

UNIVERSIDAD NACIONAL DE ROSARIO
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, INGENIERIA Y AGRIMENSURA

I.S.S.N. 03260690

CUADERNOS

DEL

INSTITUTO DE MATEMATICA "BEPPO LEVI"

V SEMINARIO SOBRE PROBLEMAS DE FRONTERA LIBRE Y SUS APLICACIONES

D. A. Tarzia (Editor)

Rosario, 19 al 21 de Diciembre de 1994

25

Rosario - República Argentina
1995

INDICE

PREFACIO	pág. ii-x
J.C. REGINATO – D.A. TARZIA, "Toma de agua y crecimiento de raíces de cultivos"	pág. 1-13
R.H. MASCHERONI, "Dos problemas de frontera libre acoplados: solidificación con simultánea sublimación"	pág. 15-26
J.I. ETCHEVERRY, "On a numerical method for solving a boundary value problem for $u_t = \alpha(u)_{xx}$"	pág. 27-34
D.A. TARZIA – C.V. TURNER, "El problema de Stefan a una fase para el líquido sobreenfriado con una condición de contorno convectiva"	pág. 35-45
L.T. VILLA – O.D. QUIROGA, "Modelos de frontera libre en transformaciones fluido – sólido reactivo"	pág. 47-62
V.A. KUZ, "One – dimension model for dynamic condensation of a vapor"	pág. 63-73
A. BOUCIGUEZ – L. SARAVIA, "Análisis térmico y solución numérica al problema de transferencia de calor en dos fases"	pág. 75-84
D.A. TARZIA – C.V. TURNER, "El comportamiento asintótico para un problema de Stefan a una fase con una condición de contorno convectivo"	pág. 85-92
CONTENIDO de la Serie Cuadern. Inst. Mat. Beppo Levi	pág. 93

PREFACIO

Dado el notable desarrollo que el tema ha experimentado en los últimos años (ver Anexo I), el *Departamento de Matemática de la Facultad de Ciencias Empresariales de la Universidad Austral* y el *Programa de Matemática Pura y Aplicada de Rosario, PROMAR (CONICET-UNR)*, que se desarrolla en el *Instituto de Matemática "Beppo Levi"* de la Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura de la Universidad Nacional de Rosario, emprendieron, a través de los proyectos de investigación y desarrollo "*Aplicaciones de Problemas de Frontera Libre*" y "*Problemas de Frontera Libre de la Física Matemática*", la organización del interdisciplinario *V Seminario sobre Problemas de Frontera Libre y sus Aplicaciones*, realizado en la ciudad de Rosario (Argentina) durante el período del 19 al 21 de diciembre de 1994.

Esta quinta edición se realizó en memoria del Profesor Julio Esteban Bouillet, destacado investigador en el área de Ecuaciones Diferenciales, recientemente desaparecido, quien fuera miembro del Comité Organizador y colaborador entusiasta de estos Seminarios desde sus comienzos.

El Comité Organizador estuvo compuesto por J. E. BOUILLET (IAM y UBA, Buenos Aires), E. A. GARCIA (CNEA, Buenos Aires), D. A. TARZIA (UA y PROMAR, Rosario) (Coordinador) y L. T. VILLA (UNSa, Salta).

La Secretaría estuvo a cargo de L. R. BERRONE, A. BRIOZZO (Coordinadora), G. G. GARGUICHEVICH, P. R. MARANGUNIC, M. F. NATALE, E. SANTILLAN MARCUS y M. C. SANZIEL.

Este Seminario ha sido realizado, en parte, gracias a subsidios que a tal efecto otorgaron la Fundación Antorchas, la Fundación J. Prats y el CONICET. Además, se contó con el auspicio del Comité Argentino de Transferencia de Calor y Materia (CAMAT).

Además colaboraron las siguientes entidades : CIDCA (CIC-CONICET-UNLP), La Plata; CNEA (sede Constituyentes), Buenos Aires; FAMAF (UNC), Córdoba; FCEFQ (UNRC), Río Cuarto; FCEyN (UBA), Buenos Aires; IAM (CONICET),

Buenos Aires; IFLYSIB (UNLP-CONICET-CIC); INENCO (CONICET-UNSa), Salta; INIQUI (CONICET-UNSa), Salta. En el Seminario participaron 37 personas provenientes de 8 ciudades argentinas (ver Anexo II – Lista de Participantes).

Los objetivos del Seminario fueron :

- 1) Gestar un *encuentro bianual/trianual* de las personas y grupos de investigación que trabajan en problemas de frontera libre y temas conexos, en particular, en el problema de Stefan (cambio de fase), a fin de provocar una *útil interacción* entre los mismos.
- 2) Despertar el interés y promover el acercamiento de jóvenes graduados en Matemática, Física, Ingeniería Química y ramas afines y, de esta manera, contribuir a la *formación de recursos humanos*, no limitando el encuentro sólo a una reunión de especialistas que se comunican las últimas novedades en la materia.

Esta quinta edición del Seminario estuvo constituida por conferencias sobre aspectos básicos del tema y conferencias referidas a las aplicaciones (ver Anexo III-Programa). En años sucesivos, los temas versarán sobre aspectos más específicos y complejos, ya sea desde un punto de vista teórico o numérico (no tratados en Seminarios anteriores) y los principios teóricos irán paulatinamente dando lugar a las aplicaciones. Se prevé la realización de una mesa redonda donde se invitará a industriales de distintas áreas para que expongan sobre los problemas no resueltos en sus respectivas empresas.

Para finalizar, quiero dejar constancia de mi sincero agradecimiento a los investigadores encargados de la redacción de estas notas como asimismo a todas aquellas personas e Instituciones que de una manera u otra han colaborado para el éxito del Seminario.

Domingo Alberto TARZIA

Compilador

Rosario, Marzo 1995.

ANEXO I

PROBLEMAS DE FRONTERA LIBRE

Los problemas de frontera libre son aquellos problemas de contorno donde interviene además una incógnita (la "frontera libre") que separa dos o más regiones, y sobre la cual se conocen datos que dependen del modelo analizado. Según el número de dimensiones del espacio, en lugar de una superficie de separación se podrá tener una curva o un número finito de puntos.

Un ejemplo típico es el problema de Stefan (o problema de cambio de fase), que estudia la temperatura en el espacio ocupado por dos fases de un cuerpo, generalmente una fase sólida y una líquida (por ej. hielo y agua en procesos de fusión o solidificación). Las funciones que representan las temperaturas de las dos fases satisfacen las correspondientes ecuaciones del calor. Sobre la superficie de separación, que puede variar en el tiempo y que se encuentra a temperatura constante, se impone una condición adicional que surge del principio de conservación de la energía. El interés y la dificultad del problema se debe a la presencia de dicha frontera libre, cuya determinación es de fundamental importancia en la práctica.

Otros ejemplos son :

- problemas de hidráulica, por ej. el del dique poroso, donde una superficie desconocida separa la zona seca de la zona húmeda;
- el problema del obstáculo, donde hay una zona de contacto entre el obstáculo y la configuración de equilibrio de la cuerda o membrana elástica;
- problemas de difusión-reacción gas-sólido en Ingeniería Química, donde la superficie incógnita separa la región del sólido ya atacada de la todavía no atacada;
- problemas de elasto-visco-plasticidad, problemas térmicos con pared semi-permeable, semiconductores bajo una unión P-N, problemas en medios porosos, problemas de mecánica de los fluidos, etc.

Entre las múltiples aplicaciones de estos problemas se pueden mencionar :

electropintura; envenenamiento y regeneración de catalizadores; combustión de sólidos; solidificación de aleaciones binarias; soldadura de metales; colada continua del acero; congelación de alimentos en la industria frigorífica; almacenamiento de energía térmica de origen solar por cambio de fase; oxidación del zirconio y fusión del dióxido de uranio en reactores nucleares, en caso de accidentes; procesos de ablación térmica; difusión-consumo de oxígeno en tejidos vivos, para el tratamiento médico de tumores mediante la aplicación de radiaciones; problemas de control óptimo ligados a procesos con cambio de fase; solidificación de suelos húmedos; derretimiento de glaciares; crecimiento de raíces de cultivo; etc.

El avance considerable que se ha obtenido en el desarrollo teórico de estos temas a nivel nacional, y sus variadas aplicaciones industriales que se encuentran en etapa inicial, impulsaron la realización de este V Seminario, prosiguiendo la línea de los ya concretados I y II Seminario sobre el Problema de Stefan y sus Aplicaciones (Rosario, 4-8/7/83 y 13-17/10/86, respectivamente) y III y IV Seminario sobre Problemas de Frontera Libre y sus Aplicaciones (Rosario, 11-15/10/1988 y 14-18/12/1992, respectivamente). El material correspondiente a los cuatro Seminarios anteriores ha sido publicado en la colección CUADERNOS del Instituto de Matemática "Beppo Levi", números 11, 12, 13, 14, 17, 18, 23 y 24.

ANEXO II

LISTA DE PARTICIPANTES

Nelson ACOSTA, Fac. de Ingeniería, Univ. Nac. de Salta, Buenos Aires 177, (4400) Salta (Argentina).

Carlos M. ALMIRON, B^o 17 de agosto, Sector 3, Mz. "C", Casa N^o 16, (3400) Corrientes (Argentina).

Laura ARAGONE, Depto Matemática, Fac. de Cs. Ex., Ing y Agrim., Univ. Nac. de Rosario, Av. Pellegrini 250, (2000) Rosario (Argentina).

Marcelo BALLARDINI, Pte. Roca 2374, (2000) Rosario (Argentina)

Lucio R. BERRONE, PROMAR (CONICET-UNR), Instituto de Matemática "B. Levi", Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario (Argentina).
E-Mail: LRBLEVI@BIBFEI.EDU.AR

Juan Pablo BORGNA, Depto Matemática, Fac. de Ciencias Exactas y Naturales, Univ. de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pabellón 1, 1428 Buenos Aires (Argentina).

Angélica BOUCIGUEZ, INENCO, Fac. de Ciencias Exactas, Univ. Nac. de Salta, Buenos Aires 177, (4400) Salta (Argentina).

Adriana BRIOZZO, Depto Matemática, FCE, Univ. Austral, Paraguay 1950, 2000 Rosario (Argentina).
E-Mail: MATEMATI@UAUFCE.EDU.AR

Víctor CORTINEZ, Instituto de Mecánica Aplicada, Dpto Ingeniería Univ. Nac. del Sur, (8000) Bahía Blanca (Argentina).

Silvia DI MARCO, Depto Matemática, Fac. de Cs. Ex., Ing y Agrim., Univ. Nac. de Rosario, Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario (Argentina).
E-Mail: DIMARCO@BIBFEI.EDU.AR

María DZIOBA, Depto Matemática, Fac. Cs. Ex. Fco. Qcas. y Nat., Univ. Nac. de Río Cuarto, Ciudad Universitaria, Ruta 36, km 601, 5800 Río Cuarto (Argentina).

Javier ETCHEVERRY, Instituto Argentino de Matemática, Viamonte 1636, 1er Cuerpo, 1055 Buenos Aires (Argentina). Depto. Mat. FCEN-UBA.
E-Mail: JETCHEV@MATE.DM.UBA.AR

Mónica A. FUSTER, Depto Matemática, Univ. Nac. del Sur, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca (Argentina).

Eduardo E. GARCIA, Depto Combustibles Nucleares, CNEA, Av. del Libertador 8250, 1429 Buenos Aires (Argentina).

E-Mail : EGARCIA@CNEA.EDU.AR

Graciela G. GARGUICHEVICH, Depto Matemática, FCE, Univ. Austral, Paraguay 1950, 2000 Rosario (Argentina); y PROMAR (CONICET-UNR), Instituto de Matemática "B. Levi", Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario (Argentina).

E-Mail: MATEMATI@UAUFCE.EDU.AR

Adriana GONZALEZ, Depto Matemática, Fac. Cs. Ex. Fco. Qcas., Univ. Nac. de Río Cuarto, Ciudad Universitaria, Ruta 36, km 601, 5800 Río Cuarto (Argentina).

Víctor A. KUZ, IFLYSIB (UNLP-CONICET-CIC), Calle 59 No. 789, Casilla de Correo 565, 1900 La Plata (Argentina). E-Mail: VAKUZ@IFLYSI.EDU.AR

Pedro LAMBERTI, FAMAF, Univ. Nac. de Córdoba, Ciudad Universitaria, Valparaiso y R. Martinez, 5000 Córdoba (Argentina).

E-Mail: LAMBERTI@FAMAF.EDU.AR

Claudia LEDERMAN, Depto. Matemática, Fac. De Cs. Ex. y Nat. UBA, Ciudad Universitaria, Pab. 1, (1428) Buenos Aires (Argentina).

E-Mail: CLEDERMA@MATE.DM.UBA.EDU.AR

Pablo LOTITO, Instituto Politécnico Superior, Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario (Argentina).

E-Mail: LOTITO@BIBFEI.EDU.AR

Elena M. MANCINELLI, Depto Matemática, Fac. de Cs. Ex., Ing y Agrim., Univ. Nac. de Rosario, Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario (Argentina).

Pedro R. MARANGUNIC, PROMAR (CONICET-UNR), Instituto de Matemática "B. Levi", Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario (Argentina).

E-Mail: PMARANGU@BIBFEI.EDU.AR

Rodolfo H. MASCHERONI, CIDCA, Calle 47 y 116, 1900 La Plata (Argentina).

Ma. Fernanda NATALE, Depto Matemática, FCE, Univ. Austral, Paraguay 1950, 2000 Rosario (Argentina).

E-Mail: MATEMATI@UAUFCE.EDU.AR

Leticia I. PETRICH, Fac. de Cs. Ex. y Nat. y Agrim. (UNNE), 9 de Julio 1449, (3400) Corrientes (Argentina).

Domingo PRATO, FAMAF, Univ. Nac. de Córdoba, Ciudad Universitaria, Valparaiso y R. Martinez, 5000 Córdoba (Argentina).

E-Mail: PRATO@FAMAF.EDU.AR

Juan C. REGINATO, Depto Física, Fac. Cs. Ex. Fco. Qcas. y Nat., Univ. Nac. de Río Cuarto, Ciudad Universitaria, Ruta 36, km 601, 5800 Río Cuarto (Argentina).

E-Mail: REGINATO@UNRCC.EDU.AR

Gabriela REYERO, Depto Matemática, Fac. de Cs. Ex., Ing y Agrim., Univ. Nac. de Rosario, Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario (Argentina).

E-Mail: REYERO@BIBFEI.EDU.AR

Julio ROSSI, Depto Matemática, Fac. de Ciencias Exactas y Naturales, Univ. de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pabellón 1, 1428 Buenos Aires (Argentina).

E-Mail: JROSSI@MATE.DM.UBA.AR

Gustavo SANCHEZ SARMIENTO, Depto Física, Fac. de Ingeniería, Univ. de Buenos Aires, Buenos Aires (Argentina).

Eduardo SANTILLAN MARCUS, Depto Matemática, Fac. de Cs. Ex., Ing y Agrim., Univ. Nac. de Rosario, Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario (Argentina); y Depto Matemática, FCE, Univ. Austral, Paraguay 1950, 2000 Rosario (Argentina).

E-Mail: MATEMATI@UAUFCE.EDU.AR

Ma. Cristina SANZIEL, PROMAR (CONICET-UNR), Instituto de Matemática "B. Levi", Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario (Argentina).

Domingo A. TARZIA, Depto Matemática, FCE, Univ. Austral, Paraguay 1950, 2000 Rosario (Argentina); y PROMAR (CONICET-UNR), Instituto de Matemática "B. Levi", Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario (Argentina).

E-Mail: TARZIA@UAUFCE.EDU.AR

Ma. Ofelia TIFNI, Fac. de Cs. Ex. y Nat. y Agrim. (UNNE), 9 de Julio 1449, (3400) Corrientes (Argentina).

Cristina V. TURNER, FAMAF, Univ. Nac. de Córdoba, Ciudad Universitaria, Valparaiso y R. Martinez, 5000 Córdoba (Argentina).

E-Mail: TURNER@MATE.UNCOR.EDU

Luis T. VILLA, INIQUI (CONICET-UNSa), Fac. de Ciencias Tecnológicas, Univ. Nac. de Salta, Buenos Aires 177, 4400 Salta (Argentina).

Noemí WOLANSKI, Depto Matemática, Fac. de Ciencias Exactas y Naturales, Univ. de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pabellón 1, 1428 Bs. As. (Argentina).

E-Mail: WOLANSKI@MATE.DM.UBA.AR

ANEXO III

PROGRAMA DEL SEMINARIO

Lunes 19 de Diciembre

- L. T. Villa – H. Quiroga, "Modelos de frontera libre en transformaciones fluido – sólido – reactivo".
- E. A. García, "Método de frontera móvil para simular la oxidación de circonio a la temperatura de fusionamiento de un reactor nuclear de potencia".
- C. V. Turner, "El problema de Stefan a una fase para un líquido sobrefriado con una condición convectiva en el borde fijo".
- P. R. Marangunic, "El problema de Stefan simétrico a dos fases con sobre-enfriamiento".

Martes 20 de Diciembre

- D. A. Tarzia, "Comportamiento asintótico en el problema de Stefan a una fase con una condición convectiva en el borde fijo".
- A. C. Briozzo, "Soluciones exactas en problemas de frontera libre con coeficiente de difusión no lineal".
- J. I. Etcheverry, "Sobre un método numérico para resolver un problema de contorno para $u_t = \alpha u_{xx}$ ".
- L. R. Berrone, "Mínimo de funciones armónicas en dominios convexos con condiciones mixtas de contorno".
- R. M. Mascheroni, "Dos problemas de frontera libre acoplados: solidificación con simultánea sublimación".
- A. M. González, "Determinación de coeficientes térmicos en materiales semi-infinitos con zona pastosa".
- M. C. Sanziel, "Análisis numérico de problemas de Stefan con fuente de energía interna".
- D. A. Tarzia, "Sobre el caso estacionario del problema de Stefan-Signorini con condiciones mixtas de contorno".

Miércoles 21 de Diciembre

- N. Wolanski, "Un problema de frontera libre proveniente de la teoría de combustión. Parte I".
- C. Lederman, "Un problema de frontera libre proveniente de la teoría de combustión. Parte II".
- V. A. Kuz, "Dinámica de la condensación de un vapor saturado".
- J. I. Etcheverry, "Modelo numérico de umbrales de fusión de metales irradiados por un cañón de electrones".
- A. C. Bouciguez, "Análisis térmico y solución numérica al problema de transferencia de calor en dos fases".
- J. C. Reginato, "Toma de agua y crecimiento de raíces de cultivo".
- G. Sánchez Sarmiento, "Determinación numérica del perfil de refractario erosionado y de la acumulación de materiales adheridos en un crisol de alto horno".

TOMA DE AGUA Y CRECIMIENTO DE RAICES DE CULTIVOS

J.C. Reginato

Dpto de Química-Física, Facultad de Ciencias Exactas Físico-Químico y Naturales

Univ. Nac. Río Cuarto, Ruta 8 - Km 601, (5800) - RIO CUARTO - Cordoba - ARGENTINA.

E-mail: Reginato@unrcc.edu.ar Fax: 54 (058) 645980/676224

D.A. Tarzia

Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Empresariales,

Universidad Austral, Paraguay 1950, (2000) - Rosario y

PROMAR (CONICET-UNR) - ARGENTINA

E-mail: Tarzia@uaufce.edu.ar

Se presenta un modelo mecánico simple para el crecimiento de raíces de cultivos debido a la toma de agua. El modelo es deducido para una única raíz y considera el efecto de los parámetros de sistema a través del acoplamiento entre el transporte de agua en suelo y la absorción de la misma por la raíz y no a través de los modelos clásicos de resistencias al flujo de agua en rizósfera, interface suelo-planta así como en el interior de la raíz. El efecto

de la capacidad suelo-agua es incluida para suelos de bajo contenido de agua con una aproximación basada en el modelo de tubos capilares de Alexander para el flujo de agua. Se obtienen soluciones analíticas a través del planteo de un modelo de frontera libre para el crecimiento de la raíz. Dichas soluciones, para el crecimiento radial vs. tiempo así como valores del potencial agua sobre la interfase raíz-suelo vs radio raíz son graficadas en función de parámetros característicos del sistema suelo-planta-agua.

INTRODUCCION

Una gran variedad de trabajos sobre el flujo de agua en el sistema suelo-planta han descripto al mismo por un análogo de la ley de Ohm (Van den Honert, 1948 [1]) y han sido definidas diferentes resistencias al flujo de agua hacia una única raíz en suelo (Gardner, 1960 [2]; Newman, 1969 [3]), en la interfase raíz-suelo (Herkelrath, 1977 [4]; Weatherley, 1978 [5]) y en el interior de la raíz (Newman, 1976 [6]; Fiscus, 1977 [7]), así como la importancia de las mismas sobre el transporte de agua (Passioura, 1980 [8]), pero sin considerar simultáneamente el transporte de agua, toma de agua y crecimiento radical acoplados. Recientemente, se han presentado trabajos sobre transporte de nutrientes y crecimiento radical acoplados mediante la modelización con problemas de frontera libre y solucionados a través del método cuasistacionario (Reginato et al., 1990 [9], 1991 [10]) y el método del balance integral (Reginato et al., 1993 [11], [12]). Similarmente, en forma análoga a los trabajos citados últimamente, el objetivo del presente modelo es estimar cualitativamente en una primera etapa los efectos de los diferentes parámetros

del sistema suelo-planta sobre el transporte de agua y crecimiento radical acoplados a través de un modelo de frontera libre a una fase (el suelo).

ANALISIS

De acuerdo al modelo de flujo de agua hacia una única raíz, el flujo en la dirección radial hacia la raíz por unidad de longitud de raíz está dado (Nye y Tinker, 1977 [13]) por:

$$v = -\pi r k(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial r} \quad (1)$$

donde v es el flujo de agua ($\text{cm}^3 \text{s}^{-1} \text{cm}^{-1}$), r es la distancia radial desde el centro de la raíz (cm) como se muestra en la figura 1, k es la conductibilidad hidráulica (cm s^{-1}) y ψ es el potencial agua (cm).

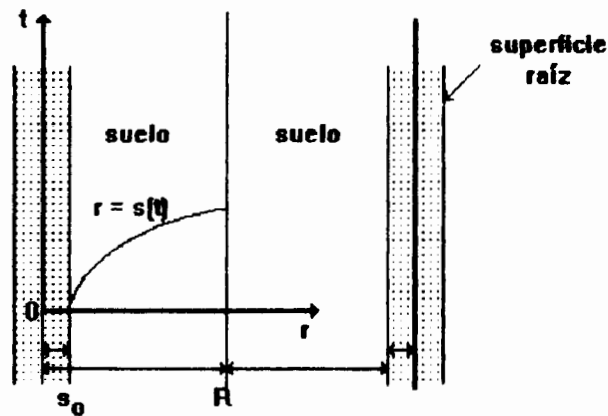


Figura 1

La ecuación de continuidad correspondiente es:

$$2\pi \frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial v}{\partial t} \quad (2)$$

donde θ es el contenido de agua del suelo. Como θ es función de ψ , $\theta = \theta(\psi)$ se cumple:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{d\theta}{d\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} = C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (3)$$

donde $C(\psi)$ es la capacidad diferencial de humedad del suelo y donde se asume que el suelo no presenta histéresis en el humedecimiento y secado del mismo (ψ es función univaluada).

Reemplazando la expresión (3) en la ecuación (2) y teniendo en cuenta la ecuación (1) resulta:

$$C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{k(\psi)}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial k(\psi)}{\partial \psi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right)^2 + k(\psi) \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \quad (4)$$

Las relaciones entre k , ψ y θ están dadas (Campbell, 1974 [15]) por:

$$\psi = \psi_e \left(\frac{\theta}{\theta_s} \right)^b = \psi_o \theta^{-b} \quad \text{con} \quad \psi_o = \psi_e \theta_s^b \quad (5)$$

$$k(\psi) = k_s \left(\frac{\psi_e}{\psi} \right)^n = k_o \psi^{-n} \quad \text{con} \quad k_o = k_s \psi_e^n \quad (6)$$

donde ψ_e es el potencial suelo-agua de entrada de aire (cm), θ_s es el contenido de saturación suelo-agua ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$), k_s es la conductividad hidráulica saturada del suelo, $-b$ es la pendiente de la curva característica suelo-agua $\psi = \psi(\theta)$ en un sistema coordenado log-log y n es la pendiente de la curva $k(\psi)$ en un sistema coordenado log-log.

De la expresión (5) se obtiene la relación inversa:

$$\theta = \theta_s \psi^{-(1/b)} \quad \text{con} \quad \theta_s = \psi_e^{(1/b)} \theta_s \quad (7)$$

Teniendo en cuenta la ecuación (6) para $\star k / \star \psi$ y la ecuación (7) para $C(\psi)$, la ecuación (4)

puede expresarse:

$$-\alpha \psi^{(1-n+1/b)} \frac{\psi_r}{r} + \beta \psi^{(-n+1/b)} \psi_r^2 - \alpha \psi^{(1-n+1/b)} \psi_{rr} = \psi_t \quad (8)$$

donde $\psi_r = \partial \psi / \partial r$, $\psi_{rr} = \partial^2 \psi / \partial r^2$, $\psi_t = \partial \psi / \partial t$. Con estas suposiciones, el crecimiento de raíces de cultivos es dado por el siguiente modelo de frontera libre (en coordenadas cilíndricas):

$$-\alpha \psi^{(1-n+1/b)} \frac{\psi_r}{r} + \beta \psi^{(-n+1/b)} \psi_r^2 - \alpha \psi^{(1-n+1/b)} \psi_{rr} = \psi_t, \quad s(t) < r < R, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (9.i)$$

$$\psi(r, 0) = \varphi(r), \quad s_0 \leq r \leq R, \quad (9.ii)$$

$$\psi(R, t) = \psi_R, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (9.iii)$$

$$-2\pi s(t)k(\psi(s(t), t))\psi_r(s(t), t) = \pi s^2(t)G(\psi(s(t), t)), \quad 0 < t < T \quad (9.iv)$$

$$F_r \pi s^2(t)G(\psi(s(t), t)) = -\psi(s(t), t) \frac{ds(t)}{dt}, \quad 0 < t < T \quad (9.v)$$

$$s(0) = s_0, \quad 0 < s_0 < R \quad (9.vi)$$

Aunque han sido propuestos numerosas funciones de extracción de agua por la raíz [15], una de las mas sencillas y por simplicidad matemática es la de Feddes, 1978 [16]) con $G(\psi)$ definida como:

$$G(\psi) = 0 \quad \text{para } 0 > \psi_s > \psi_1 \text{ con } \psi_1 = \text{potencial agua punto anaerobiosis}$$

$$G(\psi) = S_{\max} \quad \text{para } \psi_1 > \psi_s > \psi_2 \text{ con } \psi_2 = \text{potencial agua punto límite}$$

$$G(\psi) = S_{\max} \frac{(\psi_1 - \psi_3)}{(\psi_2 - \psi_3)} \quad \text{para } \psi_2 > \psi_s > \psi_3 \text{ con } \psi_3 = \text{potencial agua punto marchitez}$$

$$G(\psi) = 0 \quad \text{para } \psi_3 > \psi_s, \quad (10)$$

La figura 2 muestra la variación de $G(\psi)$ vs. ψ según se indicó arriba.

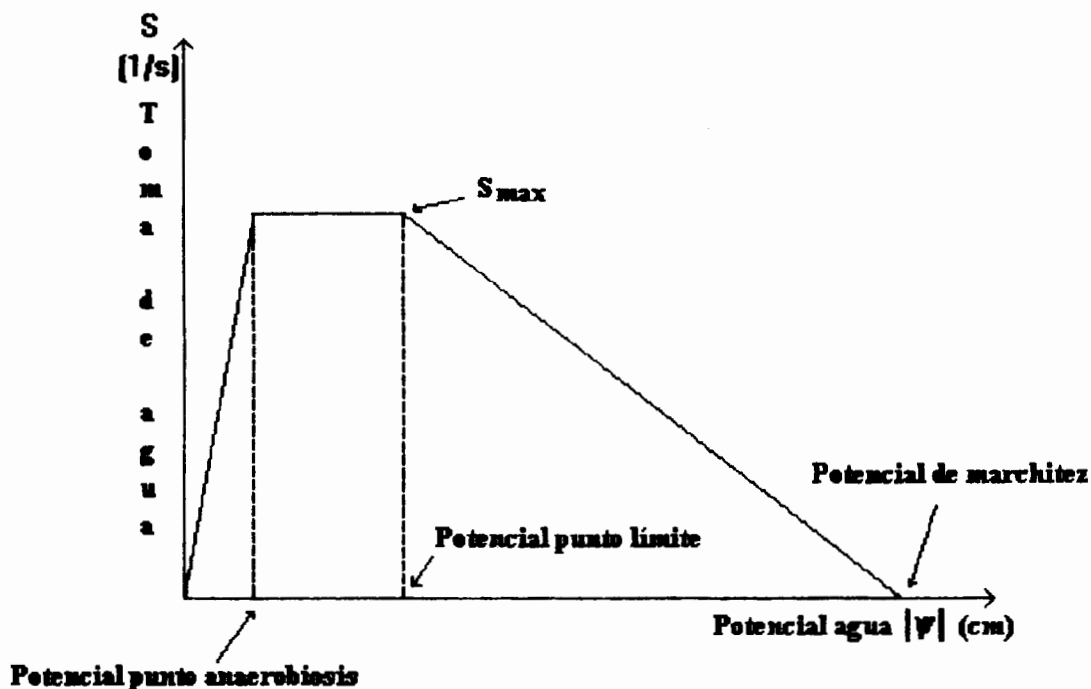


Figura 2

T es el tiempo para el cual existe solución. La ecuación (9.i) es la ecuación de conducción hidráulica expresada en términos del potencial agua ψ ; teniendo en cuenta la dependencia de la misma del contenido de agua de suelo θ . Nótese que es una ecuación a derivadas parciales con coeficientes fraccionarios que resultan de determinaciones experimentales. La condición (9.ii) es el perfil inicial de potenciales entre la raíz y el radio del cilindro de suelo R de donde extrae agua la raíz. La ecuación (9.iii) es la condición de contorno sobre R representando un potencial agua constante (como podría ser el obtenido bajo condiciones de riego por goteo). La ecuación (9.iv) representa el balance de energía por unidad de masa dado a través del potencial agua donde el miembro de la izquierda representa el flujo sobre la raíz y el término de la derecha el mismo flujo a través de la absorción de agua por la raíz. La ecuación (9.v) representa el mismo balance expresado en función de la velocidad de crecimiento $ds(t)/dt$. La condición (9.vi) es la condición inicial para la frontera libre $s(t)$ en la cual F_r es la fracción de agua incorporada y usada por el metabolismo radical para el crecimiento.

