



Conferencias, seminarios y trabajos de Matemática

ISSN:1515-4904



VI Seminario sobre Problemas de Frontera Libre y sus Aplicaciones.

Segunda Parte





e Matemática, osario, rgentina

MAT Serie A: CONFERENCIAS, SEMINARIOS Y TRABAJOS DE MATEMATICA

DIRECTOR

D. A. TARZIA	Departamento de Matemática – CONICET, FCE-UA,
	Paraguay 1950, S2000FZF ROSARIO, ARGENTINA
	Domingo.Tarzia@fce.austral.edu.ar

COMITE EDITORIAL Y CIENTIFICO

L. A. CAFFARELLI	Department of Mathematics, Univ. of Texas at Austin, RLM 8100 Austin , TEXAS 78712, USA.
	<u>caffarel@math.utexas.edu</u>
R. DURAN	Depto. de Matemática, FCEyN, Univ. de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pab. 1, 1428 BUENOS AIRES, ARGENTINA.
A. FASANO	Dipartimento di Matematica "U. Dini", Univ. di Firenze, Viale Morgagni 67/A, 50134 FIRENZE, ITALIA. fasano@udini math unifi it
M. PRIMICERIO	Dipartimento di Matematica "U. Dini", Univ. di Firenze, Viale Morgagni 67/A, 50134 FIRENZE, ITALIA. primice@udini.math.unifi.it
M. C. TURNER	FAMAF, Univ. Nac. de Córdoba, Ciudad Universitaria, 5000 CORDOBA, ARGENTINA.
R. WEDER	Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas, Univ. Nac. Autónoma de México (UNAM) Apartado Postal 20-726, MEXICO, DF 010000.
N. WOLANSKI	weder@servidor.unam.mx Depto. de Matemática, FCEyN, Univ. de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pab. 1, 1428 BUENOS AIRES, ARGENTINA. wolanski@dm.uba.ar

SECRETARIA DE REDACCION

G. GARGUICHEVICH Depto. de Matemática, FCE-UA, Paraguay 1950, S2000FZF ROSARIO, ARGENTINA. Graciela.Garguichevich@fce.austral.edu.ar

MAT es una publicación del Departamento de Matemática de la Facultad de Ciencias Empresariales de la Universidad Austral (FCE-UA) cuyo objetivo es contribuir a la difusión de conocimientos y resultados matemáticos. Se compone de dos series:

• Serie A: CONFERENCIAS, SEMINARIOS Y TRABAJOS DE MATEMATICA.

• Serie B: CURSOS Y SEMINARIOS PARA EDUCACION MATEMATICA.

La Serie A contiene trabajos originales de investigación y/o recapitulación que presenten una exposición interesante y actualizada de algunos aspectos de la Matemática, además de cursos, conferencias, seminarios y congresos realizados en el Depto. de Matemática. El Director, los miembros del Comité Editorial y Científico y/o los árbitros que ellos designen serán los encargados de dictaminar sobre los merecimientos de los artículos que se publiquen.

La Serie B se compone de cursos especialmente diseñados para profesores de Matemática de cada uno de los niveles de educación: E.G.B., Polimodal, Terciaria y Universitaria.

Además, se publican bajo el título **MAT**- PREPUBLICACIONES DE MATEMATICA, versiones preliminares de trabajos inéditos de investigación de los integrantes del Departamento y colaboradores. La serie A y las Prepublicaciones podrán ser consultadas en: www.austral.edu.ar/MAT

ISSN: 1515-4904 Propiedad de ACES

MAT

SERIE A : CONFERENCIAS, SEMINARIOS Y TRABAJOS DE MATEMÁTICA

No. 4

VI SEMINARIO SOBRE PROBLEMAS DE FRONTERA LIBRE Y SUS APLICACIONES Segunda Parte

Domingo A. Tarzia (Ed.)

INDICE

• **Omar Gil**, "El problema de Hele-Shaw como un problema límite para la ecuación de los medios porosos", 1-10.

• Juan C. Reginato – Domingo A. Tarzia, "Estimations of nutrient uptakes by roots of crops through a moving boundary model", 11-16.

• Oscar D. Quiroga – Luis T. Villa – Fernando Suarez, "Problemas de frontera libre en procesos de transferencia de materia y energía con reacción química", 17-22.

• Edgardo A. Spiazzi – Rodolfo H. Mascheroni, "Modelo de deshidratación osmótica de alimentos vegetales", 23-32.

• Eduardo A. Santillan Marcus – Domingo A. Tarzia, "Exact solutions for phase change processes in humid porous half spaces", 33-38.

Rosario, Septiembre 2001

El VI Seminario sobre Problemas de Frontera Libre y sus Aplicaciones tuvo lugar en el Departamento de Matemática de la FCE de la Universidad Austral, en Rosario, del 16 al 18 de Diciembre de 1998. Fue realizado con el apoyo del Proyecto de Investigación Plurianual del CONICET "Problemas de Frontera Libre para la Ecuación del Calor-Difusión" y gracias a un subsidio otorgado por el CONICET.

Los problemas de frontera libre son aquellos problemas de contorno donde interviene además, una superficie incógnita (la "frontera libre") que separa dos o más regiones, 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.

El avance considerable que se ha obtenido en el desarrollo teórico de estos temas a nivel nacional y sus potenciales aplicaciones a la industria (electropintura, envenenamiento y regeneración de catalizadores; combustión de sólidos; solidificación de aleaciones binarias; soldadura de metales; colada contínua 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 suelos húmedos; derretimiento de glaciares; crecimiento de raíces de cultivo; precio en las opciones americanas; etc.) impulsaron su realización, prosiguiendo la línea de los Seminarios anteriores, con el objetivo de facilitar la interacción entre las personas y grupos de investigación que trabajan en dichos problemas y en temas conexos, y de despertar el interés y promover el acercamiento de jóvenes graduados.

COMITE ORGANIZADOR: Dr. L. A. Caffarelli, Austin - Texas (EEUU); Dr. E. A. García, Buenos Aires; Dr. D. A. Tarzia, Rosario (Coordinador); Ing. L. T. Villa, Salta; Dra. N. Wolanski, Buenos Aires.

SECRETARÍA LOCAL: Lic. A. C. Briozzo, Lic. G. G. Garguichevich, Ariel Lombardi, Lic. P. R. Marangunic, Lic. M. F. Natale, Lic. E. A. Santillan Marcus (Coordinador), Lic. M. C. Sanziel

Esta segunda parte contiene cinco de las conferencias y comunicaciones presentadas. La nómina general se incluye, en orden cronológico, en MAT – Serie A, 3 (2001), pág. 42.

Los manuscritos fueron recibidos y aceptados en mayo de 2001.

EL PROBLEMA DE HELE-SHAW COMO UN PROBLEMA LÍMITE PARA LA ECUACIÓN DE LOS MEDIOS POROSOS

Omar GIL

Instituto de Matemática y Estadística "Prof. Ing. Rafael Laguardia" Facultad de Ingeniería Universidad de la República Oriental del Uruguay Julio Herrera y Reissig 565 11300 MONTEVIDEO, URUGUAY

omargil@fing.edu.uy

Resumen

En este trabajo discutimos el comportamiento de las soluciones de la *ecuación de los medios porosos* $u_t = \Delta(u^m)$ cuando el exponente *m* tiende a infinito. Para que la solución de esta ecuación esté determinada fijaremos un dato inicial u_0 y, si el dominio Ω en el que se está trabajando es distinto de todo el espacio, un dato de borde *g* en la frontera de Ω . En este trabajo supondremos que ambos datos son no negativos. Mostramos que en el límite se obtiene una evolución que consiste en una proyección del dato inicial u_0 a una función \tilde{u}_0 que satisface $\tilde{u}_0 \leq 1$, seguida de una evolución que corresponde a un *problema de Hele-Shaw* con dato inicial \tilde{u}_0 y dato lateral *g*. La proyección inicial está caracterizada por un problema variacional conocido como el *problema de la mesa*

Clasificación: 35K65, 35R35, 76S05

Palabras clave: ecuación de los medios porosos, problema de Hele-Shaw, problema de la mesa, capa límite.

Abstract

In this lecture we discuss the behaviour of solutions to the *Porous Media Equation* $u_t = \Delta(u^m)$ when the exponent m goes to infinity. In order to completely determine the solution of the equation, initial data u_0 and, in case the working domain Ω is not the whole space, boundary data g on the boundary of Ω must be given. We will take both non negative. We show that the limit evolution is a projection of the initial data u_0 to some function \tilde{u}_0 satisfying $\tilde{u}_0 \leq 1$, followed by a Hele-Shaw evolution with initial data \tilde{u}_0 and boundary data g. The initial projection is described by means of a variational problem known as *the mesa problem*.

AMS subject classification: 35K65, 35R35, 76S05

Key words: boundary layer, Hele-Shaw problem, mesa problem, Porous Media Equation.

1. La ecuación de los medios porosos

La ecuación de los medios porosos (EMP)

$$u_t = \Delta(u^m)$$

aparece en la modelización de diversos fenómenos y es una las ecuaciones no lineales de difusión que ha sido más ampliamente estudiada a partir de la segunda mitad del siglo pasado. Por ejemplo, puede ser empleada para describir la filtración de agua en un medio poroso. En este proceso, la altura z = u(x, y, t) de la zona saturada obedece la ecuación de Boussinesq, que es justamente EMP cuando la dimensión n del espacio es 2 y el exponente m también es igual a 2, ver [Be, GMOT]. El flujo laminar de gas en un medio poroso también puede ser analizado por medio de EMP. En este caso tendremos n = 3 y la densidad u obedece la ecuación con un valor de $m \ge 2$, que depende del proceso que estemos analizando a través de la ley de estado

$$v = \frac{m}{m-1}u^{m-1}$$

que relaciona la presión v con la densidad u, ver [M].

En lo sucesivo consideraremos soluciones no negativas de la ecuación de los medios porosos para m > 1, definidas en un dominio Ω contenido en R^n . Prescribiremos un dato inicial

$$u(x,0) = u_0(x) \ge 0, \quad x \in \Omega,$$

y, cuando la frontera de Ω sea no vacía, un dato lateral

$$u^m(x,t) = g(x) \ge 0, \quad x \in \partial\Omega, \ t > 0.$$

Muchos aspectos dinámicos de la ecuación, como la velocidad de propagación finita y la aparición de *fronteras libres*, o *interfaces*, en la evolución, son comunes todo el rango de valores m > 1 para el exponente de la ecuación. En efecto, si m > 1 la ecuación de los medios porosos es una ecuación parabólica que degenera en el nivel u = 0, en el que se anula también la difusividad $D(u) = mu^{m-1}$. Esto produce la aparición de una interface, o frontera libre, que separa las regiones en las que u es positiva de aquellas en las que se anula. Esta interface se propaga con una velocidad finita \vec{V} , que puede ser calculada a partir de la variable v por medio de la *Ley de Darcy*

$$\vec{V} = -\nabla v$$
,

que es en realidad una de las hipótesis dinámicas básicas que conducen a la obtención de la ecuación de los medios porosos como modelo para diversos procesos de difusión. Por conveniencia, utilizaremos los nombres *densidad* y *presión* para las variables u y v respectivamente, aunque estemos trabajando con valores de *m* que no correspondan a ningún modelo físico.

2. El problema de Hele-Shaw

El problema de Hele-Shaw es un modelo matemático bidimensional que describe el movimiento de un fluido viscoso e incompresible confinado entre dos placas paralelas en una celda delgada [EJ, ST]. La variable principal en la descripción de este fenómeno es la presión v en el fluido. La presión del aire se considera igual a 0, y se desprecian los efectos debidos a la tensión superficial. La hipótesis básica del modelo es que la dinámica está gobernada por la Ley de Darcy. Este hecho, junto con la condición de incompresibi-lidad $\nabla \cdot \vec{V} = 0$ implican que la presión es una función armónica en el conjunto en que es positiva. v = 0

cuya evolución está gobernada por la Ley de Darcy. Si el flujo transcurre en una región Ω del espacio la evolución estará determinada si se fija el valor de la presión en la frontera Ω de Ω_0 inicialmente ocupada por el fluido.

El modelo de Hele-Shaw tiene aplicaciones en la industria del plástico [Ri], y en electromecanizado [MGR]. También puede ser considerado como un caso límite del problema de Stefan a una fase en el que el calor específico de la fase líquida es nulo [LR, V]. Consideraremos en esta nota la generalización natural de este problema a cualquier dimensión n.

3. El límite $m \rightarrow \infty$ en el problema de enfoque

La conexión entre la ecuación de los medios porosos y el problema de Hele-Shaw resulta de utilidad en la descripción del fenómeno conocido como *enfoque*, en que una solución de EMP evoluciona en forma tal que su frontera libre colapsa en un punto en un cierto instante T. Existe una familia de soluciones radiales, autosemejantes de enfoque para EMP que, escritas en la variable presión v y para t < T tienen la forma

$$v(r,t) = (T-t)^{2J-1} f(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} = r(T-t)^{-J},$$

donde f está soportada en un intervalo de la forma $\mathbf{x} \ge \mathbf{x}_0$. Esto hace que en cada instante t el soporte de v sea el conjunto $r > \mathbf{x}_0 (T-t)^J$, cuya interfase se enfoca en el origen en tiempo T. El exponente $\mathbf{J} = \mathbf{J}(n,m)$ depende de la dimensión espacial n y el valor de m en EMP. Si n = 1 vale 1 para cualquier valor de m, pero está en el intervalo (1/2,1) si $n \ge 2$. El hecho de que el exponente sea estrictamente menor que 1 produce cierta singularidad en el momento del enfoque, porque la velocidad de la interface se hace infinito en ese instante. El cálculo detallado del exponente \mathbf{J} es, en consecuencia, de interés para la descripción del enfoque -un fenómeno físico digno de estudio en sí mismo- y para la teoría de regularidad de EMP. Ver la introducción de [AGV] y sus referencias.

