

## SOLUCIÓN NUMÉRICA DE UN PROBLEMA DE STEFAN CON CONDUCTIVIDAD DEPENDIENTE DE LA TEMPERATURA Y UN TÉRMINO CONVECTIVO

Mariela C. Olgún<sup>a</sup>, María C. Sanziel<sup>a,b</sup> y Domingo A. Tarzia<sup>c</sup>

<sup>a</sup>FCEIA-UNR, Avda. Pellegrini 250, Rosario, Argentina, [mcolguin@fceia.unr.edu.ar](mailto:mcolguin@fceia.unr.edu.ar),  
<http://www.fceia.unr.edu.ar>

<sup>b</sup>Consejo de Investigaciones UNR, [sanziel@fceia.unr.edu.ar](mailto:sanziel@fceia.unr.edu.ar),

<sup>c</sup>CONICET - FCE Universidad Austral, Paraguay 1950, Rosario, Argentina, [DTarzia@austral.edu.ar](mailto:DTarzia@austral.edu.ar),  
<http://www.austral.edu.ar>

**Palabras Clave:** frontera libre, Problema de Stefan, conductividad térmica no-lineal, solución numérica, diferencias finitas

**Resumen.** En este trabajo se obtiene la solución numérica de un problema de Stefan a una fase, planteado en un material semi-infinito, en el que la conductividad térmica depende de la temperatura y en el que se considera además la presencia de un término convectivo, en el borde fijo se supone una condición de flujo de calor. Para ello se desarrolla un algoritmo derivado del análisis teórico de este problema de frontera libre y un método de diferencias finitas con paso espacial variable. Se implementan ambos procedimientos utilizando el software Scilab y se comparan los valores numéricos obtenidos.

## 1. INTRODUCCIÓN

Los problemas de conducción del calor con cambio de fase, aparecen frecuentemente en procesos industriales y en otros problemas de interés tecnológico (Alexiades y Solomon, 1983; Athanasopoulos, 1999; Fasano y Primicerio, 1986; Figueiredo et al., 2006; Kenmochi, 2000). Por este motivo el modelado de este tipo de sistema es de gran significación desde el punto de vista de la matemática aplicada. Una amplia bibliografía sobre el tema puede verse en Tarzia (2000).

En este trabajo se considera un problema de Stefan a una fase, planteado en un material semi-infinito, en el que la conductividad térmica depende de la temperatura y en el que aparece un término convectivo. En el borde fijo  $x = 0$  se impone una condición de flujo del tipo  $-\frac{q_0}{\sqrt{t}}$  ( $q_0 > 0$ ) y se supone que la temperatura de cambio de fase es  $\theta_f = 0$ . Se pretende determinar la evolución del frente de cambio de fase  $x = s(t)$  y la distribución de temperatura  $\theta(x, t)$ .

Se estudia (Natale y Tarzia, 2008; Rogers y Broadbridge, 1988) el siguiente problema de frontera libre:

$$\rho c \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k(\theta, x) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) - v(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x}, \quad 0 < x < s(t), \quad t > 0, \quad (1)$$

$$k(\theta(0, t), 0) \frac{\partial \theta}{\partial x}(0, t) = -\frac{q_0}{\sqrt{t}}, \quad q_0 > 0, \quad t > 0, \quad (2)$$

$$k(\theta(s(t), t), s(t)) \frac{\partial \theta}{\partial x}(s(t), t) = -\rho l \dot{s}(t), \quad t > 0 \quad (3)$$

$$\theta(s(t), t) = 0, \quad t > 0, \quad s(0) = 0. \quad (4)$$

Los coeficientes  $c$  ( $[c] = \frac{m^2}{C s^2}$ ),  $\rho$  ( $[\rho] = \frac{kg}{m^3}$ ) y  $l$  ( $[l] = \frac{m^2}{s^2}$ ) son respectivamente, el calor específico, la densidad y el calor latente de fusión del medio; la conductividad térmica  $k(\theta, x)$  y la velocidad generalizada  $v(\theta)$  están dadas por las siguientes expresiones (Natale y Tarzia, 2008; Rogers y Broadbridge, 1988):

