D^y x_t^2) - \frac{1}{\Delta^4} (D^x y_t y_\rho + D^y x_t x_\rho)^2 \\
&= \frac{1}{\Delta^4} [(D^x)^2 y_\rho^2 y_t^2 + D^x D^y y_\rho^2 x_t^2 + D^y D^x x_\rho^2 y_t^2 + (D^y)^2 x_\rho^2 x_t^2 + \\
&\quad - ((D^x)^2 y_\rho^2 y_t^2 + (D^y)^2 x_\rho^2 y_t^2 + D^x D^y 2x_t y_s x_\rho y_\rho)] \\
&= \frac{1}{\Delta^4} [D^x D^y y_\rho^2 x_t^2 + D^y D^x x_\rho^2 y_t^2 + D^x D^y 2x_t y_t x_\rho y_\rho] \\
&= \frac{D^x D^y}{\Delta^4} [y_\rho^2 x_t^2 + x_\rho^2 y_t^2 + 2x_t y_t x_\rho y_\rho] \\
&= \frac{D^x D^y}{\Delta^4} [y_\rho x_t - x_\rho y_t]^2
\end{aligned}$$

Considerando el determinante de la expresión (4.26) llegamos a¹

$$D^{tt}D^{\rho\rho} - D^{t\rho}D^{\rho t} = \frac{D^x D^y}{\Delta^4} \left[\det \begin{pmatrix} x_t & x_\rho \\ y_t & y_\rho \end{pmatrix} \right]^2 = \frac{D^x D^y}{\Delta^4} \Delta^2 = \frac{D^x D^y}{\Delta^2}$$

Por ello finalmente podemos escribir

$$\Delta \frac{D^{tt}D^{\rho\rho} - D^{t\rho}D^{\rho t}}{D^{\rho\rho}} = \frac{D^x D^y}{\Delta D^{\rho\rho}} \quad (4.81)$$

Con esto, la integral en el numerador de la expresión (4.77)

$$\begin{aligned}
I &= \int_{-\rho_0}^{\rho_0} d\rho \Delta \left(\frac{D^{tt}D^{\rho\rho} - D^{t\rho}D^{\rho t}}{D^{\rho\rho}} \right) \partial_t C = \int_{-\rho_0}^{\rho_0} d\rho \frac{D^x D^y}{\Delta D^{\rho\rho}} \partial_t C \\
&= \partial_t C^{(0)} \int_{-\rho_0}^{\rho_0} \frac{D^x D^y}{\Delta D^{\rho\rho}} d\rho \quad (4.82)
\end{aligned}$$

y usando nuevamente (4.53)

$$I = D^x D^y \partial_t C^{(0)} \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \frac{\Delta}{(y_t^2 D^x + x_t^2 D^y)} d\rho \quad (4.83)$$

Usando (4.40), (4.41) y (4.46), el argumento dentro de la integral en (4.83) queda

$$\frac{al}{\rho^2} \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \frac{\left[1 - \frac{\rho a f''}{\rho^2 l} \right]}{\left\{ D^x \left[f' + \frac{\rho}{\rho_2} \left(\frac{a'}{l} - \frac{a f' f''}{l^3} \right) \right]^2 + D^y \left[1 - \frac{\rho}{\rho_2} \left(\frac{a' f'}{l} + \frac{a f''}{l} - \frac{a f'^2 f''}{l^3} \right) \right]^2 \right\}} d\rho \quad (4.84)$$

¹Resulta que el procedimiento realizado en la Sección 4.2, es el mismo tanto para canales simétricos como para canales asimétricos.

Tomemos el denominador y reescribamoslo

$$\begin{aligned}
& D^x \left[f' + \frac{\rho}{\rho_2} \left(\frac{a'}{l} - \frac{af'f''}{l^3} \right) \right]^2 + D^y \left[1 - \frac{\rho}{\rho_2} \left(\frac{a'f'}{l} + \frac{af''}{l} - \frac{af'^2f''}{l^3} \right) \right]^2 \\
&= D^x \left[f'^2 + 2f' \frac{\rho}{\rho_2} \left(\frac{a'}{l} - \frac{af'f''}{l^3} \right) + \frac{\rho^2}{\rho_2^2} \left(\frac{a'}{l} - \frac{af'f''}{l^3} \right)^2 \right] + \\
&+ D^y \left[1 - 2 \frac{\rho}{\rho_2} \left(\frac{a'f'}{l} + \frac{af''}{l} - \frac{af'^2f''}{l^3} \right) + \frac{\rho^2}{\rho_2^2} \left(\frac{a'f'}{l} + \frac{af''}{l} - \frac{af'^2f''}{l^3} \right)^2 \right] \\
&= (D^x f'^2 + D^y) + \\
&+ 2 \frac{\rho}{\rho_2} \left(D^x \frac{a'f'}{l} - D^x \frac{af'^2f''}{l^3} - D^y \frac{a'f'}{l} - D^y \frac{af''}{l} + D^y \frac{af'^2f''}{l^3} \right) + \\
&+ \frac{\rho^2}{\rho_2^2} \left[D^x \left(\frac{a'}{l} - \frac{af'f''}{l^3} \right)^2 + D^y \left(\frac{a'f'}{l} + \frac{af''}{l} - \frac{af'^2f''}{l^3} \right)^2 \right]
\end{aligned}$$

Definamos entonces

$$\alpha \equiv (D^x f'^2 + D^y) \quad (4.85)$$

$$\beta \equiv \left(D^x \frac{a'f'}{l} - D^x \frac{af'^2f''}{l^3} - D^y \frac{a'f'}{l} - D^y \frac{af''}{l} + D^y \frac{af'^2f''}{l^3} \right) \quad (4.86)$$

$$\gamma \equiv \left[D^x \left(\frac{a'}{l} - \frac{af'f''}{l^3} \right)^2 + D^y \left(\frac{a'f'}{l} + \frac{af''}{l} - \frac{af'^2f''}{l^3} \right)^2 \right] \quad (4.87)$$

$$\delta \equiv \frac{af''}{l} \quad (4.88)$$

Y así con esto, I queda, ec. (4.83)

$$I = D^x D^y \frac{al}{\rho_0} \partial_t C^{(0)} \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \frac{\left[1 - \frac{\rho}{\rho_2} \delta \right]}{\left[\alpha + 2\beta \frac{\rho}{\rho_2} + \gamma \frac{\rho^2}{\rho_2^2} \right]} d\rho \quad (4.89)$$

Así, resolviendo esta integral

$$I_1 = \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \frac{\left[1 - \frac{\rho}{\rho_2} \delta \right]}{\left[\alpha + 2\beta \frac{\rho}{\rho_2} + \gamma \frac{\rho^2}{\rho_2^2} \right]} d\rho \quad (4.90)$$

considerando tablas de integrales[49]

$$\begin{aligned}
\int \frac{Mx + N}{A + 2Bx + Cx^2} &= \frac{M}{2C} \ln |A + 2Bx + Cx^2| + \\
&+ \frac{NC - MB}{C\sqrt{AC - B^2}} \arctan \frac{Cx + B}{\sqrt{AC - B^2}} \quad (4.91)
\end{aligned}$$

si² $AC > B^2$. Así llegamos a la expresión

$$\begin{aligned}
 \int_{-\rho_1}^{\rho_2} \frac{\left[1 - \frac{\rho}{\rho_2} \delta\right]}{\left[\alpha + 2\beta \frac{\rho}{\rho_2} + \gamma \frac{\rho^2}{\rho_2^2}\right]} d\rho &= \rho_2 \int_{-\frac{\rho_1}{\rho_2}}^1 \frac{[1 - r\delta]}{[\alpha + 2\beta r + \gamma r^2]} dr \\
 &= -\frac{\rho_0 \delta}{2\gamma} \ln |\alpha + 2\beta r + \gamma r^2| \Big|_{r=-\frac{\rho_1}{\rho_2}}^{r=1} + \\
 &+ \rho_0 \frac{\gamma + \beta \delta}{\gamma \sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \arctan \frac{\gamma r + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \Big|_{r=-\frac{\rho_1}{\rho_2}}^{r=1}
 \end{aligned}$$

Así

$$\begin{aligned}
 I_1 &= -\frac{\rho_2 \delta}{2\gamma} \ln \left| \frac{\alpha + 2\beta + \gamma}{\alpha - 2\beta \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right) + \gamma \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^2} \right| + \\
 &+ \rho_2 \frac{\gamma + \beta \delta}{\gamma \sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \left(\arctan \frac{\gamma + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} - \arctan \frac{-\gamma \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right) + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \right)
 \end{aligned} \tag{4.92}$$

Con esto, (4.89) queda

$$\begin{aligned}
 I &= D^x D^y a l \partial_t C^{(0)} \left[-\frac{\delta}{2\gamma} \ln \left| \frac{\alpha + 2\beta + \gamma}{\alpha - 2\beta \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right) + \gamma \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^2} \right| + \right. \\
 &\left. + \frac{\gamma + \beta \delta}{\gamma \sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \left(\arctan \frac{\gamma + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} - \arctan \frac{-\gamma \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right) + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \right) \right]
 \end{aligned}$$

²página 67, expresión 5 de la referencia[49].

Por lo anterior, al retomar³ (4.77)

$$D^{(0)}(t) = \frac{1}{w(t)\partial_t C^{(0)}} D^x D^y a l \partial_t C^{(0)} \left[-\frac{\delta}{2\gamma} \ln \left| \frac{\alpha + 2\beta + \gamma}{\alpha - 2\beta \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right) + \gamma \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^2} \right| + \frac{\gamma + \beta\delta}{\gamma\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \left(\arctan \frac{\gamma + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} - \arctan \frac{-\gamma \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right) + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \right) \right]$$

Finalmente

$$D^{(0)}(t) = \frac{a l D^x D^y}{\left(\frac{la}{\rho_2}(\rho_1 + \rho_2) - \frac{a^2 f''}{2\rho_2 l^2}(\rho_2^2 - \rho_1^2)\right)} \left[-\frac{\delta}{2\gamma} \ln \left| \frac{\alpha + 2\beta + \gamma}{\alpha - 2\beta \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right) + \gamma \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^2} \right| + \frac{\gamma + \beta\delta}{\gamma\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \left(\arctan \frac{\gamma + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} - \arctan \frac{-\gamma \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right) + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \right) \right] \quad (4.94)$$

De las expresiones (4.85), (4.88), (4.87) y (4.88), vemos que la ecuación (4.94) es dependiente de la variación del eje del canal, f' , de la concavidad de este, f'' , así como del ancho del canal, a , y cómo varía este, a' .

Para un canal simétrico, es decir, $\rho_1 = \rho_2 \equiv \rho_0$ obtenemos

$$D^{(0)}(t) = \frac{D^x D^y}{2} \left[-\frac{\delta}{2\gamma} \ln \left| \frac{\alpha + 2\beta + \gamma}{\alpha - 2\beta + \gamma} \right| + \frac{\gamma + \beta\delta}{\gamma\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \left(\arctan \frac{\gamma + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} - \arctan \frac{-\gamma + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \right) \right] \quad (4.95)$$

La expresión (4.94) es el resultado más importante de este capítulo. Es la expresión más general para un coeficiente de difusión en un canal bidimensional.

$$\partial_t \frac{\mathcal{P}}{w(t)} = \partial_t \frac{C^{(0)}(t)w(t)}{w(t)} = \partial_t C^{(0)}(t) \quad (4.93)$$

4.6. Canal recto asimétrico

Como un caso particular se considerará un canal cuyo eje central sea recto. Una vez obtenida la expresión para dicho canal, se espera que el resultado sea la expresión presente en la literatura[50], la ecuación Dagdug-Pineda ⁴. Para este caso, $f'(t) = 0$ por lo que

$$\alpha = D^y \quad (4.97)$$

$$\beta = 0 \quad (4.98)$$

$$\gamma = \frac{a'^2}{l^2} D^x \quad (4.99)$$

$$\delta = 0 \quad (4.100)$$

$$l = 1 \quad (4.101)$$

Por esto, la ec. (4.94) queda

$$\begin{aligned} D^{(0)}(t) &= \frac{a l D^x D^y}{\left(\frac{a l}{\rho_2}(\rho_1 + \rho_2)\right)} \left[\frac{\gamma}{\gamma \sqrt{\alpha \gamma}} \left(\arctan \frac{\gamma}{\sqrt{\alpha \gamma}} - \arctan \frac{-\gamma \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)}{\sqrt{\alpha \gamma}} \right) \right] \\ &= \frac{D^x D^y}{\left(\frac{(\rho_1 + \rho_2)}{\rho_2}\right)} \left[\frac{1}{\sqrt{a'^2 D^x D^y}} \left(\arctan \left(a' \sqrt{\frac{D^x}{D^y}} \right) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \arctan \left(-a' \left(\frac{\rho_1}{\rho_2} \right) \sqrt{\frac{D^x}{D^y}} \right) \right) \right] \end{aligned}$$

esto se puede reescribir como

$$D^{(0)}(t) = \sqrt{D^x D^y} \frac{\arctan \left(a' \sqrt{\frac{D^x}{D^y}} \right) - \arctan \left(-a' \left(\frac{\rho_1}{\rho_2} \right) \sqrt{\frac{D^x}{D^y}} \right)}{\frac{a'(\rho_1 + \rho_2)}{\rho_2}} \quad (4.102)$$

⁴

$$\frac{D(x)}{D_0} = \frac{\arctan f_2' - \arctan f_1'}{w'} \quad (4.96)$$

donde f_2 y f_1 son las funciones que describen las paredes superiores e inferiores, respectivamente.

Nótese que el denominador de la expresión (4.102) es justamente $w'(t)$.

Además si consideremos que el medio es isótropo, $D^x = D^y \equiv D_0$

$$D^{(0)}(t) = D_0 \frac{\arctan(a') - \arctan\left(-a' \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)\right)}{w'} \quad (4.103)$$

Finalmente, por como se construyó el canal, $a(t)$ es la longitud de la pared superior desde el centro del eje del canal, para hacer clara la analogía le llamaremos $a_2 = a$. Por otro lado, el término $a' \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)$ es la longitud de la pared inferior del canal desde el eje central del canal. Llamemosle $a_1 = a' \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)$.

$$D^{(0)}(t) = D_0 \frac{\arctan(a'_2) - \arctan(a'_1)}{w'} \quad (4.104)$$

Con esta terminología queremos mostrar explícitamente que hemos llegado a la expresión de **Dagdug-Pineda**, expresión (4.96), que es la generalización del caso simétrico obtenido por Kalinay y Percus[51].

Para un canal simétrico y con $D^x = D^y \equiv D_0$, la ec. (4.95) queda

$$D^{(0)}(t) = \frac{D_0}{2a'(t)} (\arctan(a') - \arctan(-a')) \quad (4.105)$$

4.7. Canal asimétrico inclinado

En esta sección, encontraremos el coeficiente de difusión efectivo dependiente de la posición $D^{(0)}(t)$ para un canal inclinado. Para ello, consideraremos que la función que parametriza el eje central del canal, tenga la primera derivada constante, esto es⁵, $f'(t) = y'_0$, con y'_0 una constante. Por lo anterior se tiene que

$$\alpha = D^x y_0^2 + D^y \quad (4.106)$$

$$\beta = \frac{a' y_0}{l} (D^x - D^y) \quad (4.107)$$

$$\gamma = \frac{a'^2}{l^2} (D^x + y_0'^2 D^y) \quad (4.108)$$

⁵definimos la línea media como $f(t)$, esto es $f(t) = y_0$

$$\delta = 0 \quad (4.109)$$

$$l = \sqrt{1 + y_0'^2} \quad (4.110)$$

con esto (4.94) queda

$$\begin{aligned} D^{(0)}(t) &= \frac{alD^x D^y}{\rho_2(\rho_1 + \rho_2)} \left[\frac{\gamma}{\gamma\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \times \right. \\ &\times \left. \left(\arctan \frac{\gamma + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} - \arctan \frac{-\gamma \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right) + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \right) \right] \\ &= \frac{D^x D^y}{\frac{(\rho_1 + \rho_2)}{\rho_2}} \left[\frac{1}{\sqrt{(D^x y_0'^2 + D^y) \left(\frac{a'}{l}(D^x + y_0' D^y)\right) - \left(\frac{a'k}{l}(D^x - D^y)\right)^2}} \times \right. \\ &\times \left(\arctan \frac{\frac{a'}{l}(D^x + y_0' D^y) + \frac{a'k}{l}(D^x - D^y)}{\sqrt{(D^x y_0'^2 + D^y) \left(\frac{a'}{l}(D^x + y_0' D^y)\right) - \left(\frac{a'y_0'}{l}(D^x - D^y)\right)^2}} + \right. \\ &\left. \left. - \arctan \frac{\left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right) \frac{a'}{l}(D^x + kD^y) + \frac{a'k}{l}(D^x - D^y)}{\sqrt{(D^x y_0'^2 + D^y) \left(\frac{a'}{l}(D^x + y_0' D^y)\right) - \left(\frac{a'y_0'}{l}(D^x - D^y)\right)^2}} \right) \right] \end{aligned}$$

Simplificando términos considerando que $D^x = D^y \equiv D_0$, obtenemos

$$\frac{D^{(0)}(t)}{D_0} = \frac{D_0}{w' \sqrt{1 + y_0'^2}} \left[\arctan \left(\frac{\rho_2}{\rho_1 + \rho_2} \frac{w'}{\sqrt{1 + y_0'^2}} \right) - \arctan \left(-\frac{\rho_1}{\rho_1 + \rho_2} \frac{w'}{\sqrt{1 + y_0'^2}} \right) \right] \quad (4.111)$$

donde w es el ancho del canal⁶.

Para un canal simétrico, de la expresión (4.95) se obtiene

$$D^{(0)}(t) = \frac{D_0}{2a' \sqrt{1 + y_0'^2}} \left[\arctan \left(\frac{a'(t)}{\sqrt{1 + y_0'^2}} \right) - \arctan \left(-\frac{a'(t)}{\sqrt{1 + y_0'^2}} \right) \right] \quad (4.112)$$

⁶Se define el ancho del canal como:

$$w \equiv \frac{\rho_1}{\rho_2} a + a = \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_2} a$$

que es simplemente la suma de la parte superior del canal con respecto a la línea media con la parte inferior del canal con respecto a la línea media.

Hemos generado una técnica matemática que contribuye a la simplificación de la solución de la difusión en canales bidimensionales. La expresión (4.94) es la ecuación más general obtenida por este método y hemos mostrado que en casos particulares, reproduce lo publicado en la literatura.

Capítulo 5

Canales 3 dimensionales

5.1. Vectores tangente, normal y binormal

Análogamente al caso bidimensional, construiremos un canal tridimensional alrededor de un eje que estará dado por una curva parametrizada. Tomaremos tres vectores ortonormales que funjan como los ejes de un nuevo sistema de referencia que se irá moviendo junto con la curva parametrizada. Pondremos nuestro nuevo sistema de referencia sobre este marco, SNC¹, y trabajaremos con la ecuación de difusión, ec. (3.11), en este marco[52].

Sea $\mathbf{r} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$, La curva parametrizada por t que representará el eje de nuestro canal, el cual tiene la expresión (ver Fig. 5.1)

$$\mathbf{r}(t) = x(t)\hat{i} + y(t)\hat{j} + z(t)\hat{k} \quad (5.1)$$

con x , y y z curvas suaves, continuas y diferenciables.

Por otro lado, el vector \mathbf{t} , tangente a la curva formada por el vector $\mathbf{r}(t)$, viene dado por

$$\mathbf{t}(t) = \dot{\mathbf{r}}(t) \quad (5.2)$$

donde el punto denota derivada total con respecto al parámetro t , $\dot{A} = \frac{dA}{dt}$.

¹Sistema no-Cartesiano

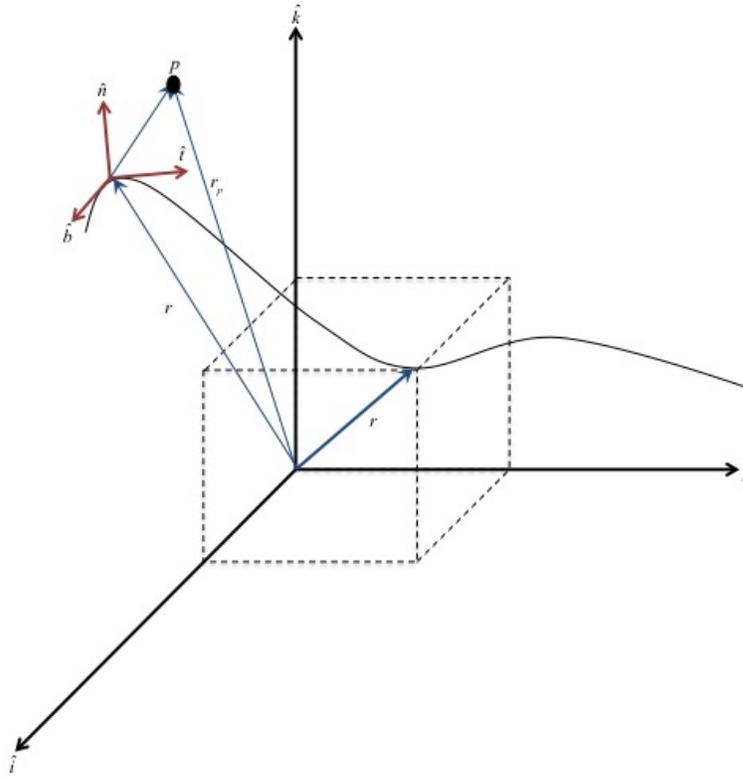


Figura 5.1:

Con esto podemos construir un vector unitario tangente a la curva

$$\hat{\mathbf{t}}(t) = \frac{\mathbf{t}}{\sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2}} = \frac{\mathbf{t}}{|\dot{\mathbf{r}}(t)|} \quad (5.3)$$

Dicha expresión para el vector tangente $\hat{\mathbf{t}}$ es útil cuando queremos que nuestra curva dependa explícitamente de la parametrización. Por otro lado, si se busca que la curva no dependa de una parametrización en particular, conviene escoger como parámetro la **longitud de arco** s (Ver apéndice C). Supongamos que se tiene $s = s(t)$, por lo que, de acuerdo a (C.2)

$$\frac{ds}{dt} = |\dot{\mathbf{r}}(t)|$$

podemos escribir

$$\hat{\mathbf{t}} = \hat{\mathbf{t}}(t) = \frac{\mathbf{t}(t)}{|\dot{\mathbf{r}}(t)|} = \frac{\dot{\mathbf{r}}(t)}{|\dot{\mathbf{r}}(t)|} = \frac{\frac{d\mathbf{r}}{dt}}{\frac{ds}{dt}} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \frac{dt}{ds} = \frac{d\mathbf{r}}{ds} = \mathbf{r}'(s) \quad (5.4)$$

donde se adopta la nomenclatura $A' = \frac{dA}{ds}$.

Queremos definir los vectores que construiremos en términos de una coordenada generalizada que llamaremos χ . Esto para poder escribir una expresión generalizada.

$$\hat{\mathbf{t}} = \hat{\mathbf{t}}(\chi) = \frac{d\mathbf{r}}{d\chi} \frac{d\chi}{ds} = \mathbf{r}'(\chi) \frac{d\chi}{ds} \quad (5.5)$$

donde $A' \equiv \frac{dA}{d\chi}$.

Para describir el vector normal a la curva $\hat{\mathbf{n}}$ pensaremos en

$$\mathbf{n}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{\hat{\mathbf{t}}(t + \Delta t) - \hat{\mathbf{t}}(t)}{\Delta t} = \dot{\hat{\mathbf{t}}} \quad (5.6)$$

con esto podemos construir un vector normal unitario

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\dot{\hat{\mathbf{t}}}}{|\dot{\hat{\mathbf{t}}}|} = \frac{\frac{d\hat{\mathbf{t}}}{dt}}{\left|\frac{d\hat{\mathbf{t}}}{dt}\right|} = \frac{\frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds} \frac{ds}{dt}}{\left|\frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds} \frac{ds}{dt}\right|} = \frac{\frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds}}{\left|\frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds}\right|} = \frac{\hat{\mathbf{t}}'}{|\hat{\mathbf{t}}'|} \quad (5.7)$$

pues, por (C.2), $\frac{ds}{dt} = \left|\frac{ds}{dt}\right|$. En coordenada generalizada

$$\hat{\mathbf{n}}(\chi) = \frac{\hat{\mathbf{t}}'(\chi)}{|\hat{\mathbf{t}}'(\chi)|} \quad (5.8)$$

Con esto, $\hat{\mathbf{n}}$ es el vector normal en términos del parámetro generalizado, χ .²

² para mostrar la perpendicularidad entre los vectores $\hat{\mathbf{t}}$ y $\hat{\mathbf{n}}$, se hace

$$\hat{\mathbf{t}} \cdot \hat{\mathbf{t}} = 1 \quad (5.9)$$

derivemos la ecuación

$$\frac{d}{d\chi} (\hat{\mathbf{t}} \cdot \hat{\mathbf{t}}) = 0 \quad (5.10)$$

esto es

$$\frac{d\hat{\mathbf{t}}}{d\chi} \cdot \hat{\mathbf{t}} + \hat{\mathbf{t}} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{t}}}{d\chi} = 0 \quad (5.11)$$

por ello

$$2\hat{\mathbf{t}} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{t}}}{d\chi} = 0 \quad (5.12)$$

es decir

$$\hat{\mathbf{t}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0 \quad (5.13)$$

Por último, buscaremos un vector \mathbf{b} que sea perpendicular a $\hat{\mathbf{t}}$ y $\hat{\mathbf{n}}$. Como $\hat{\mathbf{t}}$ y $\hat{\mathbf{n}}$ pueden estar en términos de χ , $\hat{\mathbf{b}}$ heredará la dependencia correspondiente, $\hat{\mathbf{b}} = \hat{\mathbf{b}}(\chi)$

$$\hat{\mathbf{b}} = \hat{\mathbf{t}} \times \hat{\mathbf{n}} \quad (5.14)$$

Con esto, tenemos tres vectores que juntos forman un sistema coordenado ortonormal que se va moviendo con el eje del canal, uno considera un parámetro t que construye la curva a partir del marco Cartesiano; por otro lado, tenemos un parámetro s que sólo considera la longitud que se avanza sobre la curva.