Las dos condiciones de frontera libre (9.iv) y (9.v) pueden ser escritas (para $G(\psi) = S_{\max}$) y para el caso muy particular (que conduce a una fácil resolución) de suelos arcillosos ($n = 2$) como:

$$\psi_r(s(t), t) = g(\psi(s(t), t)) = -\frac{s}{2k_o} S_{\max} \psi^2(s) \quad (11)$$

$$\frac{ds(t)}{dt} = f(\psi(s(t), t)) = -F_r \pi \frac{s^2}{\psi(s)} S_{\max} \quad (12)$$

y para $G(\psi) = S_{\max} (\psi_s - \psi_3) / (\psi_2 - \psi_3)$ como:

$$g(\psi) = A s \left[\psi_3 \psi_s^2 - \psi^3 \right] \quad \text{con} \quad A = -\frac{S_{\max}}{2k_o (\psi_2 - \psi_3)} \quad (13)$$

$$f(\psi) = B s^2 \left[1 - \frac{\psi_3}{\psi_s} \right] \quad \text{con} \quad B = \frac{-F_r \pi S_{\max}}{\psi_2 - \psi_3} \quad (14)$$

Para resolver el modelo de frontera libre (9.i,ii,iii,iv,v,vi) aplicamos el método cuasiestacionario (Stefan, 1889 [17]; Carslaw and Jaeger, 1959 [18]; Tarzia, 1988 [19]), a través del cual se resuelve la ecuación (9.i) con $\psi_t = 0$ junto a las restantes ecuaciones (9.ii,iii,iv,v,vi) (Este método, es decir, el método cuasistacionario, contiene implícitamente todos los modelos de capilaridad que relacionan n con b y en particular, el modelo válido para suelos con bajos contenido de agua ($n = 1 + 3/b$) (Alexander y Skagg, 1986 [20]) lo que produce las siguientes soluciones para $G(\psi) = S_{\max}$:

$$\psi(s(t), t) = \left(\frac{1}{\psi_R} + \frac{s^2 S_{\max}}{2k_o} \ln \frac{s}{R} \right)^{-1} \quad (15)$$

$$\frac{ds(t)}{dt} = -F_r s^2 S_{\max} \left(\frac{1}{\Psi_R} + \frac{s^2 S_{\max}}{2k_0} \ln \frac{s}{R} \right)^{-1} \quad (16)$$

y para $G(\psi) = S_{\max} (\psi_s - \psi_3) / (\psi_2 - \psi_3)$ las siguientes soluciones:

$$\psi(s(t), t) = \left\{ \frac{1}{\Psi_R} - \left[\frac{1}{\Psi_R} + As^2 \psi_3 \ln \left(\frac{s(t)}{R} \right) - \sqrt{\frac{1}{\Psi_R} + As^2 \psi_3 \ln \left(\frac{s(t)}{R} \right) - 4 \ln \left(\frac{s(t)}{R} \right) As^2 \left(\frac{\Psi_3}{\Psi_R} - 1 \right)} \right] / 2 \right\}^{-1} \quad (17)$$

$$f(\psi(s(t), t)) = Bs^2 \left[1 - \frac{\Psi_3}{\psi(s(t), t)} \right] \text{ con } \psi_s \text{ dada por (17)}. \quad (18)$$

Las ecuaciones (16) y (18) son resueltas por el método de Runge-Kutta para ecuaciones diferenciales ordinarias y las figuras 3 y 4 muestran algunos resultados teóricos para el potencial agua en la interfase raíz-suelo vs. radio raíz así como la frontera libre $s(t)$ vs. tiempo en función de algunos parámetros característicos del sistema suelo-agua-planta como la conductibilidad hidráulica k_0 para el caso de toma de agua proporcional a ψ .

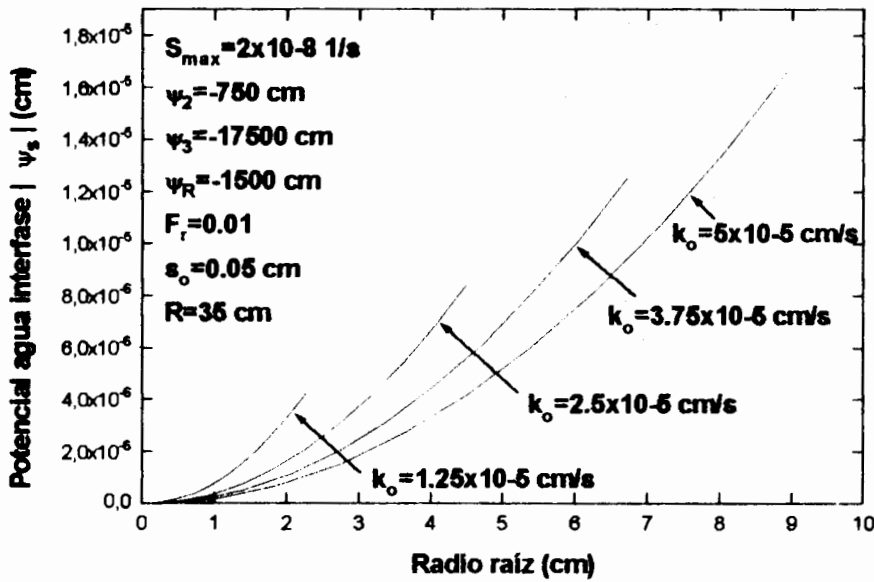


Figura 3

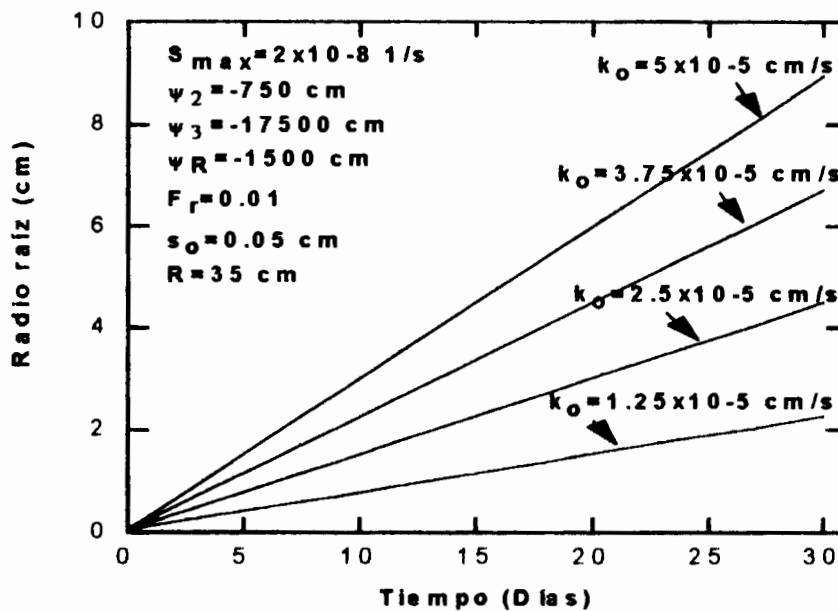


Figura 4

Un análisis mas detallado del efecto de los restantes parámetros se muestran en los siguientes diagramas de sensibilidad paramétrica en los cuales se varían cada uno de los parámetros con los restantes permaneciendo constantes en los valores 0.5, 1, 1.5 y 2 como se muestra en las figuras 5

y 6 que ilustran el crecimiento radial a los 12 días para los casos de toma de agua constante y toma de agua variable linealmente con ψ , respectivamente.

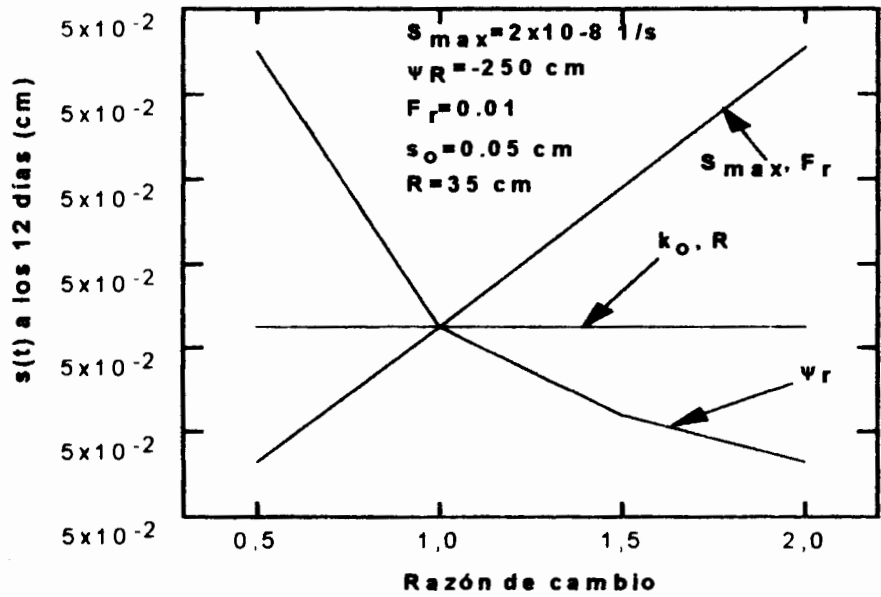


Figura 5

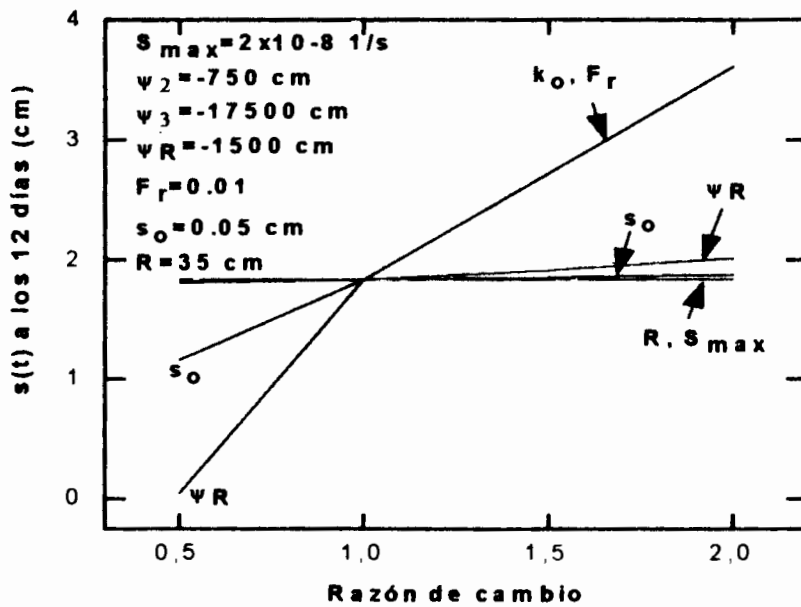


Figura 6

CONCLUSIONES

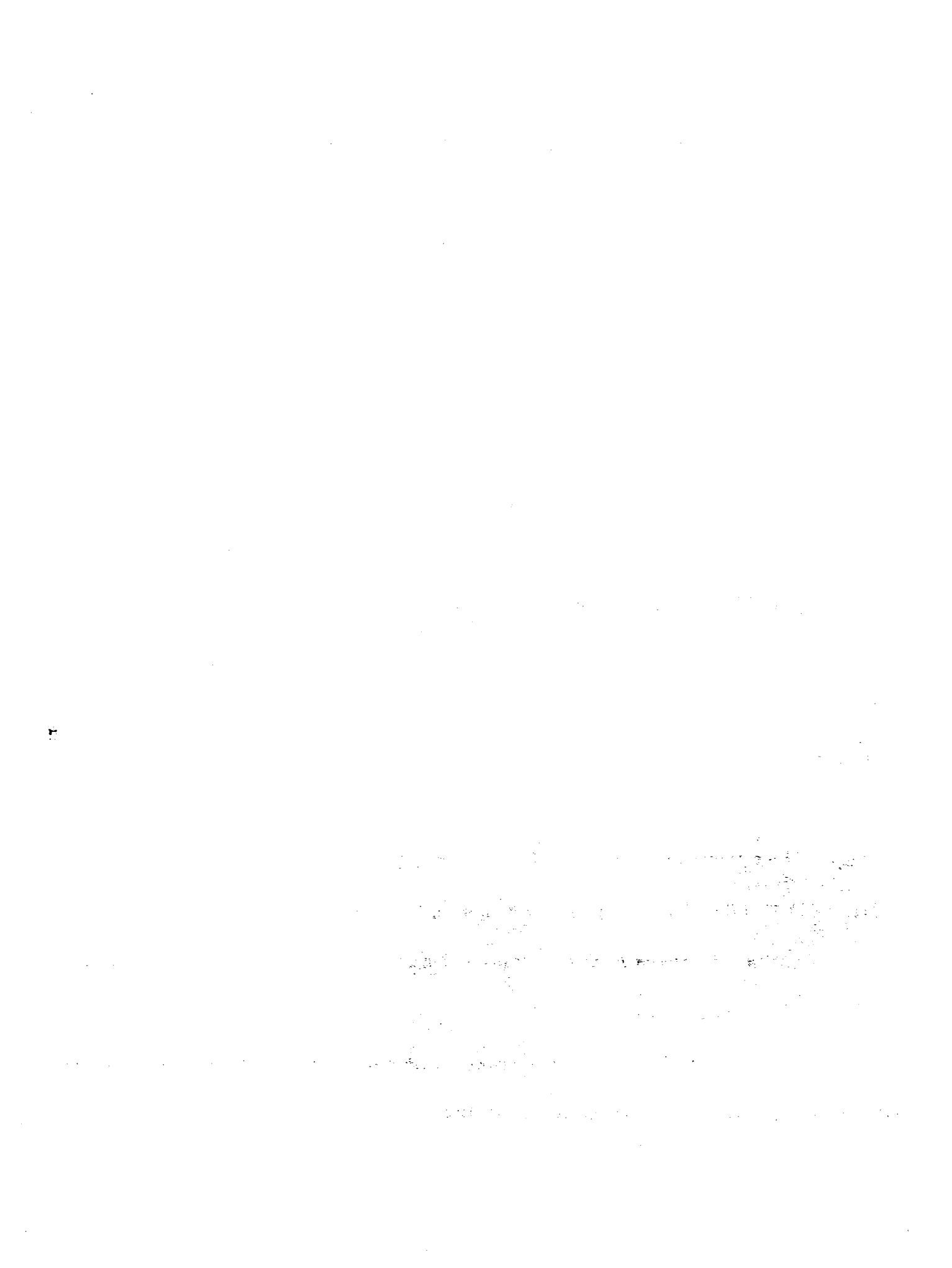
De un análisis más completo de los resultados, se concluye que el crecimiento radial es lineal para ambos casos de toma de agua constante y variando linealmente con el potencial agua. Asimismo se encuentra que la eficiencia del mecanismo de absorción para el crecimiento radial es mayor en el caso de toma de agua variando linealmente con el potencial agua. De la comparación de los diagramas de sensibilidad se concluye que a toma de agua constante, mientras más seco está el suelo (potencial agua mas grande) menor es el crecimiento. En cambio, para toma de agua proporcional al potencial agua, mientras más seco está el suelo, el crecimiento puede ser ligeramente mayor. Este comportamiento (en este tipo de suelos), puede ser de gran importancia tecnológica para el desarrollo genético de nuevas semillas que tengan valores óptimos del potencial agua máximo, S_{\max} , ψ_2 y ψ_3 adaptados a suelos particulares. Debe remarcarse que, aunque las soluciones obtenidas solo brindan una aproximación cualitativa de la situación real y el modelo sólo ha sido desarrollado para suelos arcillosos, estas conclusiones son útiles para el diseño de modelos más complejos (por ejemplo, en cualquier tipo de suelos) que predigan la toma de agua en forma más precisa, así como para la instrumentación de técnicas agrícolas que permitan optimizar el funcionamiento de cultivos desde el punto del aprovechamiento del agua del suelo.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Van den Honert, T.H. 1948. "*Water transport in plants as a catenary process*". Discuss. Faraday Soc. 3:146-153.

- [2] Gardner, W.R. 1960. ***"Dynamic aspects of water availability to plants"***. Soil Sci. 89:63-73.
- [3] Newman, E.I. 1969. ***"Resistance to water flow in soil and plant. I. Soil resistance in relation to amounts of root: theoretical estimates"***. J. Appl. Ecol. 16:1-12
- [4] Herkelrath, W.N, Miller, E.E. y Gardner W.R. 1977. ***"Water uptake by plants; II. The root contact model"***. Soil Sci. Soc. Am. J. 41:1039-1043.
- [5] Weatherley, P.E. 1978. ***"The hydraulic resistance of the soil-root interface: a cause of water stress in plants"***. The soil-root interface symposium, Oxford, England.
- [6] Newman, E.I. 1976. ***"Interaction between osmotic and pressure-induced flow in plant roots"***. Plant Physiol. 57:738-739.
- [7] Fiscus, E.L. 1977. ***"Effects of coupled solute and water flow in plant roots with special reference to Brouwe's experiment"***. J. Exp. Bot. 28:71-77.
- [8] Passioura J.B. 1980. ***"The transport of water from soil to shoot in wheat seedlings"***. J. Exp. Bot. 31:333-345
- [9] Reginato J.C., Tarzia D.A y Cantero A. 1990. ***"On the free boundary problem for the Michelis-Menten absorption model for root growth"***. Soil Sci. 150(4):722-729.
- [10] Reginato J.C., Tarzia D.A y Cantero A. 1991. ***"On the free boundary problem for the Michelis-Menten absorption model for root growth.High concentrations"***. Soil Sci. 152(2):61-72.
- [11] Reginato J.C., Tarzia D.A. 1993. ***"The balance integral method applied to root growth of crops"***. Int. J. Engng. Sci. 31(1):61-70

- [12] J.C.Reginato, D.A.Tarzia, M.A.Dzioba. 1993. *"Analytical study of the effects of some soil plant parameters on root growth owing to absorption of one mobile ions. A free boundary model"*. Plant and Soil , 15,(1993),185-196
- [13] Nye P.H. y Tinker P.B. 1977. *"Solute movement in the soil-root system"*. Studies in Ecology Vol. 4. University of California Press, Berkeley.
- [14] Campbell, G.S. 1974. *"A simple method for determining unsaturated conductivity from moisture retention data"*. Soil Sci. 117:311-314.
- [15] Molz, J.F. 1981. *"Models of water transport in the soil-plant system. A review"*. Water Res. Research, Vol 17, 5, 1245-1260
- [16] Feddes R.A, Kowalik, P.J., Malinka, K.K y Zaradny, H. 1978. *"Simulation of field water use and crop Yield"*. Centre for Agricultural Publishing and Documentation. Wageningen, the Netherlands.
- [17] Stefan J. 1889. *"Uber einige. probleme der theorie der warmelettung"*. Zitzungberichte der Kaiserlichen Akademic der Wissenschaften Mathematisch-Naturwissenschaftliche classe 98:473-484
- [18] Carlaw H.S y Jaeger J.C. 1959. *"Conduction of heat in solids"*. Clarendon Press, Oxford.
- [19] Tarzia D.A. 1988. *"A bibliography on moving-free boundary problems for the heat-diffusion equation. The Stefan Problem"*. Progetto Nazionale M.P.I. Equazioni di evoluzione e applicazione fisico-matematiche. Firenze, Italy.
- [20] Alexander L.; Skaggs R.G. 1986. *"Predicting unsaturated hydraulic conductivity from the soil water characteristics"*. Trans. ASAE 29:176-184



DOS PROBLEMAS DE FRONTERA LIBRE ACOPLADOS: SOLIDIFICACION CON SIMULTANEA SUBLIMACION

Rodolfo H. Mascheroni

Introducción

En los tres seminarios anteriores se presentaron distintos aspectos del problema de la transferencia de calor con cambio de fase en la congelación y descongelación de alimentos. En el II Seminario se vieron los métodos de solución numéricos (Conferencia no publicada), en el III Seminario los métodos de solución aproximados para geometrías regulares simples (1) y en el IV Seminario los métodos aproximados para geometrías multidimensionales y/o irregulares (2).

En los alimentos que se congelan sin empaquetar (como hamburguesas, albóndigas, filetes de pescado, etc) la situación real es mucho más complicada que la descrita en los trabajos precedentes. Existe, además del fenómeno de transferencia de calor, un proceso simultáneo de transferencia de materia originado en la sublimación del hielo superficial. Una situación semejante se presenta durante la congelación de materiales biológicos y de suelos.

En el caso de los alimentos esta sublimación superficial genera un importante perjuicio económico por el efecto conjunto de la pérdida de peso y de la disminución de la calidad por la peor apariencia, consistencia y sabor resultantes. En este sentido es importante poder predecir la influencia de las condiciones del proceso sobre la transferencia de vapor de agua entre el alimento y el medio circundante (el aire).

El sistema físico real corresponde a dos sistemas Stefan simultáneos, que se desplazan con velocidades muy distintas: Un frente de congelación que alcanzará el centro del sistema (congelación total) y un frente de deshidratación que sólo penetrará muy superficialmente durante el período que dura la congelación. La Figura 1 presenta un esquema de dicha situación durante un momento intermedio del proceso de congelación. En esas circunstancias habrá una zona (parcialmente) congelada (ZONA 1) separada por un frente de cambio de fase de la zona sin congelar (ZONA 2). Simultáneamente, dentro de la ZONA 1 y adyacente a la superficie existirá una "cáscara" de material deshidratado

(ZONA 3), cuyo espesor será muy pequeño respecto del espesor total del alimento.

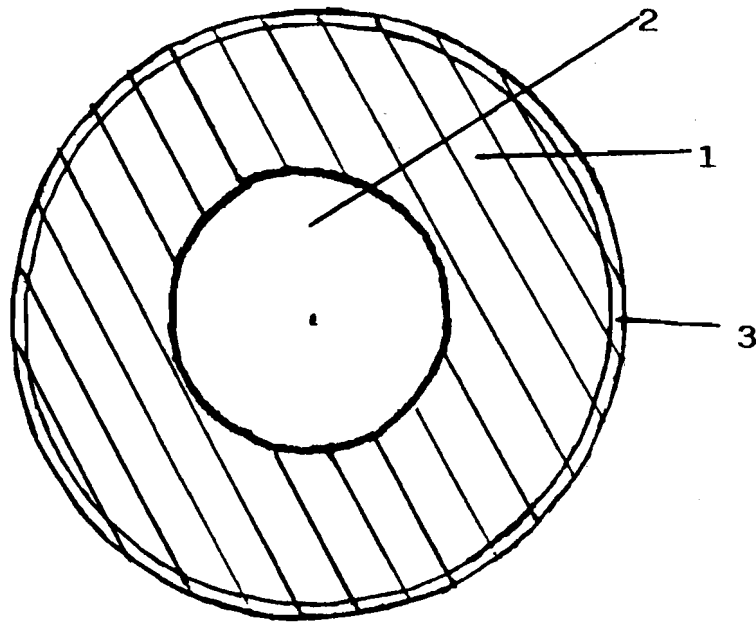


Fig. 1. Esquema del sistema estudiado: 1, Zona congelada; 2, Zona sin congelar; 3, Zona deshidratada

No obstante su importancia teórica y práctica, este tipo de estudios ha sido abordado en muy pocas oportunidades. Ello se debe a las enormes complicaciones inherentes al desarrollo del modelo matemático y a su solución numérica entre las que se incluyen:

- La fuerte variación con la temperatura de las propiedades térmicas del alimento (capacidad calorífica C_p , conductividad térmica k , densidad ρ y coeficiente de difusión D) (ya vistos en (1));
- El que en muchos casos no se conozcan en forma precisa, ni aún aproximada dichos valores;
- El que las propiedades en la zona deshidratada (ZONA 3) dependan fuertemente de la estructura original del alimento y de la matriz desecada resultante (se deberán determinar experimentalmente);
- El hecho de estar ambos balances (de calor y materia) fuertemente acoplados a través de las condiciones de contorno y de la dependencia de D con la temperatura.

Entre los que han modelado este tipo de sistema, aún con el uso de hipótesis simplificadoras, Chau y col. (3) y Chau y Gaffney (4) trabajaron sobre la transferencia simultánea de calor y materia durante la refrigeración de vegetales vivos (que respiran);

Sukhwal y Aguirre-Puente (5) y Aguirre-Puente y Sukhwal (6) midieron y modelaron la sublimación de hielo desde medios dispersos. No obstante la mayoría de la información publicada restante está basada sólo en información experimental o en modelos semi-empíricos.

Formulación Matemática

Se trabajó tanto sobre la geometría de esferas (la que se asimila a los casos de frutas enteras, porciones esféricas, croquetas y albóndigas) como de cilindros finitos (casos de hamburguesas, pizzas y platos preparados) (7), (8). Para la ejemplificación del problema presentaremos en este trabajo sólo el primer caso. Para de cilindros finitos el esquema es similar y puede consultarse en (7).

El balance de energía a resolver es

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k \nabla T) \quad (1)$$

en el cual T es la temperatura, t el tiempo y donde, como se manifestó previamente, ρ , C_p y k son funciones de la temperatura y composición (Sanz y col. (9)).

C_p es una capacidad calorífica aparente, ya que incluye tanto a la capacidad calorífica verdadera (sensible) como al calor de cristalización del agua. Este último es liberado a lo largo de un amplio rango de temperatura, ya que la mayoría de los alimentos se comportan como una solución, presentando una depresión del punto de congelación y una curva de equilibrio temperatura-concentración (1), (9).

Las condiciones de contorno son las usuales para esta situación:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0$$

para el centro de la esfera y

$$-k \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R} = h(T - T_a) + K L_v (C - C_a) \Big|_{r=R}$$

para la superficie de la esfera.

En estas ecuaciones r es la coordenada radial, C la composición, T_a y C_a se refieren a las condiciones ambientales del aire y L_v es el calor de sublimación del hielo. Para h

y K , los coeficientes de transferencia de calor y materia, se han tomado los valores determinados por Tocci y Mascheroni (10) para congeladores continuos de cinta y "corregidos" por la presencia de la capa deshidratada superficial de espesor δ (δ depende de la pérdida de peso y crece con el tiempo) como:

$$h = \frac{h_0}{1 + \delta h_0/k_d} \quad K = \frac{K_0}{1 + \delta K_0/Deff}$$

Aquí h_0 y K_0 corresponden a la zona "nodeshidratada" (Zona 1); k_d es la conductividad del alimento deshidratado (Zona 3) y $Deff$ el coeficiente de difusión del vapor de agua en la matriz sólida deshidratada (Pham y Willix (11)).

Simultáneamente, el balance de materia a ser resuelto es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla(D \nabla C) \quad (2)$$

Se hicieron suposiciones similares a las utilizadas en el balance de energía. Las condiciones de contorno para la superficie y el centro del alimento quedan expresadas como

$$-D \frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{r=R} = K (C - C_a) \Big|_{r=R}$$

$$\frac{\partial C}{\partial r} = 0 \Big|_{r=0}$$

Métodos Numéricos

Cleland and Earle (12) demostraron que, para el modelado de la transferencia de calor durante la congelación de alimentos se obtienen resultados similares tanto si se usan esquemas de diferencias finitas explícitas como alternativas más elaboradas que impliquen métodos implícitos de 2 ó 3 niveles de tiempo, siempre que se utilicen intervalos suficientemente pequeños de espacio y tiempo. Esto es debido a que las principales fuentes de error están originadas, como ya se explicó, en los valores de propiedades a utilizar. Basados en estos criterios se probaron 2 métodos explícitos que difieren en la distribución espacial de los elementos de volumen (y por tanto de los puntos en la malla).

Método A: Incrementos espaciales de igual tamaño

Se trabaja con espaciado constante de malla Δr , tal como se lo esquematiza en la Figura 2a.

Si llamamos Δr y Δt a los incrementos radial y temporal, respectivamente, definidos como $\Delta r = R/(I-1)$ y T_i^n se refiere a la temperatura calculada en $r = (i-1)\Delta r$ y $t = n\Delta t$, la forma discretizada del balance de energía viene dada por la Ecuación (3). Reordenando se obtiene la forma general válida para los puntos interiores (Ecuación (4)). En ella es: $REL1 = \Delta t / \Delta r^2$ y $\alpha = k / (\rho C_p)$.

$$\rho_i^n C_{p_i}^{n+1} \frac{(T_i^{n+1} - T_i^n)}{\Delta t} = \frac{k_i^n}{\Delta r^2} (T_{i+1}^n - 2 T_i^n + T_{i-1}^n) + \frac{(k_{i+1}^n - k_{i-1}^n) (T_{i-1}^n - T_i^n)}{4 \Delta r^2} + \frac{k_i^n}{(i-1) \Delta r^2} (T_{i+1}^n - T_{i-1}^n) \quad (3)$$

$$T_i^{n+1} = T_i^n + REL1 \alpha_i^n (T_{i+1}^n - 2 T_i^n + T_{i-1}^n) + REL1 \alpha_i^n (T_{i+1}^n - T_{i-1}^n) + \frac{REL1}{4 C_{p_i}^n \rho_i^n} (k_{i+1}^n - k_{i-1}^n) (T_{i+1}^n - T_{i-1}^n) \quad (4)$$

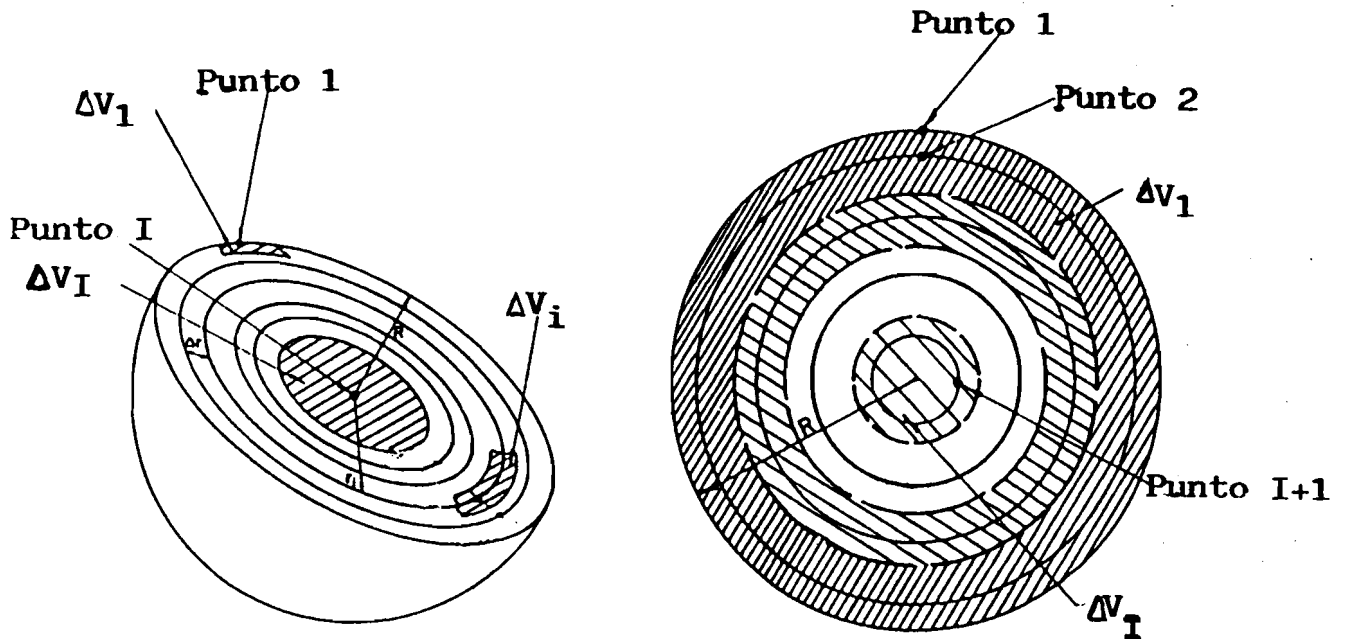


Fig. 2. Diagrama de los esquemas de cálculo usados. a: Iguales Δr ; b: Iguales ΔV

Para los límites del sistema (centro ($i=1$) y superficie ($i=I$)) se obtienen las siguientes relaciones específicas discretizando las condiciones de contorno:

$$T_1^{n+1} = T_1^n + 6 REL1 \alpha_1^n (T_2^n - T_1^n) \quad (5)$$

$$T_I^{n+1} = T_I^n + 2 REL1 \alpha_I^n [T_{I-1}^n - T_I^n] - 2 REL1 \frac{\Delta I}{k_I^n} (h (T_I^n - T_a) + K (C_I^n - C_a) Lv) \left(\frac{k_{I+1}^n - k_I^n}{4k_I^n} + \frac{I}{I-1} \right) \quad (6)$$

Para C_i^{n+1} se obtienen relaciones similares a las ecuaciones (4), (5) y (6).