$$k(\theta, x) = \rho c \frac{1 + dx}{(a + b\theta)^2} \quad v(\theta) = \rho c \frac{d}{2(a + b\theta)^2}, \quad (5)$$

siendo  $b$  ( $[b] = \frac{\sqrt{s}}{mC}$ ) un parámetro real y  $a$  ( $[a] = \frac{\sqrt{s}}{m}$ ) y  $d$  ( $[d] = \frac{1}{m}$ ) parámetros reales positivos. Este tipo de conductividad térmica ha sido considerada en numerosos trabajos, en tanto que la ecuación de transporte no-lineal (1) aparece conectada con flujos no-saturados en medios heterogéneos (Bluman y Kumei, 1980; Broadbridge, 1986).

En la Sección 2 se presentan resultados teóricos acerca de la existencia y unicidad de la solución del problema tratado.

En la Sección 3 se exhibe un algoritmo, derivado de los resultados teóricos, que permite calcular los valores numéricos de la solución y también se describe un método de diferencias finitas con paso espacial variable con el cual aproximar la solución del problema tratado.

En la Sección 4 se muestran los resultados obtenidos implementando el algoritmo “teórico” y el método de diferencias finitas, a través del software Scilab, programa de código abierto.

En la Sección 5 se muestran las conclusiones.

## 2. RESULTADOS TEÓRICOS

Para el tratamiento del Problema (1)-(4) en Natale y Tarzia (2008) se realiza en primer lugar la siguiente transformación:

$$y = \frac{2}{d}[(1 + dx)^{\frac{1}{2}} - 1], \quad \bar{S}(t) = \frac{2}{d}[(1 + ds(t))^{\frac{1}{2}} - 1], \quad \bar{\theta}(y, t) = \theta(x, t).$$

Luego se define la nueva transformación:

$$y^* = y^*(y, t) = \int_{\bar{S}(t)}^y (a + b\bar{\theta}(\sigma, t))d\sigma + (-\frac{l}{c}b + a)\bar{S}(t)$$

$$\theta^*(y^*, t^*) = \frac{1}{a + b\bar{\theta}(y, t)}, \quad t^* = t$$

$$S^*(t^*) = y^* \Big|_{y=\bar{S}(t)} = (-\frac{l}{c}b + a)\bar{S}(t)$$

y la variable de semejanza:

$$\xi^* = \frac{y^*}{\sqrt{2\gamma^*t^*}}$$

donde  $\gamma^*$  es una constante positiva adimensional a ser determinada. Las nuevas funciones incógnita:

$$\Theta^*(\xi^*) = \theta^*(y^*, t^*), \quad S^*(t^*) = \sqrt{2\gamma^*t^*}$$

satisfacen entonces el siguiente problema diferencial ordinario:

$$\frac{d^2\Theta^*}{d\xi^{*2}} + \gamma^*\xi^* \frac{d\Theta^*}{d\xi^*} = 0, \quad -bq_0^*\sqrt{\frac{2}{\gamma^*}} < \xi^* < 1 \tag{6}$$

$$\frac{d\Theta^*}{d\xi^*}(-bq_0^*\sqrt{\frac{2}{\gamma^*}}) = \sqrt{2\gamma^*}q_0^*b \Theta^*(-bq_0^*\sqrt{\frac{2}{\gamma^*}}) \tag{7}$$

$$\frac{d\Theta^*}{d\xi^*}(1) = \alpha^*\gamma^* \tag{8}$$

$$\Theta^*(1) = \frac{c}{l} \tag{9}$$

con

$$q_0^* = \frac{q_0}{\rho c}, \quad \alpha^* = \frac{lb}{a(-lb + ca)}.$$

La solución de la ecuación diferencial (6) está dada por:

$$\Theta^*(\xi^*) = A \operatorname{erf}(\sqrt{\frac{\gamma^*}{2}}\xi^*) + B$$

donde

$$A = \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\gamma^*}{2}} \alpha^* \exp(\frac{\gamma^*}{2}), \quad B = \frac{1}{a} - \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\gamma^*}{2}} \alpha^* \exp(\frac{\gamma^*}{2}) \operatorname{erf}(\sqrt{\frac{\gamma^*}{2}}).$$

y

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-u^2) du.$$

La constante desconocida  $\gamma^*$  resulta ser la solución de la ecuación:

$$\alpha^* \sqrt{\gamma^*} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\theta_f^*}{g(bq_0^*, \frac{1}{\sqrt{\pi}}) + \operatorname{erf}(\sqrt{\frac{\gamma^*}{2}})} \exp(-\frac{\gamma^*}{2}), \quad \gamma^* > 0, \quad (10)$$

donde

$$g(x, p) = \operatorname{erf}(x) + p \frac{\exp(-x^2)}{x}, \quad x > 0, \quad p \in \mathbb{R}.$$

En el mencionado trabajo (Natale y Tarzia, 2008) se prueba que: Si  $b > 0$  y  $a > \frac{bl}{c}$  ó  $b < 0$ , entonces existe una única solución del problema de frontera libre (1)-(4) dada por:

$$\theta(x, t) = \frac{1}{b} \left[ \frac{1}{B + A \operatorname{erf}(Y(\frac{2}{a}(\sqrt{1+dx}-1), t))} - a \right], \quad 0 < x < s(t), \quad t > 0 \quad (11)$$

$$s(t) = \frac{c\delta}{ac-lb} \left[ 2\sqrt{t} + \frac{cd\delta}{ac-lb} t \right] \quad (12)$$

siendo

$$\delta = \sqrt{\frac{\gamma^*}{2}} \quad (13)$$

y la función  $Y = Y(y, t)$  la solución del problema de Cauchy en la variable  $y$ :

$$\frac{\partial Y}{\partial y}(y, t) = \frac{1}{2\sqrt{t}} \left( \frac{1}{B + A \operatorname{erf}(Y(y, t))} \right), \quad 0 < y < \bar{S}(t), \quad t > 0 \quad (14)$$

$$Y(0, t) = -bq_0^*, \quad (15)$$

donde  $t \geq t_0 > 0$  es un parámetro, siendo  $t_0$  cualquier tiempo positivo dado.

### 3. MÉTODOS NUMÉRICOS

#### 3.1. Algoritmo derivado de los Resultados Teóricos

Teniendo en cuenta los resultados teóricos expuestos en la Sección 2, para obtener los valores numéricos de la solución explícita (11)-(12) se propone el siguiente

#### ALGORITMO

PASO 1: Calcular  $\delta$  en (13) a partir de la solución  $\gamma^*$  de la ecuación (10);

PASO 2: Fijado  $t_0 > 0$  para cada  $t \geq t_0$ , calcular  $s(t)$  de la expresión (12);

PASO 3: Calcular  $Y = Y(x, t)$  como la solución del problema de Cauchy (14)-(15);

PASO 4: Calcular la temperatura  $\theta = \theta(x, t)$  a partir de la expresión (11).

### 3.2. Método de diferencias finitas con grilla variable

Considerando que el problema tratado, descrito por las ecuaciones (1) - (4), es un problema de frontera libre, el dominio resulta variable en el tiempo y es por ello necesaria la utilización de una malla variable para obtener una solución numérica que aproxime a  $\{\theta(x, t), s(t)\}$ . La idea del método, consiste en fijar un paso de tiempo  $\Delta t$  y definir la grilla de modo que la frontera libre pase sobre los nodos de ésta (Caldwell y Savovic, 2002; Crank, 1984; Torres y Turner, 2001).