Ahora, supongamos que tenemos un punto p en \mathbb{R}^3 cuyas coordenadas en el sistema de referencia estático son

$$\mathbf{r}_p = \tilde{x}\hat{i} + \tilde{y}\hat{j} + \tilde{z}\hat{k} \quad (5.15)$$

Consideremos lo siguiente, los vectores $\hat{\mathbf{n}}$ y $\hat{\mathbf{b}}$ forman un conjunto de planos que son perpendiculares al eje del canal. De este conjunto de planos, tomemos el plano que contenga al punto p . En dicho plano las coordenadas del punto p en el sistema coordenada que está sobre el eje del canal son

$$\mathbf{R}_p = A\hat{\mathbf{n}} + B\hat{\mathbf{b}} \quad (5.16)$$

Además, \mathbf{r} intersecta con el plano que contiene a p .

$$\mathbf{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k} \quad (5.17)$$

Con esto podemos escribir

$$\mathbf{r}_p = \mathbf{r} + \mathbf{R}_p \quad (5.18)$$

Si escribimos la ecuación (5.16) en coordenadas polares, es decir, $A = R_p \cos \theta$ y $B = R_p \sin \theta$

$$\mathbf{R}_p = R_p \left(\cos \theta \hat{\mathbf{n}} + \sin \theta \hat{\mathbf{b}} \right) \quad (5.19)$$

pero el término $\left(\cos \theta \hat{\mathbf{n}} + \sin \theta \hat{\mathbf{b}} \right)$ es el vector radial $\hat{\mathbf{r}}_{n,b}$ en coordenadas polares sobre el plano que contiene al punto p .

$$\hat{\mathbf{r}}_{n,b} \equiv \cos \theta \hat{\mathbf{n}} + \sin \theta \hat{\mathbf{b}} \quad (5.20)$$

Por ello

$$\mathbf{R}_p = R_p \hat{\mathbf{r}}_{n,b} \quad (5.21)$$

donde podemos generalizar la expresión pidiendo que $R_p = R_p(\theta)$. Así, la posición de punto p queda dado por

$$\mathbf{r}_p = \mathbf{r} + R_p(\theta) \hat{\mathbf{r}}_{n,b} \quad (5.22)$$

Si introducimos otro parámetro $\rho \in [0, \rho_0]$, podríamos describir cualquier punto dentro de un canal cuyas paredes tienen un radio de $R_p(\theta)$.

$$\mathbf{r}_p = \mathbf{r} + \frac{\rho}{\rho_0} R_p(\theta) \hat{\mathbf{r}}_{n,b} \quad (5.23)$$

Notese que como $\hat{\mathbf{n}}$ y $\hat{\mathbf{b}}$ heredan su dependencia en t ó s , y \mathbf{r} puede ser escrito en términos de ambos parámetros, \mathbf{r}_p heredará la dependencia correspondencia en t ó s . Escribiendo de manera general la expresión anterior para cualquier punto en el espacio, tenemos

$$\mathbf{r}_p(t, \rho, \theta) = \mathbf{r}(t) + \frac{\rho}{\rho_0} R_p(\theta, t) \hat{\mathbf{r}}_{n,b}(t) \quad (5.24)$$

$$\mathbf{r}_p(s, \rho, \theta) = \mathbf{r}(s) + \frac{\rho}{\rho_0} R_p(\theta, s) \hat{\mathbf{r}}_{n,b}(s) \quad (5.25)$$

Si χ representa cualquier parámetro externo o de longitud de arco

$$\mathbf{r}_p(\chi, \rho, \theta) = \mathbf{r}(\chi) + \frac{\rho}{\rho_0} R_p(\theta, \chi) \hat{\mathbf{r}}_{n,b}(\chi) \quad (5.26)$$

5.2. Cálculo del determinante

En la Sección 5, se escribió en forma vectorial la expresión (5.26), que representa el eje medio del canal. Para calcular el determinante, se necesitan expresiones de tipo $\frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^\mu}$, donde la tilde representa las coordenadas en el marco Cartesiano. Consideremos que

$$x_\mu = x_\mu(\tilde{x}_i) \quad (5.27)$$

y

$$\tilde{x}_i = \tilde{x}_i(x_\mu) \quad (5.28)$$

si existe una transformación inversa. Tomemos la diferencial de las variables en el sistema cartesiano

$$d\tilde{x}^a = \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^\mu} dx^\mu \quad (5.29)$$

Del mismo modo ³

$$dx^\mu = \frac{\partial x^\mu}{\partial \tilde{x}^b} d\tilde{x}^b \quad (5.32)$$

sustituyendo la ec. (5.32) en (5.29) queda

$$d\tilde{x}^a = \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^\mu} \frac{\partial x^\mu}{\partial \tilde{x}^b} d\tilde{x}^b \quad (5.33)$$

es decir,

$$\begin{aligned} d\tilde{x}^a &= \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial \tilde{x}^1} d\tilde{x}^1 + \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^2} \frac{\partial x^2}{\partial \tilde{x}^1} d\tilde{x}^1 + \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^3} \frac{\partial x^3}{\partial \tilde{x}^1} d\tilde{x}^1 + \\ &+ \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial \tilde{x}^2} d\tilde{x}^2 + \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^2} \frac{\partial x^2}{\partial \tilde{x}^2} d\tilde{x}^2 + \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^3} \frac{\partial x^3}{\partial \tilde{x}^2} d\tilde{x}^2 + \\ &+ \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial \tilde{x}^3} d\tilde{x}^3 + \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^2} \frac{\partial x^2}{\partial \tilde{x}^3} d\tilde{x}^3 + \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^3} \frac{\partial x^3}{\partial \tilde{x}^3} d\tilde{x}^3 \end{aligned}$$

desarrollando la expresión, identificando $\tilde{x}^1 = x$, $\tilde{x}^2 = y$, $\tilde{x}^3 = z$, $x^2 = \theta$ y $x^3 = \rho$

$$\begin{aligned} d\tilde{x}^a &= \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial x} dx + \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} dx + \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} dx + \\ &+ \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial y} dy + \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} dy + \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial y} dy + \\ &+ \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial z} dz + \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} dz + \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} dz \end{aligned} \quad (5.34)$$

³ Esto es equivalente a escribir:

De (5.29) se desprenden las expresiones

$$\begin{cases} dx = \frac{\partial x}{\partial s} ds + \frac{\partial x}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial x}{\partial \rho} d\rho \\ dy = \frac{\partial y}{\partial s} ds + \frac{\partial y}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial y}{\partial \rho} d\rho \\ dz = \frac{\partial z}{\partial s} ds + \frac{\partial z}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial z}{\partial \rho} d\rho \end{cases} \quad (5.30)$$

De (5.32) se desprenden las expresiones

$$\begin{cases} ds = \frac{\partial s}{\partial x} dx + \frac{\partial s}{\partial y} dy + \frac{\partial s}{\partial z} dz \\ d\theta = \frac{\partial \theta}{\partial x} dx + \frac{\partial \theta}{\partial y} dy + \frac{\partial \theta}{\partial z} dz \\ d\rho = \frac{\partial \rho}{\partial x} dx + \frac{\partial \rho}{\partial y} dy + \frac{\partial \rho}{\partial z} dz \end{cases} \quad (5.31)$$

donde x^1 es el parámetro que describe construye el eje central de la curva.

Si desarrollamos la expresión para $a = 1$

$$\begin{aligned} dx &= \left(\frac{\partial x}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial x} + \frac{\partial x}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) dx + \\ &+ \left(\frac{\partial x}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial y} + \frac{\partial x}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial y} + \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) dy + \\ &+ \left(\frac{\partial x}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial z} + \frac{\partial x}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} + \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) dz \end{aligned} \quad (5.35)$$

Igualando término a término ambos lados de la ec. (5.35), se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$\frac{\partial x}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial x} + \frac{\partial x}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} = 1 \quad (5.36)$$

$$\frac{\partial x}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial y} + \frac{\partial x}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial y} + \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} = 0 \quad (5.37)$$

$$\frac{\partial x}{\partial x^1} \frac{\partial x^1}{\partial z} + \frac{\partial x}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} + \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0 \quad (5.38)$$

Para simplificar la notación, definiremos $x^1 \equiv \chi$, $\frac{d}{d\chi} f(\chi) \equiv f'$ y $\frac{\partial a}{\partial b} \equiv a_b$.

Con esto las ecuaciones quedan

$$x_\chi \chi_x + x_\rho \rho_x + x_\theta \theta_x = 1 \quad (5.39)$$

$$x_\chi \chi_y + x_\rho \rho_y + x_\theta \theta_y = 0 \quad (5.40)$$

$$x_\chi \chi_z + x_\rho \rho_z + x_\theta \theta_z = 0 \quad (5.41)$$

Mediante un procedimiento análogo, sustituyendo en (5.34), con $a=2$, se obtienen las expresiones

$$y_\chi \chi_x + y_\rho \rho_x + y_\theta \theta_x = 0 \quad (5.42)$$

$$y_\chi \chi_y + y_\rho \rho_y + y_\theta \theta_y = 1 \quad (5.43)$$

$$y_\chi \chi_z + y_\rho \rho_z + y_\theta \theta_z = 0 \quad (5.44)$$

Finalmente, sustituyendo $a=3$ en (5.34)

$$z_\chi \chi_x + z_\rho \rho_x + z_\theta \theta_x = 0 \quad (5.45)$$

$$z_\chi \chi_y + z_\rho \rho_y + z_\theta \theta_y = 0 \quad (5.46)$$

$$z_\chi \chi_z + z_\rho \rho_z + z_\theta \theta_z = 1 \quad (5.47)$$

Para resolver el sistema, reagrupamos las ecuaciones (5.39), (5.42) y (5.45)

$$x_\chi \chi_x + x_\rho \rho_x + x_\theta \theta_x = 1 \quad (5.48)$$

$$y_\chi \chi_x + y_\rho \rho_x + y_\theta \theta_x = 0 \quad (5.49)$$

$$z_\chi \chi_x + z_\rho \rho_x + z_\theta \theta_x = 0 \quad (5.50)$$

con este sistema de 3 ecuaciones con 3 incógnitas podemos encontrar la dependencia para χ_x , ρ_x y θ_x .

De manera análoga, reagrupamos las ecuaciones (5.40), (5.43) y (5.46)

$$x_\chi \chi_y + x_\rho \rho_y + x_\theta \theta_y = 0 \quad (5.51)$$

$$y_\chi \chi_y + y_\rho \rho_y + y_\theta \theta_y = 1 \quad (5.52)$$

$$z_\chi \chi_y + z_\rho \rho_y + z_\theta \theta_y = 0 \quad (5.53)$$

Con este sistema de ecuaciones podemos resolver para χ_y , ρ_y y θ_y .

Finalmente, de las ecuaciones (5.41), (5.44) y (5.47) formamos el sistema

$$x_\chi \chi_z + x_\rho \rho_z + x_\theta \theta_z = 0 \quad (5.54)$$

$$y_\chi \chi_z + y_\rho \rho_z + y_\theta \theta_z = 0 \quad (5.55)$$

$$z_\chi \chi_z + z_\rho \rho_z + z_\theta \theta_z = 1 \quad (5.56)$$

con el cual podemos resolver para χ_z , ρ_z y θ_z .

Entonces ya tenemos los tres sistemas de 3 ecuaciones con 3 incógnitas, ahora sólo resta decidir cómo vamos a resolverlos. Finalmente, usaremos la

regla de Cramer para resolver los sistemas de ecuaciones. Sea una matriz \mathbb{A} , la solución al sistema

$$\mathbb{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (5.57)$$

viene dada por

$$x_j = \frac{\det(\mathbb{A}_j)}{\det(\mathbb{A})} \quad (5.58)$$

donde \mathbb{A}_j es la matriz que resulta de remplazar la j -ésima columna de \mathbb{A} por el vector \mathbf{b} .

Tomemos el sistema de ecuaciones formado por (5.48), (5.49) y (5.50) y escribamoslo en notación matricial

$$\begin{pmatrix} x_\chi & x_\theta & x_\rho \\ y_\chi & y_\theta & y_\rho \\ z_\chi & z_\theta & z_\rho \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_x \\ \theta_x \\ \rho_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.59)$$

Entonces, en nuestro caso, \mathbb{A} tiene la forma

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} x_\chi & x_\theta & x_\rho \\ y_\chi & y_\theta & y_\rho \\ z_\chi & z_\theta & z_\rho \end{pmatrix} \quad (5.60)$$

la solución para χ_x viene dada por

$$\chi_x = \frac{\det(\mathbb{A}_{\chi_x})}{\det(\mathbb{A})} \quad (5.61)$$

donde

$$\det(\mathbb{A}_{\chi_x}) = \begin{vmatrix} 1 & x_\theta & x_\rho \\ 0 & y_\theta & y_\rho \\ 0 & z_\theta & z_\rho \end{vmatrix} = (y_\theta z_\rho - z_\theta y_\rho) \quad (5.62)$$

Así, tenemos que

$$\chi_x = \frac{(y_\theta z_\rho - z_\theta y_\rho)}{\det(\mathbb{A})} \quad (5.63)$$

La solución para ρ_x sería

$$\rho_x = \frac{\det(\mathbb{A}_{\rho_x})}{\det(\mathbb{A})} \quad (5.64)$$

donde

$$\det(\mathbb{A}_{\rho_x}) = \begin{vmatrix} x_\chi & x_\theta & 1 \\ y_\chi & y_\theta & 0 \\ z_\chi & z_\theta & 0 \end{vmatrix} = (y_\chi z_\theta - y_\theta z_\chi) \quad (5.65)$$

Así tenemos que

$$\rho_x = \frac{(y_\chi z_\theta - y_\theta z_\chi)}{\det(\mathbb{A})} \quad (5.66)$$

Finalmente, para θ_x tenemos

$$\theta_x = \frac{\det(\mathbb{A}_{\theta_x})}{\det(\mathbb{A})} \quad (5.67)$$

donde

$$\det(\mathbb{A}_{\theta_x}) = \begin{vmatrix} x_\chi & 1 & x_\rho \\ y_\chi & 0 & y_\rho \\ z_\chi & 0 & z_\rho \end{vmatrix} = (y_\rho z_\chi - y_\chi z_\rho) \quad (5.68)$$

así tenemos que

$$\theta_x = \frac{(y_\rho z_\chi - y_\chi z_\rho)}{\det(\mathbb{A})} \quad (5.69)$$

De la misma manera, podemos escribir las ecuaciones (5.51), (5.52) y (5.53) de manera matricial

$$\begin{pmatrix} x_\chi & x_\theta & x_\rho \\ y_\chi & y_\theta & y_\rho \\ z_\chi & z_\theta & z_\rho \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_y \\ \theta_y \\ \rho_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.70)$$

donde la matriz \mathbb{A} es la misma que la expresión (5.60).

Mediante un procedimiento similar al anterior obtenemos que

$$\chi_y = \frac{(x_\rho z_\theta - z_\rho x_\theta)}{\det(\mathbb{A})}, \quad (5.71)$$

$$\rho_y = \frac{(x_\theta z_\chi - z_\theta x_\chi)}{\det(\mathbb{A})} \quad (5.72)$$

y

$$\theta_y = \frac{(x_\chi z_\rho - z_\chi x_\rho)}{\det(\mathbb{A})} \quad (5.73)$$

Por último, escribamos las ecuaciones (5.54), (5.55) y (5.56) en notación matricial

$$\begin{pmatrix} x_\chi & x_\theta & x_\rho \\ y_\chi & y_\theta & y_\rho \\ z_\chi & z_\theta & z_\rho \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_z \\ \theta_z \\ \rho_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.74)$$

donde nuevamente la matriz \mathbb{A} tiene la misma forma que (5.60).

Las soluciones que se obtienen aquí son

$$\chi_z = \frac{(x_\theta y_\rho - x_\rho y_\theta)}{\det(\mathbb{A})}, \quad (5.75)$$

$$\rho_z = \frac{(y_\theta x_\chi - x_\theta y_\chi)}{\det(\mathbb{A})} \quad (5.76)$$

y

$$\theta_z = \frac{(y_\chi x_\rho - x_\chi y_\rho)}{\det(\mathbb{A})} \quad (5.77)$$

Como podemos observar, en todas las soluciones se encuentra el término $\det(\mathbb{A})$, el cual, procederemos a calcular a continuación.

Retomemos nuevamente la expresión (5.26)

$$\mathbf{r}_p(\chi, \rho, \theta) = \mathbf{r}(\chi) + \frac{\rho}{\rho_0} R_p(\theta, \chi) \hat{\mathbf{r}}_{n,b}$$

Ahora, consideremos que $R_p(\chi, \theta) = \sqrt{a(\chi)} R(\theta)$ y escribamos la ecuación (5.26) en términos de sus componentes

$$\tilde{x}_i(\chi, \rho, \theta) = x_i(\chi) + \frac{\rho}{\rho_0} \sqrt{a(\chi)} R(\theta) (n_i \cos \theta + b_i \sin \theta) \quad (5.78)$$

donde, como habíamos establecido anteriormente, $\hat{\mathbf{r}}_{n,b} = (\cos \theta \hat{\mathbf{n}} + \sin \theta \hat{\mathbf{b}})$.

Derivemos parcialmente (5.78) con respecto a χ

$$\frac{\partial \tilde{x}_i}{\partial \chi} = x'_i(\chi) + \frac{\rho R(\theta)}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\sqrt{a(\chi)} (n_i(\chi) \cos \theta + b_i(\chi) \sin \theta) \right) \quad (5.79)$$

esto es

$$\frac{\partial \tilde{x}_i}{\partial \chi} = x'_i(\chi) + \frac{\rho R(\theta)}{\rho_0} \left(\sqrt{a(\chi)} \left(\cos \theta \frac{dn_i}{d\chi} + \sin \theta \frac{db_i}{d\chi} \right) + (n_i \cos \theta + b_i \sin \theta) \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} \right) \quad (5.80)$$

para las derivadas de las componentes de los vectores normal y binormal, utilizaremos las **fórmulas de Frenet-Serret** (Apéndice D).

$$\frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds} = \kappa \hat{\mathbf{n}}, \quad (5.81)$$

$$\frac{d\hat{\mathbf{n}}}{ds} = -\kappa \hat{\mathbf{t}} + \tau \hat{\mathbf{b}} \quad (5.82)$$

y

$$\frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} = \tau \hat{\mathbf{n}} \quad (5.83)$$

donde κ es la curvatura y τ la torsión.

Las componentes de las ecuaciones de Frenet-Serret son

$$\frac{dt_i}{ds} = \kappa n_i, \quad (5.84)$$

$$\frac{dn_i}{ds} = -\kappa t_i + \tau b_i \quad (5.85)$$

y

$$\frac{db_i}{ds} = -\tau n_i \quad (5.86)$$

Dado que las expresiones de Frenet-Serret están escritas en términos de la longitud de arco, sin pérdida de generalidad, reescribamos (5.80)

$$\frac{\partial \tilde{x}_i}{\partial \chi} = x'_i(\chi) + \frac{\rho R(\theta)}{\rho_0} \left(\sqrt{a(\chi)} \left(\cos \theta \frac{ds}{d\chi} \frac{dn_i}{ds} + \sin \theta \frac{ds}{d\chi} \frac{db_i}{ds} \right) + (n_i \cos \theta + b_i \sin \theta) \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} \right) \quad (5.87)$$

que puede ser reescrita como

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{x}_i}{\partial \chi} = & x'_i(\chi) + \frac{\rho R(\theta)}{\rho_0} \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_i + \right. \\ & \left. + \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_i - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_i + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_i \cos \theta + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_i \sin \theta \right) \end{aligned} \quad (5.88)$$

Ahora, derivemos (5.78) parcialmente con respecto a ρ y θ respectivamente

$$\frac{\partial \tilde{x}_i}{\partial \rho} = \frac{\sqrt{a(\chi)} R(\theta)}{\rho_0} (n_i \cos \theta + \sin \theta b_i) \quad (5.89)$$

$$\frac{\partial \tilde{x}_i}{\partial \theta} = \frac{\rho \sqrt{a(\chi)} R(\theta)}{\rho_0} (-\sin \theta n_i + b_i \cos \theta) + \frac{\rho \sqrt{a(\chi)} R'(\theta)}{\rho_0} (\cos \theta n_i + \sin \theta b_i) \quad (5.90)$$

Con lo anterior, podemos calcular

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_i}{\partial \theta} \frac{\partial x_j}{\partial \rho} - \frac{\partial x_i}{\partial \rho} \frac{\partial x_j}{\partial \theta} &= \left(\frac{\sqrt{a(\chi)}R(\theta)}{\rho_0} (n_j \cos \theta + b_j \sin \theta) \frac{\rho \sqrt{a(\chi)}R(\theta)}{\rho_0} (-n_i \sin \theta + b_i \cos \theta) \right) + \\ &- \left(\frac{\sqrt{a(\chi)}R(\theta)}{\rho_0} (n_i \cos \theta + b_i \sin \theta) \frac{\rho \sqrt{a(\chi)}R(\theta)}{\rho_0} (-n_j \sin \theta + b_j \cos \theta) \right) \end{aligned}$$

Si hacemos los productos correspondientes y hacemos las operaciones de los términos comunes, obtenemos

$$\frac{\partial x_i}{\partial \theta} \frac{\partial x_j}{\partial \rho} - \frac{\partial x_i}{\partial \rho} \frac{\partial x_j}{\partial \theta} = \frac{\rho R^2 a}{\rho_0^2} (b_i n_j - b_j n_i) \quad (5.91)$$

Por otro lado, el determinante de \mathbb{A} tiene la forma

$$\det \mathbb{A} = \begin{vmatrix} x_\chi & x_\theta & x_\rho \\ y_\chi & y_\theta & y_\rho \\ z_\chi & z_\theta & z_\rho \end{vmatrix} = x_\chi(y_\theta z_\rho - z_\theta y_\rho) - x_\theta(y_\chi z_\rho - z_\chi y_\rho) + x_\rho(y_\chi z_\theta - z_\chi y_\theta)$$

el cual puede ser reescrito como

$$\det \mathbb{A} = x_\chi(y_\theta z_\rho - z_\theta y_\rho) + y_\chi(x_\rho z_\theta - z_\rho x_\theta) + z_\chi(y_\rho x_\theta - x_\rho y_\theta) \quad (5.92)$$

Sustituyamos las ecuaciones (5.88) y (5.91) en (5.92) y obtenemos (ver Apéndice E.1)

$$\Delta \equiv \det \mathbb{A} = \frac{ds}{d\chi} \left(\frac{\rho^2 a^{3/2}(\chi) R^3(\theta) \cos \theta}{\rho_0^3} \kappa(\chi) - \frac{\rho a(\chi) R^2(\theta)}{\rho_0^2} \right) \quad (5.93)$$

5.3. Coeficiente de difusión efectivo

El procedimiento a seguir es análogo al hecho en la Sección 4.5.

Empecemos nuestro desarrollo a partir de la ec. (4.59)

$$\Delta \dot{C} = \partial_\mu [\Delta D^{\mu\nu} \partial_\nu C]$$

Integremos sobre el radio del canal $\rho \in [0, \rho_0]$

$$\begin{aligned}
\int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta \dot{C} d\rho &= \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \partial_\mu [\Delta D^{\mu\nu} \partial_\nu C] d\rho \\
&= \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \partial_\chi [\Delta D^{s\nu} \partial_\nu C] d\rho + \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \partial_\theta [\Delta D^{\theta\nu} \partial_\nu C] d\rho + \\
&+ \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \partial_\rho [\Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C] d\rho \\
&= \partial_\chi \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{s\nu} \partial_\nu C] d\rho + \partial_\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{\theta\nu} \partial_\nu C] d\rho + \\
&+ \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \partial_\rho [\Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C] d\rho \tag{5.94}
\end{aligned}$$

Concentremos en el tercer término del lado derecho

$$\int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \partial_\rho [\Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C] d\rho = [\Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C]_{\rho=\rho_0} - [\Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C]_{\rho=0}$$

Usando la condición de frontera, ec. (4.56) se obtiene

$$\int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \partial_\rho [\Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C] d\rho = -[\Delta D^{\rho\nu} \partial_\nu C]_{\rho=0} \tag{5.95}$$

Ahora, recurramos a la expresión para el determinante, ec. (5.93), al evaluar $\rho = 0$, el determinante Δ se anula y por ello, la expresión (5.95) se anula. Por lo anterior, (5.94) queda

$$\int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta \dot{C} d\rho = \partial_\chi \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{s\nu} \partial_\nu C] d\rho + \partial_\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{\theta\nu} \partial_\nu C] d\rho \tag{5.96}$$

Integremos en θ sobre un período completo

$$\begin{aligned}
\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} d\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta \dot{C} d\rho &= \partial_\chi \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} d\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{s\nu} \partial_\nu C] d\rho + \\
&+ \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} d\theta \partial_\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{\theta\nu} \partial_\nu C] d\rho \tag{5.97}
\end{aligned}$$

Ahora, concentremos en el segundo término del lado derecho de la ecuación anterior

$$\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} d\theta \partial_\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{\theta\nu} \partial_\nu C] d\rho$$

Realizando la integración en θ

$$\begin{aligned}
\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} d\theta \partial_\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{\theta\nu} \partial_\nu C] d\rho &= \left(\int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{\theta\nu} \partial_\nu C] d\rho \right) \Big|_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \\
&= \left(\int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta J^\theta d\rho \right) \Big|_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \\
&= \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} (\Delta J^\theta) \Big|_{\theta=0}^{\theta=2\pi} d\rho \\
&= \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} (\Delta(\chi, 2\pi, \rho) J^\theta \Big|_{\theta=0} - \Delta(\chi, 0, \rho) J^\theta \Big|_{\theta=0}) d\rho
\end{aligned} \tag{5.98}$$

Como Δ depende de θ mediante $R(\theta)$ y $\cos \theta$, ec. (5.93),

$\Delta(\chi, 2\pi, \rho) = \Delta(\chi, 0, \rho)$ ya que $R(\theta)$ es una curva paramétrica cerrada⁴.