Método B: Incrementos de volumen iguales

Chau and Gaffney (4) presentan un detallado desarrollo del método. Brevemente, consiste en dividir el cuerpo (esfera o cilindro) en I cáscaras concéntricas de igual volumen ΔV , donde $\Delta V = V / I$, donde V es el volumen total del cuerpo. Su ventaja principal es que, para esferas y cilindros infinitos, se genera una "concentración" más alta de puntos de la malla cerca de la superficie, lo que posibilitaría cálculos más precisos de los perfiles de temperatura y concentración. Además el punto situado sobre la superficie no tiene masa asignada, con lo que es mucho más exacto el cálculo de su temperatura (4).

Tal como se esquematiza en la Figura 2b, cada punto de la malla está situado en el centro del elemento de volumen. La forma general, basada en el balance de energía en un elemento de volumen genérico ΔV_i es:

$$\rho_i^n C p_i^n \Delta V_i \frac{(T_i^{n+1} - T_i^n)}{\Delta t} = \frac{k_{i-\frac{1}{2}}^n A_{i-1}}{\Delta r_{i-1}} (T_{i-1}^n - T_i^n) - \frac{k_{i+\frac{1}{2}}^n A_i}{\Delta r_i} (T_i^n - T_{i+1}^n) \quad (7)$$

en la que: $A_i = 4 \pi r_i r_{i+1}$; $r_i = (1 + (1.5 - i) / I)$ para $2 \leq i \leq I+1$; $\Delta r_i = r_i - r_{i+1}$
 $\Delta r_{i+1} = r_{i+1} - r_i$.

El punto 1 está sobre la superficie y el punto $I+2$ está en el centro.

Reordenando se obtiene la forma general para T_i^{n+1} [8]:

$$T_i^{n+1} = T_i^n \left[1 - \frac{\Delta t}{\Delta V_i \rho_i^n C_{P_i}^n} \left(\frac{k_{i-\frac{1}{2}}^n A_{i-1}}{\Delta r_{i-1}} + \frac{k_{i+\frac{1}{2}}^n A_i}{\Delta r_i} \right) \right] + \frac{\Delta t}{\Delta V_i \rho_i^n C_{P_i}^n} \left(\frac{k_{i-\frac{1}{2}}^n A_{i-1} T_{i-1}^n}{\Delta r_{i-1}} + \frac{k_{i+\frac{1}{2}}^n A_i T_{i+1}^n}{\Delta r_i} \right) \quad (8)$$

Para $i = 1$ (superficie) se tiene a través de la condición de contorno:

$$T_1^{n+1} = \frac{\left[k_{3/2}^n \frac{A_1}{\Delta r_1} T_2^n + 4 \pi R^2 (h T_a - K L v (C_1^n - C_a)) \right]}{k_{3/2}^n \frac{A_1}{\Delta r_1} + 4 \pi R^2 h} \quad (9)$$

El punto $I+2$ no puede calcularse por aplicación del esquema y puede ser obtenido por extrapolación polinómica. Esto es un problema de difícil solución durante el cambio de fase, cuando los perfiles son casi planos cerca del centro. La extrapolación puede llevar a valores de temperaturas muy superiores a los reales. Esta posible fuente de error es muy importante en el cálculo de tiempos de congelación.

Para C_i^{n+1} se obtienen relaciones similares a las ecuaciones (7), (8) y (9).

Resultados

Ambos modelos numéricos fueron codificados en QUICKBASIC y corridos en una PC AT486. En todos los cálculos se utilizaron propiedades térmicas de carne vacuna picada tomadas de (9), las que dependen de la composición y temperatura y tienen diferentes fórmulas de predicción por sobre y debajo de la temperatura de comienzo de congelación T_{cr} .

Para el Método A se utilizaron 16 puntos de malla en casi todos los cálculos. En estas condiciones se obtuvieron resultados estables utilizando $\Delta t \leq 0.50$ s.

Para el Método B se utilizaron 14 elementos de volumen. En estas condiciones se obtuvieron resultados estables utilizando $\Delta t \leq 0.10$ s.

Para ambos métodos el utilizar mayor número de puntos no mejoró las predicciones. No hubo diferencias significativas entre los tiempos de congelación t_f y la pérdida de

peso w_l predichas por ambos métodos. La mayor variación en ft fue de 0.22 min para $T_a = -35^\circ\text{C}$ y $v_a = 10 \text{ m s}^{-1}$; para w_l fue de 0.026% para $T_a = -35^\circ\text{C}$ y $v_a = 7 \text{ m s}^{-1}$.

Como ejemplo de la información obtenida con el método de predicción, la Figura 3 muestra la variación de los perfiles de temperatura con el tiempo predichos para una albóndiga de $R = 0.019 \text{ m}$ congelada con $T_i = 5.0^\circ\text{C}$, $T_a = -30.0^\circ\text{C}$, $v_a = 7.0 \text{ m s}^{-1}$ y flujo de aire descendente perpendicular a la cinta, cuyo ft fue 26.74 min. Un dato relevante es que, a medida que avanza la congelación, la forma de los perfiles de temperatura se distorsiona en la zona adyacente a la superficie. Esta distorsión es causada por las distintas propiedades en la zona deshidratada y el modelo es capaz de simularlo adecuadamente.

Por su parte, la Figura 4 muestra la historia térmica para tres puntos (superficie ($r = R$), centro ($r = 0$) y un punto equidistante de ambos ($r = 0.5 R$)) para las condiciones de congelación previamente citadas.

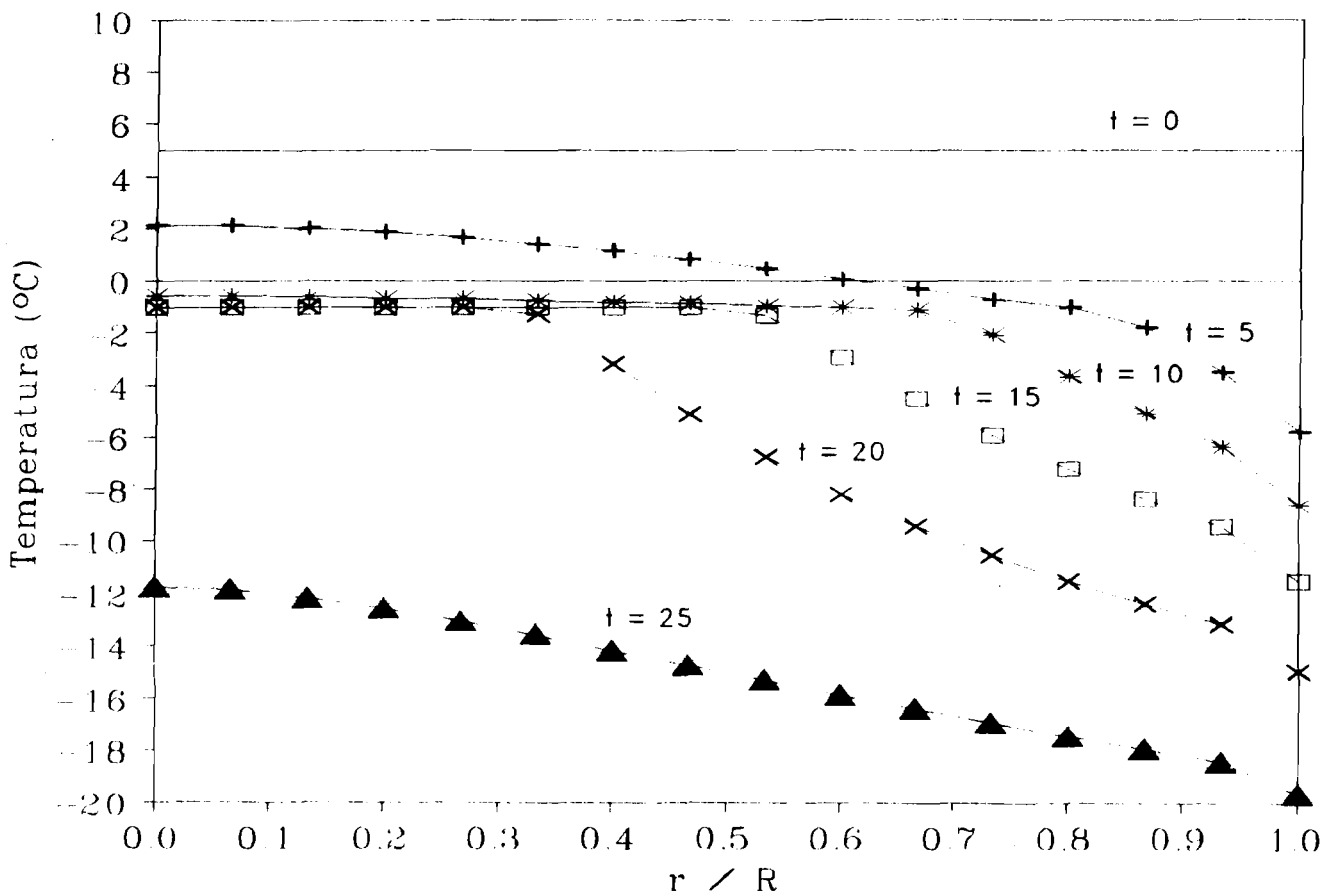


Fig.3. Perfiles de temperatura predichos para la congelación de albóndigas con $T_i = 5^\circ\text{C}$, $T_a = -30^\circ\text{C}$, $v_a = 7 \text{ m/s}$ y flujo de aire descendente

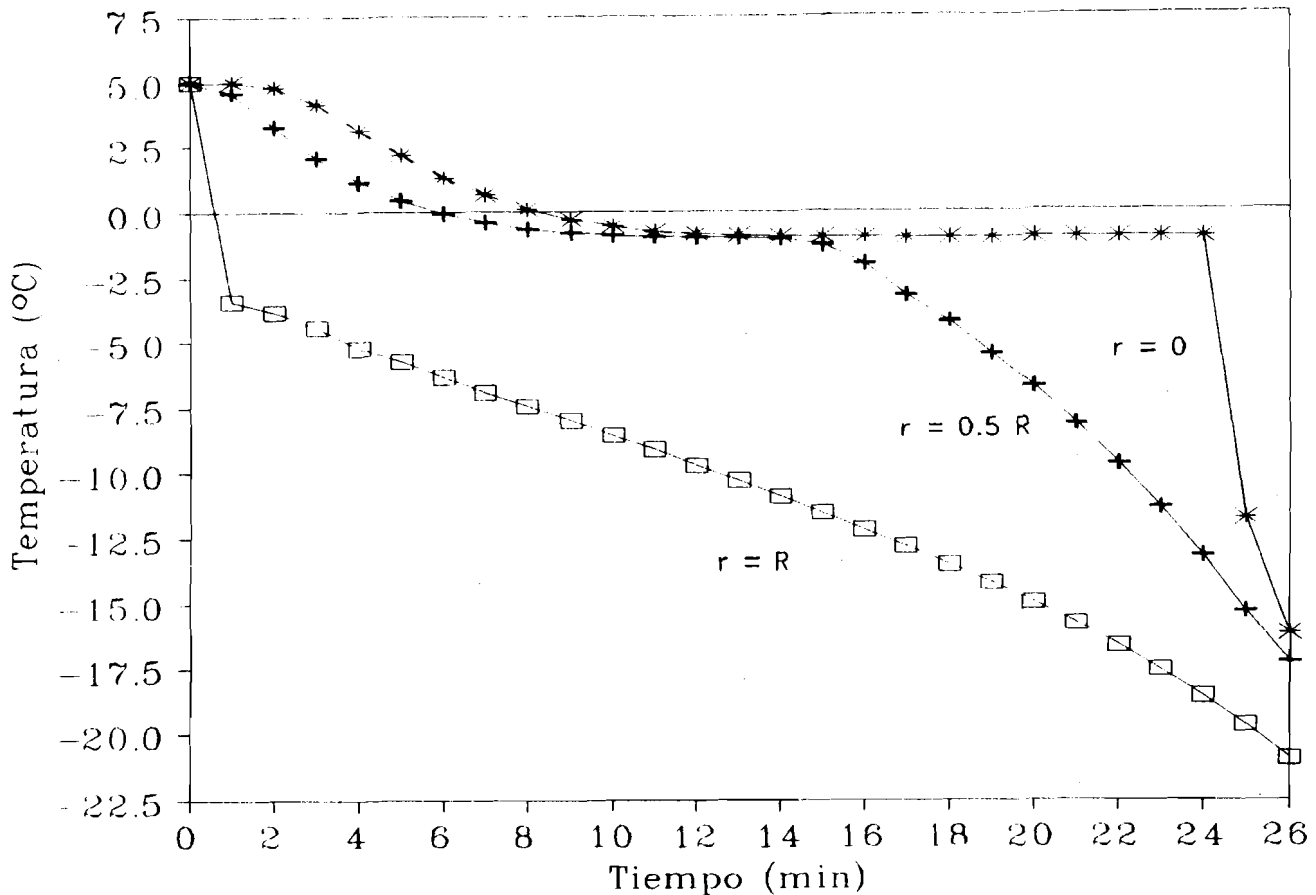


Fig. 4. Historias térmicas predichas para distintos puntos de una albóndiga durante su congelación en congeladores de cintas ($R = 0.019$ m, $T_i = 5^\circ\text{C}$)

Asimismo la Figura 5 muestra la variación de los t_f predichos (el tiempo necesario para alcanzar -18°C en el centro) en función de la temperatura y velocidad del aire. Como era de esperar la dependencia con ambos parámetros es alta, pero disminuye al descender T_a y al aumentar v_a .

A su vez, la Figura 6 presenta los valores calculados de la pérdida de peso w_l para las mismas condiciones de operación de la figura anterior. Las pérdidas predichas varían entre 1.04 y 2.07% para los valores extremos de T_a y v_a .

Discusión y Conclusiones

- Es posible predecir la transferencia simultánea de calor y materia durante la congelación

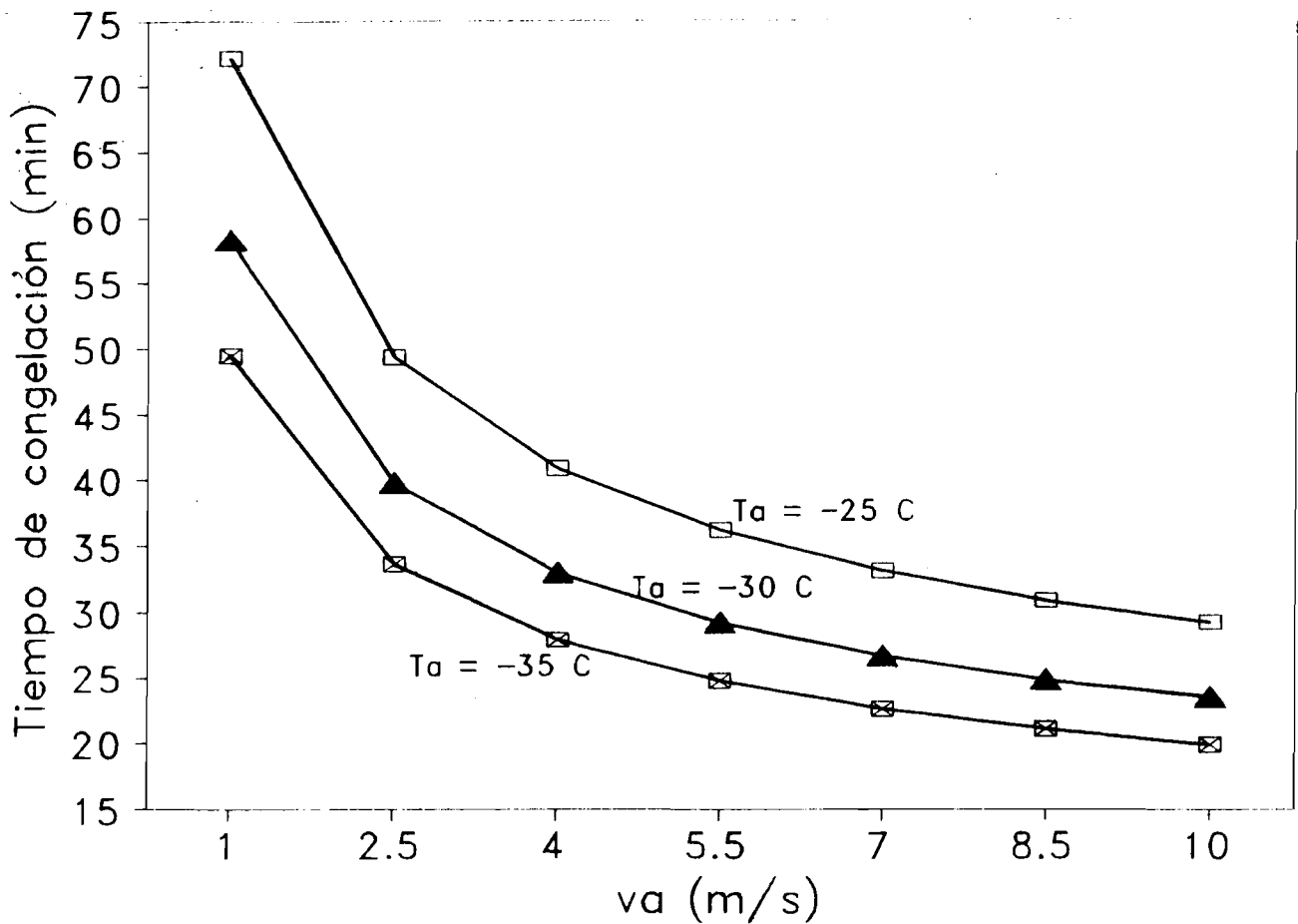


Fig. 5. Tiempos de congelación predichos para albóndigas en congeladores continuos de cintas con flujo de aire descendente

y el almacenamiento de alimentos a través del uso de un modelo teórico, sin realizar hipótesis simplificadoras en su deducción.

- El empleo de métodos numéricos explícitos facilita el desarrollo y uso de los programas de cálculo.
- El uso del modelo de elementos de volumen constantes (Método B) no incrementó la precisión de los cálculos respecto del de elementos espaciales constantes (Método A), pero si las necesidades de tiempo de máquina.
- El modelo desarrollado permite calcular perfiles de temperatura y composición, tiempos de congelación y pérdida de peso.
- El modelo puede ser utilizado para mejorar el diseño de equipos, disminuir el tiempo de proceso, el consumo de energía y las pérdidas de peso.
- Se pueden realizar aplicaciones similares para el caso de congelación de suelos.

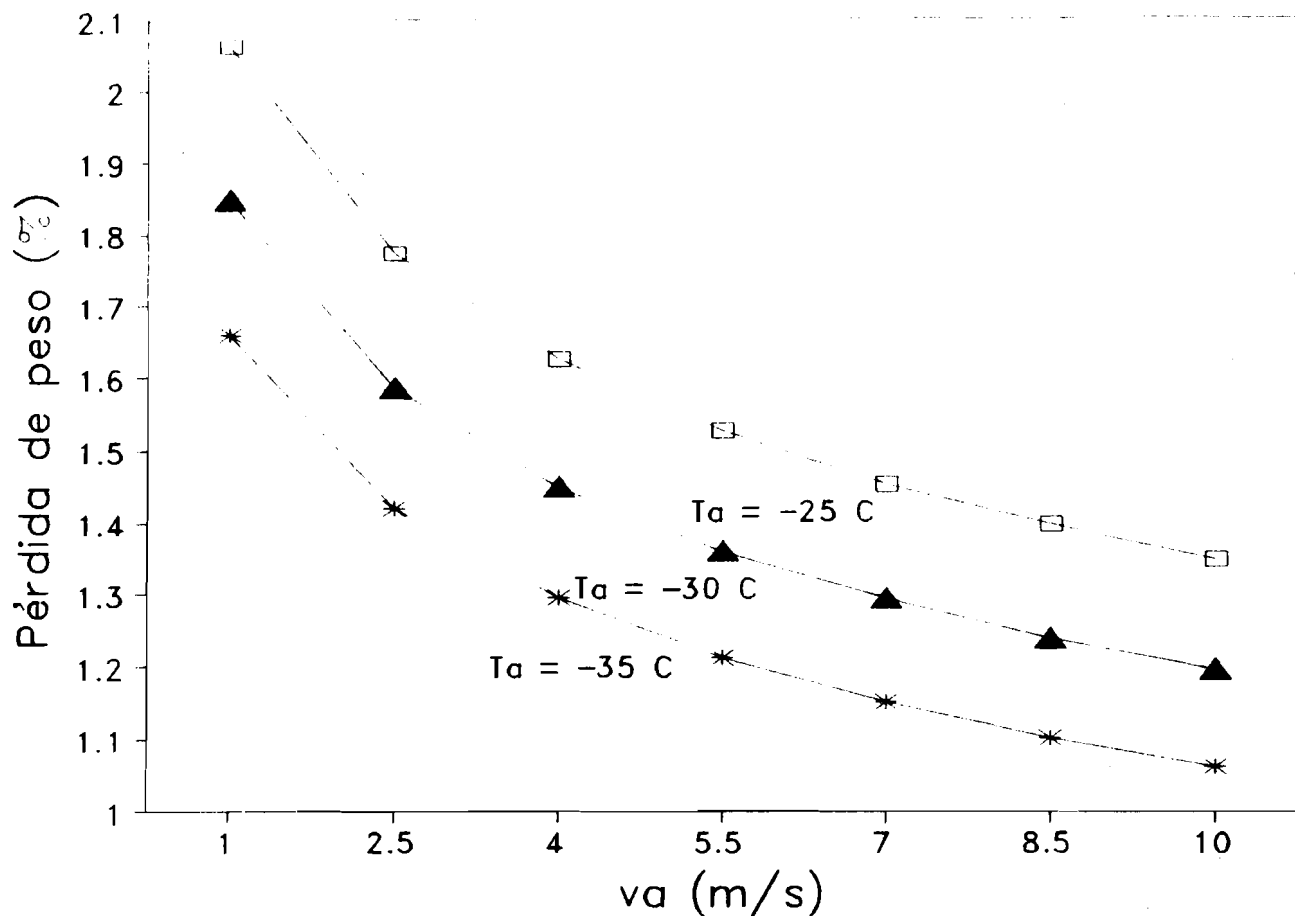


Fig. 6. Pérdidas de peso predichas durante la congelación de albóndigas en congeladores de cintas

Referencias

1. Mascheroni, R.H. 'Métodos simplificados para la predicción de tiempos de congelación y descongelación de alimentos'. *Cuadernos del Instituto de Matemática "Beppo Levi"*, N°17, pp.55-71, 1989.
2. Mascheroni, R.H. 'Transferencia de calor con cambio de fase en sistemas multidimensionales: uso de factores de forma en métodos aproximados'. *Cuadernos del Instituto de Matemática "Beppo Levi"*, N°24, pp.51-66, 1993.
3. Chau, K.V., Gaffney, J.J. y Romero, R.A. 'A mathematical model for the transpiration from fruits and vegetables'. *ASHRAE Trans.* 94 (1): pp. 1541-1561, 1988.
4. Chau, K.V. y Gaffney, J.J. 'A finite - difference model for heat and mass transfer in

products with internal heat generation and transpiration'. *J. Food Sci.* 55: pp. 484-487, 1990.

5. Sukhwai, R.N. y Aguirre-Puente, J. 'Sublimation des milieux dispersés. Considérations théoriques et expérimentation'. *Rev. Gén. Therm. Fr.* (262), pp. 663-674, 1983.

6. Aguirre-Puente, J. y Sukhwai, R.N. 'Sublimation of ice in frozen dispersed media', en *Proceedings of The Third International Offshore Mechanics and Arctic Engineering Symposium* (Ed. V.J. Lunardini), Vol. 3, pp. 38-44, 1983.

7. Tocci, A.M. y Mascheroni, R.H. 'Modelling and numerical simulation of the simultaneous heat and mass transfer during food freezing and storage' en *Advanced Computational Methods in Heat Transfer III* (Eds. L.C. Wrobel, C.A. Brebbia y A.J. Nowak); pp. 579-586, 1994.

8. Tocci, A.M. y Mascheroni, R.H. 'Numerical models for the simulation of the simultaneous heat and mass transfer during food freezing and storage' *Int. Com. Heat & Mass Transf.* (en prensa), 1995.

9. Sanz, P.D., Domínguez Alonso, M. y Mascheroni, R.H. 'Equations for the prediction of thermophysical properties of meat products', *Lat. Am. Appl. Res.* 19: pp. 155-163, 1989.

10. Tocci, A.M. y Mascheroni, R.H. 'Heat and mass transfer coefficients during the refrigeration, freezing and storage of meats, meat products and analogues' *J. Food Engng.* (in press), 1995.

11. Pham, Q.T. y Willix, J. 'A model for food desiccation in frozen storage', *J. Food Sci.* 49: pp. 1275-1281 & 1294, 1984.

12. Cleland, A.C. y Earle, R.L. 'Assessment of freezing time prediction methods', *J. Food Sci.* 49: pp. 1034-1042, 1984.

(CIDCA) Centro de Investigación y Desarrollo
en Criotecología de Alimentos
47 y 116, (1900) La Plata
y Facultad de Ingeniería U.N.L.P.

On a numerical method for solving a boundary value problem for $u_t = \alpha(u)_{xx}$.

Javier I. Etcheverry

1 Introduction

We consider solutions in $\mathbb{R}_{\geq 0} \times \mathbb{R}_{> 0}$ of the problem

$$u_t = \alpha(u)_{xx} \quad u(x, 0) = 0 \quad u(0, t) = u_0 \quad (1)$$

with $\alpha(u)$ a continuous nondecreasing function, and u_0 a positive constant.

We recall briefly the method exposed in [1]. We discretise the range of the solution in n nodes u_i :

$$0 < u_1 < \dots < u_n = u_0 \quad (2)$$

and we obtain a system of nonlinear ordinary differential equations for the level curves y_i , that we can write:

$$\begin{cases} \dot{y}_1 = -\frac{1}{\Delta u_1} \frac{\alpha_2 - \alpha_1}{y_2 - y_1} \\ \dot{y}_i = \frac{1}{\Delta u_i} \left[\frac{\alpha_i - \alpha_{i-1}}{y_i - y_{i-1}} - \frac{\alpha_{i+1} - \alpha_i}{y_{i+1} - y_i} \right] & 2 \leq i \leq n-1 \\ \dot{y}_n = 0 \end{cases} \quad (3)$$

where $\Delta u_i = u_{i+1} - u_i$, and $\alpha_i = \alpha(u_i)$.

The solutions y_i , $i = 1, \dots, n$ must satisfy the initial data:

$$y_1(0) = y_2(0) = \dots = y_{n-1}(0) = y_n(0) = 0$$

Note that the system is singular at $t = 0$, what makes this form difficult of integrate numerically. But the similarities of the main equation (1) suggest that $y_i(t) = \beta_i \sqrt{t}$, $i = 1, \dots, n$. By replacing these expressions in equation (3), we obtain the nonlinear algebraic system ($A_i = \alpha_i - \alpha_{i-1}$):

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\beta_1 \Delta u_1 & = & -\frac{A_2}{\beta_2 - \beta_1} \\ \frac{1}{2}\beta_i \Delta u_i & = & \frac{A_i}{\beta_i - \beta_{i-1}} - \frac{A_{i+1}}{\beta_{i+1} - \beta_i} \\ \beta_n & = & 0 \end{cases} \quad 2 \leq i \leq n-1 \quad (4)$$

As the β_i define the level curves of a function, we must have:

$$\beta_1 \geq \beta_2 \geq \dots \geq \beta_{n-1} \geq \beta_n = 0 \quad (5)$$

In the following we prove that the nonlinear system (4) has only one solution satisfying (5).

2 Main Results

We begin by noting that we can satisfy the first $n - 1$ equations above (4) by taking an arbitrary value $\beta_1 > 0$, and by setting:

$$\beta_i = \beta_{i-1} - \frac{2A_i}{\sum_1^{i-1} \beta_j \Delta u_j} \quad 2 \leq i \leq n \quad (6)$$

In fact, the first equation from (4) yields:

$$\beta_2 = \beta_1 - \frac{2A_2}{\beta_1}$$

in accord with (6). By summing the first $k - 1$ equations (4), we have:

$$\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{k-1} \beta_j \Delta u_j = -\frac{A_k}{\beta_k - \beta_{k-1}}$$

Solving for β_k , we obtain (6).

Hence, the question is if we can satisfy the condition $\beta_n = 0$, as well as the relations (5), for some value β_1 .

Next we prove two lemmas.

Lemma 1 *For each $n > 1$, and β_1 large enough, we have*

$$\beta_1 \geq \beta_2 \geq \cdots \geq \beta_{n-1} \geq \beta_n > 0$$

Proof: Let

$$\beta_1 > \sqrt{2 \sum_{j=2}^n A_j} \quad (7)$$

Let k be the first index such that $\beta_k \leq 0$. If $k < n$, we have:

$$\begin{aligned} 0 \geq \beta_k &= \beta_{k-1} - \frac{2A_k}{\sum_{j=1}^{k-1} \beta_j \Delta u_j} \geq \\ &\geq \beta_{k-1} - \frac{2A_k}{\beta_1 \Delta u_1} = \beta_{k-2} - \frac{2A_{k-1}}{\sum_{j=1}^{k-2} \beta_j \Delta u_j} - \frac{2A_k}{\beta_1 \Delta u_1} \geq \\ &\beta_{k-2} - \frac{2A_k}{\beta_1 \Delta u_1} - \frac{2A_{k-1}}{\beta_1 \Delta u_1} \geq \cdots \geq \beta_1 - \frac{2 \sum_{j=2}^k A_j}{\beta_1 \Delta u_1} > 0 \end{aligned}$$

The last inequality follows from (7). \square

Lemma 2 *Let $\hat{\beta}_1 > 0$ be such that $\hat{\beta}_1 \geq \hat{\beta}_2 \geq \cdots \geq \hat{\beta}_k \geq 0$. Then, for $\beta_1 \in [\hat{\beta}_1, \infty)$ we have that $\beta_2, \dots, \beta_{k+1}$ are continuous increasing functions of β_1 .*

Proof: We have $\beta_1 > \hat{\beta}_1$. Suppose that there exist an index j , $2 \leq j \leq k+1$ such that $\beta_j \leq \hat{\beta}_j$. Let l be the first index such that $\beta_l \leq \hat{\beta}_l$. We have:

$$\beta_l = \beta_{l-1} - \frac{2A_l}{\sum_{i=1}^{l-1} \beta_i \Delta u_i} > \hat{\beta}_{l-1} - \frac{2A_l}{\sum_{i=1}^{l-1} \hat{\beta}_i \Delta u_i} = \hat{\beta}_l$$

a contradiction. By repeating this procedure for any two values of $\beta_1 \in [\hat{\beta}_1, \infty)$ we obtain the claimed monotony. The continuity follows from

$$\sum_{j=1}^i \beta_j \Delta u_j > \sum_{j=1}^i \hat{\beta}_j \Delta u_j > 0$$

by noting that then β_i , $2 \leq i \leq k + 1$ are composition of continuous functions of β_1 . \square

We can now proceed to prove the following theorem, that gives existence and uniqueness of the solution of the system (4).