Se definen:

$t_1 > 0$  (tiempo inicial),  $\Delta t > 0$  paso de tiempo constante,  $t_j = t_1 + (j-1)\Delta t$ ,  $j = 2, \dots, j_{max}$ ,  $x_1 = 0$ ,  $s_1 = s(t_1)$ . Suponiendo que el segmento  $[0, s_1]$  se encuentra particionado en  $(n-1)$  intervalos espaciales, para  $n \in \mathbb{N}$ ,  $n > 1$  se notan:

$$\Delta x_{i-1}^1 = \frac{s_1}{n-1}, \quad x_i^1 = (i-1) \Delta x_{i-1}^1, \quad i = 2, \dots, n.$$

Mediante el algoritmo descrito en el párrafo anterior, se calcula  $\theta_i^1 = \theta(x_i, t_1)$  con  $i = 1, \dots, n-1$  y de la ecuación (4) se tiene que  $\theta_n^1 = \theta(x_n, t_1) = 0$ .

Para  $j = 2, \dots, j_{max}$ ,  $\Delta x_i^j = \Delta x_{i-1}^{j-1}$ ,  $i = 1, \dots, n+j-3$ , a partir de la ecuación (3) se calcula

$$\Delta x_{n+j-2}^j = \frac{c}{a^2} (1 + ds_{j-1}) \frac{\theta_{n+j-3}^{j-1} \Delta t}{\Delta x_{n+j-3}^j l}. \tag{16}$$

resultando  $x_i^j = x_{i-1}^j + \Delta x_{i-1}^j$ ,  $i = 1, \dots, n+j-1$ ,  $\theta_i^j = \theta(x_i, t_j)$ .

Así definidos los pasos temporal y espacial, se discretizan las ecuaciones (1) y (2) con un esquema en diferencias finitas implícito en el tiempo y se obtiene un sistema no lineal de ecuaciones de orden  $n+j-2$  de la forma:

$$F^j(\theta^j) = 0$$

siendo  $\theta^j = (\theta_1^j, \theta_2^j, \dots, \theta_{n+j-2}^j)$  y  $F^j = (f_1^j, f_2^j, \dots, f_{n+j-2}^j)$  un campo vectorial con:

$$f_1^j(\theta^j) = \frac{\rho c}{\Delta x_1} \frac{\theta_2^j - \theta_1^j}{(a + b\theta_1^j)^2} + \frac{q_0}{\sqrt{t_j}}$$

y para  $i = 2, \dots, n+j-2$

$$f_i^j(\theta^j) = \theta_i^{j-1} - \theta_i^j + \Delta t \left[ \frac{d}{2(a+b\theta_i^j)^2} c_i^j - 2b \frac{1+dx_i}{(a+b\theta_i^j)^3} (c_i^j)^2 + \frac{1+dx_i}{(a+b\theta_i^j)^2 \Delta x_i} \left( c_i^j - \frac{\theta_i^j - \theta_{i-1}^j}{\Delta x_{i-1}} \right) \right]$$

con

$$c_i^j = \frac{\theta_{i+1}^j - \theta_i^j}{\Delta x_i}.$$

Este sistema se resuelve aplicando el método iterativo de Newton para funciones vectoriales. Es decir, conociendo  $\theta^{j-1}$

- se define  $w^{(1)} = \theta^{j-1}$

- se plantea el sistema lineal asociado:

$$J(w^{(r-1)})h = -F^j(w^{(r-1)})$$

donde  $J$  es la matriz Jacobiana del campo  $F$  y  $h \in \Re^{n+j-2}$

- $w^{(r)} = w^{(r-1)} + h$
- se hace  $r = r + 1$  hasta  $r^*$ , iteración en la que se alcanza una tolerancia prefijada
- se define  $\theta^j = w^{(r^*)}$

**Observación:** la presencia del término convectivo en la ecuación (1) trae como consecuencia que la matriz  $J$  resulte ser una matriz mal condicionada. Más aún, puede observarse que su número de condición empeora en cada paso temporal y cuando se consideran valores de  $n$  más grandes, ya que aumenta su orden.

