

Comportamiento de Sustancias de Cambio de Fase con Condición de Borde de Temperatura Constante

José González y Angélica Boucíguez

En este trabajo se presenta un modelo sencillo de simulación numérica que permite calcular rápidamente la posición de la interfase y la distribución de temperaturas en el interior de una sustancia de cambio de fase, sometida a una excitación externa de temperatura en el borde fijo. Se analizan dos situaciones diferentes: una en que la temperatura externa es la misma para todas las sustancias y otra en que la temperatura externa es un valor fijo por encima de la de fusión de cada sustancia. Los resultados obtenidos muestran el comportamiento de tales materiales de cambio de fase, de acuerdo a sus parámetros térmicos y temperaturas de fusión.

Palabras clave: materiales de cambio de fase, problema de Stefan, temperatura de fusión, frontera libre, simulación numérica.

Phase change materials behavior with constant temperature as boundary condition

The present paper presents a simple numerical simulation model for the rapid calculation of the interface position and the temperature distribution in the interior of change phase materials with constant temperature as boundary condition. Two different conditions are considered, one of them with the same external temperature for all the substances and the other with the external temperature fixed at constant value over the melting point of each substance. The results obtained show the behavior of these materials according to their thermal parameters and their melting point temperatures.

Key words: phase change materials, Stefan problem, melting point, free boundary problem, numerical simulation.

Introducción

La utilización de sustancias de cambio de fase en acondicionamiento térmico de locales destinados a diversos fines, ha sido planteada en diversas oportunidades. (Farid et al, 2004; Lock, 1996; Strich, 2003)

En particular, es interesante observar el comportamiento de tales sustancias ante diferentes temperaturas externas, así como evaluar cuál será el acondicionamiento térmico más apropiado frente a condiciones externas similares.

El desarrollo actual de las herramientas de cálculo numérico hace factible la realización de tales evaluaciones mediante modelos de simulación (Alexiades & Solomon, 1993; Fuchs, 1996; Tarzia, 1981/82; Zerroukat & Chatwin, 1994) que permitan predecir tales comportamientos sin necesidad de llevar a cabo experiencias, que en general implican mayores costos de investigación.

Es por ello que se ha utilizado un modelo de simulación numérica que fuera desarrollado anteriormente (González y Boucíguez, 2004) para el estudio del comportamiento de tales sustancias, el que fue también validado por comparación con los resultados de la solución analítica.

Al utilizar sustancias de cambio de fase, es útil considerar el caso, en que la temperatura que se desea mantener en el ambiente a acondicionar, coincide con la de cambio de fase de la sustancia utilizada, lo que simplifica notablemente el diseño y el desarrollo del modelo numérico.

Por esta razón, la condición inicial, para todos los casos, es sustancia sólida (líquida) a la temperatura de fusión, si la temperatura externa es mayor (menor) que ésta. Para los cálculos realizados en este trabajo se ha optado por la primera alternativa, siendo la segunda totalmente análoga.

El problema se resuelve únicamente en la nueva fase, es decir la líquida, mientras que el sólido permanece a la temperatura de fusión. Esta situación se conoce en literatura como el problema de Stefan a una fase, por lo que sólo es necesario tener en cuenta los parámetros térmicos correspondientes a la nueva fase, líquida en este caso. (Alexiades & Solomon, 1993; Tarzia, 1981/82; Zerroukat & Chatwin, 1994).

Planteo del problema y modelo de cálculo

La formulación matemática del problema puede hacerse a través de las ecuaciones de difusión o del modelo entálpico, autores tales como Alexiades & Solomon, 1993 y Zerroukat & Chatwin, 1994 por citar algunos, explican ambas formulaciones. El modelo difusivo permite determinar conjuntamente la distribución de temperaturas y la posición de la frontera, es aconsejable cuando se tiene una sola interfase; mientras que el modelo entálpico es sumamente útil cuando están presentes dos o más interfases, ya que con la entalpía, se calcula la distribución de temperatura y la fracción de líquido presente, obteniendo a partir de éste último resultado la posición de la frontera. Lógicamente ambos métodos conducen a los mismos resultados. En trabajos anteriores (Boucíguez et al, 2002; Medina et al, 2002) se han comparado diversos métodos numéricos utilizando ambas formulaciones. Se ha considerado también, que el recipiente que contiene las sustancias de cambio de fase, tiene dimensiones tales que su espesor es considerablemente más pequeño que su largo y su alto, por lo que la sustancia prácticamente no convecta y además puede tratarse el problema como unidimensional. Dado que en este caso hay solo una interfase presente, se ha decidido trabajar con el modelo difusivo, por lo que el planteo matemático del problema se resume en las siguientes ecuaciones diferenciales sujetas a las correspondientes condiciones iniciales y de borde.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad 0 < t < \tau, \quad 0 < x < s(t) \leq e \quad (1)$$