Theorem 1 *For each $n \geq 2$, there exists a unique solution of the nonlinear algebraic system (4) that satisfies the inequalities (5).*

Proof: We are going to proceed by induction. Let be $k = 2$, and note that

$$\beta_2 = \beta_1 - \frac{2A_2}{\beta_1} = 0 \iff \beta_1 = \pm\sqrt{2A_2}$$

By taking $\beta_1 = \sqrt{2A_2}$ we have the only positive solution. Let be $\beta_1^k \geq \beta_2^k \geq \dots \geq \beta_k^k = 0$ the unique solution of (4), (5). We want to prove that (4) with $n = k + 1$ has only one solution that satisfies (5). By Lemma 1 there exists $\beta_1^m > 0$ such that the corresponding $\beta_{k+1}^m > 0$. By hypothesis we have $\beta_1^k \geq \dots \geq \beta_k^k = 0$ and then

$$\beta_{k+1}^k = \beta_k^k - \frac{2A_{k+1}}{\sum_{j=1}^k \beta_j^k \Delta u_j} = -\frac{2A_{k+1}}{\sum_{j=1}^k \beta_j^k \Delta u_j} \leq 0$$

By Lemma 2, for $\beta_1 \geq \beta_1^k$ we have that β_{k+1} is a continuous increasing function of β_1 . The previous argument showed that this continuous function is negative or zero for $\beta_1 = \beta_1^k$, and positive for $\beta_1 = \beta_1^m$. We then conclude that it must vanish for a unique $\beta_1 \in [\beta_1^k, \beta_1^m]$. The uniqueness of the solution of (4), (5) follows because for $\beta_1 < \beta_1^k$ some β_i , $i < k + 1$ must become negative, and for $\beta_1 > \beta_1^m$ we have $\beta_{k+1} > 0$. \square

3 Numerical examples

We have applied this method to solve the boundary problem (1) for different constitutive relations $\alpha(u)$. We show the results in Figures 1 – 4, corresponding to the heat equation, the porous media equation for $m = 2$ and $m = 5$, and to a Stefan problem respectively.

The implementation is straightforward, using the ideas of the lemma's proofs in the preceding sections. The only difficulty is that for β_1 not large

n	10	100	1000	10000
$\ \epsilon\ _\infty$	0.05	0.005	0.0005	0.00005
$\ \epsilon\ _{L^1}$	0.087	0.0081	0.00078	0.000077

Table 1: Errors of the numerical solution obtained for the discretisation 2

enough, the values of some β_i , $i < n$ can be negative, and then the sum in the denominator in equation (6) can even go to zero. To overcome this difficulty, we note that if we replace iteration (6) by the iteration:

$$\beta_i = \beta_{i-1} - \frac{2A_i}{\sum_1^{i-1} |\beta_j| \Delta u_j} \quad 2 \leq i \leq n \quad (8)$$

we obtain $\beta_n < \beta_{n-1} < \dots < \beta_2 < \beta_1$, for any initial value β_1 . Now, if we found β_1 such that $\beta_n = 0$, as calculated with this iteration, we have $\beta_i > 0$ $i = 1, \dots, n-1$, and then the solution of iteration (8) coincides with that of iteration (6).

We have applied a BRENT type routine to find the solution of (8) that satisfies $\beta_n = 0$. The solution of the nonlinear system is very fast. For instance, for $n = 20000$, it took less than two seconds in a 486 based computer.

To analyze the error of the method, we compare the solution obtained numerically for $\alpha(u) = u$, $u_0 = 1$ and a uniform mesh $u_i = u_0 i/n$ with the exact solution $\operatorname{erfc}(\frac{x}{2\sqrt{t}})$.

We have computed the L^1 norm of the error ϵ by integrating numerically with the trapezoidal rule.

The calculation of the L^∞ error needs a little analysis. We are comparing a step function (the numerical solution) with a continuous one, and then is clear that the error in this norm can not be smaller than about $\Delta u/2$. We choose to compare the average of each vertical segment of the numerical solution, with the corresponding exact value.

The results obtained are displayed in Table 1. Note that the error decreases linearly with the value of Δu .

n	10	100	1000	10000
$\ \epsilon\ _\infty$	0.0046	0.00046	0.000032	0.0000037
$\ \epsilon\ _{L^1}$	0.051	0.004	0.00035	0.000032

Table 2: Errors of the numerical solution obtained for the discretisation 9

Also, we note that a preferred strategy to discretise the range of the solution can be to take (for a uniform mesh) $\hat{u}_0 = u_0 \left(1 + \frac{1}{2n+1}\right)$ and

$$u_i = \frac{i\hat{u}_0}{n} \quad i = 1, \dots, n \quad (9)$$

so that the boundary value $u(0, t) = u_0$ corresponds to the average of the last vertical segment of the solution. The results obtained with this discretisation are shown in Table 2. In this case the order of convergence is still linear, but the constants are smaller.

References

- [1] J.E.Bouillet, J.I.Etcheverry. *Numerical experiments with $u_t = \alpha(u)_{xx}$* . Encuentros de Ecuaciones Diferenciales II. Trabajos de Matemática 190. IAM Conicet, Julio 1992.

Dirección del autor: Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pabellón I, 1428, Buenos Aires, (Argentina).

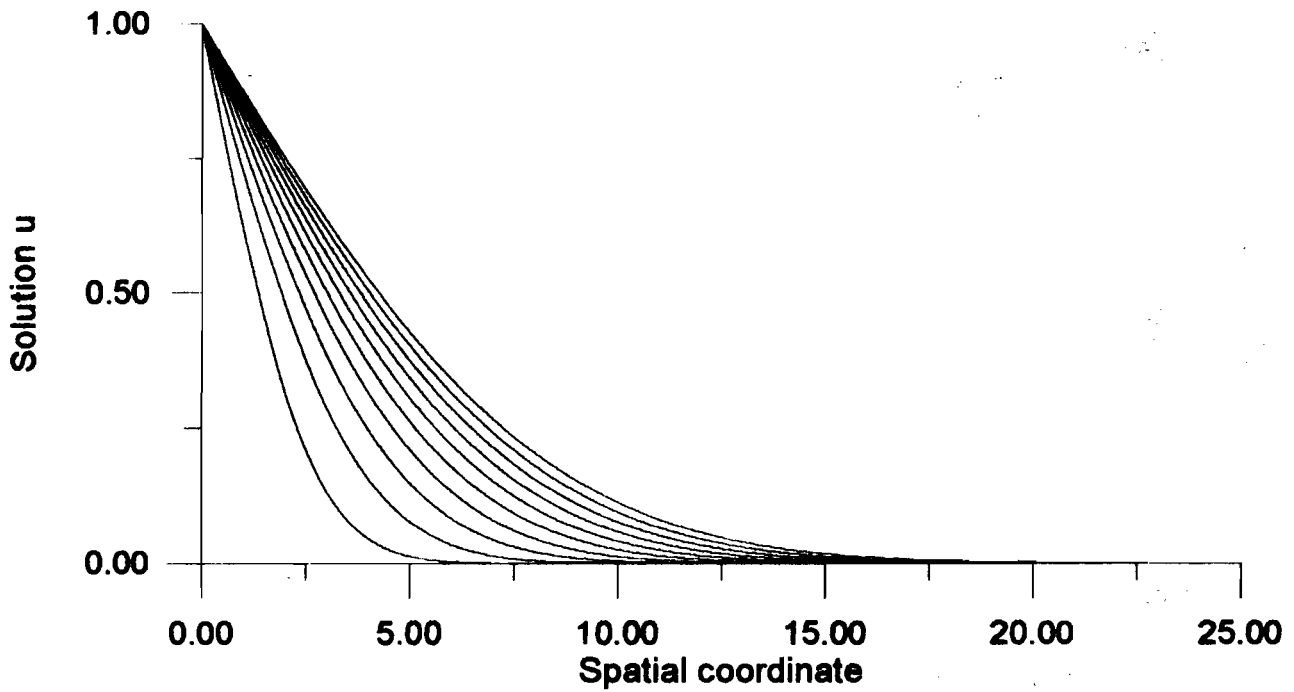


Figure 1: solution of the heat equation with $u(0,t)=1$, $u(x,0)=0$.

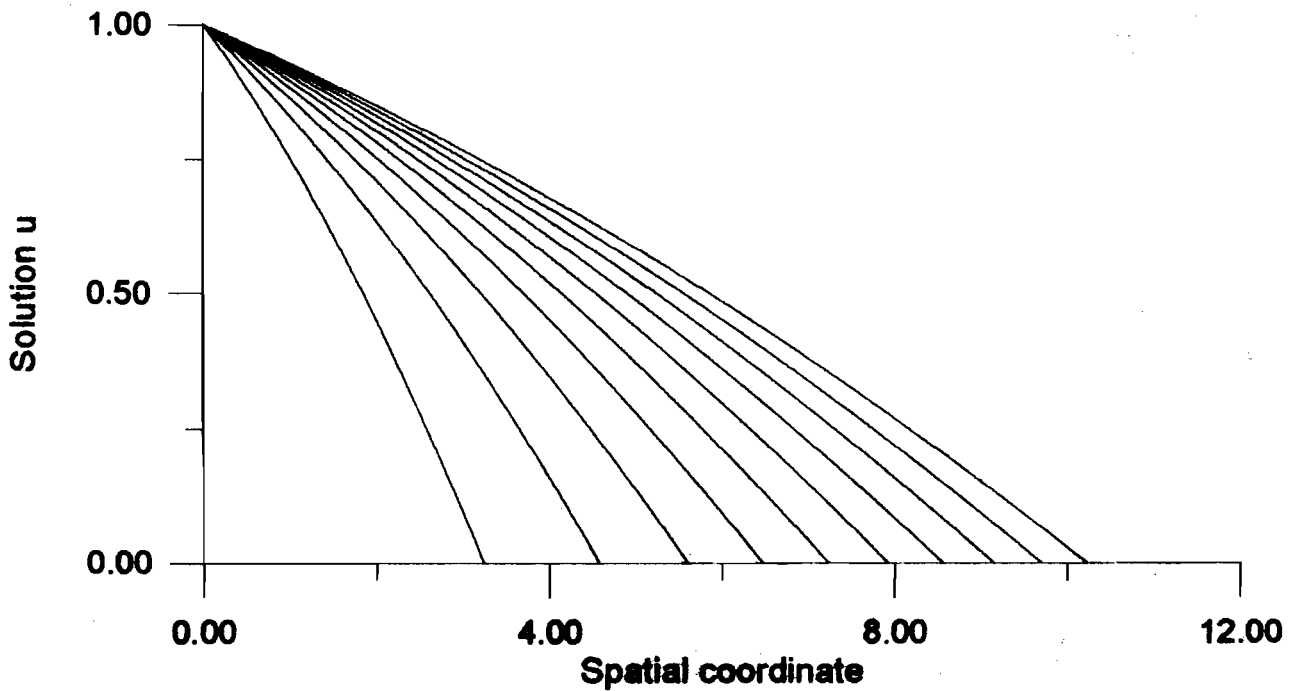


Figure 2: Solution of the porous media equation with $m=2$, $u(0,t)=1$, and $u(x,0)=0$.

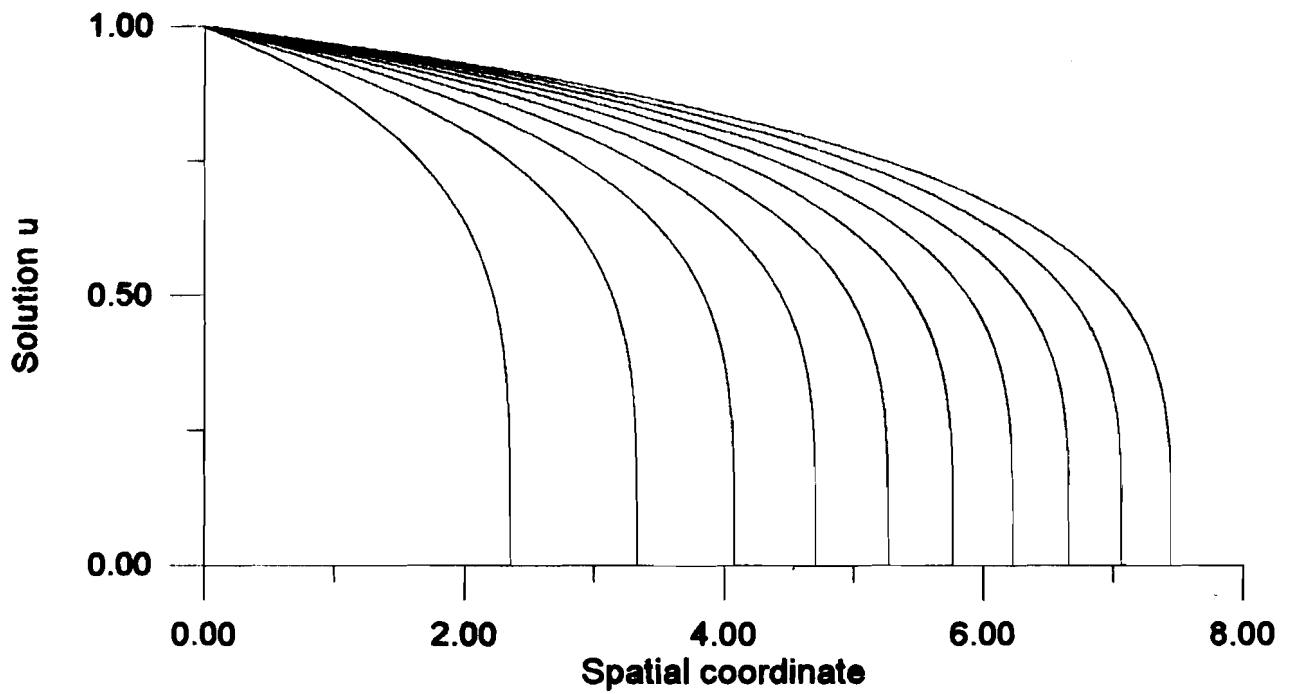


Figure 3: solution of the porous media equation with $m=5$, $u(0,t)=1$, and $u(x,0)=0$.

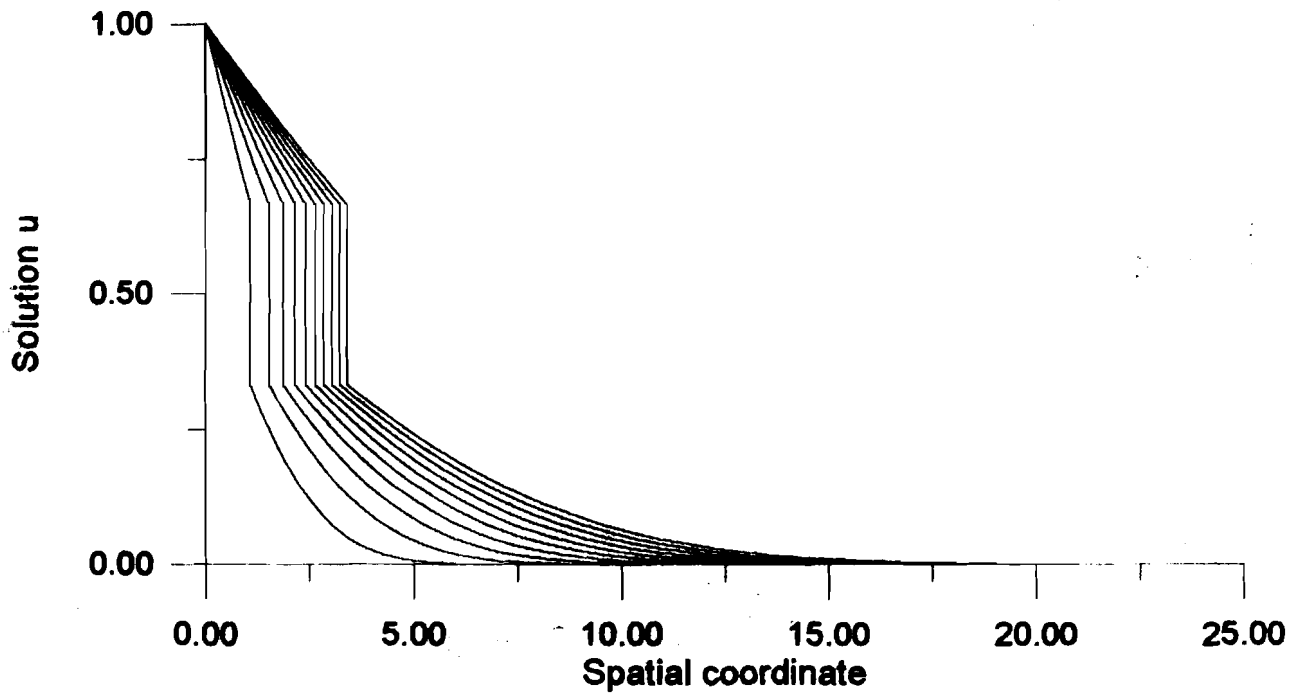


Figure 4: Solution of a Stefan problem with $u(0,t)=1$, and $u(x,0)=0$.

EL PROBLEMA DE STEFAN A UNA FASE PARA EL LÍQUIDO SOBREENFRIADO CON UNA CONDICIÓN DE CONTORNO CONVECTIVO

DOMINGO A. TARZIA

CRISTINA V. TURNER

I. Introducción

El estudio de la solidificación de un líquido sobreenfriado tiene un doble interés debido a:

- a) que es un fenómeno termodinámicamente metaestable.
- b) su relación con el problema de consumo-difusión del oxígeno.

a) La temperatura de equilibrio de fusión T_m , de un material puro es la temperatura a la cual el estado sólido y líquido del material puede coexistir en equilibrio termodinámico, (bajo las condiciones de presión ambiente).

A temperaturas mayores que T_m , la energía libre del líquido es menor que la del sólido, con lo cual de acuerdo a la Segunda Ley de Termodinámica, el líquido es una fase estable, lo mismo ocurre para temperaturas menores que $t < T_m$, en la cual la fase sólida es la estable por tener menos energía.

A pesar de esto, muchos materiales pueden ser enfriados a temperaturas menores que T_m , sin que la fase sólida aparezca. Por ejemplo el agua puede ser enfriada por debajo de temperaturas: $-40^{\circ}C$ sin que solidifique, bajo muy estrictos controles. Otros materiales como los silicatos o polímeros pueden ser enfriados cientos de grados y se transforman en vidrios en vez de cristalizar (sólido desordenado o líquido amorfo).

La temperatura a la cual un líquido es enfriado $T < T_m$ se conoce como la temperatura de superenfriamiento y la temperatura $\Delta T = T_m - T$ es el grado de superenfriamiento.

El estado de superenfriamiento es un estado metaestable en el sentido que la energía libre es mayor que la del estado real (el sólido), pero es un mínimo local de energía libre respecto a otra variable coordenada (por ejemplo: orden),[8].

b) Ver V.

II. Planteo del problema de frontera libre.

Problema I:

Encontrar la temperatura $\theta(y, \tau)$ y la frontera libre $r(\tau)$ tal que:

$r(\tau)$ sea Lipschitz continua para $\tau > 0$;

$\dot{r}(\tau)$ sea continua para $\tau > 0$;

$\theta(y, \tau)$ sea continua para $0 \leq y \leq r(\tau)$ y $\tau > 0$;

$\theta_\tau(y, \tau)$, $\theta_{yy}(y, \tau)$ son continuas para $0 < y < r(\tau)$, $\tau > 0$;

$\theta_y(y, \tau)$ sea continua para $0 \leq y \leq r(\tau)$, $\tau > 0$;

$r(\tau)$ y $\theta(y, \tau)$ satisfacen las siguientes condiciones:

$$\theta_\tau = \alpha \theta_{yy}, \quad 0 < y < r(\tau), \quad 0 < \tau < \tau_0$$

$$\theta(r(\tau), \tau) = 0, \quad 0 < \tau < \tau_0$$

$$k \theta_y(r(\tau), \tau) = -\rho \lambda \dot{r}(\tau), \quad 0 < \tau < \tau_0$$

$$k \theta_y(0, \tau) = h(\theta(0, \tau) - g(\tau)), \quad \tau > 0$$

$$\theta(y, 0) = \theta_0(y), \quad 0 \leq y \leq b$$

$$r(0) = b$$

Los parámetros son:

α = difusividad térmica del material (m^2/s)

k = conductividad térmica del material (KJ^0C/m)

ρ = densidad del material (Kg/m^3)

λ = calor latente de fusión (KJ/Kg)

h = coef. de transferencia calórica del fluido a la superficie del material (KJs^0C/m^2)

$g(\tau)$ = temperatura del fluido ambiente del material ($^{\circ}C$).

El frente de la fusión en el tiempo τ es $r(\tau)$, mientras $\theta(y, \tau)$ es la temperatura en la posición y y el tiempo τ .

En [1] está probado que la solución del Problema I existe. Este problema se conoce como, el modelo matemático para la solidificación del líquido sobreenfriado [3].

La solidificación del líquido sobreenfriado se debe a la transferencia convectiva de calor desde el fluido externo a temperatura $g(\tau)$ hacia la cara externa del material ($x = 0$).

Se puede adimensionalizar el problema mediante el siguiente cambio de variables

$$x = \frac{y}{b} \quad t = \frac{k\tau}{\rho cb^2}$$

$$z(x, t) = \frac{c}{\lambda} \theta(y, \tau) \quad s(t) = \frac{r(\tau)}{b}$$

Luego las variables (T, s, z) satisfacen el siguiente problema:

Problema II:

- (1.1) $z_{xx} = z_t$, en D_T ;
- (1.2) $s(0) = 1$;
- (1.3) $z(s(t), t) = 0$, $0 < t < T$;
- (1.4) $z_x(s(t), t) = -\dot{s}(t)$, $0 < t < T$;
- (1.5) $z(x, 0) = \varphi(x)$, $0 < x < 1$;
- (1.6) $z_x(0, t) = \beta[z(0, t) - G(t)]$, $0 < t < T$.

donde $\beta = \frac{h}{kb}$ es un parámetro adimensional, y

$$D_T = \{(x, t) | 0 < x < s(t), 0 < t < T\}$$

$$G(t) = \frac{c}{\lambda} g \left(\frac{b^2 \rho c t}{k} \right).$$

A continuación resumiremos los resultados obtenidos en [7].

III. El problema a una fase del líquido sobreenfriado

En esta sección consideraremos las siguientes hipótesis

$\varphi(x) \leq 0$, $0 < x < 1$ y $G(t) \leq 0$, $t > 0$ y la condición de compatibilidad

$$\varphi'(0) = \beta[\varphi(0) - G(0)].$$

Las primeras propiedades elementales de la solución están resumidas en las siguientes Proposiciones:

Proposición 3.1. Si (T, s, z) es una solución del Problema II, luego

i) $z \leq 0$ en D_T .

ii) $\dot{s}(t) < 0$, $t > 0$.

iii) $G(t) \leq 0$, $\varphi(x) \geq G(0) = \max_{t>0} G(t)$, luego $z \geq G(t)$ en D_T .

iv) $\varphi' \geq 0$, $\dot{G}(t) \leq 0$ luego $z_x \geq 0$ en D_T .

v) $\dot{G} \geq 0$, $\varphi'' > 0$ luego $z_t > 0$ en D_t .

Demostración. Todas estas propiedades se desprenden del Principio del Máximo. \square

Proposición 3.2. Si (T, s, z) satisfacen (1.1)-(1.6) del Problema II, luego se satisfacen las siguientes representaciones integrales para la solución:

$$s(t) = 1 + \int_0^1 \varphi(x) dx - \int_0^t z_x(0, \tau) d\tau - \int_0^{s(t)} z(x, t) dx \quad (3.1)$$

$$\frac{s^2(t)}{2} = \frac{1}{2} + \int_0^1 x\varphi(x) dx + \int_0^t z(0, \tau) d\tau - \int_0^{s(t)} xz(x, t) dx \quad (3.2)$$

$$s(t) \left[1 + \frac{\beta}{2}s(t) \right] = 1 + \frac{\beta}{2} + \int_0^1 (1 + \beta x)\varphi(x) dx + \int_0^t \beta G(\tau) d\tau - \int_0^{s(t)} (1 + \beta x)z(x, t) dx \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\beta s^4(t)}{24} + \frac{s^3(t)}{6} &= \frac{\beta}{24} + \frac{1}{6} + \int_0^1 \left(\frac{\beta x^3}{6} + \frac{x^2}{2} \right) \varphi(x) dx \\ &\quad - \int_0^{s(t)} \left(\frac{\beta x^3}{6} + \frac{x^2}{2} \right) z(x, t) dx + \iint_{D_t} z(x, \tau) (\beta x + 1) dx d\tau \end{aligned} \quad (3.4)$$

Demostración. Sale de la identidad de Green. \square

Nota 1: En las siguientes secciones usaremos la notación

$$Q(t) = 1 + \frac{\beta}{2} + \int_0^1 (1 + \beta x)\varphi(x) dx + \int_0^t \beta G(\tau) d\tau \quad (3.5)$$

En [1], [2] y [3] se puede ver que si $\varphi(1) = 0$, $\varphi(x)$ es Hölder continua para $x = 1$ y $G(t)$ es una función continua a trozos en cada intervalo $(0, t)$, $t > 0$, entonces este problema posee una única solución para T "suficientemente pequeño".

Más aún, si la solución existe, ocurren tres diferentes comportamientos (ver [1], Teorema 8 and [2]).

(A) El problema tiene solución para T arbitrariamente grande.

(B) Existe una constante $T_B > 0$ tal que $\lim_{t \rightarrow T_B} s(t) = 0$.

(C) Existe una constante $T_C > 0$ tal que $\inf_{t \in (0, T_C)} s(t) > 0$ y $\lim_{t \rightarrow T_C} s(t) = -\infty$.

Analizaremos la posibilidad de ocurrencia de estos tipos de comportamiento en conexión con los datos iniciales φ , de contorno, temperatura del fluido externo G y el coeficiente de transferencia β .

Proposición 3.3. Si $\dot{G} \leq 0$, $\varphi(x) \geq G(0)$ y la solución (T, s, z) del Problema II, es caso (B) luego $Q(T_B) = 0$.

Demostración. Se toma límite cuando $t \rightarrow T_B$ en (2.3) y se usa la acotación de z obtenida en la Proposición 2.1. \square

Proposición 3.4. Si (T, s, z) es una solución del Problema II, y los datos iniciales y de contorno satisfacen las siguientes hipótesis:

i) $\varphi(x) \geq M(x - 1)$, $0 \leq x \leq 1$, $0 < M < 1$;

ii) $G(t) \geq -M$

y existe un tiempo T_B tal que $Q(T_B) = 0$, luego la solución (T_B, s, z) es caso (B).

Demostración. Se puede probar usando el Principio de Máximo que $z(x, t) \geq M(x - 1)$.

Si reemplazamos esta inecuación en (2.3) para $t = T_B$, entonces $s(T_B)$ satisface la siguiente inecuación

$$s(T_B) \left[(1 - M) + s(T_B) \left[\frac{\beta(1 - M) + M}{2} \right] + \beta s^2(T_B) \frac{M}{3} \right] \leq 0.$$

La forma cuadrática entre corchetes tiene coeficientes $1 - M > 0$ y $\frac{\beta(1-M)+M}{2} > 0$, luego $s(T_B) = 0$. \square

La siguiente Proposición es una adaptación de la misma afirmación dada en [4].

Proposición 3.5. Supongamos que $t_0 < T$, $\lim_{t \rightarrow t_0} s(t) > 0$. φ satisface la hipótesis iv) de la Proposición 2.1. Más aún $Q(t) > 0 \forall t \leq t_0$. Luego si definimos una función:

$$\eta(t) = \begin{cases} \max\{x \in [0, s(t)] \mid z(x, t) \leq -1\} \\ 0 \quad \text{if } z(x, t) > -1, x \in [0, s(t)] \end{cases}$$

entonces se sigue

$$\lim_{t \rightarrow t_0} \eta(t) < \lim_{t \rightarrow t_0} s(t).$$

Proposición 3.6. Sea (T, s, z) una solución del Problema II tal que $\varphi(x) \geq M(x - 1)$, $0 \leq x \leq 1$ y $S_T = \inf_{t \in (0, T)} s(t) > 0$. Si existen dos constantes $d \in (0, S_T)$, $z_0 \in (0, 1)$ tales que $Md \geq z_0$, y

$$z(s(t) - d, t) \geq -z_0, \quad 0 \leq t \leq T,$$

luego

$$\dot{s}(t) \geq \frac{\ln(1 - z_0)}{d}.$$

Demostración. Ver el Lema 2.4 en [2] y [4]. \square

Proposición 3.7. Sea (T, s, z) una solución del of Problema II y φ satisface las hipótesis de la Proposición 2.1 iv), luego si la solución es de tipo (C), entonces $Q(T_C) \leq 0$.

Demostración. Supongamos que $Q(T_C) > 0$, luego la isoterma $z = -1$ tiene que estar separada de la frontera libre. Esto se desprende de la Proposición 2.5.

Usando la Proposición 3.6 $\dot{s}(t)$ tiene una cota inferior, lo cual contradice el tipo (C) de solución. \square

Corolario 3.8. Si (T, s, z) es una solución del Problema II y φ y G satisfacen las siguientes hipótesis:

- i) $\varphi(x) \geq M(x - 1), \quad 0 \leq x \leq 1;$
 - ii) $G(t) \geq -M, \quad 0 < M < 1,$
- y la solución es de tipo (C), entonces $Q(T_C) < 0$.

Demostración. Sigue de las Proposiciones 2.4 y 2.7. \square

Proposición 3.9. Sea (T, s, z) una solución del Problema II, φ y G satisfacen las siguientes hipótesis:

- i) $\varphi(x) \geq M(x - 1), \quad M > 0, \quad 0 \leq x \leq 1;$
- ii) $G \in L^1(0, \infty).$

Si la solución es de tipo (A), luego $Q(t) \geq 0, t > 0$. Más aún si $G(t) \geq -M, (M > 0), \forall t > 0$, y si la solución es de tipo (A), resulta $Q(t) > 0 \forall t > 0$.

La demostración se basa en suponer que la tesis es falsa y encontrar una contradicción usando (3.4)

IV. Comportamiento asintótico de la solución

Proposición 4.1. Sea (T, z, s) una solución del Problema II del tipo (A) bajo las hipótesis de la Proposición 3.9 y iii) de la Proposición 3.3. Luego si existe $\lim_{t \rightarrow \infty} G(t)$ y notamos $Q_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} Q(t), s_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} s(t)$, entonces s_∞ viene dada por

$$s_\infty = \frac{-1 + \sqrt{1 + 2\beta Q_\infty}}{\beta} \quad (3.1)$$

Demostración. Resulta de tomar límite $t \rightarrow \infty$ en (3.3). \square

Proposición 4.2.

i) Para cada $t > 0$ la frontera libre del Problema II satisface la siguiente condición:

$$s(t) \geq 1 + \int_0^1 \varphi(x) dx + \beta t \inf_{0 \leq \tau \leq t} G(\tau).$$

ii) Si $\dot{G}(t) \leq 0$, $\varphi(x) \geq G(0)$, luego

$$s^2(t) \geq 1 + 2 \int_0^1 x\varphi(x) dx + 2t \inf_{0 \leq \tau \leq t} G(\tau).$$

Demostración. Salen usando la representación integral y la Proposición 3.1. \square

V. El problema consumo difusión del oxígeno

Es interesante analizar cómo depende la solución z del problema de la temperatura externa $G(t)$.