#### 4. RESULTADOS NUMÉRICOS

En esta Sección se implementan en Scilab los algoritmos descritos en la Sección anterior. Con el fin de comparar los valores de las soluciones numéricas obtenidas, se considera un material cuyas constantes térmicas son:

$$c = 4187 \frac{J}{kgC} \text{ calor específico;}$$

$$l = 394000 \frac{J}{kg} \text{ calor latente de fusión;}$$

$$\rho = 1000 \frac{kg}{m^3} \text{ densidad de masa volumétrica.}$$

Los parámetros  $a$ ,  $b$  y  $d$  en las expresiones (5) se suponen:

$$a = 42,48 \frac{\sqrt{s}}{m}; \quad b = -1/10 \frac{\sqrt{s}}{mC}; \quad d = 60 \frac{1}{m}.$$

Con  $\Delta t = 10$  seg,  $t_j = (j - 1)\Delta t$ ,  $j = 1, \dots, 181$  y  $n = 30$  se analizan cuatro casos para diferentes valores de  $q_0$  en la condición de borde (2).

Para medir las diferencias entre las soluciones obtenidas por ambos métodos numéricos, se calculan los errores porcentuales  $E_s$  entre los valores de las fronteras libres  $s_{teo}$  (correspondiente al algoritmo de la Sección 3.1) y  $s_{DF}$  (correspondiente al algoritmo de la Sección 3.2). En la ecuación (16) puede observarse la íntima relación entre la discretización espacial y la frontera libre.

Se grafican dichas fronteras libres y para el instante final de tiempo, se grafican también las distribuciones de temperatura  $T_{teo}$  y  $T_{DF}$ .

Las figuras que aparecen al final del trabajo, muestran los resultados numéricos según el siguiente detalle:

$$\text{CASO I: (Fig. 1 y 2)} \quad q_0 = 48642,35 \frac{kg}{s^{\frac{3}{2}}} \quad \text{y} \quad E_s = 2,79 \%$$

$$\text{CASO II: (Fig. 3 y 4)} \quad q_0 = 69954,62 \frac{kg}{s^{\frac{3}{2}}} \quad \text{y} \quad E_s = 2,97 \%$$

$$\text{CASO III: (Fig. 5 y 6)} \quad q_0 = 102136,22 \frac{kg}{s^{\frac{3}{2}}} \quad \text{y} \quad E_s = 2,88 \%$$

CASO IV: (Fig. 7 y 8)  $q_0 = 128887,07 \frac{kg}{s^2}$  y  $E_s = 3,91 \%$ .

Cuando se tomaron discretizaciones espaciales más finas (es decir valores de  $n$  más grandes), los errores porcentuales no disminuyeron. Esto es, seguramente, consecuencia del mal condicionamiento de la matriz  $J$  observado en la Sección anterior, el cual afecta a la solución del sistema lineal que debe resolverse en cada paso temporal.

## 5. CONCLUSIONES

Se obtuvieron valores numéricos de la solución  $\{\theta(x, t), s(t)\}$  del Problema (1)-(4) a través de la implementación de dos procedimientos:

1. un algoritmo derivado directamente del análisis teórico del problema, efectuado en [Natale y Tarzia \(2008\)](#);
2. un método de diferencias finitas con paso espacial variable.

Se observó que, mediante el primer procedimiento pueden encontrarse valores de la solución para cualquier instante de tiempo  $t > 0$ .

En el caso del segundo procedimiento, al aplicarse el método de Newton para la resolución del sistema no-lineal al que se arriba, se generan en cada iteración sistemas lineales cuyas matrices de coeficientes son mal condicionadas y ese mal condicionamiento empeora a medida que se avanza en el tiempo. Por este motivo este método pudo ser empleado sólo en intervalos reducidos de tiempo.

En el intervalo de tiempo común a la aplicación de ambos procedimientos se compararon los valores de las soluciones y se obtuvieron resultados aceptables (con errores menores al 5 %).

En consecuencia, se puede afirmar que el algoritmo propuesto a partir del estudio teórico, proporciona una herramienta eficiente para el cálculo de la solución numérica del problema de frontera libre considerado.

## 6. AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por los proyectos PIP N. 0460 de CONICET-UA (Rosario-Argentina) y "Tratamiento Numérico de Problemas de Frontera Libre"(cód. ING305 UNR).