$$\rho L \frac{ds(t)}{dt} = -k \frac{\partial T(x=s(t))}{\partial x}, \quad \forall t > 0 \quad (2)$$

$$T(x,0) = T_f, \quad 0 < x \leq e \quad (3)$$

$$s(0) = 0 \quad (4)$$

$$T(0,t) = T_{amb}, \quad \forall t > 0 \quad (5)$$

$$T(s(t),t) = T_f, \quad \forall t > 0 \quad (6)$$

En estas ecuaciones $T(x,t)$, función de las variables espacial x y temporal t , denota el perfil de temperatura de la sustancia de cambio de fase, $\alpha = k/(r c)$ es la difusividad térmica de la sustancia, igual al cociente entre la conductividad térmica k y el producto de la densidad r por la capacidad calorífica c ; τ es el tiempo total de cálculo, e el espesor de la sustancia considerado para el cálculo y L su calor latente de fusión. La función $s(t)$, desconocida a priori, es la posición de la interfase líquido - sólido, en función del tiempo t ; T_f es la temperatura de fusión y T_{amb} la temperatura externa. La ecuación (1) es la de difusión en la fase líquida, la (2) plantea el balance de energía en la interfase, se conoce como ecuación de Stefan. Las ecuaciones (3) y (4) son las condiciones iniciales, mientras que las (5) y (6) son las condiciones de borde en $x = 0$ y en $x = s(t)$, respectivamente. Dado que se analizará el comportamiento de distintas sustancias de cambio de fase, las ecuaciones (1) a (6) han sido escritas explicitando todos sus parámetros térmicos, tal como se hace frecuentemente en física y no en forma adimensional como suele hacerse en matemática, ya que precisamente se desea evaluar el comportamiento de las distintas sustancias presentadas, teniendo en cuenta los parámetros térmicos que las caracterizan. Por otra parte, en el rango de temperaturas de trabajo puede considerarse que los coeficientes térmicos no varían. (Bejan, 1993).

La discretización de las ecuaciones (1) y (2) permite la resolución numérica del problema, junto con las condiciones iniciales y de borde, lo que conduce a:

$$T(i, j) = \alpha \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \{T(i-1, j-1) - 2T(i, j) + T(i+1, j-1)\} \quad (7)$$

$$\rho L \frac{s(j) - s(j-1)}{\Delta t} = -k \frac{\delta T}{\delta x} \quad (8)$$

dónde dT es el pequeño salto térmico entre la temperatura más próxima a la frontera y la de fusión en el espacio dx . El índice i corresponde a la variación de la variable espacial x y el j a la temporal t .

Para resolver numéricamente el problema se ha realizado un programa en Pascal utilizando un esquema en diferencias finitas explícitas, con un intervalo espacial $\Delta x = 3.33 \cdot 10^{-3}$ m y un intervalo temporal $\Delta t = 15$ seg. En todos los casos, estos intervalos son adecuados para asegurar la convergencia del método. El tiempo total de cálculo es de 30 horas. Un esquema de la sustancia de cambio de fase a simular, se muestra en la figura 1.

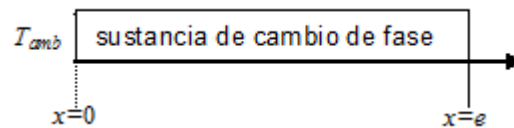


Fig. 1 Esquema de la sustancia de cambio de fase a simular.

Resultados obtenidos

Se han elegido seis sustancias diferentes para realizar el cálculo cuyos parámetros térmicos y temperatura de fusión se presentan en la Tabla I. En ella solo se presentan las propiedades térmicas de la sustancia en estado líquido, ya que, tal como se señaló anteriormente, el sólido permanece a la temperatura de fusión.

