

ANÁLISIS DE LA EVOLUCIÓN DE LA FRONTERA DE UN MATERIAL DE CAMBIO DE FASE SUJETO A CONDICIONES DE TEMPERATURA EXTERNA VARIABLE

Angélica Boucíguez¹, Luis Villa² Sonia Esteban¹ y Miguel A. Lara³

CIUNSA - Consejo de Investigaciones de la Universidad Nacional de Salta
Av. Bolivia 5150 - 4400 Salta
Tel: 0387-1255424 - fax 0387 - 4255888
e-mail: bouciga@unsa.edu.ar

RESUMEN: La utilización de sustancias de cambio de fase en el acondicionamiento térmico presenta diferentes posibilidades de uso. En particular, es de interés estudiar el caso en que la temperatura ambiente, a la que esté sometido el material de cambio de fase sea una función conocida y variable en el tiempo. Para analizar tal situación, muy poco tratada en literatura, se ha formulado un modelo del problema de Stefan a una fase para la ecuación del calor sobre el que se presenta una simulación numérica en diferencias finitas que permite evaluar la posición de la frontera como función del tiempo. Se presentan también fundamentos teóricos que permiten avalar los resultados de tal simulación.

Palabras Claves: frontera libre, material de cambio de fase, acondicionamiento térmico.

INTRODUCCIÓN

La necesidad de buscar formas de acondicionamiento pasivo, en que el ahorro energético tenga una componente importante es fundamental, ya que no solo permite reducir gastos, sino también limitar el uso de los combustibles tradicionales. (Abhat, 1983). La utilización de sustancias de cambio de fase en el acondicionamiento térmico, cobra entonces vital importancia dado que presenta diversas alternativas de utilización. En efecto, ellos pueden ser incorporados a materiales tradicionales de construcción, formando parte de paredes o cielos rasos o bien utilizarse directamente puros, como muros colectores acumuladores. (Boucíguez, 1998)

Es necesario seleccionar la temperatura de funcionamiento del sistema y con ella elegir el material de cambio de fase adecuado, no sólo por el requisito de presentar fusión a dicha temperatura, sino también por sus parámetros térmicos y por no presentar problemas de contaminación.

En particular, los compuestos orgánicos, en contraste con los inorgánicos, no presentan problemas de sub enfriamiento y son más estables. (Hasan and Sayigh, 1994). Los materiales orgánicos, especialmente sustancias como las ceras, grasas y sus ésteres han sido recomendados como acumuladores. Su calor latente de fusión, densidad, conductividad térmica y calor específico se encuentran en el orden de 120 kJ/kg, 800 kg/m³, 0.20 W/m C y 1500 J/kg C, respectivamente. (Swern, 1964).

El material de cambio de fase a utilizar para un determinado propósito deberá cumplir los siguientes requisitos:

- Presentar el cambio de fase en el rango de temperatura de operación deseada
- Presentar fusión a una temperatura definida
- Ser seguros y estar disponibles en plaza en cantidades suficientes
- Tener un razonable ciclo de vida útil de acuerdo a su costo.
- Tener un alto calor latente por unidad de masa
- Tener un alto calor específico
- Las densidades del líquido y del sólido deben ser similares.
- Ser químicamente estables
- No ser corrosivos, ni tóxicos, ni inflamables

CONSIDERACIONES GENERALES Y PLANTEO DEL PROBLEMA

A fin de estudiar el comportamiento de determinadas sustancias que puedan ser utilizadas con fines térmicos se ha realizado un estudio de factibilidad considerando que ella se encuentra envasada en recipientes cuyo espesor no sea superior a diez centímetros y que inicialmente la sustancia se encuentra sólida (o líquida) a la temperatura de fusión.

¹ INENCO- Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional de Salta

² INIQUI- Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional de Salta

³ IFIR- Universidad Nacional de Rosario

Para ello, se ha formulado un modelo del problema de Stefan a una fase (Tarzia, 1981/82), cuya descripción está dada por las siguientes ecuaciones:

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

$$u(s(t), t) = 0, \quad \forall t > 0 \quad (2)$$

$$\rho L \frac{ds(t)}{dt} = \pm k \frac{\partial u(x = s(t))}{\partial x}, \quad \forall t > 0 \quad (3)$$

sujetas a las siguientes condiciones iniciales ($t=0$) y de borde ($x = 0$).

$$u(x, 0) = 0, \quad 0 < x \leq e \quad (4)$$

$$s(0) = 0 \quad (5)$$

$$u(0, t) = u_{amb}(t), \quad \forall t > 0 \quad (6)$$

En las que x, t : son las variables espacial y temporal, respectivamente.