Una manera adecuada para analizarlo es vía la llamada transformación clásica al Problema de consumo y difusión del oxígeno:

$$u(x, t) = \int_x^{s(t)} \left\{ \int_\gamma^{s(t)} [1 + z(\alpha, t)] d\alpha \right\} d\gamma$$

Usando esta transformación el Problema II se transforma en el siguiente problema:

Problema III:

$$u_{xx} - u_t = 1, \text{ en } D_t;$$

$$s(0) = 1;$$

$$u(s(t), t) = u_x(s(t), t) = 0, \quad t > 0;$$

$$u(x, 0) = H(x), \quad 0 \leq x \leq 1;$$

$$u_x(0, t) - H'(0) = \beta[u(0, t) - H(0) + \|G\|_{1,t}], \quad t > 0.$$

donde

$$H(x) = \int_x^1 \int_\gamma^1 (1 + \varphi(\alpha)) d\alpha d\gamma.$$

De aquí en más φ satisfecerá las siguientes hipótesis

$$-1 < \varphi(x) \leq 0, \quad 0 \leq x \leq 1,$$

luego

$$H(x) > 0, \quad H'(x) < 0, \quad H''(x) > 0, \quad 0 \leq x \leq 1.$$

Proposición 5.1. Sea (T, s, u) solución del Problema III, con $-1 < \varphi \leq 0$ en $[0, 1]$ y iii) de la Proposición 2.1, luego $u(x, t) < H(x)$, $x \in (0, s(t))$, $t > 0$.

Demostración. Sale de aplicar el Principio de Máximo a $W = u - H$. \square

Corolario 5.2. Sea (T, s, u) una solución del Problema III. Si $G(t) > -1$, $t > 0$, luego $u(x, t) \geq 0$ en D_t .

Demostración. Sale de la Proposición 2.1 iii) \square

El próximo resultado determina cómo la solución u depende de $G(t)$.

Proposición 5.3. La solución (T, s, u) del Problema III, depende monótonamente de G . En particular si (T_i, s_i, u_i) , $i = 1, 2$ son soluciones para G_1 y G_2 respectivamente y si $G_1(t) < G_2(t)$, luego $s_1(t) \leq s_2(t)$ y $u_1(x, t) \leq u_2(x, t)$ en donde ambas estén definidas.

Demostración. Sea $v(x, t)$ la función definida como:

$$v(x, t) = u_2(x, t) - u_1(x, t)$$

en los puntos donde ambas estén definidas.

Sea $t^* = \sup\{t | u_2(0, t) > u_1(0, t)\}$ y $t^{**} = \sup\{t | s_2(t) > s_1(t)\}$.

Supongamos que t^* y t^{**} sean finitos. Por definición v satisface el siguiente problema

$$\begin{aligned} v_{xx} &= v_t, x \in (0, s_1(t)), t \in (0, t^{**}); \\ v(x, 0) &= 0; \\ v(s_1(t), t) &= u_2(s_1(t), t) > 0; \\ v_x(0, t) &= \beta[v(0, t) + (\|G_2\|_{1,t} - \|G_1\|_{1,t})]. \end{aligned}$$

Afirmación 1: $t^* \neq t^{**}$. Supongamos que $t^* = t^{**}$. Luego

- a) $s_1(t^*) = s_2(t^*)$
- b) $\dot{s}_1(t^*) \geq \dot{s}_2(t^*)$
- c) $v(s_1(t^*), t^*) = u_2(s_1(t^*), t^*) = u_2(s_2(t^*), t^*) = 0$.

Más aún $u_2(0, t) > u_1(0, t)$ para $t < t^*$, luego

$$v(0, t) > 0, \quad t < t^*$$

y

$$v(s_1(t), t) = u_2(s_1(t), t) > 0.$$

como $v(s_1(t^*), t^*) = 0$ es un mínimo, luego por el Principio de Mínimo aplicado a v en D_t resulta $v_x(s_1(t^*), t^*) < 0$ lo cual contradice a) debido a

$$v_x(s_1(t^*), t^*) = u_{2x}(s_1(t^*), t^*) = u_{2x}(s_2(t^*), t^*) = 0$$

Luego $t^* \neq t^{**}$.

Afirmación 2: $t^* < t^{**}$ resulta imposible:

En $[0, t^*]$, $s_1(t) < s_2(t)$, ya que $v(s_1(t), t) > 0$. Por definición $v(0, t) > 0$ para $t < t^*$ y $v(0, t^*) = 0$ con lo cual $v(0, t^*)$ es un mínimo y por lo tanto $v_x(0, t^*) > 0$, lo cual contradice

$$v_x(0, t^*) = \beta[v(0, t^*) + (\|G_2\|_{1, t^*} - \|G_1\|_{1, t^*})] = \beta[\|G_2\|_{1, t^*} - \|G_1\|_{1, t^*}] < 0.$$

Afirmación 3: $t^{**} < t^*$ es imposible:

Supongamos $t^{**} < t^*$, y como $v(0, t) > 0$, $v(s_1(t), t) = u_2(s_1(t), t) > 0$, para $t < t^{**}$, el punto $(s_1(t^{**}), t^{**})$ es un mínimo para v porque $v(s_1(t^{**}), t^{**}) = u_2(s_1(t^{**}), t^{**}) = u_2(s_2(t^{**}), t^{**}) = 0$. Luego por el Principio de Mínimo:

$$v_x(s_1(t^{**}), t^{**}) < 0$$

lo cual contradice

$$v_x(s_1(t^{**}), t^{**}) = u_{2x}(s_2(t^{**}), t^{**}) = 0.$$

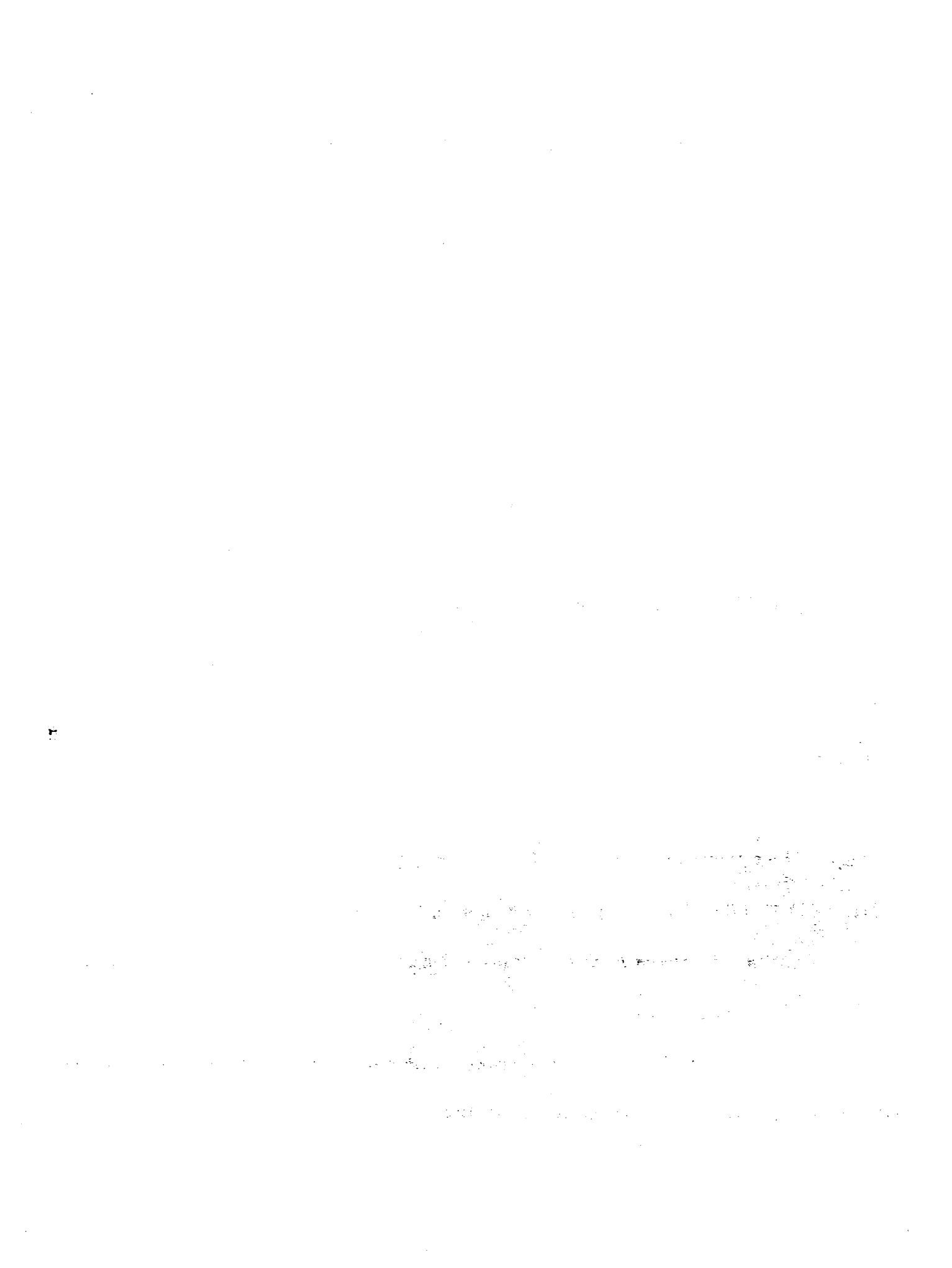
Luego queda probada la Proposición. \square

REFERENCIAS

1. A. FASANO, M. PRIMICERIO, *General free-boundary problems for the heat equation I*, Math. Anal Appl. **57** (1977), 694–723.
2. A. FASANO, M. PRIMICERIO, *New results on some classical parabolic free-boundary problems*, Quarterly of Applied Mathematics **38** (1981), 439–460.
3. A. D. SOLOMON, V. ALEXIADES, D. G. WILSON, *The Stefan problema with a convective boundary condition*, Quarterly of Applied Mathematics **40** (1982), 203–217.
4. E. COMPARINI, R. RICCI, D. TARZIA, *Remarks on a one dimensional Stefan problema related to the diffusion-consumption model*, Z. Angew. Math. Mech. **64** (1984), 543–550.
5. J. R. CANNON, C. D. HILL, *Remarks on a Stefan problema*, J. Math. Mech. **17** (1967), 433–441.
6. A. FRIEDMAN, *Partial Differential Equations of Parabolic Type*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, N J, 1964.
7. D. A. TARZIA, C. V. TURNER, *The one-phase supercooled Stefan problem with a convective boundary condition.*, to appear in Quarterly of Applied Math.
8. A.D. SOLOMON, V. ALEXIADES, *Mathematical modeling of melting and freezing processes*, Hemisphere Publishing Corporation..

Domingo A. TARZIA
- Dpto. Matemática, FCE
Univ. Austral
Paraguay 1950
(2000) Rosario
- Promar (CONICET-UNR)
Inst. Mat. "B. Levi"
Av. Pellegrini 250
(2000) Rosario
ARGENTINA.
e-mail: tarzia@uaufce.edu.ar

Cristina V. TURNER
FaMAF,
Ciudad Universitaria
Universidad Nacional Córdoba
(5000) Córdoba
ARGENTINA.
e-mail: turner@mate.uncor.edu



MODELOS DE FRONTERA LIBRE EN TRANSFORMACIONES FLUIDO - SOLIDO REACTIVO

L.T. VILLA – O.D. QUIROGA

1.- Aspectos Generales

El presente cursillo se nutre esencialmente en el material que sobre el tema en cuestión se encuentra en el texto [Qui Av Fu] sobre modelado de las transformaciones fluido-sólido reactivo.

Con el término " transformaciones fluido-sólido reactivo se cubren:

- (i) reacciones químicas heterogéneas no catalíticas
- (ii) disolución de sólidos en líquidos
- (iii) vaporizaciones de sólidos en gas

Consideraremos solo transformaciones producidas por reacción química y no así por interacciones de tipo físico. Supondremos también que las transformaciones son isotérmicas .

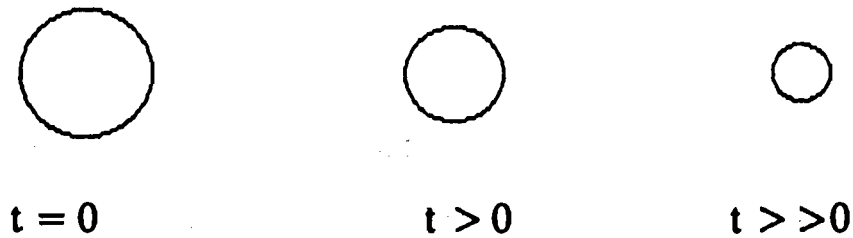
Hay evidencia experimental de que la superficie de una partícula de sólido reactivo puro no poroso en contacto con un reactivo fluido puede comportarse como uniformemente reactiva o no uniformemente reactiva .

En el primer caso toda la superficie sólida tiene un grado de reactividad uniforme desde el momento mismo en que sólido y fluido se ponen en contacto. A reacciones de este tipo se denominan transformaciones por ataque uniforme.

En el segundo caso la reacción recién comienza luego de transcurrido un intervalo inicial de incubación o tiempo de latencia. No toda la superficie sólida es útil al ataque químico. A reacciones de este tipo se denominan transformaciones por ataque no uniforme.

En la Fig 1 siguiente se ilustra esquemáticamente el curso o evolución experimentado por una partícula de sólido reactivo bajo una transformación por ataque uniforme y no uniforme.

- Transformación por ataque uniforme



- Transformación por ataque no uniforme tipo autolocalizada o topoquímica

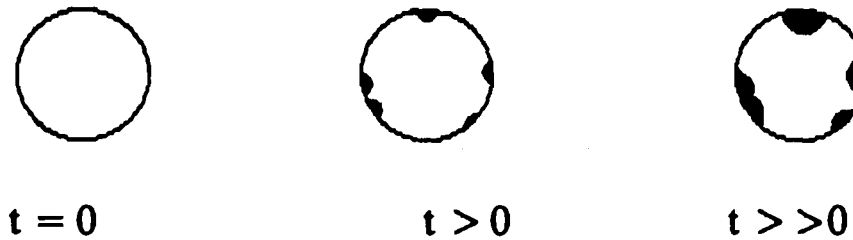


Fig 1

Glosario y Notación

A continuación se explicita un glosario básico usado en sistemas fluido-sólido reactivo. En el APENDICE se provee la notación utilizada en el desarrollo del cursillo.

Partícula reactante: Es la muestra de sólido reactivo objeto de modelado

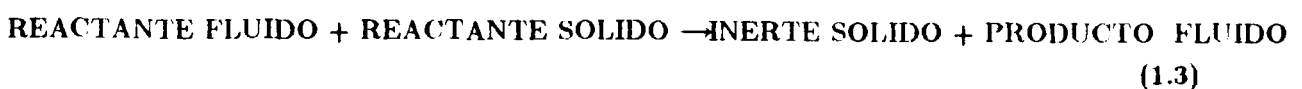
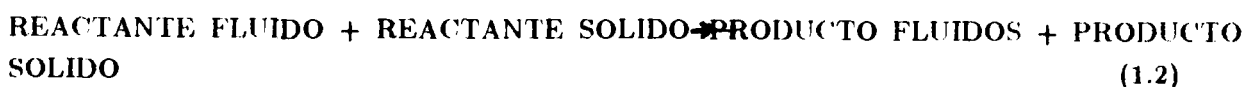
Superficie externa de la partícula (Ω): Es su borde

Superficie interfacial (Ω_I) : Es la superficie actual de la partícula reactante en contacto con el reactivo fluido.

Interfase reaccional (Ω_R) : Es la zona de la superficie interfacial donde tiene lugar la reacción química sólido-fluido.

Tal como se mencionó previamente, la superficie interfacial puede o no ser uniformemente reactiva.

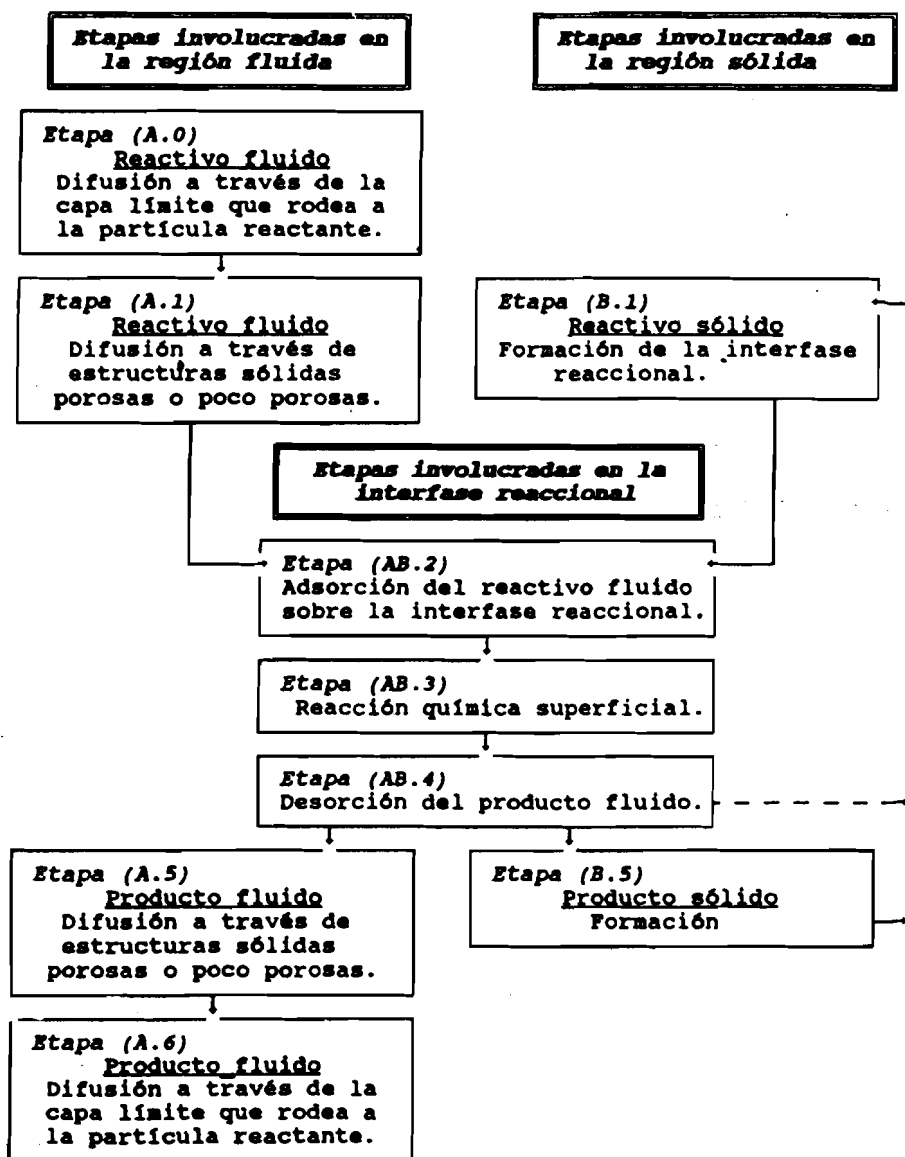
En general, las transformaciones fluido - sólido que nos ocupan pueden representarse por algunos de los siguientes esquemas:



1.1.- Etapas Involucradas en las Transformaciones Fluido-Sólido Reactivo

En el CUADRO N^o1 siguiente se ilustra un esquema de las etapas involucradas en las reacciones fluido-sólido reactivo, teniendo en cuenta las que interesan a la región fluida, región sólida y las comunes a ambas.

CUADRO N^o 1



Como puede verse en [Qui Av Fu], se estima conveniente agrupar las transformaciones fluido-sólido reactivo en los cuatro grupos siguientes:

TRANSFORMACIONES I caracterizadas por:

- Ia) reactivo sólido puro no poroso
- Ib) superficie interfásial uniformemente reactiva y coincidente con la superficie externa de la partícula, esto es $\Omega \equiv \Omega_T$
- Ic) la transformación se inicia ni bien se ponen en contacto los reactivos sólido y fluido.

Observando el CUADRO N^o1, se infiere que en estas transformaciones las Etapas (A.1), (B.1), (A.5) y (B.5) deben ignorarse.

TRANSFORMACIONES II con las siguientes características principales:

- IIa) presencia de una o más regiones sólidas porosas, sea del propio sólido reactivo o de un producto sólido adherido a la partícula reactante
- IIb) la superficie interfacial es uniformemente reactiva
- IIc) la transformación se inicia en el mismo momento que se ponen en contacto los reactivos.

En este caso, la Etapa (B.1) debe ser ignorada.

TRANSFORMACIONES III caracterizadas por:

- IIIa) reactivo sólido puro y no poroso
- IIIb) superficie interfásial no uniformemente reactiva
- IIIc) al comienzo de la transformación puede observarse un tiempo de inducción o latencia.

TRANSFORMACIONES IV tienen las siguientes características:

- IVa) presencia de una ó más regiones sólidas porosas
- IVb) superficie interfacial no uniformemente reactiva
- IVc) al comienzo de la transformación puede observarse un tiempo de inducción o latencia.

Teniendo a las vista las características de las TRANSFORMACIONES I A IV explicitadas precedentemente, resulta que los modelos de frontera libre como descriptivos de procesos fluido-sólido reactivo se circunscriben al campo de las TRANSFORMACIONES I y algunos casos de la II, esencialmente a través de :

MODELO 1 : Modelo del núcleo en contracción

- (a) En esta variante no hay formación ni de producto sólido ni de cenizas (sólido

inerte). El sólido atacado por el fluido da lugar por reacción química superficial a un producto fluido y eventualmente otro gaseoso que se desprende de la superficie reaccional. El diámetro de la partícula disminuye con el progreso de la reacción. La frontera libre es la posición del radio instantáneo de la partícula.

(b) El diámetro externo de la partícula se mantiene inalterado y la reacción química superficial produce sólido inerte poroso (cenizas) y producto fluido. La frontera libre es la coordenada de la interfase o superficie reaccional sólido inerte-sólido puro.

MODELO 2 : Modelo de zona de reacción

La reacción química se produce en una zona de pequeño espesor con relación a la longitud característica de la partícula. Tal zona cubre uniformemente a la partícula a modo de piel y avanza hacia el interior de la partícula al transcurrir la reacción, produciéndose la disminución del tamaño del sólido reactivo.

En la Fig 2 siguiente se ilustra esquemáticamente el curso de la transformación fluido-sólido reactivo según lo prescrito por (a) y (b) del MODELO 1. El MODELO 2 se ilustra en la Fig 3.

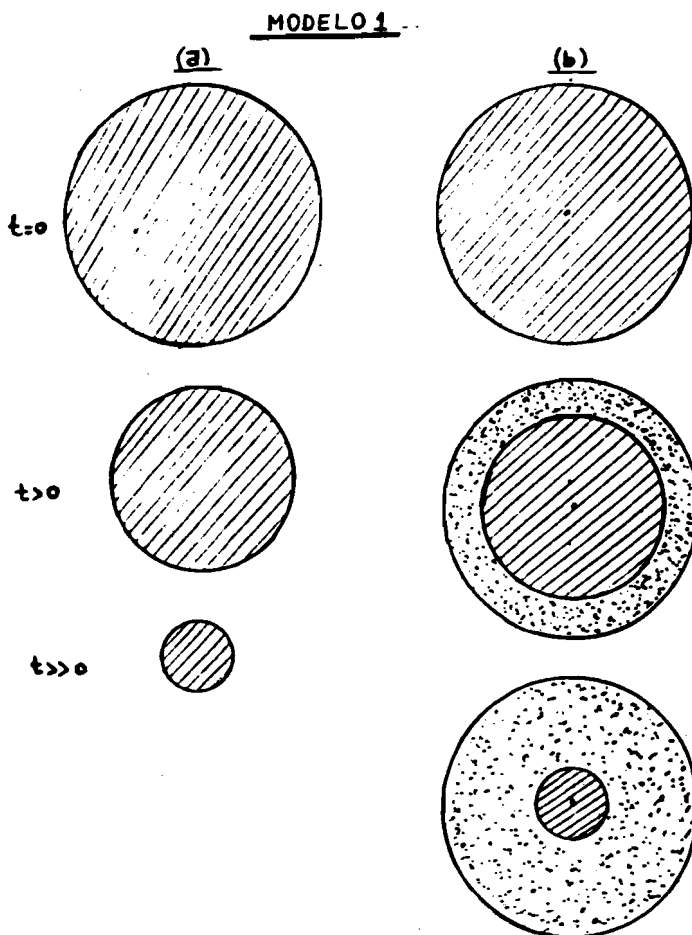
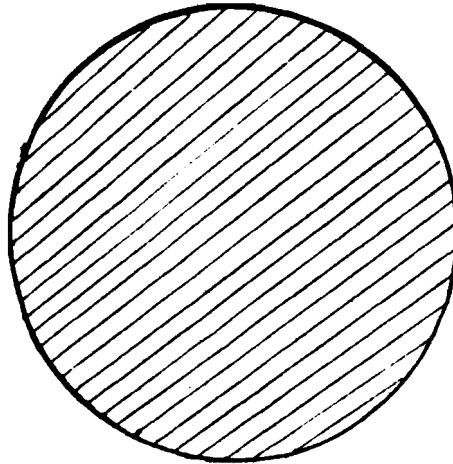


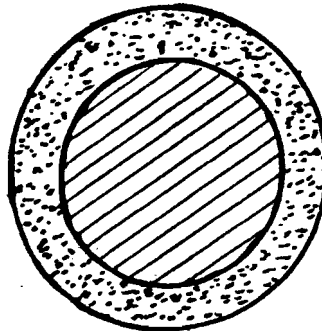
Fig2

MODELO 2

$t=0$



$t>0$



$t \gg 0$

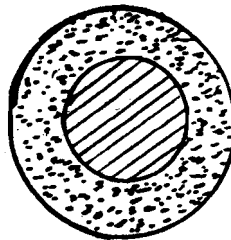


Fig 3

Acerca de los precitados modelos hay mucho producido en la literatura, especialmente sobre la variante (b) del MODELO 1 y el MODELO 2 [ver por ejemplo [We], [Ra, Do] y referencias citadas en [Qui Av Fu]]. Relativo a (b) hay también un trabajo más o menos reciente [Qui Av Fu].

En lo que sigue no abocaremos precisamente a la variante (a) del MODELO 1.

2.- Consideraciones Generales sobre el Modelado

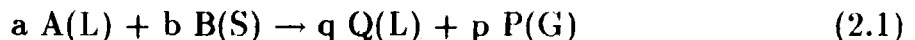
En el análisis del proceso que nos ocupa juegan su rol los siguientes aspectos

- (2.a) balance de masa para la partícula de sólido reactivo (ocupa el rol central en la metodología desarrollada en [Qui Av Fu])
- (2.b) ecuaciones estequiométricas de la transformación
- (2.c) principio de conservación de la masa del sistema
- (2.d) expresiones para la cinética de la reacción química superficial
- (2.e.) modelos de la interfase reaccional y de los cambios estructurales que experimenta el sólido reactivo
- (2.f) ecuaciones de continuidad para las especies químicas pertinentes
- (2.g) tipo de equipo (contactor) donde se lleva a cabo el proceso de cambio
- (2.h) regímenes de velocidad para la transformación (cual será la etapa controlante)
- (2.i) condiciones operativas

Pasamos entonces a analizar en particular y a modo de ejemplo específico presentado en este cursillo como un proceso de transformación fluido-sólido reactivo descrito por un modelo de frontera libre al siguiente:

2.1.- Disolución química de un sólido en un líquido

La reacción que ocurre en tal proceso se puede representar como



Usaremos el MOELO 1 variante (a) para describir el proceso en cuestión, para el que aparte de las consideraciones ya hechas precedentemente explicitamos las siguientes:

- (1) Todos los parámetros físicos y de transporte (densidad, viscosidad, difusividad) de sólido y fluido se suponen constantes en el curso de la transformación
- (2) La partícula reactante mantiene su forma y no se disgrega ni sinteriza en el curso de la reacción
- (3) Sobre Ω no hay acumulación de especies químicas fluidas
- (4) La transformación se realiza a temperatura constante
- (5) Condiciones operativas: Partícula reactante estanca en corriente líquida
- (6) Etapa controlante de la velocidad global del proceso: (A.0), (AB.2) a (AB.4) , (A.6)
- (7) Expresión cinética para la velocidad de reacción química superficial r_s

$$r_s = \frac{k C_{A_s}}{1 + k_1 C_{A_s}} \quad (2.2)$$

- (8) Geometría específica considerada para el sólido reactante : pastillas planas de espesor $2R$ y esferas de radio R [ver esquemas ilustrativos en Fig 4]

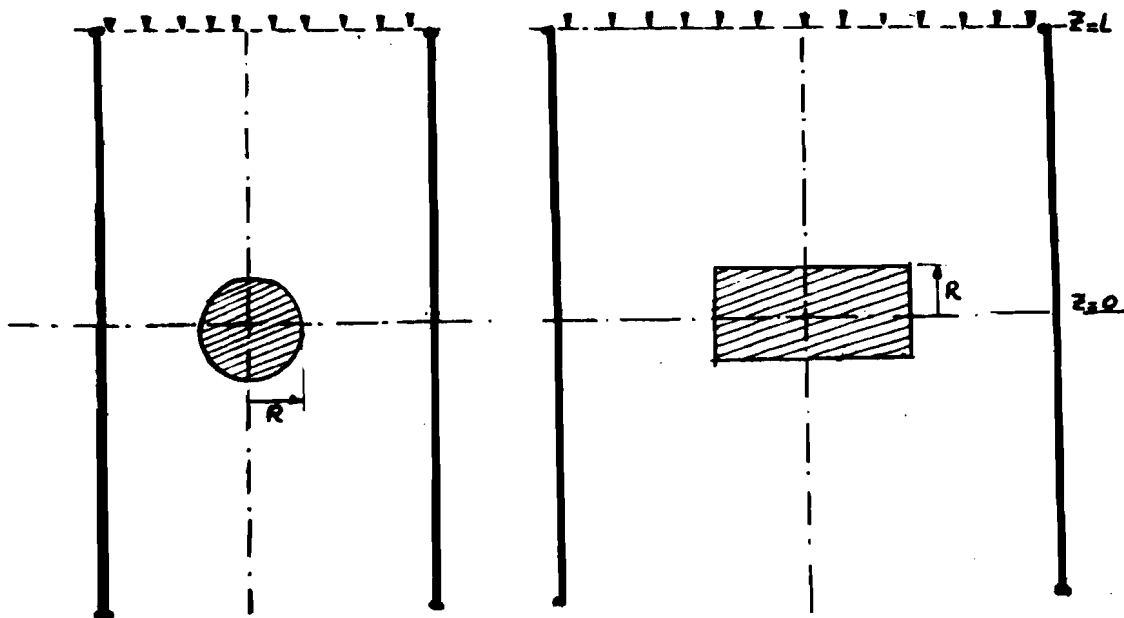


Fig 4

Modelo Matemático descriptivo :

La ecuación básica es la del balance de masa macroscópico de una partícula reactante que se expresa como

$$\frac{dM_P}{dt} = -\eta_F \Omega \quad (2.3)$$

siendo M_P y Ω la masa y la superficie externa de la partícula reactante, η_F el flujo másico medio total de las especies químicas fluidas, evaluado sobre Ω . En nuestro caso se tiene

$$\eta_F = \eta_A + \eta_q + \eta_p \quad (2.4)$$

con

$$\eta_i = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} (-\eta_i \cdot \mathbf{n}) d\sigma \quad (2.5)$$

\mathbf{n} : vector normal a Ω .

Por otra parte, para la ecuación estequiométrica se tiene

$$m_A \nu_A + m_B \nu_B + m_Q \nu_Q + m_P \nu_P = 0 \quad (2.6)$$

es decir

$$-a m_A - b m_B + q m_Q + p m_P = 0 \quad (2.7)$$

y de la restricción impuesta por el principio de conservación de la masa del sistema se sigue que

$$\left. \begin{aligned} \eta_A \Omega &= \nu_A m_A r_s \Omega_r \\ \eta_Q \Omega &= \nu_Q m_Q r_s \Omega_r \\ \eta_P \Omega &= \nu_P m_P r_s \Omega_r \end{aligned} \right| \quad (2.8)$$

$\nu_A, \nu_B, \nu_Q, \nu_P$ ($\nu_A = -a, \nu_B = -b, \nu_Q = q, \nu_P = p$) son los coeficientes estequiométricos y m_A, m_B, m_Q, m_P , pesos moleculares de las especies químicas intervinientes.