Con esto, la ec. (5.98) queda

$$\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} d\theta \partial_\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{\theta\nu} \partial_\nu C] d\rho = \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta(\chi, 0, \rho) (J^\theta \Big|_{\theta=0} - J^\theta \Big|_{\theta=0}) d\rho$$

Ahora, pediremos que la componente θ del flujo sea cerrada dentro del canal, por lo que $J_{\theta=0}^\theta = J_{\theta=2\pi}^\theta$ y así obtenemos

$$\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} d\theta \partial_\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{\theta\nu} \partial_\nu C] d\rho = 0$$

Así, (5.97) queda

$$\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} d\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta \dot{C} d\rho = \partial_\chi \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} d\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{\chi\nu} \partial_\nu C] d\rho$$

esto es

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} d\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta C d\rho = \partial_\chi \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} d\theta \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} [\Delta D^{\chi x} \partial_s C + \Delta D^{\chi\theta} \partial_\theta C + \Delta D^{\chi\rho} \partial_\rho C] d\rho \tag{5.99}$$

Ahora, el número de partículas se define como

$$N = \int_{\mathcal{D}} C d\tilde{x} d\tilde{y} d\tilde{z} \tag{5.100}$$

⁴Por la condición de periodicidad, se tiene que $R(2\pi) = R(0)$

donde \mathcal{D} es el dominio del canal que se analiza. Este mismo dominio visto desde el punto de vista del sistema de referencia cartesiano, \mathcal{D}' , nos lleva a la expresión

$$N = \int_{\mathcal{D}} C d\tilde{x}d\tilde{y}d\tilde{z} = \int_{\mathcal{D}'} \mathcal{J}C dx dy dz = \int_{\chi_0}^{\chi_1} \left(\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \mathcal{J}C d\theta d\rho \right) d\chi \quad (5.101)$$

donde \mathcal{J} es el Jacobiano de la transformación y

$\mathcal{D}' = [\chi_0, \chi_1] \cup [0, 2\pi] \cup [0, \rho_0]$. Como en coordenadas cartesianas la métrica es euclidiana, el Jacobiano de la transformación coincide con el determinante de la métrica, por lo tanto

$$N = \int_{\chi_0}^{\chi_1} \left(\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta C d\theta d\rho \right) d\chi \equiv \int_{s_0}^{s_1} \mathcal{P} d\chi \quad (5.102)$$

es decir,

$$\mathcal{P} \equiv \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta C d\theta d\rho \quad (5.103)$$

donde \mathcal{P} es llamada la concentración marginal. Por todo o anterior, la ec. (5.99) queda

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = \partial_{\chi} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta [D^{\chi\chi} \partial_{\chi} C + D^{\chi\theta} \partial_{\theta} C + D^{\chi\rho} \partial_{\rho} C] d\theta d\rho \quad (5.104)$$

Por otro lado, propongamos que la ecuación de Fick-Jacobs en SNC sea⁵

$$\frac{\partial \mathcal{P}(\chi, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \chi} D(\chi) \mathcal{A}(\chi) \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{\mathcal{P}(\chi, t)}{\mathcal{A}(\chi)} \right) \quad (5.106)$$

donde $D(\chi)$ es el coeficiente de difusión efectivo dependiente de la posición.

⁵La expresión para la ecuación de Fick-Jacobs generalizada, ec. (2.9) viene dada por

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D(x) A(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{c(x, t)}{A(x)} \right)$$

donde $A(x)$ es el área de la sección transversal del canal en la posición x

$$A(x) = e^{-\beta U(x)} \quad (5.105)$$

dado por (2.6).

El término

$$\mathcal{A}(\chi) \equiv \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta d\theta d\rho \quad (5.107)$$

es el área de la sección transversal en el canal. El término Δ nos indica la manera que esta se deforma al pasar de un sistema de referencia al otro (ya que Δ es el determinante y el Jacobiano de la transformación).

Comparando las ecs. (5.106) y (5.104)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \chi} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta [D^{\chi\chi} \partial_\chi C + D^{\chi\theta} \partial_\theta C + D^{\chi\rho} \partial_\rho C] d\theta d\rho & \quad (5.108) \\ & = \frac{\partial}{\partial \chi} D(\chi) \mathcal{A}(\chi) \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{\mathcal{P}(\chi, t)}{\mathcal{A}(\chi)} \right) \end{aligned}$$

Esto es

$$\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta [D^{\chi\chi} \partial_\chi C + D^{\theta\theta} \partial_\theta C + D^{\rho\rho} \partial_\rho C] d\theta d\rho = D(\chi) \mathcal{A}(\chi) \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{\mathcal{P}(\chi, t)}{\mathcal{A}(\chi)} \right) \quad (5.109)$$

Despejando $D(\chi)$

$$D(\chi) = \frac{\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta [D^{\chi\chi} \partial_\chi C + D^{\theta\theta} \partial_\theta C + D^{\rho\rho} \partial_\rho C] d\theta d\rho}{\mathcal{A}(\chi) \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{\mathcal{P}(\chi, t)}{\mathcal{A}(\chi)} \right)} \quad (5.110)$$

Podemos ver que la expresión (5.110) depende de las cantidades $\partial_\chi C$, $\partial_\theta C$ y $\partial_\rho C$.

Las variables θ y ρ caracterizan la geometría del canal en las direcciones transversales y nos interesa caracterizar dicha geometría en la dirección longitudinal χ . Para ello, expresaremos el coeficiente $D(\chi)$ en términos longitudinales como se muestra a continuación.

Tomemos la expresión (3.8)

$$J^a = -D^{ab} \partial_b C$$

y con esto

$$\begin{aligned} J^\theta &= -D^{\theta\mu} \partial_\mu C = -D^{\theta\chi} \partial_\chi C - D^{\theta\theta} \partial_\theta C - D^{\theta\rho} \partial_\rho C \\ J^\rho &= -D^{\rho\mu} \partial_\mu C = -D^{\rho\chi} \partial_\chi C - D^{\rho\theta} \partial_\theta C - D^{\rho\rho} \partial_\rho C \end{aligned}$$

despejando

$$D^{\theta\theta}\partial_\theta C = -D^{\theta\chi}\partial_\chi C - D^{\theta\rho}\partial_\rho C - J^\theta \quad (5.111)$$

$$D^{\rho\rho}\partial_\rho C = -D^{\rho\chi}\partial_\chi C - D^{\rho\theta}\partial_\theta C - J^\rho \quad (5.112)$$

Sustituyendo (5.111) en (5.112) y viceversa, (5.112) en (5.111)

$$D^{\theta\theta}D^{\rho\rho}\partial_\rho C = -D^{\theta\theta}D^{\rho\chi}\partial_\chi C - D^{\rho\theta}(-D^{\theta\chi}\partial_\chi C - D^{\theta\rho}\partial_\rho C - J^\theta) - D^{\theta\theta}J^\rho$$

$$D^{\rho\rho}D^{\theta\theta}\partial_\theta C = -D^{\rho\rho}D^{\theta\chi}\partial_\chi C - D^{\theta\rho}(-D^{\theta\chi}\partial_\chi C - D^{\theta\rho}\partial_\rho C - J^\theta) - D^{\rho\rho}J^\theta$$

Despejando para $\partial_\rho C$ y $\partial_\theta C$ respectivamente se llega a

$$\partial_\rho C = \frac{D^{\theta\theta}J^\rho - D^{\rho\theta}J^\theta + (D^{\theta\theta}D^{\rho\chi} - D^{\rho\theta}D^{\theta\chi})\partial_\chi C}{D^{\rho\theta}D^{\theta\rho} - D^{\theta\theta}D^{\rho\rho}} \quad (5.113)$$

$$\partial_\theta C = \frac{D^{\rho\theta}J^\rho - D^{\theta\theta}J^\theta + (D^{\theta\rho}D^{\rho\chi} - D^{\rho\rho}D^{\theta\chi})\partial_\chi C}{D^{\rho\rho}D^{\theta\theta} - D^{\theta\rho}D^{\rho\theta}} \quad (5.114)$$

sustituyendo en (5.110)

$$\begin{aligned} D(\chi) &= \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \frac{\Delta}{\mathcal{A}(\chi)\frac{\partial}{\partial\chi}\left(\frac{\mathcal{P}(\chi)}{\mathcal{A}(\chi)}\right)} [D^{\chi\chi}\partial_\chi C + \\ &+ D^{\chi\theta} \left(\frac{D^{\rho\theta}J^\rho - D^{\theta\theta}J^\theta + (D^{\theta\rho}D^{\rho\chi} - D^{\rho\rho}D^{\theta\chi})\partial_\chi C}{D^{\rho\rho}D^{\theta\theta} - D^{\theta\rho}D^{\rho\theta}} \right) + \\ &+ D^{\chi\rho} \left(\frac{D^{\theta\theta}J^\rho - D^{\rho\theta}J^\theta + (D^{\theta\theta}D^{\rho\chi} - D^{\rho\theta}D^{\theta\chi})\partial_\chi C}{D^{\rho\theta}D^{\theta\rho} - D^{\theta\theta}D^{\rho\rho}} \right)] d\theta d\rho \end{aligned}$$

Acomodando términos

$$D(\chi) = \frac{\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} d\theta d\rho \Delta \mathcal{D} \partial_\chi C}{\mathcal{A}(\chi)\frac{\partial}{\partial\chi}\left(\frac{\mathcal{P}(\chi)}{\mathcal{A}(\chi)}\right)} + \frac{\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} d\theta d\rho \Delta \mathcal{D}_{00}}{\mathcal{A}(\chi)\frac{\partial}{\partial\chi}\left(\frac{\mathcal{P}(\chi)}{\mathcal{A}(\chi)}\right)} \quad (5.115)$$

Con

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &= \frac{1}{D^{\theta\theta}D^{\rho\rho} - D^{\rho\theta}D^{\theta\rho}} \left(D^{\chi\chi}D^{\theta\theta}D^{\rho\rho} - D^{\chi\chi}D^{\rho\theta}D^{\theta\rho} + D^{\chi\theta}D^{\theta\rho}D^{\rho\chi} + \right. \\ &\left. - D^{\chi\theta}D^{\rho\rho}D^{\theta\chi} - D^{\chi\rho}D^{\theta\theta}D^{\rho\chi} + D^{\chi\rho}D^{\rho\theta}D^{\theta\chi} \right) \quad (5.116) \end{aligned}$$

$$D_{00} = \frac{D^{\chi\theta} D^{\theta\rho} J^\rho - D^{\chi\theta} D^{\rho\rho} J^\theta - D^{\chi\rho} D^{\theta\theta} J^\rho + D^{\chi\rho} D^{\rho\theta} J^\theta}{D^{\rho\rho} D^{\theta\theta} - D^{\rho\theta} D^{\theta\rho}} \quad (5.117)$$

Considerando que sólo hay flujo en el sentido del vector normal al área \mathcal{A} , esto es, $J^\theta = 0$ y $J^\rho = 0$,

$$D(\chi) \cong \frac{\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} d\theta d\rho \Delta \mathcal{D} \partial_\chi C}{\mathcal{A}(\chi) \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{\mathcal{P}(\chi, t)}{\mathcal{A}(\chi)} \right)} \quad (5.118)$$

Diremos que cuando la concentración C no dependa de las variables transversales, esto es, de θ y ρ , $D(\chi)$ estará a orden cero, el cual tiene una expresión de la forma⁶

$$D^{(0)}(\chi) \cong \frac{\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} d\theta d\rho \Delta \mathcal{D}}{\mathcal{A}(\chi)} \quad (5.119)$$

La expresión (5.119) es el resultado más importante de este capítulo. Es la expresión más general para un coeficiente de difusión en un canal tridimensional.

5.4. Coeficiente de difusión efectivo para un canal recto

Consideraremos que el canal recto está sobre el eje \hat{i} en el espacio Cartesiano. Parametrizaremos esta recta como

$$\mathbf{r}(t) = (t, 0, 0) \quad (5.120)$$

⁶Como C no depende de θ y ρ , sale de las integrales

$$D(\chi) \cong \frac{\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} d\theta d\rho \Delta \mathcal{D} \partial_\chi C}{\mathcal{A}(\chi) \frac{\partial}{\partial \chi} \left[\frac{C \left(\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta d\theta d\rho \right)}{\left(\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta d\theta d\rho \right)} \right]}$$

las integrales hacen la unidad y queda

$$D(\chi) = \frac{\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} d\theta d\rho \Delta \mathcal{D} \partial_\chi C}{\mathcal{A}(\chi) \frac{\partial C}{\partial \chi}}$$

Así, los términos $\partial_\chi C$ se eliminan y la expresión se transforma en la ec. (5.119).

Ahora, si $\chi = t$, las ecs. (5.20) y (5.26) se expresan como

$$\mathbf{r}_p(t, \rho, \theta) = \mathbf{r}(t) + \frac{\rho}{\rho_0} R(\theta, t) \left(\cos \theta \hat{\mathbf{n}} + \sin \theta \hat{\mathbf{b}} \right)$$

donde, por construcción, escogeremos los vectores $\hat{\mathbf{t}} = (1, 0, 0)$, $\hat{\mathbf{n}} = (0, 0, 1)$ y $\hat{\mathbf{b}} = (0, -1, 0)$. El signo negativo en la componente \hat{j} del vector $\hat{\mathbf{b}}$ se escoge así para tener un sistema coordenado de mano derecha. Además escogeremos $R(\theta, t) = \sqrt{a(t)}$, es decir, el ancho de las paredes del canal sólo dependerá del parámetro externo t .

Con esto, la dependencia entre las coordenadas del sistema euclidiano con SNC queda

$$x(t, \rho, \theta) = t, \quad (5.121)$$

$$y(t, \rho, \theta) = -\frac{\rho}{\rho_0} \sqrt{a(t)} \sin \theta \quad (5.122)$$

y

$$z(t, \rho, \theta) = \frac{\rho}{\rho_0} \sqrt{a(t)} \cos \theta \quad (5.123)$$

Con esto podemos calcular las expresiones

$$\begin{aligned} x_t &= 1, & x_\theta &= 0, & x_\rho &= 0 \\ y_t &= -\frac{\rho a'}{2\rho_0 \sqrt{a}} \sin \theta, & y_\theta &= -\frac{\rho}{\rho_0} \sqrt{a} \cos \theta & y_\rho &= -\frac{\sqrt{a}}{\rho_0} \sin \theta \\ z_t &= \frac{\rho a'}{2\rho_0 \sqrt{a}} \cos \theta, & z_\theta &= -\frac{\rho}{\rho_0} \sqrt{a} \sin \theta & z_\rho &= \frac{\sqrt{a}}{\rho_0} \cos \theta. \end{aligned} \quad (5.124)$$

Por otro lado, para calcular el determinante Δ , usamos la ec. (5.93)

$$\Delta = \frac{ds}{dt} \left(\frac{\rho^2 a^{3/2}(t) R^3(\theta) \cos \theta}{\rho_0^3} \kappa(t) - \frac{\rho a(t) R^2(\theta)}{\rho_0^2} \right)$$

Ya que se trabaja con un canal recto, la curvatura $\kappa = 0$, por lo que, si $R(\theta) = 1$, la ecuación (5.93) queda

$$\Delta = -\frac{\rho}{\rho_0^2} a(t) \quad (5.125)$$

Con todo lo anterior, podemos calcular las ecs. (5.63), (5.66), (5.69), (5.71), (5.72), (5.73), (5.75), (5.76) y (5.77)

$$\begin{aligned} t_x &= 1, & \theta_x &= 0, & \rho_x &= -\frac{a\rho a'}{2} \\ t_y &= 0, & \theta_y &= -\frac{\rho_0}{\rho\sqrt{a}} \cos \theta & \rho_y &= -\frac{\rho_0}{\sqrt{a}} \sin \theta \\ t_z &= 0, & \theta_z &= \frac{\rho_0}{\rho\sqrt{a}} \sin \theta & \rho_z &= \frac{\rho_0}{\sqrt{a}} \cos \theta. \end{aligned} \quad (5.126)$$

Una vez hecho esto, recurrimos a la ec. (5.110)

$$D^{\mu\nu} = D^{ab} \frac{\partial x^\mu}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial x^\nu}{\partial \tilde{x}^b}$$

para calcular el tensor de difusión en el marco SNC. Con esto obtenemos

$$D^{tt} = t_x^2 D^x + t_y^2 D^y + t_z^2 D^z \quad (5.127)$$

$$D^{t\theta} = t_x \theta_x D^x + t_y \theta_y D^y + t_z \theta_z D^z \quad (5.128)$$

$$D^{t\rho} = t_x \rho_x D^x + t_y \rho_y D^y + t_z \rho_z D^z \quad (5.129)$$

$$D^{\theta\theta} = \theta_x^2 D^x + \theta_y^2 D^y + \theta_z^2 D^z \quad (5.130)$$

$$D^{\theta\rho} = \theta_x \rho_x D^x + \theta_y \rho_y D^y + \theta_z \rho_z D^z \quad (5.131)$$

$$D^{\rho\rho} = \rho_x^2 D^x + \rho_y^2 D^y + \rho_z^2 D^z \quad (5.132)$$

Así, sustituyendo (5.126) en las ecuaciones (5.127-5.132) obtenemos

$$D^{tt} = D^x \quad (5.133)$$

$$D^{t\theta} = D^{\theta t} = 0 \quad (5.134)$$

$$D^{t\rho} = D^{\rho t} = -D^x \frac{aa'\rho}{2} \quad (5.135)$$

$$D^{\theta\theta} = \frac{\rho_0^2}{\rho^2 a} (D^y \cos^2 \theta + D^z \sin^2 \theta) \quad (5.136)$$

$$D^{\theta\rho} = D^{\rho\theta} = (D^y - D^z) \frac{\rho_0^2}{\rho a} \sin \theta \cos \theta \quad (5.137)$$

$$D^{\rho\rho} = D^x \frac{a^2 a'^2 \rho^2}{4} + (D^y + D^z) \frac{\rho_0^2}{a} \quad (5.138)$$

A continuación, supondremos que la concentración depende únicamente de la coordenada longitudinal, esto es, $C(t, \theta, \rho) \approx C(t)$ y que $D^y = D^z$. Con

esto, estamos listos para plantearnos resolver la ec. (5.119)

$$D^{(0)}(t) = \frac{\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} d\theta d\rho \Delta \mathcal{D}}{\left(\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta d\theta d\rho \right)}$$

con

$$\begin{aligned} \mathcal{D} = & \frac{1}{D^{\theta\theta} D^{\rho\rho} - D^{\rho\theta} D^{\theta\rho}} \left(D^{tt} D^{\theta\theta} D^{\rho\rho} - D^{tt} D^{\rho\theta} D^{\theta\rho} + D^{t\theta} D^{\theta\rho} D^{\rho t} + \right. \\ & \left. - D^{t\theta} D^{\rho\rho} D^{\theta t} - D^{t\rho} D^{\theta\theta} D^{\rho t} + D^{t\rho} D^{\rho\theta} D^{\theta t} \right) \end{aligned}$$

Primero resolvamos la operación que hay que hacer con \mathcal{D}_1 , las componentes del tensor de difusión

$$\mathcal{D} = \frac{4a(t)D^x \rho_0^2}{a'(t)^2 \rho^2 + 4a(t)\rho_0^2} \quad (5.139)$$

que al integrar en θ y ρ queda

$$\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} d\theta d\rho \Delta \mathcal{D} = -\frac{4\pi a(t)^2 D^x}{a'(t)^2} \ln \left(\frac{4a(t) + a'(t)^2}{4a(t)} \right) \quad (5.140)$$

La integral en el denominador queda

$$\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta d\theta d\rho = -\pi a(t) \quad (5.141)$$

Finalmente, el coeficiente de difusión efectivo queda

$$D^{(0)}(t) = 4D^x \frac{a(t)}{a'(t)^2} \ln \left(1 + \frac{a'(t)^2}{4a(t)} \right) \quad (5.142)$$

si el ancho del canal no varía, $a'(t) = 0$, por lo que, haciendo el límite de la expresión (5.142) para encontrar la convergencia⁷

$$D^{(0)}(t) = 4D^x \frac{a(t)}{a'(t)^2} \left(\frac{a'(t)^2}{4a(t)} \right) \quad (5.143)$$

esto es

$$D^{(0)}(t) = D^x \quad (5.144)$$

donde la aproximación se quedó a primer orden.

7

$$\ln(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \dots \quad ; |x| < 1$$

5.5. Coeficiente de difusión efectivo para un canal inclinado

Para el canal inclinado, escogeremos que la recta esté dentro del plano $y - z$

$$\mathbf{r}(t) = (0, t, mt) \quad (5.145)$$

Para trabajar, escogimos el parámetro exterior t , ya que queremos observar los efectos de la geometría en el coeficiente de difusión efectivo. Si tomáramos como parámetro la longitud de arco s , lo que encontraríamos es que estamos viajando sobre un canal recto y el coeficiente de difusión efectiva sería simplemente D_0 .

Usando la ec. (5.5)

$$\hat{\mathbf{t}} = \mathbf{r}'(\chi) \frac{d\chi}{ds}$$

donde hemos escogido que $\chi = t$, esto es, que t es nuestra coordenada generalizada, es decir

$$\hat{\mathbf{t}} = \mathbf{r}'(t) \frac{dt}{ds}$$

con $\frac{ds}{dt} = \sqrt{1 + m^2}$. Por ello, el vector tangente queda

$$\hat{\mathbf{t}} = \frac{1}{\sqrt{1 + m^2}}(0, 1, m) \quad (5.146)$$

Como hemos elegido que la recta esté sobre el plano $y - z$, escogeremos el vector binormal como $\hat{\mathbf{b}} = (1, 0, 0)$. Así, calculamos el vector normal como

$$\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{b}} \times \hat{\mathbf{t}} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{1+m^2}} & \frac{m}{\sqrt{1+m^2}} \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 + m^2}}(0, -m, 1) \quad (5.147)$$

Considerando la ec (5.26)

$$\mathbf{r}(t, \rho, \theta) = \mathbf{r}_0(t) + \frac{\rho}{\rho_0} R(\theta, t) \left(\cos \theta \hat{\mathbf{n}} + \sin \theta \hat{\mathbf{b}} \right)$$

encontramos que

$$\mathbf{r}(t, \rho, \theta) = \frac{\rho \sqrt{a(t)}}{\rho_0} \left(\sin \theta, t - \frac{m \cos \theta}{\sqrt{1 + m^2}}, mt + \frac{\cos \theta}{\sqrt{1 + m^2}} \right) \quad (5.148)$$

donde consideraremos que $R(\theta, t) = \sqrt{a(t)}$.