## REFERENCIAS

- Alexiades V. y Solomon A. *Mathematical modeling of melting and freezing processes*. Hemisphere, Washington, 1983.
- Athanasopoulos I. *Free boundary problems: Theory and applications*. CRC Press, Boca Raton, 1999.
- Bluman G. y Kumei S. On the remarkable nonlinear diffusion equation. *J.Math. Phys.*, 21:1019–1023, 1980.
- Broadbridge P. Non-integrability of non-linear diffusion-convection equations in two spatial dimensions. *J. Phys. A: Math.*, 19:1245–1257, 1986.
- Caldwell J. y Savovic S. Numerical solution of stefan problem by variable space grid and boundary immobilization method. *J.Math.Sci.*, 13:67–79, 2002.
- Crank J. *Free and moving boundary problems*. Clarendon Press, 1984.
- Fasano A. y Primicerio M. Nonlinear diffusion problems. *Lecture Notes in Math. N.1224*, 1986.

- Figueiredo I., J.F. R., y L. S. *Free Boundary Problems: Theory and Applications*, volumen 154. ISNM - International Series of Numerical Mathematics, Birkhäuser, 2006.
- Kenmochi N. Free boundary problems: Theory and applications, i,ii. *Gakuto International Series: Mathematical Sciences and Applications*, 13, 14, 2000.
- Natale M. y Tarzia D. The classical one-phase stefan problem with temperature-dependent thermal conductivity and a convective term. *MAT-Serie A*, 15:1–16, 2008.
- Rogers C. y Broadbridge P. On a linear moving boundary problem with heterogeneity: application of reciprocal transformation. *J. Appl. Math. Phys. (ZAMP)*, (39):122–129, 1988.
- Tarzia D. A bibliography on moving - free boundary problems for the heat-diffusion equation. the stefan and related problems. *MAT-Serie A*, 2:1–297, 2000.
- Torres G. y Turner C. Método de diferencias finitas para un problema de bingham unidimensional. *MAT-Serie A*, 5:11–26, 2001.

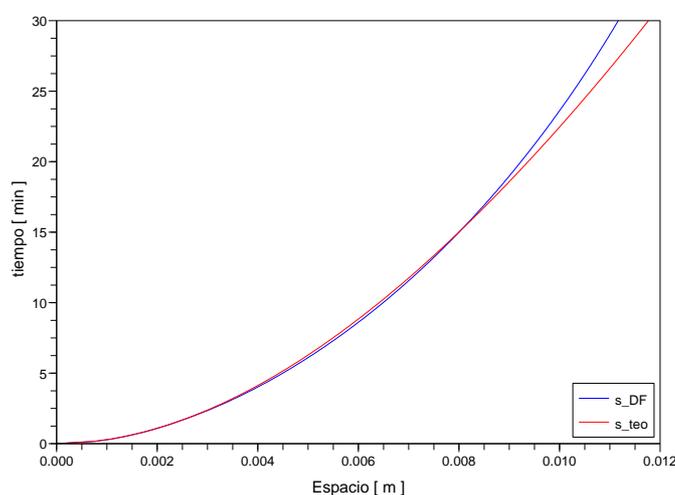


Figura 1: Frontera libre ( $q_0 = 48642,35 \frac{kg}{s^2}$ )

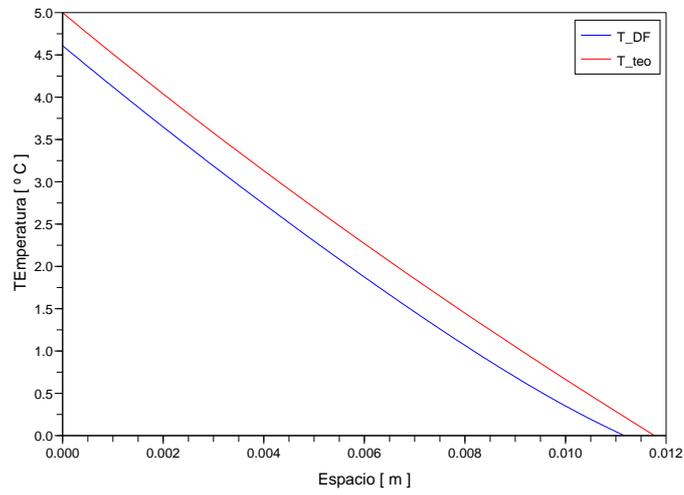


Figura 2: Temperatura en el instante final de tiempo ( $q_0 = 48642,35 \frac{kg}{s^2}$ )