Denotando con $S=S(t)$ la coordenada que con origen en el centro de la pastilla sólida reactante ubica la posición al tiempo t de la superficie o interfase reaccional líquido - sólido, teniendo presente todo lo explicitado en esta sección, se puede escribir el siguiente modelo matemático descriptivo del proceso en consideración:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{AL} \frac{1}{z^m} \frac{\partial}{\partial z} \left(z^m \frac{\partial C_A}{\partial z} \right), \quad S(t) < z < L, \quad t > 0 \quad (2.9)$$

$$D_{AL} \frac{\partial C_A}{\partial z} \Big|_{z=L} = -k_c [C_{A_0} - C_{A_s}], \quad t > 0 \quad (2.10)$$

$$-D_{AL} \frac{\partial C_A}{\partial z} \Big|_{z=S(t)} = m_A a \frac{k C_{A_s}}{1 + k_1 C_{A_s}}, \quad t > 0 \quad (2.11)$$

$$C_A(z, 0) = C_{A_0}, \quad R \leq z \leq L \quad (2.12)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{b m_B}{\rho a} \frac{k C_{A_s}}{1 + k_1 C_{A_s}} \quad (2.13)$$

$$S(0) = R \quad (2.14)$$

donde para el coeficiente global de transferencia de masa k_c , se consideró la siguiente correlación debida a Frosling

$$\frac{k_c S(t)}{D_{AL}} = 2 + J \left(\frac{S(t) U}{\mu_L} \right)^{1/2} \left(\frac{\mu_L}{D_{AL} \rho_L} \right)^{1/3} \quad (2.15)$$

siendo J una constante positiva, U un flujo convectivo para el líquido, μ_L y ρ_L viscosidad y densidad del líquido.

$C_A = C_A(z,t)$ denota el perfil de concentración del reactante A en fase líquida, D_{AL} la difusividad, m es un factor geométrico [$m=0$ (pastilla plana), $m=2$ (pastilla esférica)], $C_{AS} = C_A(S(t),t)$.

3.- Aproximación cuasi-estacionaria ($m=0$)

En tal caso, el balance de materia para A en (2.9) queda:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial C_A}{\partial z} \right) = 0, \quad S(t) < z < L \quad (3.1)$$

Suponiendo despreciable el segundo término del segundo miembro de (2.15), a partir de (3.1), (2.9), (2.10) y (2.11) se obtiene

$$C_A = C_{A0} - \frac{a k C_{A0}}{D_{AL} \left(1 + a \frac{k_1}{k_c} \right)} \left(z - \frac{D_{AL}}{k_c} \right) \quad (3.2)$$

En consecuencia, a partir de (2.13) y (3.2) se encuentra el siguiente problema de Cauchy para la frontera libre $S=S(t)$.

$$\left| \begin{array}{l} \frac{dS}{dt} = F(S, \text{parámetros}) \\ S(0) = R \end{array} \right. \quad (3.3)$$

En (3.3) los parámetros son k , D_{AL} , k_1 .

Los grupos paramétricos usados en la resolución computacional de (3.3) fueron definidos de la siguiente manera:

$$a_0 = \frac{a k C_{A_0}}{D_{AL} (1 + a k)}, \quad b_0 = \frac{b m_B k}{\rho a}, \quad c_0 = k_1 C_{A_0}, \quad (3.4)$$

$$d_0 = k_1 D_{AL}, \quad l = \frac{D_{AL} (1 + c_0) + b_0}{D_{AL} d_0}, \quad p = \frac{a_0}{D_{AL} d_0}, \quad e_0 = c_0 a_0$$

Los resultados de la simulación computacional de (3.3) se ilustran en las Fig. 5 a Fig. 10 . La dependencia paramétrica parece razonable.

REFERENCIAS

[Qui Av Fu] O. D. QUIROGA - J. R. AVANZA - A. J. FUSCO "Modelado de las Transformaciones Fluido-Sólido Reactivo".

[We] C. Y. WEN "Noncatalytic heterogeneous solid fluid reaction models " . Industrial Eng. Chem; 60, N^o 9 (1968), 33 - 54

[Ra Do] A. RAMACHANDRAN - L. K . DORAISWAMY "Modeling of Noncatalytic Gas - Solid Reactions ", AIChE Journal, 28(6), 881-900, (November 1982)

[Vi Qui Mo] L. T. VILLA - O. D. QUIROGA - G. V. MORALES "The shrinking core model for non-catalytic gas-solid reactions with arbitrary order with respect to the gaseous reactant and general boundary conditions". Trans I Chem E, Vol 70, Part A, May 1992

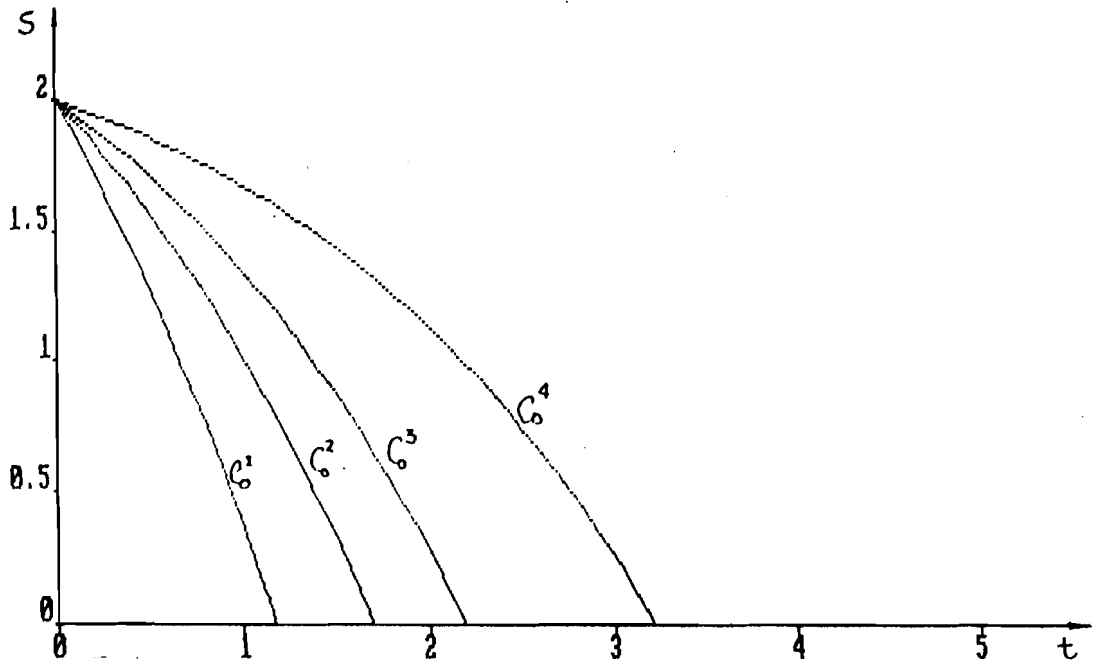


Fig 5 ($C_0^i > C_0^{i+1}$, $i=1, \dots$) ($k_1=0$)

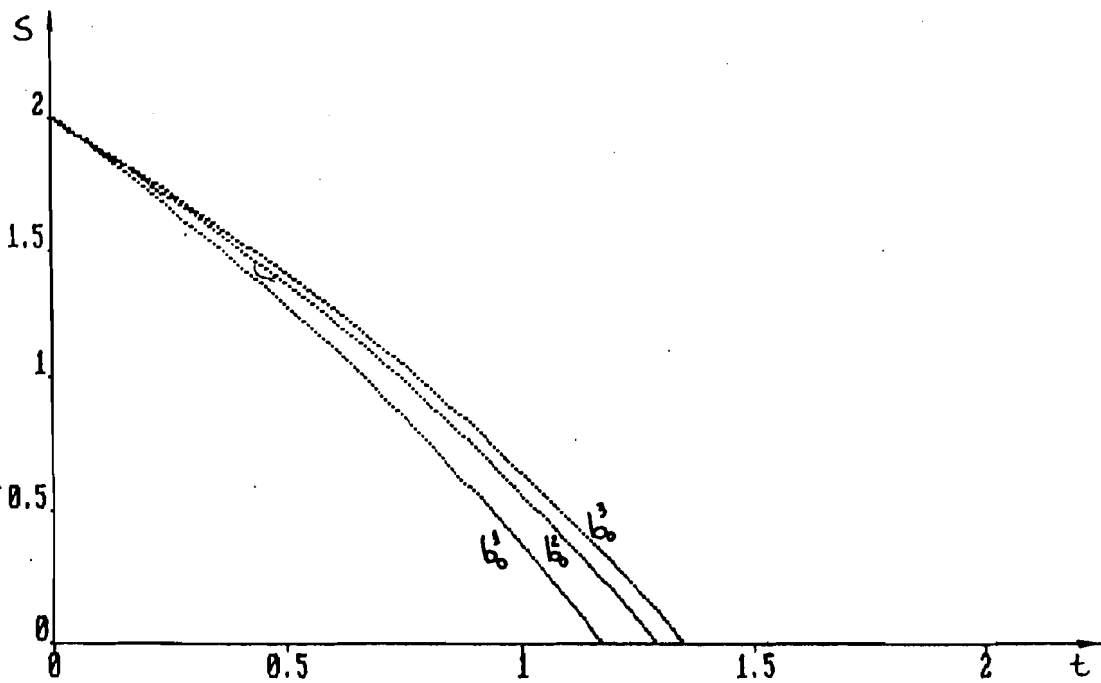


Fig 6 ($b_0^1 > b_0^2 > b_0^3$) ($k_1=0$)

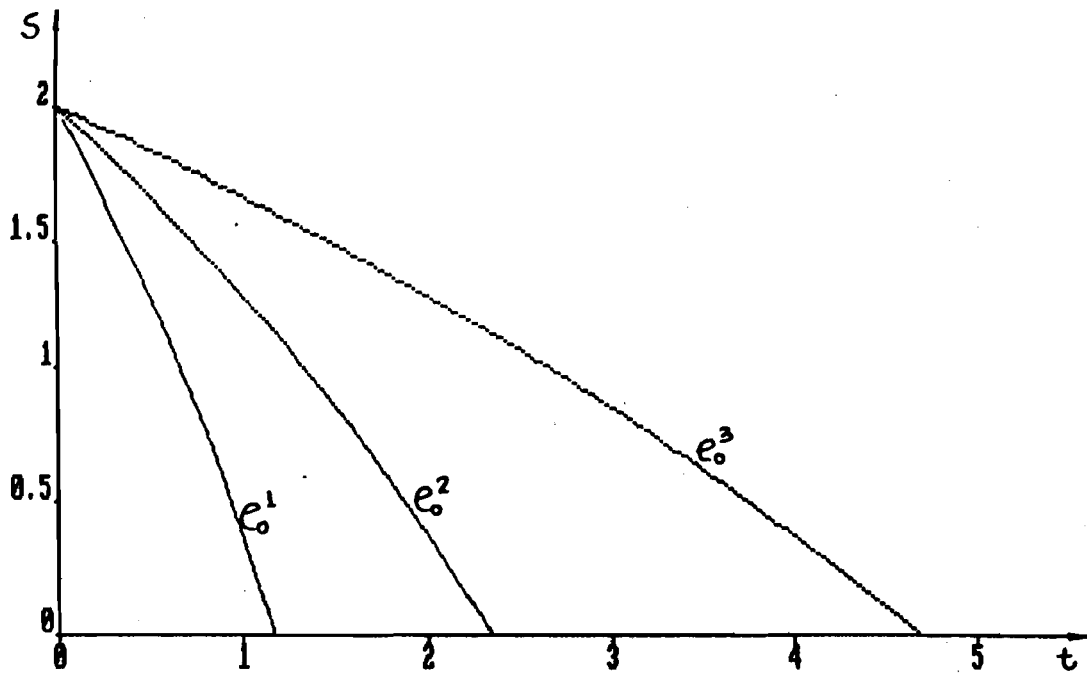


Fig 7 ($e_0^1 > e_0^2 > e_0^3$) ($k_i = 0$)

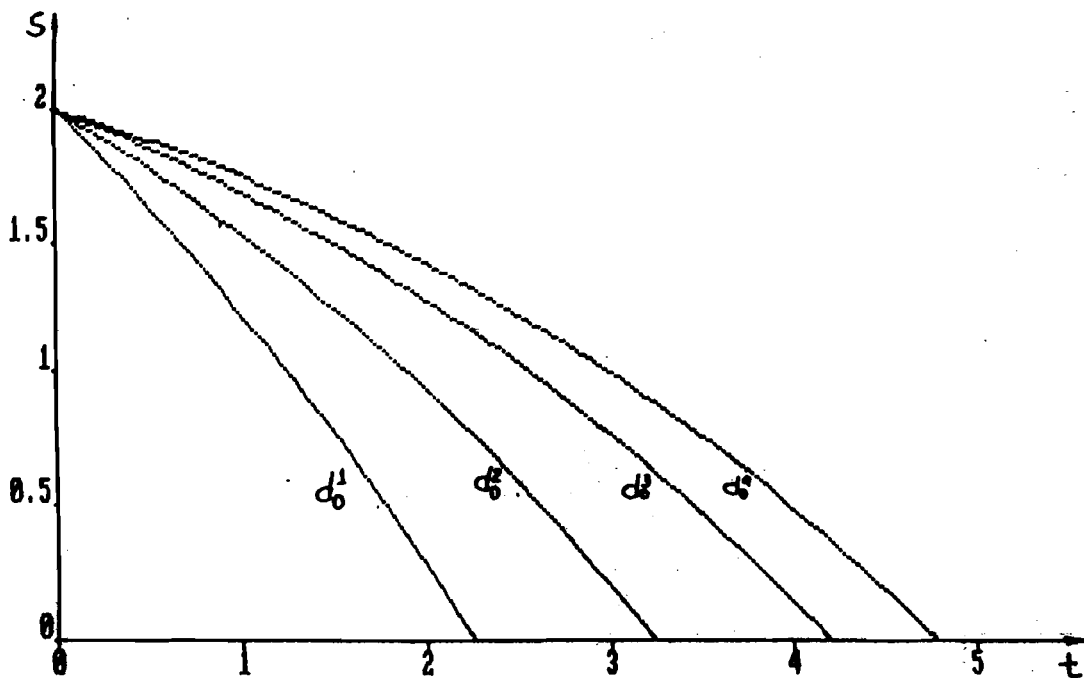


Fig 8 ($d_0^i > d_0^{i+1}, i=1, \dots$) ($k_1 > 0$)

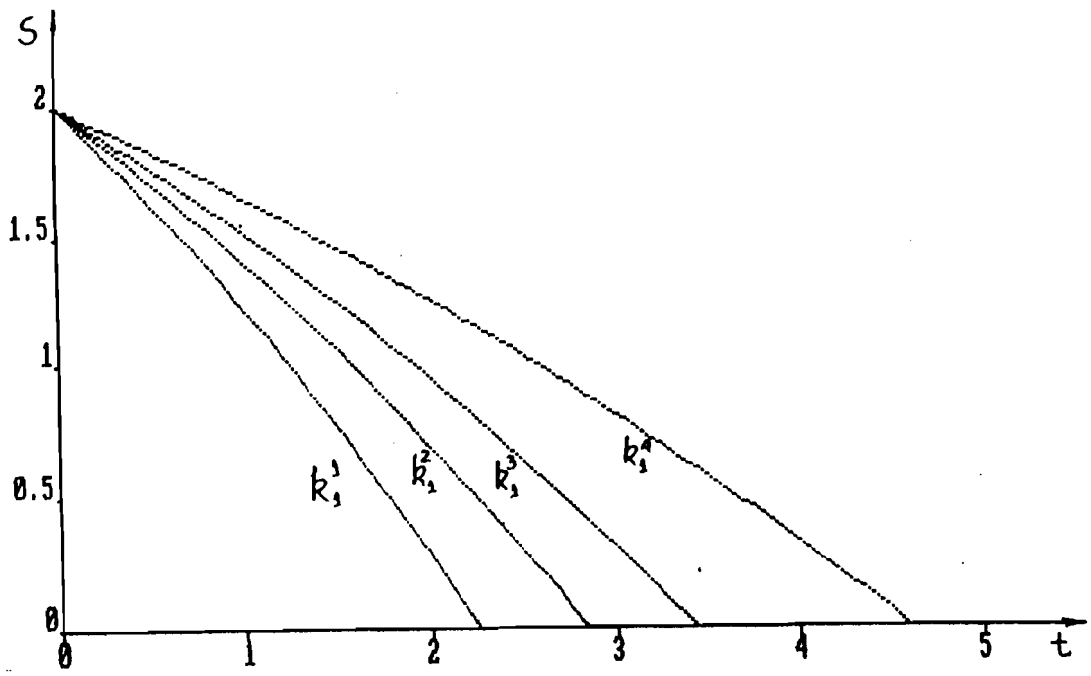


Fig 9 ($k_i^i < k_i^{i+1}, i=1..$)

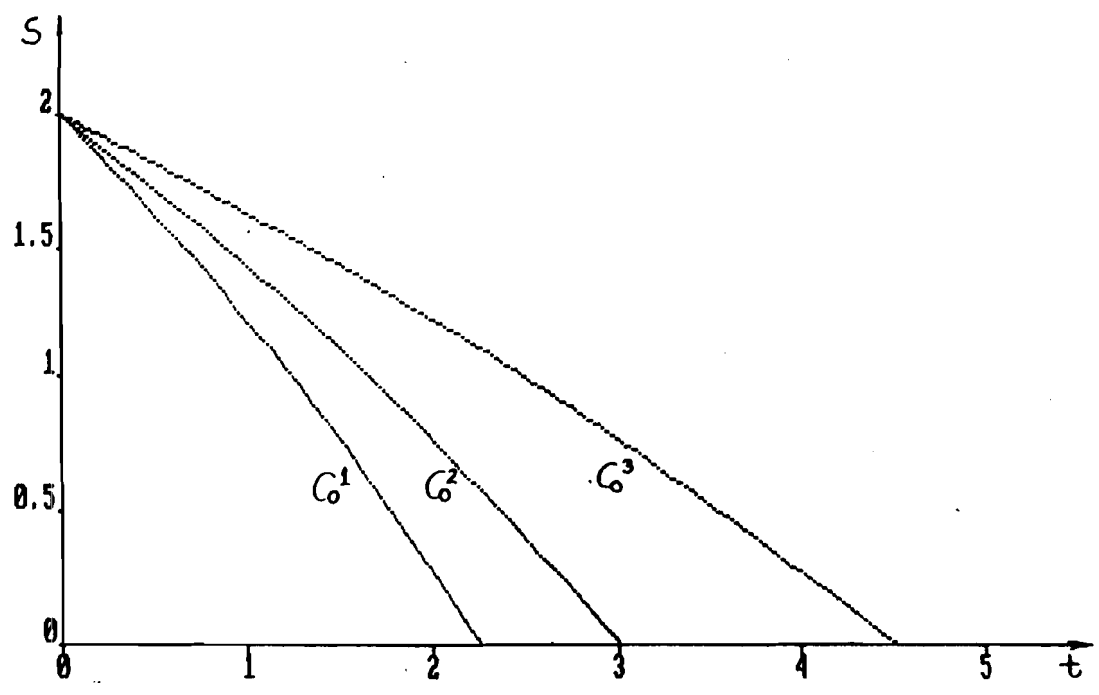


Fig 10 ($k_i > 0$) ($C_0^1 > C_0^2 > C_0^3$)

NOTACIONES

A	reactivo fluido
a	coeficiente estequiométrico de A
B	reactivo sólido
b	coeficiente estequiométrico de B
C_A	concentración molar de A en el seno de la región fluida, kmol/m^3
C_{A_s}	concentración molar de A sobre la interfase reaccional, kmol/m^3
DAL	coeficiente de difusión de la i-ésima especie química en un medio líquido L, m^2/s
G	Flujo másico superficial, $\text{kg/m}^2 \text{ s}$ en ec (2.15)
k	coeficiente cinético
k_c	coeficiente de transferencia de masa, m/s
k_1	coeficiente cinético de adsorción de A, m^3/kmol
m	coeficiente geométrico
m_A	peso molecular de A, kg/kmol
m_B	peso molecular de B, kg/kmol
p	coeficiente estequiométrico de P
q	coeficiente estequiométrico de Q
r_s	velocidad de reacción química heterogénea, específica por unidad de interfase reaccional, $\text{kmol/m}^2\text{s}$
t	tiempo, s
z	coordenada espacial
μ_L	viscosidad del líquido, kg/m s
ρ_L	densidad del líquido, kg/m^3

SUBINDICES

- F con respecto a una región fluida
- G con respecto a una región gaseosa
- L con respecto a una región líquida
- S con respecto a una región sólida

INIQUI (CONICET – UNSa),
Facultad de Ingeniería,
Universidad Nacional de Salta,
Buenos Aires 177,
4400 Salta, Argentina.

ONE-DIMENSION MODEL FOR DYNAMIC CONDENSATION OF A VAPOR

V. A. KUZ *.

Abstract

A fluid-dynamic one-dimensional model of condensation of a vapor into a liquid is presented here. Under special thermodynamic conditions a saturated vapor condenses into droplets. This non-equilibrium process is characterized by: a transfer of mass from the vapor to the incipient liquid, a thermal gradient at interface and a release of heat from the gas to the interface (heat of condensation). These three fundamental physical aspects of the problem are taken into account in the description. The thermal boundary condition for a spherical interface is first derived. Then this surface equation together with the balance mass equation and the thermal "static" distribution of each bulk phase results in a first order non-linear differential equation. The general solution of the equation is analysed for different situations. In the case of single non interacting drops condensing onto a substrate (heterogeneous condensation), it predicts an exponent of $1/3$ for the time evolution of the droplet radius. But for an assembly of interacting drops the power law exponent changes to one. For the homogeneous case of single non interacting droplets, the equation gives a power exponent of $1/2$ and for an assembly of interacting , for small values of time , the drop's radius grows linearly with time. These results are discussed and compared with experiment.

1 Introduction

Most human beings recognize the effects of gravity and condensation as phenomena happening everywhere around in nature . Formation of tiny droplets on every flower or leaf is a routine spectacle in every early morning all around

the planet. "Breath Figures" or dew formation on windows or spectacles [1], transformation of clouds into rain, condensation of water in a cloud chamber [2] microemulsions and macroemulsions stability [3], creaming of emulsions [4], grain growth [5], etc. are problems of considerable interest and pose important questions to be understood in Condensed Matter Physics. In thermodynamic language this phenomena is known as a first order phase transition. Heterogeneous and homogeneous [6] are the names of the two ways of a saturated vapor condensation. When vapor condenses on an inhomogeneous solid surface or a seed or a fast particle (Wilson chamber), the process is named heterogeneous condensation. But when a pure saturated vapor is condensed by density fluctuations, the condensation is called homogeneous. From the thermodynamic point of view [7], heterogeneous and homogeneous condensation differ on the density value at which each of it occurs. To trigger condensation, the later process requires higher density values than the former. This fact will be used later to characterize both ways of condensation. Measurements were reported of the growth of breath figures on solids [8], [9], on liquids [10] and also the influence of wetting conditions in the formation of breath figures on fibers [11]. Models considering diffusion-limited droplet growth developed from a mean-field boundary approximation [12] and the influence of temperature gradients on the kinetics boundary layer problem for a condensing droplet have been developed [13] in order to understand the experiments. A dynamic-scaling approach was also developed for the description of the droplet-size distribution [14]. The kinetics of droplet growth was investigated using Montecarlo simulations, scaling theory and the Smoluchowski equation [15]. Simulation on the formation of large liquid drops by molecular aggregates was described and discussed for the stationary and falling case [16]. The laws of condensation onto a substrate or the homogeneous nucleation of a supersaturated vapor also could depend on the droplet's interaction. Interacting droplets grow faster than single ones. In an assembly of interacting droplets the growth is produced by coalescence. Bigger ones, following Laplace law, grow faster to reduce the pressure of the system. Single drop condensation could be seen as a convective transfer of mass and heat from the gas phase to the liquid drop. In a coalescence process the convective transport of gas is irrelevant. The growth is ruled by the transport of liquid. Certainly here condensation will be viewed as a fluid dynamic process but the thermal

distribution and the associated thermal gradients at each phase will be such that no internal flow though Marangoni or Raleigh-Benard convection takes place

2 The Thermal Boundary Condition for a Drop.

Before considering the specific fluid-dynamic problem of condensation of a saturated vapor into tiny droplets , it is necessary to know, in spherical symmetry, the interfacial thermal balance equation . This equation has been previously derived for the case of a plane surface of separation [17]. We follow here a phenomenological approach . We start by considering the conservation law [18] of the specific internal energy u of an inhomogeneous fluid (the interface)

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = -div(\rho uv + J_q) - P : grad(v) \quad (1)$$

where ρ is the density , v the velocity , J_q is the heat flow and P is the total pressure tensor . From here on it will be considered that there is not any gradient of temperature, velocity or concentration on the surface of the drop. That is all changes occur along the radial direction r . Then the hydrostatic part of the product $P : grad(v)$ reduces to

$$P : grad(v) = \sum_{\alpha\beta} P_{\alpha\beta} \frac{\partial v_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} \simeq P_N \frac{\partial v_r}{\partial r} \quad (2)$$

where P_N and v_r are the pressure and the velocity along the radial direction. Besides all these special restrictions on the gradients and on the tensor [19], we also assume that the system is in a steady state situation . However under these assumptions , equations (1) and (2) becomes :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 (\rho u v_r - \kappa \frac{\partial T}{\partial r})) + P_N \frac{\partial v_r}{\partial r} = 0 \quad (3)$$

where $\kappa \frac{\partial T}{\partial r}$ is the normal part of the heat flow vector J_q and κ the heat conductivity. This last equation can be written as follow

$$\frac{\partial}{\partial r} [r^2 (v_r (\rho u + P_N) - \kappa \frac{\partial T}{\partial r})] - v_r \frac{\partial}{\partial r} (r^2 P_N) = 0 \quad (4)$$

By integrating this equation between two concentric spheres , $r - \epsilon < r_s < r + \epsilon$, one at the gas and the other at the liquid side and assuming that v_r is in this region a smooth function of r then we have :

$$[r^2(v_r \rho h - \kappa \frac{\partial T}{\partial r})]_{r-\epsilon}^{r+\epsilon} - (v_r)_s [(r^2 P_N)]_{r-\epsilon}^{r+\epsilon} = 0 \quad (5)$$

h indicates the specific enthalpy ($h = u + \frac{P_N}{\rho}$). The velocity v_r has been approximated by its value at the Gibbs dividing surface $(v_r)_s$. By inserting the Laplace relation ($\Delta P = 2\sigma/r$) into equation (5), it becomes :

$$[v_r \rho h - \kappa \frac{\partial T}{\partial r}]_{r-\epsilon}^{r+\epsilon} + (v_r)_s \frac{2\sigma}{r} = 0 \quad (6)$$

As it can be seen this thermal boundary condition takes into account the enthalpics and the thermal flow of each phase as well as the capillary pressure contribution. Equation (6) is a basic equation for the description of the condensation process.

3 One-Dimension Condensation

The process of condensation of a saturated vapor into droplets consists basically in the an interchange of heat and mass, occurring at the surface of the drop. The former, regulated by equation (6), is rewritten as follows :

$$\left[\rho h \frac{\partial r}{\partial t} \right]_l^g + \frac{2\sigma}{r} \left(\frac{\partial r}{\partial t} \right)_s = \left[\kappa \frac{\partial T}{\partial r} \right]_l^g \quad (7)$$

where the radial velocity $v_r = (\partial r / \partial t)$ and $[\cdot]_l^g$ indicates a difference of the corresponding property at both sides of the Gibbs dividing surface (the liquid side and the gas side respectively). Let us write , for the steady state situation , the continuity equation at the droplet's surface . It reads

$$\rho_l (\partial r / \partial t)_l = \rho_g (\partial r / \partial t)_g \quad (8)$$

ρ_l and ρ_g indicate the liquid and gas density respectively . As $\rho_l \gg \rho_g$ then it follows from equation (8) that $(\partial r / \partial t)_g \gg (\partial r / \partial t)_l$. Close to the interface,

the gas particles move faster than the liquid ones. By remembering that the heat is transported from the gas (saturated vapor) to the liquid (the drop) , then equation (7), the surface energy balance equation, becomes :

$$\left(\frac{\partial r}{\partial t}\right)_g + \frac{2\sigma}{\rho_g L r} \left(\frac{\partial r}{\partial t}\right)_s = -\frac{\kappa_l}{\rho_g L} \left(\frac{\partial T}{\partial r}\right)_l + \frac{\kappa_g}{\rho_g L} \left(\frac{\partial T}{\partial r}\right)_g \quad (9)$$

L represent the latent heat of condensation, κ_l and κ_g are heat conductivities of the liquid and gas respectively. In the next applications of this equation, it will be assumed that the thermal gradients are such that no convective motion at the drop's surface is present; neither Rayleigh nor Marangoni instability[20] is present

a) Heterogeneous Growth of Single Drops

In order to calculate the temperature gradients at the interface from the liquid and gas side respectively , it is necessary to know the thermal distribution at both bulk phases. The temperature and the gradient can be found by solving the following differential equation .

$$\rho \frac{dq}{dt} = -div J_q \quad (10)$$

where dq is the sensible heat per unit mass transferred to the liquid droplet from the gas phase . J_q is the " heat flow "[18] and is given by the law of Fourier ($J_q = -\kappa gradT$). The thermal evolution of the droplet can be found by solving the following equation :

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dT}{dr} \right) = -\frac{A_o}{\kappa_l} \quad (11)$$

Here we have assumed that the sensible heat transferred to the liquid ($\rho dq/dt$) = A_o is constant . The solution of the above equation is

$$T = -\frac{A_o}{6\kappa_l} r^2 + C \quad (12)$$

where C is a constant. For obtaining the thermal distribution of the gas phase, it is assumed that heat flow radially to the drop, then the temperature is given by:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dT}{dr} \right) = 0 \quad (13)$$

The heat flow from the gas to the drop , then the solution of equation(13) is:

$$T = \frac{A}{r} + B \quad (14)$$

where A and B are constant. After substitution of the respective thermal gradients, evaluated from equations(12) and (14), into equation (9) we get the following non lineal first order differential equation

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \frac{2\sigma}{\rho_g L r} \frac{\partial r}{\partial t} - \frac{A_o}{3\rho_g L} r - \frac{A\kappa_g}{\rho_g L r^2} = 0 \quad (15)$$

Here it has been dropped the subscript on the velocity , because it was assumed $(\partial r/\partial t)_g \approx (\partial r/\partial t)_s$. The solution of this differential equation will provide us the condensation laws . It must be kept in mind that condensation of a vapor could be reached under two intrinsically different situations. When the saturated vapor condenses by fluctuations on an homogeneous surface of the system , the condensation is called homogeneous. The vapor is in a metastable state and the phase change is triggered at high density values . Another situation is when there are imperfections on the wall. In this case the transition is named heterogeneous and occurs at lower densities than the former. For water drops of the order of μm the "coefficient" of the second term of equation (15) is $\frac{2\sigma}{\rho_g L r} < 1$. Under this assumption equation(15) reduces to:

$$\frac{\partial r^3}{\partial t} - \frac{A_o}{3\rho_g L} r^3 - \frac{3A\kappa_g}{\rho_g L} = 0 \quad (16)$$

The solution of this equation after expanding the exponential is

$$r^3 = r_o^3 + \left(\frac{r_o^3}{3} + \frac{3A\kappa_g}{A_o} \right) \frac{A_o}{\rho_g L} t \quad (17)$$

Drops without interactions grow with time following a power of 1/3

Let us assume now that the temperature of the drop remains constant during the process of condensation ; in such a situation the thermal gradient evaluated from the liquid side will be null and the growth equation (9) will reduce to

$$\frac{\partial r^3}{\partial t} - \frac{3A\kappa_g}{\rho_g L} = 0 \quad (18)$$

then

$$r^3 = \frac{A\kappa_g t}{\rho_g L} \quad (19)$$

Also here we get the same power law as before (see equations (17) and (19), the temperature distribution of the drop does not affect the condensation law of single drops. The 1/3 growing power was found by experiment and by numerical simulation[9],[10] and also predicted via an heuristic model [1].

b) Heterogeneous Growth of an Assembly of Drops

The situation in this case is different than for single drops . Here the growth is basically governed by the coalescence of neighboring drops. Bigger drops grows at expenses of smaller ones (condition of mechanical stability) . It could be assumed in this situation that the growing drop is surrounded by smaller ones of any size and it is practically circumvented by liquid . This bigger drop is imbibe in the same liquid. Then the temperature and its gradient will be given by a distribution similar to equation (12). However equation (9) reduces to

$$\frac{\partial r}{\partial t} - \frac{A_o}{3\rho_g L} r = 0 \quad (20)$$

By expanding the solution of equation (20), we have

$$r = r_o + r_o \frac{A_o}{3\rho_g L} t \quad (21)$$

Coalescence accelerate three times the growth of a single drop . Experiments and simulation agree with this result [1].

c) Homogeneous Growth of a Single Drop.