Con esto podemos calcular

$$\begin{aligned}
 x_s &= \frac{\rho a'}{2\rho_0\sqrt{a}} \sin \theta, & x_\theta &= \frac{\rho\sqrt{a}}{\rho_0} \cos \theta, & x_\rho &= \frac{\sqrt{a}}{\rho_0} \sin \theta \\
 y_s &= 1 - \frac{\rho a'}{2\rho_0\sqrt{a}} \frac{m \cos \theta}{\sqrt{1+m^2}}, & y_\theta &= \frac{\rho\sqrt{a}}{\rho_0} \frac{m \sin \theta}{\sqrt{1+m^2}}, & y_\rho &= -\frac{\sqrt{a}}{\rho_0} \frac{m \cos \theta}{\sqrt{1+m^2}} \\
 z_s &= m + \frac{\rho a'}{2\rho_0\sqrt{a}} \frac{m \cos \theta}{\sqrt{1+m^2}}, & z_\theta &= -\frac{\rho\sqrt{a}}{\rho_0} \frac{\sin \theta}{\sqrt{1+m^2}}, & z_\rho &= \frac{\sqrt{a}}{\rho_0} \frac{\cos \theta}{\sqrt{1+m^2}}
 \end{aligned} \tag{5.149}$$

Consideremos la expresión para el determinante Δ , ec. (5.93), con $\chi = t$

$$\Delta = \frac{ds}{dt} \left(\frac{\rho^2 a^{3/2}(t) R^3(\theta) \cos \theta}{\rho_0^3} \kappa(t) - \frac{\rho a(t) R^2(\theta)}{\rho_0^2} \right)$$

Como trabajamos con un canal recto, $\kappa = 0$

$$\Delta = -\frac{ds}{dt} \frac{\rho a(t) R^2(\theta)}{\rho_0^2} \tag{5.150}$$

como $R(\theta) = 1$ tenemos

$$\Delta = -\frac{\rho\sqrt{1+m^2}}{\rho_0^2} a(t) \tag{5.151}$$

Con todo lo anterior, podemos calcular las ecs. (5.63), (5.66), (5.69), (5.71), (5.72), (5.73), (5.75), (5.76) y (5.77)

$$\begin{aligned}
 t_x &= 0, & \theta_x &= \frac{\rho_0 \cos \theta}{\rho\sqrt{a}}, & \rho_x &= \frac{\rho_0 \sin \theta}{\sqrt{a}} \\
 t_y &= \frac{1}{1+m^2}, & \theta_y &= \frac{\rho_0 m \sin \theta}{\sqrt{1+m^2}\rho\sqrt{a}}, & \rho_y &= -\frac{2m\sqrt{1+m^2}\rho_0\sqrt{a} \cos \theta + \rho a'}{2a + 2m^2 a} \\
 t_z &= \frac{m}{1+m^2}, & \theta_z &= -\frac{\rho_0 \sin \theta}{\sqrt{1+m^2}\rho\sqrt{a}}, & \rho_z &= \frac{\rho_0 \cos \theta}{\sqrt{1+m^2}\sqrt{a}} - \frac{m\rho a'}{2a(1+m^2)}
 \end{aligned} \tag{5.152}$$

Una vez hecho esto, recurrimos a la ec. (5.110)

$$D^{\mu\nu} = D^{ab} \frac{\partial x^\mu}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial x^\nu}{\partial \tilde{x}^b}$$

para calcular el tensor de difusión en SNC. Con esto obtenemos

$$D^{tt} = t_x^2 D^x + t_y^2 D^y + t_z^2 D^z \quad (5.153)$$

$$D^{t\theta} = t_x \theta_x D^x + t_y \theta_y D^y + t_z \theta_z D^z \quad (5.154)$$

$$D^{t\rho} = t_x \rho_x D^x + t_y \rho_y D^y + t_z \rho_z D^z \quad (5.155)$$

$$D^{\theta\theta} = \theta_x^2 D^x + \theta_y^2 D^y + \theta_z^2 D^z \quad (5.156)$$

$$D^{\theta\rho} = \theta_x \rho_x D^x + \theta_y \rho_y D^y + \theta_z \rho_z D^z \quad (5.157)$$

$$D^{\rho\rho} = \rho_x^2 D^x + \rho_y^2 D^y + \rho_z^2 D^z \quad (5.158)$$

Así, substituyendo (5.152) en las ecuaciones (5.153-5.158) obtenemos

$$D^{tt} = \frac{D^y + D^z m^2}{(1 + m^2)^2} \quad (5.159)$$

$$D^{t\theta} = D^{\theta s} = \frac{(D^y - D^z) m \rho_0 \sin \theta}{(1 + m^2)^{3/2} \rho \sqrt{a}} \quad (5.160)$$

$$D^{t\rho} = D^{\rho s} = -\frac{2(D^y - D^z) m \sqrt{1 + m^2} \rho_0 \sqrt{a} \cos \theta + (D^y + D^z m^2) \rho a'}{2(1 + m^2)^2 a} \quad (5.161)$$

$$D^{\theta\theta} = \frac{\rho^2 D^x (m^2 + 1) \cos^2 \theta + \rho^2 \sin^2 \theta (D^y m^2 + D^z)}{(m^2 + 1) a} \quad (5.162)$$

$$D^{\theta\rho} = D^{\rho\theta} = \frac{\rho_0 \sin \theta}{2(1 + m^2)^2 \rho a^{3/2}} \times \quad (5.163)$$

$$\times \left[2(1 + m^2) (D^x - D^z + D^x m^2 - D^y m^2) \rho_0 \sqrt{a} \cos \theta + (D^z - D^y) m \sqrt{1 + m^2} \rho a' \right]$$

$$D^{\rho\rho} = \frac{1}{4(1 + m^2)^2 \rho a^2} \times \quad (5.164)$$

$$\times \left[-2(1 + m^2) \rho_0^2 a (-D^z - D^y m^2 - D^x (1 + m^2) + (D^x - D^z + D^x m^2) \cos(2\theta)) + \right. \\ \left. + 4(D^y - D^z) m \sqrt{1 + m^2} \rho \rho_0 \sqrt{a} \cos \theta a' + (D^y + D^z m^2) \rho^2 a'^2 \right]$$

A continuación, supondremos que la concentración depende únicamente de la coordenada longitudinal, esto es, $C(t, \theta, \rho) \approx C(t)$ y que

$D^y = D^z = D^x = D_0$. Con esto, estamos listos para plantearnos resolver la ec. (5.119)

$$D^{(0)}(t) = \frac{\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} d\theta d\rho \Delta \mathcal{D}}{\left(\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta d\theta d\rho \right)}$$

El tensor de difusión queda, según (5.116)

$$\mathcal{D} = \frac{4aD_0\rho_0^2}{4(1+m^2)\rho_0^2a + \rho^2a'^2} \quad (5.165)$$

que al integrar en θ y ρ queda

$$\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} d\theta d\rho \Delta \mathcal{D} = \frac{4D_0\sqrt{1+m^2}\pi a^2}{a'^2} \ln \left(\frac{4(1+m^2)a}{4(1+m^2)a + a'^2} \right) \quad (5.166)$$

La integral en el denominador queda

$$\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta d\theta d\rho = -\sqrt{1+m^2}\pi a(t) \quad (5.167)$$

Finalmente, el coeficiente de difusión efectivo queda

$$D^{(0)}(t) = 4D_0 \frac{a}{a'^2} \ln \left(1 + \frac{a'^2}{4(1+m^2)a} \right) \quad (5.168)$$

Si el canal recto tiene un radio constante, $a(t) = 1$, habrá que hacer un límite cuando $a'(t)$ tiende a cero para encontrar la convergencia de la expresión (5.168). Dicha convergencia viene dada por la expresión

$$D^{(0)}(t) = \frac{D_0}{1+m^2} \quad (5.169)$$

5.6. Coeficiente de difusión efectivo para una hélice circular

Construyamos un canal cuyo eje central tenga forma de una hélice circular infinita. Consideremos la parametrización que describe este canal en dirección de $\hat{\mathbf{k}}$, (ver figura 5.7)

$$\mathbf{r}_0(t) = (r_h \cos(\omega t), r_h \sin(\omega t), kt) \quad (5.170)$$

Tomemos la expresión (C.1) para la longitud de arco

$$s(t) = \int_a^t |\mathbf{r}'_0(u)| du$$

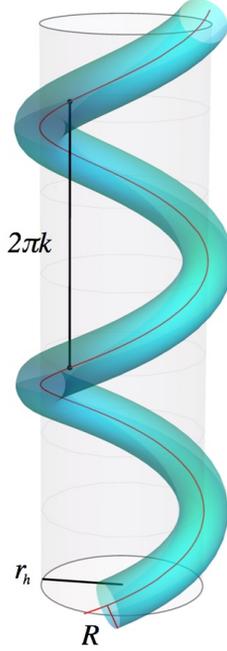


Figura 5.2: Hélice circular de área transversal constante.

con lo que encontramos que

$$s(t) = \sqrt{k^2 + r_h^2 \omega^2} t \quad (5.171)$$

y así

$$\mathbf{r}_0(s) = \left(r_h \cos \left(\omega \frac{s}{\sqrt{k^2 + r_h^2 \omega^2}} \right), r_h \sin \left(\omega \frac{s}{\sqrt{k^2 + r_h^2 \omega^2}} \right), k \frac{s}{\sqrt{k^2 + r_h^2 \omega^2}} \right) \quad (5.172)$$

Para nuestros propósitos, resulta que los parámetros ω y k pueden remplazarse por un parámetro α , donde α se define como

$$\alpha \equiv \frac{r_h \omega}{k} \quad (5.173)$$

Con esto, (5.172) queda

$$\mathbf{r}_0(s) = \left(r_h \cos \left(\frac{\alpha s}{r_h \sqrt{\alpha^2 + 1}} \right), r_h \sin \left(\frac{\alpha s}{r_h \sqrt{\alpha^2 + 1}} \right), \frac{s}{\sqrt{\alpha^2 + 1}} \right) \quad (5.174)$$

Así, calculemos el vector $\hat{\mathbf{t}}$ tangente a la curva

$$\hat{\mathbf{t}} = \mathbf{r}'_0(s)$$

Esto es,

$$\hat{\mathbf{t}} = \frac{\alpha}{\sqrt{1 + \alpha^2}} \left(-\sin \left(\frac{\alpha s}{r_h \sqrt{1 + \alpha^2}} \right), \cos \left(\frac{\alpha s}{r_h \sqrt{1 + \alpha^2}} \right), \frac{1}{\alpha} \right) \quad (5.175)$$

Por otro lado, calculemos el vector $\hat{\mathbf{n}}$ normal a la curva

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds}}{\left| \frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds} \right|}$$

es decir,

$$\hat{\mathbf{n}} = \left(-\cos \left(\alpha \frac{s}{r_h \sqrt{1 + \alpha^2}} \right), -\sin \left(\alpha \frac{s}{r_h \sqrt{1 + \alpha^2}} \right), 0 \right) \quad (5.176)$$

Finalmente, usando (5.14)

$$\hat{\mathbf{b}} = \hat{\mathbf{t}} \times \hat{\mathbf{n}}$$

esto es

$$\hat{\mathbf{b}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} \left(\sin \left(\alpha \frac{s}{r_h \sqrt{1 + \alpha^2}} \right), -\cos \left(\alpha \frac{s}{r_h \sqrt{1 + \alpha^2}} \right), \alpha \right) \quad (5.177)$$

Por otro lado, mediante (5.93), calculemos el determinante Δ de la transformación

$$\Delta = \frac{\rho^2 a^{3/2} R^3(\theta) \cos \theta}{\rho_0^3} \kappa(s) - \frac{\rho a R^2(\theta)}{\rho_0^2}$$

por ello

$$\Delta = \frac{a\rho(\sqrt{a}\kappa\rho \cos \theta - \rho_0)}{\rho_0^3} \quad (5.178)$$

donde se consideró $R(\theta) = 1$.

Considerando la ec. (5.26)

$$\mathbf{r}(s, \rho, \theta) = \mathbf{r}_0(s) + \frac{\rho}{\rho_0} R(\theta, s) \left(\cos \theta \hat{\mathbf{n}} + \sin \theta \hat{\mathbf{b}} \right)$$

que nos sirve para calcular

$$\begin{aligned}
 x_s &= \frac{\sqrt{a}\rho \left(\cos \theta (\tau - \alpha\kappa) \cos \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right) + \sqrt{\alpha^2+1} \tau \sin \theta \sin \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right) \right)}{\sqrt{\alpha^2+1}\rho_0} + \\
 &+ \frac{\alpha\rho_0 \cos \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right)}{\sqrt{\alpha^2+1}\rho_0} \\
 x_\theta &= \frac{\sqrt{a}\rho}{\rho_0} \left(\sin(\theta) \sin \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right) + \frac{\cos \theta}{\sqrt{\alpha^2+1}} \cos \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right) \right) \\
 x_\rho &= \frac{\sqrt{a}}{\rho_0} \left(\frac{\sin(\theta)}{\sqrt{\alpha^2+1}} \cos \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right) - \cos \theta \sin \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right) \right) \\
 y_s &= \frac{\sqrt{a}\rho \left(\cos \theta (\alpha\kappa - \tau) \sin \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right) + \sqrt{\alpha^2+1} \tau \sin \theta \cos \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right) \right)}{\sqrt{\alpha^2+1}\rho_0} + \\
 &- \frac{\alpha\rho_0 \sin \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right)}{\sqrt{\alpha^2+1}\rho_0} \\
 y_\theta &= \frac{\sqrt{a}\rho}{\rho_0} \left(\sin \theta \cos \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right) - \frac{\cos \theta}{\sqrt{\alpha^2+1}} \sin \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right) \right) \\
 y_\rho &= \frac{\sqrt{a}}{\rho_0} \left(-\cos \theta \cos \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right) - \frac{\sin \theta}{\sqrt{\alpha^2+1}} \sin \left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}} \right) \right) \\
 z_s &= \frac{\rho_0 - \sqrt{a}\rho \cos \theta (\alpha\tau + \kappa)}{\sqrt{\alpha^2+1}\rho_0} \\
 z_\theta &= -\frac{\sqrt{a}\alpha\rho \cos \theta}{\sqrt{\alpha^2+1}\rho_0} \\
 z_\rho &= -\frac{\sqrt{a}\alpha \sin(\theta)}{\sqrt{\alpha^2+1}\rho_0}
 \end{aligned}$$

Con todo lo anterior, podemos calcular las ecs. (5.63), (5.66), (5.69),

(5.71), (5.72), (5.73), (5.75), (5.76) y (5.77)

$$\begin{aligned}
 S_x &= \frac{\alpha \rho_0 \cos\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right)}{\sqrt{\alpha^2+1}(\rho_0 - \sqrt{a}\kappa\rho \cos\theta)} \\
 S_y &= \frac{\alpha \rho_0 \sin\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right)}{\sqrt{\alpha^2+1}(\sqrt{a}\kappa\rho \cos\theta - \rho_0)} \\
 S_z &= \frac{\rho_0}{\sqrt{\alpha^2+1}(\rho_0 - \sqrt{a}\kappa\rho \cos\theta)} \\
 \theta_x &= \frac{\rho_0}{\sqrt{a}(\alpha^2+1)\rho(\sqrt{a}\kappa\rho \cos\theta - \rho_0)} \times \\
 &\quad \times \left(\frac{1}{2}\sqrt{a}\rho \left(\sqrt{\alpha^2+1} \cos\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) (2\alpha\tau + \kappa \cos 2\theta + \kappa) + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + (\alpha^2+1)\kappa \sin 2\theta \sin\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) \right) + \right. \\
 &\quad \left. - \rho_0 \left((\alpha^2+1) \sin\theta \sin\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \sqrt{\alpha^2+1} \cos\theta \cos\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) \right) \right) \\
 \theta_y &= -\frac{\rho_0}{\sqrt{a}(\alpha^2+1)\rho(\sqrt{a}\kappa\rho \cos\theta - \rho_0)} \times \\
 &\quad \times \left(\sqrt{a}\rho \left(\sqrt{\alpha^2+1} \cos^2(\theta)(\alpha\tau + \kappa) \sin\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - (\alpha^2+1)\kappa \sin\theta \cos\theta \cos\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) + \alpha\sqrt{\alpha^2+1}\tau \sin^2\theta \sin\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) \right) \right. \\
 &\quad \left. + \rho_0 \left((\alpha^2+1) \sin\theta \cos\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) - \sqrt{\alpha^2+1} \cos\theta \sin\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) \right) \right) \\
 \theta_z &= -\frac{\rho_0(\sqrt{a}\rho(\alpha\kappa \cos 2\theta + \alpha\kappa - 2\tau) - 2\alpha\rho_0 \cos\theta)}{2\sqrt{a}\sqrt{\alpha^2+1}\rho(\sqrt{a}\kappa\rho \cos\theta - \rho_0)} \\
 \rho_x &= -\frac{\rho_0 \left((\alpha^2+1) \cos\theta \sin\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) - \sqrt{\alpha^2+1} \sin\theta \cos\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) \right)}{\sqrt{a}(\alpha^2+1)} \\
 \rho_y &= -\frac{\rho_0 \left(\sqrt{\alpha^2+1} \sin\theta \sin\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) + (\alpha^2+1) \cos\theta \cos\left(\frac{\alpha s}{\sqrt{\alpha^2+1}}\right) \right)}{\sqrt{a}(\alpha^2+1)} \\
 \rho_z &= -\frac{\alpha\rho_0 \sin\theta}{\sqrt{a}\sqrt{\alpha^2+1}}
 \end{aligned}$$

Deseamos calcular el tensor de difusión en SNC, expresión (5.110)

$$D^{\mu\nu} = D^{ab} \frac{\partial x^\mu}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial x^\nu}{\partial \tilde{x}^b}$$

esto es

$$\begin{aligned} D^{ss} &= s_x^2 D^x + s_y^2 D^y + s_z^2 D^z \\ D^{s\theta} &= s_x \theta_x D^x + s_y \theta_y D^y + s_z \theta_z D^z \\ D^{s\rho} &= s_x \rho_x D^x + s_y \rho_y D^y + s_z \rho_z D^z \\ D^{\theta\theta} &= \theta_x^2 D^x + \theta_y^2 D^y + \theta_z^2 D^z \\ D^{\theta\rho} &= \theta_x \rho_x D^x + \theta_y \rho_y D^y + \theta_z \rho_z D^z \\ D^{\rho\rho} &= \rho_x^2 D^x + \rho_y^2 D^y + \rho_z^2 D^z \end{aligned}$$

Si consideramos que $D^x = D^y = Dz$, obtenemos

$$\begin{aligned} D^{ss} &= \frac{D^x \rho_0^2}{(\rho_0 - \sqrt{a} \kappa \rho \cos \theta)^2} \\ D^{s\theta} &= -\frac{D^x \rho_0^2 \tau}{(\rho_0 - \sqrt{a} \kappa \rho \cos \theta)^2} \\ D^{s\rho} &= 0 \\ D^{\theta\theta} &= \frac{D^x \rho_0^2 (a \rho^2 (\kappa^2 \cos 2\theta + \kappa^2 + 2\tau^2) - 4\sqrt{a} \kappa \rho_0 \rho \cos \theta + 2\rho_0^2)}{2a \rho^2 (\rho_0 - \sqrt{a} \kappa \rho \cos \theta)^2} \\ D^{\theta\rho} &= 0 \\ D^{\rho\rho} &= \frac{D^x \rho_0^2}{a} \end{aligned}$$

A continuación, supondremos que la concentración depende únicamente de la coordenada longitudinal. Con esto, estamos listos para plantearnos resolver la ec. (5.119)

$$D^{(0)}(s) = \frac{\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} d\theta d\rho \Delta \mathcal{D}}{\left(\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} \Delta d\theta d\rho \right)}$$

donde, el denominador queda

$$\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=1} \Delta d\theta d\rho = -\pi a \quad (5.179)$$

Con respecto al numerador de la expresión (5.119), ec (5.116), se obtiene

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &= \frac{1}{D^{\theta\theta} D^{\rho\rho} - D^{\rho\theta} D^{\theta\rho}} \left(D^{ss} D^{\theta\theta} D^{\rho\rho} - D^{ss} D^{\rho\theta} D^{\theta\rho} + D^{s\theta} D^{\theta\rho} D^{\rho s} + \right. \\ &\quad \left. - D^{s\theta} D^{\rho\rho} D^{\theta s} - D^{s\rho} D^{\theta\theta} D^{\rho s} + D^{s\rho} D^{\rho\theta} D^{\theta s} \right) \\ &= \frac{2D^x}{\kappa^2 \rho^2 \cos 2\theta - 4\kappa\rho \cos \theta + \kappa^2 \rho^2 + 2\rho^2 \tau^2 + 2} \end{aligned}$$

Esto es

$$\mathcal{D}(\kappa, \tau) = \frac{2D^x}{\kappa^2 \rho^2 \cos 2\theta - 4\kappa\rho \cos \theta + \kappa^2 \rho^2 + 2\rho^2 \tau^2 + 2} \quad (5.180)$$

por lo que

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{D}(\kappa, \tau) &= \frac{2aD^x \rho(-\rho_0 + \sqrt{a}\kappa\rho \cos \theta)}{\rho_0 (a\kappa^2 \rho^2 + 2\rho_0^2 + 2a\rho^2 \tau^2 - 4\sqrt{a}\kappa\rho\rho_0 \cos \theta + a\kappa^2 \rho^2 \cos(2\theta))} \\ &\equiv \frac{\mathcal{D}_a}{\mathcal{D}_b} \end{aligned} \quad (5.181)$$

que es la expresión que deseamos integrar. Para poner la expresión (5.181) en términos de la variable α , usamos⁸

$$\kappa = \frac{\alpha^2}{r_h (1 + \alpha^2)} \quad (5.182)$$

y

$$\tau = -\frac{\alpha}{r_h (1 + \alpha^2)} \quad (5.183)$$

⁸ donde se ha hecho uso de las expresiones (D.1) y (D.11).

$$\begin{aligned} \kappa &= \left| \frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds} \right| \\ \tau &= -\mathbf{n} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} \end{aligned}$$

que nos dice que $\alpha = \kappa/\tau$. Así, llegamos a

$$\Delta\mathcal{D}(\alpha, \kappa) = \frac{2aD^x\rho(-\rho_0 + \sqrt{a}\kappa\rho\cos\theta)}{\rho_0(a\kappa^2\rho^2 + \frac{1}{\alpha}2a\kappa^2\rho^2 + 2\rho_0^2 - 4\sqrt{a}\kappa\rho\rho_0\cos\theta + a\kappa^2\cos(2\theta))} \quad (5.184)$$

o también, si sustituimos directamente (5.182) y (5.183) en (5.181) obtenemos

$$\Delta\mathcal{D}(\alpha, r_h) = \frac{2aD_0r_h\alpha_p^2\rho(r_h\alpha_p^2\rho_0 - \sqrt{a}\alpha^2\rho\cos\theta)}{\rho_0(a\alpha(1 + \alpha_p^2)\rho^2 + 2r_h^2\alpha_p^4\rho_0^2 - 4\sqrt{a}r_h\alpha^2\alpha_p^2\rho\rho_0\cos\theta + a\alpha^4\rho^2\cos(2\theta))} \quad (5.185)$$

con

$$\alpha_p^2 \equiv 1 + \alpha^2 \quad (5.186)$$

Las expresiones (5.181), (5.184) y (5.185) no se pueden integrar por lo que se recurrirá a aproximaciones.

5.6.1. Aproximación a κ 's y τ 's pequeñas con a constante

Haremos un desarrollo en serie de Taylor para la curvatura κ y la torsión τ . Tomando la expresión (5.181)

$$\Delta\mathcal{D}(\kappa, \tau) = \frac{2aD^x\rho(-\rho_0 + \sqrt{a}\kappa\rho\cos\theta)}{\rho_0(a\kappa^2\rho^2 + 2\rho_0^2 + 2a\rho^2\tau^2 - 4\sqrt{a}\kappa\rho\rho_0\cos\theta + a\kappa^2\rho^2\cos(2\theta))}$$

Orden 0 en κ y orden 0 en τ

$$D^{(0)}(s, \kappa, \tau)^{(0,0)} = \frac{\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=1} (-D^x\rho + \dots) d\theta d\rho}{-\pi} = D^x \quad (5.187)$$

Vemos que a primer orden, recuperamos el canal recto. Los desarrollos en serie de orden (1,0), (0,1) y (1,1) dan el mismo resultado⁹.

⁹La notación se lee como: el primer término en el paréntesis es el orden del desarrollo en κ , el segundo término del paréntesis es el desarrollo en τ , (κ, τ) .

Orden 2 en κ y orden 0 en τ

$$\begin{aligned}
 D^{(0)}(s, \kappa, \tau)^{(2,0)} &= \frac{D^x}{-\pi} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=1} ((-\rho + O(\tau^1)) + \kappa(-\rho^2 \sqrt{a} \cos(\theta) + O(\tau^1)) + \\
 &+ a\kappa^2 \left(\frac{1}{2} \rho^3 (-4 \cos^2(\theta) + \cos(2\theta) + 1) + O(\tau^1) \right) + O(\kappa^3)) d\theta d\rho \\
 &= D^x + \frac{D^x}{4} a\kappa^2 + \dots
 \end{aligned}$$

Esto es

$$D^{(0)}(s, \kappa, \tau)^{(2,0)} = D^x + \frac{D^x}{4} a\kappa^2 + \dots \quad (5.188)$$

El desarrollo en serie de orden (2,1), da el mismo resultado.

Orden 1 en κ y orden 2 en τ

$$D^{(0)}(s, \kappa, \tau)^{(1,2)} = D^x - \frac{D^x}{2} a\tau^2 + \dots \quad (5.189)$$

Orden 2 en κ y orden 2 en τ

$$D^{(0)}(s, \kappa, \tau)^{(2,2)} = \kappa^2 \left(\frac{aD^x}{4} - a^2 D^x \tau^2 \right) - \frac{1}{2} a D^x \tau^2 + D^x + \dots \quad (5.190)$$

Los desarrollos en serie de orden (3,2), (2,3) y (3,3) dan el mismo resultado.

Orden 4 en κ y orden 0 en τ

$$D^{(0)}(s, \kappa, \tau)^{(4,0)} = D^x + \frac{D^x}{4} a\kappa^2 + \frac{D^x}{8} a^2 \kappa^4 + \dots \quad (5.191)$$

Los desarrollos de orden (4,1) y (5,1) dan el mismo resultado.

Orden 4 en κ y orden 2 en τ

$$D^{(0)}(s, \kappa, \tau)^{(4,2)} = D^x + \kappa^2 \left(\frac{aD^x}{4} - a^2 D^x \tau^2 \right) + \kappa^4 \left(\frac{a^2 D^x}{8} - \frac{45}{32} a^3 D^x \tau^2 \right) + \frac{1}{2} a D^x \tau^2 + \dots \quad (5.192)$$

Los desarrollos de orden (4,3), (5,2) y (5,3) dan el mismo resultado.

Orden 4 en κ y orden 4 en τ

$$D^{(0)}(s, \kappa, \tau)^{(4,4)} = D^x + \frac{1}{3} a^2 D^x \tau^4 + \kappa^2 \left(\frac{15}{8} a^3 D^x \tau^4 - a^2 D^x \tau^2 + \frac{aD^x}{4} \right) + \kappa^4 \left(\frac{21}{4} a^4 D^x \tau^4 - \frac{45}{32} a^3 D^x \tau^2 + \frac{a^2 D^x}{8} \right) - \frac{1}{2} a D^x \tau^2 + \dots \quad (5.193)$$

Los desarrollos de orden (5,4) y (5,5) dan el mismo resultado.