Para el problema de Hele-Shaw hay soluciones autosemejantes explícitas de enfoque con exponente J = 1/2 si $n \ge 2$. Este es justamente el valor límite del exponente para la ecuación de los medios porosos, tal como establecemos en el siguiente teorema.

Teorema 1 [AGV]. Si $n \ge 2$ entonces $\lim_{m\to\infty} J(n,m) = 1/2$.

Además es cierto que los perfiles f de las soluciones de enfoque para EMP convergen a los correspondientes a Hele-Shaw. Ver [AGV] por los detalles.

4. El límite $m \rightarrow \infty$ cuando el dato inicial u_0 está acotado por 1

Presentaremos ahora un análisis del paso al límite $m \rightarrow \infty$ para EMP en un contexto más general. Hemos visto en los párrafos anteriores que la Ley de Darcy y la variable presión aparecen como ingredientes fundamentales en la descripción de la dinámica de los dos modelos que trataremos en este artículo, lo que incluye la evolución de las fronteras libres. En nuestra descripción del límite la variable v tendrá un papel destacado. De hecho, elegiremos escribir la ecuación de los medios porosos en la forma

$$u_t = \Delta v$$
, $v = u^m$.

La variable v que acabamos de introducir no es exactamente la variable presión que aparece en la Ley de Darcy, pero observemos que es "esencialmente" la misma variable para valores grandes de m, que son justamente los que nos interesa considerar. Cuando el exponente m tiende a infinito la relación $v = u^m$ se aproxima al grafo H definido por

$$H(v) = \begin{cases} [0,1], & v = 0, \\ 1, & v > 0, \end{cases}$$

en la región $u \ge 0$, $v \ge 0$, del plano (u, v). En consecuencia, la evolución límite estará caracterizada por las ecuaciones

$$u_t = \Delta v, \qquad u \in H(v).$$

Este problema de evolución, junto con la prescripción de un dato inicial u_0 para la variable u y un dato lateral g para la v, es la *formulación débil para el problema de Hele-Shaw* que consideraremos en esta nota. Una formulación del problema de Hele-Shaw en término del grafo H aparece ya en [dBF]. Los detalles acerca de la formulación a que haremos referencia en este trabajo pueden encontrarse en [GQ1]. Ver también [V].

Para enunciar nuestro próximo teorema llamaremos u_m a una solución de la ecuación de los medios porosos con exponente m, y v_m a su potencia u_m^m .

Teorema 2 [GQ1]. Consideremos un dominio Ω con frontera acotada y suave, una función u_0 medible y con soporte compacto que satisface $0 \le u_0 \le 1$, y una función $g \ge 0$ que es la restricción al borde de Ω de una función de $W^{1,2}(\Omega) \cap L^{\infty}(\Omega)$. Entonces existe un único par de funciones (u, v) que es solución del problema de Hele-Shaw con dato inicial u_0 y dato lateral g. Además, para todo T > 0, las funciones v_m convergen en $L^1(\Omega \times (0,T))$ a la función v.

El teorema que acabamos de enunciar provee una descripción del comportamiento de las soluciones de la ecuación de los medios porosos para grandes valores de *m* cuando el dato inicial no supera el nivel 1. Observemos que el grafo *H* que aparece en el límite no admite valores de *u* mayores que 1. Por lo tanto, cuando la hipótesis $u_0 \leq 1$ no se satisface el dato inicial debe "adaptarse" al grafo, lo que provoca en el problema límite una proyección de u_0 a una nueva función \tilde{u}_0 que no supera el valor 1. Para valores grandes de *m* esta proyección se refleja en la aparición de una capa límite que conecta las funciones u_0 y \tilde{u}_0 en una escala de tiempos que presentaremos más adelante.

5. Formulación variacional del problema de Hele-Shaw

Para manejar el caso en que $||u_0||_{\infty} > 1$ introduciremos una *formulación variacional del problema de Hele-Shaw* que puede obtenerse a partir de la formulación débil que estamos manejando. Si integramos respecto al tiempo la ecuación $u_t = \Delta v$ obtenemos

$$u(\cdot,t) = u_0 + \Delta w(\cdot,t),$$

donde hemos definido w como

$$w(\cdot,t) = \int_0^t v(\cdot,s) ds \; .$$

La condición de pertenencia al grafo de las variables $u \neq v$ implica (1-u)v = 0. Por lo tanto la nueva variable w debe satisfacer

$$(1 - u_0 - \Delta w(\cdot, t))w_t = 0, \ 1 - u_0 - \Delta w(\cdot, t) \ge 0, \ w \ge 0.$$

En realidad puede mostrarse que la primera igualdad se satisface si ponemos w en lugar de su derivada respecto al tiempo w_i , por lo que se tiene

$$(1 - u_0 - \Delta w(\cdot, t))w = 0, \quad 1 - u_0 - \Delta w(\cdot, t) \ge 0, \quad w \ge 0.$$

Remitimos al lector a [GQ1] por una prueba detallada de este último paso. Sin embargo, digamos que la posibilidad de pasar a una formulación con w en vez de w_t puede verse como consecuencia de una "propiedad de retención" para el problema de Hele-Shaw que asegura que una vez que la variable $v = w_t$ toma un valor positivo en un cierto punto del espacio para un cierto tiempo t continua siendo positiva en ese punto para todos los tiempos posteriores.

El conjunto de condiciones sobre w que hemos obtenido, junto con los datos de borde

$$w(x,t) = g(x)t$$
, $x \in \partial \Omega$, $t \ge 0$,

que provienen de integrar respecto al tiempo la condición v = g en $\partial \Omega$, constituyen una nueva formulación para el problema de Hele-Shaw a la que nos referimos como *formula-ción variacional del problema de Hele-Shaw*. Esta formulación variacional para el problema de

Hele-Shaw generaliza ligeramente la que fue introducida en el trabajo [EJ]. En [EJ] sólo se consideran funciones indicatrices de conjuntos como dato u_0 para el pro-blema, lo que es equivalente a prescribir la región Ω_0 del espacio ocupada inicialmente por el fluido. La flexibilidad que permite considerar cualquier función con recorrido en [0,1] como dato para Hele-Shaw nos será imprescindible para analizar el límite de EMP.

Por cierto, esta nueva formulación es equivalente a la formulación débil, y también caracteriza la evolución, cuando el dato inicial u_0 satisface $u_0 \le 1$. Notemos que, bajo esta hipótesis, para t = 0 obtenemos que la función $w(x,0) \equiv 0$ satisface todas las condiciones del problema, incluidas las condiciones de borde. Si el dato lateral g es distinto de cero entonces para tiempos positivos la condición de borde para w ya no es nula, y la función w(x,t) recoge la información sobre la evolución posterior debida a la presencia de un dato de frontera no trivial.

6. El límite cuando $||u_0||_{\infty} > 1$

Comencemos por observar que cuando el dato u_0 supera el valor 1 la función $w(x,0) \equiv 0$ ya no es solución para la formulación variacional en t = 0, porque la condi-ción $1 - u_0 - \Delta w(\cdot,0) \ge 0$ no se satisfaría. En cambio, para la solución $w(\cdot,0)$ del proble-ma se tiene que

$$\widetilde{u}_0 = u_0 + \Delta w(\cdot, 0)$$

satisface la condición $\tilde{u}_0 \leq 1$ de compatibilidad con el grafo que vincula las variables $u \neq v$ del problema de Hele-Shaw. Esta proyección de u_0 a \tilde{u}_0 es conocida como el *problema de la mesa*, que aparece en la descripción del límite $m \to \infty$ para la ecuación de los medios porosos en los casos en que el dominio Ω es todo el espacio R^n , o el dato de frontera sobre $\partial \Omega$ es nulo. Ver [BBH] y sus referencias.

El problema límite evoluciona a partir de este nuevo dato inicial \tilde{u}_0 y lo que observamos es una solución del problema de Hele-Shaw en Ω , con dato lateral g para v y dato inicial $u(x,0) = \tilde{u}_0(x)$. Vemos entonces que el problema límite consiste de una proyección instantánea del dato inicial u_0 a \tilde{u}_0 , seguida de una evolución gobernada por Hele-Shaw. Notemos que la descripción variacional del problema es capaz de dar cuenta de ambos fenómenos, pero no la forma débil. De hecho, no existe solución para la formulación débil del problema de Hele-Shaw cuando se tiene que el dato inicial satisface $||u_0||_{\infty} > 1$, y en la descripción independiente del proceso de proyección del dato inicial si se desea expresar el problema límite en términos de su formulación débil. Recogemos el contenido de esta discusión en nuestro próximo teorema, que es una extensión del Teorema 2 en varios sentidos.

Teorema 3 [GQ2]. Consideremos un dominio Ω con frontera acotada y suave, una función u_0 medible, con soporte compacto, no negativa y acotada, y una función $g \ge 0$ que es la restricción al borde de Ω de una función de $W^{1,2}(\Omega) \cap L^{\infty}(\Omega)$. Sea \tilde{u}_0 la proyección de u_0 en el sentido del problema de la mesa. Sea (u, v) el par que es solución del problema de Hele-Shaw con dato inicial \tilde{u}_0 y dato lateral g. Entonces, para todo T > t > 0 las funciones $u_m(\cdot,t)$ convergen en $L^1(\Omega)$ a $u(\cdot,t)$, y las funciones v_m convergen en $L^1(\Omega \times (t,T))$ a la función v. El par (u, v) puede calcularse a partir de la función w que aparece en la formulación variacional del problema de Hele-Shaw por las fórmulas

 $u(\cdot,t) = u_0 + \Delta w(\cdot,t), \qquad v = w_t.$

7. La capa límite

Hemos visto entonces que el caso en que $||u_0||_{\infty} > 1$ produce para el problema límite una transición instantánea del dato inicial a un nuevo dato \tilde{u}_0 tal que $||\tilde{u}_0||_{\infty} \leq 1$. Para valores grandes de *m* esto corresponde a la formación de una capa límite que conecta ambos estados. La evolución dentro de la capa límite tiene una escala de tiempos muy rápida, que en el límite $m \to \infty$ se ve como el colapso instantáneo de todas las porciones del dato inicial que están por encima del nivel 1. Para conjeturar cuál es la escala de tiempo y las variables adecuadas para la descripción de la capa límite introduciremos una variable temporal $\mathbf{t}(t)$ y una expresión de *u* en esta escala de tiempo definida por

$$\overline{u}_m(x,t) = u_m(x,t(t)).$$

Entonces

$$\overline{u}_{mt}(x,t) = u_{mt}(x,t(t))t'(t) = \Delta(t'(t)u_m^m(x,t(t))).$$

Esto sugiere definir $t(t) = t^{m+1}/(m+1)$ y

$$\overline{v}_m(x,t) = t^m \overline{u}_m^m(x,t)$$

de modo que las nuevas variables también satisfacen la ecuación $\overline{u}_t = \Delta \overline{v}$. Notemos que en este caso la relación que deben satisfacer las variables \overline{u} y \overline{v} en el límite es $u(\cdot,t) \in H_t(v(\cdot,t))$, donde H_t es el grafo monótono definido por

$$H_{t}(v) = \begin{cases} [0,1/t], & v = 0, \\ 1/t, & v > 0. \end{cases}$$

Si integramos respecto al tiempo la ecuación para las nuevas variables, introducimos

$$\overline{w}(\cdot,t) = \int_{0}^{t} \overline{v}(\cdot,s) ds$$

y repetimos el razonamiento que nos llevó a la formulación variacional en la escala de tiempo original obtenemos, en el límite $m \to \infty$, las siguientes condiciones sobre \overline{w} :

$$(1/t - u_0 - \Delta \overline{w}(\cdot, t))\overline{w} = 0, \ 1/t - u_0 - \Delta \overline{w}(\cdot, t) \ge 0, \ \overline{w} \ge 0.$$

La condición de borde para \overline{w} está dada, para $0 < t \le 1$ y *m* finito, por

$$\overline{w}(x,t) = \frac{g(x)t^{m+1}}{m+1}, \quad x \in \partial\Omega.$$

Naturalmente, la condición de borde en el límite es que \overline{w} debe anularse sobre la frontera de Ω . A este problema límite que se obtiene para cada tiempo *t* con condición de borde nula lo llamaremos *problema de la mesa a altura* 1/*t*. Estamos ahora en condiciones de enunciar el teorema que contiene la descripción de la capa límite.

Teorema 3 [GQ2]. Bajo las mismas hipótesis que el Teorema 2 llamemos \overline{w} a la función que resulta de resolver el problema de la mesa a altura 1/t para la función u_0 , e introduzcamos $\overline{u}(\cdot,t) = u_0 + \Delta \overline{w}(\cdot,t)$, $\overline{v} = \overline{w}_t$. Entonces para todo $t \in (0,1]$ las funciones $\overline{u}_m(\cdot,t)$ convergen en $L^1(\Omega)$ a $\overline{u}(\cdot,t)$. Las funciones \overline{v}_m convergen en $L^1(\Omega \times (0,1))$ a la función \overline{v} .

Vale la pena observar que nuestra descripción de la capa límite contiene la conexión con la escala de tiempo original, ya que el resultado final de la evolución dentro de la capa límite, que se obtiene para el valor t = 1 en la escala de tiempos correspondiente, se obtiene resolviendo el problema de la mesa a altura 1, que es justamente el que caracterizaba la proyección del dato inicial u_0 .