The homogeneous growth of a drop is produced when a supersaturated vapor is condensed by fluctuations of density. Let us suppose that the temperature of the liquid drop is nearly constant and that of the gas (the outside fluid) is given by equation (14). As we mentioned before the vapor density reaches here higher values than in the heterogeneous case . Under this circumstances, it is assumed that $\frac{2\sigma}{\rho_g L r} > 1$, then equation (9) becomes :

$$\frac{\partial r^2}{\partial t} - \frac{A\kappa_g}{\sigma} = 0 \quad (22)$$

The solution of this equation is

$$r^2 = \frac{A\kappa_g}{\sigma}t \quad (23)$$

In this case the radius grows with the power exponent 1/2. This growth exponent is similar to the corresponding of a 3-D droplet on a 1-D substrate [1]

d) Homogeneous Growth of an Assembly of Drops

As in the heterogeneous cases the growth of a drop is fundamentally controlled by the coalescence of the smaller droplets . The increase of the drop's mass by condensation of the saturated vapor is neglected in relation to the coalescence process. Here it is also assumed that $\frac{2\sigma}{\rho_g L r} > 1$. A central bigger drop is imbibe by smaller ones of the same liquid, the temperature and its gradient will be given by equation (12). Then equation (9) reduces to :

$$\frac{\partial r}{\partial t} - \frac{A_o}{6\sigma}r^2 = 0 \quad (24)$$

The solution of this equation is

$$r = r_o + \frac{6\sigma}{A_o} \left(\frac{1}{t_o} - \frac{1}{t} \right) \quad (25)$$

It is seen from this equation that for small values of t, $r \approx t$ and at large values of t, $r \approx cte$. The former asymptotic solution is similar to that found before for the heterogeneous case (see equation (21))

4 Conclusions

It has been study here the condensation problem at the light of a fluid-dynamic approach . First of all it has been found the surface thermal balance equation. This equation was obtained, for the steady state situation, by integrating the three-dimensional energy balance equation . In the derivation, it was assumed that all the relevant changes occur along the radial direction of the drop and that there is not thermal or concentration gradient acting on the surface of the drop itself. The resulting equation (equation (9)) links , at the Gibbs dividing

surface , the enthalpic , the thermal and the capillary pressure contribution to the energy. By using properly this equation it can be treated single non-interacting and assembly of interacting droplets for the heterogeneous and homogeneous condensation. The former case for both droplet's situation is represented by equations (16) or (18) and (20) respectively. These equations were obtained by assuming that the capillary pressure contribution is neglected in relation to the thermal and enthalpic contributions. It must be kept in mind that the condensation density values of the saturated vapor for heterogeneous systems is lower than the respective values of the homogeneous ones. Then $1 > \frac{2\sigma}{\rho_g L} \frac{1}{r}$ clearly represents the condition for condensation onto a substrate. Water drops of the order of μm fulfill this condition .For single non interacting and assembly of interacting droplets, the power growth exponents predicted here are 1/3 and 1 respectively. This results agree with experiments [10] and numerical simulation [9]. It must be mentioned that the 1/3 power law was also obtained by a model where basically it was assumed a proportion between the rate of change of the drop's volume and the concentration gradient in the boundary layer [1]. The homogeneous growth of single and assemble of interacting drops have been considered by assuming in both cases that $1 < \frac{2\sigma}{\rho_g L} \frac{1}{r}$. Here capillarity instead the enthalpic contribution play an essential role in the description . Non interacting drops grow with the power exponent 1/2 . This growing power is similar to the one found experimentally on very thin thread under wetting conditions [11]. Finally for small values of t, the homogeneous case of an assembly of droplets, grows linearly with time. However it can be concluded that the present fluid-dynamic approach takes into account the relevant feature of the condensation mechanism.and predicts correct power laws.

*Instituto de Fisica de Liquidos y Sistemas Biologicos.IFLYSIB. (U.N.L.P. - CONICET - CIC)
c.c 565 .1900 La Plata. Argentina

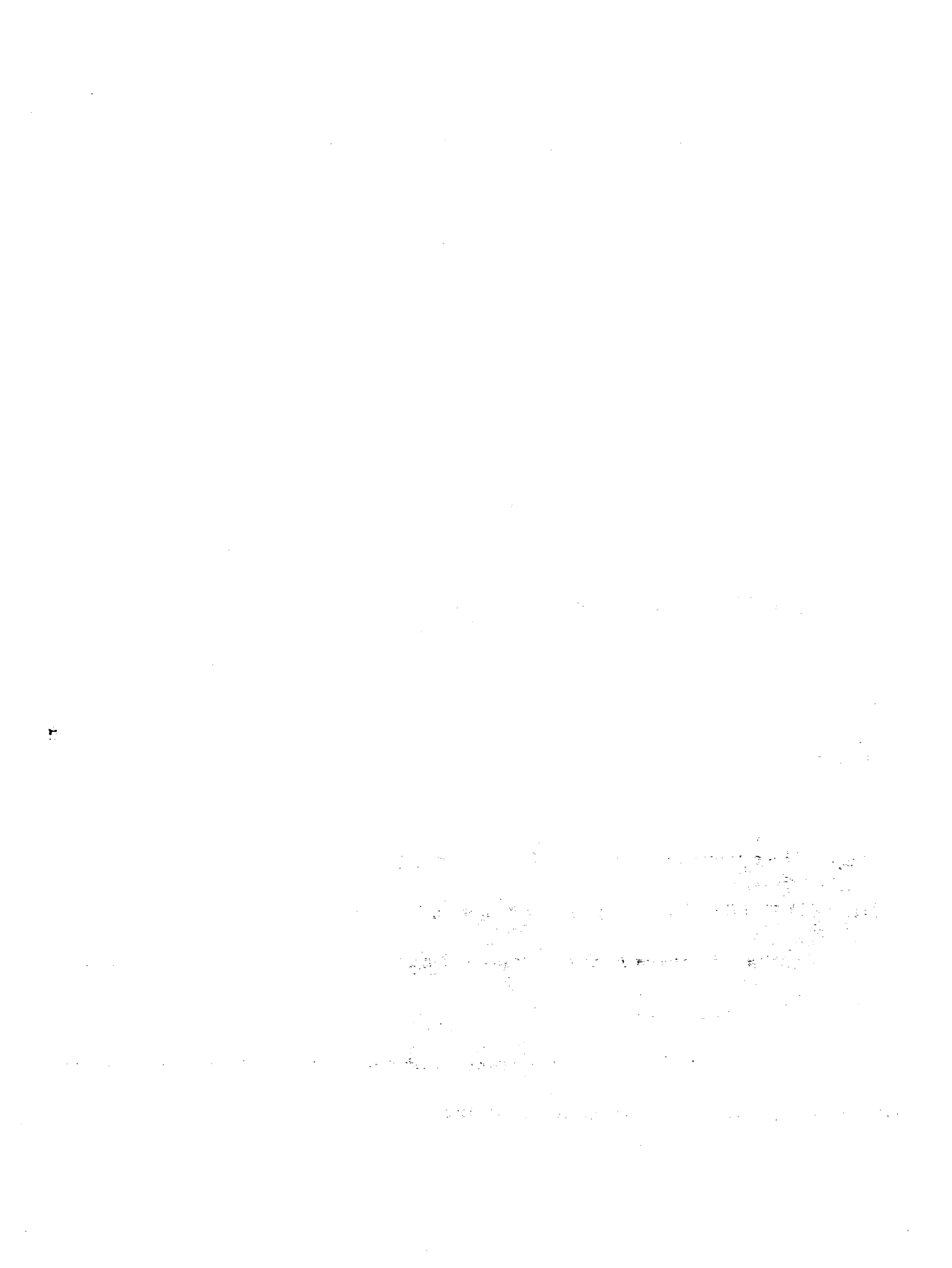
Acknowledgement

I Thank A.E.Rodriguez for valuable discussions.

References

- [1] D.Beysens, A.Steyer, P.Guenoun, D.Fritter and C.M.Knobler;Phase Transitions ,31,219-246 (1991)
- [2] W.G.Courtney; J.Phys.Chem.,72(2),433-440,(1968)
- [3] P.D.Fletcher and D.I.Horsup; J.Chem.Soc.Faraday Trans.,88(6),855-864, (1992)
- [4] J.Bibette,D.Roux and B.Pouligny, J.Phys. II France 2, 401-424, (1992)
- [5] C.J.Wörner, S.Romero and P.M.Hazzledine ; J.Mat.Res.6, 1773-1778, (1991)
- [6] A.A.Chernov ; Modern Crystallography III, 36 Springer Series in Solid-State Sciences ,Spriger-Verlag ,Berlin New York 1984
- [7] F.F. Abraham ,” Homogeneous Nucleation Theory ” , Advance in Theoretical Chemistry , Edited by H.Eyring and D.Anderson , Academic Press ,New York and London (1974)
- [8] D.Beysens and C.M.Knobler ; Phys.Rev.Lett.,57(12), 1343(1986)
- [9] D.Fritter, D.Roux, D.Beysens, and C.M.Knobler, J.Stat.Phys.52,1447(1988)
- [10] C.M.Knobler and D.Beysens,Europhys Lett.6,707(1988)
- [11] JM di Meglio and P.Gandeboeuf, J.Chim.Phys.89,1371(1992)
- [12] T.M.Rogers ,K.R.Elder and R.C.Desai ; Phys.Rev. A 38(10),5303 (1988)
- [13] M.E.Widder and U.M.Titulaer ;J.Stat.Phys., 67(1-2)92 ,337,(1992)
- [14] F.Family and P.Meakin; Phy.Rev.Lett.,61(4),428(1988)
- [15] P.Meakin and F.Family ; J.Phys.A:Math.Gen.22,L225-L230.(1989)
- [16] D.Greenspan; J.Phys.D:Appl.Phys.22,1415-1417 (1989)

- [17] V.A.Kuz , J.Colloid and Interf. Sci.132, 269,(1989)
- [18] S.R.De Groot and P.Mazur , " Non-Equilibrium Thermodynamics" pp11-17, North Holland ,Amsterdam & London (1969).
- [19] J.S.Rowlinson and B.Widom ; Molecular Theory of Capillarity , Clarendon Press-Oxford (1982)
- [20] E.Chifu, I.Stan,Z.Finta, and E.Gavrila; J.Colloid and Interf.Sci.93,140-150,(1983)



ANALISIS TERMICO Y SOLUCION NUMERICA AL PROBLEMA DE TRANSFERENCIA DE CALOR EN DOS FASES

Angélica Boucíguez y Luis Saravia

1 Introducción

La acumulación y posterior transferencia de calor es un problema interesante en el acondicionamiento pasivo de locales. Esto puede realizarse utilizando materiales tradicionales (tales como ladrillo, adobe, piedra, agua, etc.) en los que solo está presente una fase y por lo tanto conduce sólo por calor sensible. Otros materiales que presentan cambio de fase en el rango de 15 a 60 C han sido estudiados con este propósito pues ellos permiten también la transferencia por calor latente, mientras dure el cambio de fase. Dentro de estas sustancias se ha estudiado el estearato de metilo, cuyo punto de fusión se encuentra alrededor de los 30 C (1).

En este trabajo se señalan las experiencias realizadas para conocer el comportamiento de la sustancia y se presenta una simulación numérica del mismo, a los efectos de poder tener un modelo fenomenológico que permita predecir el comportamiento de dicha sustancia u otras similares, para las mismas geometrías o condiciones térmicas. Por otra parte, apoyándose en los datos experimentales, se han realizado cálculos que permiten conocer los parámetros que gobiernan la sustancia, tales como conductividad del sólido, coeficiente convectivo del líquido y velocidad de avance del frente de fusión.

2 El material: Estearato de Metilo

El estearato de metilo es una sustancia de origen orgánico que presenta el cambio de fase sólido - líquido entre los 29 y los 34 C (de acuerdo a su pureza), con un calor latente de 120 a 150 KJ/Kg y un calor específico de 1600 $J/Kg C$, lo que permite realizar una transferencia de calor importante tanto en forma sensible como latente para el acondicionamiento pasivo de viviendas.

Además el cambio de fase es reversible y no presenta problemas de subenfriamiento, a la vez que la sustancia no degrada tras sucesivos ciclajes térmicos, tal como se ha comprobado con estudios de infrarrojo y análisis térmico diferencial (2), lo que la hace particularmente interesante sobre otras sustancias utilizadas con el mismo fin que sí presentan estos inconvenientes. (3)

Las diferencia de densidad entre las fases sólida y líquida (830 y 755 Kg/m^3 respectivamente), señalan la necesidad de prever los problemas de dilatación que pueden producirse en los recipientes que contienen a la sustancia al producirse la solidificación, por lo que es aconsejable el llenado de los mismos con sustancia líquida hasta un 80 % de su capacidad.

3 Dispositivo experimental

A los efectos de analizar la sustancia se la ha almacenado en tanques de 0,40 * 0,75 * 0,07 m^3 que contienen unos 17 Kg de estearato. Partiendo de sustancia sólida (15 C) se la sometió a calentamiento constante ($\simeq 90 W/m^2$) por una de sus caras, aislando convenientemente las restantes, hasta que la misma llegó completamente al estado líquido ($\simeq 58 C$), lo que demandó unos 200 *min.* Luego se quitó la aislación y se cortó el suministro de calor produciéndose el enfriamiento de la sustancia hasta llegar al estado sólido, lo que demoró unas 3 *hs.* hasta el comienzo de la fusión y unas 18 *hs.* más hasta estar totalmente sólida a 25 C. El sensor que mide la temperatura se encuentra en el punto medio de la sustancia, a unos 3,5 *cm* de la pared que recibe el calor. La sustancia aumenta su temperatura mientras se le suministra calor, cortado éste, disminuye la disminuye considerablemente hasta que empieza la solidificación, estando por tanto a la temperatura de cambio de fase, a continuación cuando se ha solidificado totalmente vuelve a disminuir la temperatura con mayor rapidez, tal como se muestra en la figura 1.

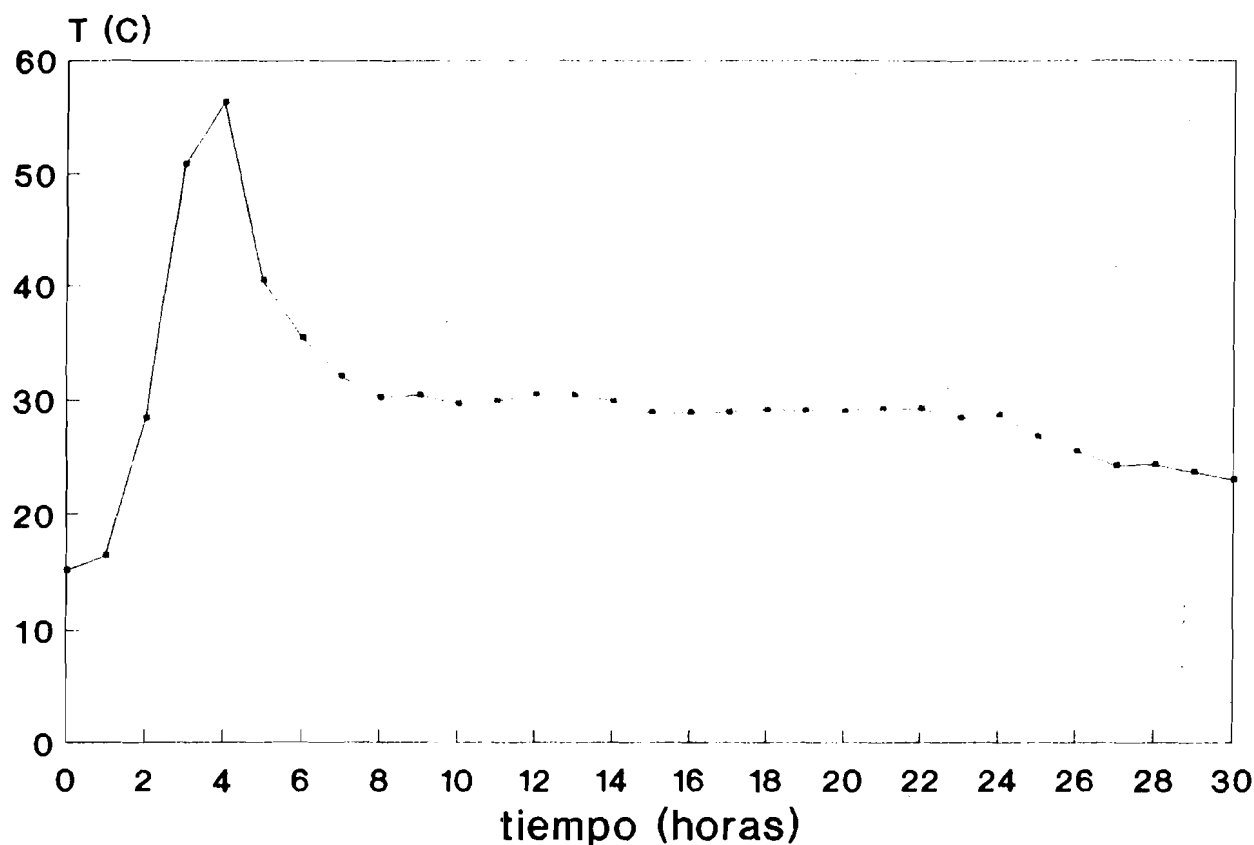


Figura 1: Comportamiento del estearato de metilo

4 Simulación numérica

Luego del estudio experimental de la sustancia se ha realizado un modelo computacional que permitió estimar no solo parámetros tales como conductividad térmica, coeficientes convectivos y velocidad con que avanza el frente de fusión, sino desarrollar un modelo que pueda ser aplicado a otras sustancias a fin de predecir su comportamiento y decidir sobre su posible utilización.

4.1 Características del problema

Se trata de un problema unidimensional a dos fases (sólida y líquida), se ha modelizado la situación en que el estado inicial es sólido y el final es líquido.

El intercambio de calor en el estado sólido es conductivo, mientras que en el estado líquido es fundamentalmente convectivo, por lo que se utiliza un modelo fenomenológico en el que el comportamiento del líquido se representa con un coeficiente convectivo h_b en la pared que recibe calor y otro h_f en la interfase. Las ecuaciones que gobiernan el proceso son las típicas de transferencia de calor, así pueden distinguirse claramente tres casos:

1. Toda la sustancia se encuentra en estado sólido, por lo que la ecuación que rige su comportamiento es:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

donde, x es un eje normal a la muestra y $a = k/\rho Cp$ es la difusividad térmica de la sustancia y se expresa en m^2/seg , con las condiciones iniciales y de borde apropiadas. En este caso $T(x, 0) = T_0$ y $T(0, t) = T_b$ y $\frac{\partial T}{\partial t}|_{(\epsilon, t)} = 0$, siendo ϵ el espesor de la muestra.

2. Ambas fases están presentes, por lo que es necesario considerar tres zonas a saber:

- sólido ($T < T_f$)
- líquido ($T > T_f$)
- cambio de fase ($T = T_f$)

Si $T < T_f$ se aplica la ecuación que corresponde al estado sólido y para $T > T_f$ las propias del estado líquido (que se explicitan en el próximo ítem). El problema fundamental de este caso es la zona de interfase, esto ocurre cuando $x = z(t)$, en donde vale que:

$$T_s(z(t), t) = T_l(z(t), t) = T_f$$

y

$$\frac{\partial T_s}{\partial x}|_{(z(t), t)} - h_f \Delta T_l(z(t), t) = \rho L v$$

donde, los subíndices s y l se refieren a sólido y líquido, respectivamente, $z(t)$ señala el lugar donde se produce el cambio de fase, a lo largo de la experiencia varía desde 0 a ϵ (siendo ϵ , el espesor de la muestra) y $v = \frac{dz}{dt}$ es la velocidad con que avanza el frente de fusión.

3. Se supone que el líquido está a temperatura constante y que presenta dos saltos de temperatura ΔT , uno en la interfase y otro en el borde. En el caso en que se encuentra completamente líquida solo se aporta calor desde el exterior y por lo tanto vale la ecuación:

$$\dot{q} = h_b \Delta T$$

4.2 Planteo del problema

Para llevar a cabo la simulación numérica se han discretizado convenientemente las ecuaciones, de modo de trazar una grilla como se muestra en la figura 2

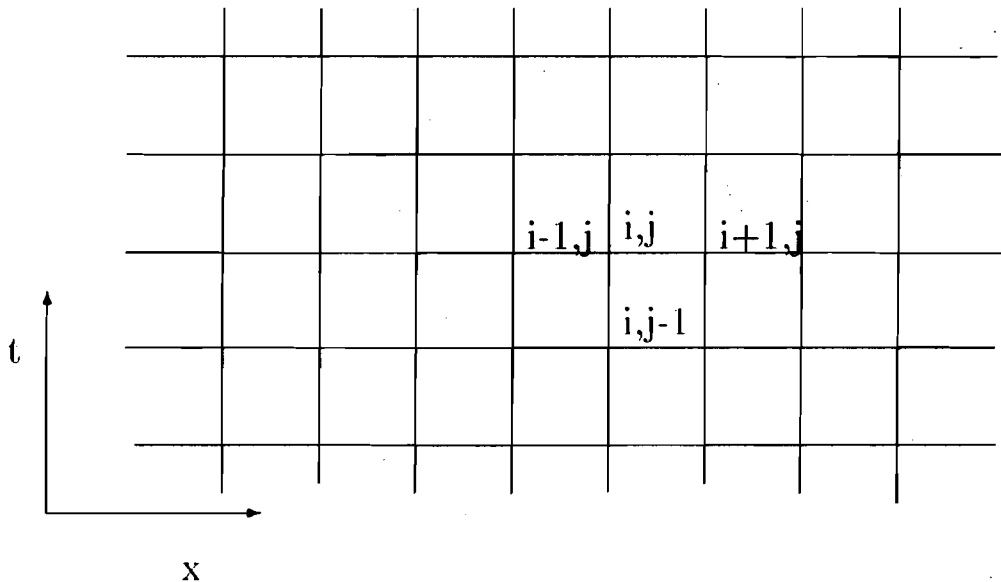


Figura 2: Grilla que muestra los puntos tomados para el cálculo

Se parte de sustancia sólida a temperatura $T_0 < T_f$, en el caso bajo estudio $T_0 = 15\text{C}$, a los efectos de simplificar los cálculos, se consideró que la fusión ocurre a los 29C y que la temperatura del líquido es la misma para cada instante de tiempo, lo que físicamente significa que al producirse la fusión la sustancia uniformiza su temperatura, adquiriendo la del líquido ya existente. El diagrama de flujo para el cálculo se muestra en la figura 3

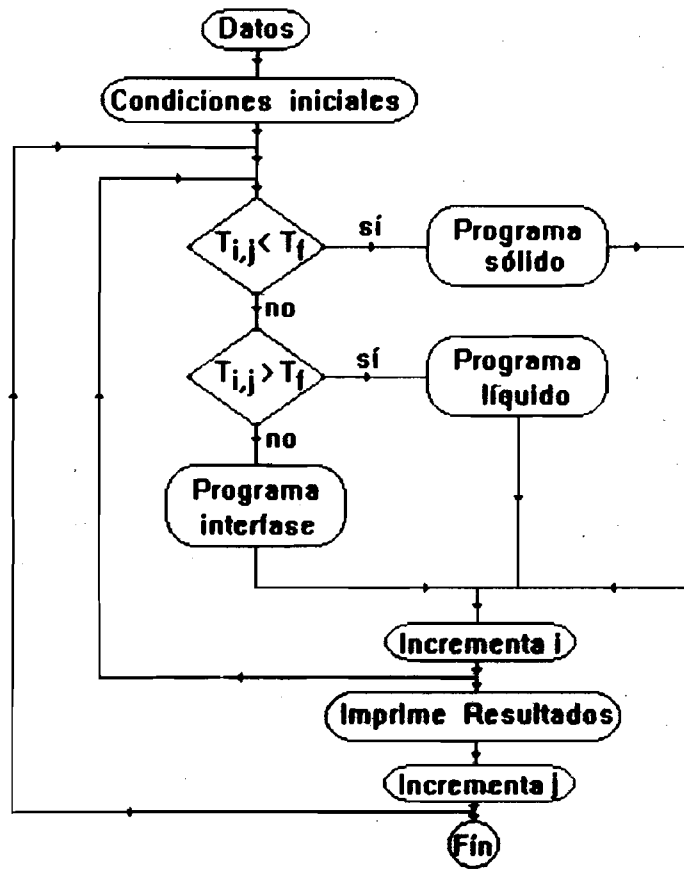


Figura 3: Diagrama de flujo del modelo de cálculo

- Programa sólido: Las ecuaciones que gobiernan este proceso son:

$$(T_{i,j} - T_{i,j-1}) = \frac{a \delta t}{2(\delta x)^2} (T_{i+1,j} + T_{i-1,j} - 2T_{i,j})$$

donde el subíndice i indica variación espacial (x) y el j indica variación temporal (t), sujeto a la condición inicial

$$T(x, 0) = T_0$$

y las condiciones de borde

$$T(0, t) = T_b(t) \text{ en } x = 0$$

$$T(i + 1, j) = T(i - 1, j) \text{ en } x = e$$

- Programa líquido: Cuando toda la sustancia está líquida, se considera que la temperatura de ésta es la misma en todo el volumen, entonces si T_b es la temperatura del borde, vale la ecuación

$$\rho_l \delta x C_p (T_{i,j} - T_{i,j-1}) = h_b \delta t (T_b - T_{i,j})$$

donde el subíndice l indica como siempre líquido y queda claro que por el hecho de haber considerado que el líquido está a la misma temperatura en toda su masa el subíndice i no señala variación en x , esto es hay una sola ecuación para cada j y no i ecuaciones.

- Programa interfase: Cuando coexisten ambas fases es necesario plantear una ecuación para cada una de ellas y otra para la interfase. Sea $z(t)$ la posición de la línea imaginaria que separa el líquido del sólido.

Entonces, por la parte líquida tenemos que

$$\rho_l \delta x C_p (T_{i,j} - T_{i,j-1}) = [h_b (T_b - T_{i,j}) - h_f (T_{i,j} - T_f)] \delta t$$

con las aclaraciones hechas en el ítem anterior para el subíndice i .

En la parte sólida vale la ecuación

$$(T_{i,j} - T_{i,j-1}) = \frac{a \delta t}{2(\delta x)^2} (T_{i+1,j} + T_{i-1,j} - 2T_{i,j})$$

donde $T_{i+1,j}$ es necesariamente T_f puesto que en la interfase es

$$T_l(z(t), t) = T_s(z(t), t) = T_f$$

También es necesario calcular la velocidad de avance del frente de fusión, para lo cual hay que tener presente que en $x = z(t)$, vale que

$$k \frac{T_s - T_f}{\delta x} - h_f (T_l - T_f) = \rho L v$$

donde T_s es la temperatura del sólido en un punto situado a una distancia δx de la interfase y T_l es la temperatura a la que se encuentra el líquido.

Con estas ecuaciones, considerando datos los coeficientes conductivo, convectivos, los calores latente y sensible, se simula el comportamiento de la sustancia, evaluándose las temperaturas y estimándose la velocidad de avance del frente de fusión.

La figura 4 muestra los resultados experimentales en comparación con los obtenidos de la simulación. En ella puede verse la bondad del ajuste.

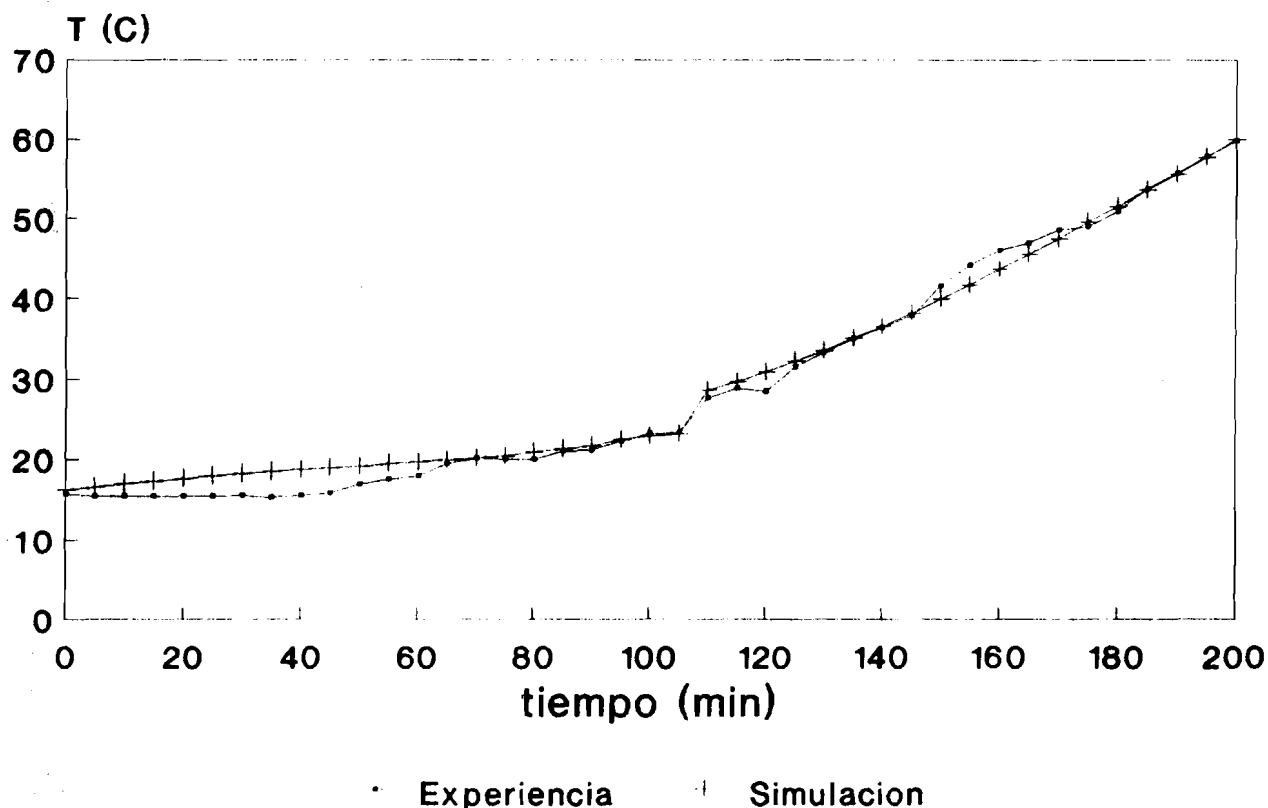


Figura 4: Comparación de los valores experimentales con los calculados

5 Discusión

De todo lo expuesto puede verse que el modelo de cálculo presenta un buen ajuste con los resultados experimentales, por lo que es factible su utilización en problemas similares. El cálculo de los parámetros físicos a través de dicho modelo resultó de utilidad para tener un conocimiento más completo del

comportamiento de la sustancia.