$u = u(x, t) = T(x, t) - T_f$: función desconocida a priori, es la diferencia entre la temperatura a la que se encuentra la sustancia $T(x, t)$ y la de fusión T_f

$s = s(t)$: función desconocida a priori, es la posición de la interfase.

$u_{amb}(t) = T_{amb}(t) - T_f$: es la diferencia entre la temperatura en el borde fijo $T_{amb}(t)$ y la de fusión T_f , como función del tiempo.

ρ, k, c, L : son la densidad, conductividad térmica, calor específico y calor latente de fusión, respectivamente, de la sustancia de cambio de fase.

$\alpha = k / (\rho c)$: es la difusividad térmica, e : es el espesor de la muestra

MODELO DE CÁLCULO

A los efectos de llevar a cabo el modelo de cálculo, que permita evaluar la posición de la frontera en función del tiempo, se ha realizado una simulación numérica en QB que utilizando diferencias finitas explícitas, permite calcular la posición de la frontera en función del tiempo y la distribución de temperatura como función de la posición y del tiempo.

A los efectos de analizar el comportamiento del material de cambio de fase sometido a condiciones de temperatura variable, se han propuesto tres funciones diferentes de temperatura en el borde fijo (una función seno, una parábola y un escalón), las que se explicitan en la tabla 1, en la que la temperatura $T_{amb}(t)$ se expresa en C y el tiempo t en horas.

Tabla 1: Temperatura de borde en función del tiempo

función elegida	Ecuación en función del tiempo
seno	$T_{amb}(t) = 15 - 8 \text{ sen } (\pi t/12)$
parábola	$T_{amb}(t) = 20 - 10 t/3 + 5 t^2/36$
escalón	$T_{amb}(t) = 0$ para $0 \leq t < 12$ y $T_{amb}(t) = 20$ para $12 \leq t \leq 24$

Estas funciones fueron elegidas porque responden a algunos casos concretos. En efecto, la función escalón corresponde a la situación en que la sustancia sufre un cambio brusco de temperatura. La función seno corresponde al hecho de una oscilación armónica de la temperatura alrededor de un determinado valor y la parábola a un ascenso (descenso) de la temperatura con el posterior descenso (ascenso) hasta alcanzar el valor inicial.

Se ha elegido realizar el cálculo en diferencias finitas explícitas dado que ello permite asegurar que en el modelo, el intervalo espacial y temporal (Δx y Δt , respectivamente), pueden hacerse tan pequeños como sea posible para que la función resulte, a los efectos del cálculo, prácticamente continua y no aparezca encubierto algún otro efecto, debidos a saltos bruscos de

temperatura, que no se presentan en la realidad, Por esta razón, los intervalos de tiempo considerados son pequeños por lo que el tiempo se expresa en fracciones decimales de horas.

Desde el punto de vista teórico un problema de frontera libre sujeto a condiciones de contorno de temperatura variable en el tiempo fue planteado por Sherman (1971), quien consigna un resultado sobre existencia y unicidad de la solución bajo las siguientes hipótesis:

- 1) La función $u_{amb}(t) \geq 0, \forall t \geq 0$, es continua excepto posiblemente en un número finito de discontinuidades acotadas.
- 2) Para cada $\varepsilon > 0, u_{amb} \neq 0$ en $0 \leq t \leq \varepsilon$.

También, Sherman establece que cuando las ecuaciones 1-6 se adimensionaliza, la frontera libre $s(t)$ debe tener cotas superior e inferior, dadas por la siguiente desigualdad:

$$\left[2(1 + \|u_{amb}(t)\|)^{-1}U(t)\right]^{1/2} \leq s(t) \leq [2U(t)]^{1/2} \quad (7)$$

donde $U(t) = \int_0^t u_{amb}(z)dz$, es la primitiva de $u_{amb}(t)$

Los datos que se posee relativos al sistema físico estudiado consisten en valores conocidos de temperatura $T_{amb}(t)$ para un conjunto discreto de valores de tiempo. A los fines de aplicar la expresión teórica dada por la Ec. (7), que acota la posición de la frontera al caso físico concreto, se ha procedido a rescribir la expresión (7) en términos de las variables originales del problema dadas por las Ec. (1) a (6), en las que la posición de la frontera está dada por $s(t)$; de esta forma, expresión (7) en términos de $s(t)$ resulta:

$$\left[2\left(1 + \frac{c}{L}\|u_{amb}(t)\|\right)^{-1}\alpha U(t)\right]^{1/2} \leq s(t) \leq [2\alpha U(t)]^{1/2} \quad (8)$$

RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

Se ha modelizado con dos sustancias orgánicas que tienen la misma temperatura de fusión ($T_f=25$ C), el difenilmetano y el estearato de metilo, pero sus parámetros térmicos (ver tabla 2) son diferentes. Ambas sustancias reúnen los requisitos señalados oportunamente.