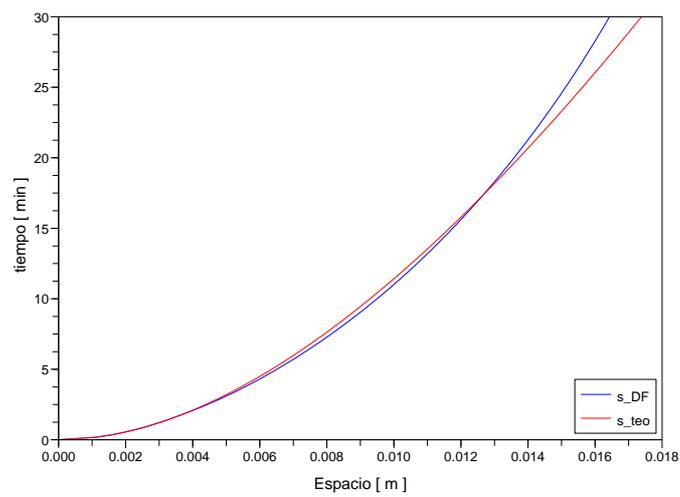


Figura 3: Frontera libre ( $q_0 = 69954,62 \frac{kg}{s^2}$ )

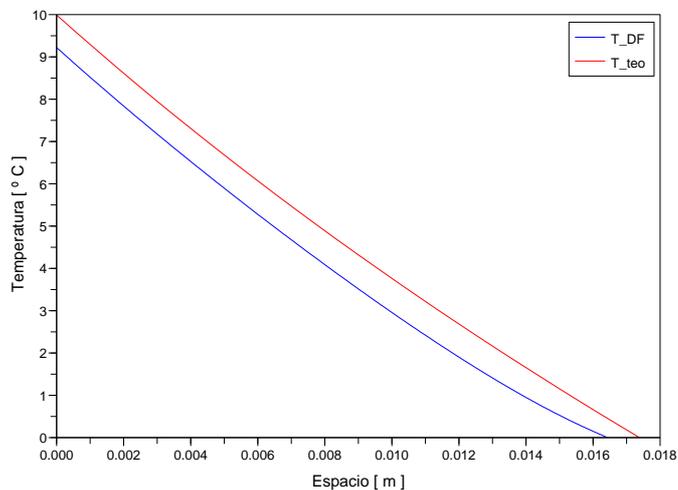


Figura 4: Temperatura en el instante final de tiempo ( $q_0 = 69954,62 \frac{kg}{s^2}$ )

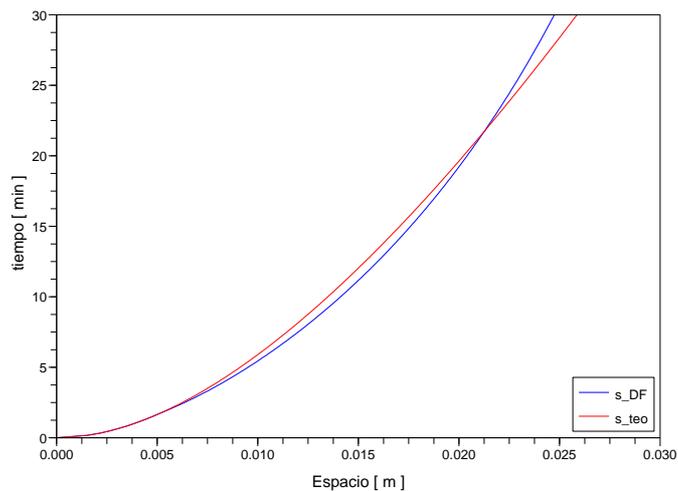


Figura 5: Frontera libre ( $q_0 = 102136,22 \frac{kg}{s^2}$ )