El hecho de que el estearato de metilo presente un cambio de fase reversible a temperatura ambiente lo hace particularmente útil en el acondicionamiento solar pasivo de locales, por lo que su estudio tiene especial interés desde el punto de vista térmico. Para ello se han construido paneles rebatibles donde se montan los recipientes que contienen la sustancia aislados en su parte posterior, los que colocados detrás de una doble vidriera, están expuestos a la radiación solar durante el día; al caer el sol se giran de modo que entreguen el calor acumulado a la habitación, tal como se muestra en la figura 5. Sin embargo, es importante señalar también que su precio oscila mucho en el mercado (desde 0,4 a 2,5 u\$s), por lo que la estimación de los costos necesarios para su utilización se tornan dificultosos.

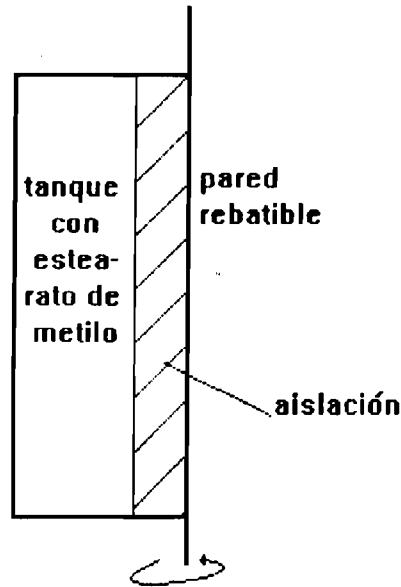


Figura 5: Esquema mostrando los paneles y los recipientes.

6 Referencias

1. A. Boucíguez y L. Saravia. *El Uso del Estearato de Metilo en Colectores Acumuladores para Calentamiento Pasivo de Viviendas*. Actas del V

Congreso Ibérico y IV Congreso Iberoamericano de Energías Renovables, Madrid, España, 1990.

2. A. Boucíguez y L. Saravia. *Estudio de los Parámetros Físicos del Estearato de Mctilo*. Presentado a la XVI Reunión de ASADES y 7^o. Congreso de la Asociación Latinoamericana de Energía Solar, (realización conjunta). La Plata, 1993
3. K. Hayakawa, H. Toada, M. Tazawa and H. Yumakita, *Thermal Oxidative Aging of Organic Latent heat Thermal Storage Materials*. Advances in Solar Energy Technology, Vol. 2. Proceeding of The Biennial Congress of the International Solar Energy Society. Hamburg, Germany, 1987. Edited by W. Bloss and F. Pfiterer. Pergamon Press.

Dirección de los autores

INENCO (Instituto UNSa. - CONICET)

Universidad Nacional de Salta.

Buenos Aires 177

4400 - Salta - Argentina

EL COMPORTAMIENTO ASINTÓTICO PARA UN PROBLEMA DE STEFAN A UNA FASE CON UNA CONDICIÓN DE CONTORNO CONVECTIVO

DOMINGO A. TARZIA

CRISTINA V. TURNER

I. Introducción

En este trabajo se estudia el comportamiento asintótico para $t \rightarrow \infty$ del siguiente problema de frontera libre parabólico (Problema de Stefan a una fase con una condición de contorno convectiva sobre la frontera fija $x = 0$) :

Problema P:

- (1) $z_{xx} = z_t$, en D_T ;
- (2) $s(0) = 1$;
- (3) $z(s(t), t) = 0$, $0 < t < T$;
- (4) $z_x(s(t), t) = -\dot{s}(t)$, $0 < t < T$;
- (5) $z(x, 0) = \varphi(x)$, $0 < x < 1$;
- (6) $z_x(0, t) = \beta[z(0, t) - G(t)]$, $0 < t < T$.

donde

$$D_T = \{(x, t) | 0 < x < s(t), 0 < t < T\},$$

$$\beta > 0, \quad \varphi(x) \geq 0, \quad 0 < x < 1 \quad \text{y} \quad G(t) \geq 0, \quad t > 0$$

y las condiciones de compatibilidad

$$\varphi'(0) = \beta[\varphi(0) - G(0)] \quad \text{y} \quad \varphi(1) = 0.$$

Se analizará el comportamiento asintótico de la frontera libre $s(t)$ en el Problema P. Otros análisis sobre comportamiento asintótico para problemas de Stefan se pueden ver en [1] y [2]. La existencia y unicidad para la solución del Problema P se puede ver en [3]. Aquí las condiciones sobre los datos serán tales que garantizan la existencia y unicidad de solución para T arbitrario en el Problema P. En [6] y [7] se puede ver el comportamiento asintótico de la solución de la inecuación variacional para el problema a dos fases de Stefan en n dimensiones, con $G(t) = \text{cte.} > 0$. En [5] se analiza la dependencia de la solución respecto de β y el comportamiento asintótico de la frontera libre para $G(t) = T_L > 0$. En ambos trabajos el comportamiento asintótico es independiente de β . En este trabajo analizamos el caso en que $G(t)$ no es constante para el Problema P.

II. Resultados preliminares.

A continuación resumiremos los resultados obtenidos en [9]

Proposición 1. Si (T, s, z) es solución de P, luego

(i) $z(x, t) \geq 0$ en D_T .

(ii) $\dot{s}(t) > 0, t > 0$.

(iii) $\dot{G}(t) \geq 0, \varphi(x) \leq G(0) = \min_{t>0} G(t)$, luego $z(x, t) \leq G(t)$ en D_T .

(iv) $\varphi' \leq 0, \dot{G}(t) \geq 0$ luego $z_x \leq 0$ en D_T .

(v) $\dot{G} \geq 0, \varphi'' > 0$ luego $z_t(x, t) \geq 0$ en D_t .

(vi) las siguientes representaciones integrales son satisfechas:

$$s(t) = 1 + \int_0^1 \varphi(x) dx - \int_0^t z_x(0, \tau) d\tau - \int_0^{s(t)} z(x, t) dx \quad (7)$$

$$\frac{s^2(t)}{2} = \frac{1}{2} + \int_0^1 x\varphi(x) dx + \int_0^t z(0, \tau) d\tau - \int_0^{s(t)} xz(x, t) dx \quad (8)$$

$$s(t) \left[1 + \frac{\beta}{2}s(t) \right] = Q(t) - \int_0^{s(t)} (1 + \beta x)z(x, t) dx \quad (9)$$

$$\frac{\beta s^4(t)}{24} + \frac{s^3(t)}{6} = \frac{\beta}{24} + \frac{1}{6} + \int_0^1 \left(\frac{\beta x^3}{6} + \frac{x^2}{2} \right) \varphi(x) dx - \int_0^{s(t)} \left(\frac{\beta x^3}{6} + \frac{x^2}{2} \right) z(x, t) dx + \iint_{D_t} z(x, t) (\beta x + 1) dx d\tau \quad (10)$$

donde

$$Q(t) = 1 + \frac{\beta}{2} + \int_0^1 (1 + \beta x) \varphi(x) dx + \int_0^t \beta G(\tau) d\tau. \quad (11)$$

Demostración. Para (i)–(v) usamos el principio de máximo[4].

(vi) sale usando la identidad de Green. \square

Observación 1 la relación (9) entre la frontera libre, la temperatura y la expresión $Q(t)$ definida en (11) ha sido usada en [8].

Proposición 2. *La solución del Problema P depende monótonamente de G. En particular si $(z_1(x, t), s_1(t))$ y $(z_2(x, t), s_2(t))$ son soluciones del Problema P para G_1 y G_2 respectivamente y $G_1 < G_2$, entonces $s_1(t) < s_2(t)$ para $t > 0$ y $z_1(x, t) < z_2(x, t)$ en donde ambas estén definidas.*

Demostración. La demostración consiste en suponer que existe un primer t_0 en donde $s_1(t_0) = s_2(t_0)$ y $\dot{s}_1(t_0) > \dot{s}_2(t_0)$, con $s_1(t) < s_2(t)$ para $0 < t < t_0$ y $z_1(x, t) < z_2(x, t)$ para $0 < x < s_1(t)$, $0 < t < t_0$.

Ahora consideremos el problema que satisface $v(x, t) = z_1(x, t) - z_2(x, t)$

(i) $v_{xx} = v_t$ $D = \{(x, t) | 0 < x < s_1(t), t < t_0\}$;

(ii) $v(x, 0) = 0$, $0 < x < 1$;

(iii) $v(s_1(t), t) = -z_2(s_1(t), t) < 0$;

(iv) $v_x(0, t) = \beta [v(0, t) - (G_1(t) - G_2(t))]$.

Supongamos ahora que existe $t_1 < t_0$ tal que $v(0, t_1) = 0$. Luego $(0, t_1)$ es un punto de máximo para $v(x, t)$ en D , con lo cual $v_x(0, t_1) < 0$. Si reemplazamos la última desigualdad en (iv)

$$v(0, t_1) < G_1(t_1) - G_2(t_1) < 0.$$

Lo cual es una contradicción. Luego $v(0, t) < 0$, $\forall t > 0$.

Usando el principio de máximo para v concluimos $v(x, t) < 0$ en D .

Pero $v(s_1(t_0), t_0) = 0$, con lo cual $(s_1(t_0), t_0)$ es un máximo para v en D , y por lo tanto

$$v_x(s_1(t_0), t_0) > 0.$$

Calculemos ahora

$$v_x(s_1(t_0), t_0) = z_{1x}(s_1(t_0), t_0) - z_{2x}(s_1(t_0), t_0) = \dot{s}_2(t_0) - \dot{s}_1(t_0) < 0,$$

lo cual es una contradicción. Con lo cual $s_1(t) < s_2(t)$ y $z_1 < z_2$ en D . \square

Observación 2. Para cada β fijo la solución (s, z) de P se llamará (s_β, z_β) de P_β y P_∞ al problema en donde la condición (6) fue reemplazada por $z_\infty(0, t) = G(t)$, $0 < t < T$, y su solución (s_∞, z_∞) .

Teorema 3. Si (T, s_β, z_β) es una solución de P_β con las siguientes hipótesis sobre φ y G

(H1) $\varphi'(x) \leq 0$ para $0 \leq x \leq 1$.

(H2) $\dot{G}(t) \geq 0$, para $t > 0$.

(H3) $\max_{[0,1]} \varphi(x) \leq G(0)$, luego

(a) $z_\beta(x, t) \leq z_\infty(x, t)$ en D_T , $s_\beta(t) \leq s_\infty(t) \forall \beta > 0, t > 0$.

(b) Dependencia monótona:

$\beta_1 \leq \beta_2$, luego $z_{\beta_1}(x, t) \leq z_{\beta_2}(x, t)$ en D_T y $s_{\beta_1}(t) \leq s_{\beta_2}(t)$.

Demostración. La demostración se puede ver en [9].

III. Comportamiento asintótico.

Aquí presentamos resultados similares a los de [1], [2].

Teorema 4.

(a) Si $\int_0^\infty G(\tau) d\tau < \infty$, luego $\lim_{t \rightarrow \infty} s(t) = s_\infty$ donde s_∞ es la única solución de la ecuación

$$x \left(1 + \frac{\beta}{2} x \right) = A(\beta, \varphi, G), x > 1 \tag{12}$$

donde

$$A(\beta, \varphi, G) = 1 + \frac{\beta}{2} + \int_0^1 (1 + \beta\xi)\varphi(\xi)d\xi + \beta \int_0^\infty G(\tau) d\tau.$$

(b) Sea (s, z) una solución del Problema P con $\int_0^\infty G(\tau) d\tau = \infty$. Para cada $t_0 \geq 0$, sea (σ, v) la solución del siguiente problema

- (i) $v_{xx} = v_t, 0 < x < \sigma(t), t \geq t_0$;
- (ii) $v_x(0, t) = \beta[v(0, t) - G(t)], t \geq t_0$;
- (iii) $v(\sigma(t), t) = 0, t \geq t_0$;
- (iv) $\sigma(t_0) = 0$;
- (v) $\dot{\sigma}(t) = -v_x(\sigma(t), t), t \geq t_0$.

Luego

$$1 \leq \left(\frac{s(t)}{\sigma(t)}\right)^2 \leq 1 + \frac{C(t_0)}{\sigma^2(t)}, t > t_0, \quad (13)$$

donde

$$C(t_0) = s^2(t_0) + \frac{2s(t_0)}{\beta} + \frac{2 \int_0^{s(t_0)} (1 + \beta x)z(x, t_0) dx}{\beta}. \quad (14)$$

y

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{s(t)}{\sigma(t)} = 1.$$

Demostración. (a) Usando (9), la acotación de $z(x, t) > 0$ en D_T y la hipótesis $\int_0^\infty G(\tau) d\tau < \infty$ resulta:

$$s(t) \left(1 + \frac{\beta}{2}s(t)\right) \leq A(\beta, \varphi, G).$$

Luego se obtiene:

$$s(t) \leq s_\infty \quad \text{para } t \geq 0 \quad (16)$$

donde $s_\infty = \frac{\sqrt{1+2\beta A}-1}{\beta}$ es la única solución de la ecuación (12).

(b) ver [9].

Teorema 5. Si (T, s_β, z_β) es la solución del Problema P con la hipótesis (H3), $\int_0^t G(\tau) d\tau = \infty$, $\int_{t_0}^t G(\tau) d\tau < \infty$, para todo t y t_0 , y además se cumple $\lim_{t_0 \rightarrow \infty} \max_{[t_0, \infty)} G(\tau) = \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \|G\|_{[t_0, \infty)} = 0$, entonces se obtiene

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{s_\beta(t)}{\sqrt{2 \int_0^t G(\tau) d\tau}} = 1$$

Demostración. Usando la función auxiliar $v(x, t)$ del Teorema 4 (b), y la representación integral (9) para (σ_β, v_β) , se obtiene

$$\frac{\beta \int_{t_0}^t G(\tau) d\tau}{1 + \|G\|_{[t_0, t]}} \leq \sigma_\beta(t) \left(1 + \frac{\beta}{2} \sigma_\beta(t)\right). \quad (19)$$

Ahora usamos (9) para (s_β, z_β) y el hecho que $\sigma_\beta(t) < s_\beta(t)$ con lo cual:

$$\frac{\beta \int_{t_0}^t G(\tau) d\tau}{(1 + \|G\|_{[t_0, t]}) \beta \int_0^t G(\tau) d\tau} \leq \frac{s_\beta(t) \left(1 + \frac{\beta}{2} s_\beta(t)\right)}{\beta \int_0^t G(\tau) d\tau} \leq 1 + \frac{D(\beta, \varphi)}{\int_0^t G(\tau) d\tau}. \quad (20)$$

Luego tomamos límite $t \rightarrow \infty$ y después $t_0 \rightarrow \infty$ y obtenemos

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{s_\beta(t)}{\sqrt{2 \int_0^t G(\tau) d\tau}} = 1 \text{ for all } \beta \quad \square$$

Lema 6. Si (T, s_β, z_β) es una solución del Problema P, y los datos satisfacen las hipótesis (H1), (H2) y (H3) entonces

$$\int_0^t [G(\tau) - z_\beta(0, \tau)] d\tau \leq \frac{s_\infty(t)}{\beta} (1 + \|G\|_t), \quad \forall \beta > 0.$$

Demostración. Sale de usar (9) y aplicar el Teorema 3.

Teorema 7. Si (T, s_β, z_β) es una solución del Problema P y los datos satisfacen (H1), (H2) y (H3), luego (s_β, z_β) y (s_∞, z_∞) satisfacen las siguientes inecuaciones

$$0 \leq \frac{s_\infty^2(t) - s_\beta^2(t)}{2} + \int_0^{s_\beta(t)} x(z_\infty(x, t) - z_\beta(x, t)) dx$$

$$\leq \int_0^t (G(\tau) - z_\beta(0, \tau)) d\tau \leq \frac{s_\infty(t)}{\beta} (1 + \|G\|_t), \forall \beta > 0.$$

Demostración. Se obtienen las representaciones integrales para ambos pares usando (8), luego se sustraen y se aplica el Lema 6.

Corolario 8. (Convergencia $\beta \rightarrow \infty$) Si (s_β, z_β) es una solución del Problema P y (s_∞, z_∞) lo es de P_∞ , bajo las hipótesis (H1), (H2) y (H3), luego:

- (i) $\lim_{\beta \rightarrow \infty} s_\beta(t) = s_\infty(t)$ para cada $t > 0$
- (ii) $\lim_{\beta \rightarrow \infty} z_\beta(x, t) = z_\infty(x, t)$ para cada $0 \leq x < s_\infty(t)$, para cada $t > 0$.

Proof. Usando el Teorema y el hecho que $s_\beta(t) \leq s_\infty(t)$ y $z_\beta \leq z_\infty$ para todo β , resulta

$$0 \leq \frac{s_\infty^2(t) - s_\beta^2(t)}{2} \leq \frac{s_\infty(t)}{\beta} (1 + \|G\|_t)$$

para todo β , luego

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} s_\beta(t) = s_\infty(t)$$

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} z_\beta(t) = z_\infty(t)$$

para cada $0 \leq x < s_\infty(t)$, para cada $t > 0$. \square

Corolario 9. Si (s_β, z_β) es solución del Problema P, luego

$$(i) s_\beta(t) \leq \sqrt{\frac{2}{\beta} Q(t)}, t > 0$$

$$(ii) s_\beta(t) \geq \frac{-1 + \sqrt{1 + \frac{2\beta Q(t)}{1+G(t)}}}{\beta}, t > 0.$$

Demostración. Sale de (9) y Proposición 1. \square

REFERENCIAS

1. J. R. CANNON, C. D. HILL, *Remarks on a Stefan problem*, J. Math. Mech. 17 (1967), 433-441.
2. J.R.CANNON, M.P. PRIMICERIO, *Remarks on the one-phase Stefan problem for the heat equation with the flux prescribed on the fixed boundary*, J. Math. Anal. Appl. 35 (1971), 361-373.
3. A. FASANO, M. PRIMICERIO, *General free-boundary problems for the heat equation*, J. Math. Anal Appl. I ;II: 58 (1977), 202-231 57 (1977), 694-723.
4. A. FRIEDMAN, *Partial Differential Equations of Parabolic Type*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, N J, 1964..
5. A.D. SOLOMON, V. ALEXIADES, D.G. WILSON., *The Stefan problem with a convective boundary condition*, Quart. of Appl. Math. 40 (1982), 203-217.
6. D.A. TARZIA., *Etude de l'inéquation variationnelle proposée par DUVAUT pour le problème de Stefan à deux phases II,*, Boll. Un. Mat. Italiana. 2 B (1983), 589-603.
7. D.A.TARZIA., *Sur le problème de Stefan à deux phases*, C.R. Acad. Sci. Paris. 288 A (1979), 941-944.
8. D.A. TARZIA, C.V. TURNER., *The one-phase supercooled Stefan problem with a convective boundary condition*, to appear in Quart. of Appl. Math..
9. D.A. TARZIA, C.V. TURNER., *The asymptotic behavior for the one-phase Stefan Problem with a convective boundary condition.*, Preprint 1995.

Domingo A. TARZIA
- Dpto. Matemática, FCE
Univ. Austral
Paraguay 1950
(2000) Rosario
- Promar (CONICET-UNR)
Inst. Mat. "B. Levi"
Av. Pellegrini 250
(2000) Rosario
ARGENTINA.
e-mail: tarzia@uauafce.edu.ar

Cristina V. TURNER
FaMAF, U.N.C
Ciudad Universitaria
Universidad Nacional Córdoba
(5000) Córdoba
ARGENTINA.
e-mail: turner@mate.uncor.edu

Serie : CUADERNOS del Inst. de Matemática "B. Levi"

Coordinador: Domingo Alberto TARZIA , Secretaria: María Cristina SANZIEL

NUMEROS APARECIDOS :

1. **G. STAMPACCHIA, "Introducción a las ecuaciones en derivadas parciales e inecuaciones variacionales".**
2. **C. PROCESI, "Teoría de Galois elemental".**
3. **U. MOSCO, "Transformada de Fourier y distribuciones".**
4. **P. BERNHARD, "Introducción a la teoría de Control Optimo".**
5. **P. FAURRE, "Teoría de Control. Filtrado estadístico e Introducción al Control Estocástico".**
6. **"Encuentro Latinoamericano sobre Métodos Teóricos y Numéricos de la Física-Matemática", E. Rofman (Ed.), Rosario, 2-7 de julio de 1973 :**
U. D'AMBROSIO, "Superficies generalizadas no cálculo das variacoes", p. 5-24.
L.A. MEDEIROS, "Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales", p. 25-58.
E. ROFMAN, "Desigualdades variacionales. Existencia y aproximación numérica de soluciones", p. 59-86.
7. **A. BENSOUSSAN, "Teoría moderna de Control Optimo".**
8. **C. BAIOCCHI, "Movimiento de un fluido en medios porosos. Enfoque variacional, cuasi-variacional y numérico".**
9. **R. GLOWINSKI, "Introducción a la aproximación de inecuaciones variacionales elípticas".**
10. **H. SAMARA, "Resolución numérica de ecuaciones diferenciales. Formulación variacional del método TAU".**
11. **"Seminario sobre el Problema de Stefan y sus Aplicaciones", D.A. Tarzia (Ed.), Rosario, 4-8 de julio de 1983, Volumen 1 :**
D.A.TARZIA, "Introducción al Seminario sobre el problema de Stefan y sus aplicaciones", p. 5-32.
D.A.TARZIA, "Problemas unidimensionales de conducción del calor con frontera móvil", p. 33-61.
J.E. BOUILLET, "Algunos resultados sobre ecuaciones de tipo parabólico", p. 63-74.
J.E. BOUILLET, "Soluciones autosemejantes con cambio de fase", p. 75-104.
L.T. VILLA, "El problema inverso de Stefan", p. 105-131.

L.T. VILLA, "Problemas optimales en la conducción del calor con cambio de fase", p. 133-142.

R.H. NOCHETTO, "Una introducción general a la resolución numérica del problema de Stefan unidimensional", p. 143-166.

G.G. GARGUICHEVICH-M.C. SANZIEL, "Una introducción general a la resolución aproximada del problema de Stefan unidimensional", p. 167-177.

12. "Seminario sobre el Problema de Stefan y sus Aplicaciones", D.A. Tarzia (Ed.), Rosario, 4-8 de julio de 1983, Volumen 2 :
 - D.A. TARZIA, "Soluciones exactas del problema de Stefan unidimensional", p. 5-36.
 - D.A. TARZIA, "Estudios teóricos en el problema de Stefan unidimensional a una fase", p. 37-85.
 - P.R. MARANGUNIC, "Algunos conceptos básicos del análisis funcional", p. 87-118.
 - H.R. BERTORELLO, "Sobre la solidificación de aleaciones binarias", p. 119-142.
 - L. CRIVELLI-S. IDELSOHN-C. BAIGORRIA, "Análisis de la fusión en barras de combustible nuclear originada por sobrecargas térmicas accidentales", p. 143-170.
 - E.E. ALANIS, "Problemas de cambio de fase en la acumulación de calor a partir de energía solar", p. 171-177.
 - M.B. STAMPELLA, "Sobre la determinación de coeficientes térmicos desconocidos de un material a través de un problema con cambio de fase", p. 179-193.
13. A. FASANO, "Las zonas pastosas en el problema de Stefan", en "II Seminario sobre el Problema de Stefan y sus Aplicaciones", D.A. Tarzia (Ed.), Rosario, 13-17 de octubre de 1986, Volumen 1.
14. "II Seminario sobre el Problema de Stefan y sus Aplicaciones", D.A. Tarzia (Ed.), Rosario, 13-17 de octubre de 1986, Volumen 2 :
 - H. BERTORELLO, "Termodinámica del cambio de fase con aplicación a transformaciones sólido-líquido", p. 9-27.
 - J.E. BOUILLET, "Comparación de soluciones de ecuaciones parabólicas", p. 29-44.
 - D.A. TARZIA, "Estudios teóricos básicos en el problema de Stefan unidimensional a dos fases", p. 45-75.
 - D.A. TARZIA, "El problema de Stefan multidimensional a una fase", p. 77-99.
 - L.T. VILLA, "La ecuación de la difusión y su aplicación a problemas de frontera libre", p. 101-116.
 - N. AGUILERA, "El método de Alt para el problema del dique poroso", p. 117-128.
 - G.G. GARGUICHEVICH, "Las inecuaciones variacionales elípticas", p. 129-138.
 - P.R. MARANGUNIC, "Distribuciones y espacios de Sobolev", p. 139-165.
 - E. ZARANTONELLO, "Teoría espectral cónica", p. 167-169.

15. P.L. GEORGE, "Introducción a la utilización del Software Científico MODULEF".
16. J.L. MENALDI, "Programación dinámica estocástica".
17. "III Seminario sobre Problemas de Frontera Libre y sus Aplicaciones", D.A. Tarzia (Ed.), Rosario, 11–15 de octubre de 1988, Volumen 1 :
J.E. BOUILLET, "Comportamiento asintótico en ecuaciones de conducción-difusión degeneradas", p. 7–13.
C. CORTAZAR – M. ELGUETA, "Sobre localización de soluciones de la ecuación de medios porosos", p. 15–27.
G.G. GARGUICHEVICH – D.A. TARZIA, "Sobre un problema de Stefan a dos fases con fuente de energía interna", p. 29–44.
M. KORTEN, "Soluciones autosemejantes de ecuaciones de difusión-conducción generalizadas", p. 45–53.
R. MASCHERONI, "Métodos simplificados para la predicción de tiempos de congelación y descongelación de alimentos", p. 55–71.
D.A. TARZIA, "Comportamiento asintótico exponencial en la ecuación de medios porosos con absorción", p. 73–86.
C.V. TURNER, "Difusión de un solvente en un polímero no homogéneo", p. 87–104.
K. TWARDOWSKA, "A free boundary value problem in solidification of binary alloys. Deterministic and stochastic approach", p. 105–119.
L.T. VILLA, "Problemas de frontera libre y móvil en procesos de ingeniería química", p. 121–132.
D.A. TARZIA, "El caso estacionario del problema de Stefan a dos fases y problemas relacionados", p. 133–151.
18. M. PRIMICERIO – R. GIANNI, "La filtración en medios porosos", en "III Seminario sobre Problemas de Frontera Libre y sus Aplicaciones", D.A. Tarzia (Ed.), Rosario, 11–15 de octubre de 1988, Volumen 2.
19. J.C. CESCO, "Economía matemática", en "Reunión Anual de la Unión Matemática Argentina", Rosario, 11–14 de octubre de 1989.
20. L. QUINTAS, "Teoría de juegos", en "Reunión Anual de la Unión Matemática Argentina", Rosario, 11–14 de octubre de 1989.
21. E. GENTILE, "Forma Normal de Jordan", en "Reunión Anual de la Unión Matemática Argentina", Rosario, 11–14 de octubre de 1989.
22. M. UGHI, "On the porous media equation with either source or absorption".
23. "IV Seminario sobre Problemas de Frontera Libre y sus Aplicaciones", D.A. Tarzia (Ed.), Rosario, 14–18 de diciembre de 1992, Volumen 1 :
J.C. REGINATO – D.A. TARZIA, "Free boundary models for root growth of

crops", p. 1–26.

E. PARDO, "Modelado térmico de soldaduras GMA", p. 27–33.

M.K. KORTEN, "Fronteras libres en soluciones de la ecuación $u_t = \Delta(u-1)_+$ ", p. 35–37.

M.C. SANZIEL – D.A. TARZIA, "Problemas con multifases", p. 39–51.

L.T. VILLA, "Modelos de Frontera Libre–Móvil en sistemas de difusión reacción química gas–sólido", p. 53–71.

L.R. BERRONE–G.G. GARGUICHEVICH, "Sobre un problema estacionario de Stefan con fuente de energía", p. 73–80.

J.I. ETCHEVERRY, "Análisis de Modelos de Ablación de Polímeros", p. 81–92.

V.A. KUZ, "Dynamic study of evaporation of droplets", p. 93–102.

D.F. DELMASTRO – A. CLAUSSE, "Oscilaciones de frontera de entalpía en flujos de dos fases", p. 103–119.

24. "IV Seminario sobre Problemas de Frontera Libre y sus Aplicaciones", D.A. Tarzia (Ed.), Rosario, 14–18 de diciembre de 1992, Volumen 2:
- L.R. BERRONE, "Rango temporal de validez de modelos que involucran a la ecuación del calor–difusión", p. 1–36.
- C.V. TURNER, "El problema de Stefan unidimensional para el líquido sobreenfriado", p. 37–49.
- R.H. MASCHERONI, "Transferencia de calor con cambio de fase en sistemas multidimensionales: uso de factores de forma en métodos aproximados", p. 51–66.
- M. STORTI, "Numerical modeling of ablation phenomena as two–phase Stefan problems", p. 67–88.
- C.B. LEDERMAN, "Un problema de frontera libre en elasticidad", p. 89–96.
- J.E. BOUILLET, "Fronteras libres en ecuaciones de conducción con coeficientes discontinuos", p. 97–102.
- D.A. TARZIA, "Numerical analysis for the heat flux in a mixed elliptic problem with solution of non–constant sign", p. 103–120.
25. J.C. REGINATO–D.A. TARZIA, "Toma de agua y crecimiento de raíces de cultivos", p. 1–13.
- R.H. MASCHERONI, "Dos problemas de frontera libre acoplados: solidificación con simultánea sublimación", p. 15–26.
- J.I. ETCHEVERRY, "On a numerical method for solving a boundary value problem for $u_t = \alpha(u)_{xx}$ ", p. 27–34.
- D.A. TARZIA – C.V. TURNER, "El problema de Stefan a una fase para el líquido sobreenfriado con una condición de contorno convectiva", p. 35–45.
- L.T. VILLA – O.D. QUIROGA, "Modelos de frontera libre en transformaciones fluido – sólido reactivo", p. 47–62.
- V.A. KUZ, "One – dimension model for dynamic condensation of a vapor", p. 63–73.
- A. BOUCIGUEZ – L. SARAVIA, "Análisis térmico y solución numérica al problema de transferencia de calor en dos fases", p. 75–84.
- D.A. TARZIA – C.V. TURNER, "El comportamiento asintótico para un problema de Stefan a una fase con una condición de contorno convectivo", p. 85–92.

**Impreso y armado en CERIDER
Ocampo y Esmeralda
2000 - Rosario
Agosto 1995**

Nota : Para intercambiar esta serie con publicaciones similares, dirigirse a:

**CUADERNOS del Instituto de Matemática "Beppo Levi",
Facultad de Ciencias Exactas , Ingeniería y Agr.,
Universidad Nacional de Rosario,
Avda. Pellegrini 250,
2000 Rosario, Argentina.**

Note : To exchange this serie with similar publications, please write to:

**CUADERNOS del Instituto de Matemática "Beppo Levi",
Facultad de Ciencias Exactas , Ingeniería y Agr.,
Universidad Nacional de Rosario,
Avda. Pellegrini 250,
2000 Rosario, Argentina.**