Orden 6 en κ y orden 0 en τ

con $a = 1$

$$D^{(0)}(s, \kappa, \tau)^{(6,0)} = D^x \left(1 + \frac{1}{4} \kappa^2 + \frac{1}{8} \kappa^4 + \frac{5}{64} \kappa^6 + \dots \right) \quad (5.194)$$

que es la expresión obtenida por Ogawa[53], la cual tiende a

$$D^{(0)}(s, \kappa, \tau)^{(6,0)} = 2D^x \frac{1 - \sqrt{1 - \kappa^2}}{\kappa^2} \quad (5.195)$$

si $\kappa < 1$.

Orden 6 en κ y orden 6 en τ

$$\begin{aligned}
 D^{(0)}(s, \kappa, \tau)^{(6,6)} &= D^x + \frac{1}{3}a^2 D^x \tau^4 + \kappa^2 \left(\frac{15}{8}a^3 D^x \tau^4 - a^2 D^x \tau^2 + \frac{aD^x}{4} \right) + \\
 &+ \kappa^4 \left(\frac{21}{4}a^4 D^x \tau^4 - \frac{45}{32}a^3 D^x \tau^2 + \frac{a^2 D^x}{8} \right) - \frac{1}{2}aD^x \tau^2 \\
 &+ \kappa^6 \left(-\frac{165}{4}a^6 D^x \tau^6 + \frac{175}{16}a^5 D^x \tau^4 - \frac{7}{4}a^4 D^x \tau^2 + \frac{5a^3 D^x}{64} \right) + \dots
 \end{aligned} \tag{5.196}$$

que es una expresión que considera torsiones y curvaturas. La expresión (5.196) es más general que la dada por Ogawa ya que este desprecia de antemano la contribución dada por la torsión τ que podría dar una contribución significativa pues, como lo dicen las ecs. (5.182) y (5.183), tienen una dependencia $\kappa = \alpha\tau$.

Por otro lado, cuando hacemos $r_h = 1$ en las expresiones (5.182) y (5.183), κ y τ dependen sólo de α por lo que podríamos escribir una en término de la otra, es decir, $\tau = \tau(\kappa)$. Para ello, tomamos (5.182) y resolvemos para α , lo que nos da

$$\alpha = \frac{\sqrt{\kappa}}{\sqrt{1 - \kappa}} \tag{5.197}$$

Sustituyendo (5.197) en (5.183), obtenemos

$$\tau = -\sqrt{\kappa - \kappa^2} \tag{5.198}$$

Si sustituimos (5.198) en (5.181) y esta a su vez en (5.119), para después resolver las integrales de forma numérica para varios valores de κ , podemos comparar estos resultados con los obtenidos en (5.196), que es una expresión analítica del coeficiente de difusión efectivo¹⁰. Podemos ilustrar estos resultados mediante la Gáfica 5.3, donde podemos notar que la aproximación es buena para valores pequeños de κ , como era de esperarse.

¹⁰No olvidemos también sustituir el valor de $\tau(\kappa)$ en la serie (5.196). Consideraremos dicha serie hasta potencias cuartas. Cabe resaltar también que a , D_0 y ρ_0 son considerados iguales a la unidad.

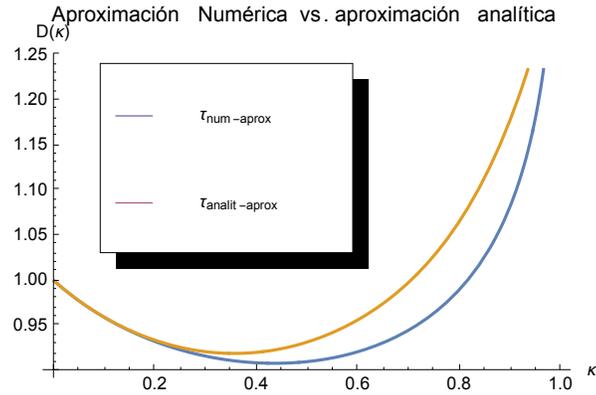


Figura 5.3:

Solución a la ecuación de Fick-Jacobs generalizada para un canal helicoidal de área transversal circular constante

Si consideramos la expresión (5.106)

$$\frac{\partial \mathcal{P}(\chi, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \chi} D(\chi) \mathcal{A}(\chi) \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{\mathcal{P}(\chi, t)}{\mathcal{A}(\chi)} \right)$$

y consideremos la expresión (5.196), podremos resolver de manera exacta la ecuación diferencial. Esto es posible ya que el coeficiente dado por (5.196) no depende de la coordenada χ , esto es, $D^{(0)}(s, \kappa, \tau) \equiv D_{eff}$. Por ello, podemos reescribir (5.106) como

$$\frac{\partial \mathcal{P}(\chi, t)}{\partial t} = D_{eff} \frac{\partial^2 \mathcal{P}(\chi, t)}{\partial \chi^2}$$

Como podemos ver, esta expresión tiene la forma usual de la ecuación de difusión, ec. (1.4), salvo que en lugar de tener el coeficiente de difusión del medio, D_0 , tiene la difusión efectiva D_{eff} . Imponiendo como condición que la difusión comienza en un punto como se hace para la difusión sin

confinamiento, obtenemos que la solución es

$$\mathcal{P}(\chi, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t D_{eff}}} e^{\frac{-\chi^2}{4t D_{eff}}} \quad (5.199)$$

Si graficamos esta expresión comparandola con el caso cuando la difusión es libre¹¹, tenemos las Figuras 5.4, 5.5 y 5.6.

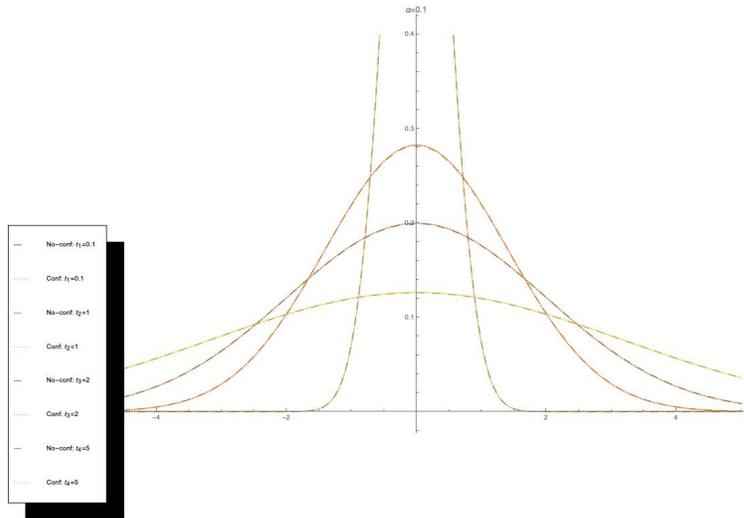


Figura 5.4: Gráfica de la expresión (5.199) para $\alpha = 0.1$.

Vemos que para el caso de $\alpha = 0.1$, Figura 5.4, la difusión bajo confinamiento y sin confinar son casi las mismas. Conforme α va creciendo, podemos observar el efecto que tiene la existencia de las paredes entrópicas en los tiempos de difusión, como nos muestran las Figuras 5.5 y 5.6.

5.6.2. Aproximación con dependencia en κ 's y τ 's pequeñas con a variable

Cuando el área es variable, las expresiones dadas por (5.88) pueden ser reescritas por un término que no depende del $a'(s)$ mas uno que sí, esto es

$$\partial_s^{a(\text{var})} \tilde{x}_i = \partial_s^{a(\text{const})} \tilde{x}_i + B_i a' \quad (5.200)$$

¹¹Para $D_0 = 1$ y área transversal $a = 1$, donde hemos graficado a 5 tiempos diferentes.

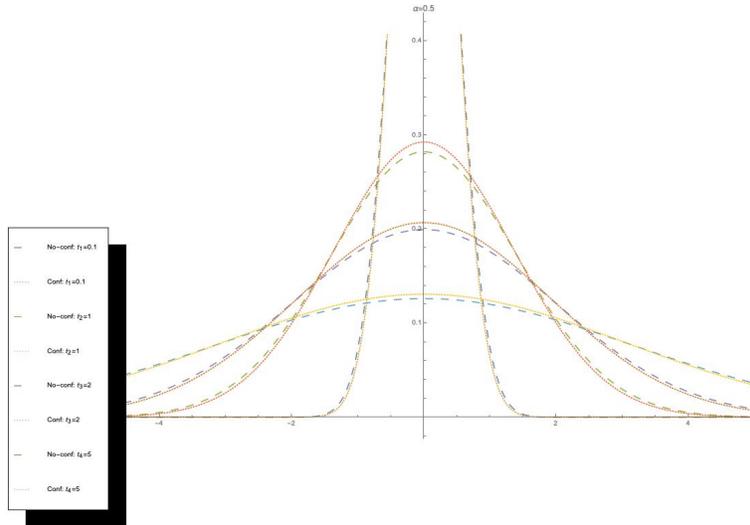


Figura 5.5: Gráfica de la expresión (5.199) para $\alpha = 0.5$.

donde

$$B_i = \frac{1}{2\sqrt{a}}(n_i \cos \theta + b_i \sin \theta) \quad (5.201)$$

Con esto, retomamos los cálculos de la sección anterior y les agregamos los términos dados por a' , repitiendo el mismo procedimiento. Esto se ve reflejado en que el tensor de difusión será la suma de los términos calculados anteriormente más términos en a' lineales y cuadráticos. Esto es explícitamente

$$\begin{aligned} D_{a(\text{var})}^{ss} &= D^{ss} \\ D_{a(\text{var})}^{s\theta} &= D^{s\theta} \\ D_{a(\text{var})}^{s\rho} &= D^{s\rho} + a' C_{s\rho} \\ D_{a(\text{var})}^{\theta\theta} &= D^{\theta\theta} \\ D_{a(\text{var})}^{\theta\rho} &= D^{\theta\rho} + a' C_{\theta\rho} \\ D_{a(\text{var})}^{\rho\rho} &= D^{\rho\rho} + a' C_{1\rho\rho} + a'^2 C_{2\rho\rho} \end{aligned}$$

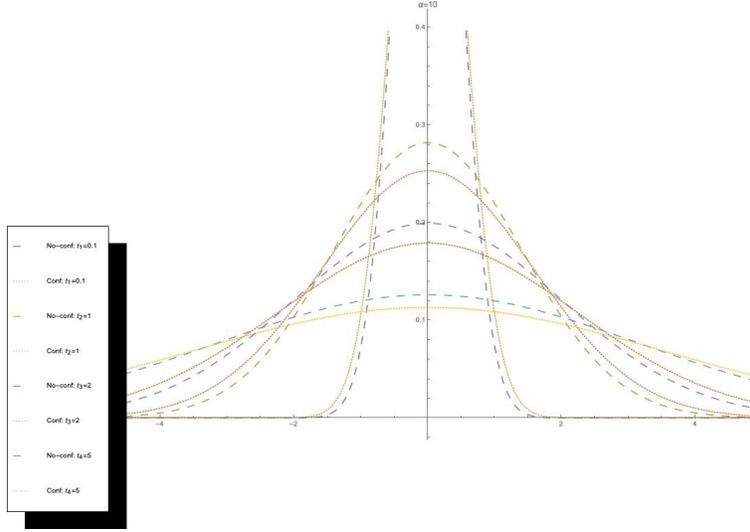


Figura 5.6: Gráfica de la expresión (5.199) para $\alpha = 10$.

donde la $C_{\mu\nu}$ dependen de B_i . De la expresión (5.119), obtenemos una razón de polinomios de a'

$$\mathcal{D} = \frac{\mathcal{D}_a^{(\text{var})}}{\mathcal{D}_b^{(\text{var})}} = \frac{d_1 + a'd_2 + a'^2d_3}{d_4 + a'd_5 + a'^2d_6}$$

donde, como $d_2 = d_3 = d_5 = 0$

$$\mathcal{D} = \frac{d_1}{d_4 + a'^2d_6},$$

y

$$d_1 = \frac{D_0^3}{a^2\rho^2(1 - \sqrt{a}\kappa\rho\cos(\theta))^2} \quad (5.202)$$

$$d_4 = \frac{D_0^2(a\kappa^2\rho^2\cos(2\theta) - 4\sqrt{a}\kappa\rho\cos(\theta) + a\kappa^2\rho^2 + 2a\rho^2\tau^2 + 2)}{2a^2\rho^2(1 - \sqrt{a}\kappa\rho\cos(\theta))^2} \quad (5.203)$$

$$d_6 = \frac{D_0^2}{4a^3(1 - \sqrt{a}\kappa\rho\cos(\theta))^2} \quad (5.204)$$

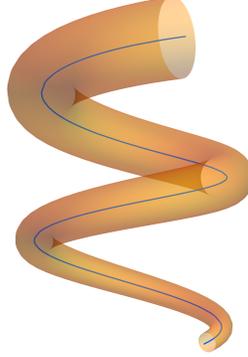


Figura 5.7: Hélice circular de área transversal variable.

Consideremos la ecuación (5.119), que para el caso de a constante, obtuvimos (5.181)

$$\mathcal{D}^{(a'=0)} = \frac{\mathcal{D}_a}{\mathcal{D}_b} \equiv \mathcal{D}_0$$

Entonces, los términos $\mathcal{O}_i(a, a')$ que contribuyen a la expresión (5.181), debido a a' , pueden introducirse como

$$\mathcal{D} = \frac{\mathcal{D}_a^{(\text{var})}}{\mathcal{D}_b^{(\text{var})}} = \frac{\mathcal{D}_a + \mathcal{O}_a(a, a')}{\mathcal{D}_b + \mathcal{O}_b(a, a')} \quad (5.205)$$

esto es

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_0 \frac{\left(1 + \frac{\mathcal{O}_a(a, a')}{\mathcal{D}_a}\right)}{\left(1 + \frac{\mathcal{O}_b(a, a')}{\mathcal{D}_b}\right)} \quad (5.206)$$

Haciendo un desarrollo de serie de Taylor en la expresión (5.206)

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_0 + a'^2 \mathcal{D}_1 + a'^4 \mathcal{D}_2 + \dots \quad (5.207)$$

con

$$\mathcal{D}_1 = \mathcal{D}_0 \frac{d_6}{\mathcal{D}_b} \quad (5.208)$$

y

$$\mathcal{D}_2 = \mathcal{D}_0 \frac{d_6^2}{\mathcal{D}_b^2} \quad (5.209)$$

Se busca integrar la expresión (5.207) conforme a la ec. (5.119). Para ello, se hará otro desarrollo en serie de Taylor para κ y τ pequeñas.

$$\begin{aligned}
 D^{(0)} &= D_0 \left[1 - \frac{1}{4}a^3\tau^6 + \frac{1}{3}a^2\tau^4 - \frac{3}{4}aa'^4\tau^2 + \frac{2}{3}aa'^2\tau^2 - \frac{1}{2}a\tau^2 + \frac{a'^4}{3} - \frac{a'^2}{2} + \right. \\
 &+ \kappa^2 \left(-\frac{14}{5}a^4\tau^6 + \frac{15}{8}a^3\tau^4 - \frac{42}{5}a^2a'^4\tau^2 + \frac{15}{4}a^2a'^2\tau^2 - a^2\tau^2 + \frac{15}{8}aa'^4 \right. \\
 &\left. \left. - aa'^2 + \frac{a}{4} \right) + \dots \right] \quad (5.210)
 \end{aligned}$$

Si $a = R^2$ la expresión (5.210) puede reescribirse como

$$\begin{aligned}
 D^{(0)} &= D_0 \left[2 \frac{1 - \sqrt{1 - (R\kappa)^2}}{(R\kappa)^2} - 1 - \kappa^2 R^2 R'^2 - \kappa^2 \tau^2 R^4 + \right. \\
 &+ \left. \frac{\ln(1 + (R\tau)^2 + R'^2)}{(R\tau)^2 + R'^2} + \mathcal{O}_1((\kappa R)^n R'^m) + \mathcal{O}_1((\kappa R)^n (\tau R)^m) + \dots \right] \quad (5.211)
 \end{aligned}$$

con $n, m \geq 4$. Si despreciamos la curvatura en (5.211) obtenemos una expresión

$$D^{(0)} \cong D_0 \frac{\ln(1 + R'^2 + (R\tau)^2)}{R'^2 + (R\tau)^2} \quad (5.212)$$

Considerando lo reportado en la literatura para un tubo con línea media recta[52], la ec. (5.212) muestra que hay una contribución dada por la línea media del canal y la torsión.

Capítulo 6

Resumen y conclusiones

■ Con la intención de contar con un enfoque moderno y general de la ecuación de difusión, se extiende esta a un lenguaje covariante, ec. (3.11)

$$\dot{C} = \partial_\mu [D^{\mu\nu} \partial_\nu C] + \Gamma_{\lambda\mu}^\mu [D^{\lambda\nu} \partial_\nu C]$$

■ En años recientes se ha establecido un nuevo enfoque al estudio de la difusión de partículas puntuales en geometrías confinadas. Este nuevo método se basa en el posicionamiento de un marco de referencia en el eje del canal para dos y tres dimensiones. Como consecuencia de esta transformación de coordenadas, la ecuación de Fick se transforma en una ecuación de Fick-Jacobs generalizada, ecs. (4.94) y (5.119)

$$D_{2D}^{(0)}(t) = \frac{a l D^x D^y}{\left(\frac{la}{\rho_2}(\rho_1 + \rho_2) - \frac{a^2 f''}{2\rho_2 l^2}(\rho_2^2 - \rho_1^2)\right)} \left[-\frac{\delta}{2\gamma} \ln \left| \frac{\alpha + 2\beta + \gamma}{\alpha - 2\beta \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right) + \gamma \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^2} \right| + \frac{\gamma + \beta\delta}{\gamma\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \left(\arctan \frac{\gamma + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} - \arctan \frac{-\gamma \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right) + \beta}{\sqrt{\alpha\gamma - \beta^2}} \right) \right]$$

y

$$D_{3D}^{(0)}(\chi) \cong \frac{\int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \int_{\rho=0}^{\rho=\rho_0} d\theta d\rho \Delta \mathcal{D}}{\mathcal{A}(\chi)}$$

■ La expresión del coeficiente de difusión efectivo dependiente de la posición deducido para canales bidimensionales que tienen línea media recta reproduce el caso asimétrico obtenido por Pineda y Dagdug, ecuación (4.104), que es la generalización del caso simétrico obtenido por Kalinay y Percus[51].

$$D^{(0)}(t) = D_0 \frac{\arctan(a'_2) - \arctan(a'_1)}{w'}$$

■ Se estudió un canal helicoidal tridimensional de sección transversal circular. Se analizaron los casos cuando la sección transversal se mantenía constante a lo largo del eje del canal y el caso cuando esta variaba. En el caso límite cuando el área transversal no varía, se obtiene la expresión reportada en la literatura por Ogawa[53]. Sin embargo, se obtiene una expresión más general en función de κ y τ pequeñas, ec. (5.196)

$$\begin{aligned} D^{(0)}(s, \kappa, \tau) &= D^x + \frac{1}{3}a^2 D^x \tau^4 + \kappa^2 \left(\frac{15}{8}a^3 D^x \tau^4 - a^2 D^x \tau^2 + \frac{a D^x}{4} \right) + \\ &+ \kappa^4 \left(\frac{21}{4}a^4 D^x \tau^4 - \frac{45}{32}a^3 D^x \tau^2 + \frac{a^2 D^x}{8} \right) - \frac{1}{2}a D^x \tau^2 \\ &+ \kappa^6 \left(-\frac{165}{4}a^6 D^x \tau^6 + \frac{175}{16}a^5 D^x \tau^4 - \frac{7}{4}a^4 D^x \tau^2 + \frac{5a^3 D^x}{64} \right) + \dots \end{aligned}$$

A su vez, cuando el área de la sección transversal varía, se obtuvo una expresión más general que en caso límite se reduce a (5.196),

$$\begin{aligned} D^{(0)} &\cong D_0 \left[2 \frac{1 - \sqrt{1 - (R\kappa)^2}}{(R\kappa)^2} - 1 - \kappa^2 R^2 R'^2 - \kappa^2 \tau^2 R^4 + \right. \\ &\left. + \frac{\ln(1 + (R\tau)^2 + R'^2)}{(R\tau)^2 + R'^2} + \mathcal{O}_1((\kappa R)^n R'^m) + \mathcal{O}_1((\kappa R)^n (\tau R)^m) + \dots \right] \end{aligned}$$

que es la expresión (5.211).

- Se obtiene una solución analítica para la difusión en una canal helicoidal con área transversal constante para κ y τ pequeñas.
- Al colocar el marco de referencia en el eje del canal y proyectando la geometría del plano transversal en una dimensión, se posee una tecnología útil para calcular el coeficiente de difusión efectivo. En principio, uno puede extender este tratamiento a más curvas parametrizadas que las que fueron consideradas en este trabajo.

Apéndice **A**

Coeficiente de difusión para sistemas confinados

En el Capítulo 2.1, se hace una breve exposición de cómo Zwanzig obtiene la ecuación (2.9). En este apartado, haremos un análisis detallado para la obtención de dicha expresión.

A.1. Derivación de la ecuación de Fick-Jacobs a partir de la ecuación de Smoluchowki

Supongamos que estamos inmersos dentro de un potencial U , que para los alcances de este trabajo, consideraremos que el potencial U es dependiente de las posiciones en el plano, $U(x, y)$. Supongamos que la difusión puede ocurrir dentro de la región $y \in [-y_0, y_0]$ y $x \in (-\infty, \infty)$ además de que impondremos una condición de ausencia de flujo en las fronteras de la región.

La descripción del comportamiento de la concentración en esta región vendría dada por la ecuación de Smoluchowski, ec. (1.34), para el caso bidimensional

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} C(x, y, t) &= D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} C(x, y, t) \\ &+ D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U(x, y)} C(x, y, t) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Integremos la expresión en la componente y de $-y_0$ a y_0 .

$$\begin{aligned} \int_{-y_0}^{y_0} dy \frac{\partial}{\partial t} C(x, y, t) &= \int_{-y_0}^{y_0} dy D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} C(x, y, t) + \\ &+ \int_{-y_0}^{y_0} dy D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U(x, y)} C(x, y, t) \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Tomemos el segundo término del lado derecho de la expresión (A.2)

$$\int_{-y_0}^{y_0} D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U} C(x, y, t) dy = D e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U} C(x, y, t) \Big|_{-y_0}^{y_0} \quad (\text{A.3})$$

pero el flujo J viene dado por la expresión (1.32),

$$J = -D e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} C(x, y, t) \quad (\text{A.4})$$

por lo que

$$\int_{-y_0}^{y_0} D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U} C(x, y, t) dy = J(x, y = y_0, t) - J(x, y = -y_0, t) = 0 \quad (\text{A.5})$$

por la condición de frontera que hemos impuesto en nuestra región. Por lo anterior, la expresión (A.2) queda

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-y_0}^{y_0} C(x, y, t) dy = \int_{-y_0}^{y_0} D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} C(x, y, t) dy \quad (\text{A.6})$$

A continuación, definamos la concentración local

$$G(x, t) \equiv \int_{-y_0}^{y_0} C(x, y, t) dy \quad (\text{A.7})$$

$G(x, t)$ nos dice el número de partículas por unidad de longitud, esto es, nos dice la densidad de partículas que hay en cada punto del eje x , sin embargo, no dice cómo estas partículas están distribuidas en el eje y . Con esto, (A.6) queda

$$\frac{\partial}{\partial t} G(x, t) = \int_{-y_0}^{y_0} D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} C(x, y, t) dy \quad (\text{A.8})$$

Supongamos que la concentración está **aproximadamente** en equilibrio local en la dirección de la coordenada y . Definamos una función A dependiente de la coordenada x para la energía libre

$$e^{-\beta A(x)} = \int_{-y_0}^{y_0} e^{-\beta U(x,y)} dy \quad (\text{A.9})$$

La función de distribución de equilibrio local en y dado x , es

$$\rho(y; x) = \frac{e^{-\beta U(x,y)}}{e^{-\beta A(x)}} \quad (\text{A.10})$$

que por construcción está normalizado a la unidad¹. Esta función de equilibrio local $\rho(y; x)$ nos dice cómo se van a distribuir las partículas en el equilibrio en la coordenada y debido a que existe el potencial² $U(x, y)$. Con esto, la aproximación al equilibrio local toma la forma

$$C(x, y, t) \cong G(x, t)\rho(y; x) \quad (\text{A.11})$$

donde la igualdad en (A.11) no se da porque se ha supuesto que la

1

$$\int \rho(y; x) dy = \int \frac{e^{-\beta U(x,y)}}{e^{-\beta A(x)}} dy = \frac{1}{e^{-\beta A(x)}} \int e^{-\beta U(x,y)} dy = \frac{1}{e^{-\beta A(x)}} e^{-\beta A(x)} = 1$$

² Podemos pensar que el potencial $U(x, y)$ es separable como $U(x, y) = A(x) + B(y)$, por lo que

$$\int_{-y_0}^{y_0} e^{-\beta U(x,y)} dy = \int_{-y_0}^{y_0} e^{-\beta[A(x)+B(y)]} dy = e^{-\beta A(x)} \int_{-y_0}^{y_0} e^{-\beta B(y)} dy = e^{-\beta A(x)}$$

si

$$\int_{-y_0}^{y_0} e^{-\beta B(y)} dy = 1$$

Por lo que podríamos pensar que

$$e^{-\beta B(y)} = \rho(y)$$

distribución $\rho(y; x)$ está en equilibrio en y . Sustituyendo (A.11) en (A.8)

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}G(x, t) &= \int_{-y_0}^{y_0} D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x,y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x,y)} G(x, t) \rho(y; x) dy \\
 &= \int_{-y_0}^{y_0} D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x,y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x,y)} G(x, t) \frac{e^{-\beta U(x,y)}}{e^{-\beta A(x)}} dy \\
 &= \int_{-y_0}^{y_0} D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x,y)} \frac{\partial}{\partial x} \frac{G(x, t)}{e^{-\beta A(x)}} dy \\
 &= D \frac{\partial}{\partial x} \int_{-y_0}^{y_0} e^{-\beta U(x,y)} \frac{\partial}{\partial x} \frac{G(x, t)}{e^{-\beta A(x)}} dy
 \end{aligned} \tag{A.12}$$

es decir,

$$\frac{\partial}{\partial t}G(x, t) = D \frac{\partial}{\partial x} \int_{-y_0}^{y_0} e^{-\beta U(x,y)} dy \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A(x)} G(x, t)$$

por (A.9) queda

$$\frac{\partial}{\partial t}G(x, t) = D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A(x)} \frac{\partial}{\partial x} \frac{G(x, t)}{e^{-\beta A(x)}} \tag{A.13}$$

que es la ecuación de Fick-Jacobs en un potencial dos dimensional.