8. El comportamiento de los soportes en el límite $m \rightarrow \infty$

Un aspecto relevante de la teoría de la ecuación de los medios porosos tiene que ver con la velocidad finita de propagación que tiene la ecuación, lo que provoca que si el dato inicial u_0 tiene soporte compacto entonces también lo tiene la solución $u_m(\cdot,t)$ para los tiempos posteriores. Resulta importante entonces conocer cómo evoluciona el soporte de u_m a medida que pasa el tiempo. Al considerar la ecuación de los medios porosos hemos introducido dos variables u_m y v_m cuyos soportes coinciden, ya que la relación que hay entre ambas es simplemente una potencia. Sin embargo, en el problema límite la relación entre u y v es la pertenencia a un cierto grafo, y bien puede ocurrir -cosa que realmente sucede en algunos ejemplos- que v se anule en regiones en las que u es positiva, lo que hace que los soportes de ambas variables puedan ser muy diferentes. Para valores de m grandes los soportes de u_m y v_m se aproximan a un cierto conjunto S que es esencialmente el soporte de u. Daremos la caracterización precisa del conjunto S definiendo sus secciones S(t) a tiempo constante en términos del dato inicial u_0 y la función w que aparece en la formulación variacional del problema límite como

$$S(t) = \{u_0 > 0\} \cup \{w(\cdot, t) > 0\}.$$

En la escala de tiempos de la capa límite ocurre algo análogo, con un conjunto al que llamaremos \overline{S} y que describiremos en términos de u_0 y \overline{w} . Introducimos entonces \overline{S} por medio de

$$\overline{S}(t) = \{u_0 > 0\} \cup \{\overline{w}(\cdot, t) > 0\}.$$

Nuevamente, la interpretación heurística de $\overline{S}(t)$ es que se trata de los puntos del espacio en que la función $\overline{u}(\cdot, t)$ es positiva.

Teorema 4 [GQ2]. Sea u_0 una función continua y de soporte compacto. Entonces

$$\begin{split} & \lim_{m \to \infty} \left\{ u_m(\cdot, t) > 0 \right\} = S(t) , \quad t > 0 ; \\ & \lim_{m \to \infty} \left\{ \overline{u}_m(\cdot, t) > 0 \right\} = \overline{S}(t) , \quad 0 < t \le 1 , \end{split}$$

en el sentido de la convergencia respecto a la distancia de Hausdorff.

Referencias

[AGV] Aronson, D.G., Gil, O. y Vázquez, J.L., *Limit behaviour of focusing solutions to nonlinear diffusions*. Comm. Partial Differential Equations, 1998, **23**, no. 1&2, 307--332.

[Be] Bear, J., Dynamics of Fluids in Porous Media. Elsevier, New York, 1971.

[dBF] di Benedetto, E. y Friedman, A., *The ill-posed Hele-Shaw model and the Stefan problem for supercooled water*. Trans. Amer. Math. Soc., 1984, **282**, no. 1, 183--204.

[BBH] Bénilan, Ph., Boccardo, L. y Herrero, M.A., On the limit of solutions of $u_t = \Delta u^m$ as $m \to \infty$. Rend. Sem. Mat. Univ. Politec. Torino, 1989, Fascicolo Speciale, 1--13.

[EJ] Elliot, C.M. y Janovský, V., A variational inequality approach to Hele-Shaw flow with a moving boundary. Proc. Roy. Soc. Edinburgh {Sect. A}, 1981, **88**, 93--107.

[GQ1] Gil, O. y Quirós, F., *Convergence of the porous media equation to Hele-Shaw*. Leiden Report W98-16, 1998. To appear in Nonlinear Anal.

[GQ2] Gil, O. y Quirós, F., Boundary layer formation in the transition from the Porous Media Equation to a Hele-Shaw flow. PreMat 00/32, 2000.

[GMOT] Goncerzewicz, J., Marcinkowska, H., Okrasinski, W. y Tabisz, K., *On the percolation of water from a cylindrical reservoir into the surrounding soil*. Zastosow. Mat., 1978, **16**, 249--261.

[LR] Louro, B. y Rodrigues, J.F., *Remarks on the quasi-steady one phase Stefan problem*. Proc. Roy. Soc. Edinburgh Scet. A, 1986, **102**, 263--275.

[MGR] McGeough, J.A. y Rasmussen, H., On the derivation of the quasi-steady model in electromechanical machining. J. Inst. Math. Applics., 1974, **13**, 13--21.

[M] Muskat, M., *The Flow of Homogeneous Fluids Through Porous Media*. McGraw-Hill, New York, 1937.

[Ri] Richardson, S., *Hele-Shaw flows with a free boundary produced by the injection of fluid into a narrow channel.* J. Fluid Mech., 1972, **56**, 609--618.

[ST] Saffman, P.G. y Taylor, G.I., *The penetration of fluid into a porous medium Hele-Shaw cell.* Proc. Roy. Soc., 1958, A 245, 312--329

[V] Vázquez, J.L., A new look at the zero specific heat limit of the Stefan problem. Preimpresión, 1998.

ESTIMATIONS OF NUTRIENT UPTAKES BY ROOTS OF CROPS THROUGH A MOVING BOUNDARY MODEL

Juan C. REGINATO¹ and Domingo A. TARZIA²

- Departamento de Química-Física, Facultad de Ciencias Físico-Químicas y Naturales, Universidad Nacional de Río Cuarto, Ruta 36 Km 601, (5800) Río Cuarto, Argentina. Corresponding author. E-mail:jreginato@exa.unrc.edu.ar
- 2 Departamento de Matemática-CONICET, FCE Universidad Austral, Paraguay 1950, S2000FZF Rosario, Argentina. E-mail: <u>Domingo.Tarzia@fce.austral.edu.ar</u>

Abstract. Single nutrient uptake by a growing root system is often estimated by the Barber-Cushman model. The model solves the coupled equations of transport in the soil and absorption of nutrient by roots in fixed domains. This study was conducted to determine whether a moving boundary model, accounting for increasing root competition, could improve predictions of nutrient uptake. Our model includes assumptions of the Barber-Cushman model and the moving boundary approximation. The model predicts nutrient uptake by coupling nutrient flux to roots and nutrient absorption on a variable domain in time. The model output was compared with measured uptake of Mg, K, P and S by various crops and soils by using experimental data obtained from the literature. Predicted Mg, K, and P uptake by pine seedling was close to that observed for K and P although for Mg the predicted uptake show deviations similar to those of the Barber-Cushman model. Predicted S uptake by wheat in different soils was better at least in ten out of eighteen measured cases. The moving boundary model appears to provide a better description of coupling between transport, absorption of nutrient and root growth than the Barber-Cushman model, and it improve the prediction for nutrient uptake in some tests.

Key words: Nutrient uptake, moving boundary model, Barber-Cushman model, growing root, heat balance integral method

Resumen. La toma de nutrientes monoespecie es a menudo estimada por el modelo de Barber-Cushman. Este modelo resuelve el conjunto de ecuaciones acopladas de transporte y absorción de iones por raíces sobre dominios fijos. Se realizó un estudio para determinar si un modelo de frontera móvil, el cual tiene en cuenta competencia de raíces, podría mejorar las predicciones de la toma de nutriente. Nuestro modelo incluye las suposiciones del modelo de Barber-Cushman y agrega la aproximación de frontera móvil. El modelo predice la toma de nutriente a través del acoplamiento del flujo de nutrientes hacia la raíz y la absorción de los mismos sobre un dominio variable cuya variación es conocida en el tiempo. La salida del modelo fue comparada con tomas medidas de Mg, K, P y S por diversos cultivos y suelos utilizando valores experimentales obtenidos de la literatura. Tomas predichas de Mg, K y P por plantines de pino fueron muy cercanas a la medidas para K y P aunque para Mg la toma predicha presentó desviaciones similares a la toma predicha por el modelo de Barber-Cushman. Las tomas predichas de S por trigo en diferentes suelos fueron mejores al menos en diez de dieciocho casos testeados. Así, el modelo de frontera móvil parece proveer una mejor descripción del acoplamiento entre transporte, absorción de nutriente y crecimiento de raíces que el modelo de Barber-Cushman y mejora las predicciones de la toma de nutriente en algunos tests.

Palabras claves: Toma de nutrientes, modelo de frontera móvil, modelo de Barber-Cushman, crecimiento de raíces, método del balance integral calórico.

AMS Subject Classification: 35R35, 35C15, 35K20, 80A20

Introduction

Nutrient uptake has been evaluated through diffusive and mass flow models which are based on numerical approximation in fixed domains of differential transport equations in soils coupled with absorption kinetics by roots (Cushman, 1979; Barber, 1995). These models estimate the nutrient concentration at the root-soil interface and the resulting nutrient uptake. Other models assume the root surface behaves like a zero-sink, therefore nutrient uptake is determined by the rate of nutrient supply to the root surface by mass flow and diffusion. In these models, the radius of finite cylindrical soil volume assigned to each root declines with increasing root density (Hoffland, 1990). In other models, analytical solutions (Nye and Tinker, 1977) were used for calculating the volume of the soil allocated to each root and the concentration at root surface including a depletion zone that increased with time until it reached the non-transfer boundary (Smethurst, 1993). Recently, we have formulated free boundary models for root growth (Reginato et al., 1990, 1991, 1993a), i.e., analytical models through which it is possible to compute nutrient concentration at the root-soil interface and root growth rate (a priori an unknown function of time). This fact allows us to postulate a new model of nutrient uptake due to the transport and absorption of ions from a more dynamic point of view. This new model differs from our previous ones as the root growth rate is now plugged in as known function of time, the same as the Barber-Cushman model. Thus, the goal of the present work is to evaluate a moving boundary model for nutrient uptake which takes into account an increasing root competition for nutrient uptake from the soil by a growing root system combining ion transport, absorption kinetics and root growth simultaneously.

A one-dimensional model is considered, i.e., a single cylindrical root in a soil where it is assumed that the conditions of moisture, light and temperature are controlled (like in a growth chamber). With these assumptions, the following one-dimensional nutrient uptake model through a moving boundary problem to one phase (the soil) (Crank, 1984, Tarzia, 2000) in cylindrical coordinates is proposed:

$$D\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + D(1 + \varepsilon_o)\frac{1}{r}\frac{\partial C}{\partial r} = \frac{\partial C}{\partial t}, \qquad s_o < r < R(t), \qquad 0 < t < T$$
(1-a)

$$C(r,0) = \varphi(r), \qquad s_o \le r \le R_o \qquad (1-b)$$

$$-Db\frac{\partial}{\partial r}C(R(t),t) + v_oC(R(t),t) = 0 , \qquad 0 < t < T \qquad (1-c)$$

$$Db\frac{\partial}{\partial r}C(s_o,t) + v_oC(s_o,t) = \frac{k_a[C(s_o,t) - C_u]}{1 + \frac{k_a[C(s_o,t) - C_u]}{I}}, \qquad 0 < t < T$$
(1-d)

$$R(t) = R_o \sqrt{\frac{l_o}{l(t)}}, \qquad 0 < t < T \qquad (1-e)$$

where *r* is the radial distance from the root axis [m], *t* is the time [s]; *T* is the maximum time for which the system has solution [s]; C_u is the concentration for which the net influx is null [mol m⁻³]; v_o is the mean effective velocity of soil solution at root surface [m s⁻¹]; *b* is the buffer power, *D* is the effective diffusion coefficient [m² s⁻¹], k_a (= J_m/K_m) is the absorption power of nutrient [m s⁻¹]; J_m is the maximum influx at infinite concentrations [mol m⁻² s⁻¹]; K_m is the concentration at which influx is $J_m/2$ [mol m⁻³]; R(t) is the variable half distance between root axes at time t [m], φ is the initial concentration defined in $[s_o, R(t)]$ [mol m³], R_o is the initial half distance between root axes [m], s_o is the root radius [m], l(t) is the root length as a function of time [m], and l_0 is the initial root length [m]. The parameter ε_0 is given by $\varepsilon_o = v_o s_o / Db$ [dimensionless]. In our model, all coefficients are assumed to be constant. Equation (1-a) represents the ion transport equation in the soil. Condition (1-b) corresponds to the initial concentration and Condition (1-c) is the boundary condition representing null flux on the moving boundary R(t) that is a priori a known function of time. Condition (1-d) represents the mass balance at the root surface where the ions arriving are incorporated through absorption kinetics. Equation (1-e) gives us the moving R(t) as a function of the instantaneous root length l(t), which is known a priori. This expression is obtained assuming a fixed volume of soil and relating R(t) with the instantaneous root length (which is a special function according to method used to estimate longitudinal root growth, i.e., linear, exponential, sigmoid, etc.), that is, assuming that the available soil volume at time t results from the difference between the available soil volume at initial time t = 0 and the grown root volume at time t, i.e., if R_o is the initial half distance between roots, l_o is the initial root length and l(t) is the root length at time t, then we have

that is

$$\pi l(t) \left[R^{2}(t) - s_{o}^{2} \right] = \pi l_{o} \left[R_{o}^{2} - s_{o}^{2} \right] - \pi s_{o}^{2} \left[l(t) - l_{o} \right]$$

 $V_{soil}\Big|_{t=t} = V_{soil}\Big|_{t=0} - V_{root}\Big|_{t=t}$

Thus, after elementary manipulations the condition (1-e) is obtained. Equation (1-e) characterizes the moving boundary approximation and replaces a second equation in (1-d), which was postulated, in our previous free boundary models.