Tabla I: Sustancias utilizadas para el cálculo

Sustancia	T_f (C)	k (W/ m C)	c (J/kg C)	ρ (kg/m ³)	L (kJ/kg)
Agua	0	0.61	4180	996	335
Butilo	12	0.24	1600	800	120
Metilo	26	0.22	1600	800	120
Difenil	25	0.14	1622	1000	105,5
Parafina	40	0.14	2890	770	180
Laúrico	40	0.20	1600	880	120

Se han analizado dos situaciones diferentes para la temperatura ambiente, a saber:

1. igual para todas las sustancias ($T_{amb} = 50^\circ\text{C}$)
2. supera en 25°C a la de fusión de cada sustancia ($T_{amb} = T_f + 25^\circ\text{C}$)

Las figuras 2 y 3 presentan el primer caso, en que la condición de borde es $T_{amb}=50^\circ\text{C}$, las figuras 4 y 5 el segundo, en que la temperatura en el borde fijo es $T_{amb}=T_f+25^\circ\text{C}$.

Las figuras 2 y 4 muestran la posición de la frontera para cada sustancia, mientras que en las figuras 3 y 5 puede verse el perfil de temperaturas en el interior de las sustancias al cabo de 30 horas.

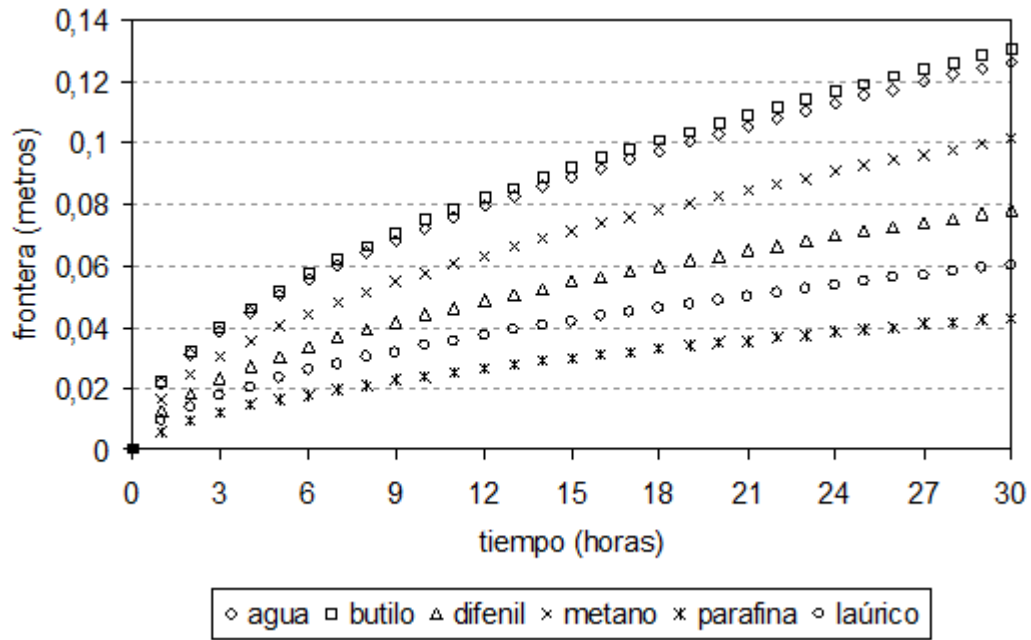


Fig. 2 Posición de la frontera móvil cuando $T_{amb}=50^{\circ}\text{C}$

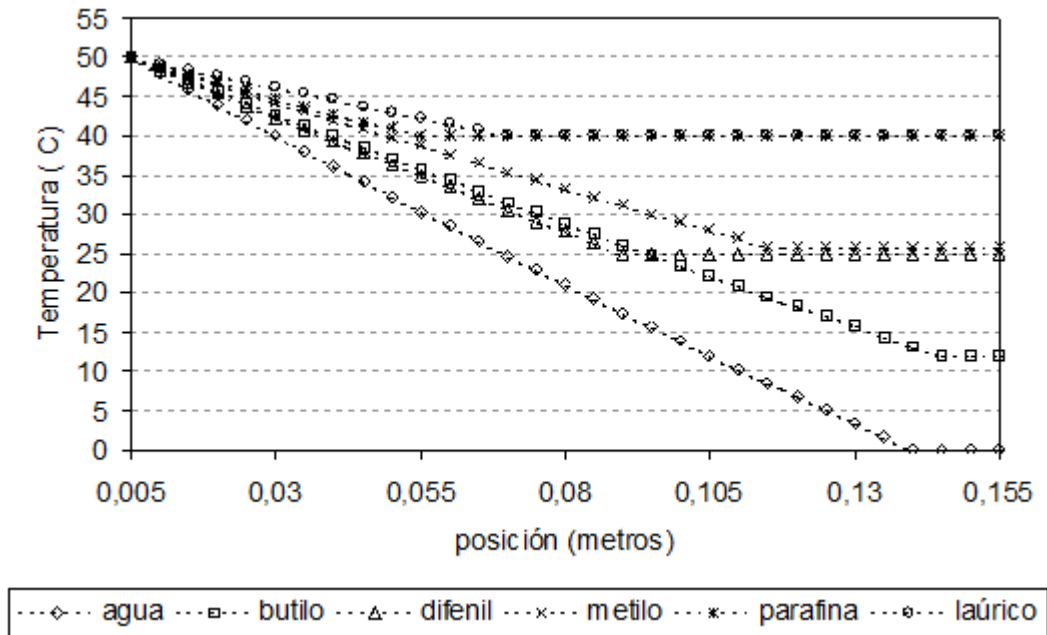


Fig. 3 Perfil de temperaturas en la sustancia cuando $T_{amb}=50^{\circ}\text{C}$, al cabo de 30 horas

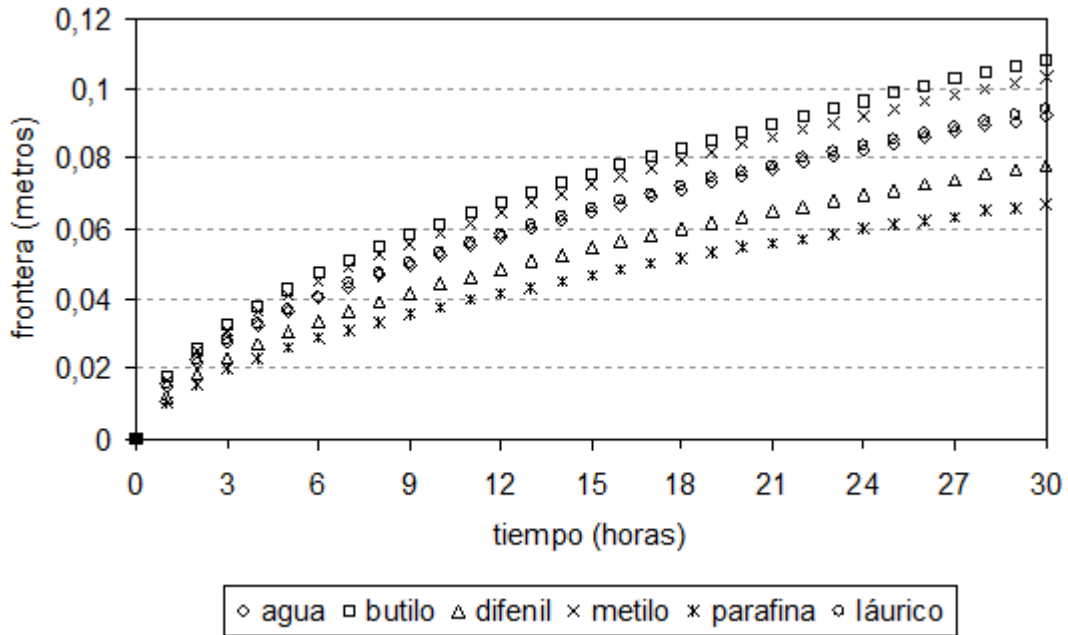


Fig. 4 Posición de la frontera móvil cuando $T_{amb}=T_f+25\text{ }^\circ\text{C}$

Análisis de resultados

Los resultados obtenidos para la posición de la frontera, en metros, al cabo de 30 horas, se resumen en la tabla II, para cada sustancia y las dos condiciones de borde estudiadas.