A.2. Coeficiente de difusión como función de la posición $D(x)$

En la deducción de la ecuación de Fick-Jacobs en la sección anterior, se supuso una condición de equilibrio local que, aunque se dijo que estaba **aproximadamente** en dicho equilibrio local, las expresiones hacen referencia a que se estaba en el equilibrio local plenamente. La idea siguiente sería suponer que la concentración está fuera del equilibrio local, es decir, la concentración tiene un término que hace referencia al equilibrio local y se le suma otro término, como se muestra³

$$C(x, y, t) = G(x, t) \rho(y; x) + \delta C(x, y, t) \tag{A.15}$$

³ Otra manera de interpretar la expresión (A.15), es reescribirla como

$$\delta C(x, y, t) = C(x, y, t) - G(x, t) \rho(y; x) \tag{A.14}$$

que se lee como que la solución exacta $C(x, y, t)$ menos la expresión propuesta en Fick-Jacobs, $G(x, t) \rho(y; x)$, tiene un error $\delta C(x, y, t)$. Así, al trabajar con $\delta C(x, y, t)$, se está considerando la información que se había perdido en la aproximación de Fick-Jacobs.

donde la δC es el término que describe la concentración fuera del equilibrio, pues suponemos que la concentración C no tiene por qué estar en el equilibrio a todo tiempo. Tomemos la ecuación (A.8) y sustituyamos (A.15) en ella

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}G(x, t) &= \int_{-y_0}^{y_0} D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} C(x, y, t) dy \\
 &= \int_{-y_0}^{y_0} D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} (G(x, t)\rho(y; x) + \delta C(x, y, t)) dy \\
 &= \int_{-y_0}^{y_0} D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} G(x, t)\rho(y; x) dy \\
 &+ \int_{-y_0}^{y_0} D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} \delta C(x, y, t) dy
 \end{aligned}$$

La primer parte del lado derecho de la integral ya se hizo y nos llevó a la ecuación (A.13)

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}G(x, t) &= D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A(x)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A(x)} G(x, t) + \\
 &+ \int_{-y_0}^{y_0} D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} \delta C(x, y, t) dy \quad (\text{A.16})
 \end{aligned}$$

reescribiendo (A.10)

$$\begin{aligned}
 e^{\beta U(x, y)} &= \frac{e^{\beta A(x)}}{\rho(y; x)} \\
 e^{-\beta U(x, y)} &= \rho(y; x) e^{-\beta A(x)}
 \end{aligned}$$

por lo que tenemos⁴

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}G(x, t) &= D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A(x)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A(x)} G(x, t) + \\
 &+ D \frac{\partial}{\partial x} \int_{-y_0}^{y_0} \rho(y; x) e^{-\beta A(x)} \frac{\partial}{\partial x} \frac{e^{\beta A(x)}}{\rho(y; x)} \delta C(x, y, t) dy \quad (\text{A.17})
 \end{aligned}$$

⁴ Aunque hemos considerado que la concentración está en algún momento fuera del equilibrio al agregar δC , seguimos considerando que el equilibrio en dirección de la coordenada perpendicular al eje del canal se alcanza instantaneamente, por lo que la expresión (A.10) sigue siendo válida.

A.2 Coeficiente de difusión como función de la posición $D(x)$ 92

Por otro lado, tomemos la ec. (A.1) y sustituyamos en ella (A.15)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [G\rho(y; x) + \delta C(x, y, t)] &= D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U} [G\rho(y; x) + \delta C] + \\ &+ D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U} [G\rho(y; x) + \delta C] \end{aligned}$$

esto es

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} G(x, t)\rho(y; x) + \frac{\partial}{\partial t} \delta C(x, y, t) &= D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} G(x, t)\rho(y; x) + \\ &+ D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} \delta C(x, y, t) + \\ &+ D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U(x, y)} G(x, t)\rho(y; x) + \\ &+ D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U(x, y)} \delta C(x, y, t) \end{aligned}$$

sustituyamos (A.17) en la expresión anterior

$$\begin{aligned} &\rho(y; x) \left[D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A(x)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A(x)} G \right. \\ &+ \left. D \frac{\partial}{\partial x} \int_{-y_0}^{y_0} \rho(y; x) e^{-\beta A(x)} \frac{\partial}{\partial x} \frac{e^{\beta A(x)}}{\rho(y; x)} \delta C dy \right] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial t} \delta C(x, y, t) = D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} G(x, t)\rho(y; x) + \\ &+ D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U(x, y)} \delta C(x, y, t) + \\ &+ D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U(x, y)} G(x, t)\rho(y; x) + \\ &+ D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U(x, y)} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U(x, y)} \delta C(x, y, t) \end{aligned}$$

que podemos reescribir como

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta C = D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U} G\rho + D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U} G\rho \quad (\text{A.18})$$

$$+ D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U} \delta C + D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U} \delta C \quad (\text{A.19})$$

$$- D\rho \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G \quad (\text{A.20})$$

$$- D\rho \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \int_{-y_0}^{y_0} \rho \frac{\partial}{\partial x} \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C dy \quad (\text{A.21})$$

Sustituyamos (A.10) en (A.18)

$$\begin{aligned}
 D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U} G \rho + D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U} G \rho &= D \frac{\partial}{\partial x} \rho e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G + \\
 &+ D \frac{\partial}{\partial y} \rho e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta A} G
 \end{aligned} \tag{A.22}$$

que junto con (A.20)

$$\begin{aligned}
 &D \frac{\partial}{\partial x} \rho e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G + D \frac{\partial}{\partial y} \rho e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta A} G - D \rho \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G = \\
 &= \left[\frac{\partial}{\partial x} \rho e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G - D \rho \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G \right] + D \frac{\partial}{\partial y} \rho e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta A} G = \\
 &= D \left[\frac{\partial}{\partial x} \rho \right] e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G + D \frac{\partial}{\partial y} \rho e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta A} G
 \end{aligned} \tag{A.23}$$

Como A y G no son funciones de y , el segundo término de lado derecho de la última igualdad se anula. Así, la expresión numerada de (A.18-A.21) queda

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \delta C &= D \left[\frac{\partial}{\partial x} \rho \right] e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G \\
 &+ D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U} \delta C + D \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U} \delta C \\
 &- D \rho \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \int_{-y_0}^{y_0} \rho \frac{\partial}{\partial x} \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C dy
 \end{aligned}$$

Si definimos el operador

$$\hat{\mathcal{B}} \equiv \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta U} + \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U} \tag{A.24}$$

Con esto

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \delta C &= D \left[\frac{\partial}{\partial x} \rho \right] e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G \\
 &+ D \hat{\mathcal{B}} \delta C \\
 &- D \rho \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \int_{-y_0}^{y_0} \rho \frac{\partial}{\partial x} \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C dy
 \end{aligned} \tag{A.25}$$

Ahora, tomemos el argumento de la integral de lado derecho de la ec.

(A.25)

$$\rho \frac{\partial}{\partial x} \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C = \frac{\partial}{\partial x} \rho \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C - \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C \frac{\partial \rho}{\partial x} \quad (\text{A.26})$$

esto es

$$\int_{-y_0}^{y_0} \rho \frac{\partial}{\partial x} \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C dy = \int_{-y_0}^{y_0} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} \delta C - \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C \frac{\partial \rho}{\partial x} dy \quad (\text{A.27})$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} \int_{-y_0}^{y_0} \delta C dy - \int_{-y_0}^{y_0} \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C \frac{\partial \rho}{\partial x} dy \quad (\text{A.28})$$

donde⁵ $\int_{-y_0}^{y_0} \delta C dy = 0$, por lo que obtenemos

$$\int_{-y_0}^{y_0} \rho \frac{\partial}{\partial x} \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C dy = - \int_{-y_0}^{y_0} \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C \frac{\partial \rho}{\partial x} dy \quad (\text{A.29})$$

Así, la ecuación (A.25) queda

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta C &= D \left[\frac{\partial}{\partial x} \rho \right] e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G \\ &+ D \hat{B} \delta C \\ &- D \rho \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \int_{-y_0}^{y_0} \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C \frac{\partial \rho}{\partial x} dy \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Esto es

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta C = D \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G + D \hat{B} \delta C + D \rho \frac{\partial}{\partial x} \int_{-y_0}^{y_0} \frac{\delta C}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) dy \quad (\text{A.31})$$

Por otro lado, tomamos (A.17)

$$\frac{\partial}{\partial t} G = D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G + D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \int_{-y_0}^{y_0} \rho \frac{\partial}{\partial x} \frac{e^{\beta A}}{\rho} \delta C dy$$

que por (A.29) puede reescribirse

$$\frac{\partial}{\partial t} G = D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G - D \frac{\partial}{\partial x} \int_{-y_0}^{y_0} \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\delta C}{\rho} dy \quad (\text{A.32})$$

5

$$\int_{-y_0}^{y_0} \delta C dy = \int_{-y_0}^{y_0} C - \rho G dy = \int_{-y_0}^{y_0} C dy - \int_{-y_0}^{y_0} \rho G dy = G - G \int_{-y_0}^{y_0} \rho dy = G - G = 0$$

donde el primer término del lado derecho es Fick-Jacobs y el segundo término, sus correcciones.

Procederemos a trabajar con las ecuaciones (A.31) y (A.32). Si hacemos una aproximación a primer orden en $\partial\rho/\partial x$, el tercer término del lado derecho de (A.31) se desprecia

$$\frac{\partial}{\partial t}\delta C = D \left(\frac{\partial\rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G + D\hat{B}\delta C \quad (\text{A.33})$$

Aplicando la transformada de Laplace

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \delta C \right\} = \mathcal{L} \left\{ D \left(\frac{\partial\rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G \right\} + \mathcal{L} \left\{ D\hat{B}\delta C \right\} \quad (\text{A.34})$$

Esto es⁶

$$s\mathcal{L} \{ \delta C \} - \delta C(x, y, 0) = D \left(\frac{\partial\rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} \mathcal{L} \{ G \} + D\hat{B}\mathcal{L} \{ \delta C \} \quad (\text{A.35})$$

Supongamos que al inicio en la coordenada y se está en equilibrio, esto es, para⁷ $t = 0$, $\delta C(x, y, 0) = 0$. Por ello

$$s\mathcal{L} \{ \delta C \} = D \left(\frac{\partial\rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} \mathcal{L} \{ G \} + D\hat{B}\mathcal{L} \{ \delta C \} \quad (\text{A.36})$$

que puede ser escrito como

$$\left(s - D\hat{B} \right) \mathcal{L} \{ \delta C \} = D \left(\frac{\partial\rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} \mathcal{L} \{ G \} \quad (\text{A.37})$$

Así,

$$\mathcal{L} \{ \delta C \} = \frac{D}{\left(s - D\hat{B} \right)} \left(\frac{\partial\rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} \mathcal{L} \{ G \} \quad (\text{A.38})$$

⁶

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{df}{dt} \right\} = s\mathcal{L} \{ f(t) \} - f(0)$$

⁷Que al tiempo $t = 0$, $\delta C(x, y, 0) = 0$ puede pensarse como que al inicio, antes de que las partículas choquen en la pared del canal, no encuentran ningún potencial, difunden como partícula libre, la cual obedece una distribución de Boltzmann.

Aplicando la transformada de Laplace inversa

$$\begin{aligned}\delta C &= \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{D}{(s - D\hat{B})} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} \mathcal{L}\{G\} \right\} \\ &= D \mathcal{L}^{-1} \left\{ \left[\frac{1}{(s - D\hat{B})} \right] \left[\left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} \mathcal{L}\{G\} \right] \right\}\end{aligned}$$

que usando fórmulas de la antitransformada de Laplace y el teorema de la convolución⁸

$$\delta C = D \int_0^t e^{tD\hat{B}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G(x, t - \bar{t}) d\bar{t} \quad (\text{A.39})$$

Sustituyendo (A.39) en (A.32)

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} G &= D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G - D \frac{\partial}{\partial x} \int_{-y_0}^{y_0} \frac{\delta C}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} dy \\ &= D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G + \\ &\quad - D \frac{\partial}{\partial x} \int_{-y_0}^{y_0} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} \left[D \int_0^t e^{tD\hat{B}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G(x, t - \bar{t}) d\bar{t} \right] dy\end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

La expresión (A.40) es correcta hasta segundo orden en $\partial \rho / \partial x$.

Quedemonos hasta segundo orden en $\partial G / \partial x$, lo que implicaría que despreciaremos las componentes que van como $\partial / \partial x$ en el operador \hat{B} .

Entonces, promovemos el operador \hat{B} , ec (A.24), al operador \hat{B}' , que va como

$$\hat{B}' = \frac{\partial}{\partial y} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial y} e^{\beta U} = \frac{\partial}{\partial y} \rho e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial y} \frac{e^{\beta A}}{\rho}$$

donde hemos utilizado (A.10). Así

$$\hat{B}' = \frac{\partial}{\partial y} \rho \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{\rho} \quad (\text{A.41})$$

⁸

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s - a} \right\} = e^{at}$$

$$\mathcal{L}^{-1} \{ \mathcal{L}\{f(t)\} \mathcal{L}\{g(t)\} \} = \int_0^t f(t - \bar{t}) g(\bar{t}) d\bar{t}$$

Con esto la ec (A.40) queda

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} G &= D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G + \\ &- D^2 \frac{\partial}{\partial x} \int_{-y_0}^{y_0} \int_0^t \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} e^{tD\hat{B}'} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G(x, t - \bar{t}) d\bar{t} dy \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

Si hacemos una aproximación Markoviana⁹, el segundo término del lado derecho de la ecuación queda

$$\int_0^t \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} e^{tD\hat{B}'} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G(x, t - \bar{t}) d\bar{t} \approx \left[\int_0^\infty \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} e^{tD\hat{B}'} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} d\bar{t} \right] G(x, t) \quad (\text{A.43})$$

Así, (A.42) queda

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} G &= D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G + \\ &- D^2 \frac{\partial}{\partial x} \int_{-y_0}^{y_0} \left[\int_0^\infty \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} e^{tD\hat{B}'} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} d\bar{t} \right] dy G(x, t) \\ &= D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G + \\ &- D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \left[D \int_{-y_0}^{y_0} \int_0^\infty \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} e^{tD\hat{B}'} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) d\bar{t} dy \right] \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G(x, t) \end{aligned}$$

la cual podemos reescribir como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} G &= D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G(x, t) + \\ &- D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} k(x) \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G(x, t) + \dots \end{aligned}$$

donde los puntos suspensivos hacen referencia a que se hizo una aproximación hasta segundo orden en $\partial \rho / \partial x$ y $\partial G / \partial x$, donde también

$$k(x) \equiv \left[D \int_{-y_0}^{y_0} \int_0^\infty \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} e^{tD\hat{B}'} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) d\bar{t} dy \right] \quad (\text{A.44})$$

⁹

$$\int_0^t C_b(t') \dot{x}(t - t') dt' \approx \dot{x}(t) \int_0^\infty C_b(t) dt$$

A.2 Coeficiente de difusión como función de la posición $D(x)$ 98

Así

$$\frac{\partial}{\partial t}G = D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} [1 - k(x) + \dots] \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G(x, t) \quad (\text{A.45})$$

Así finalmente

$$\frac{\partial}{\partial t}G = \frac{\partial}{\partial x} e^{-\beta A} D(x) \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta A} G(x, t) \quad (\text{A.46})$$

donde

$$D(x) = D [1 - k(x) + \dots] = \frac{D}{1 + k(x)} \quad (\text{A.47})$$

La expresión (A.47) converge cuando $|k(x)| < 1$.

Apéndice **B**

Cálculo Tensorial

El uso de la matemática para resolver problemas físicos nos insta a usar lenguajes adecuados de esta. La mecánica de Newton, a través del cálculo, nos permitía pensar la naturaleza, y en particular la materia, como un continuo, aunque hoy sabemos que esto no es así y la materia se compone de trozos de materia llamados átomos. A pesar de esto, nos permitía entender la mecánica celeste o el movimiento de los cuerpos de una manera precisa.

El lenguaje matemático que se use en particular ayuda a resolver ciertos problemas. Además, el lenguaje puede llegar a revelar estructura, lo que da una comprensión sucinta de la naturaleza del problema e incluso permite extender los alcances del entendimiento[54]. El uso del **cálculo tensorial** en problemas de difusión de partículas brownianas tiene como propósito extender el alcance dado por el cálculo vectorial en esta materia.

B.1. Variedades

Las variedades son espacios topológicos¹ en los cuales se ha podido extrapolar localmente, a través de un homeomorfismo², nociones pertenecientes a \mathbb{R}^n . Un tensor es un objeto local definido en estos espacios. Estos objetos locales son dotados de estructura que les da soporte para poder diferenciarlos, mapearlos y operarlos entre sí[55].

B.2. Transformación de coordenadas de curvas y superficies

Dado un tensor, podemos visualizar curvas, superficies o entes de diferentes dimensiones. Para un tensor con n grados de libertad

$$x^a = x^a(u^b) \quad (\text{B.1})$$

con³ $a = 1, 2, \dots, n$ y $b = 1, 2, \dots, m$.

El punto esencial del cálculo tensorial es establecer cosas válidas en cualquier marco de referencia, es decir, tener expresiones las cuales podamos llevarlas de un marco x^a a un marco x'^a dadas por n ecuaciones

$$x'^a = x'^a(x^1, x^2, \dots, x^n) \quad (\text{B.2})$$

$a = 1, 2, \dots, n$. O de manera más compacta

$$x'^a = x'^a(x) \quad (\text{B.3})$$

Diferenciando cada una de las coordenadas de un sistema de referencia con respecto a cada una de las coordenadas la otra, obtenemos una matriz de

¹Sin ahondar demasiado en un tema tan extenso, un espacio topológico es una estructura matemática que cumple determinados axiomas. \mathbb{R}^n es un espacio topológico.

²Un homeomorfismo es una función que relaciona dos espacios topológicos entre sí. Si dos espacios topológicos son homeomorfos, se dice que son espacios equivalentes, es decir, que tienen las mismas propiedades.

³Para tener una notación compacta, hemos escrito $x^a(u^b)$ en lugar de $x^a(u^1, u^2, \dots, u^m)$

transformación de $n \times n$ llamada Jacobiano

$$\left[\frac{\partial x'^a}{\partial x^b} \right] = \begin{pmatrix} \frac{\partial x'^1}{\partial x^1} & \frac{\partial x'^1}{\partial x^2} & \cdots & \frac{\partial x'^1}{\partial x^n} \\ \frac{\partial x'^2}{\partial x^1} & \frac{\partial x'^2}{\partial x^2} & \cdots & \frac{\partial x'^2}{\partial x^n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial x'^n}{\partial x^1} & \frac{\partial x'^n}{\partial x^2} & \cdots & \frac{\partial x'^n}{\partial x^n} \end{pmatrix}$$

que en notación compacta escribimos

$$J' = \left[\frac{\partial x'^a}{\partial x^b} \right] \quad (\text{B.4})$$

ó definido de manera inversa

$$J = \left[\frac{\partial x^a}{\partial x'^b} \right] \quad (\text{B.5})$$

En principio, por el teorema de la función inversa, podemos resolver la ecuación (B.3) para las coordenadas x^a y obtener la transformada inversa

$$x^a = x^a(x') \quad (\text{B.6})$$

Si tenemos un tensor $x'^a = x'^a(x^a)$, con $a = 1, 2, \dots, n$, la diferencial está definida como

$$dx'^a = \frac{\partial x'^a}{\partial x^1} dx^1 + \frac{\partial x'^a}{\partial x^2} dx^2 + \dots + \frac{\partial x'^a}{\partial x^n} dx^n \quad (\text{B.7})$$

que, de manera compacta, mediante el uso de la convención de Einstein, luce⁴

$$dx'^a = \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} dx^b \quad (\text{B.9})$$

Entonces, pediremos que todo aquello que queramos sea llamado tensor, transforma de esta manera ante cambio de coordenadas.

⁴ **Convención de suma de Einstein.** Siempre aparezca un mismo índice dos veces en la misma expresión, una vez arriba y otra abajo, debe realizarse una suma sobre dicho índice

$$A_i B^i = A_1 B^1 + A_2 B^2 + A_3 B^3, \quad (\text{B.8})$$

B.2.1. Tensores contravariantes

Un vector contravariante o tensor contravariante de rango 1, es el conjunto de cantidades X^a en el sistema coordenado x^a que se transforma ante el cambio de coordenadas como

$$X'^a = \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} X^b \quad (\text{B.10})$$

Un tensor contravariante de rango 2 transforma de acuerdo a

$$X'^{ab} = \frac{\partial x'^a}{\partial x^c} \frac{\partial x'^b}{\partial x^d} X^{cd} \quad (\text{B.11})$$

Un tensor contravariante de rango n transforma de acuerdo a

$$X'^{a_1 a_2 \dots a_n} = \frac{\partial x'^{a_1}}{\partial x^{b_1}} \frac{\partial x'^{a_2}}{\partial x^{b_2}} \dots \frac{\partial x'^{a_n}}{\partial x^{b_n}} X^{b_1 b_2 \dots b_n} \quad (\text{B.12})$$

B.2.2. Tensores covariantes

Un vector covariante o tensor covariante de rango 1, es el conjunto de cantidades X_a en el sistema coordenado x^a que se transforma ante el cambio de coordenadas como

$$X'_a = \frac{\partial x^a}{\partial x'^b} X^b \quad (\text{B.13})$$

Un tensor covariante de rango 2 transforma de acuerdo a

$$X'_{ab} = \frac{\partial x^a}{\partial x'^c} \frac{\partial x^b}{\partial x'^d} X_{cd} \quad (\text{B.14})$$

Un tensor covariante de rango n transforma de acuerdo a

$$X'_{a_1 a_2 \dots a_n} = \frac{\partial x^{a_1}}{\partial x'^{b_1}} \frac{\partial x^{a_2}}{\partial x'^{b_2}} \dots \frac{\partial x^{a_n}}{\partial x'^{b_n}} X_{b_1 b_2 \dots b_n} \quad (\text{B.15})$$

B.2.3. Tensores mixtos

Hay tensores que pueden ser una combinación de tensores covariantes y tensores contravariantes. Son llamados tensores de tipo (n, m) .

$$X'^{a_1 a_2 \dots a_n}_{b_1 b_2 \dots b_m} = \frac{\partial x^{a_1}}{\partial x'^{c_1}} \frac{\partial x^{a_2}}{\partial x'^{c_2}} \dots \frac{\partial x^{a_n}}{\partial x'^{c_n}} \frac{\partial x'^{d_1}}{\partial x^{b_1}} \frac{\partial x'^{d_2}}{\partial x^{b_2}} \dots \frac{\partial x'^{d_m}}{\partial x^{b_m}} X^{c_1 c_2 \dots c_n}_{d_1 d_2 \dots d_m} \quad (\text{B.16})$$

Por notación, los subíndices son usados para tensores covariantes y los superíndices para los tensores contravariantes. Los tensores $(0, 0)$ son llamados invariantes o escalares.

B.3. Álgebra tensorial

Un campo tensorial definido sobre una región de la variedad, es una asociación de un tensor del mismo tipo en cada punto de la región. Dicho tensor será una función de las componentes x^a en algún sistema de referencia, de manera que al cambiar al marco de referencia x'^a , el tensor será ahora función de este nuevo sistema

$$X'^a(x') = \left. \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} \right|_P X^b(x) \quad (\text{B.17})$$

Como puede verse debido a la notación, el tensor depende del punto P en el que esté situado.

La operación de **suma** se encuentra dentro del álgebra tensorial. Uno puede tomar dos tensores del mismo tipo (n, m) definidos en el mismo punto P de la variedad, $X_{d_1 \dots d_m}^{c_1 \dots c_n}(P)$ y $Y_{d_1 \dots d_m}^{c_1 \dots c_n}(P)$ y sumarlos

$$X'^{a_1 \dots a_n}_{b_1 \dots b_m} + Y'^{a_1 \dots a_n}_{b_1 \dots b_m} = \frac{\partial x^{a_1}}{\partial x'^{c_1}} \dots \frac{\partial x^{a_n}}{\partial x'^{c_n}} \frac{\partial x'^{d_1}}{\partial x^{b_1}} \dots \frac{\partial x'^{d_m}}{\partial x^{b_m}} \left(X_{d_1 \dots d_m}^{c_1 \dots c_n} + Y_{d_1 \dots d_m}^{c_1 \dots c_n} \right) \quad (\text{B.18})$$

Como puede apreciarse, la suma de los dos tensores del tipo (n, m) arroja un objeto del mismo tipo $Z_{d_1 \dots d_m}^{c_1 \dots c_n} = X_{d_1 \dots d_m}^{c_1 \dots c_n} + Y_{d_1 \dots d_m}^{c_1 \dots c_n}$ que transforma como tensor en el mismo punto P .