Tabla 2: Parámetros térmicos de las sustancias utilizadas.

sustancia	k (W/m C)	ρ (kg/m ³)	c (J/kg C)	L (J/kg)
difenilmetano	0.142	1000	1622	105500
estearato de metilo	0.220	800	1600	120000

En las figuras 1 y 2 se muestran los resultados de la simulación numérica para ambas sustancias, para los tres casos de dependencia temporal de la temperatura señalados en la tabla 1.

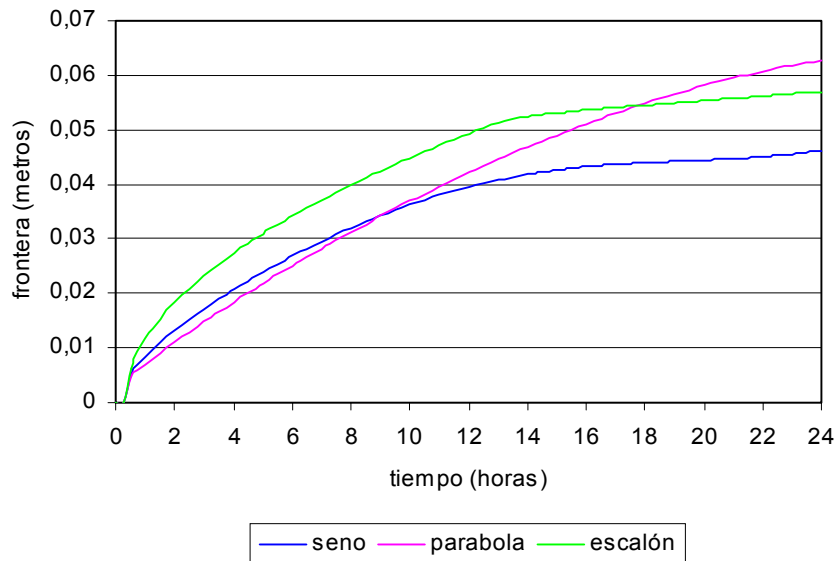


Figura 1: Comportamiento del difenilmetano

Dado que la temperatura de fusión de ambas sustancias es de 25 C, el estado inicial es sustancia líquida a esta temperatura y por lo tanto el frente de solidificación avanzará dejando a su paso sustancia sólida. En ambas figuras se observa que al cabo de 1 día no se ha superado el espesor estipulado de la muestra ($e = 10\text{ cm}$), por lo que ambas sustancias pueden utilizarse en las condiciones planteadas para mantener una temperatura de 25 C.

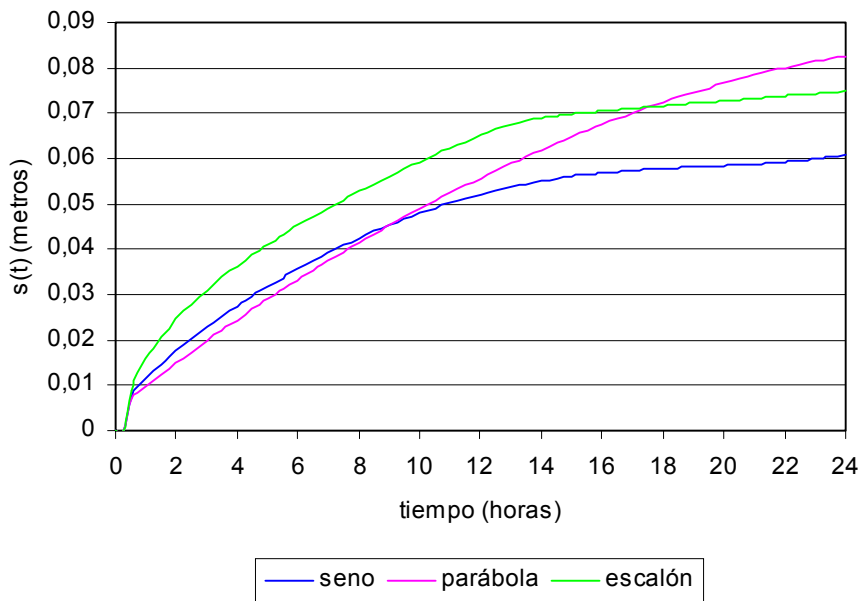


Figura 2: Comportamiento del estearato de metilo

Se observa también la diferencia en el avance de la frontera para las tres funciones evaluadas. Tanto para el difenilmetano como para el estearato de metilo, la curva que avanza a mayor velocidad es la que corresponde a la situación en que la función que describe la variación de la temperatura externa es una parábola.