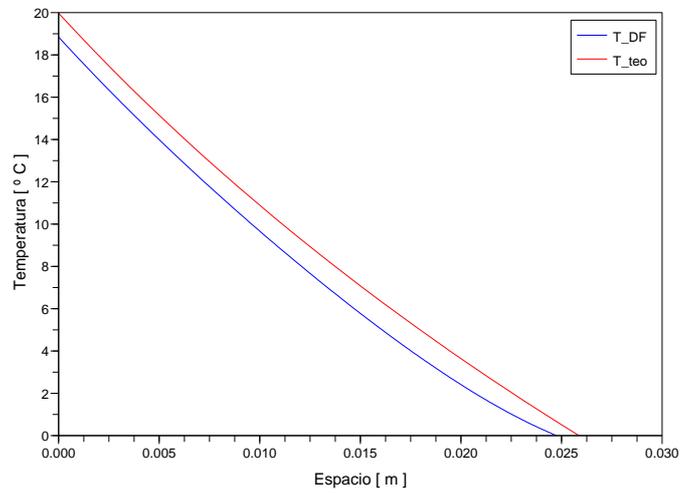


Figura 6: Temperatura en el instante final de tiempo ( $q_0 = 102136,22 \frac{kg}{s^2}$ )

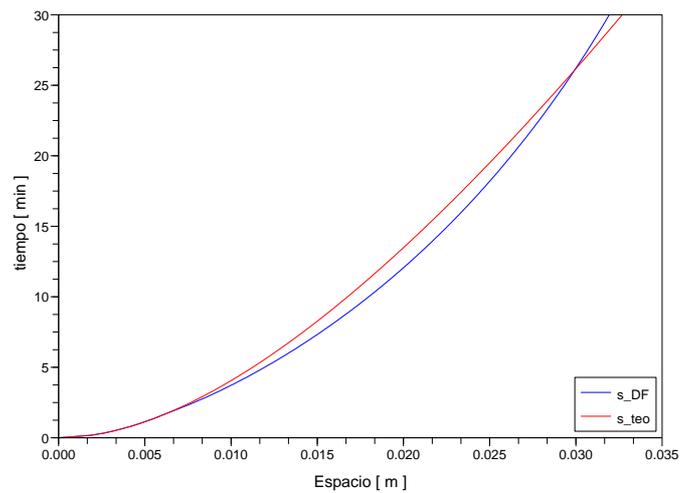


Figura 7: Frontera libre ( $q_0 = 128887,07 \frac{kg}{s^2}$ )

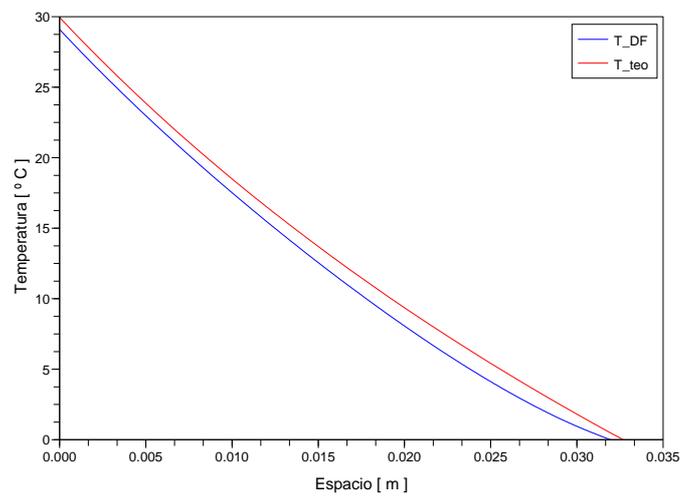


Figura 8: Temperatura en el instante final de tiempo ( $q_0 = 128887,07 \frac{kg}{s^2}$ )