Tabla II: Posición de la frontera a las 30 hs

Sustancia	$T_{amb} = 50\text{ }^\circ\text{C}$	$T_{amb}=T_f+25\text{ }^\circ\text{C}$
Agua	0.126	0.092
Butilo	0.131	0.108
Difenil	0.078	0.078
Metilo	0.101	0.103
Parafina	0.043	0.067
Laúrico	0.060	0.094

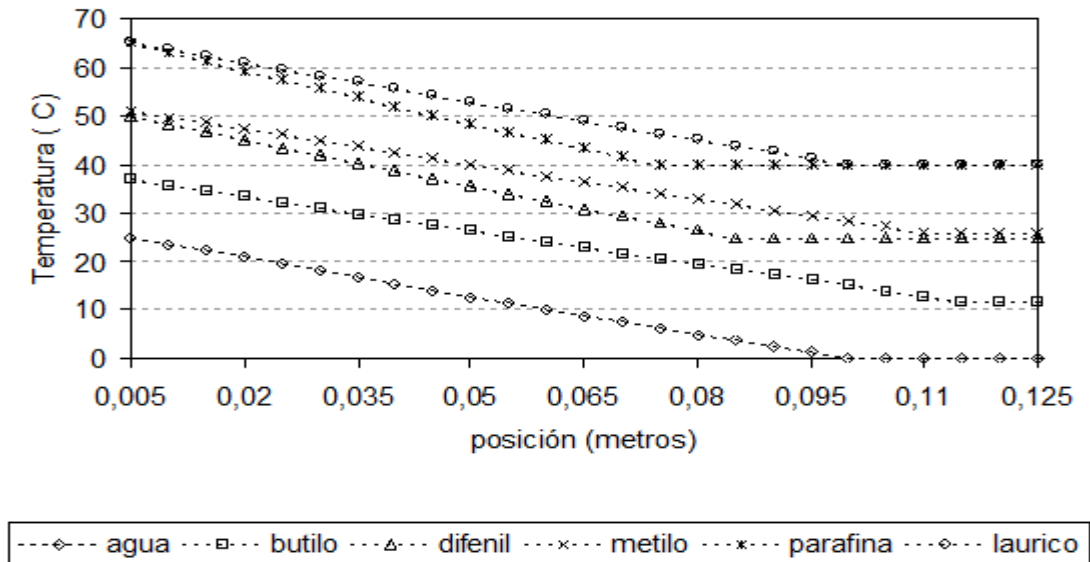


Fig. 5 Perfil de temperaturas en la sustancia cuando $T_{amb} = T_f + 25^\circ\text{C}$ al cabo de 30 horas.

Los resultados obtenidos en la evaluación de ambas situaciones planteadas, según se muestra en las figuras 2 a 5 y en la tabla 2, permiten aseverar que:

1.- Cuando $T_{amb} = 50^\circ\text{C}$ el frente de fusión avanza con distintas velocidades para cada sustancia, siendo los más rápidos el butilo y el agua, que se encuentran muy próximos entre sí, demostrando que los parámetros térmicos cumplen un rol fundamental en la transferencia de calor.

En esta situación, se observa que la posición de la interfase depende de la temperatura de fusión, así como de los parámetros térmicos de las sustancias.

La mayor diferencia entre la temperatura en el borde y la de fusión se tiene para el agua, lo que podría llevar a pensar, apresurada y erróneamente, que esta sustancia debería sentir más el efecto de dicha condición de borde. Sin embargo el butilo es la sustancia que más sufre tal efecto. Lo que demuestra la influencia de las propiedades térmicas, en la posición de la frontera.

2. - En el caso en que $T_{amb} = T_f + 25^\circ\text{C}$ las sustancias que presentan los frentes de fusión más rápidos son el butilo y el metilo, cuyos parámetros térmicos son bastante similares, mientras que el agua y el láurico se encuentran próximos entre sí.

El avance de las fronteras, como así también la rapidez con que lo hacen depende de las propiedades térmicas de las sustancias y de la temperatura de fusión.

Dado que la diferencia de temperatura entre el borde y la T_f es constante, el parámetro que acompaña a la condición de Stefan tendrá implicancia a la hora de este análisis. Se aprecia entonces que la conductividad, el calor latente y la densidad son las propiedades que tienen influencia directa en estos resultados. Si se realiza el cociente entre la conductividad y el calor latente por la densidad se observa que, efectivamente la curva correspondiente al butilo tiene un factor mayor que las demás fronteras, con lo cual avanza más rápido en el tiempo. De esta manera se verifica la coherencia entre las curvas correspondientes.

Cada uno de los perfiles converge a la temperatura de fusión de cada sustancia, pero en este caso, la temperatura en el borde fijo es distinta para cada sustancia.