The model is solved by applying the integral balance method (Goodman, 1958, Reginato et al., 1993b). So, the partial differential equation (1-a) is integrated in variable r on the domain (s_o, R(t)). Moreover, by using an analogous methodology as used in phase-change processes, the following expression for C(r, t) is proposed:

$$C(\mathbf{r},t) = \varphi(\mathbf{r}) \left[1 + \beta(t) \left(1 - \frac{\mathbf{r}}{R(t)} \right)^2 \right]$$
(2)

with:

$$\varphi(r) = C_R e^{-\varepsilon(R_o - r)}, \qquad \varepsilon = \frac{v_o}{Db} = \frac{\varepsilon_o}{s_o}$$
(3)

where C_R is the initial ion concentration in soil solution at $r = R_o \text{ [mol m}^3\text{]}$. Expression (2) for the concentration verifies the initial (1-b) by taking $\beta(0) = 0$ and boundary (1-c) conditions. So, after some elementary and long manipulations, and taking into account the particular case of an linear root growth, the following differential equation for $\beta(t)$ was obtained (see Reginato et al., 2000):

$$\frac{d\beta(t)}{dt} = \frac{F_2(R(t),\beta(t))}{F_1(R(t))}, \qquad \beta(0) = 0 \qquad (4)$$

with:

$$R(t) = R_o \sqrt{\frac{l_o}{l_o + kt}}$$

The system (4) is solved through the Runge-Kutta method for ordinary differential equations, which was implemented in a FORTRAN program on a personal computer.

Total nutrient uptake can be obtained from the following formula, which can be considered as a modified version of the Cushman formula (Cushman, 1979; Claasen and Barber, 1976)

$$U = 2\pi s_o l_o \int_{t=0}^{t=t_{max}} J_c(t) dt + 2\pi s_o \int_{t=0}^{t=t_{max}} \left[\int_{t=t}^{t=t_{max}} J_c(t) dt \right] \dot{l}(t) dt$$
(5)
with $J_c(t) = \frac{k_a [C(s_o, t) - C_u]}{1 + \frac{k_a [C(s_o, t) - C_u]}{J_m}}$

where $J_c(t)$ is the influx, l(t) is the longitudinal root rate growth and U is computed from t = 0 to $t = t_{max}$.

Results and Discussion

The model was tested with experimental data extracted from the literature. Thus, uptake of Mg, K and P for loblolly pine seedlings during 180 days in a modified A horizon soil mesic Typic Hapludult (Kelly et al., 1992), was estimated. The comparison between the Barber-Cushman prediction using the NUTRIENT UPTAKE program (Oates and Barber, 1987) and the estimation of the present model, i.e., the moving boundary model, assuming a linear root growth with time is shown in Table 1.

	_	Predicted uptake (mmol pot ⁻¹)				
Nutrient	Observed uptake (mmol pot ⁻¹)	Barber-Cushman Model (1)		Moving Boundary Model (2)		
			Error (†)		Error (†)	
Mg	1.617	0.625	61.3	0.680 (*)	57.1	
ĸ	6.663	6.285	5.6	6.653 (*)	0.15	
Р	1.332	1.185	11	1.302 (*)	2.25	
Г	1.332	1.105	11	1.302 (*)	2.25	

Table 1. Mg, K and P uptake by pine seedling: observed vs. predicted by Barber-Cushman and moving boundary models

(1) Source: Kelly et al. 1992

(2) Source: Present paper

(†) Relative error = [(Observed uptake - predicted uptake)/Observed uptake] x 100.

(*) The value obtained by the moving boundary model represents a better prediction

Predicted uptakes improved in all cases, although for Mg uptake the same deviations showed by the Barber-Cushman model persisted, probably because high J_m values obtained from solution studies are responsible for underprediction of Mg uptake by crops (Rengel et al., 1990). Thus, both models can be improved taking into account J_m values obtained from soil studies. The nutrient uptake predicted by our model can be improved in its theoretical aspects. In this respect, the limitation of these models is that both consider the absorption of only one nutrient explicitly without taking into account the simultaneous absorption of ions and the possible coupling with other ions in the absorption. This last fact suggests the need for a model that simultaneously takes into account the interactions among nutrients, as for example, by using competitive kinetic absorption. Moreover, the model is tested with data of S uptake by wheat grown on Norwood silt loam (Typic Hapludalf) and Mhoon silty clay loam (Typic Fluvaquent) for a period of 24 and 17 days, respectively, under glasshouse conditions (Delgado and Amacher, 1997). The NUTRIENT UPTAKE program (Oates and Barber, 1987) and the present model were used for the input data. The predicted uptakes using a linear root growth are shown in Table 2.

	Observed	Predicted uptake (mmol pot ⁻¹)				
Crop (Soil)	Uptake	Barber-Cushman Model		Moving Boundary Model		
	(mmol pot ⁻¹)	(1)	(2))	
			Error (†)		Error (†)	
Wheat (Norwood +)	0.02557	0.004678	81.7	0.00749 (*)	70.7	
. ,	0.0287	0.02969	3.4	0.02684	6.5	
	0.0452	0.05925	31	0.0532 (*)	17.7	
	0.06923	0.09355	35.1	0.0746 (*)	7.75	
	0.08358	0.1294	54.8	0.099 (*)	18.4	
Wheat (Norwood)	0.01091	0.004678	57.1	0.00822 (*)	24.6	
	0.0234	0.03119	33.3	0.02966 (*)	26.7	
	0.0452	0.0701	55	0.06599 (*)	46	
	0.0561	0.106	88.9	0.08624 (*)	53.7	
	0.0977	0.145	48.4	0.1141 (*)	16.8	
Wheat (Mhoon +)	0.08576	0.09048	5.5	0.01247	85.3	
· · · ·	0.1356	0.2089	54	0.01383	89.8	
	0.229	0.3071	34	0.01477	93.5	
	0.2426	0.4288	76.7	0.01577	93.5	
Wheat (Mhoon)	0.0555	0.02807	49.4	0.01913	65.5	
	0.08358	0.05519	33.9	0.03627	56.6	
	0.0764	0.08731	14.3	0.05137	32.7	
	0.08358	0 1185	41.8	0.06883 (*)	17.6	

Table 2. S uptake by wheat: observed vs. predicted by Barber-Cushman and moving boundary models Source: Delgado and Amacher, 1997 (We have extracted their predicted S uptake by using J_m obtained from soil studies)

(†) Relative error = [(Observed uptake - predicted uptake)/Observed uptake] x 100.

(*) The value obtained by the moving boundary model represents a better prediction

The moving boundary model provides a better prediction in ten cases for a total number of eighteen predictions. We remark that for Norwood soils the comparison between the predicted uptakes by the Barber-Cushman model and the predicted uptakes by our model shown that the present model overpredicts 1.27 times the observed uptakes while the Barber-Cushman model overpredicted 1.72 times the observed values. This fact is shown in Figure 1. For the Mhoon soils, the predictions are poor. On the other hand, for long periods of time as accounting for K, P and Mg our model makes better predictions. We remark that the validity of the root competition assumption for the soils considered in the tests is justified because the depletion radius ($r_D = s_o + 2\sqrt{Dt}$ following Baldwin and Nye (1974)) equals to the instantaneous half distance between root axes R(t) in few days (Aprox. three or four days for the soils considered). Thus, the moving boundary model could be a good alternative method for the prediction of nutrient uptake.

References

Baldwin, J.P. and P.H. Nye. 1974. A model to calculate the uptake by a developing root system or

root hair system of solutes with concentration variable diffusion coefficients. Plant Soil 40:703-706

Barber, S.A. 1995. Soil Nutrient Bioavailability: A Mechanistic Approach, 2nd Ed. J. Wiley, New York.

Claassen, N., and S.A. Barber. 1974. A Method for Characterizing the Relation between Nutrient Concentration and Flux into Roots of Intact Plants. Plant Physiol. 54:564-568

Claasen, N., and S.A. Barber. 1976. Simulation model for nutrient uptake from soil by a growing plant root system. Agron. J. 68:961-964

Crank, J. 1984. Free and Moving Boundary Problems. Clarendon Press, Oxford

Cushman, J.H. 1979. An analytical solution to solute transport near root surfaces for low initial concentrations: I. Equation development. Soil Sci. Soc. Am. J. 43:1087-1090

Delgado, J.A., and M.C. Amacher. 1997. Modeling the uptake of sulfur by crops on three alluvial soils of Louisiana: wheat, Commun. Soil Sci. Plant Anal. 28:225-236

Goodman, T.R. 1958. The heat-balance integral and its applications to problems involving a change of phase, Transf. of the ASME 80:335-342.

Hoffland, E., H.S. Bloemhof, G.R. Findenegg, P.A. Leffelaar, and J. Nelemans. 1990. Simulation of nutrient uptake by a growing root systems considering increasing root density and inter-root competition. *In* Plant Nutrition-Physiology and Applications. Ed. M.L. van Beusichem, 9-15. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands.

Kelly, J.M., S.A. Barber, and G.S. Edwards. 1992. Modeling magnesium, phosphorus and potassium uptake by loblolly pine seedling using a Barber-Cushman approach. Plant and Soil 139:209-218

Nye, P.H., and P.B. Tinker. 1977. Solute movement in the soil-root system. Blackwell Scientific, Oxford, England

Oates, K., and S.A. Barber. 1987. Nutrient uptake: A microcomputer program to predict nutrient absorption from soil by roots. J. Agron. Educ. 16:65-68

Reginato, J.C., D.A. Tarzia, and A. Cantero. 1990. On the free boundary problem for the Michaelis-Menten absorption model for root growth. Soil Sci. 150:722-729

Reginato, J.C., D.A. Tarzia, and A. Cantero. 1991. On the free boundary problem for the Michaelis-Menten absorption model for root growth. High concentrations. Soil Sci. 152:63-71

Reginato, J.C., D.A. Tarzia, and M.A. Dzioba. 1993a. Analytical study of the effect of some soil and plant parameters on root growth due to absorption of one mobile ion: A free boundary model. Plant and Soil, 157:185-196

Reginato, J.C., and D.A. Tarzia. 1993b. The balance integral method applied to root growth of crops. Int. J. of Eng. Sci. 31:61-70

Reginato, J.C., M. C. Palumbo, Ch. I. Bernardo, I. S. Moreno y D. A. Tarzia. 2000. Modeling Nutrient Uptake Using A Moving Boundary Approach. Comparison with the Barber-Cushman Model. Soil Science Society of America Journal, 64(4):1363-1367

Rengel, Z. and D. L. Robinson. 1990. Modeling magnesium uptake from an acid soil. II. Barber-Cushman model. Soil Sci. Soc. Am. J. 54:791-795

Smethurst, P.; and N.B. Comerford. 1993. Simulating nutrient uptake by single or competing and contrasting root systems. Soil Sci. Soc. Am. J. 57:1361-1367

Tarzia, D.A. 2000. A bibliography on moving-free boundary problems for the heat-diffusion equation. The Stefan and related problems. MAT-Serie A, Rosario, #2 (with 5869 titles on the subject). See www.austral.edu.ar/MAT-SerieA/2(2000)/

PROBLEMAS DE FRONTERA LIBRE EN PROCESOS DE TRANSFERENCIA DE MATERIA Y ENERGIA CON REACCION QUIMICA

Oscar D. Quiroga, Luis T. Villa y Fernando Suarez

INIQUI - Facultad de Ingeniería Universidad Nacional de Salta. Buenos Aires 177, 4400 Salta, Argentina. e- mail : villal @ Ciunsa .edu.ar

RESUMEN. En el presente trabajo, dentro del amplio espectro de procesos que pueden encuadrarse en el tipo de problemas consignado en el título, se ha tomado en consideración solo un caso especifico sencillo de modelar cual es el referido a un fenómeno isotérmico de disolución de sólidos no porosos en líquidos.

El término reacción se ha conceptualizado según su acepción mas amplia que es la correspondiente al de transformación.

Se analizan las distintas etapas involucradas en el proceso en cuestión desde el momento en que ambas fases se ponen en contacto. Asimismo, los correspondientes regímenes cinéticos emergentes según cual sea la etapa controlante de la velocidad de disolución.

Se toma un determinado tipo de régimen para ilustrar el modelado y simulación de la solución matemática del problema en un caso específico.

Palabras Claves: Disolución - transformación - partícula no porosa - régimen cinético.

ABSTRACT. In the present, from the lot of process which allows a free boundary problem as a descriptive model, a simple specific case, such as the isothermal nonporous solid - liquid dissolution is considered.

The term reaction has been considered in its more general aception which is as a transformation.

The different stages implied in the process are analized. Also, the corresponding kinetical regimes comming out according to the controlling step on the dissolution velocity.

A determinated type of regime is take into account in order to illustrate the modelling, and the simulation of the corresponding mathematical solution for a specific case is obtained.

Key Words: Dissolution - Transformation - Non porous particle - Kinetical regime.

INTRODUCCIÓN

Desde los trabajos pioneros en el tema allá por 1896 hasta la fecha la cinética de la disolución de sólidos en líquidos es un tema que ha despertado el interés de prominentes científicos e ingenieros. De acuerdo con Rice y Jones (1979), su historia es rica en paradojas y debates manifiestos, pudiendo decirse que desde comienzos del siglo xx se viene realizando un esfuerzo científico considerable, dirigido principalmente a establecer si el mecanismo de disolución del sólido es controlado por la cinética de la superficie o de la difusión.