Cuando la temperatura externa varía en forma senoidal, en ambas sustancias el frente de solidificación avanza prácticamente en forma lineal, durante la primera mitad del tiempo total de cálculo, disminuyendo luego la velocidad de avance del frente de fusión.

En lo que respecta a la respuesta para el caso en que la temperatura externa varía bruscamente (función escalón), se observa un rápido avance de la posición de la frontera durante la primera mitad del tiempo de cálculo, en este caso la temperatura externa se encuentra a 25 C por debajo de la de fusión, mientras que al producirse el salto de temperatura, la velocidad de avance de la frontera cae sensiblemente, lo que está de acuerdo con el hecho de que la diferencia entre la temperatura ambiente y la de fusión ha bajado bruscamente a 5 C.

Se observa también el diferente comportamiento en ambas sustancias, a pesar de fundir a la misma temperatura, lo que pone en evidencia el rol de los parámetros térmicos.

Se han realizado también los cálculos correspondientes a las predicciones de la posición según lo establecido por la ecuación (8), estos resultados se muestran en la tabla 3.

Tabla 3: Comparación de los resultados del modelo con las predicciones teóricas.

	Teórico			Ecuación (8)		
	$s(t)_{\text{seno}}$	$s(t)_{\text{escalón}}$	$s(t)_{\text{parábola}}$	seno	escalón	parábola
Difenilmetano	4,612	5,696	6,274	$4.4 < s(t) < 4,81$	$5.2 < s(t) < 5,9$	$5.7 < s(t) < 6,53$
Estearato de metilo	6,071	7,484	8,259	$5.8 < s(t) < 6,29$	$6.9 < s(t) < 7,7$	$7.6 < s(t) < 8,5$

CONCLUSIONES

De los resultados obtenidos en la simulación numérica puede verse que la frontera es siempre una función creciente del tiempo, aunque la pendiente de esta función varía en el tiempo. Esto es así porque la función temperatura externa, es una función no monótona del tiempo, es más en algunos casos (seno y parábola) tiene, en algunos tramos, pendiente positiva y en otros negativa. La función escalón muestra el comportamiento de la frontera en el caso de que la sustancia de cambio de fase

sea sometida a un cambio brusco de temperatura, observándose que la frontera avanza rápidamente y luego se mantiene prácticamente en la misma posición.

Los resultados emergentes de la simulación para la posición del frente de cambio de fase, resultan enmarcarse de acuerdo a lo previsto teóricamente por la desigualdad dada por la ecuación (8), tal como se desprende de la tabla 3.

Es de recalcar también que la evolución de la frontera no sólo queda determinada por las condiciones externas y la temperatura de fusión del material de cambio de fase elegido sino también por sus parámetros térmicos; por lo que es necesario considerar todos estos factores en el momento de elegir una determinada sustancia.

REFERENCIAS

- Abhat, A. *Low Temperature Latent Heat Thermal Energy Storage: Heat Storage Materials*. Solar Energy, 1983, Vol 30 N° 4 pp313 - 332.
- Boucíguez, A. *Buthyl Stearate Behavior in Passive Conditioning of Dwellings Building*. Actas del 7° Congreso Latinoamericano de Transferencia de Calor y Materia (LAYCYM 98), Vol II. Salta, 1998, pág. 421 – 424.
- Hasan, A.; Sayigh, A., *Some Fatty Acids as Phase Change Thermal Energy Storage Materials*. Renewable Energy, 1994, Vol. 4, N° 1, pp. 69 – 76.
- Sherman, B. Free Boundary Problems for the Heat Equation in Which the Moving Interface Coincides Initially with the Fixed Face, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 33, pp. 449 - 466, 1971
- Swern, D. *Bayley's Industrial Oil and Fat Products*, 1964 Chapter 3, pp. 97 - 139.
- Tarzia, D. *Una Revisión sobre Problemas de Frontera Móvil y Libre para la Ecuación del Calor. El problema de Stefan*. *Mathematicae Notae*. Año XXIX, pp 147 - 214, 1981/82

DINAMICAL BEHAVIOR OF THE FREE BOUNDARY IN A PHASE CHANGE MATERIAL SUBMITTED TO VARIABLE EXTERNAL BOUNDARY TEMPERATURE

ABSTRACT

The use of phase change materials in thermal conditioning provides different possibilities. In particular, it is interesting the case in which the boundary temperature on the phase change material is a known function of time. In order to analyze such a situation, a mathematical model consisting in a one phase Stefan problem for the heat equation has been formulated. For such problem a numerical simulation using finite difference which provides the free boundary position as a function of time is presented. Theoretical fundamentals that support the simulation results are also presented.

Keywords: free boundary, phase change material, thermal conditioning.