Se observa también que la difusividad térmica tiene una importante influencia en los resultados. En efecto, el valor de la difusividad para el agua, butilo, metilo y parafina es del mismo orden de magnitud, mientras que el difenilmetano y láurico tienen difusividades del mismo orden pero diferentes a las anteriores, lo que explica la diferencia de las pendientes entre estos grupos de sustancias.

En todos los casos el quiebre de las curvas que muestran el perfil de temperatura en el interior de la sustancia de cambio de fase, (figuras 3 y 5) hacia la temperatura de fusión marca la posición en donde se encuentra la interfase, lo cual debe mostrar coherencia con las curvas que señalan la posición de la

frontera libre, (figuras 2 y 4) esto es: el perfil de temperaturas en el interior de las sustancias está en acuerdo con lo observado en el frente de fusión, en ambos casos. Por otra parte, un ancho máximo de 15 cm, asegura que en cualquiera de los casos planteados la sustancia no se fusiona por completo al cabo de 30 horas.

Conclusiones

Los resultados obtenidos permiten asegurar que, en el caso de las sustancias utilizadas, se puede lograr un acondicionamiento térmico adecuado, por lo menos durante 30 horas.

La existencia de diversas sustancias con la misma temperatura de fusión, que presentan diferentes comportamientos, permite elegir aquella que sea más adecuada, de acuerdo a uso previsto, teniendo en cuenta, además, la facilidad de su obtención en plaza y su costo.

La temperatura de fusión y los parámetros térmicos son determinantes del perfil de temperatura y de la posición de la frontera.

Es importante destacar, que el modelo de simulación numérica es aplicable a cualquier otra sustancia de cambio de fase.

Agradecimientos

Este trabajo se desarrolló en el marco del Proyecto de Investigación N° 1264 del Consejo de Investigaciones de la Universidad Nacional de Salta, (CIUNSa) a quien se agradece su financiamiento.

Referencias

- Alexiades, V.; Solomon, A.** 1993 *Mathematical Modeling of Melting or Freezing Processes*. Hemisphere Publishing Corporation, A Member of the Taylor & Francis Group.
- Bejan, A.** 1993 *Heat Transfer*. John Wiley & Sons.
- Boucíguez, A. Medina, M. Villa, L. González, J y Lara, M.** 2002 *Comparación de Métodos Numéricos en la Solución del Problema de Stefan*. Revista Energías Renovables y Medio Ambiente. Vol. 11, 41 – 46.
- Farid, M; Khudhair, A; Razack, S; Al-Hallaj, S.** 2004 *A Review on Phase Change Energy Storage: Materials and Applications*. Energy Conversion and Management 45, 1597 – 1615.
- Fucks, H.** 1996 *The Dynamics of Heat*, Springer.
- González, J. y Boucíguez, A.** 2004 *Resolución Numérica del Problema de Stefan a Una Fase. Un Modelo Mejorado*. Comunicación. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente, Vol. 8, N° 2, 08.01– 08.02.
- Lock, G.** 1996 *Latent Heat Transfer. An Introduction to Fundamentals*. Oxford Engineering Science Series.
- Medina, M. Boucíguez, A. Olgún, M. y Lara, M.** 2002 *Modelización Térmica con Cambio de Fase de la Pared de un Embalaje para Productos Biológicos*. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente. Revista de la Asociación Argentina de Energía Solar. Vol. 6, N° 2, 08.25 - 08.30.
- Strich, U.** 2003 *Heat Transfer Enhancement in Latent Heat Storage System for Building*. Energy and Building, 35, 1097 – 1104.
- Tarzia, D.** 1981/82 *Una revisión sobre problemas de Frontera Móvil y Libre para la Ecuación del Calor. El Problema de Stefan*. Mathematicae Notae, 29 pp 147 – 241.
- Zerroukat, M & Chatwin, C.** 1994 *Computational Moving Boundary Problems*. Research Studies Press LTD, John Wiley & Sons.

José González

Alumno de la Carrera de Licenciatura en Física. Becario del CIUNSa, con beca para estudiantes avanzados. Se encuentra desarrollando su Tesis de Licenciatura.

Angélica Boucíguez

Licenciada en Física. Profesor Adjunto Ordinario de Termodinámica. Directora del Proyecto de Investigación N° 1264 del CIUNSa. Directora de beca del alumno González y de su Tesis de Licenciatura en Física.

E-mail: bouciga@unsa.edu.ar Tel:0387-4255424 Fax:0387-4255489 Universidad Nacional de Salta