ECUACIONES FUNDAMENTALES DEL MODELADO

Balance de masa del reactivo sólido en la partícula

18

Consideramos el caso de una partícula sólida constituida por un reactivo B que en presencia de un disolvente A se transforma en un soluto liquido:

$$\begin{array}{ccc} \mathbf{A}_{(\mathrm{L})} \\ \mathbf{B}_{(\mathrm{s})} & \Leftrightarrow & \mathbf{B}_{(\mathrm{L})} \end{array} \tag{1.1}$$

Para este caso, tal como ha sido demostrado por Quiroga et al. (1996), la variación que experimenta la masa de B en la partícula reactante, debida únicamente a la interacción fisicoquímica que experimenta con el fluido A que la rodea, puede expresarse como:

$$\frac{\mathrm{dX}}{\mathrm{dt}} = \frac{\Omega \mathrm{m}_{\mathrm{B}} \mathrm{N}_{\mathrm{B}}}{\mathrm{M}^{\mathrm{o}}}$$
(1.2)

en la cual han quedado excluidos los fenómenos de disgregación o de rotura que puede experimentar la partícula, como así también los de aglomeración o de sinterización con otras partículas. X, y N_B han sido definidos como

$$X = \frac{M^0 - M}{M}$$
(1.3)

$$N_B = \mathcal{K}_{\mathcal{C}} \left(\mathcal{C}_{\mathcal{B}\Omega} - \mathcal{C}_{\mathcal{B}} \right) \tag{1.4}$$

donde $C_{B\Omega}$ es la concentración molar de soluto sobre la superficie Ω de la partícula

Formulación de Ω para partículas no porosas, constituidas por un sólido reactivo puro y superficie interfacial uniformemente reactiva

Cuando la partícula está formada por un sólido reactivo puro no poroso y la superficie interfacial presenta un mismo grado de reactividad en toda su extensión, su superficie externa Ω y X se hallan vinculados por la siguiente ecuación

$$\Omega = \Omega^0 (1 - X)^{m/(1+m)}$$
(1.5)

y, Ω^0 y M^0 , por la siguiente

$$\frac{\Omega^0}{M^0} = \frac{2(1+m)}{r_{B^{0}}}$$
(1.6)

Donde ℓ^0 es la menor de longitudes características de la partícula, y *m* es un coeficiente de forma, cuyos valores son m = 0, para láminas; m = 1, para agujas; m = 2, para esferas o partículas que se transforman homotéticamente

Relación de vinculo entre C_B y X

Cuando la disolución tiene lugar en un contactor del tipo tanque agitado discontinuo, C_B y X quedan vinculados entre si por la siguiente ecuación:

$$C_{\rm B} = C_{\rm B}^* \, \rm YX \tag{1.7}$$

Donde C_B^* es la concentración molar de saturación del soluto; e Y es el factor de saturación, definido como

$$Y = \frac{M^0}{m_B C_B^* V_L}$$
(1.8)

REGIMENES CINÉTICOS

La disolución de sólidos en líquidos, es un proceso que se desarrolla en estado no estacionario, y desde el punto de vista de la cinética química, se caracteriza por el hecho de que en su velocidad se hallan involucradas un conjunto de etapas en serie, las cuales deben ser analizadas desde el mismo momento en que ambas fases se ponen en contacto. Para el caso particular de la disolución de una partícula sólida no porosa en contacto con un solvente líquido, estas etapas son las siguientes:

Etapa (D. 1): Adsorción del disolvente.

Etapa (D. 2): Disociación del sólido en iones o moléculas (formación del soluto).

Etapa (D. 3): Desorción del soluto.

<u>Etapa (D. 4):</u> Interdifusión del solvente y del soluto a través de la capa limite que rodea a la partícula.

En todos los casos, la velocidad observada de la disolución es dada por la velocidad de la etapa más lenta, dependiendo cada una de estas de un conjunto de variables, como por ej. : las propiedades fisicoquímicas de las especies químicas (concentración, viscosidad, coeficiente de difusión, etc.); la temperatura; la velocidad relativa entre las fases; y el tamaño y la forma de partícula.

A través de todas estas etapas y de las variables que determinan sus respectivas velocidades, es posible prever que mientras dura la disolución de la partícula, su velocidad proceda en alguno de los regímenes siguientes:

Régimen I o régimen de control por transferencia de masa: la velocidad de la disolución es controlada por la velocidad de la Etapa (D.4).

Régimen II o régimen de control químico: La velocidad de la disolución es controlada por la etapa (D.2) o, a través de un mecanismo combinado, por las velocidades de las Etapas (D.1) a (D.3)

Régimen III o régimen de control mixto Las velocidades de las Etapas (D.1) a (D.4) son todas del mismo orden de magnitud.

Es de destacar que, mas allá de los diversos regímenes postulados para interpretar el fenómeno tal cual se ilustró precedentemente, desde el punto de vista macroscópico, la característica común es de que se tiene un frente móvil (frontera libre) (por ejemplo el radio instantáneo de la partícula que se va disolviendo). La dinámica de la frontera libre y en consecuencia la del grado de transformación o conversión del sólido, tendrá que ver con la oportunidad o no del régimen propuesto en relación al hecho real.

MODELADO DE DISOLUCIÓN EN RÉGIMEN I

Si la velocidad de la disolución es controlada por la velocidad de transferencia de masa del soluto desde la superficie interfacial hacia el seno de la fase líquida, o del solvente desde el seno de la fase líquida hasta la superficie interfacial, entonces puede suponerse que las velocidades de las Etapas (D.1) a (D.3) son altas, y por consiguiente, en cortos tiempos de contacto, $C_{B\Omega}$ alcanza el valor de C_{B}^{*} resultando así:

$$N_{\rm B} = K_{\rm C} \left(C_{\rm B}^* - C_{\rm B} \right) \tag{1.9}$$

El cual es un modelo propuesto en (1897), y fue posteriormete adoptado por una cantidad de investigadores que les sucedieron. Si bien es cierto que el cumplimiento de la hipótesis $C_{B\Omega} = C_B^*$ se ha observado experimentalmente en numerosos casos, como veremos luego, su validez no es estrictamente universal, sino que depende de la velocidad con que $C_{B\Omega}$ alcanza el punto de saturación.

Por combinación de las ecs. (2), (4), (5), (7) y (9), se obtiene

$$\frac{dX}{dt} = (1+m)h_c(1-YX)(1-X)^{\frac{m}{1+m}}$$
(1.10)

 $con h_c$ definido como

$$h_c = \frac{2 \operatorname{m}_{\mathrm{B}} K_c \operatorname{C}_{\mathrm{B}}^{*}}{\boldsymbol{\Gamma}_{\mathrm{B}} \ell^0}$$
(1.11)

APLICACIÓN DEL MODELO AL TRATAMIENTO DE DATOS EXPERIMENTALES

Tomando datos difundidos en la literatura para el caso de la disolución de cloruro de sodio (sal común) en agua (se suponen partículas esféricas: m = 2) en condiciones tales que el parámetro Y del modelo es pequeño, a continuación se presenta gráficamente el resultado de simular la resolución de la ecuación (1.10) sujeta a la condición inicial X (0) = 0.

Los resultados se ilustran en las figuras 1 y 2. Con referencia a tales figuras se pueden confrontar valores experimentales de la conversión en función del tiempo de evolución del proceso.









NOTACIÓN

- A = disolvente
- B = soluto
- C_B = concentración molar del soluto en el seno de la fase líquida, Kmol/m³
- $C_{B\Omega}$ = concentración molar del soluto sobre la superficie externa de la partícula, Kmol/m³

 $C_{\rm B}^*$ = concentración molar de saturación del soluto, Kmol/m³

- K_c = coeficiente de transferencia de masa m/s
- K = constante de equilibrio de la disolución
- M = masa de sólido B, Kg
- M^0 = masa inicial de solido B, Kg
- m_B = peso molecular del sólido B, Kg/Kmol
- $N_{\rm B}$ = flujo molar de soluto sobre la superficie externa de la partícula Kmol/s m²
- V_L = volumen de la solución, m³
- X = conversión del sólido B
- Y = factor de saturación
- r_d = velocidad de disociación de las moléculas del sólido Kmol/s m²

t = tiempo, s

Letras griegas

- δ = espesor de la capa límite que rodea la partícula, m
- ρ_B = densidad del reactivo sólido, Kg/m³
- Ω = superficie externa de la partícula, m²

REFERENCIAS

[1] QUIROGA O. D., AVANZA J. R., FUSCO A. J & VILLA L. T., "Transformaciones Fluido Sólido reactivo. Parte I. Caracterización, ecuaciones fundamentales del modelado y clasificación", Proceedings LATCYM 96 (1996), Vol 2, 1155 – 1160.

[2] RICE R. G. & JONES P. J., "Complete dissolution of sphericall particles in free fall", Chem. Eng. Sci., 34 (1979).

MODELO DE DESHIDRATACION OSMOTICA DE ALIMENTOS VEGETALES

Edgardo A. SPIAZZI y Rodolfo H. MASCHERONI

CIDCA (Centro de Investigación y Desarrollo en Criotecnología de Alimentos) Calle 47 y 116 – (1900) La Plata – Argentina e-mail: rhmasche@volta.ing.unlp.edu.ar

RESUMEN Se presenta el desarrollo y la aplicación de un modelo para la predicción de la transferencia de masa durante la deshidratación osmótica de tejidos vegetales. El modelo toma en cuenta la capacidad de cada constituyente para difundir dentro del tejido, utilizando un coeficiente de difusión y un coeficiente de transferencia de materia transmembranario. La variación del volumen del tejido durante la deshidratación (contracción) se considera como un frente móvil que retrocede desde la superficie de contacto con la solución osmótica. El modelo también depende de la forma y tamaño del producto, de la relación solución osmótica/producto, de la composición inicial de producto y solución y del grado de agitación de la misma. Las predicciones del modelo se verifican contra datos experimentales de la deshidratación de rodajas, cubos y cilindros de frutas y hortalizas en soluciones acuosas de alcoholes o de azúcar y/o sal.

Palabras claves: Deshidratación osmótica, modelado, frente móvil, alimentos vegetales

ABSTRACT The development and application of a model for the prediction of mass transfer during osmotic dehydration is presented. The model takes into account the capacity of each constituent to diffuse within the tissue by using a diffusion coefficient and a transmembrane mass transfer coefficient. Tissue volume variation (contraction) is considered as a moving boundary that recedes from the contact surface between solution and product. The model also depends on product shape and size, on the mass ratio of osmotic solution to product, on the initial composition of the product and solution and on its degree of shaking.

Model predictions are verified against experimental data of osmotic dehydration of fruit and vegetable cubes, slices and cylinders in aqueous solutions of alcohols or of sugar and/or salt. **Key-words:** Osmotic dehydration, modeling, moving boundary, vegetable foods

1. INTRODUCCION

La **Deshidratación Osmótica** (DO) es una técnica que aplicada a productos frutihortícolas permite reducir su contenido de humedad (hasta un 50-60 % en base húmeda) e incrementar el contenido de sólidos solubles. Si bien el producto obtenido no es estable para su conservación, su composición química permite obtener, después de un secado con aire caliente o una congelación, un producto final de buena calidad organoléptica.

En este proceso el frutihortícola es puesto en contacto con una solución concentrada de alcohol, sales y/o azúcares, estableciéndose una doble transferencia de materia: **agua** desde el producto hacia la solución – junto con sustancias naturales (azúcares, vitaminas, pigmentos) – y, en sentido opuesto, **solutos** de la solución hacia el frutihortícola. En consecuencia el producto pierde agua (WL), gana sólidos solubles (SG) y reduce su volumen (VR).

Un esquema de la problemática a resolver en el modelado y simulación del proceso es el siguiente:

24 Spiazzi-Mascheroni, "Deshidratación osmótica de alimentos ...", MAT – Serie A, 4 (2001), 23-32.



2. MODELIZACION 2.1. Modelos Existentes

.

El enfoque del modelado de la DO puede dividirse en dos grandes categorías: Modelado fenomenológico y Modelado microscópico-estructural.

Modelado fenomenológico: No trata de explicar el mecanismo de la transferencia de materia a través de un modelo físicoquímico, sino que sólo intenta relacionar WL, SG y VR con las condiciones operativas a través de relaciones muy simples, generalmente de validez limitada al caso en estudio (Hawkes & Flink [5], Dalla Rosa & col. [3], Andreotti & col. [1], entre muchos otros). El tipo de relaciones obtenidas son los siguientes:

$$WL = K_w(t)^{1/2}$$
(1)

$$SG = K_s (t)^{1/2}$$
 (2)

Las Kw y Ks son constantes fenomenológicas que dependen, al menos, de la composición,

temperatura y grado de agitación. Por lo tanto, son válidas sólo para las condiciones en que fueron determinadas, a menos que se modele su dependencia con dichas variables operativas.

Modelado microscópico-estructural: Los modelos más simplificados consideran difusión en un sistema homogéneo. Plantean el balance para el sistema y - a partir de la solución analítica y de datos experimentales - regresionan un coeficiente de difusión aparente para cada componente que difunde (Hawkes & Flink [5], Conway & col. [2], entre otros).

En el otro extremo, existen modelos muy elaborados que combinan la difusión multicomponente con la existencia de elementos estructurales (pared celular, membrana protoplasmática, espacios intercelulares), a través de los cuales deben difundir los componentes, y que implican resistencias adicionales y generan la aparición de numerosos coeficientes, difíciles de calcular o medir (Toupin & col. [13], Marcotte & col. [8]).

2.2 Modelo desarrollado

Se trata de un modelo de deshidratación osmótica (Modelo Osmótico-Difusivo MOD), parcialmente inspirado en los citados de Toupin y Marcotte, el cual toma en consideración la deformación del material y está basado en la transferencia de agua a través de las membranas celulares y en la difusión multicomponente en los espacios intercelulares.

Durante la deshidratación la transferencia de materia en un tejido vegetal puede ser interpretada a través del esquema desarrollado en la Fig.1.



Figura 1. Esquema mostrando los distintos flujos que se consideran al modelar la DO

Se considera que la membrana celular es semipermeable, con lo que sólo es posible transferencia de agua y de sales y azúcares naturales (fructosa, glucosa) a través de ella hacia el

espacio extracelular (Transporte Transmembranario Plasmalemmático, TTP), o aún hacia una célula adyacente (Transporte Transmembranario Simplástico, TTS). Una vez que el agua y los constituyentes naturales alcanzan los espacios extracelulares, se transfieren hacia la solución osmótica. A su vez, los solutos de la solución osmótica se transfieren hacia el producto mediante un mecanismo semejante pero de dirección opuesta (Transporte Difusional-Convectivo, TDC). Como la pared celular es permeable a la mayoría de los solutos utilizados en DO, el espacio comprendido entre la membrana celular y la pared celular también es considerado como espacio intercelular a los fines del modelado.