Por otro lado, la operación **producto** también se encuentra en el álgebra de tensores. Siempre es posible multiplicar tensores de tipo diferente sobre el mismo punto P . Esto es, la multiplicación de dos tensores de tipos (a_1, b_1) y (a_2, b_2) resulta en un tensor del tipo $(r_1 + r_2, s_1 + s_2)$ en P .

B.4. Derivada covariante

Vimos en las secciones anteriores algunas propiedades que los tensores deben cumplir. De ahí surge una nueva pregunta acerca de si la derivada

de un tensor sigue siendo un tensor. Tomemos la expresión (B.10)

$$X'^a = \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} X^b$$

y derivémosla

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x'^c} X'^a &= \frac{\partial}{\partial x'^c} \left(\frac{\partial x'^a}{\partial x^b} X^b \right) \\ &= \frac{\partial x^d}{\partial x'^c} \frac{\partial}{\partial x^d} \left(\frac{\partial x'^a}{\partial x^b} X^b \right) \\ &= \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} \frac{\partial x^d}{\partial x'^c} \frac{\partial}{\partial x^d} X^b + \frac{\partial^2 x'^a}{\partial x^b \partial x^d} \frac{\partial x^d}{\partial x'^c} X^b \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Si el primer término del lado derecho estuviera solo de ese lado de la expresión (B.19), la derivada de un tensor cumpliría con el criterio usual de transformación de tensores. Debido a esto, buscaremos contruir un nuevo concepto de derivada que a su vez sea tensorial.

Derivar implica el límite de una razón de una cantidad evaluada en dos puntos diferentes, digamos P y Q y otra cantidad que representa la separación de estos dos puntos, cuando dicha separación tiende a cero. Tomemos el tensor X^a para hacer dicha comparación, esto es

$$\nabla X^a = \lim_{\delta u \rightarrow 0} \frac{X^a|_Q - X^a|_P}{\delta u} \quad (\text{B.20})$$

donde $X^a|_P$ y $X^a|_Q$ son dos tensores evaluados en dos puntos distintos. Esta resta no es un tensor por lo que buscaremos ‘trasladar’ el tensor en P a Q para poder hacer una comparación del tensor en ambos puntos. Para ello, P estará asociado a la coordenada x^a y Q a la coordenada $x^a + \delta x^a$. Entonces, el tensor en el punto P se representa $X^a(x)$ y haciendo un desarrollo en serie de Taylor a primer orden en el punto Q , se tiene

$$X^a|_Q \equiv X^a(x + \delta x) = X^a + \delta x^b \partial_b X^a \quad (\text{B.21})$$

Ahora, pensemos que el tensor X^a se traslada una cantidad $\delta X^a(x)$ de manera que se posiciona en el punto Q . Esta cantidad $\delta X^a(x)$ debe ser dependiente de X^a y δx^a ya que si cualquiera de estas dos cantidades son

cero, $\delta X^a(x)$ también debe serlo. Postularemos que dicha dependencia es la más sencilla posible, es decir, que es lineal

$$\delta X^a(x) = -\Gamma_{bc}^a(x)X^b\delta x^c \quad (\text{B.22})$$

donde el signo negativo es por convención. El símbolo Γ_{bc}^a es un tensor de tercer grado que aún debemos determinar su valor. Así

$$X^a|_P \equiv X^a - \Gamma_{bc}^a(x)X^b\delta x^c \quad (\text{B.23})$$

Con esto, como $\delta u = \delta x^c$, la expresión (B.20) queda

$$\begin{aligned} \nabla_c X^a &= \lim_{\delta x^c \rightarrow 0} \frac{(X^a + \delta x^b \partial_b X^a) - (X^a - \Gamma_{bc}^a(x)X^b\delta x^c)}{\delta x^c} \\ &= \lim_{\delta x^c \rightarrow 0} \frac{\delta x^c \partial_c X^a + \Gamma_{bc}^a(x)X^b\delta x^c}{\delta x^c} \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Así

$$\nabla_c X^a = \partial_c X^a + \Gamma_{bc}^a(x)X^b \quad (\text{B.25})$$

que es llamada **derivada covariante**.

Por conveniencia, multipliquemos por dx^c la ec. (B.25) queda

$$DX^a \equiv \nabla_c X^a dx^c = dX^a + \Gamma_{bc}^a(x)X^b dx^c \quad (\text{B.26})$$

con

$$dX^a = \frac{\partial X^a}{\partial x^c} dx^c \quad (\text{B.27})$$

Si pedimos que la derivada covariante transforme como tensor de acuerdo a la ec. (B.10), debe cumplir que

$$DX'^a = \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} DX^b \quad (\text{B.28})$$

es decir,

$$dX'^a + \Gamma_{mn}^a X'^m dx'^n = \frac{\partial x'^a}{\partial x^h} \left(dX^h + \Gamma_{pq}^h X^p dx^q \right) \quad (\text{B.29})$$

Por otro lado, tomemos la expresión (B.19)

$$\frac{\partial X'^a}{\partial x'^c} = \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} \frac{\partial x^d}{\partial x'^c} \frac{\partial X^b}{\partial x^d} + \frac{\partial^2 x'^a}{\partial x^b \partial x^d} \frac{\partial x^d}{\partial x'^c} X^b$$

y reescribamosla como⁵

$$dX'^a = \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} dX^b + \frac{\partial^2 x'^a}{\partial x^b \partial x^d} X^b dx^d \quad (\text{B.30})$$

Así, restando la expresión (B.30) de (B.29) se obtiene

$$\Gamma'^a_{mn}(x) X'^m dx'^n = \frac{\partial x'^a}{\partial x^h} \Gamma^h_{pq} X^p dx^q - \frac{\partial^2 x'^a}{\partial x^p \partial x^q} X^p dx^q \quad (\text{B.31})$$

que podemos reescribir como

$$\Gamma'^a_{mn} \frac{\partial x'^m}{\partial x^p} \frac{\partial x'^n}{\partial x^q} X^p dx^q = \frac{\partial x'^a}{\partial x^h} \Gamma^h_{pq} X^p dx^q - \frac{\partial^2 x'^a}{\partial x^p \partial x^q} X^p dx^q \quad (\text{B.32})$$

que es equivalente a

$$\Gamma'^a_{mn} \frac{\partial x'^m}{\partial x^p} \frac{\partial x'^n}{\partial x^q} = \frac{\partial x'^a}{\partial x^h} \Gamma^h_{pq} - \frac{\partial^2 x'^a}{\partial x^p \partial x^q} \quad (\text{B.33})$$

que resolviendo para Γ'^a_{mn} queda

$$\Gamma'^a_{mn} = \frac{\partial x'^a}{\partial x^h} \frac{\partial x'^p}{\partial x^m} \frac{\partial x'^q}{\partial x^n} \Gamma^h_{pq} - \frac{\partial x'^p}{\partial x^m} \frac{\partial x'^q}{\partial x^n} \frac{\partial^2 x'^a}{\partial x^p \partial x^q} \quad (\text{B.34})$$

El tensor Γ^h_{pq} es llamado *conexión afín*. En nuestro caso, las conexiones afines son tensores simétricos y reciben el nombre de *símbolos de Christoffel*. Con esto, hemos encontrado la expresión que la conexión afín cumple para que la derivada covariante sea un tensor.

Con esto, vemos que la derivación en una variedad se ve modificada por un término $\Gamma^a_{bc}(x)X^b$ con respecto a la derivada convencional que conocíamos en cálculo sobre espacios \mathbb{R}^n , como se ve en (B.25). Por ende, podemos pensar que el cálculo tensorial es una generalización del cálculo vectorial.

⁵ Multiplicando por dx'^c y considerando la expresión (B.27)

$$dX'^a = \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} \left(\frac{\partial x^d}{\partial x'^c} dx'^c \right) \frac{\partial X^b}{\partial x^d} + \frac{\partial^2 x'^a}{\partial x^b \partial x^d} \left(\frac{\partial x^d}{\partial x'^c} dx'^c \right) X^b$$

esto es,

$$dX'^a = \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} \frac{\partial X^b}{\partial x^d} dx^d + \frac{\partial^2 x'^a}{\partial x^b \partial x^d} X^b dx^d$$

Apéndice C

Reparametrización y longitud de arco

C.1. Longitud de arco

Consideremos la curva paramétrica $\mathbf{r}(t)$, donde t es el parámetro de dicha curva

$$\mathbf{r}(t) = x(t)\hat{i} + y(t)\hat{j} + z(t)\hat{k}$$

con $t \in [a, b]$. Definamos ahora la **longitud de arco** $s(t)$

$$s(t) = \int_a^t |\dot{\mathbf{r}}(u)| du = \int_a^t \sqrt{\left(\frac{dx}{du}\right)^2 + \left(\frac{dy}{du}\right)^2 + \left(\frac{dz}{du}\right)^2} du \quad (\text{C.1})$$

diferenciando ambos lados de la ecuación (C.1) y usando la primer parte del teorema fundamental del cálculo¹

$$\frac{ds}{dt} = |\dot{\mathbf{r}}(t)| \quad (\text{C.2})$$

¹Sea $f \in [a, b]$ integrable. Definamos F por

$$F(x) = \int_a^x f(t) dt$$

si f es continua en $c \in (a, b)$, entonces F es derivable en c y

$$F'(c) = f(c)$$

C.2. Reparametrización

Sean I y J intervalos en \mathbb{R} . Además, sea $\mathbf{r} : I \rightarrow \mathbb{R}^3$ una curva y $c : J \rightarrow I$ una función diferenciable. Diremos que tenemos una *reparametrización* de \mathbf{r} por c si se cumple la composición

$$\mathbf{h} \equiv \mathbf{r}(c) : J \rightarrow \mathbb{R}^3 \quad (\text{C.3})$$

Entonces, a cada punto $t \in J$, $\mathbf{h}(c)=\mathbf{r}(t(c))$, es decir, \mathbf{h} , en general, sigue el mismo camino que \mathbf{r} pero \mathbf{h} alcanza puntos distintos en la curva para algún valor de t dado.

Si quisieramos calcular la norma de dicha reparametrización \mathbf{h}

$$\frac{d\mathbf{h}}{dc} = \frac{d}{dc} \mathbf{r}(t(c)) = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \frac{dt}{dc} \quad (\text{C.4})$$

es decir,

$$\left| \frac{d\mathbf{h}}{dc} \right| = \left| \frac{d\mathbf{r}}{dt} \frac{dt}{dc} \right| = \frac{dt}{dc} \left| \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right| = \frac{dt}{dc} |\dot{\mathbf{r}}(t)| \quad (\text{C.5})$$

Si en particular, la función $c(t)$ fuera la longitud de arco, es decir $c = s$, la expresión (C.5) quedaría

$$\left| \frac{d\mathbf{h}}{ds} \right| = \frac{dt}{ds} |\dot{\mathbf{r}}(t)| = \frac{dt}{ds} \frac{ds}{dt} = 1 \quad (\text{C.6})$$

donde se ha hecho uso de la expresión (C.2). Esto nos dice que reparametrizar en la longitud de arco significa que la norma de la curva será unitaria.

Parametrizar mediante la longitud de arco permite que la parametrización no dependa de un sistema coordenado en particular, parametrizar en la longitud de arco significaría que sólo importa qué tanto se mueve uno sobre la línea curva, esto es, si una curva \mathbf{r} está reparametrizada en términos de la longitud de arco s , $\mathbf{h}(s)$ implica que sólo nos importa la distancia s que se ha avanzado a lo largo de dicha curva.

Apéndice **D**

Las ecuaciones de Frenet-Serret

Consideremos la curva paramétrica $\mathbf{r}(t)$, donde t es el parámetro de dicha curva

$$\mathbf{r}(t) = x(t)\hat{i} + y(t)\hat{j} + z(t)\hat{k}$$

con $t \in [a, b]$. Para saber cómo cambia el vector $\hat{\mathbf{t}}$ con respecto a s , calculamos $\frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds}$. A la magnitud de esta expresión le llamaremos **curvatura** y se denota por la letra κ .

$$\kappa = \left| \frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds} \right| \quad (\text{D.1})$$

donde $\hat{\mathbf{t}}$ está definido en (5.3). Así, la curvatura nos cuenta cómo cambia el vector tangente con respecto al parámetro s .

Ahora, tomemos la expresión (5.8)

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\hat{\mathbf{t}}'}{|\hat{\mathbf{t}}'|}$$

y recribamosla

$$\hat{\mathbf{t}}' = |\hat{\mathbf{t}}'| \hat{\mathbf{n}}$$

debido a (D.1), obtenemos

$$\frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds} = \kappa(s) \hat{\mathbf{n}} \quad (\text{D.2})$$

que es una de las ecuaciones de Frenet-Serret.

Ahora, tomemos el vector binormal $\hat{\mathbf{b}}$, ec. (5.14) y hagamos

$$\hat{\mathbf{b}} \cdot \hat{\mathbf{b}} = 1 \quad (\text{D.3})$$

derivemos la ecuación

$$\frac{d}{ds} (\hat{\mathbf{b}} \cdot \hat{\mathbf{b}}) = 0 \quad (\text{D.4})$$

esto es

$$\frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} \cdot \hat{\mathbf{b}} + \hat{\mathbf{b}} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} = 0 \quad (\text{D.5})$$

Esto es

$$2\hat{\mathbf{b}} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} = 0 \quad (\text{D.6})$$

es decir

$$\hat{\mathbf{b}} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} = 0 \quad (\text{D.7})$$

lo que nos dice que $\hat{\mathbf{b}}$ es perpendicular a $\frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds}$.

Por otro lado, considerando (5.14)

$$\hat{\mathbf{b}} = \hat{\mathbf{t}} \times \hat{\mathbf{n}}$$

Derivando

$$\frac{d}{ds} \hat{\mathbf{b}} = \frac{d}{ds} (\hat{\mathbf{t}} \times \hat{\mathbf{n}})$$

que puede ser escrita como¹

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} &= \left(\frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds} \times \hat{\mathbf{n}} \right) + \left(\hat{\mathbf{t}} \times \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{ds} \right) \\ &= (\kappa \hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{n}}) + \left(\hat{\mathbf{t}} \times \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{ds} \right) \end{aligned}$$

pero $\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{n}} = 0$, por lo que queda

$$\frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} = \left(\hat{\mathbf{t}} \times \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{ds} \right) \quad (\text{D.8})$$

1

$$\frac{d}{dt} [\mathbf{u}(t) \times \mathbf{v}(t)] = \mathbf{u}' \times \mathbf{v} + \mathbf{u} \times \mathbf{v}'$$

haciendo el producto punto con $\hat{\mathbf{t}}$

$$\hat{\mathbf{t}} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} = \hat{\mathbf{t}} \cdot \left(\hat{\mathbf{t}} \times \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{ds} \right)$$

usando la propiedad $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = 0$, tenemos

$$\hat{\mathbf{t}} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} = 0 \quad (\text{D.9})$$

lo que nos dice que $\hat{\mathbf{t}}$ es perpendicular a $\frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds}$. En consecuencia de (D.7) y (D.9), podemos decir que $\frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds}$ es paralelo a $\hat{\mathbf{n}}$. Esto es

$$\frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} = -\tau(s)\hat{\mathbf{n}} \quad (\text{D.10})$$

donde $\tau(s)$ es la **torsión**. Si hacemos el producto punto de la ec. (D.10) por el vector normal $\hat{\mathbf{n}}$, obtenemos

$$\tau = -\hat{\mathbf{n}} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} \quad (\text{D.11})$$

La torsión es una medida de cómo cambia el vector $\hat{\mathbf{b}}$ con respecto al parámetro s .

Finalmente, consideremos $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{b}} \times \hat{\mathbf{t}}$. Derivemos

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\mathbf{n}}}{ds} &= \frac{d\hat{\mathbf{b}}}{ds} \times \hat{\mathbf{t}} + \hat{\mathbf{b}} \times \frac{d\hat{\mathbf{t}}}{ds} \\ &= (-\tau\hat{\mathbf{n}}) \times \hat{\mathbf{t}} + \hat{\mathbf{b}} \times (\kappa\hat{\mathbf{n}}) \\ &= -\tau\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{t}} + \kappa\hat{\mathbf{b}} \times \hat{\mathbf{n}} \\ &= -\tau(-\hat{\mathbf{b}}) + \kappa(-\hat{\mathbf{t}}) \end{aligned}$$

Con lo que se llega a

$$\frac{d\hat{\mathbf{n}}}{ds} = -\kappa\hat{\mathbf{t}} + \tau\hat{\mathbf{b}} \quad (\text{D.12})$$

y así se obtienen las ecuaciones de Frenet-Serret. En contraste con la curvatura, la torsión puede tener ambos signos, positivo o negativo.

Apéndice E

Cálculos algebraicos

E.1. Simplificación del determinante Δ

Sustituyamos las ecuaciones (5.88) y (5.91) en (5.92)

$$\begin{aligned}
 \det \mathbb{A} = & \frac{\rho R^2 a}{\rho_0^2} \left[x'(\chi) + \frac{\rho R(\theta)}{\rho_0} \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_x + \right. \right. \\
 & + \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_x - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_x + \\
 & \left. \left. + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_x \cos \theta + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_x \sin \theta \right) \right] (b_y n_z - b_z n_y) \\
 & + \frac{\rho R^2 a}{\rho_0^2} \left[y'(\chi) + \frac{\rho R(\theta)}{\rho_0} \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_y + \right. \right. \\
 & + \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_y - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_y + \\
 & \left. \left. + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_y \cos \theta + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_y \sin \theta \right) \right] (b_z n_x - b_x n_z) \\
 & + \frac{\rho R^2 a}{\rho_0^2} \left[z'(\chi) + \frac{\rho R(\theta)}{\rho_0} \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_z + \right. \right. \\
 & + \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_z - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_z + \\
 & \left. \left. + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_z \cos \theta + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_z \sin \theta \right) \right] (b_x n_y - b_y n_x)
 \end{aligned}$$

que puede ser reescrita como

$$\begin{aligned}
\det \mathbb{A} &= \frac{\rho R^2 a}{\rho_0^2} [x'(\chi) (b_y n_z - b_z n_y) + y'(\chi) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
&+ z'(\chi) (b_x n_y - b_y n_x)] + \\
&+ \frac{\rho^2 R^3 a}{\rho_0^3} \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_x + \right. \\
&+ \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_x - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_x + \\
&+ \left. \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_x \cos \theta + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_x \sin \theta \right) (b_y n_z - b_z n_y) + \\
&+ \frac{\rho^2 R^3 a}{\rho_0^3} \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_y + \right. \\
&+ \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_y - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_y + \\
&+ \left. \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_y \cos \theta + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_y \sin \theta \right) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
&+ \frac{\rho^2 R^3 a}{\rho_0^3} \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_z + \right. \\
&+ \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_z - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_z + \\
&+ \left. \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_z \cos \theta + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_z \sin \theta \right) (b_x n_y - b_y n_x)
\end{aligned}$$

esto es

$$\begin{aligned}
\det \mathbb{A} = & \frac{\rho R^2 a}{\rho_0^2} [x'(\chi) (b_y n_z - b_z n_y) + y'(\chi) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
& + z'(\chi) (b_x n_y - b_y n_x)] + \frac{\rho^2 R^3 a}{\rho_0^3} \left[\left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \ell \kappa t_x + \right. \right. \\
& + \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_x - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_x + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_x \cos \theta + \\
& + \left. \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_x \sin \theta \right) (b_y n_z - b_z n_y) + \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_y + \right. \\
& + \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_y - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_y + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_y \cos \theta + \\
& + \left. \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_y \sin \theta \right) (b_z n_x - b_x n_z) + \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_z + \right. \\
& + \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_z - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_z + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_z \cos \theta + \\
& + \left. \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_z \sin \theta \right) (b_x n_y - b_y n_x) \Big]
\end{aligned}$$

realizando un producto se puede llegar a

$$\begin{aligned}
\det \mathbb{A} &= \frac{\rho R^2 a}{\rho_0^2} [x'(\chi) (b_y n_z - b_z n_y) + y'(\chi) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
&+ z'(\chi) (b_x n_y - b_y n_x)] + \frac{\rho^2 R^3 a}{\rho_0^3} \left[\left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_x \right) \times \right. \\
&\times (b_y n_z - b_z n_y) + \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_x - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_x + \right. \\
&+ \left. \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_x \cos \theta + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_x \sin \theta \right) (b_y n_z - b_z n_y) + \\
&+ \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_y \right) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
&+ \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_y - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_y + \right. \\
&+ \left. \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_y \cos \theta + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_y \sin \theta \right) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
&+ \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_z \right) (b_x n_y - b_y n_x) + \\
&+ \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_z - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_z + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_z \cos \theta + \right. \\
&+ \left. \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_z \sin \theta \right) (b_x n_y - b_y n_x) \left. \right]
\end{aligned}$$

reescribiendo nuevamente

$$\begin{aligned}
\det \mathbb{A} &= \frac{\rho R^2 a}{\rho_0^2} [x'(\chi) (b_y n_z - b_z n_y) + y'(\chi) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
&+ z'(\chi) (b_x n_y - b_y n_x)] + \\
&+ \frac{\rho^2 R^3 a}{\rho_0^3} \left[\left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_x \right) (b_y n_z - b_z n_y) + \right. \\
&+ \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_y \right) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
&+ \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_z \right) (b_x n_y - b_y n_x) + \\
&+ \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_x - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_x + \right. \\
&+ \left. \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_x \cos \theta + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_x \sin \theta \right) (b_y n_z - b_z n_y) + \\
&+ \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_y - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_y + \right. \\
&+ \left. \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_y \cos \theta + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_y \sin \theta \right) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
&+ \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_z - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_z + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_z \cos \theta + \right. \\
&+ \left. \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_z \sin \theta \right) (b_x n_y - b_y n_x) \Big]
\end{aligned}$$

Concentremos en los últimos tres términos de la expresión anterior

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_x - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_x + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_x \cos \theta + \right. \\
& \left. + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_x \sin \theta \right) (b_y n_z - b_z n_y) + \\
& \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_y - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_y + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_y \cos \theta + \right. \\
& \left. + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_y \sin \theta \right) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
& \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_z - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_z + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_z \cos \theta + \right. \\
& \left. + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_z \sin \theta \right) (b_x n_y - b_y n_x) \\
& = \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_x (b_y n_z - b_z n_y) - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_x (b_y n_z - b_z n_y) + \\
& + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_x \cos \theta (b_y n_z - b_z n_y) + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_x \sin \theta (b_y n_z - b_z n_y) + \\
& + \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_y (b_z n_x - b_x n_z) - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_y (b_z n_x - b_x n_z) + \\
& + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_y \cos \theta (b_z n_x - b_x n_z) + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_y \sin \theta (b_z n_x - b_x n_z) + \\
& + \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_z (b_x n_y - b_y n_x) - \frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_z (b_x n_y - b_y n_x) + \\
& + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_z \cos \theta (b_x n_y - b_y n_x) + \frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_z \sin \theta (b_x n_y - b_y n_x)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= b_y n_z \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_x \right) - b_z n_y \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_x \right) + \\
&+ b_y n_z \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_x \right) - b_z n_y \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_x \right) + \\
&+ b_y n_z \left(\frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_x \cos \theta \right) - b_z n_y \left(\frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_x \cos \theta \right) + \\
&+ b_y n_z \left(\frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_x \sin \theta \right) - b_z n_y \left(\frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_x \sin \theta \right) + \\
&+ b_z n_x \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_y \right) - b_x n_z \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_y \right) \\
&+ b_z n_x \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_y \right) - b_x n_z \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_y \right) + \\
&+ b_z n_x \left(\frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_y \cos \theta \right) - b_x n_z \left(\frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_y \cos \theta \right) + \\
&+ b_z n_x \left(\frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_y \sin \theta \right) - b_x n_z \left(\frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_y \sin \theta \right) + \\
&+ b_x n_y \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_z \right) - b_y n_x \left(\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \tau b_z \right) + \\
&+ b_x n_y \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_z \right) - b_y n_x \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \sin \theta \tau n_z \right) + \\
&+ b_x n_y \left(\frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_z \cos \theta \right) - b_y n_x \left(\frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} n_z \cos \theta \right) + \\
&+ b_x n_y \left(\frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_z \sin \theta \right) - b_y n_x \left(\frac{d(\sqrt{a})}{d\chi} b_z \sin \theta \right) \\
&= 0
\end{aligned}$$