Para describir matemáticamente este sistema, con las hipótesis planteadas, se subdivide la porción de tejido vegetal en N volúmenes iguales y concéntricos. Como el tejido se supone isótropo, todas las células que están en el elemento de volumen Vⁱ están a la misma distancia zⁱ de la interface tejido/solución osmótica, y se considera que muestran una conducta similar (ver Fig.1).

Para un sistema de DO discontínuo (batch) los flujos y balances de masa para el elemento de volumen Vⁱ son:

<u>Volumen Celular V_c^{i} :</u>

	•			
Flujo celular:	$nw_{c}^{1} = kw_{c}$	$v_{\rm c} (\rho w_{\rm c}^{-1} - \rho w_{\rm o}^{-1})$	(3	3)

Balance de masa celular: $d(mw_c^{i})/dt = -nw_c^{i}A_c^{i}$ (4)

donde:

$$\rho w_c^{\ i} = m w_c^{\ i} / V_c^{\ i} \tag{5}$$

$$\rho w_o^{\ i} = m w_o^{\ i} / V_o^{\ i} \tag{6}$$

finalmente, kw_c es el coeficiente de transferencia de masa que tiene en cuenta el transporte transmembranario; $\rho w_c^{\ i} y \rho w_o^{\ i}$ son las concentraciones másicas de agua en el volumen celular $(V_c^{\ i}) y$ en el volumen intercelular $(V_o^{\ i})$, respectivamente. Considerando un comportamiento ideal de las soluciones, dichos volúmenes se calculan según:

$$V_{c}^{\ i} = mw_{c}^{\ i} v_{w} + ms_{c}^{\ i} v_{s} + v_{inso}^{\ i}$$
(7)

$$V_{o}^{i} = mw_{o}^{i}v_{w} + ms_{o}^{i}v_{s} + v_{inso}^{i}$$
(8)

En las ec. (7) y (8) mw y ms son las masas de agua y soluto, respectivamente; $v_w y v_s$ son los volúmenes másicos parciales de agua y soluto, respectivamente, mientras que v_{inso} es el volumen de insolubles.

El área de transferencia A_cⁱ se calcula según la siguiente expresión:

$$A_{c}^{i} = Ncv (V_{c}^{i})^{2/3}$$
 (9)

donde Ncv tiene en cuenta la forma geométrica de la célula y el número de células por unidad de volumen.

La ec. (1) es una expresión muy simplificada a la que se llega aplicando conceptos de termodinámica de procesos irreversibles.

<u>Volumen intercelular V_0^i :</u>

Por simplicidad se considera en esta descripción un solo tipo de soluto:

Flujos intercelulares: $nw_{o}^{i} = Dw \left(\rho w_{o}^{i+1} - \rho w_{o}^{i}\right) / \Delta z^{i} + \rho w_{o}^{i} u^{i}$ (10)

$$ns_{o}^{i} = Ds \left(\rho s_{o}^{i} - \rho s_{o}^{i+1}\right) / \Delta z^{i} + \rho s_{o}^{i} u^{i}$$
(11)

Cambio en la masa intercelular:
$$d(mw_o^{i})/dt = (nw_o^{i+1} A_o^{i+1} - nw_o^{i} A_o^{i}) + nw_c^{i} A_c^{i}$$
 (12)

$$d(ms_o^{i})/dt = (ns_o^{i} A_o^{i} - ns_o^{i+1} A_o^{i+1})$$
(13)

donde

$$\rho s_o^{\ i} = m s_o^{\ i} / V_o^{\ i} \tag{14}$$

 ρs_o^i es la concentración másica del soluto en el volumen intercelular; Dw y Ds son los coeficientes difusivos aparentes para agua y soluto respectivamente y Δz^i es el espesor del elemento de volumen Vⁱ.

El área de transferencia A_oⁱ del volumen intercelular se calcula según:

$$A_o^{i} = Cg \left(V_o^{i}\right)^{2/3} \varepsilon^{i}$$

$$\tag{15}$$

En la ec.(15) Cg tiene en cuenta la geometría del corte de tejido vegetal y ε^{i} representa la fracción de área geométrica correspondiente a los espacios intercelulares:

$$\epsilon^{i} = V_{o}^{i} / (V_{c}^{i} + V_{o}^{i})$$
(16)

El símbolo u¹ representa la velocidad de retroceso del área de transferencia (este área se visualiza como limitado por un frente móvil que retrocede al contraerse el tejido vegetal) y se calcula según:

$$u^{i} = (z_{t}^{i} - z_{t+dt}^{i}) / dt$$
 (17)

Como la mayor resistencia a la transferencia de masa se localiza en los tejidos (control interno), las concentraciones en la solución osmótica se deducen de balances de masa totales:

$$\sum_{i=1}^{i=N} \frac{d(ms_{o}^{i})}{dt} = -\frac{d(ms_{sol}^{osm})}{dt} \qquad \qquad \sum_{i=1}^{i=N} \frac{d(mw_{o}^{i})}{dt} = -\frac{d(mw_{sol}^{osm})}{dt}$$
(18)

De esta manera se llega a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (2N ecuaciones para agua y N ecuaciones para cada soluto) que se resuelve por medio de un algoritmo de cálculo programado en Turbo Pascal.

3. RESULTADOS

Se validó el modelo propuesto contra datos experimentales propios y de bibliografía de deshidratación osmótica de hortifrutícolas en distintas soluciones acuosas:

- Deshidratación de cubos de papa en solución de ClNa-sacarosa (45%-15% p/v). Los datos fueron tomados de Lenart & Flink [7] y publicados en Spiazzi & Mascheroni [10]. Se ajustaron kw = 1.5×10^{-11} m/s y Dw = 1.1×10^{-9} m²/s. Se obtuvo muy buena reproducibilidad de los datos experimentales de WL, SG y de Xs(fracción másica de soluto) en la papa y en la solución.

- Deshidratación de cubos de pera y manzana y de medias frutillas en solución de sacarosa al 67.5% (datos experimentales de Garrote & col. [4]). Los resultados fueron publicados en Spiazzi y Mascheroni [11].

Para la pera y la manzana: Al ser frutas de estructura similar se ajustaron valores iguales o muy parecidos para los coeficientes involucrados: kw = 5.0×10^{-11} m/s y Dw = 0.1×10^{-9} m²/s. Para los azúcares de la fruta: Ds = 0.1×10^{-9} m²/s y para la sacarosa Ds = 0.050×10^{-9} m²/s en la pera y Ds = 0.055×10^{-9} m²/s en la manzana. Se obtuvo muy buena reproducibilidad de los datos experimentales de WL y SG.

Para las frutillas cortadas longitudinalmente: Se ajustaron kw = 2.0×10^{-11} m/s, Dw = 1.5×10^{-9} m²/s y Ds = 0.25×10^{-9} m²/s. Los coeficientes de transferencia para la piel fueron kw =

 $1.8 \ge 10^{-8}$ m/s y ks = 0.3 $\ge 10^{-8}$ m/s. Nuevamente se obtuvo muy buena reproducibilidad de los datos experimentales de WL y SG.

- Deshidratación de discos de manzana en solución de glucosa al 55% a 45 °C (datos de Hough & col. [6]). Se ajustaron kw = 5.0×10^{-11} m/s y Dw = 10.0×10^{-9} m²/s. Para los azúcares de la fruta Ds = 0.1×10^{-9} m²/s y para la glucosa Ds = 1.5×10^{-9} m²/s. Se obtuvo muy buena reproducibilidad de los datos experimentales de WL, SG y VR.

- Deshidratación de frutillas enteras o en mitades en solución de sacarosa (datos propios publicados en Spiazzi & Mascheroni [11]).

Mitades de frutillas en solución al 64.5% a 17°C: De los datos experimentales se ajustaron kw = 1.0×10^{-11} m/s y Dw = 0.9×10^{-9} m²/s. Para los azúcares de la fruta y para la sacarosa Ds = 0.15×10^{-9} m²/s. Los coeficientes de transferencia para la piel fueron kw = 1.08×10^{-8} m/s y para todos los solutos ks = 0.18×10^{-8} m/s. Nuevamente se obtuvo muy buena reproducibilidad de los datos experimentales de WL y SG y de concentración de soluto en la fruta y en la solución.

Frutillas enteras en solución al 62.5% a 16°C: De los datos experimentales se ajustaron kw = 1.0×10^{-11} m/s y Dw = 0.9×10^{-9} m²/s. Para los azúcares de la fruta y para la sacarosa Ds = 0.15×10^{-9} m²/s (todos estos datos son iguales a los de medias frutillas). Los coeficientes de transferencia para la piel fueron kw = 12.0×10^{-8} m/s y para todos los solutos ks = 2.0×10^{-8} m/s. La importante diferencia respecto del caso anterior puede deberse a aproximaciones en el modelado de la forma del fruto. Nuevamente se obtuvo muy buena reproducibilidad de los datos experimentales de WL y SG y de concentración de soluto en la fruta y en la solución.

- Deshidratación de cubos de manzana de 9mm de lado con soluciones de PolietilenGlicol (PEG) de distintos pesos moleculares a 40 °C (datos correspondientes a Saurel [9]). Estos resultados se analizaron parcialmente en Spiazzi y Mascheroni [12] y se muestran acá con mayor detalle que los previamente citados.

Las condiciones experimentales utilizadas fueron los siguientes:

Composición del producto:

SUSTANCIA	AGUA	FRUCTOSA	AZÚCARES	INSOLUBLES
% (p/p)	83	6	7	4

Se utilizaron soluciones osmóticas al 60% (p/p) de PEG200, PEG3000, mezcla 50-50 de PEG200 y PEG3000, PEG10000 y de EtilenGlicol, todas con una relación másica solución/producto igual a 20.

Los parámetros utilizados fueron: fracción de volumen extracelular $\varepsilon = 0.2$ y diámetro celular 200 µm. Los coeficientes de difusión aparentes, coeficientes de transferencia de materia y volúmenes parciales másicos usados fueron:

SUSTANCIA	AGUA	FRUCTOSA	AZÚCARES	ETILENGLICOL	PEG200	PEG300	PEG3000
$D_{j}^{0}(m^{2}/s)x10^{9}$	0.300	0.285	0.230	0.440	0.330	0.060	0.020
$k_{j} (m/s) x 10^{9}$	200	1	0	0	0	0	0
$v (m^3/kg) x 10^3$	1	0.628	0.628	0.887	0.887	0.887	0.887

Teniéndose en cuenta el efecto de la viscosidad del medio sobre el coeficiente de Difusión aparente según:

 $D_{j} = D^{o}_{\ j} \ \rho_{w} \ / \ (A_{j} + B_{j} \ \rho_{w})$

Los valores utilizados para los coeficientes Aj y Bj para cada componente y solución son:

SUSTANCIA	COEFICIENTE	ETILENGLICOL Y PEG200	PEG3000	PEG10000
solutos	$A(kg/m^3)$	3000	6000	15000
	В	2	4	10
agua	A (kg/m^3)	500	583	1250
	В	0.50	0.58	1.25



Figura 2. Pérdida de peso y ganancia de sólidos para cubos de manzana en solución de EtilenGlicol al 60%



Figura 3. Pérdida de peso y ganancia de sólidos para cubos de manzana en solución de PEG200 al 60%



Figura 4. Pérdida de peso y ganancia de sólidos para cubos de manzana en solución de PEG3000 al 60%



Figura 5. Pérdida de peso y ganancia de sólidos para cubos de manzana en solución de mezcla de PEG200 y PEG3000 al 30-30%



Figura 6. Pérdida de peso y ganancia de sólidos para cubos de manzana en solución de PEG10000 al 60%

De los resultados presentados en estas 5 figuras se deduce:

- La muy buena predicción de WL y SG por parte del modelo;

- Que experimentalmente, a medida que se utilizan PEG de mayor Peso Molecular (y por tanto mayor volumen de la molécula) baja la incorporación neta de sólidos. En el extremo del caso de solución de PEG10000 se produce una pérdida neta de solutos. Eso se debe a que la salida de los solutos naturales de la fruta no puede ser contrabalanceada por la entrada del soluto de la solución de DO (el PEG10000), debido al gran tamaño de su molécula que impide su difusión en los espacios extracelulares;

- Que el modelo desarrollado puede simular adecuadamente dichas características.

4. CONCLUSIONES

El modelo propuesto para interpretar la Deshidratación Osmótica de frutihortícolas, basado en los mecanismos de transferencia de materia en tejidos celulares, permite tener en cuenta las variables experimentales: concentración de la solución osmótica, la forma y tamaño del producto, etc.

Un mismo juego de parámetros de ajuste permite simular los resultados experimentales obtenidos en distintas condiciones de operación para los mismos productos.

El modelo brinda además una imagen cualitativa -en acuerdo con observaciones al microscopio- sobre los cambios que ocurren en el tejido celular de un frutihortícola durante su DO.

NOMENCLATURA

- A Area de transferencia, m^2
- Ds Coeficiente de difusión aparente del soluto, m^2 / s
- Dw Coeficiente de difusión aparente del agua, m^2 / s
- K Constante fenomenológica en ec. (1) y (2)
- ks Coeficiente de transferencia transmembranario de soluto, m / s
- kw Coeficiente de transferencia transmembranario de agua, m / s
- m_s Masa de soluto, kg
 - Flujo másico de soluto, kg / (m^3s)
 - nw Flujo másico de agua, kg/(m³s)
 - t Tiempo, s

zⁱ

mw

VR

WL

3

- u Velocidad de retroceso del frente de tejido, m / s
- Vⁱ Elemento de volumen i, m³
- v Volumen másico parcial, m³ / kg

Ganancia de sólidos, %

- Xs Fracción másica de soluto
- Δz Incremento espacial, m
- $\rho_{\rm w}$ Concentración másica de agua, kg / m³

Subíndices

ns SG

- c En la célula
- j Correspondiente al componente j del sistema
- s Del soluto
- t Evaluado al tiempo t

Supraíndice

i Correspondiente al elemento de volumen i

REFERENCIAS

[1] ANDREOTTI R., TOMASICCHIO M. & MACIAVELLI L., Disidratazione parziale della frutta per osmosi. Ind. Conserve Vol. 58 (1983), pp. 90-95.

[2] CONWAY J., CASTAIGNE F., PICARD G. & VOXAN X., Mass transfer considerations in osmotic dehydration of apples. Can. Inst. Food Sci. Technol. Vol. 16, no. 1 (1983), pp. 25-29.

[3] DALLA ROSA M., PINNAVAIA G. & LERICI C.R., La disidratazione della frutta mediante osmosi diretta. Nota II. Esperienze di laboratorio su alcuni generi di frutta. Ind. Conserve Vol.57 (1982), pp. 3-7.
[4] GARROTE R.L., SILVA E.R. & BERTONE R.A., Osmotic concentration at 5°C and 25°C of pear and apple cubes and strawberry halves. Food Sci. Technol. Vol. 25, no. 2 (1992), pp. 133-138.

[5] HAWKES J. & FLINK J.M., Osmotic concentration of fruit slices prior to freeze dehydration. J. Food Proc. Preserv. Vol. 2, no. 4 (1978), pp. 265-284.

[6] HOUGH G., CHIRIFE J. & MARINI C., A simple model for osmotic dehydration of apples. Food Sci. & Technol. Vol. 26, no. 2 (1993), pp. 151-156.

[7] LENART A. & FLINK J.M., Osmotic concentration of potato I. Criteria for the end-point of the osmosis process. J. Food Technol. Vol. 19, no. 1 (1984), pp. 45-63.

[8] MARCOTTE M., TOUPIN C.H. & LE MAGUER M., Mass transfer in cellular tissues. Part I: The mathematical model. J. Food Engng. Vol. 13, no. 3 (1991), pp. 199-220.

[9] SAUREL R., Deshydratation-impregnation par immersion en solutions ternaires: Etude des transports d'eau et de solutes sur gel et produits d'origine animale. Tesis Doctoral Université de Montpellier II (1995).

[10] SPIAZZI E.A. & MASCHERONI R.H., Deshidratación osmótica de productos frutihortícolas. Actas del VI Congreso Argentino de Ciencia y Tecnología de Alimentos (1994), pp. 473-475.

[11] SPIAZZI E.A. & MASCHERONI R.H., Dehydrofreezing. Modelling of mass transfer in osmotic treatment and quality of osmo-frozen products. Proc. 19th Int. Cong. Refrig. Vol. 1 (1995), pp. 299-306.
[12] SPIAZZI E.A. & MASCHERONI R.H., Mass transfer model for osmotic dehydration of fruits and vegetables – I. Development of the simulation model. J. Food Engng. Vol. 34 (1997), pp. 387-410.

[13] TOUPIN C.J., MARCOTTE M. & LE MAGUER M., Osmotically induced mass transfer in plant storage tissues: A mathematical model - Part 1. J. Food Engng. Vol. 10, no. 1 (1989), pp. 13-28.

inso De los insolubles

Reducción de volumen, %

Posición del elemento de volumen i, m

o En el espacio extracelular

Fracción de volumen extracelular

- sol De la solución osmótica
- w Del agua

Masa de agua, kg

Pérdida de peso, %

EXACT SOLUTIONS FOR PHASE CHANGE PROCESSES IN HUMID POROUS HALF SPACES

Eduardo A. SANTILLAN MARCUS^(*) and Domingo A. TARZIA^{(*)(**)}

(*) Departamento de Matemática, FCE, Univ. Austral, Paraguay 1950, (S2000FZF) Rosario, Argentina. (**) CONICET, Argentina. E-mails: Eduardo.Santillan@fce.austral.edu.ar; Domingo.Tarzia@fce.austral.edu.ar

Abstract. We review recent results concerning two different models for freezing (desublimation) in a humid porous half space with a heat flux condition of the type q_0/\sqrt{t} at the fixed face x = 0. Exact solutions for the coupled temperature and moisture distributions are obtained in both models. In each case, an inequality for the positive coefficient q_0 is necessary and sufficient in order to obtain that explicit solution. Furthermore, an equivalence between a phase change problem with a temperature condition at x = 0 and the corresponding phase change process with a heat flux condition of that type on the fixed face for each model is also obtained.

Resumen. Se presenta una revisión de recientes resultados concernientes a dos modelos diferentes de congelamiento (desublimación) de un semi-espacio poroso húmedo con una dada condición de flujo del calor del tipo q_0/\sqrt{t} en el borde fijo x = 0. Se obtienen soluciones exactas para las distribuciones de temperatura y humedad acopladas para ambos modelos. En cada caso, se deduce una desigualdad para el parámetro positivo q_0 que resulta ser una condición necesaria y suficiente para obtener las soluciones explícitas de tipo similaridad. Más aún, se demuestra también una equivalencia entre el problema de cambio de fase con una condición de temperatura constante en x = 0 y el correspondiente problema de cambio de fase con la dada condición de flujo de calor para ambos modelos.

Key Words: Phase change, porous medium, freezing, desublimation, evaporation, similarity method, moisture, exact solutions, free boundary problem, Stefan problem.

Palabras Claves: Cambio de fase, medio poroso, congelamiento, desublimación, evaporación, método de similaridad, húmedad, soluciones exactas, problema de frontera libre, problema de Stefan. AMS Subject Classification: 35R35, 80A22, 35C05.

1.- INTRODUCTION

Heat and mass transfer with phase change problems, taking place in a porous medium, such as evaporation, condensation, freezing, melting, sublimation and desublimation, have wide application in separation processes, food technology, heat and mixture migration in soils and grounds (see [AlSo, Cr, Lun,Ta3]). Due to the non-linearity of the problem, solutions usually involve mathematical difficulties. Only a few exact solutions have been found for idealized cases [LaCl, CaJa, FPT, Li, Mi1, Mi2; Ta1, Ta2]. Mathematical formulation of the heat and mass transfer in capillary porous bodies has been established by Luikov [Lu1, Lu2, Lu3, LuMi]. Two differents models was presented in [Mi1] for solving the problem of evaporation of liquid moisture from a porous medium. For the problem of freezing (desublimation) of humid porous half-space, an exact solution is presented in [Mi2]. An exact solution for the desublimation problem in a porous medium with a temperature condition on the fixed face is also presented by [Li]. Other problems in this direction was given by [Ch, FGPR, FPT]. A large bibliography on free and moving boundary problems for the heat-diffusion equation was given in [Ta3].

34 Santillan Marcus-Tarzia, "Exact solution for ...", MAT - Serie A, 4 (2001), 33-38.

In the following, two different analytical models of freezing (desublimation) of moisture in a humid porous medium with heat flux condition at x = 0 of the type q_0 / \sqrt{t} (with $q_0 > 0$) will be presented. First, a desublimation process, following [Li, SaTa2] will be studied. An analytic model of this process will be defined and exact solutions for the coupled temperature and moisture distributions will be found. Furthermore, the position of the desublimation free boundary that divides the frozen and the humid vapour phases will be found too. An inequality for the coefficient q_0 is necessary and sufficient in order to obtain the corresponding explicit solution. Finally, an equivalence between a phase change problem with a constant temperature condition and a phase change process with a heat flux condition of the that type at the fixed face is also obtained. Secondly, a freezing process, following [Mi1, SaTa1] will be studied and similar conclusion of the first part can be obtained. This article generalizes the results obtained for the temperature distribution in the solid-liquid phase change problem due to [Ta1], for the desublimation problem (coupled of temperature and moisture distributions) in a porous humid half-space with a heat flux condition at the fixed face.

2.- Desublimation in humid porous half spaces

Let us consider a solid, rigid, porous half-space containing a uniform mixture of air and moisture in a vapor form. Initially the porous body is at a uniform moisture concentration C_i and an uniform temperature T_i . The vapor is desublimated by maintaining a heat flux condition of the type q_0/\sqrt{t} on the surface at x=0. For the formulation of the problem, we made the same assumptions as made in [Li]:

(1) In the frozen region, 0 < x < s(t), there is no moisture movement, where s = s(t) locates the desublimation front. In the vapor region, $s(t) < x < +\infty$, there are heat and moisture mass flows; (2) The convective terms in the vapor region are small and may be neglected;

(2) The convective terms in the vapor region are small and may be neglected, (2) The there entrying has negligible for an end of the second state of the second state

(3) The thermophysical properties of the frozen and vapor regions remain respectively constants;(4) The Soret effect, or the thermal diffusion, gives rise to a mass flux which is normally very small relative to the normal Fickian flux, and may be neglected.

The following differential equations describe the process of desublimation:

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} = a_1 \frac{\partial^2 T_1(x,t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < s(t), \quad t > 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial t} = a_2 \frac{\partial^2 T_2(x,t)}{\partial x^2}, \qquad \frac{\partial C}{\partial t} = a_m \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}, \quad s(t) < x < \infty, t > 0$$
(2)

where a_1 and a_2 are the volume averaged thermal diffusivities in the frozen and vapor regions, respectively, and a_m the volume averaged mass diffusivity of the vapor in the porous body. T_1 denotes the temperature in the frozen region, and T_2 and C denote the temperature and the moisture concentration of the vapor region respectively. The initial and boundary conditions and the heat and moisture mass balance at the desublimation front x = s(t) can be described as follows:

$$T_2(\infty,t) = T_2(x,0) = T_i, \qquad C(\infty,t) = C(x,0) = C_i, \quad x > 0, \quad t > 0 \quad ; \quad s(0) = 0 \tag{3}$$

Santillan Marcus-Tarzia, "Exact solution for ...", MAT - Serie A, 4 (2001), 33-38.

$$k_1 \frac{\partial T_1}{\partial x}(0,t) = \frac{q_0}{\sqrt{t}} , t > 0$$
⁽⁴⁾

$$T_1(s(t),t) = T_2(s(t),t) = T_s , \qquad C(s(t),t) = C_s < C_i, \qquad t > 0$$
(5)

$$k_1 \frac{\partial T_1}{\partial x}(s(t),t) - k_2 \frac{\partial T_2}{\partial x}(s(t),t) = C_0 L \dot{s}(t), \quad a_m \frac{\partial C}{\partial x}(s(t),t) = (C_0 - C_s) \dot{s}(t), \quad t > 0$$
(6)

where k_1 and k_2 are the volume averaged thermal conductivities in the frozen and vapor regions respectively, L is the latent heat of desublimation, C_s is the moisture concentration of the vapor phase at the desublimation front and $C_0(C_0 > C_s)$ is the moisture concentration of the frozen phase, which is an unknown of the problem and it must to be determined as a part of the solution. The heat flux condition (4) was firstly considered by [Ta1] for a solid-liquid phase-change problem. The solution of the desublimation process (1)-(6) is given by:

$$T_{1}(x,t) = T_{s} + \frac{q_{0}\sqrt{\pi a_{1}}}{k_{1}} \left(erf\left(x/2\sqrt{a_{1}t}\right) - erf\left(\sqrt{a_{2}/a_{1}}\lambda\right) \right)$$
(7)

$$T_2(x,t) = T_i - \frac{T_i - T_s}{erfc(\lambda)} erfc(x/2\sqrt{a_2 t}), \quad C(x,t) = C_i - \frac{C_i - C_s}{erfc(\sqrt{a_2/a_1}\lambda)} erfc(x/2\sqrt{a_1 t})$$
(8)

$$s(t) = 2\lambda\sqrt{a_2t} \quad , \qquad C_0 = C_s + \sqrt{\frac{a_m}{a_2}} \left(\frac{C_i - C_s}{\sqrt{\pi}\lambda}\right) F_1\left(\sqrt{\frac{a_m}{a_2}}\lambda\right) \tag{9}$$

where erf and erfc are the error and the complimentary error functions, defined by

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{x} \exp(-v^{2}) dv$$
, $erfc(x) = 1 - erf(x)$, $F_{1}(x) = \frac{\exp(-x^{2})}{erfc(x)}$ (10)

and λ is a dimensionless constant which characterizes the desublimation front and must satisfy the following equation

$$q_0 \exp\left(-\frac{a_2}{a_1}\lambda^2\right) - \frac{k_2(T_i - T_s)}{\sqrt{\pi a_2}}F_1(\lambda) - \sqrt{\frac{a_m}{\pi}}(C_i - C_s)LF_1(\sqrt{\frac{a_2}{a_m}}\lambda) = C_s L\sqrt{a_2}\lambda, \lambda > 0.$$
(11)

Theorem 1. We have: (i) If the coefficient q_0 verifies the condition

$$q_0 > \frac{k_2(T_i - T_s)}{\sqrt{\pi a_2}} + (C_i - C_s)L\sqrt{\frac{a_m}{\pi}}, \qquad (12)$$

then there exists one and only one solution $\lambda > 0$ of the equation (11). In this case, the solution of the problem (1)-(6) is given by (7)-(9) for that λ .

(ii) If $q_0 \leq \frac{k_2(T_i - T_s)}{\sqrt{\pi a_2}} + (C_i - C_s)L\sqrt{\frac{a_m}{\pi}}$, then there is no solution of the problem (1)-(6) as a

phase change problem; it is only a heat conduction problem for the initial vapor phase. **Proof.** See [SaTa2].