Con esto la expresión para el determinante de \mathbb{A} queda

$$\begin{aligned}
\det \mathbb{A} &= \frac{\rho R^2 a}{\rho_0^2} [x'(\chi) (b_y n_z - b_z n_y) + y'(\chi) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
&+ z'(\chi) (b_x n_y - b_y n_x)] + \\
&+ \frac{\rho^2 R^3 a}{\rho_0^3} \left[\left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_x \right) (b_y n_z - b_z n_y) + \right. \\
&+ \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_y \right) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
&+ \left. \left(-\frac{ds}{d\chi} \sqrt{a(\chi)} \cos \theta \kappa t_z \right) (b_x n_y - b_y n_x) \right]
\end{aligned}$$

que puede ser reescrito como

$$\begin{aligned}
\det \mathbb{A} &= \frac{\rho R^2 a}{\rho_0^2} [x'(\chi) (b_y n_z - b_z n_y) + y'(\chi) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
&+ z'(\chi) (b_x n_y - b_y n_x)] + \\
&+ \frac{\rho^2 \kappa R^3 a^{3/2} \cos \theta}{\rho_0^3} \frac{ds}{d\chi} [(-t_x) (b_y n_z - b_z n_y) + (-t_y) (b_z n_x - b_x n_z) + \\
&+ (-t_z) (b_x n_y - b_y n_x)]
\end{aligned}$$

es decir,

$$\begin{aligned}
\det \mathbb{A} &= \frac{\rho R^2 a}{\rho_0^2} [(z' n_y - y' n_z) b_x + (x' n_z - z' n_x) b_y + (y' n_x - x' n_y) b_z] + \\
&+ \frac{\rho^2 \kappa R^3 a^{3/2} \cos \theta}{\rho_0^3} \frac{ds}{d\chi} \times \\
&\times [(t_y n_z - t_z n_y) b_x + (t_z n_x - t_x n_z) b_y + (t_x n_y - t_y n_x) b_z] \quad (\text{E.1}) \\
&= \frac{\rho^2 R^3 \cos \theta a^{3/2}(\chi) \kappa(\chi)}{\rho_0^3} \frac{ds}{d\chi} \times \\
&\times \underbrace{[(t_y n_z - t_z n_y) b_x + (t_z n_x - t_x n_z) b_y + (t_x n_y - t_y n_x) b_z]}_{\beta(\chi)} + \\
&+ \frac{\rho R^2 a(\chi)}{\rho_0^2} \underbrace{[(z' n_y - y' n_z) b_x + (x' n_z - z' n_x) b_y + (y' n_x - x' n_y) b_z]}_{\alpha(\chi)}
\end{aligned}$$

concentremos en¹

$$\begin{aligned}
\alpha(\chi) &= (z'n_y - y'n_z)b_x + (x'n_z - z'n_x)b_y + (y'n_x - x'n_y)b_z \\
&= \left(\frac{ds}{d\chi}t_zn_y - \frac{ds}{d\chi}t_y n_z\right)b_x + \left(\frac{ds}{d\chi}t_x n_z - \frac{ds}{d\chi}t_z n_x\right)b_y + \\
&+ \left(\frac{ds}{d\chi}t_y n_x - \frac{ds}{d\chi}t_x n_y\right)b_z \\
&= -\frac{ds}{d\chi}[(t_y n_z - t_z n_y)b_x + (t_z n_x - t_x n_z)b_y + (t_x n_y - t_y n_x)b_z] \\
&= -\frac{ds}{d\chi}[b_x b_x + b_y b_y + b_z b_z] = -\frac{ds}{d\chi}[b_x^2 + b_y^2 + b_z^2] = -\frac{ds}{d\chi}\hat{\mathbf{b}} \cdot \hat{\mathbf{b}} \\
&= -\frac{ds}{d\chi}
\end{aligned} \tag{E.3}$$

y

$$\begin{aligned}
\beta(\chi) &= (t_y n_z - t_z n_y)b_x + (t_z n_x - t_x n_z)b_y + (t_x n_y - t_y n_x)b_z \\
&= b_x b_x + b_y b_y + b_z b_z = b_x^2 + b_y^2 + b_z^2 = \hat{\mathbf{b}} \cdot \hat{\mathbf{b}} \\
&= 1
\end{aligned} \tag{E.4}$$

¹ Escribamos explícitamente las componentes de $\hat{\mathbf{b}}$

$$\hat{\mathbf{b}} = \hat{\mathbf{t}} \times \hat{\mathbf{n}} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ t_x & t_y & t_z \\ n_x & n_y & n_z \end{vmatrix} = \underbrace{(t_y n_z - t_z n_y)}_{b_x} \hat{i} - \underbrace{(t_x n_z - t_z n_x)}_{b_y} \hat{j} + \underbrace{(t_x n_y - t_y n_x)}_{b_z} \hat{k} \tag{E.2}$$

Además, tomemos la expresión (5.5)

$$\hat{\mathbf{t}} = \mathbf{r}'(\chi) \frac{d\chi}{ds}$$

y reescribamosla en término de sus componentes

$$\hat{\mathbf{t}} = \underbrace{\frac{d\chi}{ds}x'(\chi)}_{t_x} \hat{i} + \underbrace{\frac{d\chi}{ds}y'(\chi)}_{t_y} \hat{j} + \underbrace{\frac{d\chi}{ds}z'(\chi)}_{t_z} \hat{k}$$

Así tenemos

$$x' = \frac{ds}{d\chi}t_x, \quad y' = \frac{ds}{d\chi}t_y, \quad z' = \frac{ds}{d\chi}t_z$$

con lo que se obtiene la ec. (5.93)

$$\Delta = \frac{ds}{d\chi} \left(\frac{\rho^2 a^{3/2}(\chi) R^3(\theta) \cos \theta}{\rho_0^3} \kappa(\chi) - \frac{\rho a(\chi) R^2(\theta)}{\rho_0^2} \right)$$

E.2. Notación compacta para sistemas de ecuaciones

Escribamos las ecuaciones (5.63), (5.66) y (5.69) en una notación más compacta

$$\frac{\partial x^\mu}{\partial \tilde{x}^1} = \frac{\epsilon_{1ab} \epsilon^{\mu\mu_1\mu_2}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^{\mu_1}} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^{\mu_2}} \quad (\text{E.5})$$

donde $\epsilon^{\mu_1\mu_2\mu_3}$ y $\epsilon_{a_1a_2a_3}$ son los símbolos de Levi-Civita.

Generalizando (E.5) para todas las soluciones se tiene una ecuación de la forma

$$\frac{\partial x^\mu}{\partial \tilde{x}^a} = \frac{\epsilon_{aa_1a_2} \epsilon^{\mu\mu_1\mu_2}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \quad (\text{E.6})$$

donde $a = 1, 2$ y 3 . Tomemos la ec. (E.5) y desarrollemosla

$$\begin{aligned}
\frac{\partial x^1}{\partial \tilde{x}^1} &= \frac{\epsilon_{1ab} \epsilon^{1\mu_1\mu_2}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^{\mu_1}} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^{\mu_2}} \\
&= \frac{\epsilon_{1ab} \epsilon^{11\mu_2}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^{\mu_2}} + \frac{\epsilon_{1ab} \epsilon^{12\mu_2}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^{\mu_2}} + \frac{\epsilon_{1ab} \epsilon^{13\mu_2}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^3} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^{\mu_2}} \\
&= \frac{\epsilon_{1ab} \epsilon^{123}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^3} + \frac{\epsilon_{1ab} \epsilon^{132}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^3} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^2} \\
&= \frac{\epsilon_{1ab}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^3} - \frac{\epsilon_{1ab}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^a}{\partial x^3} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^2} \\
&= \frac{\epsilon_{12b}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^3} + \frac{\epsilon_{13b}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^3} - \frac{\epsilon_{12b}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^2} - \frac{\epsilon_{13b}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^2} \\
&= \frac{\epsilon_{123}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} + \frac{\epsilon_{132}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} - \frac{\epsilon_{123}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} - \frac{\epsilon_{132}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \\
&= \frac{1}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} + \frac{(-1)}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} - \frac{1}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} - \frac{(-1)}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \\
&= \frac{1}{2\Delta(x)} \left[\frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} - \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} - \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} + \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \right] \\
&= \frac{1}{2\Delta(x)} \left[2 \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} - 2 \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} \right] \\
&= \frac{1}{\Delta(x)} \left[\frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} - \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} \right]
\end{aligned}$$

Finalmente

$$\frac{\partial x^1}{\partial \tilde{x}^1} = \frac{1}{\Delta} \left[\frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} - \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} \right] \quad (\text{E.7})$$

que es la ecuación (5.63). En el cálculo anterior, por simplicidad, se omitieron los términos con coeficientes de ϵ repetidos ya que estos serán nulos.

E.3. Notación compacta del determinante

Verifiquemos que

$$\Delta = \frac{1}{3!} \epsilon^{\mu_1\mu_2\mu_3} \epsilon_{a_1a_2a_3} \frac{\partial \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_3}}{\partial x^{\mu_3}}$$

términos con índices repetidos que hacen que los símbolos de Levi-Civita se anulen). Al agrupar los términos que son semejantes nos damos cuenta que se repite de a 6, esto es

$$\begin{aligned}
\Delta &= \frac{1}{3!} \left[6 \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} - 6 \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} + 6 \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^3} + \right. \\
&\quad \left. - 6 \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} + 6 \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} - 6 \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^3} \right] \\
&= \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} - \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} + \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^3} + \\
&\quad - \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} + \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} - \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^3}
\end{aligned}$$

Reagrupando tenemos

$$\begin{aligned}
\Delta &= \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^1} \left(\frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} - \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} \right) + \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^2} \left(\frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^3} - \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^3} \right) + \\
&\quad + \frac{\partial \tilde{x}^1}{\partial x^3} \left(\frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^2} - \frac{\partial \tilde{x}^3}{\partial x^1} \frac{\partial \tilde{x}^2}{\partial x^2} \right) \tag{E.8}
\end{aligned}$$

que es el determinante (5.92).

E.4. Símbolos de Christoffel en SNC

La expresión para el cambio de coordenadas de los símbolos de Christoffel vienen dados por la expresión (B.34)

$$\Gamma_{\nu\sigma}^{\mu} = \Gamma_{bc}^a \frac{\partial x^{\mu}}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial \tilde{x}^b}{\partial x^{\nu}} \frac{\partial \tilde{x}^c}{\partial x^{\sigma}} + \frac{\partial x^{\mu}}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial^2 \tilde{x}^a}{\partial x^{\nu} \partial x^{\sigma}} \tag{E.9}$$

como para la métrica euclidiana $\Gamma_{bc}^a = 0$, tenemos

$$\Gamma_{\nu\sigma}^{\mu} = \frac{\partial x^{\mu}}{\partial \tilde{x}^a} \frac{\partial^2 \tilde{x}^a}{\partial x^{\nu} \partial x^{\sigma}} \tag{E.10}$$

Ahora, sustituyendo la ecuación (E.6) en (E.10) obtenemos

$$\Gamma_{\nu\sigma}^{\mu} = \frac{\epsilon_{aa_1a_2} \epsilon^{\mu\mu_1\mu_2}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \frac{\partial^2 \tilde{x}^a}{\partial x^{\nu} \partial x^{\sigma}} \tag{E.11}$$

Con la expresión (E.11), ya se tienen todos los elementos para calcular la derivada covariante en nuestro sistema CCM.

E.5. Relación de los Símbolos de Christoffel con el determinante

Tomemos la expresión (E.3), que es la expresión del determinante escrito en notación compacta

$$\Delta = \frac{1}{3!} \epsilon^{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \epsilon_{a_1 a_2 a_3} \frac{\partial \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_3}}{\partial x^{\mu_3}} \quad (\text{E.12})$$

Con esto, si derivamos el operador nabra

$$\begin{aligned} \partial_\mu \Delta &= \frac{\partial \Delta}{\partial x^\mu} = \frac{\partial}{\partial x^\mu} \left(\frac{1}{3!} \epsilon^{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \epsilon_{a_1 a_2 a_3} \frac{\partial \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_3}}{\partial x^{\mu_3}} \right) \\ &= \frac{1}{3!} \epsilon^{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \epsilon_{a_1 a_2 a_3} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \left(\frac{\partial \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_3}}{\partial x^{\mu_3}} \right) \\ &= \frac{1}{3!} \epsilon^{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \epsilon_{a_1 a_2 a_3} \frac{\partial \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \left(\frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_3}}{\partial x^{\mu_3}} \right) + \\ &+ \frac{1}{3!} \epsilon^{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \epsilon_{a_1 a_2 a_3} \frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_3}}{\partial x^{\mu_3}} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \left(\frac{\partial \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}} \right) \end{aligned}$$

Esto es

$$\begin{aligned} \partial_\mu \Delta &= \frac{1}{3!} \epsilon^{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \epsilon_{a_1 a_2 a_3} \frac{\partial \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}} \left(\frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \frac{\partial^2 \tilde{x}^{a_3}}{\partial x^\mu \partial x^{\mu_3}} + \frac{\partial^2 \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^\mu \partial x^{\mu_2}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_3}}{\partial x^{\mu_3}} \right) + \\ &+ \frac{1}{3!} \epsilon^{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \epsilon_{a_1 a_2 a_3} \frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_3}}{\partial x^{\mu_3}} \frac{\partial^2 \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^\mu \partial x^{\mu_1}} \\ &= \frac{1}{3!} \epsilon^{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \epsilon_{a_1 a_2 a_3} \frac{\partial \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \frac{\partial^2 \tilde{x}^{a_3}}{\partial x^\mu \partial x^{\mu_3}} + \\ &+ \frac{1}{3!} \epsilon^{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \epsilon_{a_1 a_2 a_3} \frac{\partial \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}} \frac{\partial^2 \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^\mu \partial x^{\mu_2}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_3}}{\partial x^{\mu_3}} + \\ &+ \frac{1}{3!} \epsilon^{\mu_1 \mu_2 \mu_3} \epsilon_{a_1 a_2 a_3} \frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_3}}{\partial x^{\mu_3}} \frac{\partial^2 \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^\mu \partial x^{\mu_1}} \end{aligned}$$

Ahora, recurramos a la ecuación (E.11)

$$\Gamma_{\nu\sigma}^\mu = \frac{\epsilon_{aa_1 a_2} \epsilon^{\mu\mu_1 \mu_2}}{2\Delta(x)} \frac{\partial \tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}} \frac{\partial \tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}} \frac{\partial^2 \tilde{x}^a}{\partial x^\nu \partial x^\sigma}$$

que reescribiendola toma la forma

$$2\Delta\Gamma_{\nu\sigma}^{\mu} = \epsilon_{aa_1a_2}\epsilon^{\mu\mu_1\mu_2}\frac{\partial\tilde{x}^{a_1}}{\partial x^{\mu_1}}\frac{\partial\tilde{x}^{a_2}}{\partial x^{\mu_2}}\frac{\partial^2\tilde{x}^a}{\partial x^{\nu}\partial x^{\sigma}}$$

Con esto, llegamos a que

$$\partial_{\mu}\Delta = \frac{2\Delta}{3!}\Gamma_{\mu_3\mu}^{\mu_3} + \frac{2\Delta}{3!}\Gamma_{\mu_2\mu}^{\mu_2} + \frac{2\Delta}{3!}\Gamma_{\mu_1\mu}^{\mu_1}$$

pero μ_1 , μ_2 y μ_3 son variables mudas por lo que podemos escribir

$$\begin{aligned}\partial_{\mu}\Delta &= \frac{2\Delta}{3!}\Gamma_{\sigma\mu}^{\sigma} + \frac{2\Delta}{3!}\Gamma_{\sigma\mu}^{\sigma} + \frac{2\Delta}{3!}\Gamma_{\sigma\mu}^{\sigma} \\ &= (3)\frac{2\Delta}{3!}\Gamma_{\sigma\mu}^{\sigma} = \Delta\Gamma_{\sigma\mu}^{\sigma}\end{aligned}$$

Así, podemos escribir

$$\Gamma_{\sigma\mu}^{\sigma} = \frac{1}{\Delta}\partial_{\mu}\Delta \tag{E.13}$$

Bibliografía

- [1] J. Crank, *The Mathematics of diffusion*. Clarendon Press, Oxford, 1975.
- [2] R. Brown, “Xxiv. additional remarks on active molecules,” *The Philosophical Magazine*, vol. 6, no. 33, pp. 161–166, 1829.
- [3] R. Brown, “On the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies,” *Edinburgh New Philosophical Journal*, vol. 5, pp. 358–371, 1828.
- [4] R. M. Mazo, *Brownian motion: fluctuations, dynamics, and applications*, vol. 112. Oxford University Press on Demand, 2002.
- [5] A. Einstein, “On the motion of small particles suspended in liquids at rest required by the molecular-kinetic theory of heat,” *Annalen Der Physik*, vol. 17, pp. 549–560, 1905.
- [6] P. S. Burada, G. Schmid, D. Reguera, M. Vainstein, J. Rubi, and P. Hänggi, “Entropic stochastic resonance,” *Physical Review Letters*, vol. 101, no. 13, p. 130602, 2008.
- [7] I. Pineda, *Sobre la difusión en sistemas confinados: Una aproximación al estudio de la difusión en canales*. PhD thesis, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, April 2013.

- [8] W. M. Saltzman, *Drug delivery: engineering principles for drug therapy*. Oxford University Press, 2001.
- [9] R. K. Jain, “Delivery of molecular and cellular medicine to solid tumors1,” *Advanced Drug Delivery Reviews*, vol. 46, no. 1-3, pp. 149–168, 2001.
- [10] J. Wang, Z. Lu, Y. Gao, M. G. Wientjes, and J. L. Au, “Improving delivery and efficacy of nanomedicines in solid tumors: role of tumor priming,” *Nanomedicine*, vol. 6, no. 9, pp. 1605–1620, 2011.
- [11] L. Dagdug, G. H. Weiss, and A. H. Gandjbakhche, “Effects of anisotropic optical properties on photon migration in structured tissues,” *Physics in Medicine & Biology*, vol. 48, no. 10, p. 1361, 2003.
- [12] V. Chernomordik, A. H. Gandjbakhche, G. H. Weiss, and L. Dagdug, “Effects of anisotropy of the turbid media on the photon penetration depth,” *Journal of Modern Optics*, vol. 57, no. 20, pp. 2048–2053, 2010.
- [13] B. Hille and Others, *Ion channels of excitable membranes*, vol. 507. Sinauer Sunderland, MA, 2001.
- [14] B. Alberts, A. Johnson, and P. Walter, “Garland science; new york: 2002,” *Molecular Biology of the Cell*, pp. 774–775.
- [15] Z. Siwy, I. Kosińska, A. Fuliński, and C. Martin, “Asymmetric diffusion through synthetic nanopores,” *Physical Review Letters*, vol. 94, no. 4, p. 048102, 2005.
- [16] K. Healy, B. Schiedt, and A. P. Morrison, “Solid-state nanopore technologies for nanopore-based dna analysis,” 2007.
- [17] P. Hanggi, “Physics of ligand migration in biomolecules,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 30, no. 2, pp. 401–412, 1983.

- [18] J. L. Barreda and H.-X. Zhou, "Theory and simulation of diffusion-influenced, stochastically gated ligand binding to buried sites," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 135, no. 14, p. 10B608, 2011.
- [19] J. S. Bader, R. W. Hammond, S. A. Henck, M. W. Deem, G. A. McDermott, J. M. Bustillo, J. W. Simpson, G. T. Mulhern, and J. M. Rothberg, "Dna transport by a micromachined brownian ratchet device," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 96, no. 23, pp. 13165–13169, 1999.
- [20] F. Daumas, N. Destainville, C. Millot, A. Lopez, D. Dean, and L. Salomé, "Confined diffusion without fences of a g-protein-coupled receptor as revealed by single particle tracking," *Biophysical Journal*, vol. 84, no. 1, pp. 356–366, 2003.
- [21] M. I. Monine, A. M. Berezhkovskii, E. J. Joslin, H. S. Wiley, D. A. Lauffenburger, and S. Y. Shvartsman, "Ligand accumulation in autocrine cell cultures," *Biophysical Journal*, vol. 88, no. 4, pp. 2384–2390, 2005.
- [22] S. C. Winans, B. L. Bassler, B. L. Bassler, and S. C. Winans, *Chemical communication among bacteria*. ASM Press Washington, DC, 2008.
- [23] D. M. Roberge, B. Zimmermann, F. Rainone, M. Gottsponer, M. Eyholzer, and N. Kockmann, "Microreactor technology and continuous processes in the fine chemical and pharmaceutical industry: is the revolution underway?," *Organic Process Research & Development*, vol. 12, no. 5, pp. 905–910, 2008.
- [24] M.-C. Daniel and D. Astruc, "Gold nanoparticles: assembly, supramolecular chemistry, quantum-size-related properties, and applications toward biology, catalysis, and nanotechnology," *Chemical Reviews*, vol. 104, no. 1, pp. 293–346, 2004.

- [25] A. Corma, “From microporous to mesoporous molecular sieve materials and their use in catalysis,” *Chemical Reviews*, vol. 97, no. 6, pp. 2373–2420, 1997.
- [26] J. Kärger, D. M. Ruthven, and D. N. Theodorou, *Diffusion in nanoporous materials*. John Wiley & Sons, 2012.
- [27] H.-S. P. Wong and D. Akinwande, *Carbon nanotube and graphene device physics*. Cambridge University Press, 2011.
- [28] M. Gershow and J. A. Golovchenko, “Recapturing and trapping single molecules with a solid-state nanopore,” *Nature Nanotechnology*, vol. 2, no. 12, p. 775, 2007.
- [29] L. T. Sexton, L. P. Horne, S. A. Sherrill, G. W. Bishop, L. A. Baker, and C. R. Martin, “Resistive-pulse studies of proteins and protein/antibody complexes using a conical nanotube sensor,” *Journal of the American Chemical Society*, vol. 129, no. 43, pp. 13144–13152, 2007.
- [30] J. C. Eijkel and A. Van Den Berg, “Nanofluidics: what is it and what can we expect from it?,” *Microfluidics and Nanofluidics*, vol. 1, no. 3, pp. 249–267, 2005.
- [31] C. S. Kumar, *Nanodevices for the life Sciences*. Wiley-VCH, 2006.
- [32] T. Graham, “Xvii. on the molecular mobility of gases,” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, vol. 153, pp. 385–405, 1863.
- [33] E. L. Cussler, *Diffusion: mass transfer in fluid systems*. Cambridge University Press, 2009.
- [34] H. Mehrer and N. A. Stolwijk, “Heroes and highlights in the history of diffusion,” *Diffusion Fundamentals*, vol. 11, no. 1, pp. 1–32, 2009.

- [35] A. Fick, “V. on liquid diffusion,” *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 10, no. 63, pp. 30–39, 1855.
- [36] T. Narasimhan, “Fourier’s heat conduction equation: History, influence, and connections,” *Reviews of Geophysics*, vol. 37, no. 1, pp. 151–172, 1999.
- [37] J. L. Lebowitz, “Pavel I. Krapivsky, Sidney Redner and Eli Ben-Naim: A kinetic view of statistical physics,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 143, no. 4, pp. 831–832, 2011.
- [38] S. Redner, *A guide to first-passage processes*. Cambridge University Press, 2001.
- [39] M. Von Smoluchowski, “Zur kinetischen theorie der brownischen molekularbewegung und der suspensionen,” *Annalen Der Physik*, vol. 326, no. 14, pp. 756–780, 1906.
- [40] M. H. Jacobs, *Diffusion processes*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [41] R. Zwanzig, “Diffusion past an entropy barrier,” *The Journal of Physical Chemistry*, vol. 96, no. 10, pp. 3926–3930, 1992.
- [42] L. Dagdug, M.-V. Vazquez, A. M. Berezhkovskii, and S. M. Bezrukov, “Unbiased diffusion in tubes with corrugated walls,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 133, no. 3, p. 034707, 2010.
- [43] M.-V. Vázquez and L. Dagdug, “Numerical study assessing the applicability of the reduction to effective one-dimensional description of diffusion in a hemispherical shaped tube,” *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, vol. 165, no. 17-18, pp. 987–991, 2010.
- [44] L. Dagdug, M.-V. Vazquez, A. M. Berezhkovskii, V. Y. Zitserman, and S. M. Bezrukov, “Diffusion in the presence of cylindrical obstacles

- arranged in a square lattice analyzed with generalized fick-jacobs equation,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 136, no. 20, p. 204106, 2012.
- [45] Y. Chávez, G. Chacón-Acosta, M.-V. Vázquez, and L. Dagdug, “Unbiased diffusion to escape complex geometries: is reduction to effective one-dimensional description adequate to assess narrow escape times?,” *Applied Mathematics*, vol. 5, no. 08, p. 1218, 2014.
- [46] Y. Chávez, M.-V. Vázquez, and L. Dagdug, “Unbiased diffusion through a linear porous media with periodic entropy barriers: a tube formed by contacting ellipses,” *Journal of Chemistry*, vol. 2015, 2015.
- [47] M. A. Armstrong, *Basic topology*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [48] A. A. García-Chung, G. Chacón-Acosta, and L. Dagdug, “On the covariant description of diffusion in two-dimensional confined environments,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 142, no. 6, p. 064105, 2015.
- [49] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products*. Academic Press, 2014.
- [50] L. Dagdug and I. Pineda, “Projection of two-dimensional diffusion in a curved midline and narrow varying width channel onto the longitudinal dimension,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 137, no. 2, p. 024107, 2012.
- [51] P. Kalinay and J. Percus, “Corrections to the fick-jacobs equation,” *Physical Review E*, vol. 74, no. 4, p. 041203, 2006.
- [52] L. Dagdug, A. A. García-Chung, and G. Chacón-Acosta, “On the description of brownian particles in confinement on a non-cartesian coordinates basis,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 145, no. 7, p. 074105, 2016.

-
- [53] N. Ogawa, “Diffusion in a curved tube,” *Physics Letters A*, vol. 377, no. 38, pp. 2465–2471, 2013.
- [54] R. d’Inverno, *Introducing Einstein’s relativity*, vol. 1. Clarendon Press Oxford, 1992.
- [55] C. Von Westenholz, *Differential forms in mathematical physics*, vol. 3. Elsevier, 2009.