35

We assume the case when data verify condition (12). Then we can compute $T_1(0,t)$ with is given by

$$T_0 = T_1(0,t) = T_s - \frac{q_0 \sqrt{\pi a_1}}{k_1} \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{a_2}{a_1}}\lambda\right) < T_s$$
(13)

Next, we can enunciate the following property:

Lemma 2. A phase change problem (1)-(6) for temperature and moisture distributions in a porous half-space with a heat flux condition on the surface x = 0 verifying the condition (12), is equivalent to a phase change problem (1)-(3), (5)-(6) with a temperature condition (14) at x = 0. Moreover, the relationship among q_0 and T_0 is given by (13), where λ is the coefficient which characterizes the free boundary given by the unique solution of the equation (11).

3.- Freezing of humid porous half-space

Let us consider the flow of heat and moisture through a porous half-space during freezing [Mi2]. The position of phase change front at time t is given by x = s(t). It divides the porous body into two regions. In the freezing region, 0 < x < s(t), there is no moisture movement and the temperature distribution t_1 is described by the heat equation

$$\frac{\partial t_1}{\partial t} = a_1 \frac{\partial^2 t_1(x,t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < s(t), \quad t > 0 \tag{14}$$

The region $s(\tau) < x < +\infty$ is humid capillary porous body in which there are coupled heat and moisture flows. The process is described by the well known Luikov's system [LuMi] for the case $\varepsilon = 0$ (ε is the phase conversion factor of liquid into vapor):

$$\frac{\partial t_2}{\partial t} = a_2 \frac{\partial^2 t_2(x,t)}{\partial x^2}, \qquad \frac{\partial u}{\partial t} = a_m \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + a_m \delta \frac{\partial^2 t_2}{\partial x^2}, \qquad x > s(t), \quad t > 0$$
(15)

The initial distributions of temperature and moisture are uniform:

$$t_2(x,0) = t_2(+\infty,0) = t_0; \ u(x,0) = u(+\infty,t) = u_0; \ x > 0, t > 0$$
(16)

It is assumed that on the surface of the half-space the heat flux depends on the time in the way (4), like in [Ta1], where $q_0 > 0$ is a coefficient which characterizes the heat flux at the fixed face x = 0. On the freezing front, there exists an equality between the temperatures:

$$t_1(s(t), t) = t_2(s(t), t) = t_v, \quad t > 0 \tag{17}$$

where $t_v < t_0$. Heat and moisture balance at the freezing front yields

$$k_1 \frac{\partial t_1}{\partial x}(s(t),t) - k_2 \frac{\partial t_2}{\partial x}(s(t),t) = u(s(t),t)\rho_2 r \dot{s}(t), \quad t > 0$$
(18)

$$\frac{\partial u}{\partial x}(s(t),t) + \frac{\partial t_2}{\partial x}(s(t),t) = 0, \quad t > 0$$
(19)

If we consider the next transformations (l_0 is a characteristic length):

$$X = x/l_0;$$
 $F_0 = a_2 t/l_0^2$ (Fourier number); $S(F_0) = s(t)/l_0$ (20)

$$T_i(X,F_0) = (t_i(x,t) - t_v)/(t_0 - t_v); i = 1,2 \quad ; \qquad \Theta(X,F_0) = (u_0 - u(x,t))/u_0$$

after some computations we obtain the following solution:

$$T_{1}(X, F_{0}) = \left[\sqrt{\pi a_{1}}q_{0} / k_{1}(t_{0} - t_{v})\right] \left(erf\left(X / 2\sqrt{a_{12}F_{0}}\right) - erf\left(\lambda / \sqrt{a_{12}}\right) \right)$$
(21)

$$T_2(X, F_0) = \left(1 - \operatorname{erf}(\lambda)\right)^{-1} \left(\operatorname{erf}\left(X / 2\sqrt{F_0}\right) - \operatorname{erf}(\lambda)\right), \quad S(F_0) = 2\lambda\sqrt{F_0}$$
(22)

$$\Theta(X, F_0) = 1 - [\exp(\lambda^2 / L_u) / (\sqrt{L_u} \exp(\lambda^2) \operatorname{erfc}(\lambda))] \operatorname{erfc}(X / 2\sqrt{L_u F_0})$$
(23)

where the parameter λ must be determined as the solution of the following equation:

$$\left\{\frac{\sqrt{\pi a_2} q_0}{k_2(t_0 - t_v)}\right\} \exp\left(\frac{-\lambda^2}{a_{12}}\right) - \frac{\exp(-\lambda^2)}{1 - \operatorname{erf}\lambda} = \sqrt{\pi} K_0 \lambda \left(1 - \left[\frac{1 - L_u}{L_u P_n}\right](1 - H(\lambda))\right), \quad \lambda > 0$$
(24)

where L_u , P_n and K_0 are the Kuikov, Posnov and Kossovitch numbres, $a_{12} = a_1/a_2$ and the real functions Q and H are defined by:

$$Q(x) = \sqrt{\pi} x \exp(-x^2)(1 - erf(x)) \quad ; \quad H(x) = \frac{Q(x/L_u)}{Q(x)}$$
(25)

We can enunciate the following property:

Theorem 3: We have:(i) If

$$q_0 > \frac{k_2(t_0 - t_v)}{\sqrt{\pi a_2}} \equiv q_{00} \tag{26}$$

then there exists one and only one solution $\lambda > 0$ of the equation (24).

(ii) If $q_0 \le q_{00}$ then there is no solution of the problem (14)-(19) as a phase change problem; it is only a heat conduction problem for the initial phase. Moreover, the limit case $q_0 = q_{00}$ can be interpretated as the limit of the solution for the case $q_0 > q_{00}$ when $r \to \infty$.

Proof. See [SaTa1].

If we consider the case where data verify condition (26) then we can compute the temperature at the fixed x = 0 which is given by:

$$t_{s} = t_{1}(0,t) = t_{v} - \sqrt{\pi \ a_{1}} \frac{q_{0}}{k_{1}} erf\left(\frac{\lambda}{\sqrt{a_{12}}}\right) < t_{v} \ . \tag{27}$$

Next, we can enunciate the following property:

38 Santillan Marcus-Tarzia, "Exact solution for ...", MAT - Serie A, 4 (2001), 33-38.

Lemma 4. A freezing problem for temperature and moisture distributions in a porous half-space with a heat flux condition on the surface x = 0 of the type (4), is equivalent to a phase change problem with a temperature condition at x=0 considering $t_1(0,\tau) = t_s < t_v$. Moreover, the relationship among q_0 and t_s is given by (27) where λ is the coefficient which characterizes the free boundary which is the unique solution of a certain equation.

Remark 1. An inequality for the coefficient λ which characterizes the phase-change interphase can be obtained for both problems (in sections 2 and 3) when a constant temperature boundary condition is impossed at x = 0 [SaTa1, SaTa2].

References

[AlSo] Alexiades, V. - Solomon, A. D., "Mathematical modeling of melting and freezing processes", Hemisphere – Taylor & Francis, Washington (1993).

[CaJa] Carslaw, H. S. - Jaeger, J. C., "Conduction of heat in solids", Clarendon Press, Oxford (1959)

[Ch] Cho, S. H., "An exact solution of the coupled phase change problem in a porous medium", Int. J. Heat and Mass Transfer, 18, (1975), 1139-1142.

[Cr] Crank, J, "Free and moving boundary problems", Clarendon Press, Oxford (1984).

[FGPR] Fasano, A. - Guan, Z. - Primicerio, M. - Rubinstein, I., "Thawing in saturated porous media", Meccanica, 28 (1993), 103-109.

[FPT] Fasano, A. - Primicerio, M. - Tarzia, D. A., "Similarity solutions in class of thawing processes", Math. Models Methods Appl. Sci., 9(1999), 1-10.

[LaCl] Lamé, G. - Clapeyron, B. P., "Memoire sur la soldification par refroidissement d'un globe liquide", Annales Chimie Physique, 47 (1831), 250-256.

[Li] Lin, S, "An exact solution of the desublimation problem in a porous medium", Int. J. Heat and Mass Transfer, 25, (1982), 625-630.

[Lu1] Luikov, A. V., "Heat and mass transfer in capillary-porous bodies", Pergamon, Oxford (1966).

[Lu2] Luikov, A. V., "Systems of differential equations of heat and mass transfer in capillary porous bodies", Int. J. Heat Mass Transfer, 18 (1975), 1-14.

[Lu3] Luikov, A. V., "Heat and mass transfer", MIR Publishers, Moscow (1978).

[LuMi] Luikov, A. V. – Mikhailov Yu A., "Theory of energy and mass transfer", Pergamon, New York (1968).

[Lun] Lunardini, V. J., "Heat transfer with freezing and thawing", Elsevier, Amsterdam (1991).

[Mi1] Mikhailov, M. D., "Exact solution of temperature and moisture distributions in a porous half-space with moving evaporation front", Int. J. Heat Mass Transfer, 18 (1975), 797-804.

[Mi2] Mikhailov, M. D., "Exact solution for freezing of humid porous half-space", Int. J. Heat Mass Transfer, 19 (1976), 651-655.

[SaTa1] Santillan Marcus, E. A. and Tarzia, D. A., "Explicit solution for freezing of humid porous halfspace with a heat flux condition", Int. J. Eng. Sci., 38 (2000), 1651-1665.

[SaTa2] Santillan Marcus, E. A. and Tarzia, D. A., "Explicit solutions for the desublimation problem in a humid porous half-space with a heat flux condition", Información Tecnológica, 11 # 4 (2000), 19-24.

[Ta1] Tarzia, D. A., "An inequality for the coefficient σ of the free boundary $s(t) = 2\sigma\sqrt{t}$ of the Neumann solution for the two-phase Stefan problem", Quart. Appl. Math., 39 (1981), 491-497.

[Ta2] Tarzia, D. A., "Soluciones exactas del problema de Stefan unidimensional", Cuadern. Inst. Mat. B. Levi, 12 (1985), 5 - 36.

[Ta3] Tarzia D. A., "A bibliography on moving free-boundary problems for the heat diffusion equation. The Stefan and related problems", MAT-SerieA, # 2 (2000), (with 5869 titles on the subject, 300 pages). See also <u>www.austral.edu.ar/MAT-SerieA/2(2000)/</u>.

INFORMACION PARA LOS AUTORES

Los trabajos han de estar escritos en español o inglés. Excepcionalmente el Director y el Comité Editorial podrán admitir trabajos escritos en otros idiomas ampliamente utilizados. Deberá presentarse el texto mecanografiado o elaborado mediante un procesador de textos, con caracteres de 12 puntos, en un rectángulo de 16cm×24cm y en una sola cara del papel. Trabajos escritos en LATEX o en MS-WORD serán bienvenidos y en ese caso el autor deberá adjuntar un diskette con los archivos correspondientes, o bien enviarlos por correo electrónico.

En cada trabajo deberá constar, en la primer página, a partir de la quinta línea, el título en letras mayúsculas y sin punto final, el nombre de el o los autores, su identificación institucional y su correspondiente dirección postal y electrónica. Se acompañará un resumen que no exceda las 200 palabras en español y otro en inglés, añadiendo en ambos las palabras claves. También se solicita la inclusión de la corresponiente AMS-Mathematics Subject Classification.

Las tablas y gráficos deberán insertarse en el texto y estar numeradas en forma correlativa.

Las referencias bibliográficas se compondrán sólo de los trabajos mencionados en el texto y se incluirán al final, por orden alfabético de autores y en orden cronológico, si existieran varios trabajos del mismo autor; cada una precedida por el correspondiente número de orden, entre corchetes. Las citas en el texto se efectuarán según los siguientes modelos: [1]; Caffarelli & Vazquez [1]; Caffarelli & Vazquez (1995, [1]). Y en la referencia final:

[1] CAFFARELLI L. A. & VAZQUEZ J.L., A free-boundary problem for the heat equation arising inflame propagation, Trans. Amer. Math. Soc., 347 (1995), pp. 411-441.

[2] FASANO A. & PRIMICERIO M., Blow-up and regularization for the Hele-Shaw problem, in Variational and free boundary problems, Friedman A. & Spruck J. (Eds.), IMA Math. Appl. Vol. 53, Springer Verlag, New York (1993), pp. 73-85.

[3] RODRIGUES J. F., *Obstacle problems in mathematical physics*, North-Holland Mathematics Studies N. 134, North-Holland, Amsterdam (1987).

Al final de la última página deberán dejarse al menos 2 líneas en blanco para incluir los datos de recepción.

INTERCAMBIOS

Departamento de Matemática – Biblioteca, Servicio de Canje Facultad de Ciencias Empresariales -Universidad Austral Paraguay 1950, S2000FZF ROSARIO, ARGENTINA

NUMEROS APARECIDOS Y POR APARECER

Serie A:

• #1(2000): E.Mascolo – F.Siepe, "Functionals of the Calculus of Variations with non standard growth conditions".

- #2(2000): D.A.Tarzia, "A Bibliography on Moving-Free Boundary Problems for the Heat-Diffusion Equation. The Stefan and Related Problems".
- #3(2001): D.A.Tarzia (Ed.), "VI Seminario sobre Problemas de Frontera Libre y sus Aplicaciones", Primera Parte.
- #4(2001): D.A.Tarzia (Ed.), "VI Seminario sobre Problemas de Frontera Libre y sus Aplicaciones", Segunda Parte.
- #5(2001): D.A.Tarzia (Ed.), "VI Seminario sobre Problemas de Frontera Libre y sus Aplicaciones", Tercera Parte.
- #6(2002): F.Talamucci, "Some Problems Concerning with Mass and Heat Transfer in a Multi-Component System".

Serie B:

• #1(2000): D.A.Tarzia, "Cómo pensar, entender, razonar, demostrar y crear en Matemática".

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA FACULTAD DE CIENCIAS EMPRESARIALES UNIVERSIDAD AUSTRAL Paraguay 1950 - S2000FZF ROSARIO - ARGENTINA TEL: (54) 341-481-4990 FAX: (54) 341-481-050 E-mail: Domingo.Tarzia@fce.austral.edu.ar